

Análisis Estructural del Reactor de Pirólisis

Guillermo A Santiago Ramos
Maestría en Ingeniería en Ingeniería Mecánica
Advisor: Hugo Peláez Carpio, Ph.D.
Polytechnic University of Puerto Rico
Graduate Project EXPO, October 2024

Resumen — Este proyecto explora el diseño y el análisis térmico de un reactor para el proceso de pirólisis rápida utilizando tres materiales diferentes: acero AISI 4340, aluminio 6063-T86 y níquel. Mediante simulaciones en COMSOL, se evaluaron el estrés, la distribución de temperatura y el desplazamiento del reactor bajo condiciones de calor y diferentes presiones internas. Los resultados demostraron que el acero AISI 4340 mantiene la integridad estructural a temperaturas deseadas para la pirólisis rápida; en cambio, el aluminio presenta una deformación significativa, y el níquel falla a temperaturas más bajas. La investigación valida el uso del acero AISI 4340 como el mejor material para este tipo de aplicaciones, aunque se observó que un aumento en la presión a 20 atm podría comprometer su integridad.

Términos clave — Deformación, estrés, pirólisis, transferencia de calor.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En Puerto Rico, al igual que en otras partes del mundo enfrentamos un serio problema de contaminación debido a los desperdicios sólidos. En la isla, se genera alrededor de 5.5lb (2.53kg) de basura por persona diariamente, una cantidad que supera en 79% el promedio mundial, agravando el problema. De estos desperdicios al menos 35% es reciclable pero solo se recicla un promedio de 11% [1].

Esta problemática no solo es de Puerto Rico, si no que se repite a nivel global. Las formas tradicionales de reciclaje no son suficiente para hacerle frente a la creciente demanda. Ante este escenario, se están explorando nuevas formas de reciclaje y una de ellas es el reciclaje químico. Este método emplea calor y presión para descomponer el

material siendo reciclado, ayudando en la reducción de desperdicios sólidos.

La pirólisis, un tipo de reciclaje químico, ocurre dentro de un reactor a varios rangos de temperatura lograr obtener el producto deseado. En esta investigación se estudiará el efecto de la temperatura en el reactor a un rango de 600°C a 900°C, ya que esto produce estrés en el reactor. Las cargas y sus efectos van a depender de los materiales de construcción del reactor y sus propiedades. Se efectuará un estudio estructural al reactor con el acero 4340, níquel y con el aluminio 6063 como materiales de construcción.

Objetivos de la Investigación (Hipótesis)

En esta investigación queremos responder:

- ¿Es el acero AISI 4340 una mejor opción para la construcción del reactor que el aluminio 6063-T86 y el níquel?
- ¿El aumento de la presión a 20 atm impacta negativamente el rendimiento del material?

Contribuciones a la Investigación

Contribuye a los avances de los estudios del reciclaje químico y la pirólisis. Desempeña un papel importante para el futuro desarrollo de la industria del reciclaje. Este estudio añade una nueva referencia para futuras investigaciones sobre los reactores utilizados en el proceso de pirólisis.

REVISIÓN DE LA LITERATURA

¿Cuándo se inventó el plástico? ¿Cuándo se convirtió en uno de los materiales más comúnmente utilizados? La invención del plástico comenzó a mediados del siglo XIX, durante una escasez de materiales derivados de animales. En plena industrialización, se inició la búsqueda de materiales

semi-sintéticos con el propósito de reemplazar los que escaseaban.

En tiempos más modernos, el procesamiento del petróleo crudo y gas natural fue lo que llevó al descubrimiento de un polímero llamado polietileno, que hoy día es el plástico más utilizado y abundante. Este polímero se encuentra en todo nuestro entorno, desde utensilios para el hogar hasta aplicaciones en el ámbito médico [2].

