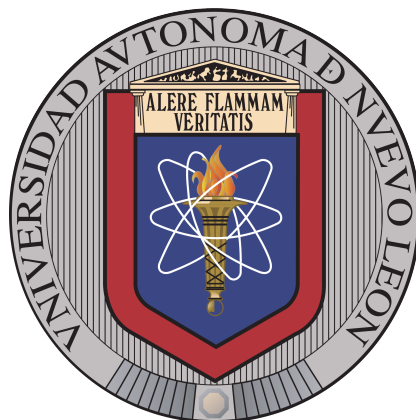


UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

POSGRADO EN CIENCIAS CON ORIENTACIÓN EN PROCESOS
SUSTENTABLES



BIOTURBOSINA A PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS
ESTERIFICADOS: PRODUCCIÓN Y PROPIEDADES
DE SUS MEZCLAS CON TURBOSINA + ADITIVOS

POR

I.Q. AYRTON JOAO BRICEÑO CANTÚ

COMO REQUISITO PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRÍA EN CIENCIAS CON ORIENTACIÓN EN PROCESOS
SUSTENTABLES

Dr. JOSÉ JULIÁN CANO GÓMEZ

Asesor

OCTUBRE 2021

**BIOTURBOSINA A PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS ESTERIFICADOS:
PRODUCCIÓN Y PROPIEDADES DE SUS MEZCLAS CON TURBOSINA +
ADITIVOS**

Aprobación de la Tesis:



DR. (A) JOSÉ JULIÁN CANO GÓMEZ
Presidente



DR. (A) CARLOS ESCAMILLA ALVARADO
Secretario (a)



DR. (A) CARLOS ENRIQUE ESCÁRCEGA GONZÁLEZ
Vocal



DRA. MARÍA ELENA CANTÚ CÁRDENAS
Sub-Directora de Posgrado

**BIOTURBOSINA A PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS ESTERIFICADOS:
PRODUCCIÓN Y PROPIEDADES DE SUS MEZCLAS CON TURBOSINA +
ADITIVOS**

Revisión de la Tesis:



DR. (A) IVÁN ALONSO SANTOS LÓPEZ
Co-Asesor (a)



DR. (A) CARLOS ENRIQUE ESCÁRCEGA GONZÁLEZ
Comité Tutorial



DR. (A) HÉCTOR JAVIER AMÉZQUITA GARCÍA
Comité Tutorial



DR. (A) CARLOS ESCAMILLA ALVARADO
Comité Tutorial



DRA. MARÍA ELENA CANTÚ CÁRDENAS
Sub-Directora de Posgrado

A mis padres, un paso más juntos...

ÍNDICE GENERAL

Agradecimientos	XIV
Resumen	xv
1. Introducción	1
2. Antecedentes	7
2.1. Hipótesis	11
2.2. Objetivos	12
2.2.1. Objetivo general	12
2.2.2. Objetivos específicos	12
3. Metodología de trabajo	13
3.1. Etapa 1	14
3.1.1. Síntesis del catalizador	14
3.1.2. Caracterización del catalizador	15
3.2. Etapa 2	15

3.2.1. Producción de bioturbosina	15
3.3. Etapa 3	16
3.3.1. Caracterización de la bioturbosina	16
3.4. Etapa 4	21
3.4.1. Preparación y caracterización de mezclas ternarias: Turbosina + Biodiésel + Alcohol	21
3.5. Etapa 5	25
3.5.1. Simulación en Dinámica de Fluidos Computacional	25
3.5.2. Creación de la geometría	25
3.5.3. Generación de la malla	26
3.5.4. Descripción del sistema y ecuaciones que lo gobiernan	27
3.5.5. Validación del modelo	29
3.5.6. Estimación de las propiedades de las mezclas combustibles a alta presión	30
4. Resultados y discusión	33
4.1. Etapa 1	33
4.1.1. Caracterización del catalizador	33
4.2. Etapa 2	35
4.2.1. Producción de bioturbosina	35
4.3. Etapa 3	39
4.3.1. Caracterización de la bioturbosina	39

4.4. Etapa 4	42
4.4.1. Preparación y caracterización de las mezclas ternarias: Turbo- sina + Biodiésel + Alcohol	42
4.5. Etapa 5	57
4.5.1. Creación de la geometría	57
4.5.2. Generación de la malla	57
4.5.3. Descripción del sistema	58
4.5.4. Validación del modelo	58
4.5.5. Simulación de la inyección de turbosina y mezclas combustibles a condiciones típicas de operación	61
5. Conclusiones	67
A. Propiedades experimentales de las mezclas	70
B. Propiedades de desviación y exceso	89
C. Parámetros de las ecuaciones de Redlich-Kister	102

ÍNDICE DE FIGURAS

3.1. Etapas de la metodología	14
3.2. Proceso de producción de bioturbosina	16
3.3. Metodología de análisis DFC	25
3.4. Modelo geométrico del sistema de inyección	26
3.5. Definición de los parámetros de aspersión Song <i>et al.</i> (2018)	29
4.1. Difractograma de rayos-x para los diferentes catalizadores Ni/C	34
4.2. Distribución de cadenas de carbono de los productos de reacción para los experimentos a 180 °C	36
4.3. Distribución de cadenas de carbono de los productos de reacción para los experimentos a 300 °C	37
4.4. Comparativa del cumplimiento del estándar para los distintos combustibles usados en el proyecto	40
4.5. Comparativa del espectro infrarrojo de los catalizadores previo y después de su uso en la reacción de desoxigenación	41
4.6. Comparativa del retorno de inversión energético para la bioturbosina	42

4.7. Efecto de los aditivos en la densidad y viscosidad de las mezclas Turbosina 60 % + Alcohol + Biodiésel	44
4.8. Efecto de los aditivos en la densidad y viscosidad de las mezclas Turbosina 70 % + Alcohol + Biodiésel	45
4.9. Efecto de los aditivos en la densidad y viscosidad de las mezclas Turbosina 80 % + Alcohol + Biodiésel	46
4.10. Efecto de los aditivos en el índice de refracción de las mezclas Turbosina 60 % + Alcohol + Biodiésel	47
4.11. Efecto de los aditivos en el índice de refracción de las mezclas Turbosina 70 % + Alcohol + Biodiésel	48
4.12. Efecto de los aditivos en el índice de refracción de las mezclas Turbosina 80 % + Alcohol + Biodiésel	49
4.13. Cumplimiento del estándar ASTM D1655	50
4.14. Volumen molar de exceso, V^E , para las mezclas ternarias	54
4.15. Desviación de la viscosidad, $\Delta\eta$, para las mezclas ternarias	55
4.16. Desviación del índice de refracción Δn_D , para las mezclas ternarias	56
4.17. Geometría del dominio computacional - Cámara de combustión	57
4.18. Mallado del dominio computacional para las simulaciones de CFD	58
4.19. Modelos utilizados para la descripción del sistema - Vista de software Ansys Fluent	59
4.20. Validación del modelo propuesto Song <i>et al.</i> (2018)	61
4.21. Efecto de los aditivos en las propiedades de spray	64

4.22. Efecto de la presión de inyección de combustible en las propiedades de spray	66
---	----

ÍNDICE DE TABLAS

3.1. Información de sustancias	13
3.2. Resumen de propiedades experimentales para caracterización	17
3.3. Parámetros de la ecuación de Tait	31
3.4. Parámetros para la correlación de viscosidad	32
4.1. Propiedades texturales de los catalizadores estudiados	33
4.2. Rendimiento de reacción para los distintos experimentos	35
4.3. Codificación para los distintos experimentos de desoxigenación	38
4.4. Condiciones de trabajo para la validación del sistema	59
4.5. Mallas usadas para la validación del sistema	60
4.6. Grado de predicción de las diferentes mallas propuestas	60
4.7. Parámetros comunes de operación durante un vuelo	62
4.8. Propiedades de la mezcla combustible a alta presión	62
A.1. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 60% (1) + Isopropanol (2) + Biodiésel (3)	71

A.2. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 70 % (1) + Isopropanol (2) + Biodiésel (3)	73
A.3. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 80 % (1) + Isopropanol (2) + Biodiésel (3)	75
A.4. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 60 % (1) + 1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	77
A.5. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 70 % (1) + 1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	79
A.6. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 80 % (1) + 1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	81
A.7. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 60 % (1) + 2-Metil-1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	83
A.8. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 70 % (1) + 2-Metil-1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	85
A.9. Datos experimentales: Densidad ρ (g cm^{-3}), Viscosidad η (mPa s) e Índice de refracción (n_D) para la mezcla Turbosina 80 % (1) + 2-Metil-1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	87

B.1. Volumen molar de exceso v^E ($\text{cm}^{-3} \text{ mol}^{-1}$), Desviación de la viscosidad $\Delta\eta$ (mPa s) y Desviación del índice de refracción (Δn_D) para las mezclas Turbosina 60 %, 70 % y 80 % (1) + Isopropanol (2) + Biodiésel (3)	90
B.2. Volumen molar de exceso v^E ($\text{cm}^{-3} \text{ mol}^{-1}$), Desviación de la viscosidad $\Delta\eta$ (mPa s) y Desviación del índice de refracción (Δn_D) para las mezclas Turbosina 60 %, 70 % y 80 % (1) + 1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	94
B.3. Volumen molar de exceso v^E ($\text{cm}^{-3} \text{ mol}^{-1}$), Desviación de la viscosidad $\Delta\eta$ (mPa s) y Desviación del índice de refracción (Δn_D) para las mezclas Turbosina 60 %, 70 % y 80 % (1) + 2-Metil-1-Butanol (2) + Biodiésel (3)	98
C.1. Parámetros para la ecuación de Redlich-Kister para calcular el volumen molar de exceso, v^E ($\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}$), y su desviación estándar, σ para las mezclas con los distintos alcoholes	103
C.2. Parámetros para la ecuación de Redlich-Kister para calcular la desviación de la viscosidad, $\Delta\eta$ (mPa s), y su desviación estándar, σ para las mezclas con los distintos alcoholes	104
C.3. Parámetros para la ecuación de Redlich-Kister para calcular la desviación del índice de refracción, Δn_D y su desviación estándar, σ para las mezclas con los distintos alcoholes	105

AGRADECIMIENTOS

Primero quiero agradecer a mis padres y a mi familia por darme la fortaleza, las ganas y la tenacidad para continuar adelante con mi proyecto de maestría, sin su apoyo no hubiera logrado todo esto.

A mi asesor el Dr. José Julián Cano Gómez, por su disposición para guiarme durante este gran recorrido y apoyarme compartiendo sus conocimientos conmigo y sobre todo, su confianza por dejarme desarrollar este proyecto.

A mi co-asesor de tesis el Dr. Iván Santos López y a los miembros de mi comité tutorial: Dr. Carlos Enrique Escárcega González, Dr. Héctor Javier Amézquita García, Dr. Carlos Escamilla Alvarado por sus recomendaciones y enseñanzas que ayudaron enormemente a mejorar este proyecto.

Al Dr. Gerardo Antonio Flores Escamilla por su amistad, consejos, enseñanzas y por su apoyo incondicional en cada momento, hoy puedo decir que gracias a usted soy mejor investigador.

Al Dr. Alberto Saucedo García que sin su ayuda nada de esto habría sido posible, gracias por siempre seguirme apoyando a lo largo de todo este tiempo.

A la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Autónoma de Nuevo León y a CONACyT por otorgar los recursos necesarios para poder desarrollar este proyecto, indispensables para construir este logro.

RESUMEN

I.Q. Ayrton Joao Briceño Cantú.

Candidato para obtener el grado de Maestría en Ciencias con Orientación en Procesos Sustentables.

Universidad Autónoma de Nuevo León.

Facultad de Ciencias Químicas.

Título del estudio: BIOTURBOSINA A PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS ESTERIFICADOS: PRODUCCIÓN Y PROPIEDADES DE SUS MEZCLAS CON TURBOSINA + ADITIVOS.

Número de páginas: 115.

OBJETIVOS Y MÉTODO DE ESTUDIO: El objetivo principal de este estudio es la producción de bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados así como caracterizar las propiedades fisicoquímicas de sus mezclas con aditivos y su comportamiento en un sistema de inyección directa. El procedimiento se ha subdividido en cinco etapas principales, síntesis del catalizador, producción de bioturbosina, caracterización, preparación de las mezclas con aditivos y simulación mediante dinámica de fluidos.

CONTRIBUCIONES Y CONCLUSIONES: Las contribuciones de esta investigación generaron una ruta de producción de bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados que cumple con los requisitos mínimos marcados por la ASTM D1655. Se prepararon mezclas biocombustibles turbosina + biodiésel + aditivos, usando como aditivos los alcoholes: isopropanol, 1-butanol y 2-metil-1-butanol. Se determinaron experimentalmente las propiedades de las mezclas biocombustibles: densidad, viscosidad e índice de refracción. Se determinaron las propiedades termodinámicas volumen molar de exceso, desviación de la viscosidad y la desviación del índice de refracción. Se determinó el indicador EROI para estimar la sustentabilidad de la producción de bio-

turbosina, el proceso presenta un EROI de 1.69, traducido en que el biocombustible producido genera más energía de la que consume para su elaboración. Las características de aspersión fueron evaluadas mediante dinámica de fluidos computacional. Se encontró que la longitud del spray aumenta ligeramente al aumentar la cantidad de alcohol, así como el ángulo formado por el spray aumenta durante los primeros milisegundos de inyección, llegando al estado pseudotransitorio más rápidamente que el combustible fósil. Las desviaciones del comportamiento en la inyección rondan entre el 3% y 5% obteniendo un biocombustible con un comportamiento muy similar a su homólogo fósil.

