



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.

Introducción

En Puerto Rico al igual que en el mundo la contaminación es un problema serio, y el reciclaje convencional no está dando resultados. Una persona puede desechar alrededor de 5.5lb de basura diariamente. De estos desperdicios solo de logra reciclar un promedio de 11%. Por esta razón es que se estudia la pirólisis, reciclaje químico, como una alternativa. Este tipo de reciclaje utiliza varios rangos de temperaturas para descomponer el material y obtener un combustible sólido, líquido o en su estado gaseoso. Este trabajo estudió el reactor, ya que es donde el proceso ocurre y está sujeto a diferentes rangos de temperatura. [1]

Trasfondo

El proceso de pirólisis es una nueva alternativa que está ganando interés en el campo del reciclaje. Ya que el mundo se está llenando de basura y sobre todo de materiales reciclables como el plástico, el Polietileno Tereftalato (PET).

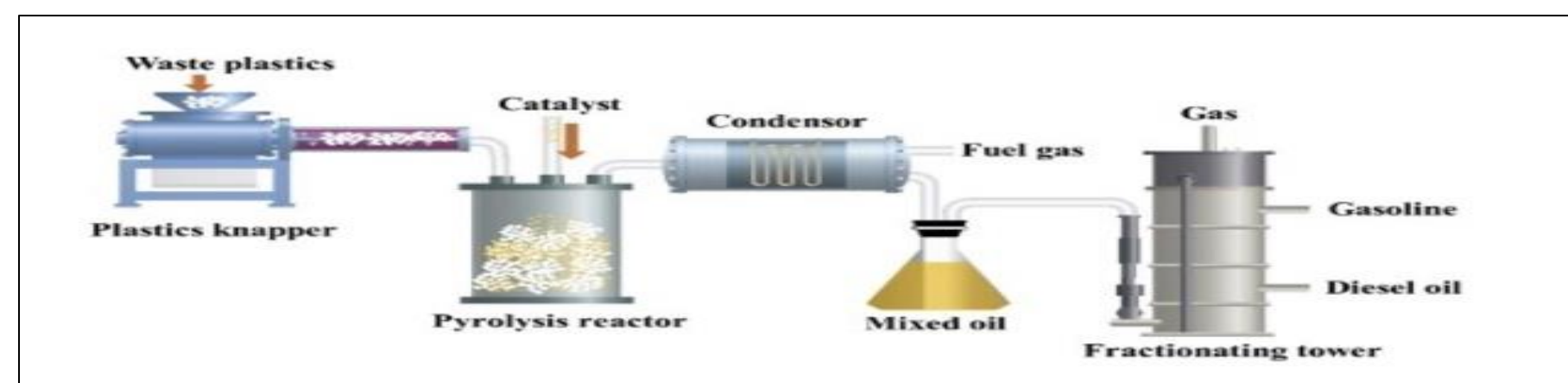


Figura 1 Representación general de un Sistema de pirólisis [2]

Este proceso de reciclaje químico produce un combustible dependiendo de la temperatura y tiempo que esté en el mismo. La pirólisis lenta trabaja en rangos menores a los 500°C y produce mayormente combustible sólido. En este estudio se tomó como material reciclable el PET. Sin embargo, este proceso puede utilizarse con otros plásticos al igual que otros materiales orgánicos.

La pirólisis rápida que fluctúa en rangos de 600°C a 999°C produce mayormente combustible líquido; la "flash" con temperaturas de 1000°C en adelante produce gas. En el proceso también se puede producir combinaciones de estos productos.

Todo este proceso ocurre en el reactor, el cual está expuesto no solo a estas temperaturas si no a otros elementos como el proceso químico. El material de construcción del reactor debe ser anticorrosivo. Con ese requisito escogimos tres materiales para la construcción del reactor. [3]

El acero AISI 4340 que es un material reconocido por su dureza y durabilidad. El segundo es el aluminio 6063 el cual es un material de baja densidad, anticorrosivo y duradero. Además, el níquel que es un material muy diverso y se puede encontrar en artículos del hogar hasta artículos más especializados. Nos concentramos en las temperaturas para la pirólisis rápida. Además, se hizo una variación en la presión ya que mientras más alta más posibilidad de obtener un combustible líquido.

