

## Capítulo 8 Caracterización Química de las emisiones producidas por la combustión de las mezclas de Nitrometanol-Biodiesel en un motor de compresión asistida por bujía incandescente de 2t

### Chapter 8 Chemical Characterization of the emissions produced by the combustion of Nitromethanol-Biodiesel mixtures in a 2t incanding plug-in compression engine

FLORES-MARQUEZ, Juan†\*, PACHECO-AGUIRRE, Francisco, CORRO, Griselda y RUIZ-REYES, Mayra

*Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Ciencias*

ID 1<sup>er</sup> Autor: *Juan, Flores-Marquez* / **ORC ID:** 0000-0001-9975-7748, **Researcher ID Thomson:** S-4659-2018, **CVU CONACYT-ID:** 477813

ID 2<sup>do</sup> Coautor: *Francisco, Pacheco-Aguirre* / **ORC ID:** 0000-0001-9266-8216, **Researcher ID Thomson:** S-4787-2018, **CVU CONACYT-ID:** 363598

ID 3<sup>er</sup> Coautor: *Griselda, Corro* / **ORC ID:** 0000-0001-8568-6133, **Researcher ID Thomson:** S-4682-2018, **CVU CONACYT-ID:** mcorro20230

ID 4<sup>to</sup> Coautor: *Mayra, Ruiz-Reyes* / **ORC ID:** 0000 0002-4575-1567, **Researcher ID Thomson:** S-4799-2018, **CVU CONACYT-ID:** 166950

J. Flores, F. Pacheco, G. Corro y M. Ruiz

Juan.floresmarq@alumno.buap.mx

A. Marroquín, H. Corres y L. Carpio. (Dir.) Ciencias de la Ingeniería y Tecnología. Handbooks-©ECORFAN-Mexico, Queretaro, 2018.

## Abstract

In the present work, the chemical characterization of the emissions produced by the combustion of nitrometanol (nitromethane-nethanol-beaver oil at 20, 71 and 9%, respectively) and biodiesel blends at 15, 30 and 50% in volume was carried out. The experiments were performed using a 2T incandescent spark plug assisted compression engine and the combustion gases were analyzed by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR). The analysis suggest that the nitrometanol mixture generates the heat combustion necessary for the ignition of biodiesel, improving the combustion of the mixtures. This was corroborated by the reduction of CO in the afterburner emissions of the engine, since the decrease of this parameter is usually associated with a better (complete) combustion of the combustible blends. It was also found that the compounds concentrations of the combustion gases and their temperatures in the engine head are related to the nitrometanol-biodiesel blend concentration.

## Biodiesel, Análisis FTIR, Emisiones Postcombustión, Motor

### 1 Introducción

La sobreexplotación de recursos no renovables está generado un creciente agotamiento en las reservas mundiales de energía, y al mismo tiempo un aumento en el precio de los combustibles derivados del petróleo. Por ende, existe la necesidad de encontrar sustitutos energéticos adecuados para reemplazar los combustibles fósiles, cubrir las demandas energéticas actuales y ser sostenibles con respecto a las materias primas de las cuales se han obtenido [1-4]. Algunas de las características requeridas para considerar un combustible como una alternativa viable son la renovabilidad o menor dependencia de los recursos limitados, bajos costos de producción, y una baja o nula contaminación. Uno de los energéticos que actualmente ha estado atrayendo un creciente interés en la investigación es el biodiésel, debido a su naturaleza ecológica y no tóxica [5]. Algunos estudios han propuesto técnicas para su elaboración a bajo costo, así como el empleo de materias primas provenientes de fuentes de desecho para su producción [6-9], lo que ha dado como resultado el impulso exponencial de este bioenergético en la última década [10].

El uso del biodiésel se extiende en diferentes sectores, tales como la producción intermediara en productos de limpieza, plastificantes y lubricantes [11], de entre los que destaca el uso del biodiésel en motores de combustión interna [12-14], siendo este uno de los sectores de mayor demanda energética. En este sentido existen numerosos estudios con respecto a este bioenergético [15-18], desde la combustión del biodiésel con mezclas de diésel, la potencia producida en los motores que emplean estas mezclas [19-23], las emisiones que genera este bioenergético [24-27] (las cuales retomaremos en la sección de resultados), hasta las posibles deficiencias que pueden ocasionar este combustible al ser empleado en motores de combustión interna diésel [28]. Sin embargo, a pesar de los numerosos estudios que se han llevado a cabo, el biodiésel no ha sido empleado del todo en mezcla con otros combustibles, tal es el caso de nitrometano, el cual es un compuesto con una amplia variedad de aplicaciones, las cuales incluyen su uso como: monopropelente [29], disolvente para el procesamiento y análisis químico, combustible de alto rendimiento, y en mezcla con metanol-aceite de castor (a la cual nos referiremos como nitrometanol) como combustible en motores de combustión interna [30, 31] así como en vehículos aéreos no tripulados [32].

La adición de metanol reduce la tendencia del vapor de nitrometano a detonar bajo compresión repentina durante el funcionamiento o la manipulación [33] y el aceite de castor actúa como lubricante. Hasta ahora, muchos trabajos han contribuido al estudio del nitrometano como uno de los principales componentes de los explosivos líquidos [34] así como de los propulsores [35], incrementando el conocimiento de las características de su combustión y explosión [36-38]. Sin embargo, a pesar de ser un compuesto ampliamente investigado, los estudios fundamentales para caracterizar las emisiones generadas en el proceso de combustión de mezclas de nitrometano-biodiésel aún son inexistentes. Por lo tanto, aquí se presenta una investigación concentrada en elucidar las características químicas de los gases de combustión de nitrometano mezclado con biodiésel. El estudio se realizó empleado un motor de combustión interna asistido por bujía incandescente, lo que permite obtener las emisiones para analizar el impacto de la combustión de las mezclas de nitrometano-biodiésel y con ello determinar el posible uso de estos energéticos.

Para detectar los gases de postcombustión y su concentración se empleó espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) por la alta sensibilidad y selectividad que esta técnica presenta en las estructuras químicas, así como al amplio espectro de detección de compuestos en gases [39, 40]. En el presente trabajo se abordarán las secciones de materiales y métodos en la cual se explican los pasos empleados para llevar a cabo los experimentos, la sección de resultados en la cual se aborda el efecto derivado de las variaciones en la parte experimental, así como su posible explicación, y finalmente se aborda la parte de conclusiones del trabajo.

## 2 Metodología a desarrollar

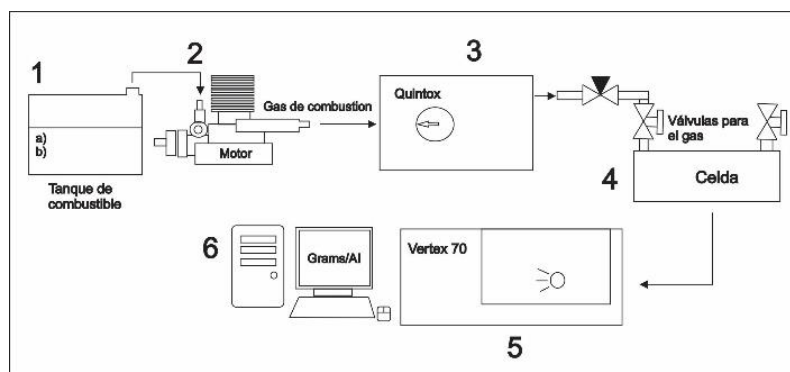
### 2.1 Sistema de muestreo y análisis de gases

Todas las pruebas experimentales se llevaron a cabo en un motor de pruebas marca HSP Modelo Vx18, Estados Unidos de Norteamérica (USA), de 2 tiempos, monocilíndrico, enfriado por convección, de aspiración natural, con arranque mediante marcha mecánica, sin carga en el eje del motor, con un volumen de desplazamiento  $2.74 \text{ cm}^3$ , y con un radio de compresión 7.5:1. Para la combustión se empleó nitrometanol comercial, marca Power Master, USA, el cual contiene 20, 71 y 9 % de nitrometano, metanol y aceite de castor respectivamente, así como biodiésel procedente de aceite residual de cocina según la preparación y características de [41]. El sistema de recolección de gases está equipado con una bomba que regula el flujo del gas de salida, la cual es un sistema de recolección Quintox Modelo Kane 9106, Reino Unido (UK), y una celda de gases para análisis espectroscópico FTIR marca Sev Modelo 172, México (MX), con un paso óptico de 0.1m. Los gases de combustión se analizaron en un espectrofotómetro FTIR marca Bruker Modelo Vertex 70, USA.