Lamentablemente, las características que inicialmente favorecieron el desarrollo industrial, su durabilidad y facilidad de producción, son las mismas que lo han convertido en una amenaza para el medio ambiente. Su composición dificulta su degradación, lo que provoca su acumulación en el océano, vertederos y en muchos otros lugares en nuestro planeta [2].

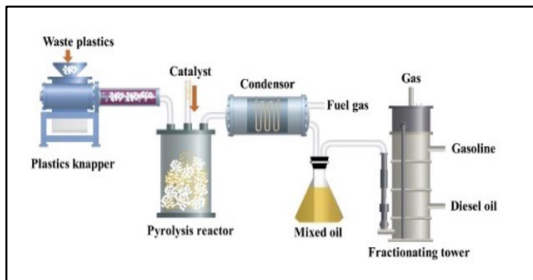


Figura 1

Configuración General de un Sistema de Pirólisis [3]

El reciclaje convencional no puede cumplir con la demanda de material polímero que se necesita procesar. Una alternativa para el reciclaje de estos materiales es el reciclaje químico, Figura 1. Este proceso convierte los plásticos y otros materiales en sustancias útiles y/o combustibles [4]. A diferencia del reciclaje tradicional, el reciclaje químico descompone el polímero a un nivel molecular, devolviéndolo a su estado original o a un estado más primitivo en forma líquida, sólida y/o gaseosa. Esto nos permite reutilizar el material, ya sea para fabricar el mismo producto o como materia prima para crear nuevos productos y en combustibles sostenibles.

La temperatura es el principal atributo para el proceso de pirólisis. Dependiendo de ésta, podemos obtener tres tipos de derivados del plástico: combustible sólido (carbón), líquido (algún tipo de combustible) y gaseoso (hidrocarburos) [5]. Para

tener más éxito en la obtención del derivado deseado se han identificado tres métodos de pirólisis. El primer método es la pirólisis lenta, que opera a una temperatura menor de 500°C y produce principalmente combustible sólido. El segundo método es la pirólisis rápida, con un rango de temperatura entre 600°C y 999°C [6] y maximiza la producción de aceite, el cual puede procesarse y refinarse para diferentes usos [7]. El tercer método es la pirólisis flash, que implica un calentamiento a más de 1000°C/s y un tiempo de reacción de solo unos segundos.

Todo este proceso ocurre en el reactor, el cual debe cumplir con los parámetros estructurales necesarios y resistir los diferentes tipos de pirólisis. El reactor no solo estará expuesto a las altas temperaturas, sino a otras condiciones, como reacciones químicas que son altamente corrosivas [8]. Otras características que se buscan en el material son resistencia térmica, durabilidad y resistencia a la tracción.

El acero inoxidable es uno de los materiales más utilizados en aplicaciones que requiere propiedades de resistencia térmica, durabilidad, resistencia a la tracción y corrosión. Sin embargo, podemos buscar otros materiales que tengan estas propiedades y evaluarlas como una opción para el proceso. Materiales como el níquel, que posee cualidades anticorrosivas y es utilizado en aplicaciones en las que pueden contener altas temperaturas, son opciones para considerar [9]. Además, materiales como la aleación de acero AISI 4340, el aluminio 6063 y el níquel, son resistentes a corrosión y tienen buena capacidad de transferencia de calor. El acero AISI 4340 es reconocido por su dureza, fuerza y durabilidad, siendo utilizado en aplicaciones automotrices y aeroespaciales, herramientas, transmisiones, entre otros [10].

Por su parte, el aluminio 6063 se destaca por su resistencia, baja densidad, capacidad anticorrosiva y excelente conductividad térmica. Es un material flexible en su uso y se utiliza para construcción, en la industria automotriz, entre otros. El níquel es un material completamente flexible que tiene

diversidad de aplicaciones desde las cotidianas a más técnicas.