Problema

Debido a la necesidad de una nueva forma de reciclaje para ayudar a conservar nuestro planeta, podemos utilizar el acero AISI 4340, el aluminio 6063 y/o el níquel como alternativas para el reactor de un sistema de pirólisis. Dentro de estas opciones probamos las siguientes hipótesis:

- ¿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?

Metodología

En este estudio se utilizó el programa de modelaje y simulación multi-físico de COMSOL. Este programa se está utilizando recientemente en la universidad. El modelo es un Reactor Catalítico Poroso con Aguja de Inyección, ya que este es parte de los ejemplos del programa en un caso químico y las instrucciones para recrearlo estaban disponibles.



Figura 2 Modelo de Reactor Poroso con Aguja de Inyección incluyendo catalítico [4]

En la imagen anterior vemos el reactor, el cual incluye un catalítico que crea una reacción química con el propósito de acelerar el proceso de pirólisis. Además, tiene dos entradas, una para el material a ser reciclado, la "Species A", y en el otro el "Species B" para el hidrógeno que ayuda a mover el material. Los módulos de mecánicas de sólidos nos permiten hacer análisis de estreses en el reactor. Lo acompaña el módulo de transferencia de calor en sólidos, el cual nos permite modelar la transferencia entre los fluidos y sólidos en el proceso dentro y fuera del reactor.

Algunas de las ecuaciones que se tomaron en consideración para lograr este análisis fueron:

Ecuación de estrés:

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

Donde: δt = connotación del tiempo, E = el Módulo de Young, α = Coeficiente de expansión térmica, ΔT = cambio en temperatura $T_2 - T_1$. [5]

Ecuación Transferecia 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 térmica del material, A = área de superficie, $\frac{dT}{dx}$ = gradiente de temperatura. [6]

Convección:

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

Donde h_c = coeficiente de convección, A = área superficial, Δt = diferencia de temperatura. [7]

Se tomó ventaja de la biblioteca de materiales que COMSOL nos provee, ya que la misma cuenta con todas las características necesarias para la simulación.

Además, se estudiaron dos casos para cada material en el proceso en el cual un caso tuvo 1atm de presión y el otro caso con 20atm.