Todo el sistema antes descrito se representa en la Figura 8.1, en donde una vez concluida la instalación del sistema experimental, se prepararon las mezclas combustibles (50 ml) en un matraz Erlenmeyer de 100 ml y se mezclaron hasta tener una composición homogénea mediante un agitador magnético, en una parrilla de agitación marca Thermo Scientific, USA. Una vez preparadas las mezclas se llenó el tanque de combustible (1) mediante decantación simple con la mezcla de combustible (a.- nitrometanol, b.- biodiésel) a analizar. Las mezclas de nitrometanol-biodiésel preparadas para la parte experimental son reportadas en la Tabla 8.1, las cantidades propuestas para las diferentes formulaciones se obtuvieron según [42, 43], esto debido a que estudios sugieren que estas relaciones son óptimas para el desempeño del motor, siendo B50 el máximo porcentaje de biodiésel operable, ya que arriba de esta concentración no detona la mezcla, dado que no se cuenta con la energía necesaria para la detonación del energético mayoritario.

Una vez que se cargó el tanque de combustible con la mezcla deseada, se purgan las líneas de combustible para posteriormente proceder con la puesta en marcha del motor (2). Una vez alcanzado el tiempo de estabilización del motor (3 minutos) los gases de combustión fueron conducidos al Quintox para finalmente tener un flujo de salida a  $100 \text{ ml} \cdot \text{min}^{-1}$  (3), y ser cargados en una celda para gases durante 1 minuto (4). Concluido este tiempo la celda se colocó en el espectrofotómetro para la caracterización de los gases mediante FTIR (5). Los espectros generados se procesaron empleando el software Grams/AI Versión 7.02 (6) para finalmente ser graficados y reportados en el presente trabajo.

**Figura 8.1** Sistema de combustión, recolección de gases y análisis de los mismos, a) nitrometanol, b) biodiésel



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

La parte experimental antes descrita ha sido probada por otros autores dando resultados satisfactorios [44].

**Tabla 8.1** Composición de las mezclas empleadas para el análisis de postcombustión de nitrometanol-biodiésel

Denominación	Composición
B0=N100	100% nitrometanol
B15=N85	15% biodiésel y 85% nitrometanol
B30=N70	30% biodiésel y 70% nitrometanol
B50=N50	50% biodiésel y 50% nitrometanol

Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

## 2.2 Determinación de temperaturas de operación

De manera paralela al análisis de los gases de combustión se recolectaron datos de temperatura de la cabeza y el escape del motor, con la finalidad de medir la variación de temperatura a medida que el biodiésel aumentaba en la mezcla. Esto se llevó a cabo mediante un pirómetro infrarrojo, marca SureBilt Modelo 49510 con las siguientes características:

- Radio de punto 12:1
- Intervalo de temperatura (-32 a 380) ° C
- Distancia máxima de operación de 1.5m

## 2.3 Análisis estadístico

Todos resultados obtenidos de la concentración de compuestos detectados y temperaturas registradas durante el empleo de las mezclas combustibles B0, B15, B30 y B50 fueron analizados estadísticamente mediante la correlación Tau de Kendall ya que se ha demostrado que permite identificar no solo las dependencias lineales entre las secuencias, sino también cualquier tipo de relación monótona [45].

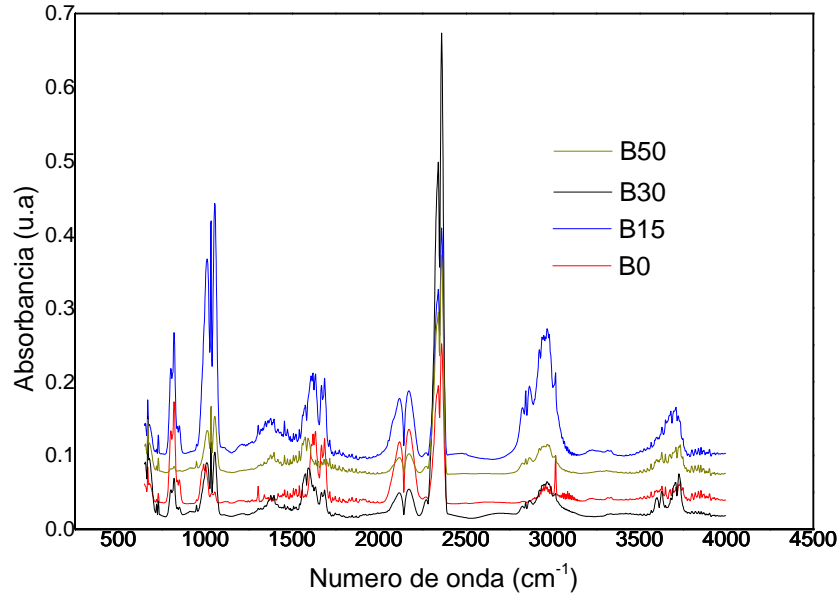
## 3 Resultados

### 3.1 Caracterización química de los gases de combustión

De las pruebas de combustión de las mezclas de nitrometanol-biodiésel, se analizaron mediante FTIR 110 compuestos divididos en 6 familias o grupos, los cuales son: hidrocarburos del carbono (C) 1 al 4, C5, C6, óxidos y peróxidos, alcoholes, y compuestos que contienen azufre. Los resultados se representaron en forma gráfica tal como se ve de la Figura 8.3 a la 8.12, comenzando por el grupo de los hidrocarburos del carbono 1 al 4, dividiendo en dos gráficas los compuestos que tiene mayor y menor concentración (cada gráfico se encuentra codificado para efectos de espacio y el nombre completo del compuesto se muestra en la Tabla 8.3).

Los espectros correspondientes a cada una de las mezclas (B0, B15, B30 y B50) se muestran en la Figura 8.2, el procedimiento de identificación de los compuestos descritos anteriormente mediante el software Grams/AI se puede encontrar en la sección de Anexos (Figuras 8.13-8.15). Cabe mencionar que en no se registraron compuestos bencénicos durante la combustión de ninguna mezcla (B0, B15 B30 o B50), mismos que se encuentran normalmente en la combustión del diésel y que su presencia se asocia con riesgos a la salud como el cáncer [46].

**Figura 8.2** Espectros FTIR correspondiente a las emisiones producidas por la combustión de las mezclas B0, B15, B30 y B50

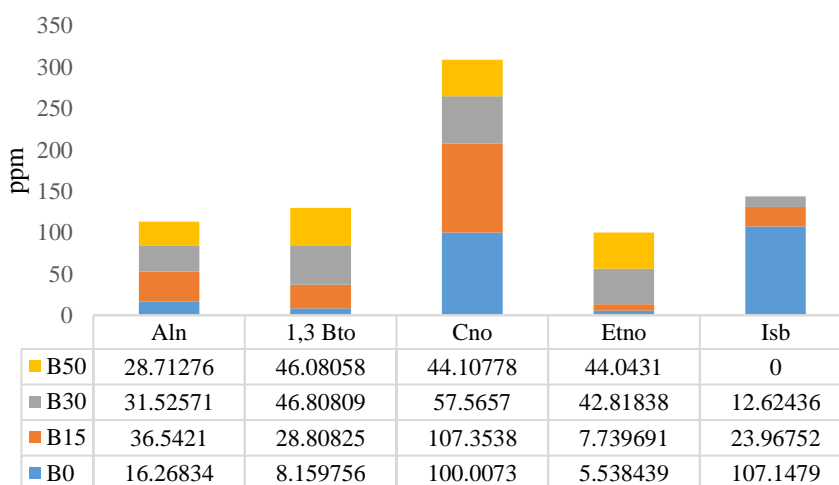


Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En la Figura 8.2 se pueden apreciar los espectros FTIR correspondientes a los gases generados por la combustión de las mezclas B0, B15, 30 y B50, a partir del análisis FTIR se pudieron identificar los compuestos presentes en la poscombustión de las mezclas nitrometanol-biodiésel, así mismo así mismo se reportan los resultados del análisis de correlación de Kendall, los compuestos que registraron valores  $p < 0.05$  se consideran significativamente correlacionados ya sea de manera directa o inversa (+1, -1). Es importante notar que las intensidades de las señales obtenidas por FTIR (Figura 8.2) para las emisiones de la combustión de la mezcla B15 son más fuertes que para los demás combustibles estudiados.

A continuación se muestran los compuestos encontrados en las mezclas de combustibles (B0, B15, B30 y B50) pertenecientes al grupo hidrocarburos de C1 al C4 de baja concentración (Figura 8.3), en la Figura 8.3 se puede apreciar que el compuesto que se encuentra en mayor cantidad de manera general es el ciclopropano (Cno).

