



“Desarrollo y evaluación de la reacción de pirólisis de polipropileno (PP) junto con biomasa para la obtención de gas de síntesis mediante un software de simulación”

Palacios Tixilima, Pamela Abigail

Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Trabajo de Unidad de Integración Curricular, previo a la obtención del título de Petroquímica

Ing. Sayavedra Delgado, Jonathan Javier, Msc

15 de agosto del 2022

Latacunga

Reporte de verificación de contenido



Identical Words	283
Words with Minor Changes	18
Paraphrased Words	0
Omitted Words	1620



Ing. Sayavedra Delgado, Jonathan Javier. Msc

C.C.: 0502865850



Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Certificación

Certifico que el trabajo de integración curricular: **“Desarrollo y evaluación de la reacción de pirólisis de polipropileno (PP) junto con biomasa para la obtención de gas de síntesis mediante un software de simulación”** fue realizado por la señorita **Palacios Tixilima, Pamela Abigail**, el mismo que cumple con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, además fue revisado y analizada en su totalidad por la herramienta de prevención y/o verificación de similitud de contenidos; razón por la cual me permito acreditar y autorizar para que se lo sustente públicamente.

Latacunga, 15 de agosto del 2022.



Firmado digitalmente por:
JONATHAN JAVIER
SAYAVEDRA DELGADO

Ing. Sayavedra Delgado, Jonathan Javier, Msc

C.C.: 0502865850



Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Responsabilidad de Autoría

Yo, **Palacios Tixilima, Pamela Abigail**, con cédula de ciudadanía n°1003987219, declaro que el contenido, ideas y criterios del trabajo de integración curricular: **"Desarrollo y evaluación de la reacción de pirólisis de polipropileno (PP) junto con biomasa para la obtención de gas de síntesis mediante un software de simulación"** es de mi autoría y responsabilidad, cumpliendo con los requisitos legales, teóricos, científicos, técnicos, y metodológicos establecidos por la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE, respetando los derechos intelectuales de terceros y referenciando las citas bibliográficas.

Latacunga, 15 de agosto del 2022.



Palacios Tixilima, Pamela Abigail

C.C.: 1003987219



Departamento de Ciencias de la Energía y Mecánica

Carrera de Petroquímica

Autorización de Publicación

Yo **Palacios Tixilima, Pamela Abigail** con cédula de ciudadanía n°1003987219, autorizo a la Universidad de las Fuerzas Armadas ESPE publicar el trabajo de integración curricular: **Título: "Desarrollo y evaluación de la reacción de pirólisis de polipropileno (PP) junto con biomasa para la obtención de gas de síntesis mediante un software de simulación"** en el Repositorio Institucional, cuyo contenido, ideas y criterios son de mi responsabilidad.

Latacunga, 15 de agosto del 2022.



Palacios Tixilima, Pamela Abigail

C.C.: 1003987219

Dedicatoria

A Dios por darme la oportunidad de ver un nuevo amanecer cada día, por la sabiduría, las oportunidades y sus bendiciones que me brinda día a día.

A mi familia por todo su apoyo incondicional, sobre todo a mi mamá por la confianza que me brinda y el esfuerzo que hace cada día por darme todo lo que necesito.

A mi abuelita Rosita que está en cielo, que siempre me brindaba palabras de motivación cada vez que iba a viajar a la Universidad.

Agradecimiento

A Dios por la vida.

A mi familia por la confianza y el apoyo que me brindan.

A mis amigos que conseguí durante toda la carrera, por su bonita amistad y sobre todo su apoyo.

Al depar C-308 por haberme abierto sus puertas y permitirme conocer a personas increíbles que estuvieron conmigo casi durante toda la carrera.

A mi papi, que a pesar de la distancia en la que nos encontramos me motiva siempre a seguir adelante y no darme por vencida.

A los docentes que me brindaron conocimientos y enseñanzas durante mi vida universitaria.

Al Ing. Jonathan Sayavedra por permitirme realizar el trabajo de titulación y guiarme en ello.