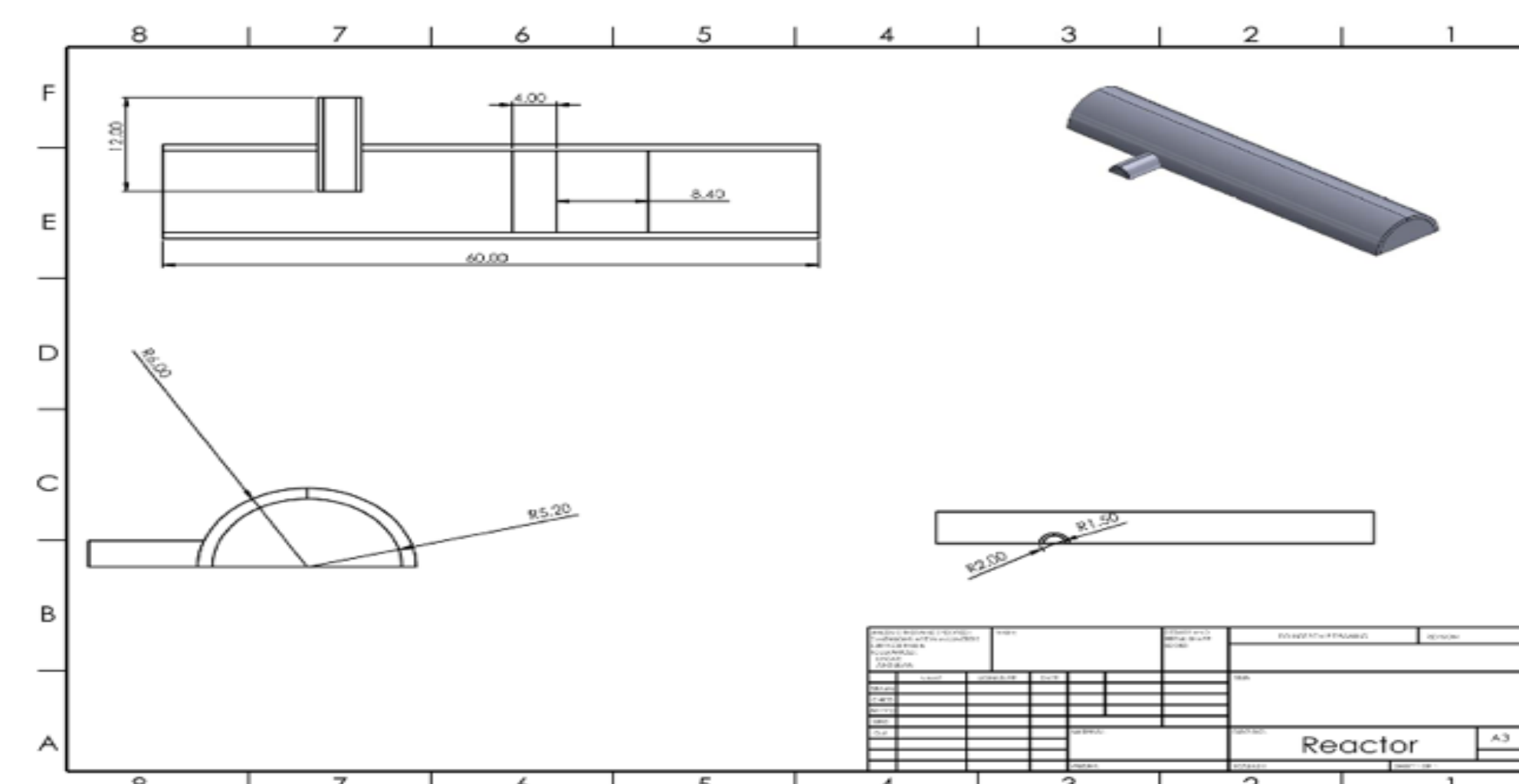


Figura 3 Dibujo de medidas del reactor

Resultados y Discusión

Para el análisis de los diferentes casos, se escogieron los datos en el área cerca de la simulación del PET, utilizando un corte de plano.