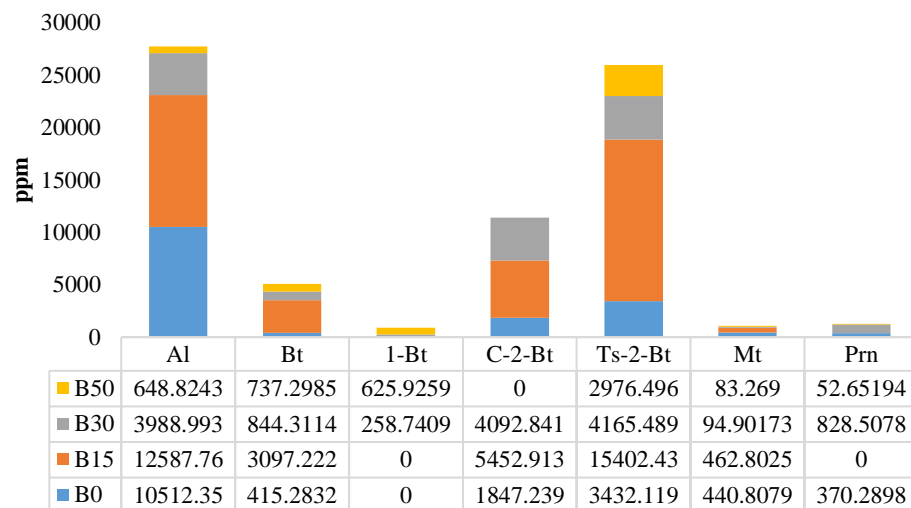
**Figura 8.3** Evolución de los compuestos de C1 al C4 de baja concentración a diferentes mezclas combustibles



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En el caso de los compuestos pertenecientes al grupo de hidrocarburos de C1 al C4 de alta concentración, estos se muestran en la Figura 4, teniendo como compuestos predominantes al aleno (Al) y al trans-2-buteno (Ts-2-Bt).

**Figura 8.4** Evolución de los compuestos de C1 al C4 de alta concentración a diferentes mezclas combustibles

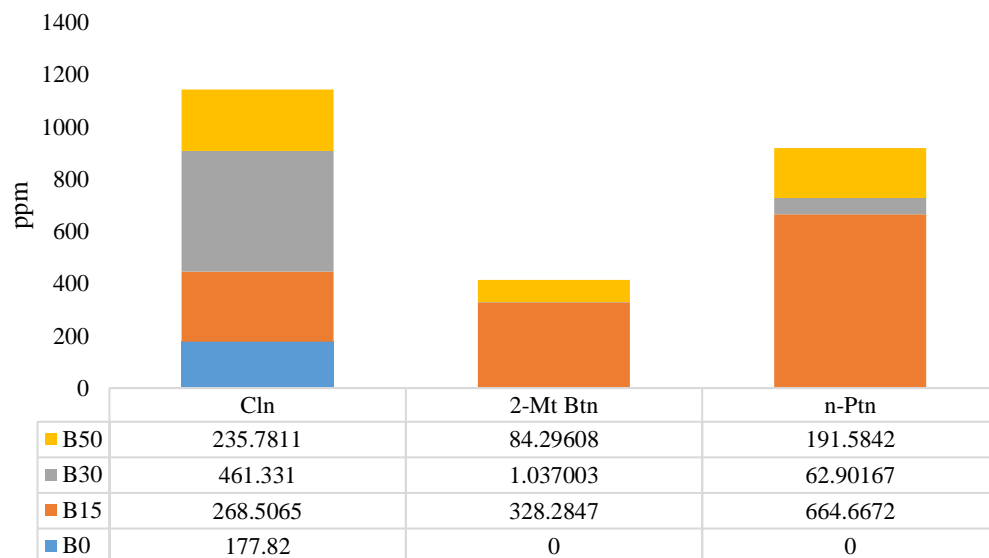


Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

Algunos de los compuestos enlistados en las Figuras 8.3 y 8.4 han sido reportados en la literatura para mezclas de biodiésel con otros compuestos, tal es el caso de Agarwal *et al.* [24], que reportan la presencia de metano (Mt), butano (Bt), acetileno (Aln), etileno (Etno) y 1,3 butadieno (1,3 Bto). En el análisis estadístico mediante Tau de Kendall ( $p < 0.05$ , +1) se encontró que existe una correlación directa entre el aumento de etano y aleno así como de trans-2-buteno y cis-2-buteno

En la Figura 8.5 se muestran los compuestos pertenecientes al grupo de hidrocarburos de C5 de baja concentración, los compuestos encontrados fueron ciclopenteno (Cln), 2-metil butano (2-Mt btn) y n-pentano (n-Ptn).

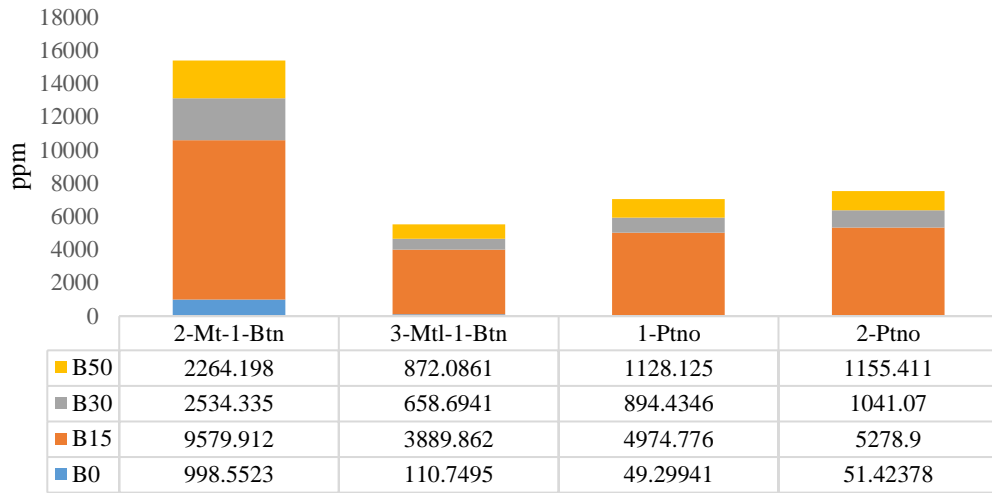
**Figura 8.5** Evolución de los compuestos de C5 a baja concentración a diferentes mezclas combustibles



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

Así mismo en la Figura 8.6 se grafican los compuestos pertenecientes al grupo hidrocarburos de C5 de alta concentración, siendo el 2-metil-1-buteno (2-Mt-1-Btn) el compuesto predominante, y en concentraciones similares el 3-metil-1-buteno (3-Mtl-1-Btn), 1-penteno (1-Ptno) y el 2-penteno (2-Ptno).

**Figura 8.6** Evolución de los compuestos C5 de alta concentración a diferentes mezclas combustibles

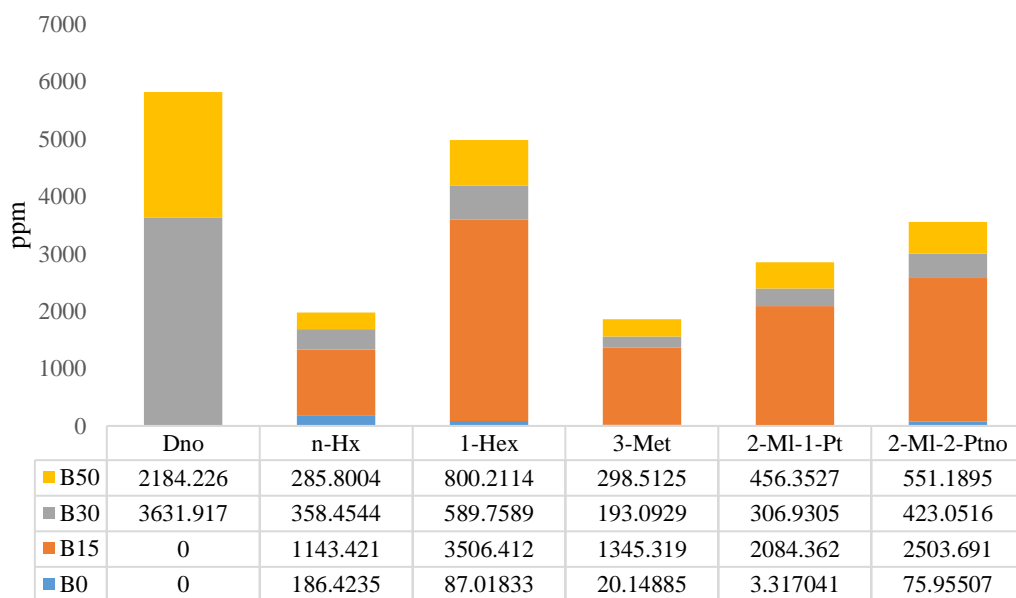


Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

La presencia de n-pentano ha sido reportada en la combustión de biodiésel por autores como Agarwal *et al.*, [24]. y Jedynska *et al.*, [25]. El análisis estadístico muestra que existe correlación significativa entre el aumento de 2-metil Butano y n-pentano así como de metil-1-buteno, 1-penteno y 2-penteno, de igual manera existe una correlación significativa entre n-pentano y 3-metil-1-Buteno, 1-penteno y 2-penteno, y de igual manera 3-metil-1-buteno aumenta con el aumento de 1-penteno y 2-penteno y finalmente 1-penteno aumenta conforme 2-penteno aumenta.