Firma del asesor: _____
Dr. José Julián Cano Gómez

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

En décadas recientes se ha visto un aumento considerable en las emisiones de contaminantes en la atmósfera, particularmente en gases de efecto invernadero tales como el CO₂, siendo este de los mayores contribuidores y responsables del cambio climático. Kandaramath Hari *et al.* (2015) En años pasados la industria del transporte aéreo tuvo un gran crecimiento, tal es así que en el 2018, Airbus reportó 4.4 billones de pasajeros. De acuerdo con la IATA (International Air Transport Association), el sector aviación contribuye con el 3% del total de las emisiones antropogénicas de CO₂. IATA (2018) Por lo cual el desarrollo de nueva tecnologías tales como el desarrollo de biocombustibles son presentadas como estrategias prometedoras para la reducción de emisiones de este gas de efecto invernadero. Baliban *et al.* (2013)

El biocombustible para aviación, también conocido como bioturbosina, ha tenido un gran interés por parte de la IATA, presentándola como una alternativa al uso de combustibles fósiles ya que esta tiene un potencial de reducción de emisiones de CO₂ de hasta el 80% de las emisiones totales. IATA (2018)

El combustible de aviones consiste en una mezcla de alcanos, alquenos e hidrocarburos aromáticos con una longitud de cadena C₈-C₁₇. A pesar de que los biocombustibles han demostrado compatibilidad, estos no pueden ser usado directamente en el sistema de combustible del avión ya que el combustible aéreo tiene

requisitos muy estrictos. Verma *et al.* (2011)

En literatura se han reportado distintas rutas de síntesis para la producción de bioturbosina tales como hidroprocesamiento (HEFA), conversión de alcoholes y reacción de Fisher-Tropsch. Gutiérrez-Antonio *et al.* (2017)

Los combustibles sintetizados mediante la reacción de Fisher-Tropsch se consideran prácticamente limpios, ya que no presentan emisiones de SO_x , tienen un alto número de cetano, generan bajas cantidades de partículas sólidas y contienen una baja cantidad de aromáticos. No obstante, presentan algunas desventajas como: costos de proceso elevados y eficiencias entre 25-50 %; además, presentan una baja densidad energética, aumentando el uso de combustible. Kandaramath Hari *et al.* (2015)

Por otro lado, los combustibles sintetizados a partir del alcohol representan ser una buena alternativa debido a sus buenas propiedades en frío, como su bajo punto de congelación, ($<-65^\circ\text{C}$) y disponibilidad de materia prima. Brooks *et al.* (2016) Sin embargo las principales desventajas de este proceso radican en la complejidad de síntesis, involucrando 4 etapas en su proceso: deshidratación, oligomerización, destilación e hidrogenación, volviendo más costosa su producción. Neuling y Kaltschmitt (2015)

Tradicionalmente la bioturbosina ha sido producida a partir de aceites vegetales, aceites de desecho de cocina y grasa animal, así como biodiésel hecho a partir de microalgas, los cuales son considerados subproductos de poco valor agregado para la industria. Kandaramath Hari *et al.* (2015)

El biodiésel es una mezcla de ésteres metílicos de ácidos grasos (FAMES) de composición $\text{C}_{14}\text{-C}_{24}$. Tiene baja estabilidad térmica y una alta viscosidad debido al alto contenido de oxígeno y largas cadenas de carbono. Hoekman *et al.* (2012)

Es por ello que los investigadores han centrado su atención hacia la desoxigenación (deCO_x), con la cual buscan remover el oxígeno de moléculas de bajo valor

agregado en forma de H_2O o CO_x . Donniss *et al.* (2009) Se ha propuesto la ruta de conversión de biodiésel a hidrocarburos de cadena media como la turbosina de manera que las cadenas más grandes de las que se compone el biodiésel se desoxigenen hacia C_{15} - C_{16} a través de las reacciones de decarbonilación/decarboxilación y después las cadenas puedan romperse en alcanos de cadena más corta. Li *et al.* (2018)

Uno de los métodos más conocidos para la remoción de oxígeno es mediante la reacción de hidrodeshidrogenación, en la cual el oxígeno es removido principalmente como agua, este método en particular requiere altas presiones de hidrógeno, lo cual vuelve a este proceso peligroso y más costoso. Santillan-Jimenez y Crocker (2012) Recientemente, la atención se ha centrado en métodos alternativos para la desoxigenación de biomasa como la descarbonilación ($-CO$) y/o la descarboxilación ($-CO_2$). En comparativa con la hidrodeshidrogenación, esta alternativa tiene ventajas notables tales como el procesamiento bajo condiciones más suaves. Kubička *et al.* (2009) De esta manera, la desoxigenación de ésteres metílicos de ácidos grasos es presentado como una ruta para la transformación de biomasa a bioturbosina. Li *et al.* (2018)

Las reacciones de desoxigenación de ácidos grasos y sus ésteres han mostrado una conversión muy baja a temperaturas moderadas de ($<400^\circ C$) lo cual indica la necesidad de incorporar un catalizador al proceso. Snåre *et al.* (2006) realizaron experimentos con una variedad de metales (Pd, Pt, Ru, Mo, Ni, Rh Ir y Os) soportados en carbón activado o en distintos óxidos como Cr_2O_3 y MgO . Los resultados que obtuvieron de sus investigaciones fue que estos metales de transición presentaron actividad catalítica para promover las reacciones de desoxigenación (Pd > Pt > Ni > Rh > Ir > Ru > Os).

El uso de bioturbosina tiene distintas ventajas, por ejemplo, la reducción de emisiones de CO_2 y SO_x debido a su alto número de cetano y su bajo contenido de azufre. Chen y Wang (2019) Por otro lado, algunas de sus propiedades difieren a las de la turbosina de origen fósil (densidad y viscosidad superiores, mayor contenido de

agua, mayor tensión superficial), lo cual representa un desafío al usarlo en el sistema de inyección de combustible. Llamas *et al.* (2012)

Uno de los retos en el uso de la bioturbosina está en evitar modificaciones en el sistema de inyección de combustible, partes como la bomba de inyección, boquillas de aspersión y las líneas de alta presión son componentes críticos a la hora de utilizar un sistema de turbo inyección directa, es por eso por lo que al usar un combustible alternativo se busca tener un sellado homogéneo para evitar fugas.

El conocimiento de las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina como viscosidad, tensión superficial, y densidad es importante para poder determinar las características de aspersión del biocombustible en el sistema de inyección, permitiendo evaluar la viabilidad como combustible alternativo bajo este enfoque. Siebers (1999)

La densidad en los combustibles influye en el transporte, producción y procesos de distribución, afectando directamente en la cantidad de combustible suministrado al sistema, al ser más denso un combustible mayor es la cantidad de masa de combustible usada en el proceso de combustión, aumentando las emisiones de contaminantes. Los combustibles para aviación tienen requisitos muy estrictos; estos deben cumplir con la norma ASTM D1655. Por este motivo el diseño de sistemas de inyección y combustión implica la descripción precisa de las características fisicoquímicas del combustible. Kim *et al.* (2016)

Durante la inyección de combustible, la tensión superficial es el principal factor que determina el grado de dispersión (tamaño y número de gotas) y la eficiencia de combustión. Es decir, cuanto menor sea la tensión superficial, esto se refleja en una mejor atomización del combustible. Salvi *et al.* (2012) Controlar la viscosidad es un aspecto importante para una combustión eficiente. Un combustible muy viscoso complica el proceso de atomización en los inyectores, provocando una mala combustión y un aumento en los gases contaminantes. Kim *et al.* (2016)

Adicionalmente, el índice de refracción resulta útil para confirmar la pureza

de las mezclas de combustible, así como calcular la composición del soluto en la solución. Nita *et al.* (2013)

El conocimiento de estas propiedades físicas es importante para el diseño de los sistemas de inyección de combustible así como para el desarrollo de nuevos modelos de predicción de otras propiedades importantes como lo son las propiedades de exceso.

Las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina pueden ser mejoradas mediante el uso de aditivos, usualmente alcoholes de cadena corta como el etanol e isopropanol son utilizados ya que permiten reducir la densidad y viscosidad de la mezcla combustible, sin embargo, estos presentan algunas desventajas como baja lubricidad, bajo número de cetano y problemas de solubilidad. Kwanchareon *et al.* (2007) El uso de alcoholes de cadena larga como 1-butanol y 2-metil-1-butanol están recibiendo atención creciente en uso como aditivos para los biocombustibles ya que estos muestran una mejor miscibilidad con diésel y turbosina, mayor número de cetano, reducción de emisiones y un mayor poder calorífico. Imdadul *et al.* (2016)

Una manera de analizar el desempeño de la bioturbosina es mediante simulación, utilizando CFD (Dinámica de Fluidos Computacional), es posible analizar las características de aspersion como la longitud de penetración, ángulo de aspersion para predecir el comportamiento del combustible en la cámara de combustión en relación con su homólogo fósil.

En este estudio se desarrolló una metodología para producir bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados mediante la desoxigenación por descarboxilación/decarbonilación de las moléculas del biodiésel para la producción de bioturbosina capaz de cumplir con los parámetros establecidos según la norma ASTM D1655. Se prepararon mezclas a partir de turbosina + biodiésel + aditivos. Se usaron isopropanol, 1-butanol, 2-metil-1-butanol como aditivos para preparar mezclas ternarias biocombustibles y se midieron la densidad, viscosidad e índice de refracción. Las propiedades mencionadas, fueron medidas experimentalmente en un rango de tem-

peraturas de 288.15 a 338.15 K a 0.1 MPa. El efecto de las mezclas biocombustible + aditivos sobre el ángulo de aspersión y longitud de penetración en la cámara de combustión se evaluó mediante simulaciones por dinámica computacional de fluidos utilizando el software ANSYS Fluent.

CAPÍTULO 2

ANTECEDENTES

La industria de la aviación ha estado explorando nuevas soluciones para reducir el consumo de combustible, no solo desde un punto de vista económico, sino también desde el punto de vista ambiental para la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero debido a la creciente preocupación ambiental. El combustible de aviones, también conocido como turbosina, es una mezcla de hidrocarburos especialmente diseñada para su uso en aeronaves conteniendo alcanos de cadena media C₈-C₁₆ así como otros hidrocarburos aromáticos. Actualmente solo es producida mediante la refinación del petróleo. Liu *et al.* (2013)

Es por ello que surge la necesidad de producir bioturbosina, como una propuesta para mitigar las emisiones de CO₂ y desplazar poco a poco la dependencia que todavía tenemos de los combustibles fósiles.

Durante la última década, se han realizado investigaciones en torno a la producción de bioturbosina; distintos autores han centrado sus esfuerzos en estudiar las diferentes rutas de producción a partir de aceites y otros ácidos grasos.

Distintas rutas desde la reacción de Fischer Tropsch y el hidrogenación de distintos tipos de grasas han sido desarrollados para producir bioturbosina a partir de biomasa.

Sotelo-Boyás *et al.* (2011) estudiaron el hidrogenación de aceite de colza

sobre tres catalizadores bifuncionales: Pt/HY, Pt/H-ZSM-5 y NiMo/ γ -Al₂O₃ sulfurada; en sus experimentos encontraron que los metales de transición Pt y Ni son los principales responsables de llevar a cabo las reacciones de hidrogenación de grasas insaturadas, mientras que la modulación de la acidez de la zeolita contribuye a la selectividad de la longitud de la cadena deseada. Los experimentos utilizando Pt/HY mostraron una mayor selectividad hacia las gasolinas (C₅-C₁₂), con una selectividad del 40 % a 380°C y 11 MPa debido a sus sitios fuertemente ácidos, mientras que sus experimentos con NiMo/ γ -Al₂O₃, al poseer una acidez más débil mostró productos del rango de diésel (C₁₃-C₂₂), con una selectividad del 78 % a 350°C y 8 MPa.

Por otro lado, Liu *et al.* (2015), produjeron bioturbosina mediante el hidropcesamiento en un microreactor continuo de lecho fijo a partir de aceite de ricino sobre un catalizador de níquel soportado en una zeolita ácida, obteniendo una selectividad del 91.6 % a 300°C, 3 MPa y 2 h⁻¹. En sus experimentos encontraron que se puede modificar el grado de desoxigenación mediante el soporte de Ni en zeolitas de acidez moderada, corroborando los hallazgos de Sotelo-Boyás *et al.* (2011).

A medida que el Ni soportado ganaba popularidad como un buen catalizador para este tipo de reacciones, por su parte, Wu *et al.* (2016) lograron producir bioturbosina a partir de la descarboxilación del ácido esteárico utilizando como catalizador Ni/C, alcanzando una selectividad del 80 %, las condiciones de reacción fueron 370°C con un tiempo de reacción de 5 horas. Además, se realizó un estudio para determinar el grado de reutilización del catalizador, para ello se corrieron tres pruebas en las cuales se obtuvo una selectividad de casi el 80 %, mostrando la factibilidad del reúso del catalizador sin comprometer la actividad catalítica.

Aunque biocombustibles como el biodiésel han demostrado compatibilidad de manera directa con los vehículos, éste no puede ser agregado directamente al combustible de aviones ya que la turbosina tiene requisitos muy estrictos. Por lo tanto, investigadores han centrado su atención hacia la desoxigenación de la biomasa, donde el oxígeno es eliminado en forma de H₂O o como moléculas de CO_x.

Es por ello que Li *et al.* (2018) investigaron la desoxigenación a partir de biodiésel de microalgas, ellos probaron cuatro catalizadores distintos de níquel soportado en zeolitas, encontraron que el catalizador de Ni/Meso-Y mostró una selectividad del 44.5 %, en su estudio concluyen que en estas reacciones, la mayoría de los ácidos grasos son primeramente desoxigenados hacia C₁₅-C₁₆ mediante descarbonilación/descarboxilación, posteriormente se rompen estas moléculas en alcanos lineales más pequeños.

Una de las cosas que caracteriza a la turbosina de origen fósil es su baja viscosidad y densidad, propiedades que tienen un impacto en el diseño de los componentes del sistema de inyección y características de aspersion. Los biocombustibles regularmente muestran valores de densidad y viscosidad mayores que su homólogo fósil, sin embargo, superan en punto de inflamabilidad haciéndola más segura para su manejo. Llamas *et al.* (2012).

Diversos investigadores se han dado a la tarea de analizar la influencia de las propiedades fisicoquímicas en las características de aspersion.

Tal es el caso de Siebers (1999), estudió el efecto de varios parámetros en la inyección de combustible como: presión de inyección, temperatura, densidad y volatilidad del combustible en la inyección de líquido. Se observó que la presión tiene un efecto en la longitud de inyección, debido a que la presión ejerce una mayor velocidad en la inyección. También demostró que la longitud de inyección es inversamente proporcional al aumento de temperatura, debido a que una menor energía es requerida para vaporizar el combustible.

Por otra parte Kook y Pickett (2012), en sus investigaciones encontraron que la longitud de inyección de combustible está ligada proporcionalmente a la densidad del combustible.

Con el uso de la bioturbosina, las emisiones contaminantes pueden reducirse en comparativa a la turbosina de origen fósil. Por otra parte, la alta viscosidad y densidad y las pobres propiedades en frío que presenta, limitan el uso de la biotur-

bosina, que tiende a tener una atomización pobre, un patrón de rociado estrecho y por lo tanto una combustión incompleta. En la literatura son pocas las investigaciones acerca del uso de aditivos para bioturbosina, la mayoría de las investigaciones se enfocan en el biodiésel, sin embargo, el uso de estos aditivos representa especial atención ya que al usarlos mejoran las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina haciéndola adecuada para su uso en sistemas de inyección tradicionales.

Otro fenómeno importante que estudiar en el desarrollo de biocombustibles es la dinámica de fluidos computacional (CFD). Con la ayuda de esta herramienta es posible evaluar el comportamiento del combustible cuando no se dispone del equipo experimental. Esto hace posible elucidar el efecto de los aditivos sobre las características de aspersión de la bioturbosina, comparando su comportamiento contra la turbosina de origen fósil.

Ra *et al.* (2008) realizaron un estudio de CFD para investigar los efectos de las propiedades físicas en motores diésel, analizaron el efecto de las propiedades en la fase líquida; densidad, tensión superficial, viscosidad y conductividad térmica; para la fase vapor: capacidad calorífica, difusividad del vapor, conductividad térmica así como la presión de vapor y la influencia de las reglas de mezclado. Concluyeron que las propiedades más sensibles que afectan directamente la inyección del combustible son la densidad, presión de vapor, viscosidad y tensión superficial.

Por su parte, Kim *et al.* (2016) llevaron a cabo un estudio de CFD, en este estudio se identificaron las propiedades físicas dependientes de la temperatura que deben tomarse en cuenta para el desarrollo de combustibles sustitutos para el modelado correcto de la longitud del spray, ángulo del spray y el retardo en la inyección del combustible objetivo. Utilizaron como modelo n-dodecano para la aspersión y estudiaron seis propiedades físicas (densidad, presión de vapor, viscosidad, tensión superficial, calor de vaporización y capacidad calorífica). En sus resultados obtuvieron que para mejorar la longitud del spray las propiedades dominantes para realizar el modelado son la densidad del líquido, viscosidad y tensión superficial.

En la literatura, resulta difícil encontrar evidencia de investigaciones previas del estudio de la inyección de turbosina o bioturbosina, ya que la mayoría de los estudios están enfocados en el diésel o biodiésel, por lo que resulta importante el abrir la brecha de investigación en este tema.

La obtención de bioturbosina con propiedades específicas busca reemplazar total o parcialmente el uso de turbosina en sistemas de turbo inyección directa. La premisa de estas investigaciones yacen en desarrollar un biocombustible que tenga características semejantes de un combustible fósil, todo esto sin comprometer el rendimiento ni realizar modificaciones al sistema de inyección. Este proyecto busca producir bioturbosina a partir de un subproducto de bajo valor agregado como los ésteres metílicos producidos a partir de grasa de res, transformándolos a bioturbosina mediante el uso de un catalizador heterogéneo de níquel soportado en carbón activado.

Por otro lado, mezclas turbosina + biodiésel + aditivo se analizarán por CFD para simular el sistema de inyección de combustible y evaluar su comportamiento bajo las propiedades fisicoquímicas de la mezcla biocombustible producida.

2.1 HIPÓTESIS

El uso de ácidos grasos esterificados como materia prima favorecerá la producción de bioturbosina mediante hidropcesamiento.