El reactor es el componente central donde ocurre todo el proceso de pirólisis, lo que lo convierte en la parte más importante del sistema. Esta es una de las razones por las cuales el estudio de su diseño y materiales es crucial para el desarrollo de esta tecnología. En esta investigación, se analizamos materiales con características similares para evaluar otras alternativas.

METODOLOGÍA

El reciclaje químico, específicamente el método de pirólisis nos provee la flexibilidad de ajustar el proceso para facilitar la obtención del derivado deseado. El proceso principal ocurre en el reactor (véase Figura 1). En el reactor se desarrolla el proceso de pirólisis, y debido a esto, alcanza temperaturas entre 600°C a 1000°C para descomponer el plástico y obtener derivados como gasolina, queroseno y/o diésel. A esta temperatura se le suman las reacciones químicas internas, las cuales no se toman en consideración en este análisis, y la presión. Como resultado de estas fuerzas aplicadas, se espera que la estructura del reactor se vea afectada debido al estrés y tensiones.

En este estudio vamos a modelar un Reactor Catalítico Poroso con Aguja de Inyección, Figura 2, que fue seleccionado ya que está relacionado a otra investigación sobre la pirólisis. Además, el mismo estaba disponible en el programa de simulación de Comsol.

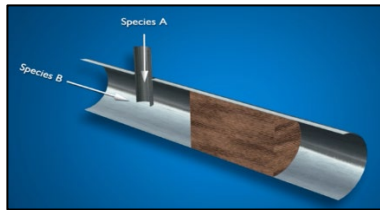


Figura 2
Modelo de Reactor Poroso con Aguja de Inyección
incluyendo Catalítico [11]

El reactor cuenta con un lado de inserción del material y en el lado opuesto, un catalizador de cloruro de níquel, el cual se utilizará para acelerar el

proceso de descomposición del PET. El reactor no contine oxígeno y tendrá un flujo interno de nitrógeno (“Species B”), en su forma gaseosa, para facilitar el movimiento del material PET (“Species A”), Figura 2, siendo inyectado por la aguja hacia el catalítico.

Objetivos

Analizar el efecto que tiene la temperatura y la presión sobre la estructura en el reactor utilizando un programa de simulación. Evaluar el comportamiento de estrés y otras reacciones relacionadas con el tiempo y la temperatura en los materiales de construcción del reactor.

Técnicas de Análisis

En este análisis utilizamos COMSOL como herramienta de modelado y simulación de sistemas multi-físicos que fue recientemente incorporado en la universidad y aun no empleado para este tipo de estudios. COMSOL nos permitió simular el sistema establecido, obtener resultados a lo largo del tiempo, y visualizar los efectos que la temperatura y presión ejercen sobre el reactor. Además, facilita la presentación clara de los resultados.

Algunas de las ecuaciones teóricas que se utilizaran en el análisis son las de estrés, transferencia de calor incluyendo convección y conducción.

Ecuación de estrés:

$$\sigma dt = \int E\alpha\Delta T(dt) \quad (1)$$

Donde: ∂t = connotación del tiempo, E = el Módulo de Young, α = Coeficiente de expansión termal, ΔT = cambio en temperatura $T_2 - T_1$.

Ecuación Transferencia de calor:

$$Q = mc\Delta T \quad (2)$$

Donde: m = masa del sistema, c = calor específico del material, ΔT = cambio de temperatura [12].

Ecuación de Conducción:

$$Q = kA \frac{dT}{dx} \quad (3)$$

Donde k = conductividad termal del material, A = área de superficie, $\frac{dT}{dx}$ = gradiente de temperatura [12].

Convección:

$$Q = h_c A \Delta t \quad (4)$$

Donde h_c = coeficiente de convección, A = área superficial, Δt = diferencia de temperatura [13].

En las mismas, el calor es la variable que cambiará respecto al tiempo y con la que se medirá el estrés. Las constantes y áreas se calcularán utilizando la biblioteca de materiales del programa COMSOL.