En la Figura 8.7 se muestran los compuestos pertenecientes al grupo de hidrocarburos de C6 y mayores, pudiéndose identificar dicitropentadieno (Dno), n-hexano (n-Hx), 1-hexeno (1-Hex), 3-metilpentano (3-Met), 2-metil-1-penteno (2-MI-1-Pt) y 2-metil-2-penteno (2-MI-2-Ptno). La presencia del 3-metilpentano y n-hexano ha sido reportada en la combustión del biodiésel (Jedynska *et al.*, [25]). El análisis estadístico muestra una correlación en el aumento de todos los compuestos entre si exceptuando dicitropentadieno y n-hexano.

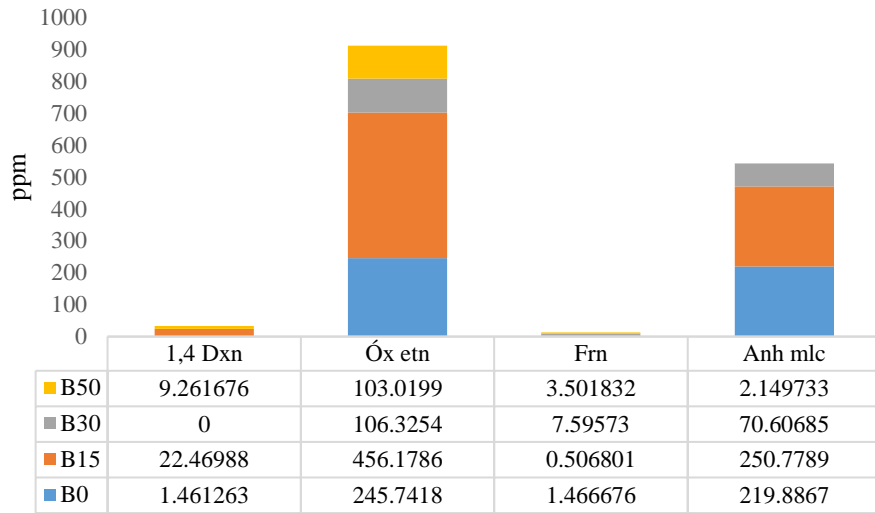
**Figura 8.7** Evolución de los compuestos de C6 y mayores a diferentes mezclas combustibles.



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En la Figura 8.8 se muestran los compuestos pertenecientes al grupo óxidos y peróxidos en menor concentración. Siendo los compuestos predominantes el óxido de etileno (Óx etn) y el anhídrido maleico (Anh mlc), y en menor cantidad 1,4 dioxano (1,4 Dxn) y furano (Frn).

**Figura 8.8** Evolución de los compuestos de óxidos y peróxidos de baja concentración a diferentes mezclas combustibles

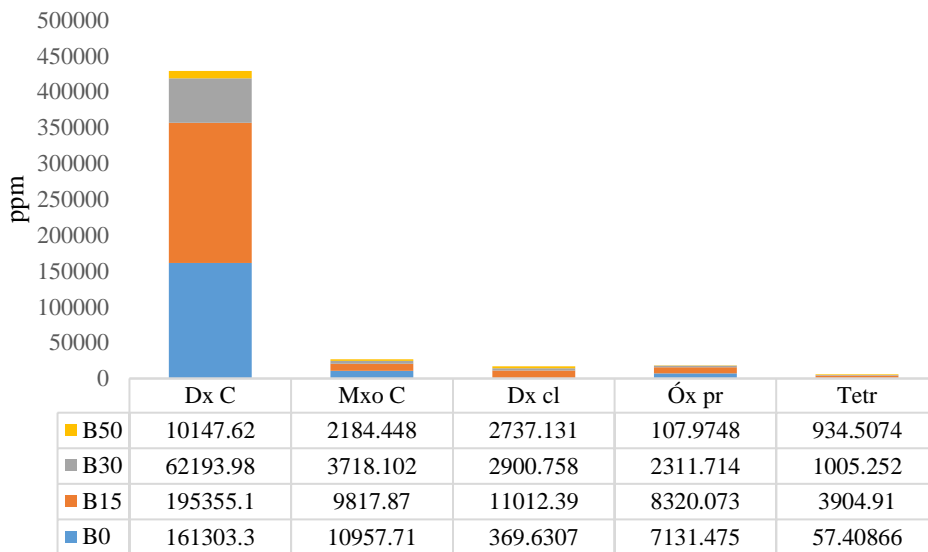


Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En la Figura 8.9 se muestran los compuestos pertenecientes al grupo de óxidos y peróxidos, de alta concentración, el compuesto que se encuentra en mayor medida para cada mezcla es dióxido de carbono (Dx C), los compuestos restantes son monóxido de carbono (Mxo C), dióxido de cloro (Dx cl), óxido de propileno (Óx pr) y tetrahydrofurano (Tetr). Siendo el dióxido de carbono y el monóxido de carbono lo más comúnmente reportado en la literatura [26,27].

El óxido de etileno aumenta conforme aumenta el anhídrido maleico, el dióxido de carbono y el óxido de propileno, el anhídrido maleico aumento con dióxido de carbono y óxido de propileno, el dióxido de carbono con el óxido de propileno y finalmente el dióxido de cloro que aumenta con el aumento de tetrahydrofurano.

**Figura 8.9** Evolución de los compuestos de óxidos y peróxidos de alta concentración a diferentes mezclas combustibles.

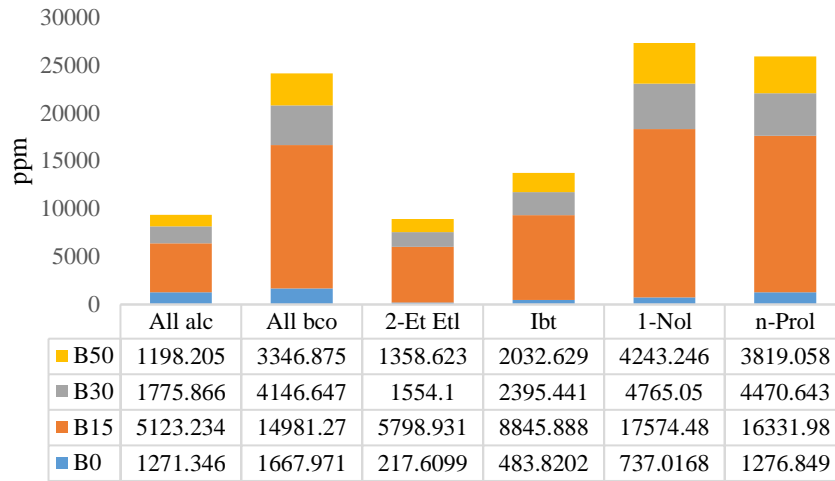


Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En la Figura 8.10 se muestran los compuestos pertenecientes al grupo alcoholes. En ella se aprecia que los tres compuestos de mayor concentración son el alcohol bencílico (All bco), 1-nonanol (1-Nol) y n-propanol (n-Prol), los compuestos restantes son alcohol alílico (All alc), 2-etoxi etanol (2-Et Etl) e isobutanol (Ibt).

Para el caso de los alcoholes todos tienen correlación significativa a excepción del alcohol alílico el cual no se relaciona su incremento o decremento con ningún compuesto de este grupo.