El uso de aditivos en la mezcla turbosina + biodiésel mejora las propiedades fisicoquímicas favoreciendo las características de aspersion.

2.2 OBJETIVOS

2.2.1 OBJETIVO GENERAL

Producir bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados y evaluar las características de aspersión de la mezcla turbosina + biodiésel + aditivos en un sistema de inyección directa.

2.2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Sintetizar bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados empleando catálisis heterogénea.

Determinar experimentalmente las propiedades fisicoquímicas de mezcla turbosina + biodiésel + aditivos.

Simular mediante Dinámica de Fluidos Computacional el proceso de inyección de combustible al usar turbosina + biodiésel + aditivos como combustible alternativo.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA DE TRABAJO

La materia prima para la producción de bioturbosina será biodiésel hecho a partir de grasa de res adquirida de expendios cárnicos. Para la síntesis del catalizador, se utilizará hexahidrato de níquel (98 % Sigma Aldrich) y carbón activado (Sigma Aldrich). Los aditivos 2-propanol (99 % Sigma Aldrich), 1-butanol (99 % Sigma Aldrich) y 2-metil-1-butanol (99 % Sigma Aldrich) fueron adquiridos con el proveedor.

La información de los reactivos usados para la síntesis del catalizador así como de los alcoholes empleados como aditivos se encuentra sintetizada en la Tabla 3.1.

TABLA 3.1: Información de sustancias

Sustancia	Marca	No. CAS	Pureza fracción masa
Hexahidrato de níquel	Sigma Aldrich	13478-00-7	0.98
Carbón activado	Darco	7440-44-0	N/A
2-propanol	Sigma Aldrich	67-63-0	0.99
1-butanol	Sigma Aldrich	71-36-3	0.99
2-metil-1-butanol	Sigma Aldrich	137-32-6	0.99

La metodología empleada para el cumplimiento de los objetivos del proyecto

se desarrollará en 5 etapas, ilustradas en la Figura 3.1.

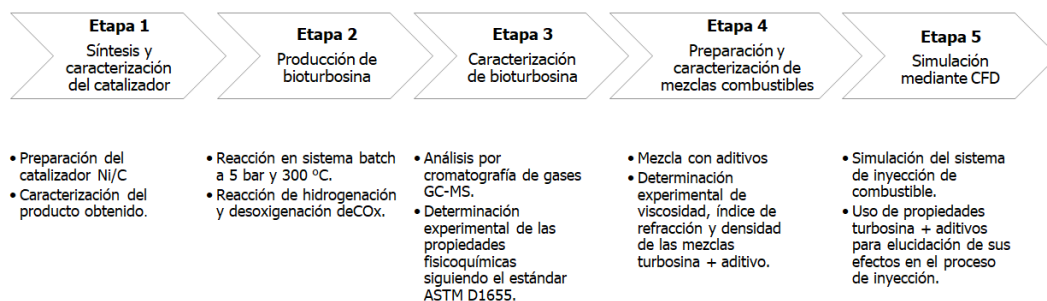


FIGURA 3.1: Etapas de la metodología

3.1 ETAPA 1

3.1.1 SÍNTESIS DEL CATALIZADOR

Se prepararon catalizadores con carga 10 wt. %, 15 wt. % y 20 wt. % Ni. Para depositar el metal sobre la superficie del soporte de carbón activado, se utilizó el método de impregnación incipiente usando $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ como metal precursor y carbón activado (Darco KB-G) como soporte.

Posteriormente se secó a 65 °C durante 12 horas. Una vez seco, el catalizador se activó en dos pasos, primero mediante calcinación para la descomposición de la sal metálica en una atmósfera de aire a 350 °C a una velocidad de 5 °C/min durante 3 horas. Por último, se redujo de manera ex-situ fluyendo una mezcla de 10 % H_2/N_2 con un flujo de 50 mL/min y 350 °C y una velocidad de 5 °C/min durante 3 horas. Santillan-Jimenez y Crocker (2012)

3.1.2 CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR

Para caracterizar al catalizador se hizo uso de difracción de rayos-x (XRD), para identificar la fase activa presente. Los patrones de difracción de rayos-x fueron obtenidos utilizando el equipo D2-Phaser con un ánodo de Cu K α ($\lambda = 0.154$ nm) como fuente de radiación. Las muestras fueron escaneadas en un rango de 2θ de 10-80°.

Las propiedades texturales del catalizador (área superficial, diámetro y volumen de poro) fueron determinadas utilizando fisisorción de nitrógeno a 77 K usando el equipo Micrometrics TriStar II System. Las áreas superficiales del catalizador fueron determinadas utilizando el modelo BET. El diámetro y volumen de los mesoporos fueron determinados por el modelo BJH.

3.2 ETAPA 2

3.2.1 PRODUCCIÓN DE BIOTURBOSINA

Los experimentos de desoxigenación de biodiésel fueron llevados a cabo en una autoclave de acero inoxidable de 50 mL. La autoclave fue purgada tres veces con N₂ previo a ser presurizado a 5 bar con N₂ y mezclas 40 % y 60 % de H₂/N₂ en volumen. La temperatura del autoclave fue medida con un termopar tipo K colocado en el interior del reactor. La reacción fue llevada con una velocidad de agitación de 500 rpm a 300 °C por 5 h. En una corrida típica, se colocan 15 mL de biodiésel y catalizador en una relación masa de 20:1 biodiésel/catalizador en el reactor. Al completarse la reacción, el equipo es enfriado a temperatura ambiente. Una vez que el reactor se enfrió completamente los productos líquidos y sólidos fueron separados mecánicamente mediante filtración. Li *et al.* (2015)

El proceso de producción de bioturbosina se resume en la Figura 3.2 comenzando la alimentación de materia prima al proceso (biodiésel y catalizador) en la primera etapa, en la segunda etapa el reactor es cargado y el sistema llevado a las condiciones de reacción, después en la tercera etapa la mezcla es separada mecánicamente por filtración donde el catalizador sólido es removido de los productos líquidos.

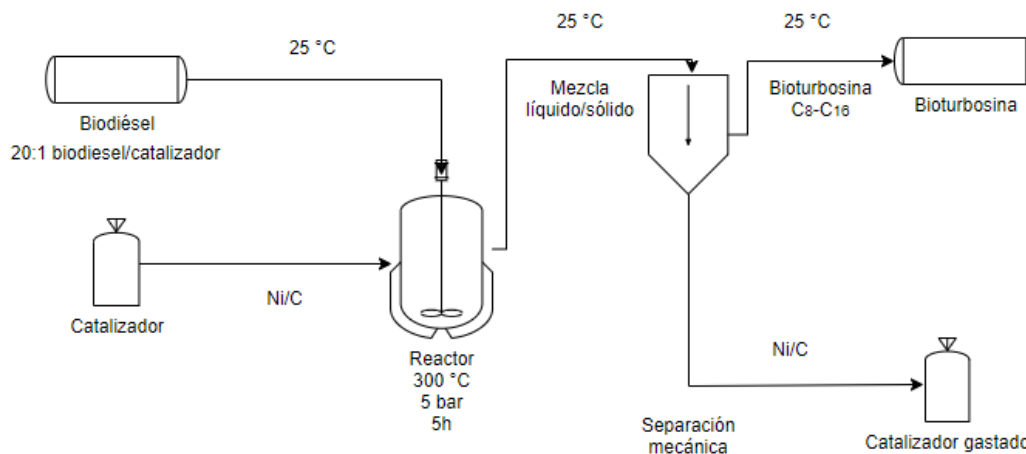


FIGURA 3.2: Proceso de producción de bioturbosina

3.3 ETAPA 3

3.3.1 CARACTERIZACIÓN DE LA BIOTURBOSINA

Una vez terminada la reacción se procedió a caracterizar la bioturbosina producida con base en el estándar ASTM D1655, en esta etapa se evaluaron algunas propiedades como: viscosidad, densidad e índice de refracción. Para determinar su composición se utilizó un cromatógrafo de gases Shimadzu GCMS-QP2010 equipado con un detector de ionización de flama (FID) equipado con una columna capilar (5 %-fenil-95 %-dimetilpolisiloxano) de 30 m x 0.25 mm i.d., 0.25 μ m. La temperatura del inyector y detector se mantuvieron a 300 °C y 320 °C respectivamente.

La temperatura del horno se mantuvo a 35 °C durante 4 minutos incrementándose hasta 300 °C a una velocidad de 5 °C/min manteniendo la temperatura durante 20 minutos. Fu *et al.* (2010)

Para la medición de la densidad se usó un densímetro de tubo vibrante modelo DMA 5000 de Anton Paar. La reproducibilidad acorde al fabricante es de $\pm 1 \times 10^{-6}$ g/cm³ y ± 0.001 K para la temperatura.

La viscosidad cinemática se estimó utilizando un viscosímetro Cannon-Fenske 50 con un rango de medición de 0.8 - 4 cSt y una precisión de ± 0.2 %. El viscosímetro se acomodó a un baño térmico para el control de la temperatura.

Finalmente, el índice de refracción se midió utilizando un refractómetro digital Abbemat 500 de Anton Paar con una resolución de $\pm 1 \times 10^{-6}$ nD.

En la Tabla 3.2 se muestra un resumen de las propiedades a determinar y el método de prueba a utilizar.

TABLA 3.2: Resumen de propiedades experimentales para caracterización

Propiedad	Método (Estándar ASTM)
Densidad a 15°C, kg/m ³	D1298
Viscosidad cinemática a -20 °C, cSt	D445
Índice de refracción, nD	N/A

Una manera de monitorear cualitativamente el rendimiento de la reacción es mediante espectroscopía infrarroja. Para ello se utilizó un espectrómetro infrarrojo Nicolet Avatar 360, se tomó una pequeña muestra de catalizador fresco y se disolvió utilizando KBr para una mejor resolución del espectro, examinando en un rango de número de onda de (4000 - 400 cm⁻¹). Se repitió el procedimiento con catalizador usado en las reacciones de desoxigenación para rastrear la presencia de alcanos y otros grupos funcionales presentes en la superficie del catalizador.

3.3.1.1 VIABILIDAD DEL PROCESO

Para evaluar la viabilidad del proceso de producción de bioturbosina, se recurrió a utilizar el indicador EROI (Energy Return On Investment), el cual tiene por objetivo evaluar la energía total que es capaz de producir una fuente de energía. Para ello, se aplica un cociente entre la energía producida y la energía que consume el proceso:

$$EROI = \frac{E_J}{E_J - \sum E_i} \quad (3.1)$$

Donde:

E_J es la energía que suministra la bioturbosina

E_i es la energía directa e indirecta requerida para producir una unidad de bioturbosina

E_i y E_j son obtenidas a partir de un balance de energía realizado al proceso.

Un cociente menor o igual a 1 indica que la energía de la fuente es menor o igual a la energía consumida. Por el contrario, un cociente mayor que 1 indica que la energía total es mayor que la energía invertida quedando en consecuencia un saldo positivo. Entre mayor sea el valor del EROI, puede decirse que el proceso es más retribuable.

Para llevar a cabo la evaluación se utilizó el enfoque del balance de energía neto sugerido por Shapouri *et al.*. Para ello se tomaron en cuenta los gastos energéticos directos e indirectos en todas las etapas del ciclo de vida de la bioturbosina. Las entradas directas de energía al proceso son calculadas a partir del poder calorífico del combustible (LHV) y la energía indirecta es calculada de los energéticos requeridos para la producción del combustible así como su materia prima.

3.3.1.2 BALANCE DE ENERGÍA EN LA SÍNTESIS DEL CATALIZADOR

Para la síntesis del catalizador se realizaron 3 etapas

La primera etapa comienza con el secado del soporte del catalizador, para ello se realiza el balance de energía sobre la etapa:

$$E_{\text{secado}} = m_{\text{AC seco}} \cdot C_{p_{\text{AC}}} \Delta T + m_{\text{AC húmedo}} \cdot C_{p_{\text{agua liq}}} + m_{\text{agua}} \cdot \lambda_{\text{vap agua}} + C_{p_{\text{agua gas}}} m_{\text{agua}} \Delta T + m_{\text{porcelana}} \cdot C_{p_{\text{porcelana}}} \cdot \Delta T \quad (3.2)$$

Donde $m_{\text{AC seco}}$ es la masa del soporte seco y $m_{\text{AC húmedo}}$ es la masa del soporte previo al secado.

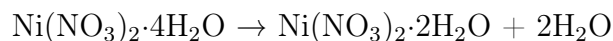
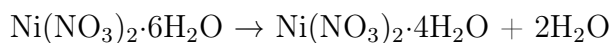
Después, la segunda etapa del proceso continúa en la calcinación y activación del catalizador, realizando un balance de energía en la etapa queda de la siguiente manera:

$$E_{c/a} = m_{\text{cat}} \cdot C_{p_{\text{cat}}} \cdot \Delta T + m_{\text{porcelana}} \cdot C_{p_{\text{porcelana}}} \cdot \Delta T + \Delta H_{\text{rxn}} \cdot \frac{m_{\text{cat}}}{M_{\text{cat}}} \quad (3.3)$$

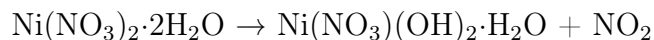
Donde $E_{c/a}$ es la energía requerida durante el proceso de calcinación/activación

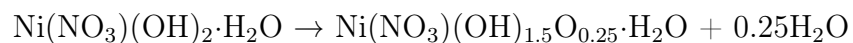
Para calcular ΔH_{rxn} se utilizó la trayectoria propuesta por Brockner *et al.* (2007) a partir de la estequiometría de las reacciones involucradas a lo largo de la descomposición térmica:

Separación del agua

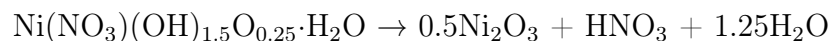


Descomposición parcial

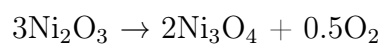




Descomposición

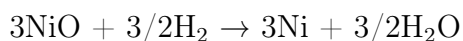


Descomposición del óxido hacia NiO



Por último, la síntesis del catalizador culmina con la activación del mismo, para ello es necesario reducir el óxido de níquel para transformarlo a níquel metálico.

Reducción con H_2/N_2 (10 % H_2) hacia Ni



Combinando las reacciones de descomposición da como resultado la reacción general de formación de Ni a partir de la descomposición del $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$



Por lo tanto:

$$\Delta H_{\text{rxn}} = \Delta H_{\text{f Ni}} \quad (3.4)$$

Donde $\Delta H_{\text{f Ni}}$ es la entalpía de formación del Ni a partir de la descomposición del $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

3.3.1.3 BALANCE DE ENERGÍA EN EL REACTOR

El balance de energía del reactor quedó de la siguiente manera:

$$E_{\text{reactor}} = m_{\text{biodiésel}} \cdot C_{p_{\text{biodiésel}}} \cdot \Delta T + UA \cdot \Delta T \quad (3.5)$$

Donde U es el coeficiente global de transferencia de calor y A es el área transferencia de calor.

$$U = 165.50 \text{ W/m}^2 \text{ K}$$

$$A = 0.0093 \text{ m}^2$$

Estas magnitudes fueron determinadas a partir del espesor y conductividad térmica del reactor así como los efectos de convección debido al movimiento del fluido dentro del reactor.

La energía total de los requerimientos del proceso está dada por:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{secado}} + E_{c/a} + E_{\text{reactor}} \quad (3.6)$$

3.4 ETAPA 4

3.4.1 PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MEZCLAS

TERNARIAS: TURBOSINA + BIODIÉSEL + ALCOHOL

Se prepararon las mezclas de turbosina + biodiesel + alcohol (isopropanol, 1-butanol, 2-metil-1-butanol) usando turbosina al 60, 70 y 80% como base para mezclar con isopropanol, 1-butanol y 2-metil-1-butanol. Las mezclas se prepararon de (0 a 40%) fracción en peso de alcohol, con la finalidad de elucidar el efecto que

tiene la concentración y el tipo de aditivo sobre la densidad, viscosidad e índice de refracción en la mezcla combustible propuesta.