El material de construcción del reactor es uno de los componentes que se va a variar para los diferentes escenarios de estudio. Se utilizará el acero AISI 4340, aluminio 6063 y el níquel en su forma natural. Otros materiales que se incluyen en el estudio son el Tereftalato de Polietileno (PET), el nitrógeno.

Tabla 1
Propiedades del Cloruro de Níquel [14]

Cloruro de Níquel		
Densidad	3.51	g/cc
Calor específico	0.5532	J/g-°C

En cuanto al catalizador de Cloruro de Níquel se va a complementar con las propiedades presentadas en la Tabla 1. Como fuera establecido anteriormente, la mayoría de las propiedades de los materiales fueron provistas por el programa de simulación. Sin embargo, al catalizador le estaremos añadiendo la densidad y el calor específico, toda vez que la librería no los contiene.

Además, estaremos haciendo los mismos escenarios variando la presión. En los primeros casos se estará utilizando 1atm y luego se elevará a 20atm y se medirá su efecto en el reactor. La presión tiene una relación directa en el producto que queremos obtener. En el caso que estamos estudiando queremos obtener la mayor cantidad posible de combustible líquido y aumentar la presión ayuda a crear las condiciones idóneas para ese propósito.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para la validación del modelo del reactor se utilizó el estudio titulado “A novel investigation using thermal modeling and optimization of waste pyrolysis reactor using finite element analysis and response surface methodology” para hacer la comparación del comportamiento de la temperatura y el estrés [12].

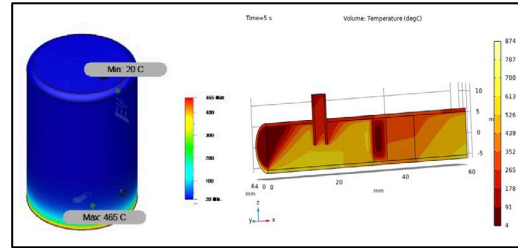


Figura 3
Contorno de Temperatura de Estudio de Referencia y Comparación de Modelo Utilizado [12]

En la Figura 3 se puede apreciar que el comportamiento de la temperatura es similar ya que ambas tienen la fuente de calor en la misma posición. La diferencia más notable entre el modelo utilizado en esta investigación y el de la referencia, es la orientación. El de referencia es vertical y el de esta investigación es horizontal. Se puede comparar el comportamiento del contorno de temperatura que son similares.

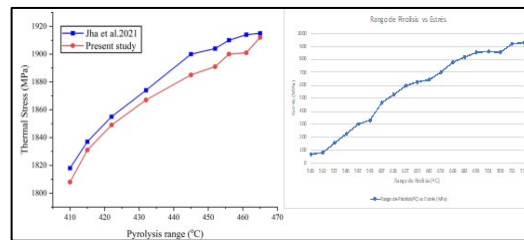


Figura 4
Comparación Resultados Experimento Referencia vs Actual [12]

En la Figura 4 se demuestra que el comportamiento de la temperatura es directamente proporcional con el estrés. Aunque los reactores son diferentes se puede comprobar el mismo comportamiento en ambos estudios. La discrepancia del modelo de reactor es el que crea que las gráficas no sean completamente iguales.

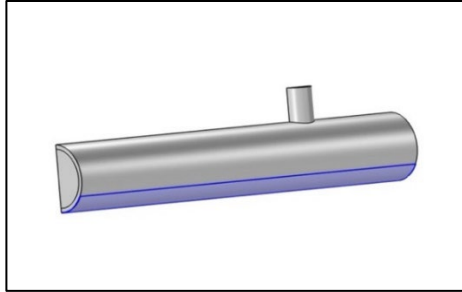


Figura 5
Área de Aplicación de Flujo de Calor

En la Figura 5 se ilustra la aplicación de calor en el reactor como referencia. Con esta comparación del comportamiento del calor y estrés el modelo se valida.