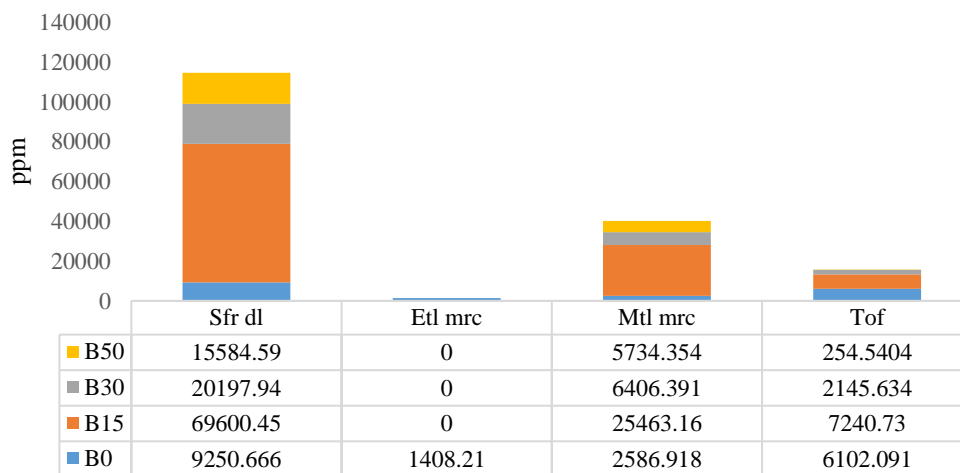


**Figura 8.10** Evolución de los alcoholes a diferentes mezclas combustibles

Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

Finalmente en la Figura 8.11 se muestran los compuestos que contienen azufre, lográndose identificar 4 compuestos, que se enunciarán de mayor a menor según su concentración general en las mezclas respectivamente: Sulfuro de dimetilo (Sfr dl), metil mercaptano (Mtl mrc), tiofeno (Tof) y etil mercaptano (Etl mrc). En el caso de los compuestos que contienen azufre solo tiene correlación significativa el aumento de sulfuro de dimetilo con el metil mercaptano.

Las tendencias generales de cada grupo (Figuras 8.3-8.11) se presentan en la se presentan en las Figuras 8.16-8.21 en la sección de Anexos pudiéndose notar el efecto de la mezcla combustible.

**Figura 8.11** Evolución de los compuestos que contienen azufre a diferentes mezclas combustibles

Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

De las pruebas de temperatura durante la operación del motor en la combustión de nitrometanol-biodiésel se sugieren las siguientes reacciones (específicamente en el caso de que la combustión sea completa):

#### 1. Oxidación de nitrometanol



En donde, el nitrometanol es la primera mezcla en quemarse dado que posee un menor punto de ignición (1). Esta primera ignición genera el calor de combustión necesario para que se acelere la combustión del biodiésel (2-4), logrando así una mejor combustión de las mezclas en simultáneo.

## 2. Oxidación del biodiésel

El biodiésel obtenido es una mezcla de metil-ésteres (metil-palmitato, metil-meristato y metil-linolelaidato), su oxidación quedará representada por tres reacciones que se describen a continuación:



### 3.2 Efecto de la mezcla del combustible en la temperatura del motor y su relación con la combustión

Las temperaturas registradas en el cabezal y escape del motor durante la combustión de las diferentes mezclas se presentan en a Tabla 8.2.

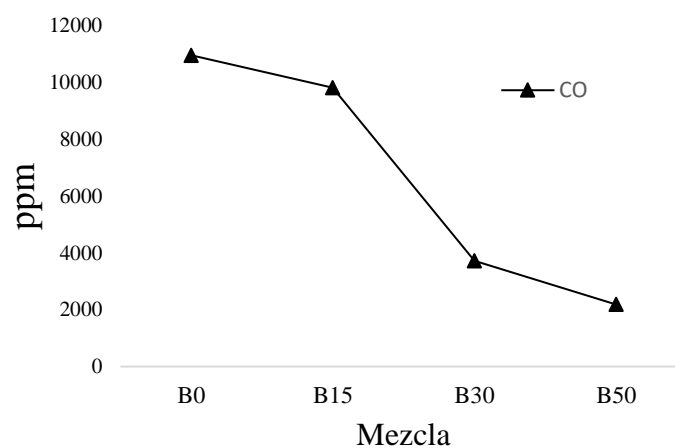
**Tabla 8.2** Temperaturas registradas en el cabezal y escape del motor durante su operación con diferentes mezclas combustibles

Temperatura del motor en ° C				
Motor	B0	B15	B30	B50
Cabezal	73.1	108	119.6	128.6
Escape	44	82	100.3	109.5

Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

Como se aprecia en la Tabla 8.2, a medida que se incrementa la cantidad de biodiésel en la mezcla, aumenta la temperatura del motor, esto puede deberse al mayor poder calorífico del biodiésel. La combustión de las mezclas (B15, B30 y B50) será mayor, en función del incremento en la proporción de biodiésel. Esto significa que en la mezcla B15, debido a la poca cantidad de biodiésel en proporción al nitrometanol, el calor generado no será suficiente para llevar a cabo la combustión completa de este biodiésel y consecuentemente se generarán mayores cantidades de compuestos mal quemados (compuestos derivados de la combustión parcial) provenientes de los componentes que necesitan fuertes cantidades de energía para ser oxidados (Figuras 8.3-8.11 y 8.16-8.21). Ahora bien, en las mezclas B30 y B50, la mayor cantidad de biodiésel generará una mayor cantidad de calor y por consecuencia, una mayor oxidación de los hidrocarburos de los dos componentes de las mezclas.

**Figura 8.12** Evolución de las partes por millón de las emisiones de CO en las mezclas empleadas



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

En la figura anterior (Figura 8.12) se observa que a medida que aumenta la concentración de biodiésel en la mezcla combustibles, las emisiones de CO disminuyen. Este resultado puede deberse al mayor poder calorífico del biodiésel lo cual genera la combustión de la mezcla. Esta relación temperatura versus concentración de CO versus mezcla, fue corroborada mediante un análisis de correlación Tau de Kendall obteniéndose un valor de -1 con una  $p < 0.05$  lo cual indica una relación inversa en los valores de temperatura y formación de CO con respecto a la concentración de biodiésel en las mezclas.

Los porcentajes de emisión de CO con respecto al total de los compuestos fueron para B15, B30 y B50, 3, 3 y 4% respectivamente, ligeramente más bajos que el combustible nitrometanol puro que tuvo un valor de 5% respectivamente.

#### 4 Anexos

**Tabla 8.3** Lista de compuestos obtenidos en el análisis FTIR de los gases de combustión, con su código implementado en las gráficas.

Símbolo	Nombre completo
Al	aleno
Bt	butano
1-Bt	1-buteno
C-2-Bt	cis-2-buteno
Ts-2-Bt	trans-2-buteno
Mt	metano
Prn	propino
Aln	acetileno
1,3 Bto	1,3 butadieno
Cno	ciclopropano
Etno	etileno
Isb	isobutano
Cln	ciclopenteno
2-Mt Btn	2-metil butano
n-Ptn	n-pentano
2-Mt-1-Btn	2-metil-1-buteno
3-Mtl-1-Btn	3-metill-1-buteno
1-Ptno	1-penteno
2-Ptno	2-Penteno
Dno	diciclopentadieno
n-Hx	n-hexano
1-Hex	1-hexeno
3-Met	3-metilpentano
2-Ml-1-Pt	2-metil-1-penteno
2-Ml-2-Ptno	2-metil-2-penteno
Dx C	dióxido de carbono
Mxo C	monóxido de carbono
Dx cl	dióxido de cloro
Óx pr	óxido de propileno
Tetr	tetrahidrofurano
1,4 Dxn	1,4 dioxano
Óx etn	óxido de etileno
Frn	furano
Anh mlc	anhídrido maleico
All alc	alcohol alílico
All bco	alcohol bencílico

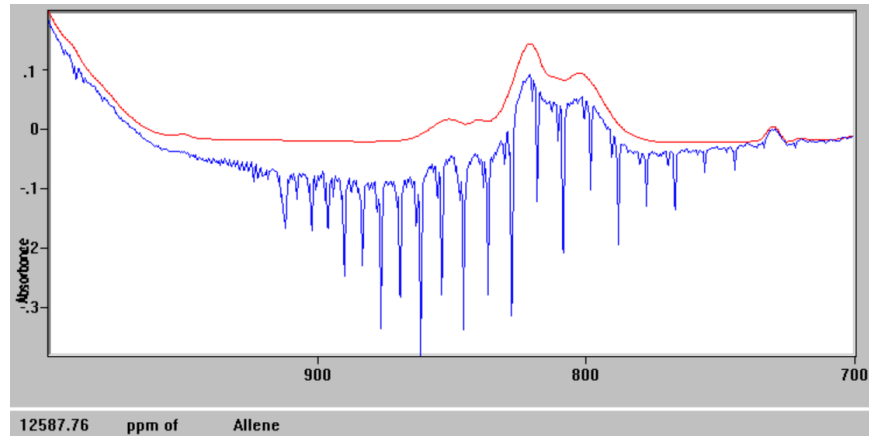
**Tabla 8.4** Lista de compuestos obtenidos en el análisis FTIR de los gases de combustión, con su código implementado en las gráficas (continuación)

