



Title: Importancia del n-butanol y su aplicación al modelado de procesos de combustión

Author: Juan, PRINCE-AVELINO, Mario, DÍAZ-GONZÁLEZ, Abelardo,
RODRÍGUEZ-LEÓN, Guillermo, OVANDO-CHACÓN

Editorial label ECORFAN: 607-8534
BCIERMMI Control Number: 2018-03
BCIERMMI Classification (2018): 251018-0301

Pages: 11
RNA: 03-2010-032610115700-14

ECORFAN-México, S.C.

244 – 2 Itzopan Street
La Florida, Ecatepec Municipality
Mexico State, 55120 Zipcode
Phone: +52 1 55 6159 2296
Skype: ecorfan-mexico.s.c.
E-mail: contacto@ecorfan.org
Facebook: ECORFAN-México S. C.

Twitter: @EcorfanC

www.ecorfan.org

Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic Republic
Spain	El Salvador	Republic of Congo
Ecuador	Taiwan	
Peru	Paraguay	Nicaragua



Introducción

Instituto Tecnológico de Veracruz

- **La combustión es la principal fuente de energía en el mundo (85 % a través de combustibles fósiles), pero también es el proceso que mayores contaminantes produce.**
- **El butanol es una alternativa prometedora que puede usarse en motores de combustión interna en mezclas mas altas que el etanol**
- **Tiene un creciente interés de investigación**
- **Tiene gran diversidad de reacciones químicas**
- **No toda la química de combustión está bien entendida**
- **Mediciones y simulaciones han arrojado resultados contradictorios**

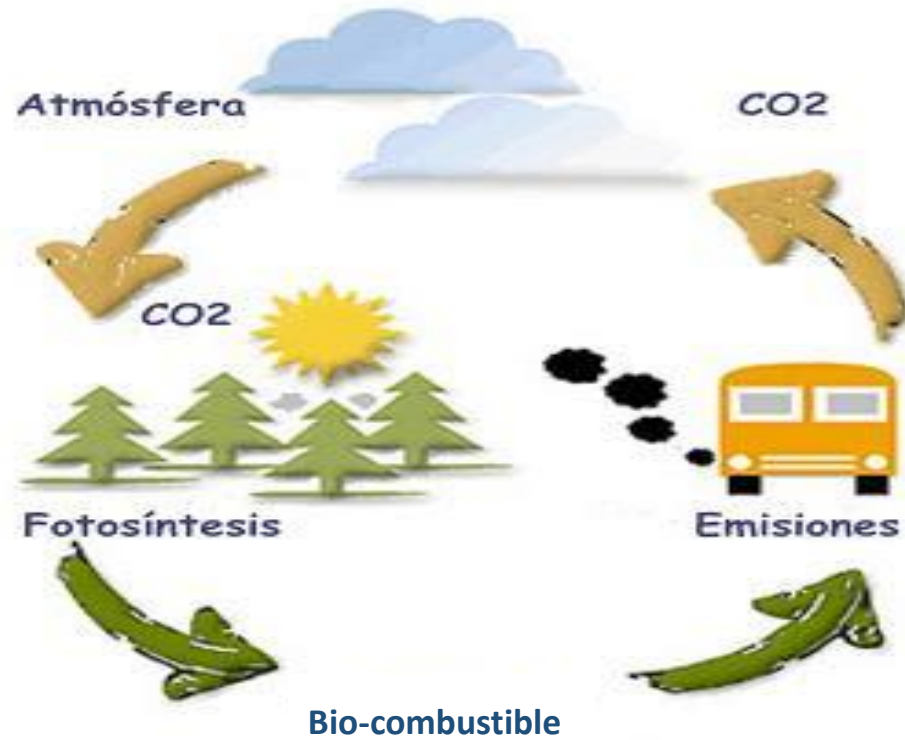
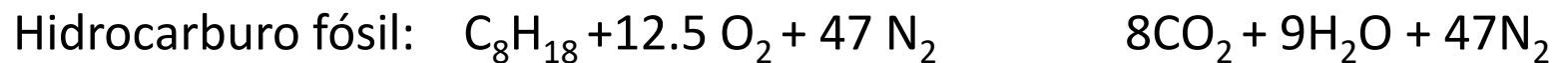
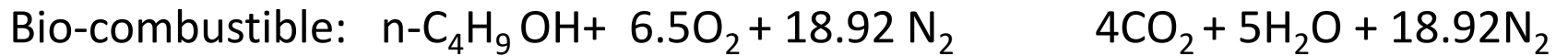


Figura 1: Ciclo neutro del CO₂





Instituto Tecnológico de Veracruz

Bio-combustibles

- Bio-combustibles de primera generación

Son aquellos fabricados a partir de:

- ✓ **Bioetano:** azúcar o almidón
- ✓ **Biodiesel:** aceites vegetales o grasas animales

- Bio-combustibles de segunda generación

Son aquellos fabricados a partir de:

- ✓ **Biomasa:** desechos agrícolas o madereros

(No compiten con la producción de alimentos)



Desarrollo del modelo de combustión



Instituto Tecnológico de Veracruz

Combustión: dinámica de fluidos que reaccionan químicamente, comprende áreas interdisciplinarias como termodinámica, mecánica de fluidos y cinética química. Desarrollo y validación de modelos químicos reducidos con FlameMaster y CHEMKIN II.