Resultados

Se creó un dibujo representativo del modelo del reactor horizontal con dos entradas y un catalítico para el proceso de pirólisis.

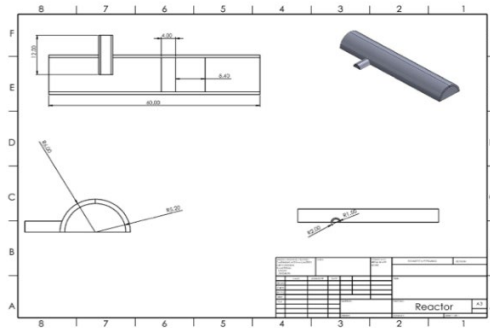


Figura 6
Dibujo de Diseño del Reactor

Este dibujo, Figura 6, contiene las medidas del reactor que son 60mm de largo, un diámetro externo de 6mm y un diámetro interno de 5.2mm en el reactor. La entrada de aguja tiene un diámetro externo de 4mm y un grosor de 0.5mm. Además, dentro del reactor se simula el área del PET con 4mm y el catalítico de 8.40mm.

Como fuera mencionado en la metodología, este estudio se basa en el efecto de las altas temperaturas en el reactor durante el proceso de pirólisis de método rápido. Donde se espera tener temperaturas entre los 600°C a 900°C. Para observar este efecto, se les aplicaron las mismas condiciones a todos los modelos, variando el material de construcción entre aluminio 6063, acero AISI 4340 y níquel.

Las condiciones internas se mantuvieron constantes. El reactor tiene un flujo de Nitrógeno constante de 20cm/s y una temperatura de 300K. En la entrada de aguja, se mantuvo el mismo flujo y también una temperatura de 300K. Se colocó internamente la representación del PET en el área antes del catalizador.

Se tomó un área en la parte baja del reactor, ver Figura 5, para la aplicación de un flujo constante de calor de 100W. El programa de COMSOL facilitó la simulación para obtener el estrés, distribución de temperatura y el desplazamiento del reactor en tiempo determinado.

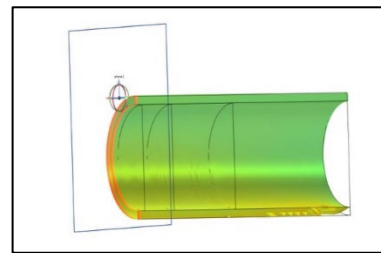


Figura 7
Corte de Plano de Modelo para Análisis

En las próximas figuras se van a mostrar los resultados de los diferentes materiales. Se comenzó con el acero AISI 4340. Para determinar el comportamiento real del estrés sin el efecto de las “singularidades” se utilizó un corte de plano vertical en el área antes de la representación del PET, ver Figura 7.

En la metodología se estableció el rango de temperatura para el análisis. El material AISI 4340 llega a ese rango a los 20s, como demostrado en la Figura 8, y tiene un estrés de alrededor de 900MPa. Este también presenta una deformación de 0.3mm a esta temperatura.

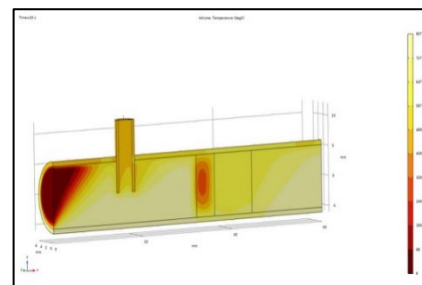


Figura 8
Contorno de Temperatura del Acero AISI 4340 a 20s

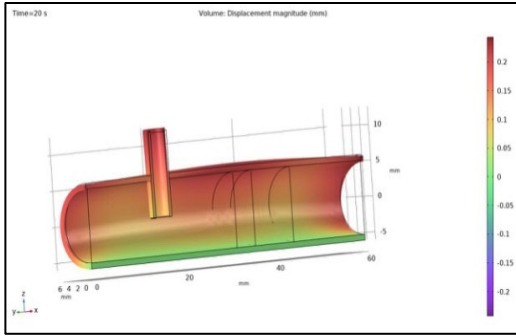


Figura 9
Contorno de Desplazamiento AISI 4340 con un Factor de Escala de 3

En la Figura 9 se ilustra el comportamiento, el cual se aumentó por un factor de 3 para la demostración del desplazamiento. En este rango el estrés se mantiene por debajo de su límite de quebranto a 1100MPa.