Símbolo	Nombre completo
2-Et Etl	2-etoxi etanol
Ibt	isobutanol
1-Nol	1-nonanol
n-Prol	n-propanol
Sfr dl	sulfuro de dimetilo
Etl mrc	etil mercaptano
Mtl mrc	metil mercaptano
Tof	Tiofeno

Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

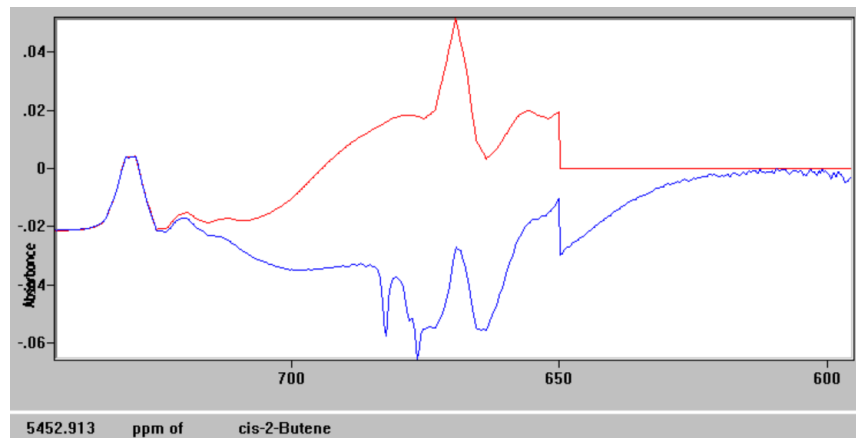
La cuantificación e identificación de los compuestos descritos en la sección 2 de la sección Metodología fue realizada mediante el software Grams/AI Versión 7.02, en el cual se compraron las muestras analizadas versus la base de datos del programa, el mismo tiene la capacidad de identificar el compuesto y proporcionar su concentración. Ejemplo de ello se muestra las Figuras 13-15 en las cuales se ejemplifica la detección y cuantificación del aleno, 2 cis Buteno y 2 trans buteno respectivamente en el software.

**Figura 8.13** Espectro correspondiente al aleno, comparado mediante FTIR en el software Grams/AI y determinando la concentración registrada



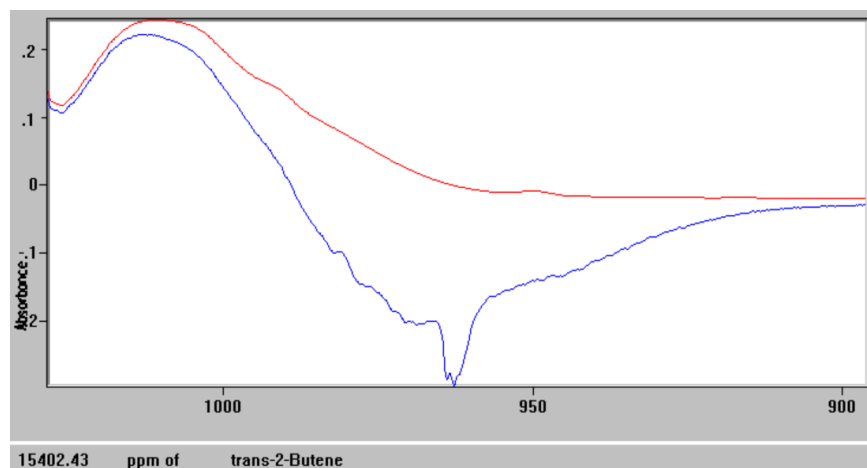
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.14** Espectro correspondiente al cis-2-buteno, comparado mediante FTIR en el software Grams/AI y determinando la concentración registrada



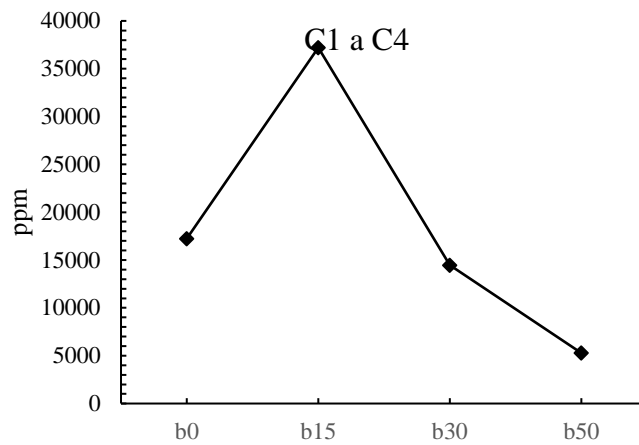
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.15** Espectro correspondiente al trans-2-buteno, comparado mediante FTIR en el software Grams/AI y determinando la concentración registrada



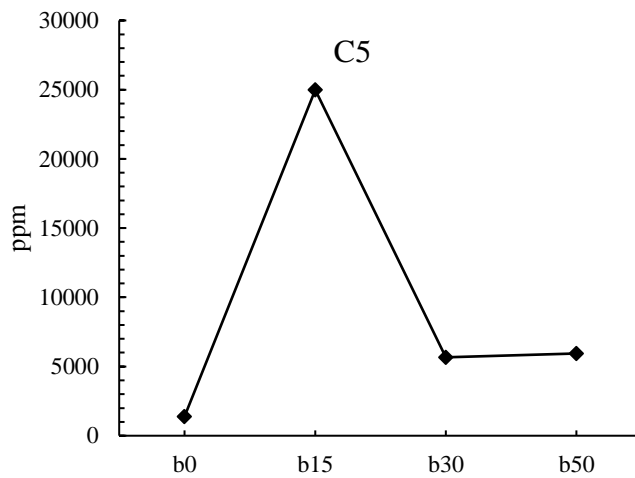
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.16** Tendencia general del grupo perteneciente a hidrocarburos C1- C4 a diferentes mezclas.



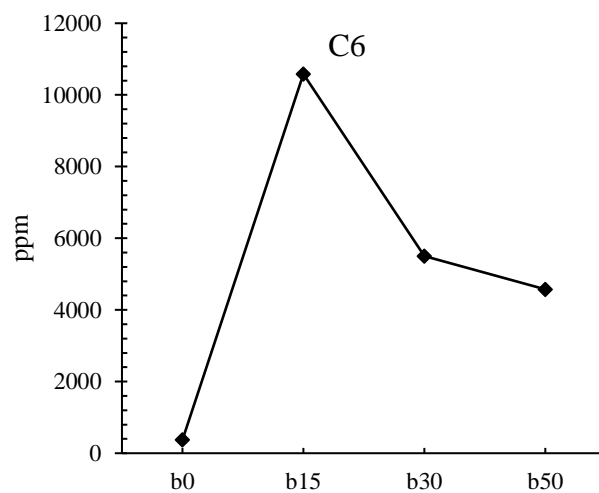
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.17** Tendencia general del grupo perteneciente a hidrocarburos C5 a diferentes mezclas.



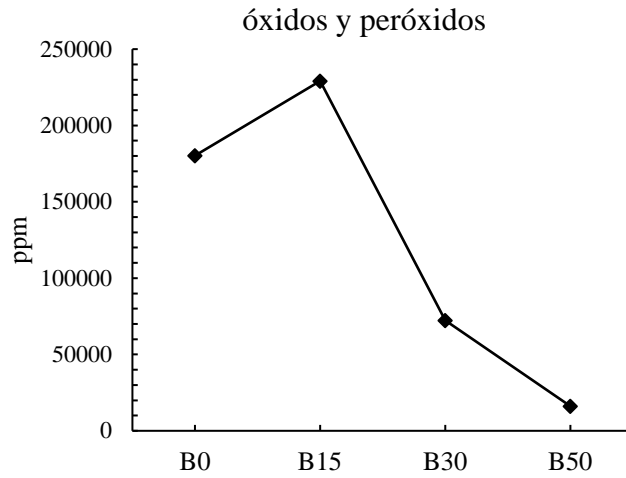
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.18** Tendencia general del grupo perteneciente a hidrocarburos C6 a diferentes mezclas.