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p u \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_{k=1}^N h_i w_i \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u \frac{\partial Y_i}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial x} (\rho Y_i V_i) + w_i \quad (2)$$

$$\omega_i = \sum_{j=1}^M K_j(T) \nu'_{ij} \prod_{k=1}^N C_k^{\nu_{kj}}$$

$$K_j(T) = B_j T^{\alpha_j} \exp(-E_j / RT)$$



Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables,
Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática



Metodología

Instituto Tecnológico de Veracruz

1. Para establecer el mecanismo cinético a temperaturas altas, se parte del mecanismo de San Diego (UCSD mech con 48 especies químicas y 240 reacciones, validado para C0-C3) y diversos trabajos publicados con mecanismos detallados (H. Curran y E. Ranzi) de alrededor de 3000 reacciones y cientos de especies.
2. Después, con análisis de sensibilidad, el tamaño del mecanismo detallado fue reducido al eliminar sistemáticamente las especies y reacciones que tienen muy poca influencia en los fenómenos de combustión (llamas e ignición).
3. Se eliminaron especies químicas en estado estacionario
4. El análisis se hizo en el software libre FlameMaster.
5. Los resultados son comparados, con diversos experimentos reportados en la literatura hechos e tubos de choque (STD) con $T > 1000$ K y de propagación de llamas para diferentes mezclas de aire/combustible.



**Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables,
Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática**



Resultados

- Finalmente se agregaron solo 14 reacciones para el 1-butanol y 6 especies químicas al mecanismo de la Universidad de California, San Diego, San Diego mech (240 reacciones y 45 especies)
- Resultando un mecanismo de 254 reacciones y solo 6 especies nuevas que generan tiempos de ignición a altas temperaturas y velocidades de llamas comparables a los reportados por los experimentos.





Tabla 1: Mecanismo reducido de combustión del n-butanol y sus constantes de reacción K_j (mol, cm³, s, kcal, K



Instituto Tecnológico de Veracruz

No.	Reacción	B_j	α_j	E_j
1	NC₄H₉OH (+M) \leftrightarrow NC ₃ H ₇ + CH ₂ OH(+M)	3.02E+23	-1.88	85710
2	NC ₄ H ₉ OH+O ₂ \leftrightarrow C₄H₈OH-1 +HO ₂	2.00E+13	0.00	46800
3	NC ₄ H ₉ OH+HO ₂ \leftrightarrow C ₄ H ₈ OH-1+H ₂ O ₂	6.00E+12	0.00	16000
4	NC ₄ H ₉ OH+O \leftrightarrow C ₄ H ₈ OH-1+OH	1.45E+05	2.47	876
5	NC ₄ H ₉ OH+OH \leftrightarrow C ₄ H ₈ OH-1+H ₂ O	5.56E+10	0.500	-380
6	NC ₄ H ₉ OH+H \leftrightarrow C ₄ H ₈ OH-1+H ₂	1.79E+05	2.530	3420
7	C ₄ H ₈ OH-1 \leftrightarrow CH ₃ CHO+C ₂ H ₅	3.00E+11	0.000	31000
8	C ₄ H ₈ OH-1+O ₂ \leftrightarrow CH ₂ CO+C ₂ H ₆ +HO ₂	4.40E+11	0.000	5000
9	C ₄ H ₈ OH-1+O ₂ \leftrightarrow C₄H₈OH-1O₂	1.00E+12	0.000	0.000
10	C ₄ H ₈ OH-1O ₂ \leftrightarrow CO+C ₂ H ₆ +CH ₂ O+OH	2.50E+11	0.000	25000
11	C ₄ H ₈ OH-1O ₂ \leftrightarrow C₄H₇OH-1OOH-4	4.69E+09	0.000	21950
12	C ₄ H ₇ OH-1OOH-4+O ₂ \leftrightarrow C₄H₇OH-1OOH-4O₂	4.52E+12	0.000	0.000
13	C ₄ H ₇ OH-1OOH-4O ₂ \leftrightarrow C₄OHKET1-4 +OH	1.56E+09	0.000	13650
14	C ₄ OHKET1-4 \leftrightarrow C ₂ H ₄ +H+CO ₂ +CH ₂ O+OH	1.00E+16	0.000	39000