Inicialmente la propuesta del estudio consistía en la preparación de mezclas biocombustibles de bioturbosina + turbosina + alcohol para la elucidación de los efectos de los aditivos en las propiedades fisicoquímicas de las mezclas y su comportamiento en un sistema de inyección de combustible. Sin embargo, debido a la emergencia sanitaria presente en el periodo en curso, aunado a las complicaciones suscitadas en el trabajo experimental, por motivos de tiempo y para respetar los objetivos previamente planteados, se cambió la propuesta de estudio a la elucidación de los efectos en las propiedades fisicoquímicas de los aditivos en la mezcla turbosina + biodiésel + alcohol y su comportamiento en un sistema de inyección de combustible.

Las mediciones experimentales de la densidad, viscosidad e índice de refracción se realizaron en un intervalo de temperatura de 288.15 a 338.15 K. Los equipos utilizados para las mediciones se detallaron en la sección 3.3.1.

La estimación de la viscosidad se realizó midiendo el tiempo que tarda en descender cierto volumen de muestra a través de un tubo capilar de vidrio previamente calibrado. La viscosidad cinemática se calculó como:

La ecuación (3.7) permite estimar la viscosidad del fluido que fluye a través del tubo capilar.

$$\nu = \kappa \cdot t \tag{3.7}$$

Donde κ es la constante de calibración del viscosímetro en mm^2/s^2 y t el tiempo de flujo del fluido a través del viscosímetro. El tiempo fue medido utilizando un cronómetro digital con una precisión de 0.01 s.

3.4.1.1 PROPIEDADES DE DESVIACIÓN Y EXCESO

En esta sección se presentan las ecuaciones para el cálculo del volumen molar de exceso, desviación de la viscosidad y la desviación del índice de refracción. La intención de calcular estas propiedades es comprender como difiere el comportamiento del compuesto puro a su comportamiento en mezcla.

El volumen molar de exceso, la desviación de la viscosidad y la desviación del índice de refracción representan la desviación del comportamiento de mezcla ideal y la mezcla real. Estas propiedades nos brindan información sobre las interacciones moleculares que tiene la mezcla.

Se calculó el volumen molar de exceso mediante:

$$V^E/(\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1}) = \sum_{i=1}^3 x_i M_i \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_i} \right) \quad (3.8)$$

Donde V^E es el volumen molar en exceso, ρ es la densidad de la mezcla, ρ_i es la densidad del compuesto puro i en la mezcla, x_i es la fracción molar, y M_i es la masa molar de los componentes puros.

La desviación de la viscosidad se calculó mediante:

$$\Delta\eta/(\text{mPa s}) = \eta - \sum_{i=1}^3 x_i \eta_i \quad (3.9)$$

Donde η y η_i son las viscosidades de la mezcla y los componentes puros respectivamente.

Por último, se calculó la desviación del índice de refracción mediante:

$$\Delta n_D = n_D - \sum_{i=1}^3 x_i n_{Di} \quad (3.10)$$

Donde n_D y n_{D_i} son los índices de refracción de la mezcla y componentes puros respectivamente.

La masa molar del biodiésel se calculó de la siguiente manera:

$$M_{\text{biodiésel}}/(\text{g mol}^{-1}) = \sum_{i=1}^{i-\text{fame}} x_i M_i \quad (3.11)$$

Donde $M_{\text{biodiésel}}$ es la masa molar promedio del biodiésel, M_i y x_i son la masa molar y fracción molar de los ésteres metílicos presentes en el biodiésel y *i-fame* es la cantidad de ésteres metílicos presentes en la mezcla.

El volumen molar en exceso, la desviación de la viscosidad y la desviación del índice de refracción fueron representados por la ecuación de Redlich y Kister (1948):

$$M^E = M_{12}^E + M_{23}^E + M_{31}^E + x_1 x_2 x_3 [A + B x_1 (x_2 - x_3) + C x_1^2 (x_2 - x_3)^2] \quad (3.12)$$

Donde M^E es la propiedad de desviación o exceso, x_1 , x_2 y x_3 son las fracciones molares de los componentes 1, 2 y 3 respectivamente y A , B y C son las constantes de Redlich-Kister para el sistema ternario. M_{12} , M_{23} y M_{31} representan las interacciones binarias entre los componentes de las mezclas, y sus valores son calculados por:

$$M_{12}^E = x_1 x_2 [a_{12} + b_{12} (x_1 - x_2) + C_{12} (x_1 - x_2)^2] \quad (3.13)$$

$$M_{23}^E = x_2 x_3 [a_{23} + b_{23} (x_2 - x_3) + C_{23} (x_2 - x_3)^2] \quad (3.14)$$

$$M_{31}^E = x_1 x_3 [a_{31} + b_{31} (x_1 - x_3) + C_{31} (x_1 - x_3)^2] \quad (3.15)$$

Donde a_{12} , b_{12} , c_{12} etc., son constantes determinadas a partir del ajuste de los

datos del volumen molar de exceso, desviación viscosidad y desviación del índice de refracción.

3.5 ETAPA 5

3.5.1 SIMULACIÓN EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

La Figura 3.3 muestra la metodología usada para el análisis de las características de aspersión de las mezclas ternarias: turbosina + biodiésel + alcohol en la cámara de inyección. Para este proceso se utilizó la suite de ANSYS Fluent v2020.

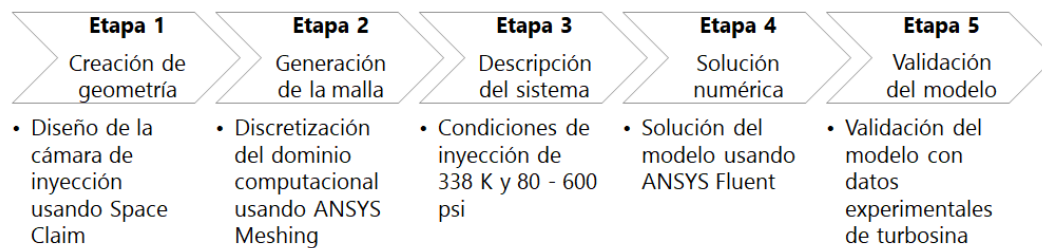


FIGURA 3.3: Metodología de análisis DFC

3.5.2 CREACIÓN DE LA GEOMETRÍA

La geometría usada para representar la inyección de combustible consta de dos piezas, la boquilla y la cámara de inyección, ambas creadas utilizando el software ANSYS Space Claim. La Figura 3.4 muestra un diagrama del modelo geométrico con sus dimensiones.

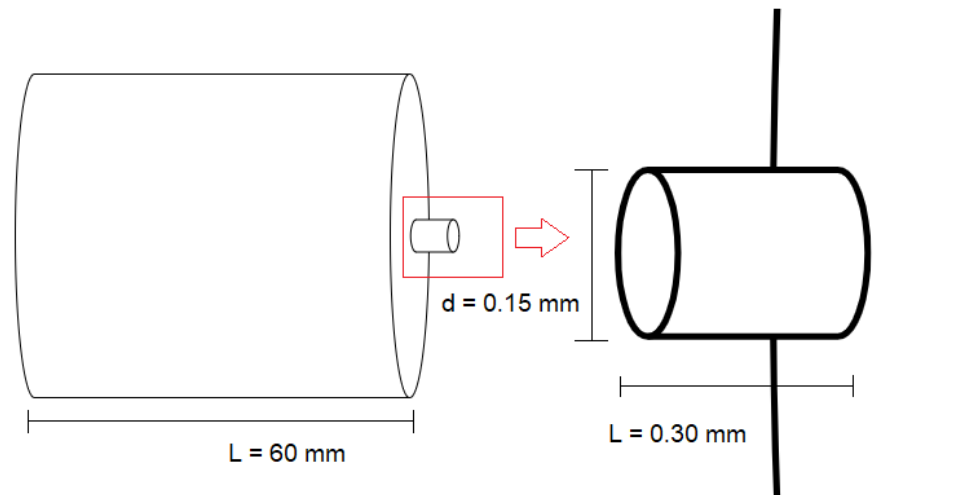


FIGURA 3.4: Modelo geométrico del sistema de inyección

3.5.3 GENERACIÓN DE LA MALLA

El mallado es una parte integral del proceso de simulación en ingeniería en donde las geometrías complejas se dividen en elementos simples que se pueden usar como aproximaciones discretas del dominio más grande. La malla influye en la precisión, convergencia y velocidad de la simulación, por lo cual se realizó un refinamiento en la zona efluente de la boquilla de inyección con el fin de representar de una manera más eficiente el comportamiento de las variables de flujo en esta sección. El dominio computacional se discretizó mediante el software ANSYS Meshing. Para elegir la malla correcta se realizaron pruebas en 3 mallas con distinto nivel de refinación, con el objetivo de buscar la independencia de los resultados obtenidos respecto a la malla así como en la comparación de los datos experimentales para validar el modelo empleado en la simulación.

3.5.4 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA Y ECUACIONES QUE LO GOBIERNAN

La cámara de combustión de una aeronave comercial trabaja con presiones de inyección de combustible de 80 a 600 psi dependiendo el régimen de flujo necesario acorde a los requerimientos de carga de trabajo. El flujo de inyección es turbulento por lo cual puede ser representado como un chorro que se difunde a través del aire contenido en la cámara de combustión, generando una nube de partículas de combustible. La cámara de combustión está diseñada para que tenga una caída de presión máxima del 6 % por lo cual esta condición se tomó en cuenta para asignar la presión de salida como condición de frontera. La temperatura de inyección se fijó a 65 °C siendo esta la temperatura promedio de inyección durante condiciones normales de vuelo. Fu *et al.* (2014)

En este trabajo se analizó el comportamiento de las mezclas ternarias de combustible: Turbosina + Biodiésel + Alcohol inyectadas en la cámara de combustión. El flujo de la mezcla combustible se representó usando el modelo multifase VOF (Volume Of Fluid).

Este método analiza las fases utilizando un solo set de ecuaciones para las fases líquida y gaseosa del sistema multifase. La ecuación (3.16) y (3.17) muestran la conservación de masa y de momento respectivamente. La ecuación de momento es dependiente de la fracción de volumen de todas las fases a través de las propiedades ρ y μ .

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u u) = -\nabla P + \rho g + \mu \nabla^2 u \quad (3.17)$$

Donde ρ , μ , g y u son la densidad, viscosidad, gravedad y vector de velocidad

respectivamente.

La densidad y viscosidad son calculadas como función de la fracción de volumen como se muestra en las ecuaciones (3.18) y (3.19) respectivamente. Donde α_i es la fracción de volumen de cada fase.

$$\rho = \sum \rho_i \alpha_i \quad (3.18)$$

$$\mu = \sum \mu_i \alpha_i \quad (3.19)$$

El modelo VOF utiliza una ecuación adicional para resolver las interfaces. Usando una forma de la ecuación de continuidad como función de las fracciones de volumen como se muestra en la ecuación (3.20).

$$\frac{\partial \alpha_i}{\partial t} + u \nabla (\alpha_i) = 0 \quad (3.20)$$

Otra ecuación importante en el estudio de este fenómeno es la ecuación de energía para contemplar el efecto de la temperatura en el proceso de inyección de combustible, expresada como:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (u(\rho E + P)) = \nabla \cdot (\kappa_{eff} \nabla T) \quad (3.21)$$

Donde K_{eff} es la conductividad térmica efectiva compartida por ambas fases.

Para terminar de describir el sistema, se utiliza el modelo propuesto por Spalart y Allmaras (1992), el cual resuelve una ecuación de transporte modelada para la viscosidad cinemática turbulenta:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\nu}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \tilde{\nu} u_i) = G_\nu + \frac{1}{\sigma_\nu} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ (\mu + \rho \tilde{\nu}) \frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right\} + C_{b2} \rho \left(\frac{\partial \tilde{\nu}}{\partial x_j} \right)^2 \right] - \Upsilon_\mu \quad (3.22)$$

Donde G_v es la generación de viscosidad turbulenta, Υ_p es la destrucción de la viscosidad turbulenta que se produce en la región cercana a la pared debido al bloqueo de la pared y la amortiguación viscosa, σ_v y C_{b2} son constantes.

3.5.5 VALIDACIÓN DEL MODELO

Para validar el modelo de inyección de combustible propuesto se hizo en términos de longitud de penetración del spray y ángulo de aspersión de la mezcla combustible como lo muestra la Figura 3.5 El modelo de inyección se validó utilizando las condiciones reportadas Song *et al.* (2018) para la inyección de Jet-A. Las dimensiones de la cámara de combustión y configuración de la boquilla fueron similares a las condiciones de trabajo propuestas por Song *et al.* (2018) La presión de inyección evaluada fue de $p = 80$ MPa.

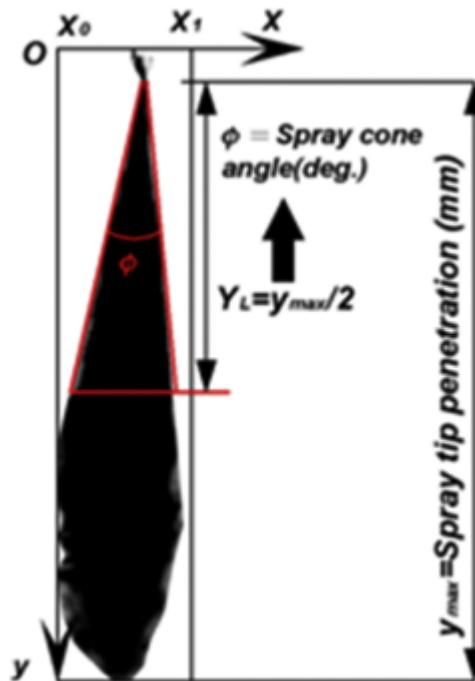


FIGURA 3.5: Definición de los parámetros de aspersión Song *et al.* (2018)

3.5.6 ESTIMACIÓN DE LAS PROPIEDADES DE LAS MEZCLAS COMBUSTIBLES A ALTA PRESIÓN

La determinación experimental de la densidad y viscosidad de las mezclas turbosina + biodiésel + alcohol se realizó a presión atmosférica. La inyección de combustible en la cámara de combustión se modeló en un rango de operación de 80 - 600 psi. Por lo anterior es necesario la estimación de los valores de densidad y viscosidad tomando en cuenta el efecto de la presión sobre estas. Para la estimación de estas propiedades se hizo uso de correlaciones generalizadas reportadas en literatura.

3.5.6.1 ESTIMACIÓN DE LA DENSIDAD DE LOS COMPONENTES DE LA MEZCLA COMBUSTIBLE

Para la estimación de la densidad de los alcoholes, biodiésel y turbosina se utilizó la ecuación de Tait. Dymond y Malhotra (1988)

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = A \log \left(\frac{B + P}{B + 0.101325} \right) \quad (3.23)$$

Donde B se calcula mediante:

$$B = b_0 + b_1 T + b_2 T^2 \quad (3.24)$$

Los parámetros para la ecuación de Tait: A, b_0 , b_1 y b_2 se presentan en la Tabla 3.3 presentada a continuación:

Donde ρ es la densidad a la presión deseada, ρ_0 es la densidad del componente a presión atmosférica, T es la temperatura en Kelvin, P es la presión en MPa, A y B son parámetros de la ecuación.

Los valores de las constantes reportadas para los alcoholes se calcularon usando

TABLA 3.3: Parámetros de la ecuación de Tait

	Turbosina	Biodiésel	2-Propanol	1-Butanol	2-Metil-1-Butanol
A	0.23	0.08	0.33	0.33	0.33
b_0 (MPa)	445.5	436.5	463.8	597.3	823.8
b_1 (MPa K ⁻¹)	-1.514	-1.399	-1.401	-2.115	-3.375
b_2 (MPa K ⁻²)	0.0014	0.0012	0.0011	0.0022	0.0041

la metodología propuesta por Cano-Gómez *et al.* (2015), para el biodiésel se utilizaron las constantes reportadas por Aitbelale *et al.* (2019) y para la turbosina se utilizaron las constantes reportadas por Rokni *et al.* (2019).