ÍNDICE DE CONTENIDOS

Carátula	1
Reporte de verificación de contenido.....	2
Certificación	3
Responsabilidad de autoría	4
Autorización de publicación	5
Dedicatoria	6
Agradecimiento.....	7
Índice de contenidos	8
Índice de tablas.....	12
Índice de figuras	13
Resumen.....	15
Abstract	16
Capítulo I: Introducción.....	17
Antecedentes.....	17
Planteamiento del problema.....	18
Justificaciones e importancia.....	19
Objetivos.....	20
<i>Objetivo general.....</i>	20
<i>Objetivos específicos</i>	20
Hipótesis	20
Variables de investigación.....	20

<i>Variable Independiente</i>	20
<i>Variable Dependiente</i>	21
Capítulo II: Marco teórico	22
Plásticos	22
<i>Clasificación de los plásticos</i>	22
Residuos plásticos.....	24
Tecnologías de reciclado.....	25
Tipos de Pirólisis.....	26
<i>Pirólisis térmica</i>	26
<i>Pirólisis catalítica</i>	27
Condición de los parámetros del proceso de pirólisis	27
<i>Temperatura</i>	27
<i>Tipo de reactor</i>	28
<i>Presión</i>	28
<i>Catalizador</i>	28
<i>Tiempo de residencia</i>	28
Reformado con vapor	29
Biomasa	29
Diseño de procesos	33
Simulación de procesos	33
Capítulo III: Metodología.....	35

Introducción.....	35
Modelado de la descomposición del polipropileno	35
Modelado de la biomasa	36
<i>Hemicelulosa.....</i>	<i>36</i>
<i>Celulosa.....</i>	<i>36</i>
<i>Lignina.....</i>	<i>37</i>
Modelado de las reacciones de reformado con vapor.....	37
Parámetros cinéticos	37
Equipos	39
Diagrama de bloques	40
Simulación	40
<i>Selección del modelo termodinámico</i>	<i>40</i>
<i>Ingreso de componentes no disponibles en el software de Aspen Plus</i>	<i>41</i>
<i>Simulación del primer reactor de pirólisis del polipropileno.....</i>	<i>45</i>
<i>Simulación del segundo reactor de pirólisis de la cáscara del cacao</i>	<i>47</i>
<i>Separación de componentes</i>	<i>48</i>
<i>Simulación del reactor de reformado con vapor</i>	<i>58</i>
Capítulo IV: Resultados y discusiones.....	62
Alimentación del proceso	62
Obtención del gas síntesis	62
Balance de masa del proceso.....	63

Especificación de diseño en el reactor	68
Análisis de sensibilidad	68
Propuesta de biomasa para el proceso de producción de gas de síntesis.....	76
Capítulo V: Conclusiones y recomendaciones	78
Conclusiones.....	78
Recomendaciones.....	80
Bibliografía	81
Anexos.....	85

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1 <i>Propiedades propileno</i>	23
Tabla 2 <i>Composiciones de biomasa</i>	31
Tabla 3 <i>Biomasa disponible en la provincia de Cotopaxi</i>	32
Tabla 4 <i>Parámetros cinéticos de la biomasa</i>	38
Tabla 5 <i>Parámetros cinéticos del polipropileno</i>	38
Tabla 6 <i>Datos ingresados al reactor R-plug 1</i>	46
Tabla 7 <i>Datos ingresados al reactor R-plug 2</i>	47
Tabla 8 <i>Flujos másicos ingresados al reactor</i>	62
Tabla 9 <i>Balance de Masa</i>	64
Tabla 10 <i>Resultados de la especificación de diseño en lo reactores de pirólisis</i>	68
Tabla 11 <i>Resultados del análisis de sensibilidad</i>	69
Tabla 12 <i>Resultados del análisis de sensibilidad</i>	70
Tabla 13 <i>Resultados del análisis de sensibilidad</i>	71
Tabla 14 <i>Resultados del análisis de sensibilidad</i>	73
Tabla 15 <i>Resultados de análisis de sensibilidad</i>	74
Tabla 16 <i>Resultados de análisis de sensibilidad</i>	75
Tabla 17 <i>Composición del gas de síntesis en la corriente de salida del proceso</i>	77