Congreso Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática

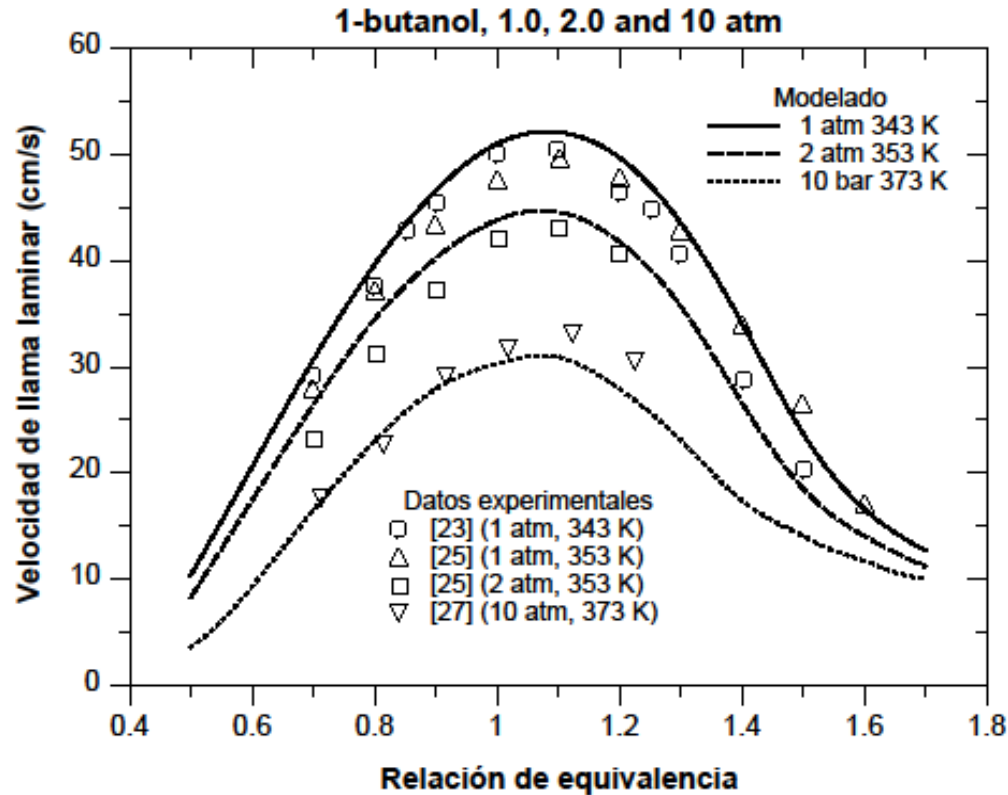


Figura 2: Comparación de las velocidades de llama medidas y calculadas para una mezcla de n-butanol/Aire.

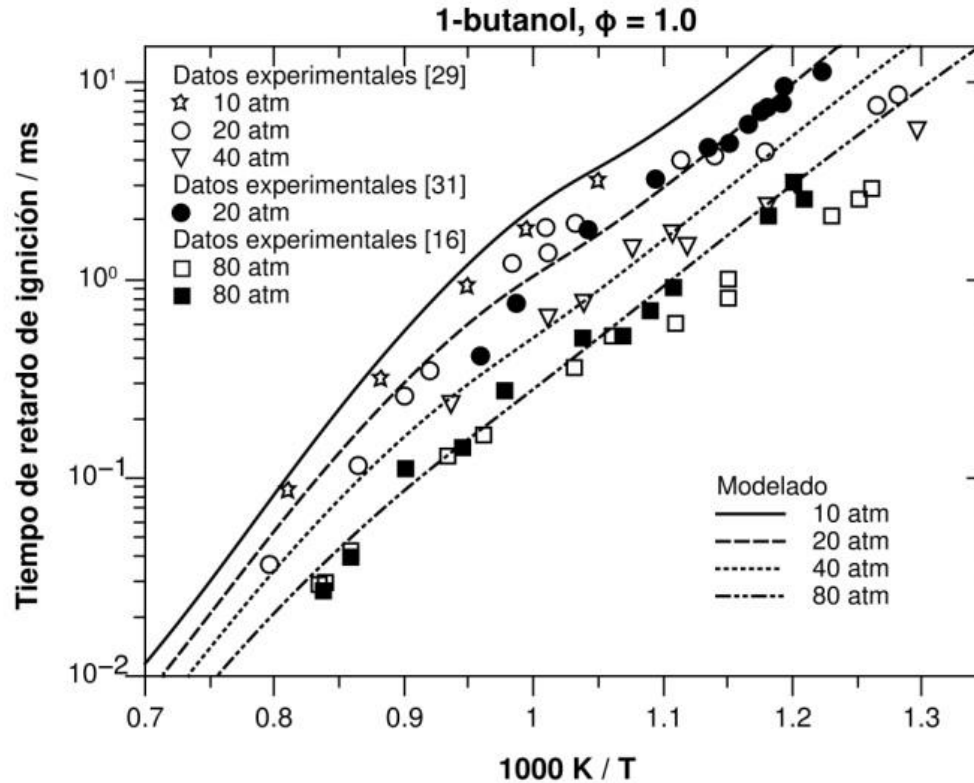


Figura 3: Tiempo de ignición para mezcla de n-butanol/Aire a diferentes presiones para $\phi = 1.0$