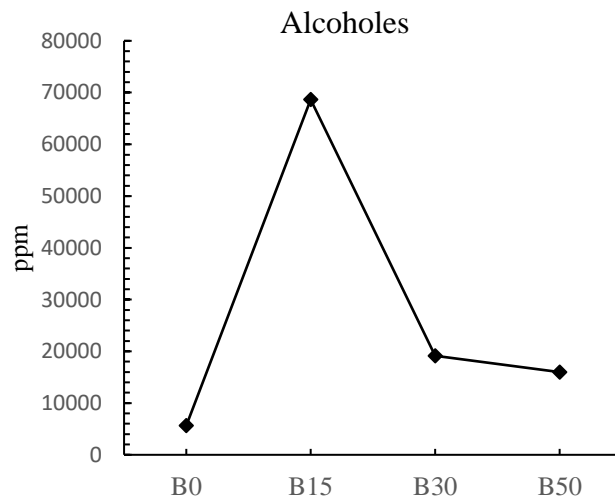
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.19** Tendencia general del grupo perteneciente a los óxidos y peróxidos a diferentes mezclas.



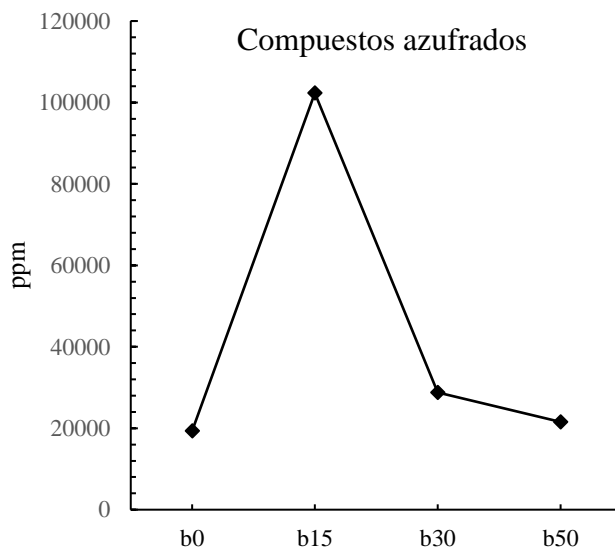
Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.20** Tendencia general del grupo perteneciente a los alcoholes a diferentes mezclas.



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

**Figura 8.21** Tendencia general del grupo perteneciente a compuestos que contienen azufre a diferentes mezclas



Fuente: (Flores-Márquez *et al.*, 2018)

## Agradecimiento

Los autores expresan su agradecimiento al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por la beca otorgada a Flores-Márquez, J.A., y a la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Posgrado de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP) sin la cual esta investigación no hubiera sido posible.

## 5 Conclusiones

Los resultados de la cuantificación de CO en los gases de combustión y las temperaturas del cabezal y escape del motor de compresión asistida por bujía incandescente de 2t en función de las diferentes mezclas de nitrometanol-biodiésel, sugieren que es posible que se lleve a cabo una ignición primaria de la mezcla de nitrometanol, la cual generará un calor de combustión que es probablemente utilizado para alcanzar la energía de activación de combustión de biodiésel. Ahora bien, la combustión de biodiésel (activada por la combustión de nitrometanol), generará un calor de combustión que se transmitirá al contenido total de este combustible en la mezcla. Debido a la débil proporción de biodiésel en la mezcla B15, el calor generado por nitrometanol y por el 15% de biodiésel, no será suficiente para llevar a cabo la combustión de biodiésel más que a una proporción moderada en sus primeras etapas de oxidación.

Esto resultará en fuertes cantidades de compuestos (hidrocarburos, compuestos oxigenados y azufrados) mal quemados, y por lo tanto las concentraciones de los compuestos de las emisiones reportados en esta investigación, son mayores que las emisiones de la combustión de nitrometanol puro (B0). Sin embargo en las mezclas B30 y B50, la mayor proporción de biodiésel generará mayores cantidades de calor que compensarán los requerimientos energéticos de mayores cantidades de compuestos (en particular de intermediarios de la oxidación total), resultando en una disminución de contaminantes en comparación con la combustión de la mezcla B15.

Los resultados presentados en este estudio demuestran el beneficio de la utilización de mezclas B30 y B50 en el motor debido a:

- Las emisiones de CO se ven disminuidas en relación a las emisiones de las combustiones de B0.
- Se obtendrá mayor energía (calor) que durante la combustión de B0.
- Se generarán menos gases de combustión contaminantes que durante la combustión de B15.
- La combustión de estas mezclas (aun la B15), genera menos contaminantes que la combustión de diésel, en particular, no se detectaron a ninguna composición compuestos bencénicos (carcinogénicos) como se han detectado en las emisiones de la combustión de diésel [46,47]

Finalmente el presente estudio destaca que se lograron identificar compuestos pertenecientes a los gases de postcombustión de un motor de compresión asistida por bujía incandescente de 2t, el cual empleó mezclas combustibles de nitrometanol-biodiésel (B0, B15, B30, B50) y que durante el empleo de mezclas de nitrometanol-biodiésel en el motor, resulta favorable el uso de la mezcla B30 y B50.

## Referencias

- [1] Beér, J. M., Jacques, M. T., Farmayan, W., & Taylor, B. R. (1981). Fuel-nitrogen conversion in staged combustion of a high nitrogen petroleum fuel. *Symposium (International) on Combustion*, 18(1), 101-110. doi: [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(81\)80015-X](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(81)80015-X)
- [2] Shirneshan, A., Almassi, M., Ghobadian, B., Borghei, A. M., & Najafi, G. (2016). Response surface methodology (RSM) based optimization of biodiesel-diesel blends and investigation of their effects on diesel engine operating conditions and emission characteristics (Vol. 15).
- [3] Motamedifar, N., & Shirneshan, A. (2018). An experimental study of emission characteristics from cylindrical furnace: Effects of using diesel-ethanol-biodiesel blends and air swirl. *Fuel*, 221, 233-239. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.01.018>
- [4] Enagi, I. I., Al-attab, K. A., & Zainal, Z. A. (2018). Liquid biofuels utilization for gas turbines: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 90, 43-55. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.006>

- [5] Wei, L., Cheung, C. S., & Ning, Z. (2018). Effects of biodiesel-ethanol and biodiesel-butanol blends on the combustion, performance and emissions of a diesel engine. *Energy*, 155, 957-970. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.05.049>
- [6] Corro, G., Sánchez, N., Pal, U., & Bañuelos, F. (2016). Biodiesel production from waste frying oil using waste animal bone and solar heat. *Waste Management*, 47, 105-113. doi: <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.02.001>
- [7] Iastiaque Martins, G., Secco, D., Kazue Tokura, L., Aparecido Bariccatti, R., Dresch Dolci, B., & Ferreira Santos, R. (2015). Potential of tilapia oil and waste in biodiesel production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42, 234-239. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.10.020>
- [8] Mahesh, S. E., Ramanathan, A., Begum, K. M. M. S., & Narayanan, A. (2015). Biodiesel production from waste cooking oil using KBr impregnated CaO as catalyst. *Energy Conversion and Management*, 91, 442-450. doi: <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2014.12.031>
- [9] Sahar, Sadaf, S., Iqbal, J., Ullah, I., Bhatti, H. N., Nouren, S., . . . Iqbal, M. (2018). Biodiesel production from waste cooking oil: An efficient technique to convert waste into biodiesel. *Sustainable Cities and Society*, 41, 220-226. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scs.2018.05.037>
- [10] Xu, Y.-J., Li, G.-X., & Sun, Z.-Y. (2016). Development of biodiesel industry in China: Upon the terms of production and consumption. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 54, 318-330. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.10.035>
- [11] Knothe, G. (2010). 9 - Other Uses of Biodiesel. In G. Knothe, J. Krahl & J. Van Gerpen (Eds.), *The Biodiesel Handbook (Second Edition)* (pp. 401-403): AOCS Press.
- [12] Kim, H., & Choi, B. (2010). The effect of biodiesel and bioethanol blended diesel fuel on nanoparticles and exhaust emissions from CRDI diesel engine. *Renewable Energy*, 35(1), 157-163. doi: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2009.04.008>
- [13] Zhang, Z.-H., & Balasubramanian, R. (2016). Investigation of particulate emission characteristics of a diesel engine fueled with higher alcohols/biodiesel blends. *Applied Energy*, 163, 71-80. doi: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.10.173>
- [14] Ali, O., Mamat, R., Abdullah, N., & Adam, A. (2016). Analysis of blended fuel properties and engine performance with palm biodiesel–diesel blended fuel (Vol. 86).
- [15] Gogoi, T. K., & Baruah, D. C. (2010). A cycle simulation model for predicting the performance of a diesel engine fuelled by diesel and biodiesel blends. *Energy*, 35(3), 1317-1323. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2009.11.014>
- [16] Jaichandar, S., & Annamalai, K. (2013). Combined impact of injection pressure and combustion chamber geometry on the performance of a biodiesel fueled diesel engine. *Energy*, 55, 330-339. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2013.04.019>
- [17] Broatch, A., Tormos, B., Olmeda, P., & Novella, R. (2014). Impact of biodiesel fuel on cold starting of automotive direct injection diesel engines. *Energy*, 73, 653-660. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2014.06.062>
- [18] Torregrosa, A. J., Broatch, A., Plá, B., & Mónico, L. F. (2013). Impact of Fischer–Tropsch and biodiesel fuels on trade-offs between pollutant emissions and combustion noise in diesel engines. *Biomass and Bioenergy*, 52, 22-33. doi: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2013.03.004>
- [19] Chauhan, B. S., Kumar, N., & Cho, H. M. (2012). A study on the performance and emission of a diesel engine fueled with *Jatropha* biodiesel oil and its blends. *Energy*, 37(1), 616-622. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2011.10.043>