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 <i>Estructura lignina</i>	30
Figura 2 <i>Estructura Hemicelulosa</i>	30
Figura 3 <i>Estructura Celulosa</i>	31
Figura 4 <i>Diagrama de bloques del proceso</i>	40
Figura 5 <i>Ventana de selección de componentes</i>	41
Figura 6 <i>Ventana User-Defined Component</i>	42
Figura 7 <i>Ventana User-Defined Component</i>	42
Figura 8 <i>Estructura del componente polipropileno</i>	43
Figura 9 <i>Estructura de la hemicelulosa</i>	43
Figura 10 <i>Estructura de la celulosa</i>	44
Figura 11 <i>Estructura de la lignina</i>	44
Figura 12 <i>Propiedades de los componentes</i>	45
Figura 13 <i>Simulación del reactor 1 de pirólisis del polipropileno</i>	46
Figura 14 <i>Simulación del reactor 2 de pirólisis de la biomasa</i>	48
Figura 15 <i>Simulación de la separación de componentes</i>	49
Figura 16 <i>Especificación de la temperatura mínima de aproximación</i>	49
Figura 17 <i>Especificación de temperatura para el heater B10</i>	50
Figura 18 <i>Especificación de temperatura para el heater B11</i>	50
Figura 19 <i>Especificación de temperatura para el heater E-104</i>	51
Figura 20 <i>Datos ingresados al separador flash</i>	52
Figura 21 <i>Datos ingresados al compresor</i>	53
Figura 22 <i>Datos ingresados al heater B7</i>	53
Figura 23 <i>Datos ingresados al separador flash</i>	54
Figura 24 <i>Simulación de la separación de componentes</i>	55
Figura 25 <i>Especificación de la temperatura mínima de aproximación</i>	55

Figura 26 <i>Especificación de temperatura para el heater E-105</i>	56
Figura 27 <i>Datos ingresados al compresor</i>	57
Figura 28 <i>Datos ingresados al heater B3</i>	57
Figura 29 <i>Datos ingresados al separador flash</i>	58
Figura 30 <i>Simulación del proceso de reformado con vapor</i>	59
Figura 31 <i>Especificación de la temperatura mínima</i>	60
Figura 32 <i>Especificación de temperatura para el heater B20</i>	61
Figura 33 <i>Proceso de obtención de gas de síntesis</i>	63
Figura 34 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs conversión</i>	69
Figura 35 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de gas generado</i>	71
Figura 36 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs conversión</i>	72
Figura 37 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de gas generado</i>	74
Figura 38 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs conversión del metano</i>	75
Figura 39 <i>Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de hidrógeno</i>	76

Resumen

En esta investigación se realizó el diseño de un proceso de pirólisis para la producción de gas de síntesis (H_2 , CO , CO_2) a partir de residuos de polipropileno y cacao, mediante el software de simulación de procesos químicos, tomando como base los procesos que han sido desarrollados en diferentes fuentes bibliográficas. Se procedió a realizar un modelado simplificado de la descomposición de la materia prima. Con la investigación realizada se esquematizó un proceso de diagrama de bloques indicando las operaciones unitarias adecuadas. Para este proceso se utilizaron dos reactores R-plug para la descomposición de la materia prima, en este equipo al variar el número de tubos generan una mayor conversión de la materia prima. Para separar los hidrocarburos livianos de los pesados provenientes del proceso de pirólisis, se procedió a enfriar las corrientes con un Cooler. Posteriormente, los hidrocarburos livianos (metano, etano, propileno, etileno) ingresaron a un proceso de reformado con vapor en un reactor de equilibrio para producción de gas de síntesis. Asimismo, se realizó un análisis de sensibilidad para determinar las temperaturas óptimas de cada reactor para obtener una mayor conversión de materia prima y de metano, al igual que un mayor rendimiento de gas generado. Por otra parte, se calcularon los parámetros cinéticos de las reacciones de descomposición del polipropileno y se determinó el flujo molar de vapor que debe ingresar al reactor de equilibrio mediante la relación molar vapor/carbono de 2 moles para la producción de gas de síntesis. Se obtuvieron los flujos másicos de las corrientes de entrada y salida de cada equipo en el proceso.