Cuando presentamos el mismo análisis variando la presión de 1atm a 20atm notamos que la temperatura a los 20s aumenta a 940°C y el estrés aumenta a 1130MPa.

En el segundo escenario se escogió el aluminio 6063- T86. Los resultados nos demuestran que el estrés se mantiene en un promedio de 0.44MPa. Teniendo su estrés más alto de 0.46MPa a una temperatura de 887°C, véase Figura 10. Esta temperatura sobrepasa la temperatura de fusión del material de 654°C.

La Figura 11 ilustra el comportamiento del desplazamiento del aluminio a los 20s que es de 0.6mm. La alta concentración en el área luego de la entrada de aguja de inyección demuestra que el material ya puede estar comprometido estructuralmente. Al igual que en el acero, se realizó un segundo escenario en el que se cambió la presión interna a 20atm. En el mismo, se aprecia un comportamiento similar en cuanto al estrés con 0.48MPa y una temperatura más baja de 689°C y al igual que el desplazamiento con 0.4mm.

El último material estudiado fue el níquel, el cual a los 20s demostró un estrés de 1022MPa con una temperatura de 580°C. Este material alcanza su estrés de quebranto a los 5s y una temperatura de 177°C ya que la misma es 317MPa que iguala el encontrado en esas condiciones.

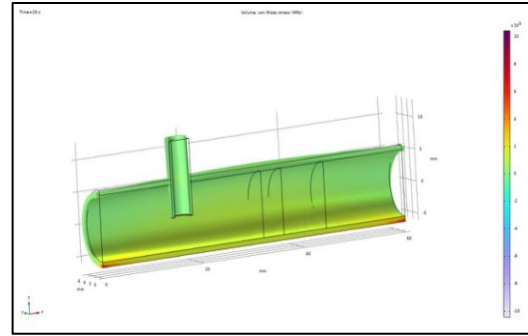


Figura 10
Contorno de Estrés en el Aluminio a 20s

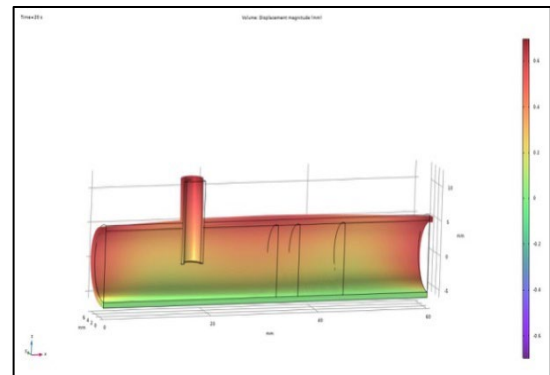


Figura 11
Contorno de Desplazamiento Aluminio a 20s

La Figura 12 nos presenta el contorno de estrés del níquel. En la misma, vemos que se mantiene en un área de bajo estrés, toda vez que es cerca del 0. Igualmente, en la Figura 13, podemos notar que la temperatura interna sigue siendo baja en el área de interés presentada en la Figura 7. En el desplazamiento no se logra ver ningún cambio ya que el material llega a uno de sus límites temprano en el proceso.