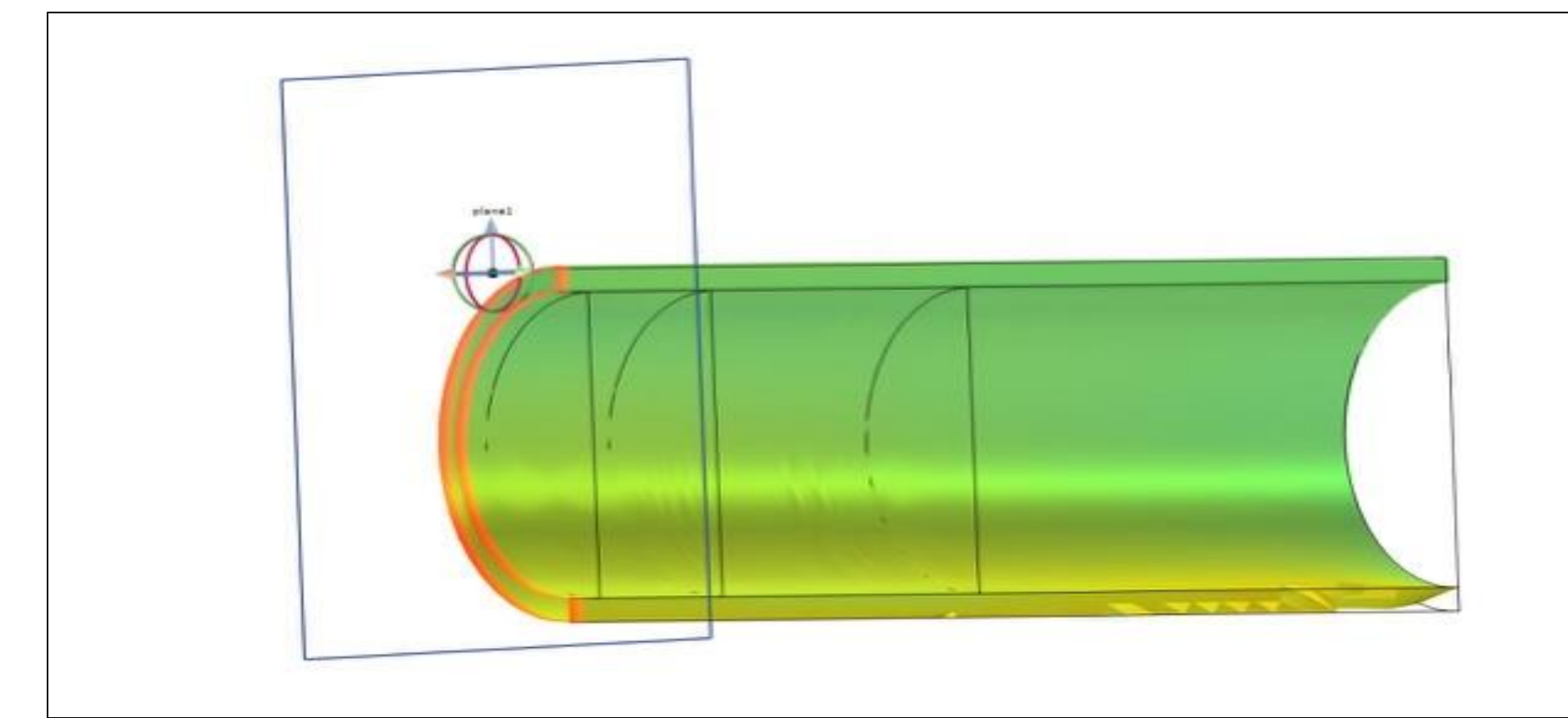


Figura 4 Corte de plano de modelo para análisis.