Palabras clave: polipropileno, biomasa, gas de síntesis, pirólisis, reformado con vapor

Abstract

In this research, the design of a pyrolysis process for the production of synthesis gas (H₂, CO, CO₂) from polypropylene and cocoa waste was carried out using chemistry process simulation software, based on the processes that have been developed in different bibliographic sources. A simplified modeling of the decomposition of the raw material was carried out. With the research carried out, a block diagram process was schematized indicating the appropriate unit operations. For this process, two R-plug reactors were used for the decomposition of the raw material; in this equipment, by varying the number of tubes, a greater conversion of the raw material is generated. To separate the light hydrocarbons from the heavy hydrocarbons coming from the pyrolysis process, the streams were cooled with a Cooler. Subsequently, the light hydrocarbons (methane, ethane, propylene, ethylene) entered a steam reforming process in an equilibrium reactor for synthesis gas production. Likewise, a sensitivity analysis was performed to determine the optimum temperatures of each reactor to obtain a higher feedstock and methane conversion, as well as a higher yield of gas generated. On the other hand, the kinetic parameters of the polypropylene decomposition reactions were calculated and the molar flow of steam that must enter the equilibrium reactor was determined using the 2 molar steam/carbon molar ratio for the production of synthesis gas. The mass flow rates of the inlet and outlet streams of each equipment in the process were obtained.

Keywords: polypropylene, biomass, syngas, pyrolysis, steam reforming

Capítulo I

Introducción

Antecedentes

La química verde es una alternativa de sostenibilidad ambiental, permite diseñar productos que no generen toxicidad y maximicen la utilización de recursos materiales y energéticos. El empleo de tecnologías para la utilización de recursos renovables debe permitir obtener productos que no presenten contaminación ambiental, debido a que los principios de la química verde engloba a la reducción y eliminación de la contaminación ambiental (Pájaro Castro & Olivero Verbel, 2011).

Para las primeras producciones de polipropileno fue en el año de 1957 utilizando la polimerización por coordinación, convirtiéndose así en uno de los plásticos que más producción tiene a nivel mundial. El polipropileno es un polímero que se obtiene a partir de la polimerización del propileno y es muy utilizado en la industria química para la producción de plásticos. Este material presenta rigidez, dureza, peso ligero y resistencia al impacto. Este polímero tiene una demanda global de un aproximado de 55 millones de toneladas al año (C. J. Mendoza et al., 2011).

La producción de plástico a partir de polipropileno es un tema de gran importancia debido a que es un material muy utilizado en el mundo, pero el hecho de ser muy utilizado aumenta la generación de desechos. Debido al bajo precio en producción de plásticos, el 50% de la producción está destinada a botellas, recipientes, envases entre otros. Para minimizar el impacto medio ambiental de los residuos de polipropileno se pueden aplicar tres reglas, las cuales son: reducir, reutilizar y reciclar. En la etapa de reciclar es cuando se busca métodos y tecnologías que permitan la reutilización de estos desechos con el fin de obtener nuevos productos sin afectar al medio ambiente (Morocho Delgado, 2019).

Planteamiento del problema

El material más utilizado a nivel mundial es el plástico, dicho material tiene varias utilidades, entre los cuales, se usa para la elaboración de bolsas, botellas, recipientes entre otros. Debido a que este material es comúnmente utilizado su producción es mayor a nivel mundial, pero como consecuencia existe la generación de desechos. En el año 2015 se generó una producción de un aproximado de 407 millones de toneladas de plástico, en el cual, solo se llega a reciclar un 9% de su totalidad.

En el Ecuador, según los datos del INEC del año 2018, la ciudadanía arroja un promedio de 12739 toneladas de basura por día, de las cuales el 11.43% representa a los plásticos. Con esta cifra existe la necesidad de buscar una alternativa que permita reutilizar los plásticos desechos y así contribuir a la reducción de la contaminación ambiental. Una alternativa para la reutilización de los plásticos es aplicar la tecnología de pirólisis térmica, en donde, los residuos plásticos son sometidos a temperaturas elevadas en ausencia de oxígeno, con el objetivo de descomponer el plástico en partículas más pequeñas.