- [20] Pang, X., Shi, X., Mu, Y., He, H., Shuai, S., Chen, H., & Li, R. (2006). Characteristics of carbonyl compounds emission from a diesel-engine using biodiesel–ethanol–diesel as fuel. *Atmospheric Environment*, 40(36), 7057-7065. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2006.06.010>
- [21] Shi, X., Yu, Y., He, H., Shuai, S., Dong, H., & Li, R. (2008). Combination of biodiesel-ethanol-diesel fuel blend and SCR catalyst assembly to reduce emissions from a heavy-duty diesel engine. *Journal of Environmental Sciences*, 20(2), 177-182. doi: [https://doi.org/10.1016/S1001-0742\(08\)60028-5](https://doi.org/10.1016/S1001-0742(08)60028-5)
- [22] Di, Y., Cheung, C. S., & Huang, Z. (2009). Comparison of the effect of biodiesel-diesel and ethanol-diesel on the gaseous emission of a direct-injection diesel engine. *Atmospheric Environment*, 43(17), 2721-2730. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2009.02.050>
- [23] Hulwan, D. B., & Joshi, S. V. (2011). Performance, emission and combustion characteristic of a multicylinder DI diesel engine running on diesel–ethanol–biodiesel blends of high ethanol content. *Applied Energy*, 88(12), 5042-5055. doi: <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2011.07.008>
- [24] Agarwal, A. K., Chandra Shukla, P., Patel, C., Gupta, J. G., Sharma, N., Prasad, R. K., & Agarwal, R. A. (2016). Unregulated emissions and health risk potential from biodiesel (KB5, KB20) and methanol blend (M5) fuelled transportation diesel engines. *Renewable Energy*, 98, 283-291. doi: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.03.058>
- [25] Jedynska, A., Tromp, P. C., Houtzager, M. M. G., & Kooter, I. M. (2015). Chemical characterization of biofuel exhaust emissions. *Atmospheric Environment*, 116, 172-182. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2015.06.035>
- [26] Shen, X., Shi, J., Cao, X., Zhang, X., Zhang, W., Wu, H., & Yao, Z. (2018). Real-world exhaust emissions and fuel consumption for diesel vehicles fueled by waste cooking oil biodiesel blends. *Atmospheric Environment*, 191, 249-257. doi: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2018.08.004>
- [27] Xue, J., Grift, T. E., & Hansen, A. C. (2011). Effect of biodiesel on engine performances and emissions. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 15(2), 1098-1116. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.11.016>
- [28] Hwang, J., Bae, C., & Gupta, T. (2016). Application of waste cooking oil (WCO) biodiesel in a compression ignition engine. *Fuel*, 176, 20-31. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.02.058>
- [29] Ambekar, A., Maurya, A. K., & Chowdhury, A. (2018). Droplet combustion studies of nitromethane and its blends. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 93, 431-440. doi: <https://doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2018.01.026>
- [30] Presles, H. N., Desbordes, D., Guirard, M., & Guerraud, C. (1996). Gaseous nitromethane and nitromethane-oxygen mixtures: A new detonation structure. *Shock Waves*, 6(2), 111-114. doi: [10.1007/BF02515194](https://doi.org/10.1007/BF02515194)
- [31] Brackmann, C., Nauc ler, J. D., El-Busaidy, S., Hosseinia, A., Bengtsson, P.-E., Konnov, A. A., & Nilsson, E. J. K. (2018). Experimental studies of nitromethane flames and evaluation of kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 190, 327-336. doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.12.011>
- [32] Germane, G. J. (1985). A Technical Review of Automotive Racing Fuels. *SAE Transactions*, 94, 867-878.
- [33] Ambekar, A., Bhangale, R., Chatterjee, R., Kulkarni, C., Kumar, S., & Chowdhury, A. (2015). Glow-plug-assisted combustion of nitromethane sprays in a constant volume chamber. *Applied Thermal Engineering*, 76, 462-474. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2014.11.043>
- [34] Menikoff, R., & Shaw, M. S. (2011). Modeling detonation waves in nitromethane. *Combustion and Flame*, 158(12), 2549-2558. doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.05.009>

- [35] Zhang, Q., Li, W., Lin, D.-C., He, N., & Duan, Y. (2011). Influence of nitromethane concentration on ignition energy and explosion parameters in gaseous nitromethane/air mixtures. *Journal of Hazardous Materials*, 185(2), 756-762. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.09.085>
- [36] Bouyer, V., Darbord, I., Hervé, P., Baudin, G., Le Gallic, C., Clément, F., & Chavent, G. (2006). Shock-to-detonation transition of nitromethane: Time-resolved emission spectroscopy measurements. *Combustion and Flame*, 144(1), 139-150. doi: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.07.004>
- [37] Leal-Crouzet, B., Baudin, G., & Presles, H. N. (2000). Shock initiation of detonation in nitromethane. *Combustion and Flame*, 122(4), 463-473. doi: [https://doi.org/10.1016/S0010-2180\(00\)00132-2](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(00)00132-2)
- [38] Hardesty, D. R. (1976). An investigation of the shock initiation of liquid nitromethane. *Combustion and Flame*, 27, 229-251. doi: [https://doi.org/10.1016/0010-2180\(76\)90026-2](https://doi.org/10.1016/0010-2180(76)90026-2)
- [39] Kachel, K., Siche, D., Golka, S., Sennikov, P., & Bickermann, M. (2016). FTIR exhaust gas analysis of GaN pseudo-halide vapor phase growth. *Materials Chemistry and Physics*, 177, 12-18. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.03.010>
- [40] Asgari, N., Ahmed, S. F., Farouk, T. I., & Padak, B. (2017). NO<sub>x</sub> formation in post-flame gases from syngas/air combustion at atmospheric pressure. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(38), 24569-24579. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.08.017>
- [41] Corro, G., Sánchez, N., Pal, U., & Bañuelos, F. (2016). Biodiesel production from waste frying oil using waste animal bone and solar heat. *Waste Management*, 47, 105-113. doi: <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.02.001>
- [42] Najafi, G. (2018). Diesel engine combustion characteristics using nano-particles in biodiesel-diesel blends. *Fuel*, 212, 668-678. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.10.001>
- [43] Wei, L., Cheung, C. S., & Ning, Z. (2018). Effects of biodiesel-ethanol and biodiesel-butanol blends on the combustion, performance and emissions of a diesel engine. *Energy*, 155, 957-970. doi: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.05.049>
- [44] Flórez Montoya, A. A., & Rojas, A. F. (2011). Efecto de la proporción de mezclas biodiesel/petrodiesel en el desempeño mecánico-ambiental de motores. *INGENIERÍA Y COMPETITIVIDAD*(2), 107-115% V 111. doi: 10.25100/iyc.v11i2.2465
- [45] Couso, I., Strauss, O., & Saulnier, H. (2018). Kendall's rank correlation on quantized data: An interval-valued approach. *Fuzzy Sets and Systems*, 343, 50-64. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fss.2017.09.003>
- [46] Ge, J. C., Kim, H. Y., Yoon, S. K., & Choi, N. J. (2018). Reducing volatile organic compound emissions from diesel engines using canola oil biodiesel fuel and blends. *Fuel*, 218, 266-274. doi: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.01.045>
- [47] Deng, W., Hu, Q., Liu, T., Wang, X., Zhang, Y., Song, W., . . . George, C. (2017). Primary particulate emissions and secondary organic aerosol (SOA) formation from idling diesel vehicle exhaust in China. *Science of The Total Environment*, 593-594, 462-469. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.03.088>