3.5.6.2 ESTIMACIÓN DE LA VISCOSIDAD DE LOS COMPONENTES DE LA MEZCLA COMBUSTIBLE

La estimación de la viscosidad de los alcoholes se realizó utilizando la ecuación propuesta por Cano-Gómez *et al.* (2015) basada en la ecuación de Mamedov (1981)

$$\frac{\eta}{\eta_0} = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^A \quad (3.25)$$

$$A = 10.4 + 0.0006n^{3.5} - \frac{5}{n} \quad (3.26)$$

Donde A es un parámetro para compensar la diferencia numérica en las relaciones de densidad y viscosidad; η_0 y ρ_0 es la viscosidad y densidad a presión atmosférica; η y ρ son la viscosidad dinámica y densidad calculadas a la presión de interés y n es el número de carbonos en la cadena de alcohol.

Para estimar la viscosidad del biodiésel y la turbosina se utilizó la siguiente correlación basada en el trabajo propuesto por Freitas *et al.* (2014)

$$\ln \eta = \ln \eta_0 + a \frac{(P - P_0)}{T^b} \quad (3.27)$$

Donde η es la viscosidad dinámica en mPa s a la presión de interés, η_0 es la viscosidad dinámica del biodiésel a presión atmosférica, P es la presión en MPa, p_0 es la presión atmosférica y T es la temperatura en Kelvin.

Los parámetros usados en la correlación para la estimación de la viscosidad se presentan en la tabla a continuación:

TABLA 3.4: Parámetros para la correlación de viscosidad

	Turbosina	Biodiésel
a	2.52	1.20
b	0.51	0.84

Los parámetros del modelo para estimar la viscosidad de la turbosina se obtuvieron ajustando datos experimentales reportados por Song *et al.* (2018), mientras que los datos para el biodiésel fueron propuestos en su estudio por Freitas *et al.* (2014)

El valor de la densidad y viscosidad de las mezclas se determinaron utilizando las reglas de mezclado.

$$J_{\text{mix}} = \sum J_i x_i \quad (3.28)$$

Donde J_i es la propiedad (densidad o viscosidad) del componente i ; x_i es la fracción molar del componente i ; e i son los componentes: turbosina, bioturbosina y alcohol.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 ETAPA 1

4.1.1 CARACTERIZACIÓN DEL CATALIZADOR

Las propiedades texturales de los catalizadores empleados en este estudio son resumidas en la Tabla 4.1, en la cual se presentan el área superficial BET, volumen de poro y diámetro de poro promedio.

TABLA 4.1: Propiedades texturales de los catalizadores estudiados

Catalizador	Área BET (m ² /g)	Volumen (cm ³ /g)	Diámetro promedio (nm)
Soporte	700	0.80	6.56
10 % Ni/C	344	0.39	5.88
15 % Ni/C	195	0.25	6.74
20 % Ni/C	130	0.18	7.64

Comparando entre los distintos catalizadores, es evidente que una carga alta de metal en la superficie resulta en un mayor llenado de poro, que se refleja en un menor volumen de poro así como una menor área superficial. Las áreas superficiales y los

volúmenes de poro disminuyen a medida que la carga de níquel se incrementa, dando pauta a que un exceso de partículas metálicas pueden estar bloqueando parte de los poros del soporte. Notablemente, los catalizadores presentan una alta dispersión del metal con un tamaño de partícula promedio entre 5.8 y 7.6 nm.

Estudios previos de distintos como Santillan-Jimenez y Crocker (2012) han reportado la actividad catalítica del níquel en reacciones de desoxigenación de ácidos grasos y sus derivados. Para comprobar la presencia de la fase activa del catalizador, se efectuó análisis de difracción de rayos-x (DRX) a los catalizadores Ni/C con carga 10 wt. %, 15 wt. % y 20 wt. % Ni. La Figura. 4.1 muestra los distintos picos de difracción, los picos en $2\theta = 44.4^\circ$, 51.8° y 76.3° fueron asignados a la fase Ni^0 . El pico prominente a 26.5° se le atribuyó a la reflexión amorfa del soporte de carbón. De acuerdo a los planos cristalográficos presentes, se observa el catalizador de níquel reticula formando una estructura cristalina cúbica centrada en la cara (FCC).

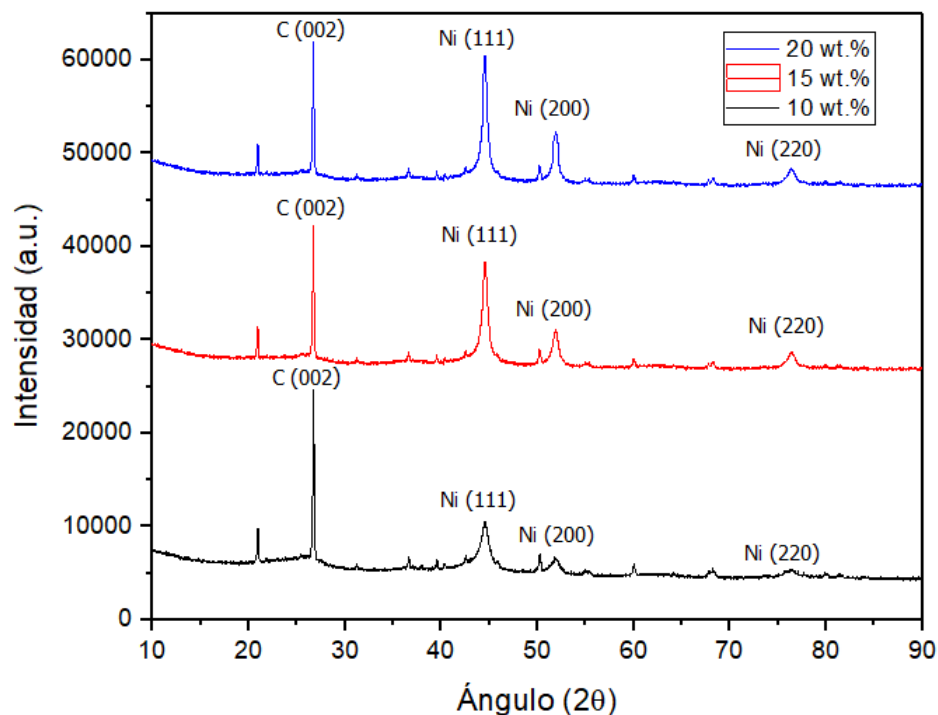


FIGURA 4.1: Difractograma de rayos-x para los diferentes catalizadores Ni/C

4.2 ETAPA 2

4.2.1 PRODUCCIÓN DE BIOTURBOSINA

Se produjo bioturbosina mediante la desoxigenación catalítica del biodiésel. Los experimentos se llevaron a cabo a 180 °C y 300 °C para determinar el efecto de la temperatura sobre el rendimiento de la reacción.

La Figura 4.2 y 4.3 muestran la distribución de cadenas de carbono de los productos de reacción obtenidos en los experimentos a 180 °C y 300 °C respectivamente. La Tabla 4.3 muestra la codificación del diseño de experimentos utilizado para las distintas condiciones de reacción.

TABLA 4.2: Rendimiento de reacción para los distintos experimentos

180 °C									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Selectividad (%)	0.03	0.16	0.02	0	0	0	0	0	0
Conversión (%)	6.48	2.38	1.10	0.97	4.95	1.21	1.31	0.83	4.46
300 °C									
Selectividad (%)	42.64	31.20	61.42	15.37	13.71	46.94	38.70	65.10	58.64
Conversión (%)	44.47	32.24	64.01	24.84	18.48	52.71	48.35	67.24	66.96

Como se muestra en la Tabla 4.2 los experimentos llevados a cabo en atmósferas con mezclas de H₂/N₂ obtuvieron mejores porcentajes de conversión; concordando con los estudios por Kubičková *et al.* (2005) que obtuvieron mejores resultados utilizando catalizadores de níquel cuando la reacción se llevó a cabo con mezclas de H₂/N₂ en lugar de utilizar He o H₂ puro. Esto puede ser atribuido a que una pequeña cantidad de hidrógeno es necesario para activar el Ni, manteniendo la superficie limpia al hidrogenar especies insaturadas, desorbiéndolas de la superficie del cata-

TABLA 4.3: Codificación para los distintos experimentos de desoxigenación

Número de muestra	Carga de catalizador (wt. %)	Atmósfera reactiva)
1	20 % Ni	N ₂
2	20 % Ni	40 % vol H ₂ /N ₂
3	20 % Ni	60 % vol H ₂ /H ₂
4	15 % Ni	N ₂
5	15 % Ni	40 % vol H ₂ /N ₂
6	15 % Ni	60 % vol H ₂ /N ₂
7	10 % Ni	N ₂
8	10 % Ni	40 % vol H ₂ /N ₂
9	10 % Ni	60 % vol H ₂ /H ₂

para formar carbonilos metálicos en estas reacciones que suceden en la superficie del catalizador, el CO dona un par de electrones al catión metálico, formando un complejo que puede quedarse atrapado en la superficie, también, el CO es conocido por disociarse en los sitios de Ni formando depósitos de carbón, favoreciendo a una rápida desactivación del catalizador. Van Stiphout *et al.* (1988)

Además, hidrocarburos insaturados producidos durante la reacción en curso adsorbidos en la superficie del catalizador pueden quedar atrapados durante la reacción propiciando la formación de coque. Los estudios de Morgan *et al.* (2010) confirman que los catalizadores basados en níquel sufren de desactivación durante la descarboxilación de triglicéridos debido a la deposición de carbón en la superficie del catalizador. La Figura 4.2 y 4.3 muestran el efecto de la carga del catalizador. La reacción muestra una menor concentración de alcanos de rango de turbosina a mayores cargas de catalizador, sugiriendo que altas cargas de Ni/C dan lugar a una generación mayor de subproductos. Después de la ocurrencia de todos estos fenómenos durante la reacción, no es de extrañar que una caída en la conversión es acompañada en una reducción de la selectividad como se observa en los experimen-

tos del 3 al 9 a 180 °C, sin embargo, a 300 °C, la temperatura influyó de manera significativa permitiendo una mejora en el rendimiento de reacción. Se obtuvieron mejores resultados en los experimentos con H₂ presente, sin embargo la conversión en presencia de N₂ se puede atribuir a la capacidad del catalizador para hidrogenar especies insaturadas que de otro modo no podrían romperse y se acumularían en la superficie del catalizador. Morgan *et al.* (2010)

En todos los experimentos, se encontró una selectividad hacia moléculas C₁₈+ menor al 3%, sugiriendo que las reacciones dominantes son de descarboxilación y descarbonilación (deCO_x). Este hallazgo es consistente de acuerdo a las investigaciones en estudios por Peng *et al.* (2012) mostrando que las reacciones deCO_x son dominantes sobre las reacciones de hidrogenación (HDO) cuando son usados catalizadores de níquel soportado. El rol de la presión parcial de hidrógeno durante la desoxigenación de ésteres metílicos continúa siendo un tema de investigación. La naturaleza de la materia prima es una variable adicional que su efecto ha sido poco investigado, muchos de los estudios se han enfocado en moléculas simples como los ácidos grasos y sus ésteres.

4.3 ETAPA 3

4.3.1 CARACTERIZACIÓN DE LA BIOTURBOSINA

La Figura 4.4 muestra los valores de densidad reportados para las muestras de turbosina, biodiésel y bioturbosina. De esta manera es posible confirmar los resultados de la sección anterior, ya que al estar presentes todavía ésteres metílicos del biodiésel se concluye que la reacción de desoxigenación no sucede por completo.

Para confirmar la presencia de alcanos se realizaron pruebas de espectroscopía infrarroja. La Figura 4.5 muestra varios picos de absorción, a 2934 y 2854 cm⁻¹ se

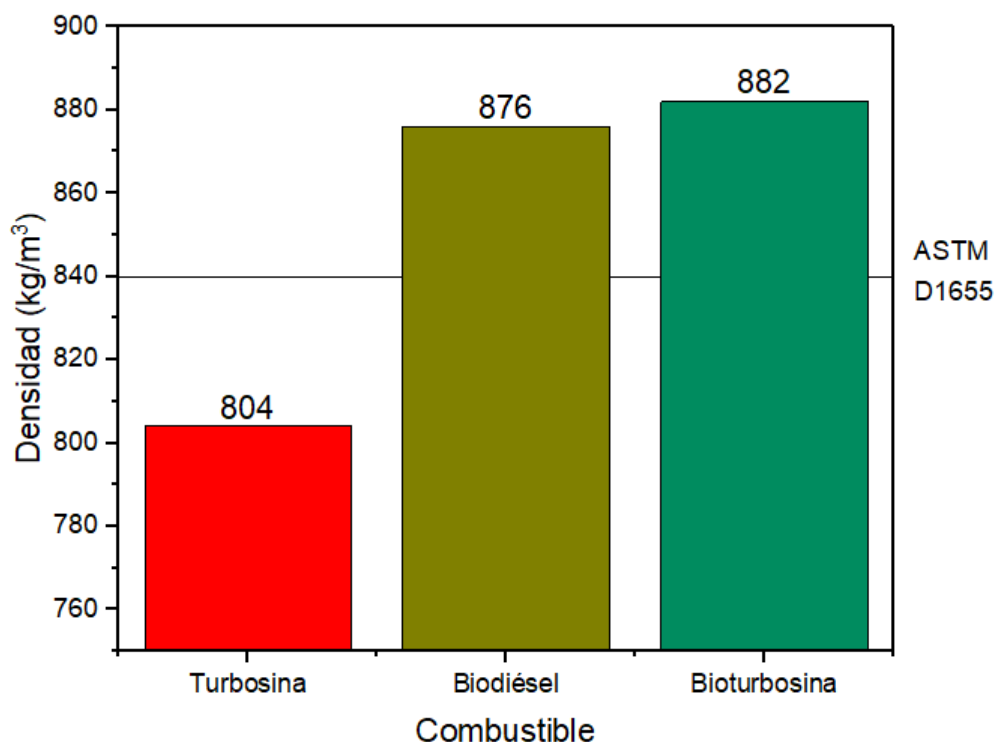


FIGURA 4.4: Comparativa del cumplimiento del estándar para los distintos combustibles usados en el proyecto

le atribuye a las vibraciones del carbono stretch $-\text{CH}_2$ y $-\text{CH}_3$ respectivamente, las cuales, al estar en la región de los alcanos, nos da la pauta que parte de los ésteres fueron convertidos a alcanos satisfactoriamente. Otro de los picos de absorción sucede a 1743 cm^{-1} , perteneciente al enlace carbonilo ($\text{C}=\text{O}$), en esta región se encuentran los ésteres y aldehídos, la aparición de este pico de absorción se le puede atribuir a la conversión incompleta de los ésteres durante el progreso de reacción, así como a la aparición de aldehídos, siendo este un producto intermediario durante la conversión de ésteres a alcanos. Por último, a 1465 cm^{-1} aparece un pico de absorción muy débil el cual se le atribuye a la vibración del enlace carbono-carbono ($\text{C}=\text{C}$), en esta región se encuentran los alquenos y aromáticos, por lo tanto, la aparición de este pico de absorción se le atribuye a la aparición de alguno de estos compuestos.

La Figura 4.6 muestra los resultados de la evaluación del indicador EROI para la producción de bioturbosina.