Ecuador es un país dependiente de combustibles fósiles para obtener energía, pero con el pasar el tiempo las reservas petroleras han sufrido un agotamiento y permitiendo un incremento de contaminación ambiental. El uso de la biomasa es una tecnología no muy conocida en el Ecuador, a pesar de saber que la biomasa es recurso renovable del cual se puede obtener productos gaseosos como es el hidrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono y metano. Una alternativa para utilizar los residuos de biomasa y no desecharla es aplicar el proceso de pirólisis térmica en el cual no genera impacto ambiental y se obtiene productos gaseosos que tiene gran demanda.

Tomando en cuenta lo mencionado anteriormente, este trabajo de titulación se enfoca en el aprovechamiento de residuos de polipropileno y biomasa, dichos residuos son sometidos

a un proceso de pirólisis térmica con el objetivo de obtener gas de síntesis, aparte de reutilizar los plásticos contribuye para disminuir la contaminación ambiental.

Justificaciones e importancia

La importancia de la química verde es que permite reducir y eliminar problemas de contaminación que son productos de las acciones industriales.

Según (Pájaro Castro & Olivero Verbel, 2011) menciona los 12 principios de la química verde, para este estudio se aplican los siguientes principios:

- Maximizar la economía atómica, es decir, obtener en el producto todos los átomos involucrados en el proceso.
- Realizar síntesis química con menos toxicidad, es decir, utilizando y generando compuestos que no presenten toxicidad.
- Utilizar materias primas renovables que sean económicas y técnicamente factibles.

Ecuador es un país que posee gran cantidad de biomasa que se obtiene de recursos agrícolas y forestales, de cuyos desechos se puede obtener gran cantidad de materia orgánica para generar energía limpia y renovable. La principal fuente de biomasa procede del banano, cacao, caña de azúcar, café, palma africana entre otros. Una alternativa para la conversión de la biomasa es aplicar la pirólisis térmica, en donde, mediante la oxidación incompleta se generan compuestos sólidos, líquidos y gaseosos.

Mediante la aplicación de la pirólisis térmica en los residuos de polipropileno generan una alternativa de producción de síntesis, este proceso permite la reutilización de materiales que son desechados por el ser humano. El polipropileno es un polímero termoplástico que generalmente es el más utilizado a nivel mundial, aproximadamente un 13% de la producción de plásticos utiliza este polímero.

En el presente trabajo de titulación se basa en aplicar el proceso de pirólisis térmica a los residuos de polipropileno y biomasa para producir lo que es el gas de síntesis. Esta investigación busca proporcionar información sobre los procesos involucrados y empleados para obtener productos como es el hidrógeno, monóxido de carbono y dióxido de carbono.

Objetivos

Objetivo general

Desarrollar y evaluar la reacción de pirólisis de polipropileno (PP) junto con biomasa para la obtención de gas de síntesis mediante un software de simulación.

Objetivos específicos

Determinar las condiciones óptimas de generación de mayor cantidad de productos con valor agregado.

Generar balances y reacciones presentes en el reactor de pirólisis.

Realizar la simulación del proceso de pirólisis ocupando los datos y cálculos obtenidos en los objetivos planteados.

Hipótesis

¿Será posible la obtención de gas de síntesis a partir de la reacción de pirólisis de polipropileno y biomasa?

Variables de investigación

Variable Independiente

Tipo de biomasa

Polipropileno

Variable Dependiente

Contenido de gas de síntesis

Capítulo II

Marco Teórico

Plásticos

Los plásticos son materiales formados por polímeros naturales o sintéticos que presentan una estructura macromolecular, junto a aditivos convenientes brindan materiales con excelentes propiedades térmicas, aislantes y presentan una resistencia a los ácidos, bases y disolventes. Los plásticos se clasifican en polietileno (PE), polipropileno (PP), cloruro de polivinilo (PVC), poliestireno, fluorocarbonatos, epoxis, fenólicos y poliésteres. Presentan propiedades de dureza, fragilidad, flexibilidad, elasticidad y plasticidad (Stubbins et al., 2021).