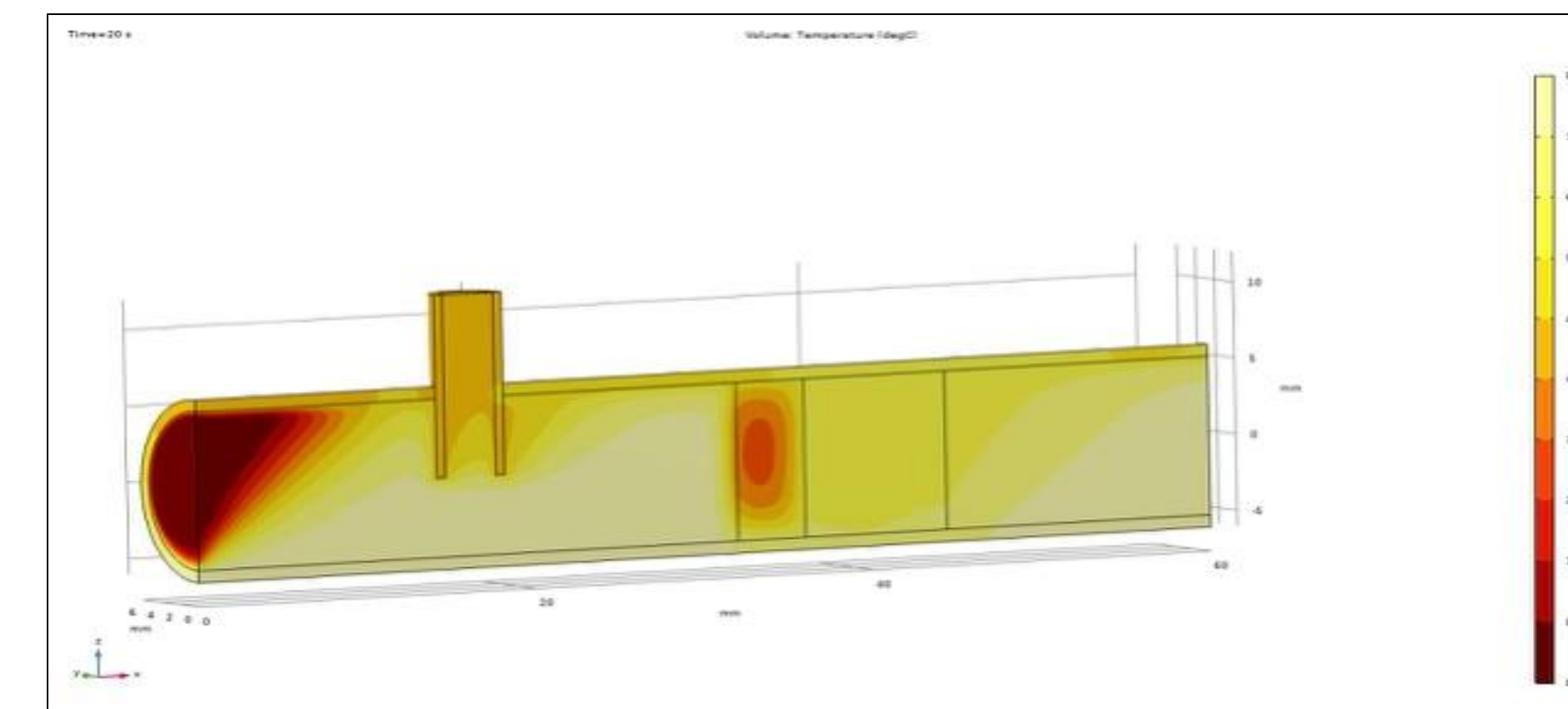


Figura 5 Contorno de temperatura del acero AISI 4340 a 20s

En el acero AISI 4340 pudimos evaluar que en el rango de temperatura deseada se mantiene con un estrés de alrededor de 900MPa y una deformación de 0.03mm.