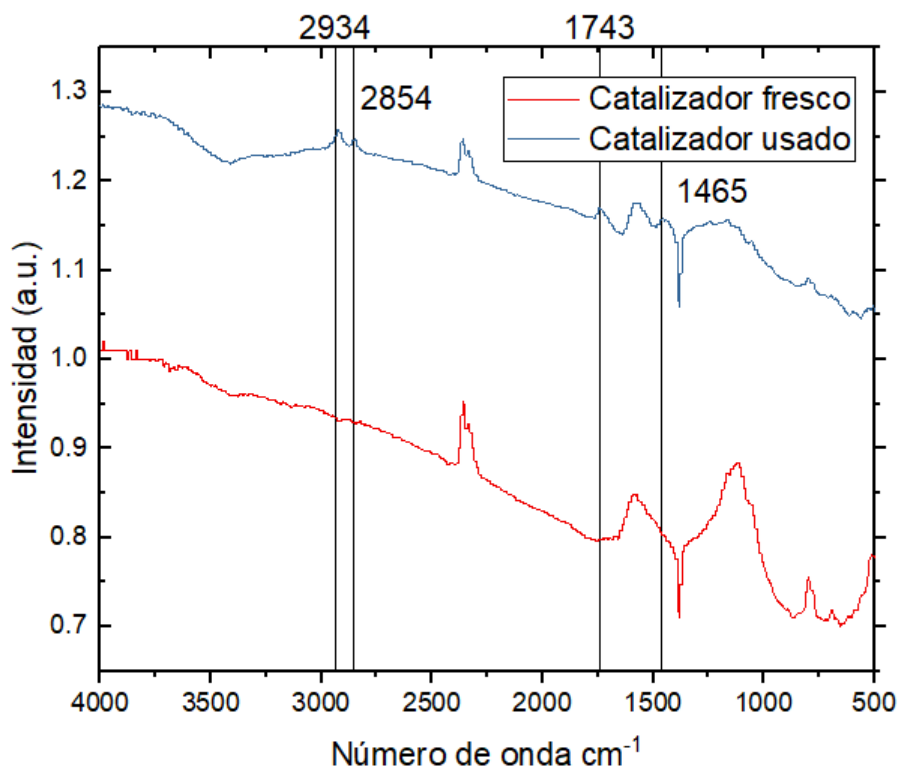


FIGURA 4.5: Comparativa del espectro infrarrojo de los catalizadores previo y después de su uso en la reacción de desoxigenación

De acuerdo al indicador evaluado la bioturbosina tiene un mayor requerimiento energético para su producción que la turbosina fósil al tener un EROI más pequeño como se ve en la Figura 4.6, una de las razones que explican este resultado se debe a que el petróleo crudo requiere relativamente poca energía para su extracción en forma líquida. Cleveland (2005). Resulta compleja la comparativa justa de este indicador entre los combustibles fósiles y biocombustibles, estos no pueden ser comparados directamente ya que la turbosina se produce a nivel industrial con procesos optimizados, mientras que los resultados obtenidos en este estudio son a nivel laboratorio, requiriendo un escalamiento.

En el caso de los biocombustibles, hay todo un proceso detrás en su transformación. Para la producción de la bioturbosina, la etapa de desoxigenación del biodiésel es una tecnología que consume energía de manera intensiva. A diferencia del petróleo

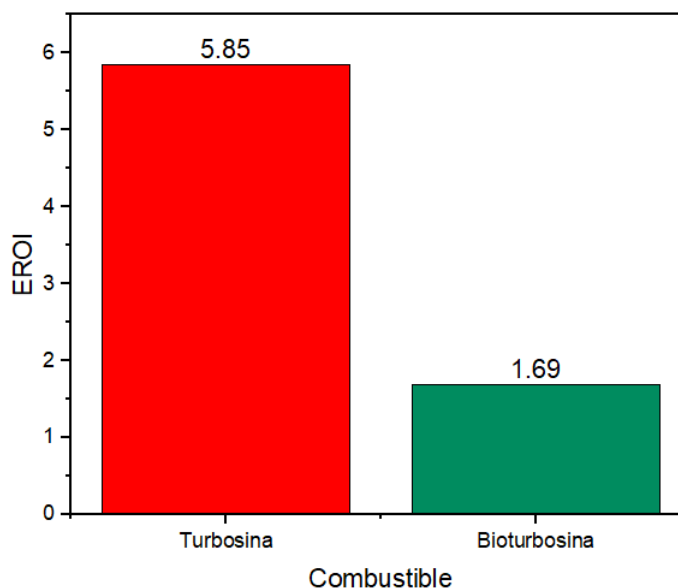


FIGURA 4.6: Comparativa del retorno de inversión energético para la bioturbosina

crudo y sus productos, los biocombustibles provenientes de biomasa contiene compuestos oxigenados. Antes de que puedan ser usados como combustibles es necesario la remoción del oxígeno. Una manera de hacerlo es mediante el hidroprocesamiento que es un proceso de alto consumo energético en comparativa del hidroprocesamiento que se lleva a cabo en las refinerías de petróleo. Para los combustibles fósiles, el hidroprocesamiento es aplicado a una parte del combustible para la remoción de azufre.

4.4 ETAPA 4

4.4.1 PREPARACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LAS MEZCLAS

TERNARIAS: TURBOSINA + BIODIÉSEL + ALCOHOL

Las mezclas turbosina (60 %, 70 % y 80 %) + biodiésel + alcohol (isopropanol, 1-butanol y 2-metil-1-butanol) fueron preparadas en función de la fracción peso

del alcohol. En las Tablas A.1 - A.9 en el Apéndice A, se presentan los valores de densidades viscosidades e índices de refracción medidos experimentalmente para las mezclas estudiadas en este trabajo. Las mediciones se realizaron en un intervalo de temperatura de (288.15 a 338.15) K a presión atmosférica.

La densidad de estas mezclas presenta un comportamiento lineal a lo largo de todo el rango de composición. Como es de esperarse, la densidad disminuye con la temperatura debido al aumento de la energía cinética de las moléculas provocando que se alejen unas de otras ocupando un mayor volumen disminuyendo la densidad. Larrañeta y Isasi (2012) Este comportamiento se observa estable y uniforme para los tres sistemas 60 %, 70 % y 80 % de turbosina como se muestra en las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9.

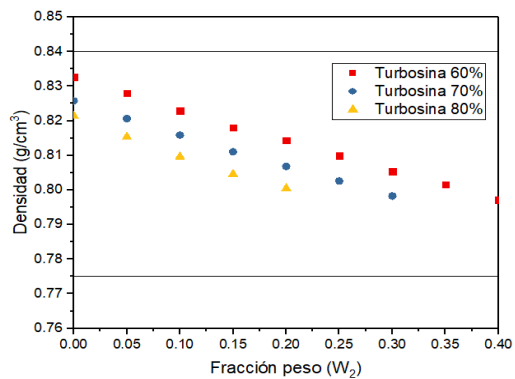
La viscosidad de estas mezclas disminuye con la temperatura y al aumentar la fracción de alcohol presente en la mezcla. Además en las Figuras 4.7, 4.8 y 4.9 se observa que a medida que se agrega alcohol a la mezcla la viscosidad tiende a descender de una manera más pronunciada.

El índice de refracción para las mezclas presenta un comportamiento lineal con la temperatura, como se observa en las Figuras 4.10, 4.11 y 4.12 concordando con los experimentos por Ortega (1982).

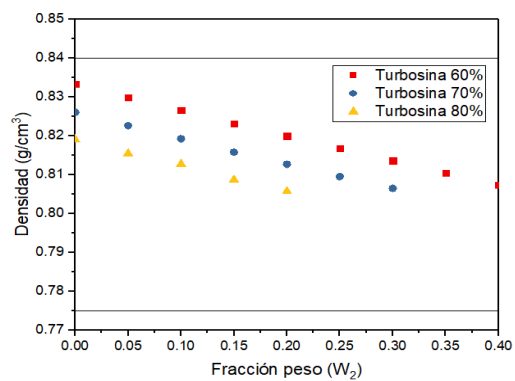
Las mezclas preparadas para los tres alcoholes y los tres sistemas (60 %, 70 % y 80 %) cumplen con el estándar ASTM D1655. Esta norma establece los límites de la densidad para el combustible de aviación como se muestra en la Figura 4.13.

4.4.1.1 PROPIEDADES DE EXCESO Y DESVIACIÓN

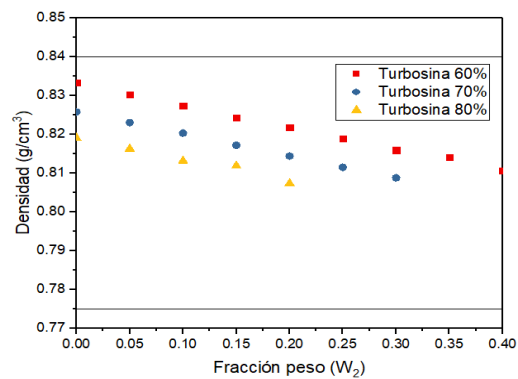
Los datos experimentales de propiedades tales como densidad, viscosidad e índice de refracción de mezclas son útiles para el completo entendimiento de sus propiedades termodinámicas y de transporte. Por otro lado, las propiedades de exceso



(a) isopropanol - Densidad



(b) 1-butanol - Densidad



(c) 2-metil-1-butanol - Densidad

FIGURA 4.13: Cumplimiento del estándar ASTM D1655

y desviación son fundamentales para el diseño de equipo industrial y para la interpretación del comportamiento líquido. Estas propiedades pueden ser usadas como guía para predecir el grado de formación de compuestos complejos en este tipo de mezclas.

Los resultados del volumen molar de exceso para las mezclas ternarias se presentan en la Figura 4.14, se tomaron los extremos de temperatura para efectuar el análisis.

En la Figura 4.14, en los incisos a) y b) se muestra el volumen molar de exceso para las mezclas con isopropanol. El volumen de exceso es positivo para la mayoría de las composiciones tanto a 15°C como a 65°C. A bajas concentraciones de alcohol (fracción molar entre 0 y 0.20), el volumen de exceso permanece negativo. El valor mínimo de v^E se encuentra cuando la fracción de alcohol $x_2 = 0$.

Por otro lado, en los incisos c) y d) se muestra el volumen molar de exceso para las mezclas con 1-butanol, el volumen molar de exceso es negativo para la mayoría de las composiciones a 15 °C. El mínimo del v^E se encuentra cuando la fracción de alcohol $x_2 = 0$.

En los incisos e) y f) se muestra el volumen molar de exceso para las mezclas con 2-metil-1-butanol. El volumen molar de exceso es negativo para la mayoría de las composiciones a 15 °C. El mínimo del v^E se encuentra cuando la fracción de alcohol $x_2 = 0$.

El volumen molar de exceso puede ser positivo o negativo donde este signo es comparado con el estado ideal del compuesto puro. Un volumen molar de exceso negativo se traduce en que las interacciones presentes entre las moléculas de los compuestos formados en la mezcla es mucho más fuerte que las interacciones entre las moléculas de los componentes en su forma pura provocando una contracción en el volumen de la mezcla; en el caso contrario, cuando el volumen molar de exceso es positivo significa que las interacciones de las moléculas de los compuestos puros son más fuertes que las interacciones de los compuestos formados en la mezcla, provo-

cando una expansión en el volumen de la mezcla que es atribuída a la presencia de fuerzas repulsivas. Barabás (2015) Estas interacciones positivas se pueden atribuir a que los ésteres y alcanos lineales presentes en la turbosina son afines geométricamente, sin embargo al introducir cadenas cortas y ramificadas de los alcoholes comienza a aumentar la fuerza de repulsión debido al pobre acomodo de las moléculas de alcohol en la estructura formada por el biodiésel y la turbosina. Chand *et al.* (2016)

Las desviaciones de la viscosidad de las mezclas con los diferentes alcoholes se muestran en la Figura 4.15, la cual se presentan valores positivos y negativos a lo largo del rango de las distintas fracciones mol presentes. La desviación de la viscosidad muestra de manera cualitativa la estimación de la fuerza de las interacciones moleculares. Chand *et al.* (2016) Los valores positivos sugieren que la viscosidad asociada formada entre moléculas es relativamente más grande que la de los componentes puros por si mismos debido a las interacciones específicas entre compuestos que no son afines y sus interacciones dipolo-dipolo. Chand *et al.* (2016)

Dubey *et al.* (2008) postulan que los valores negativos de la desviación de la viscosidad indican que las fuerzas de dispersión en el sistema son dominantes en esta mezcla, además la existencia de fuerzas de dispersión indica que las moléculas de los componentes tienen diferentes tamaños y formas. Así como la inclusión de moléculas más pequeñas en estructuras más grandes como los alcanos lineales presentes.

En la Figura 4.16 se presentan las desviaciones del índice de refracción. Para los tres alcoholes se presentan valores positivos y negativos en ambas temperaturas. La magnitud de la propiedad permanece casi constante con el cambio de temperatura. Existe una relación entre la desviación del índice de refracción y el volumen molar de exceso, la dependencia entre estas dos variables aún es compleja. Martins *et al.* (2012) En muchas mezclas, la regla general es que Δn_D es correlacionada con v^E . Algunos autores como Reis *et al.* (2010) sugieren que al tener una mezcla con valores positivos de Δn_D con un volumen molar de exceso negativo v^E indica la presencia de cambios direccionales como los enlaces de hidrógeno, mientras que, cuando los cambios de

ambas propiedades ocurren en la misma dirección implica que predominan los efectos de reorganización molecular en el rango de composición dado.

Los valores experimentales para el volumen molar de exceso (v^E), desviación de la viscosidad ($\Delta\eta$) y desviación del índice de refracción (Δn_D) se presentan en las tablas B.1, B.2 y B.3 en el Apéndice B. Los valores de las constantes ajustadas al modelo de Redlich y Kister (1948) se presentan en las Tablas C.1, C.2 y C.3 en el Apéndice C.

4.5 ETAPA 5

4.5.1 CREACIÓN DE LA GEOMETRÍA

Se diseñó una boquilla acoplada a una cámara de combustión para modelar el dominio computacional sobre el que se llevaría a cabo la simulación de la inyección de combustible. La geometría se elaboró con el software ANSYS SpaceClaim como se muestra en la Figura 4.17.

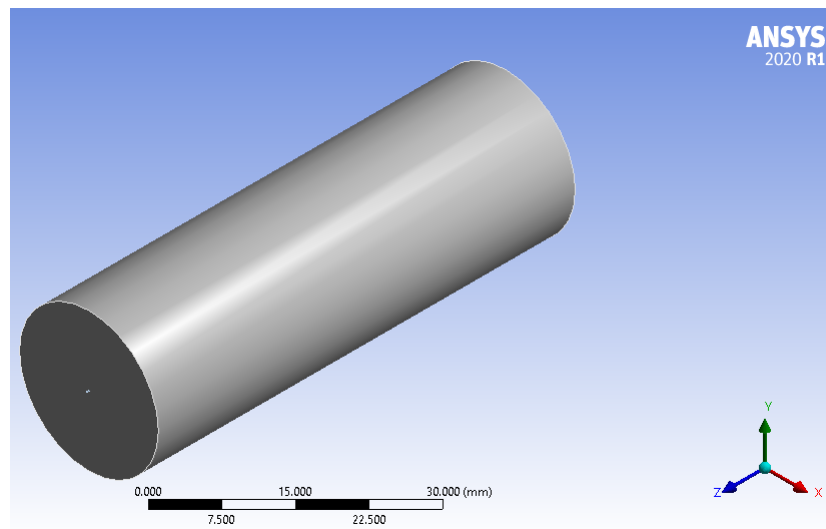


FIGURA 4.17: Geometría del dominio computacional - Cámara de combustión

4.5.2 GENERACIÓN DE LA MALLA

La malla generada para la geometría de la cámara de combustión se construyó usando el software ANSYS Meshing, la malla tiene una forma tetraédrica. La Figura 4.18 muestra la malla utilizada para el estudio.