Clasificación de los plásticos

Polietileno

El polietileno es una macromolécula que presenta cadenas repetitivas de etileno, está constituido por átomos de carbono e hidrógeno. Su estructura simple va aumentando a medida que su peso molecular llega a considerarse de una macromolécula. Se puede considerar el polietileno de alto peso molecular cuando posee 400000 moléculas de carbono. Presentan propiedades químicas y mecánicas importantes, donde se destaca la abrasión, su lubricidad, resistencia al impacto y es un material tipo inerte. El polietileno es comúnmente utilizado en la ortopedia, representa al 0.1% de los homopolímeros lineales, contiene una sola estructura repetitiva (Cardona et al., 2010).

Polipropileno (PP)

El polipropileno es un material plástico que tiene mayor uso, se puede sintetizar mediante las estructuras isotáctica, sindiotáctica o atáctica. Es un producto petroquímico que se deriva del monómero propileno, se produce a través de un proceso de llamado polimerización por adición. El polipropileno presenta semejanzas con el polietileno debido a su

costo y a sus propiedades que tienen similitud, pero el polipropileno presenta el punto de fusión más alto lo que permite usarlo en algunas aplicaciones a diferencia del polietileno. El polipropileno es el plástico más ligero e importante en la industria, presenta una densidad de aproximadamente 0,905 g/cm³. Presenta una alta cristalinidad, el cual genera propiedades eléctricas, carácter químico inerte, resistencia a la humedad, resistencia a la atracción, rigidez y dureza (Longo et al., 2011).

Su mayor ventaja está relacionada con la alta resistencia a la temperatura, lo permite sea especialmente adecuado para artículos como bandejas, embudos, cubos, botellas, garrafas y frascos de instrumentos que deben ser esterilizados frecuentemente para su uso en un entorno clínico (Maddah, 2016).

Tabla 1

Propiedades propileno

Propiedad	Valor	Unidades
Densidad	0.91-0.94	<i>g/cm³</i>
Resistencia a la atracción	3200-5000	Psi
Absorción de agua	0.01	%
Alargamiento	3-700	%
Punto de ablandamiento	140-150	°C
Punto de fusión	160-166	°C
Volumen específico	30.4-30.8	<i>cm³/lb</i>
Volumen específico	30.4-30.8	<i>cm³/lb</i>

Nota. Tomado de Polypropylene as a Promising Plastic: A Review (p.3), por Maddah, (2016), American Journal of Polymer Science.

Policarbonato

El policarbonato es un termoplástico amorfo que presenta un alto rendimiento que se utiliza en algunas aplicaciones, sus buenas propiedades mecánicas y su transparencia lo convierten en un buen candidato para un costo bajo. Presenta dos límites principales, el primero está relacionado con su baja resistencia al rayado y a la abrasión, y el segundo se refiere a su vulnerabilidad a los rayos UV y a ciertos disolventes y químicos (Benayoun, 2015).

Poliestireno

El poliestireno es un termoplástico que se obtiene a partir de la polimerización del estireno, presenta una amplia gama de aplicaciones, desde los cubiertos desechables hasta el aislamiento de viviendas. Independientemente de sus favorables prestaciones mecánicas, su buena inercia química y su excelente procesabilidad, los avances tecnológicos han planteado exigencias adicionales a estos materiales como la conductividad eléctrica y propiedades mecánicas mejoradas (Kaseem et al., 2016).

Residuos plásticos

Los residuos plásticos son un problema mundial, debido a que generan un fuerte impacto a la salud de los seres humanos y al ecosistema. Los plásticos no son inertes por lo que contienen sustancias químicas con potencial tóxico y tienen la capacidad de transportar contaminantes. Un claro ejemplo es la quema de residuos plásticos en un campo abierto que genera la contaminación del aire y el calentamiento del aire circundante, esta acción aumenta el riesgo de enfermedades del corazón, dolencias respiratorias y daño al sistema nervioso en los seres humanos. En el ambiente marino, la presencia de residuos plásticos permite la liberación de sustancias químicas contenidas, estos residuos tienen la capacidad de atraer contaminantes como son los contaminantes orgánicos persistentes que la mayoría son hidrofóbicos y el plástico llega a actuar como un sumidero para contaminantes (Verma et al., 2016).