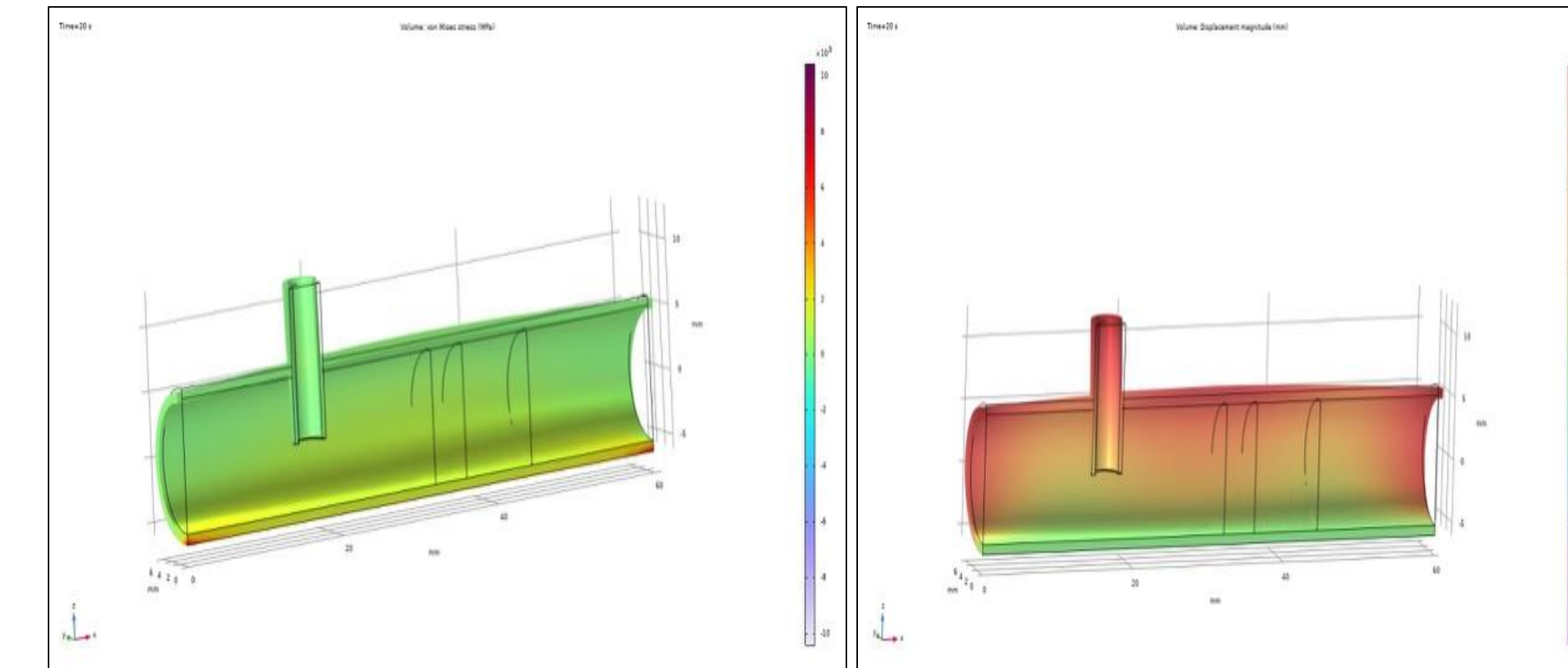


Figura 6 Contorno de estrés y desplazamiento en el aluminio a 20s

En el caso del aluminio 6063-T86 se notó que el estrés no tiene un gran aumento y se mantiene alrededor de 0.44MPa a una temperatura de 887°C. Este tiene un desplazamiento de 0.6mm bajo estas condiciones. Esto se puede deber a que la temperatura de fusión es de 654°C.

En cambio, el níquel solo llegó a 5s antes de fallar ya que el estrés llega y sobrepasa los 317MPa el cual es el estrés de quebranto de este material. El níquel solo pudo llegar a una temperatura de 177°C.

Para el segundo caso en el que se aumentó la presión interna a 20atm tenemos que el comportamiento general es el mismo. En el caso del acero la temperatura tiene un aumento a 940°C y un estrés de 1130MPa. Este estrés sobrepasa el estrés de quebranto del material que es de 1100MPa. En los otros materiales para el aluminio tuvo una leve mejoría en la temperatura a 689°C al igual que el desplazamiento a 0.4mm y un estrés de 0.48MPa. El níquel el aumento en la presión ayuda un poco en cuanto al estrés y la temperatura de este. El estrés baja a los 5s a 266MPa y la temperatura de 218°C. El mismo va a fallar en 10s ya que sobrepasa su estrés de quebranto.