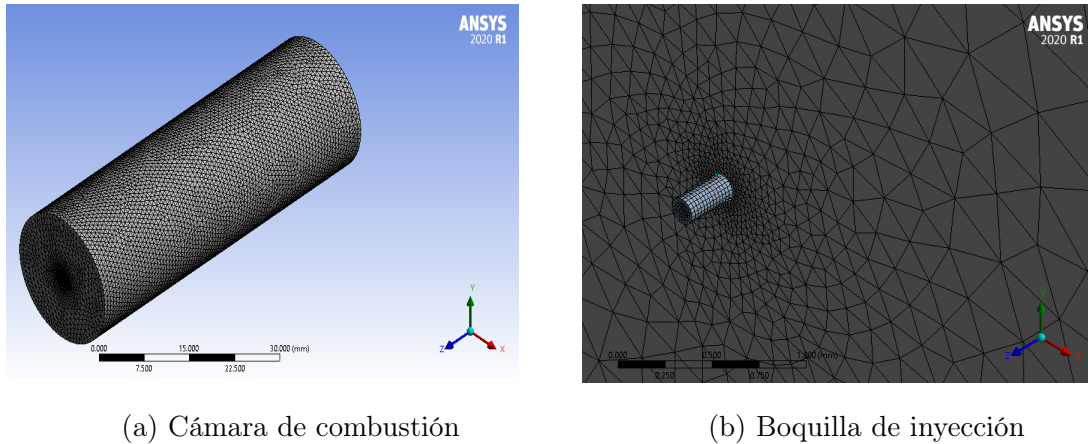


FIGURA 4.18: Mallado del dominio computacional para las simulaciones de CFD

4.5.3 DESCRIPCIÓN DEL SISTEMA

El sistema se definió como un fluido (Turbosina + Biodiésel + Alcohol) que sale de la boquilla de inyección de combustible y se conduce hacia la cámara de combustión. Para este sistema, el análisis se enfocó en evaluar el ángulo de aspersion y longitud de penetración del spray. La Figura 4.19 muestra los modelos utilizados para describir el comportamiento del sistema usando el software ANSYS Fluent. Mediante este software se utilizaron las ecuaciones de gobierno de momentum y masa. Dentro del software fue especificado los valores de densidad y viscosidad que caracterizan al fluido para simular su comportamiento dentro del sistema. Se estableció una presión de inyección de 80, 200, 400 y 600 psi, con una caída de presión del 6% como condiciones de frontera. Fu *et al.* (2014)

4.5.4 VALIDACIÓN DEL MODELO

La validación del modelo se realizó en términos de longitud de penetración del spray y ángulo de aspersion del combustible en la cámara de combustión. La Figura 4.20 muestra la comparación del comportamiento del spray entre los datos experimentales medidos por Song *et al.* (2018) y la predicción del modelo propuesto. El

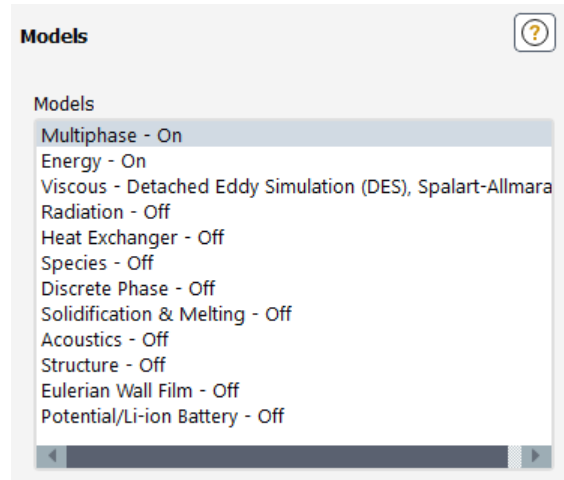


FIGURA 4.19: Modelos utilizados para la descripción del sistema - Vista de software Ansys Fluent

régimen de trabajo utilizado fue basado en las condiciones experimentales reportadas Song *et al.* (2018) reportadas en la Tabla 4.4

TABLA 4.4: Condiciones de trabajo para la validación del sistema

Condiciones de trabajo	Parámetros
Combustible	Jet-A (Turbosina)
Diámetro de boquilla	0.15 mm
Longitud de boquilla	0.30 mm
Presión de inyección	80 MPa

Para corroborar que la malla propuesta para este modelo era la correcta, se hicieron pruebas con distintas mallas para determinar la malla que represente el fenómeno con la suficiente precisión sin requerimientos elevados de tiempo computacional.

La Tabla 4.5 muestra las distintas mallas con los parámetros de calidad usados para determinar la viabilidad de la malla.

La Figura 4.20 muestra el grado de predicción del modelo en comparativa con

TABLA 4.5: Mallas usadas para la validación del sistema

Malla	Número de elementos	Calidad del elemento	Calidad ortogonal
Gruesa	64 k	0.84	0.78
Fina	256 k	0.85	0.79
Refinada	500 k	0.85	0.79

TABLA 4.6: Grado de predicción de las diferentes mallas propuestas

	Longitud (AAPD %)	Ángulo (AAPD %)	Tiempo computacional (h)
Gruesa	16.04	14.26	8
Fina	15.31	9.39	28
Refinada	20.08	31.24	50

los datos experimentales reportados por Song *et al.* (2018).

Para evaluar el grado de predicción de cada malla propuesta se utilizó el porcentaje de desviación promedio (AAPD %).

En la Tabla 4.6 se observan los distintos grados de predicción así como el tiempo computacional necesario para resolver cada uno de los sistemas. Se procedió a continuar los experimentos utilizando la malla fina, ya que cuenta con el balance entre capacidad de predicción y tiempo computacional. En la Figura 4.20 se observa el comportamiento de las distintas mallas, mientras que la malla gruesa muestra una buena predicción en el desarrollo intermedio del spray, entre los 0.3 y 0.6 milisegundos de inyección, el sistema empieza a sobrepredicir a partir de los 0.6 ms, este comportamiento se le atribuye al tamaño robusto de los elementos, desarrollando el perfil de flujo de manera errónea. Así mismo observamos que la malla fina y refinada tienen una predicción bastante similar, sin embargo la capacidad predictiva de estas mallas funciona mejor cuando el spray está casi completamente desarrollado.

TABLA 4.7: Parámetros comunes de operación durante un vuelo

Régimen	Presión del combustible (psi)
Ralentí	80
Descenso	200
Ascenso	400
Despegue	600

este análisis fueron aquellas que cumplieron con la norma ASTM D1655.

Los valores de densidad y viscosidad utilizados en el análisis computacional fueron obtenidos de manera experimental en este trabajo a 0.1 MPa. Mientras que las mismas propiedades tanto de los componentes puros y mezclas, fueron calculados a alta presión (80, 200, 400 y 600 psi) mediante las ecuaciones descritas en la metodología en la sección 3.5.6.

La Tabla 4.8 muestra el valor de la densidad y viscosidad para las mezclas que se utilizaron para el análisis de las características de aspersión mediante el modelo propuesto en este estudio.

TABLA 4.8: Propiedades de la mezcla combustible a alta presión

Presión	isopropanol		1-butanol		2-metil-1-butanol	
	ρ (g/cm ³)	μ (mPa s)	ρ (g/cm ³)	μ (mPa s)	ρ (g/cm ³)	μ (mPa s)
80 psi	0.76797	0.50293	0.77624	0.64773	0.78544	0.70015
200 psi	0.76868	0.53892	0.77693	0.67989	0.78611	0.73119
400 psi	0.76984	0.60763	0.77807	0.74087	0.78721	0.78995
600 psi	0.77099	0.68905	0.77919	0.81261	0.78830	0.85894

La Figura 4.21 muestra el efecto de los aditivos en las características de aspersión de las distintas mezclas combustibles. Parte de este estudio busca elucidar los

efectos de distintos parámetros tales como presión y el efecto de aditivos en las características de aspersión. Donde Biocombustible 1, Biocombustible 2 y Biocombustible 3 son isopropanol, 1-butanol y 2-metil-1-butanol, respectivamente.

Estudios previos de distintos autores como Song *et al.* (2018) han mostrado que la presión de inyección del combustible tiene un efecto remarcable, como se muestra en la Figura 4.21 (a, c, e), al aumentar la presión la longitud del spray aumenta en promedio un 30 % entre cada régimen de trabajo. Este fenómeno puede ser explicado que el momentum del spray producido por un alto coeficiente de descarga cuando la presión de inyección aumenta. Podemos concluir que la longitud del spray aumenta de manera proporcional con la presión de inyección del combustible.

Otros autores como Cheng *et al.* (2014) han demostrado que el uso de aditivos tiene un efecto notable en las propiedades fisicoquímicas de las mezclas combustibles. El efecto de los aditivos en la longitud del spray es mostrado en la Figura 4.21 (a, c, e), se puede notar que la diferencia de la longitud del spray entre la turbosina y las mezclas biocombustibles es muy pequeña, con una diferencia del 5 % en promedio. En comparativa de las mezclas biocombustibles con la turbosina, se observa que la diferencia de la longitud es muy poca, sin embargo, esta diferencia se debe a la variación de las viscosidades y densidades entre una mezcla y otra. Las mezclas biocombustibles presentan viscosidades más bajas que la turbosina permitiéndoles un desplazamiento y empuje a lo largo de la boquilla de inyección con menos resistencia al flujo mientras que una densidad menor en la mezcla se traduce en fuerza mayor de empuje para la misma cantidad de fluido.

La Figura 4.21 (b, d, f) representa la variación del ángulo del spray formado durante el tiempo de inyección. Se puede notar que el ángulo de spray se reduce ligeramente a medida que se aumenta la presión y a medida que transcurre el tiempo. Durante los primeros milisegundos el spray se desarrolla pasando por un periodo de desorden hasta desarrollarse completamente llegando a un estado pseudoestacionario cuando se encuentra completamente desarrollado. Tang *et al.* (2018)

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

Se propuso una nueva ruta de producción de bioturbosina a partir de ácidos grasos esterificados en la que los ésteres metílicos son desoxigenados a C₁₅-C₁₆ para después romper las cadenas de carbono en alcanos más ligeros. Esta ruta de producción permitió la producción de bioturbosina a partir de productos de bajo valor agregado.

Los catalizadores de Ni/C mostraron ser capaces de convertir los ácidos grasos esterificados a bioturbosina.

A 180 °C y presión de 5 bar la conversión máxima fue del 6.48 %. A 300 °C, la conversión máxima alcanzada fue de 67.24 %, indicando que el rendimiento de la reacción se ve influenciada en gran parte por la temperatura del proceso.

La conversión del biodiésel depende fuertemente de la temperatura y la carga del catalizador. Bajo condiciones de ausencia de H₂, se observa que las cadenas de ésteres metílicos desoxigenan principalmente a hidrocarburos más pesados C17+. Los rendimientos de reacción más altos se lograron con las mezclas de H₂/N₂. El efecto del hidrógeno juega un rol muy importante en mantener la actividad del catalizador. La reacción muestra una menor concentración de alcanos de rango de turbosina a mayores cargas de catalizador, sugiriendo que altas cargas de Ni/C dan lugar a una generación mayor de subproductos.

La detección de hidrocarburos se estimó de forma cuantitativa utilizando cromatografía de gases con espectrometría de masas y de forma cualitativa utilizando espectroscopía infrarroja mediante búsqueda de señales en la región de los alcanos. De igual manera se rastreó la presencia de productos intermediarios para la comprensión del mecanismo de reacción. Los productos intermediarios encontrados fueron ácidos grasos, alcoholes y aldehídos. Los mecanismos de desoxigenación requieren mayor investigación.

Se obtuvo una tasa del retorno energético (EROI) de 1.69; la energía contenida en la bioturbosina recupera casi el 70 % de energía adicional que consume durante su producción.

Las densidades e índices de refracción de las mezclas biocombustibles muestran un comportamiento lineal decreciente en función del aumento de temperatura y fracción de alcohol presente en la mezcla debido al incremento de la energía cinética en las moléculas. Los valores de la viscosidad cinemática muestran que a medida que aumenta el alcohol presente en la mezcla la viscosidad desciende de una manera más pronunciada.

Los valores de volumen de exceso, desviación de la viscosidad y desviación del índice de refracción fueron negativos para la mayoría de las composiciones lo cual representa que las interacciones intermoleculares de las mezclas presentan una contracción en el volumen atribuida a la afinidad geométrica de los hidrocarburos lineales y los ésteres presentes.

La densidad de las mezclas preparadas cumplen con los límites establecidos en la norma ASTM D1655 para todo el rango de concentraciones.

El uso de isopropanol, 1-butanol y 2-metil-1-butanol como aditivo tiene un efecto notable en las propiedades fisicoquímicas de las mezclas combustibles. Se obtuvo una longitud del spray ligeramente mayor que la turbosina de origen fósil con una diferencia en promedio del 5 % respecto a la turbosina. Para el ángulo del spray se obtuvo una reducción en promedio del 3 % respecto a la turbosina; se

concluye que la volatilidad de las mezclas biocombustibles con los distintos aditivos se traduce en la modificación de ésta característica de aspersión.

Las mezclas biocombustibles preparadas en este estudio tienen características de aspersión (longitud de penetración y ángulo del spray) similares a las características de la turbosina fósil, gracias a su similitud pudieran ser utilizadas como combustible sustituto parcial de la turbosina fósil. Aún existen grandes áreas de oportunidad en esta área de investigación.

Finalmente, este trabajo de investigación es un aporte a estudios previos relacionados con la producción de biocombustibles renovables a partir de productos de bajo valor agregado utilizando catalizadores soportados de bajo costo. Es relevante mencionar que a pesar de obtener resultados favorables a escala laboratorio, queda para futuras investigaciones su verificación a escala industrial.

APÉNDICE A

PROPIEDADES EXPERIMENTALES DE
LAS MEZCLAS

BIBLIOGRAFÍA

- AITBELALE, R., Y. CHHITI, F. E. M. ALAOU, A. SAHIB EDDINE, N. MUÑOZ RUJAS y F. AGUILAR (2019), «High-Pressure Soybean Oil Biodiesel Density: Experimental Measurements, Correlation by Tait Equation, and Perturbed Chain SAFT (PC-SAFT) Modeling», *J. Chem. Eng. Data*, **64**(9), págs. 3994–4004, URL <https://doi.org/10.1021/acs.jced.9b00391>.
- BALIBAN, R. C., J. A. ELIA, C. A. FLOUDAS, X. XIAO, Z. ZHANG, J. LI, H. CAO, J. MA, Y. QIAO y X. HU (2013), «Thermochemical Conversion of Duckweed Biomass to Gasoline, Diesel, and Jet Fuel: Process Synthesis and Global Optimization», *Ind. Eng. Chem. Res.*, **52**(33), págs. 11 436–11 450, URL <https://doi.org/10.1021/ie3034703>.
- BARABÁS, I. (2015), «Liquid densities and excess molar volumes of ethanol+biodiesel binary system between the temperatures 273.15K and 333.15K», *Journal of Molecular Liquids*, **204**, págs. 95–99, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167732215000598>.
- BERENBLYUM, A. S., T. A. PODOPLELOVA, R. S. SHAMSIEV, E. A. KATSMAN y V. Y. DANYUSHEVSKY (2011), «On the mechanism of catalytic conversion of fatty acids into hydrocarbons in the presence of palladium catalysts on alumina», *Petroleum Chemistry*, **51**(5), pág. 336, URL <https://doi.org/10.1134/S0965544111050069>.
- BROCKNER, W., C. EHRHARDT y M. GJIKAJ (2007), «Thermal decomposition of nickel nitrate hexahydrate, Ni(NO₃)₂·6H₂O, in comparison to Co(NO₃)₂·6H₂O