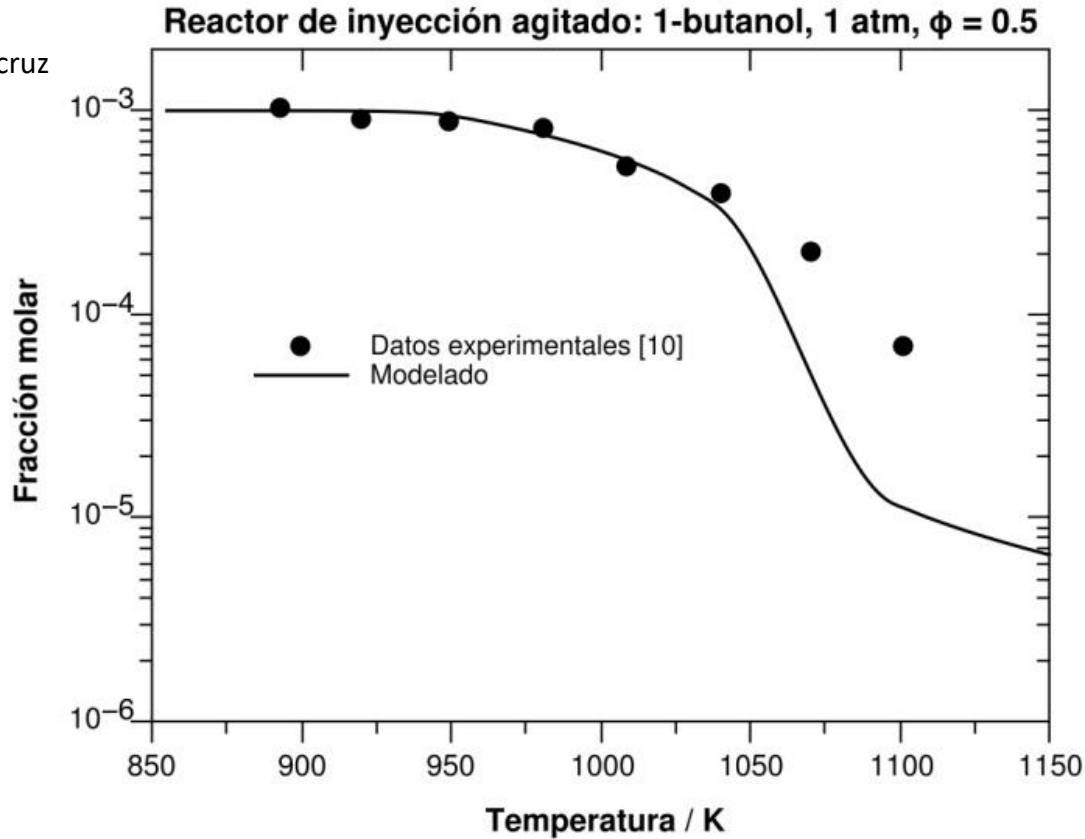


Figura 4: Concentración de n-butanol, a 1 atm, en función de la temperatura para $\phi = 0.5$ en JSR



Conclusiones

Instituto Tecnológico de Veracruz

Se describió la importancia de los biocombustibles: Balance neutro del CO_2 , producción y consideraciones de uso.

También se ha mostrado que agregando un conjunto relativamente pequeño de reacciones y especies al mecanismo químico reducido de UC San Diego, es posible modelar la combustión del n-butanol. La metodología toma en cuenta extensa literatura reciente sobre la cinética química de este bio-combustible.

Para obtener este mecanismo corto y de fácil uso, en el presente trabajo se eliminaron todas aquellas especies químicas y reacciones de menor importancia así como eliminación de especies en estado estacionario.

Ninguno de los parámetros químicos finales fue escogido arbitrariamente para ajustarse a los datos experimentales; todos ellos fueron tomados directamente de la literatura.

El mecanismo reducido resultante produce muy buenos resultados al compararlos contra datos experimentales de propagación de llamas, tiempos de ignición y reactores de inyección agitado, para mezclas de n-butanol/aire.



ECORFAN®

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIERMMI is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- (www.ecorfan.org/ booklets)