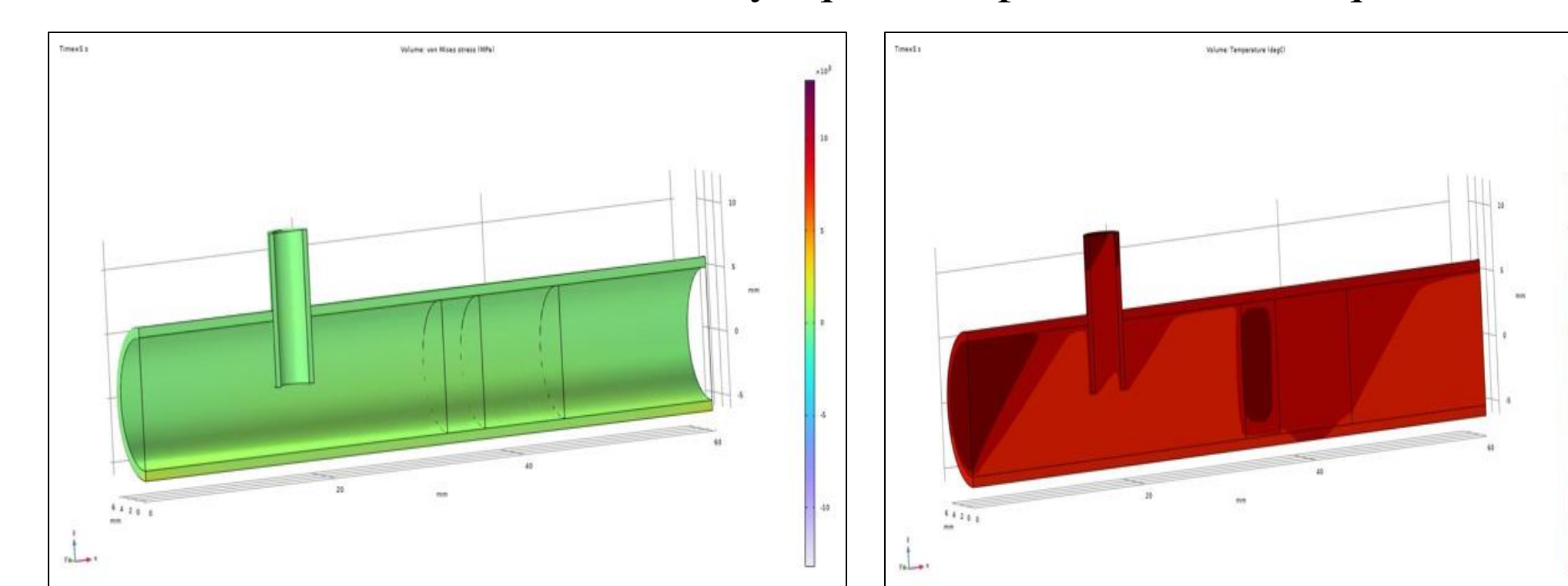


Figura 7 Contorno de estrés y desplazamiento en el níquel a 20s

Conclusiones

Este estudio demostró que con una presión de 1atm se confirma la hipótesis, que el acero AISI 4130 es una mejor selección para que los otros materiales. Es el único material que no falla en estas condiciones. El aluminio 6063 falla debido a que tiene un punto de fusión bajo y el níquel tiene un punto de quebrando bajo.

Además, también se confirma que el aumentar la presión afecta negativamente a los materiales de construcción para el reactor de pirólisis. El que estos fallen en las condiciones de este proyecto no significa que no se puedan utilizar para otros tipos de pirólisis o materiales.

Trabajo Futuro

Luego de este trabajo se podría continuar viendo cómo afecta teniendo el proceso completo químico dentro del reactor. Además, otra opción sería expandir las configuraciones para diferentes tipos de pirólisis y materiales.

Agradecimientos

Este proyecto no hubiera sido posible sin el apoyo de mi esposa quien ha sido mi apoyo en este programa de posgrado. Además, a mi mentor Dr. Hugo Peláez quien me facilitó las herramientas necesarias para lograr terminar este proyecto con su mentoría.

Referencias

- [1] C. Cruz Mejias, «Global Press Journal,» 16 Febrero 2021. [En línea]. Available: <https://globalpressjournal.com/americas/puerto-rico/trash-crisis-leaves-puerto-rico-brink/es/>. [Último acceso: 11 Octubre 2023].
- [2] 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,» *Scientific Reports*, p. 15, 6/3/2023.
- [3] <<Eagri>>[En Línea]. Available: <http://www.Eagri.org>
- [4] A. Akinsade, A. O. Akinola, S. S. Yaru y J. F. Eiche, «Thermal and Structural Modelling of Laboratory-Scale Pyrolysis Reactor,» *Saudi Journal of Engineering and Technology*, 2024
- [5] E. Stuff, «Educational Stuff,» 26 Agosto 2021. [En línea]. Available: <https://www.educationalsuff.com/thermal-stresses-and-strains/>
- [6] 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,» *Scientific Reports*
- [7] «The Engineering ToolBox (2003),» 2003. [En línea]. Available: https://www.engineeringtoolbox.com/convective-heat-transfer-d_430.html. [Último acceso: 6 Octubre 2023]