- and $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ », *Thermochimica Acta*, **456**(1), págs. 64–68, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040603107000548>.
- BROOKS, K. P., L. J. SNOWDEN-SWAN, S. B. JONES, M. G. BUTCHER, G.-S. J. LEE, D. M. ANDERSON, J. G. FRYE, J. E. HOLLADAY, J. OWEN, L. HARMON, F. BURTON, I. PALOU-RIVERA, J. PLAZA, R. HANDLER, D. SHONARD y C. J. CHUCK (2016), «Chapter 6 - Low-Carbon Aviation Fuel Through the Alcohol to Jet Pathway», en *Biofuels for Aviation*, Academic Press, págs. 109–150, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128045688000068>.
- CANO-GÓMEZ, J. J., G. A. IGLESIAS-SILVA y M. RAMOS-ESTRADA (2015), «Correlations for the prediction of the density and viscosity of 1-alcohols at high pressures», *Fluid Phase Equilibria*, **404**, págs. 109–117, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378381215300157>.
- CHAND, G. P., M. G. SANKAR, D. RAMACHANDRAN y C. RAMBABU (2016), «Densities, Viscosities and Speeds of Sound of Binary Mixtures of 2-Chloroaniline with o-Chlorotoluene, m-Chlorotoluene and p-Chlorotoluene at Different Temperatures», *Journal of Solution Chemistry*, **45**(2), págs. 153–187, URL <https://doi.org/10.1007/s10953-016-0439-0>.
- CHEN, R.-X. y W.-C. WANG (2019), «The production of renewable aviation fuel from waste cooking oil. Part I: Bio-alkane conversion through hydro-processing of oil», *Renewable Energy*, **135**, págs. 819–835, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960148118314794>.
- CHENG, X., L. CHEN y F. YAN (2014), «Study of the characteristic of diesel spray combustion and soot formation using laser-induced incandescence (LII)», *Journal of the Energy Institute*, **87**(4), págs. 383–392, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1743967114000324>.
- CLEVELAND, C. J. (2005), «Net energy from the extraction of oil and gas in the Uni-

- ted States», *Energy*, **30**(5), págs. 769–782, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544204002890>.
- DONNIS, B., R. G. EGEBERG, P. BLOM y K. G. KNUDSEN (2009), «Hydroprocessing of Bio-Oils and Oxygenates to Hydrocarbons. Understanding the Reaction Routes», *Topics in Catalysis*, **52**(3), págs. 229–240, URL <https://doi.org/10.1007/s11244-008-9159-z>.
- DUBEY, G., M. SHARMA y N. DUBEY (2008), «Study of densities, viscosities, and speeds of sound of binary liquid mixtures of butan-1-ol with n-alkanes (C6, C8, and C10) at T = (298.15, 303.15, and 308.15) K», *The Journal of Chemical Thermodynamics*, **40**, pág. 309–320.
- DYMOND, J. H. y R. MALHOTRA (1988), «The Tait equation: 100 years on», *International Journal of Thermophysics*, **9**(6), págs. 941–951, URL <https://doi.org/10.1007/BF01133262>.
- FREITAS, S. V., J. J. SEGOVIA, M. CARMEN MARTÍN, J. ZAMBRANO, M. B. OLIVEIRA, ÁLVARO S. LIMA y J. A. COUTINHO (2014), «Measurement and prediction of high-pressure viscosities of biodiesel fuels», *Fuel*, **122**, págs. 223–228, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236114000416>.
- FU, J., X. LU y P. E. SAVAGE (2010), «Catalytic hydrothermal deoxygenation of palmitic acid», *Energy Environ. Sci.*, **3**, págs. 311–317, URL <http://dx.doi.org/10.1039/B923198F>.
- FU, Z., Y. LIN, L. LI y C. ZHANG (2014), «Experimental and numerical studies of a lean-burn internally-staged combustor», *Chinese Journal of Aeronautics*, **27**(3), págs. 488–496, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1000936114000703>.
- GUTIÉRREZ-ANTONIO, C., F. GÓMEZ-CASTRO, J. DE LIRA-FLORES y S. HERNÁNDEZ (2017), «A review on the production processes of renewable jet fuel»,

- Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **79**, págs. 709–729, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032117307463>.
- HOEKMAN, S. K., A. BROCH, C. ROBBINS, E. CENICEROS y M. NATARAJAN (2012), «Review of biodiesel composition, properties, and specifications», *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **16**(1), págs. 143–169, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136403211100390X>.
- HONORATO DE OLIVEIRA, B. F., L. F. DE FRANÇA, N. C. FERNANDES CORRÊA, N. F. D. P. RIBEIRO y M. VELASQUEZ (2021), «Renewable Diesel Production from Palm Fatty Acids Distillate (PFAD) via Deoxygenation Reactions», *Catalysts*, **11**(9), pág. 1088.
- IATA (2018), «International Air Transport Association, Annual Review», .
- IMDADUL, H., H. MASJUKI, M. KALAM, N. ZULKIFLI, A. ALABDULKAREM, M. RASHED y A. ASHRAFUL (2016), «Influences of ignition improver additive on ternary (diesel-biodiesel-higher alcohol) blends thermal stability and diesel engine performance», *Energy Conversion and Management*, **123**, págs. 252–264, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890416305179>.
- IMMER, J. G., M. J. KELLY y H. H. LAMB (2010), «Catalytic reaction pathways in liquid-phase deoxygenation of C18 free fatty acids», *Applied Catalysis A: General*, **375**(1), págs. 134–139, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0926860X09008710>.
- IMMER, J. G. y H. H. LAMB (2010), «Fed-Batch Catalytic Deoxygenation of Free Fatty Acids», *Energy Fuels*, **24**(10), págs. 5291–5299, URL <https://doi.org/10.1021/ef100576z>.
- KANDARAMATH HARI, T., Z. YAAKOB y N. N. BINITHA (2015), «Aviation bio-fuel from renewable resources: Routes, opportunities and challenges», *Renewa-*

- ble and Sustainable Energy Reviews*, **42**, págs. 1234–1244, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032114009204>.
- KIM, D., J. MARTZ y A. VIOLI (2016), «Effects of fuel physical properties on direct injection spray and ignition behavior», *Fuel*, **180**, págs. 481–496, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236116301272>.
- KOOK, S. y L. M. PICKETT (2012), «Liquid length and vapor penetration of conventional, Fischer–Tropsch, coal-derived, and surrogate fuel sprays at high-temperature and high-pressure ambient conditions», *Fuel*, **93**, págs. 539–548, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236111006211>.
- KUBIČKA, D., P. ŠIMÁČEK y N. ŽILKOVÁ (2009), «Transformation of Vegetable Oils into Hydrocarbons over Mesoporous-Alumina-Supported CoMo Catalysts», *Topics in Catalysis*, **52**(1), págs. 161–168, URL <https://doi.org/10.1007/s11244-008-9145-5>.
- KUBIČKOVÁ, I., M. SNÅRE, K. ERÄNEN, P. MÄKI-ARVELA y D. Y. MURZIN (2005), «Hydrocarbons for diesel fuel via decarboxylation of vegetable oils», *Catalysis Today*, **106**(1), págs. 197–200, international Conference on Gas-Fuel 05, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586105005493>.
- KWANCHAREON, P., A. LUENGNARUEMITCHAI y S. JAI-IN (2007), «Solubility of a diesel–biodiesel–ethanol blend, its fuel properties, and its emission characteristics from diesel engine», *Fuel*, **86**, págs. 1053–1061.
- LARRAÑETA, E. y J. R. ISASI (2012), «Phase Behavior of Reverse Poloxamers and Poloxamines in Water», *Langmuir : the ACS journal of surfaces and colloids*, **29**.
- LESTARI, S., P. MÄKI-ARVELA, K. ERÄNEN, J. BELTRAMINI, G. Q. MAX LU y D. Y. MURZIN (2010), «Diesel-like Hydrocarbons from Catalytic Deoxygenation of Stearic Acid over Supported Pd Nanoparticles on SBA-15 Ca-

- talysts», *Catalysis Letters*, **134**(3), págs. 250–257, URL <https://doi.org/10.1007/s10562-009-0248-9>.
- LI, T., J. CHENG, R. HUANG, J. ZHOU y K. CEN (2015), «Conversion of waste cooking oil to jet biofuel with nickel-based mesoporous zeolite Y catalyst», *Biore-source Technology*, **197**, págs. 289–294, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852415012213>.
- LI, T., J. CHENG, X. ZHANG, J. LIU, R. HUANG y J. ZHOU (2018), «Jet range hydrocarbons converted from microalgal biodiesel over mesoporous zeolite-based catalysts», *International Journal of Hydrogen Energy*, **43**(21), págs. 9988–9993, URL <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.04.078>.
- LIU, G., B. YAN y G. CHEN (2013), «Technical review on jet fuel production», *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **25**, págs. 59–70, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032113001846>.
- LIU, S., Q. ZHU, Q. GUAN, L. HE y W. LI (2015), «Bio-aviation fuel production from hydroprocessing castor oil promoted by the nickel-based bifunctional catalysts», *Bioresource Technology*, **183**, págs. 93–100, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852415002357>.
- LLAMAS, A., A.-M. AL-LAL, M. HERNANDEZ, M. LAPUERTA y L. CANOIRA (2012), «Biokerosene from Babassu and Camelina Oils: Production and Properties of Their Blends with Fossil Kerosene», *Energy Fuels*, **26**(9), págs. 5968–5976, URL <https://doi.org/10.1021/ef300927q>.
- MAIER, W. F., W. ROTH, I. THIES y P. V. R. SCHLEYER (1982), «Hydrogenolysis, IV. Gas phase decarboxylation of carboxylic acids», *Chemische Berichte*, **115**(2), págs. 808–812, <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cber.19821150245>, URL <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cber.19821150245>.

- MAMEDOV, A. M. (1981), «Description of different properties of liquids by identical formulas», *Journal of engineering physics*, **41**(5), págs. 1230–1232, URL <https://doi.org/10.1007/BF00824924>.
- MARTINS, F., R. E. LEITÃO, M. C. VENTURA, L. PINHEIRO y N. NUNES (2012), «Densities and refractive indices for the ternary mixture methanol/propan-1-ol/acetone», *Journal of Molecular Liquids*, **170**, págs. 30–36, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167732212001018>.
- MORGAN, T., D. GRUBB, E. SANTILLAN-JIMENEZ y M. CROCKER (2010), «Conversion of Triglycerides to Hydrocarbons Over Supported Metal Catalysts», *Topics in Catalysis*, **53**(11), págs. 820–829, URL <https://doi.org/10.1007/s11244-010-9456-1>.
- NEULING, U. y M. KALTSCHMITT (2015), «Conversion routes for production of biokerosene—status and assessment», *Biomass Conversion and Biorefinery*, **5**(4), págs. 367–385, URL <https://doi.org/10.1007/s13399-014-0154-2>.
- NITA, I., S. GEACAI, N. ANISOARA y E. GEACAI (2013), «Estimation of the refractive index of diesel fuel+biodiesel blends», *Analele Universitatii .°vidiusConstanta - Seria Chimie*, **24**.
- ORTEGA, J. (1982), «Densities and refractive indices of pure alcohols as a function of temperature», *J. Chem. Eng. Data*, **27**(3), págs. 312–317, URL <https://doi.org/10.1021/je00029a024>.
- PENG, B., X. YUAN, C. ZHAO y J. A. LERCHER (2012), «Stabilizing Catalytic Pathways via Redundancy: Selective Reduction of Microalgae Oil to Alkanes», *J. Am. Chem. Soc.*, **134**(22), págs. 9400–9405, URL <https://doi.org/10.1021/ja302436q>.
- RA, Y., R. REITZ, J. MCFARLANE y S. DAW (2008), «Effects of Fuel Physical Properties on Diesel Engine Combustion Using Diesel and BioDiesel Fuels», *SAE International Journal of Fuels and Lubricants*, **1**, págs. 703–718.

- REDLICH, O. y A. T. KISTER (1948), «Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions», *Ind. Eng. Chem.*, **40**(2), págs. 345–348, URL <https://doi.org/10.1021/ie50458a036>.
- REIS, J. C. R., I. M. S. LAMPREIA, A. F. S. SANTOS, M. L. C. J. MOITA y G. DOUHÉRET (2010), «Refractive Index of Liquid Mixtures: Theory and Experiment», *ChemPhysChem*, **11**(17), págs. 3722–3733, <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cphc.201000566>, URL <https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cphc.201000566>.
- ROKNI, H. B., A. GUPTA, J. D. MOORE, M. A. MHUGH, B. A. BAMGBADE y M. GAVAISES (2019), «Purely predictive method for density, compressibility, and expansivity for hydrocarbon mixtures and diesel and jet fuels up to high temperatures and pressures», *Fuel*, **236**, págs. 1377–1390, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016236118315783>.
- SALVI, A. A., D. ASSANIS y Z. FILIPI (2012), «Impact of Physical and Chemical Properties of Alternative Fuels on Combustion, Gaseous Emissions, and Particulate Matter during Steady and Transient Engine Operation», *Energy Fuels*, **26**(7), págs. 4231–4241, URL <https://doi.org/10.1021/ef300531r>.
- SANTILLAN-JIMENEZ, E. y M. CROCKER (2012), «Catalytic deoxygenation of fatty acids and their derivatives to hydrocarbon fuels via decarboxylation/decarbonylation», *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, **87**(8), págs. 1041–1050, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/jctb.3775>, URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jctb.3775>.
- SHAPOURI, H., M. WANG y J. A. DUFFIELD (), *Net Energy Balancing and Fuel-Cycle Analysis*, capítulo 5, John Wiley and Sons, Ltd, págs. 73–86, URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/0470022442.ch5>.
- SIEBERS, D. (1999), «Scaling Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Spray Based

- on Mixing-Limited Vaporization», *SAE Technical Paper*, URL <https://doi.org/10.4271/1999-01-0528>.
- SNÅRE, M., I. KUBIČKOVÁ, P. MÄKI-ARVELA, K. ERÄNEN y D. Y. MURZIN (2006), «Heterogeneous catalytic deoxygenation of stearic acid for production of biodiesel», *Industrial and Engineering Chemistry Research*, **45**(16), págs. 5708–5715.
- SONG, L., T. LIU, W. FU y Q. LIN (2018), «Experimental study on spray characteristics of ethanol-aviation kerosene blended fuel with a high-pressure common rail injection system», *Journal of the Energy Institute*, **91**(2), págs. 203–213, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1743967116305530>.
- SOTELO-BOYÁS, R., Y. LIU y T. MINOWA (2011), «Renewable Diesel Production from the Hydrotreating of Rapeseed Oil with Pt/Zeolite and NiMo/Al₂O₃ Catalysts», *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **50**(5), págs. 2791–2799, <https://doi.org/10.1021/ie100824d>, URL <https://doi.org/10.1021/ie100824d>.
- SPALART, P. y S. ALLMARAS (1992), «A One-Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows», *AIAA*, **439**.
- TANG, M., Y. PEI, Y. ZHANG, T. TZANETAKIS, M. TRAVER, D. CLEARY, S. QUAN, J. NABER y S.-Y. LEE (2018), «Development of a Transient Spray Cone Angle Correlation for CFD Simulations at Diesel Engine Conditions», .
- VAN STIPHOUT, P., D. STOBBE, F. V.D. SCHEUR y J. GEUS (1988), «Activity and stability of nickel—copper/silica catalysts prepared by deposition-precipitation», *Applied Catalysis*, **40**, págs. 219–246, URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016698340080439X>.
- VERMA, D., R. KUMAR, B. S. RANA y A. K. SINHA (2011), «Aviation fuel production from lipids by a single-step route using hierarchical mesoporous zeolites»,

- Energy Environ. Sci.*, **4**, págs. 1667–1671, URL <http://dx.doi.org/10.1039/C0EE00744G>.
- WU, J., J. SHI, J. FU, J. A. LEIDL, Z. HOU y X. LU (2016), «Catalytic Decarboxylation of Fatty Acids to Aviation Fuels over Nickel Supported on Activated Carbon», *Scientific Reports*, **6**(1), pág. 27 820, URL <https://doi.org/10.1038/srep27820>.

RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO

I.Q. Ayrton Joao Briceño Cantú

Candidato para obtener el grado de
Maestría en Ciencias con Orientación en Procesos Sustentables

Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Químicas

Tesis:

BIOTURBOSINA A PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS ESTERIFICADOS:
PRODUCCIÓN Y PROPIEDADES DE SUS MEZCLAS CON TURBOSINA +
ADITIVOS

Datos personales

Nacido en San Nicolas de los Garza, Nuevo León, 18 de Febrero de 1995. Hijo de Juan José Briceño Pérez y Yolanda Cantú López.

Educación

Licenciatura en Ingeniería Química. 2012-2018 - Universidad Autónoma de Nuevo León

Experiencia profesional

Especialista de Seguridad y Medio Ambiente de 2018 a 2019 en Denso México.