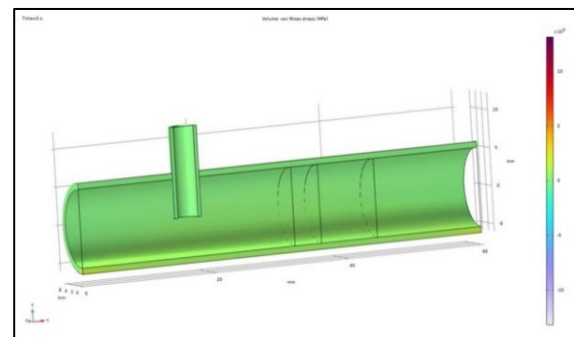


Figura 12
Contorno de Estrés del Níquel a 5s

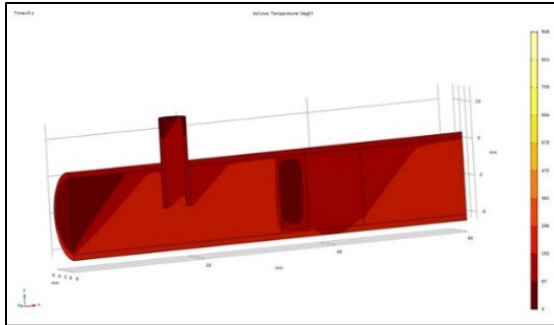


Figura 13
Contorno de Temperatura de Níquel a 5s

En cambio, cuando se aumentó la presión a 20atm hubo una leve mejoría ya que a los 5s la temperatura se mantuvo alrededor de 218°C y el estrés a 266 MPa. Aunque ya a los 10s este sobrepasa la de quebranto.

Discusión

Cuando comparamos los resultados de los tres metales propuestos se observó que la aleación de aluminio, a pesar de que está hecho para resistir altas cargas estructurales, tiene una limitación en altas temperaturas. Este tiene la mayor deflexión de 0.6mm que, según los resultados, la Figura 11, en contraste a 0.1mm, Figura 9, para el acero a una temperatura de alrededor de 600°C la cual inicia el rango de temperatura deseado para la pirólisis rápida. Cuando estudiamos los resultados del níquel, esta falla a bajas temperaturas al llegar y sobrepasar su estrés de quebranto a solo 118°C.

El material que mantuvo integridad estructural necesaria fue el acero AISI 4340, el cual llegó a la temperatura deseada para la pirólisis rápida con 900°C y a 1atm de presión manteniéndose dentro de su límite su estrés de quebranto, 1100MPa, y su deformación no tan notable como los otros materiales. Aunque en las condiciones del primer caso se mantuvo dentro de los parámetros estructurales deseados, cuando se estableció el segundo caso aumentando la presión interna a 20atm el mismo presentó un posible riesgo debido a que el estrés aumentó a 1130MPa.

CONCLUSIONES

El proceso de pirólisis es una innovación en el proceso de reciclaje. En este proceso uno de los elementos más importantes es el reactor. El mismo está expuesto a condiciones que van a afectar el material térmicamente y esto es lo que se ha considerado en este estudio. Se utilizó el acero AISI 4340, aluminio 6063-T86 y níquel como materiales de construcción, ya que cumplen con ser anticorrosivos, fuertes y resistentes.

Este estudio confirmó la hipótesis propuesta que el acero es un mejor material para el proceso de pirólisis rápida que el aluminio y el níquel. El acero fue el único en que su estrés no falló y se mantuvo dentro de su rango de estrés de quebranto, aunque el mismo sobrepasa su rango de estrés de rendimiento. Se confirma también, la segunda estipulación que el aumentar la presión a 20atm va a impactar negativamente los materiales. En el aluminio y níquel se vio una mejoría en las etapas iniciales del proceso, pero cuando las temperaturas aumentan se afecta negativamente la estructura.

Para las condiciones presentadas en este proyecto no todos los materiales utilizados cumplieron con los requisitos. Pero no podemos descartar que se puedan utilizar para otros de los tipos de pirólisis que no requieran de altas temperatura o que el producto esperado no sea un combustible líquido. También podríamos hacer el estudio con otro material para ser reciclado como materia orgánica u otro tipo de plástico.

El uso del programa COMSOL fue muy útil ya que es un programa flexible y fácil de utilizar. Lamentablemente, los análisis de ingeniería demandan una alta capacidad de computación y esto limita el análisis. En el caso de este trabajo la definición de parámetros, mechado, entre otros se vieron afectados.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] C. Cruz Mejías, *La crisis de la basura tiene a Puerto Rico cerca 'del precipicio'*, "Global Press Journal", 16/feb/2021. [En línea]. Disponible: <https://globalpressjournal.com/americanas/puerto-rico/trash->

- [crisis-leaves-puerto-rico-brink/es/](#) [Último acceso: 11 Octubre 2023].
- [2] S. Museum, “Science Museum”. [En línea]. Disponible: <https://www.sciencemuseum.org.uk/objects-and-stories/chemistry/age-plastic-parkesine-pollution>. 11/oct/2019. [Último acceso: 2023].
- [3] M. Irfan, R. Saleem, B. Shoukat, H. Hussain, S. Shukrullah, M. Y. Naz, S. Rahman, A. A. J. Ghanim, G. Nawalany y T. Jakubowski, «Production of combustible fuels and carbon nanotubes from plastic wastes using an in-situ catalytic microwave pyrolysis process.» 06 Junio 2023. [En línea]. Available: <https://www.nature.com/articles/s41598-023-36254-6>.
- [4] “Intarex”, *Qué es y cómo funciona el reciclaje químico*. [En línea]. Disponible: <https://www.intarex.com/que-es-y-como-funciona-el-reciclaje-quimico/>. [Último acceso: 19 Septiembre 2023].
- [5] educarchile, *Pirólisis de plásticos, otra alternativa de reciclaje - UDT I Exploradores del átomo al cosmos*. 2020. [En línea]. Disponible: <https://www.youtube.com/watch?v=n5XSYh1e5Mw>.
- [6] “Eagri”, “Development of e-Courses for B.Sc (Agriculture)” [En línea]. Disponible: <http://www.Eagri.org>. [Último acceso: 25 09 2023].
- [7] C.H.Z., D.S.T., W. H. Y., Lin Mei Wu, “Catalytic Thermochemical Processes for Biomass Conversion to Biofuels and Chemicals”, de *Bioenergy research: advances and applications*, Elsevier, 2014, p. 513.
- [8] Pérez, L., *Material of Construction Options for Chemical Process Plants*, De Dietrich Process Systems, 27 April 2017. [En línea]. Disponible: <https://www.ddpsinc.com/blog/material-of-construction-options-for-chemical-process-plants>.
- [9] J. E. Davis, *Nickel, Cobalt, and Their Alloys*, ASM International, 2000.
- [10] A. International, *ASM Metals Handbook, Volume 1: Properties and Selection: Irons, Steels, and High-Performance Alloys*, 1990.
- [11] A. Akinsade, A. O. Akinola, S. S. Yaru y J. F. Eiche, «Thermal and Structural Modelling of Laboratory-Scale Pyrolysis Reactor.» 2024. [En línea]. Available: https://saudijournals.com/media/articles/SJEAT_92_51-57.pdf.
- [12] A. N. ., A. B. ., K. P. S. ., P. S. ., B. J. B. ., A. J. & M. A. S. Shivi Garg, «A novel investigation using thermal modeling and optimization of waste pyrolysis reactor using finite element analysis and response surface methodology.» 06 Julio 2023. [En línea]. Available: <https://www.nature.com/articles/s41598-023-37793-8>.
- [13] “The Engineering ToolBox” (2003). [En línea]. Disponible: https://www.engineeringtoolbox.com/convective-heat-transfer-d_430.html [Último acceso: 6/oct/2023].
- [14] L. *MatWeb, Your Source for Materials Information*, <https://matweb.com/>. [Último acceso: 5/oct/2023].