Tecnologías de reciclado

- **Tratamiento primario**

Es un tipo de reciclado que consiste en realizar operaciones mecánicas para generar un producto nuevo que contenga similitud en las características del material original. Este tipo de tratamiento se emplea para el aprovechamiento de recorte de las plantas de producción y transformación, y pertenece a un cierto porcentaje reducido de los residuos plásticos (Arandes et al., 2004).

- **Tratamiento secundario**

Este tipo de tratamiento consiste en realizar una fusión, los desechos son transformados en productos que presentan diferentes formas y con mayor espectro de aplicaciones, es decir, son diferentes al plástico original mediante un proceso evolutivo en cascada. Este tratamiento es comúnmente más utilizado en la industria automotriz, y se estima que el 20% de residuos plásticos pueden ser reciclados de esta manera (Arandes et al., 2004).

- **Tratamiento terciario**

El reciclado terciario o más conocido como el reciclado químico, tiene como objetivo el aprovechamiento integral de los elementos que componen al plástico mediante la transformación de este para obtener hidrocarburos, los cuales pueden utilizarse como materia prima para la obtención de otros plásticos o para la industria petroquímica. Los procesos involucrados en este tipo de reciclado pueden ser químicos o térmicos, todo depende del polímero que se desea tratar.

- **Tratamiento cuaternario**

Este tipo de reciclado consiste en la incineración de los residuos plásticos para recuperar energía. Este tratamiento no es muy comúnmente utilizado debido a que genera problemas medioambientales.

Tipos de Pirólisis

La pirólisis es un proceso de degradación térmica en el cual, las moléculas de polímeros de cadenas largas se convierten en cadenas más cortas y menos complejas mediante el calor y la presión. En este proceso se requiere de calor intenso y ausencia de oxígeno en una corta duración, los productos que se obtienen a partir de este proceso son el aceite, el gas y carbón vegetal, dichos productos son de gran importancia para las industrias generalmente en la producción y refinerías. El proceso de pirólisis es muy flexible por la razón que se puede manipular los parámetros del proceso como es la temperatura, presión, catalizador, reactor y tiempo de residencia, con el objetivo de optimizar el rendimiento del producto en función del producto que requiere obtener. Este proceso genera una mínima contaminación ambiental, por lo cual es viable y se considera como una tecnología verde que incluso, se puede obtener un producto gaseoso de alto valor calorífico sustancial que se puede utilizar para compensar necesidades energéticas en una planta de pirólisis (Dayana et al., 2016).

Pirólisis térmica

Es un proceso de degradación en cual se utiliza temperaturas ($>700^{\circ}\text{C}$), obteniendo mezclas de productos de bajo peso molecular C1-C4 junto a compuestos aromáticos como es el benceno, tolueno y xileno. Si se utilizan bajas temperaturas en el rango de 400°C - 500°C se obtienen como productos gases con alto poder calorífico. El rendimiento y la composición de los productos están controlados tanto por la temperatura como por la duración de la reacción. Este proceso está en función de las reacciones en cadena de radicales, mediante la transferencia de hidrógeno y la ruptura de la cadena principal. El mecanismo presente en este proceso implica las etapas de iniciación, propagación de radicales libres seguidos de la escisión de la cadena β y la terminación (Almeida & Marques, 2016).

Pirólisis catalítica

En este proceso se involucra un catalizador que promueve reacciones de descomposición a temperaturas más bajas en el rango de 390°C a 420°C en periodos de tiempo más cortos. Este proceso tiene como ventaja que existe un menor consumo energético y la producción de hidrocarburos aromáticos ligeros con alto valor comercial (Nizami & Rehan, 2016).

La presencia de un catalizador en un proceso de pirólisis promueve a:

- Aumentar la selectividad del proceso.
- Inhibir la formación de productos no deseados.
- Costos reducidos.
- Aumento de rendimiento de productos de mayor valor agregado.
- Menor consumo de energía.
- Reacciones de descomposición a bajas temperaturas.
- Tiempo de residencia más corto y reactores con volumen más pequeño.

Condición de los parámetros del proceso de pirólisis

Los parámetros de un proceso cumplen un papel importante en la optimización del rendimiento y la composición del producto que se desea obtener. En la pirólisis de plásticos, los parámetros importantes pueden resumirse en la temperatura, tipo de reactor, presión, catalizador y tiempo de residencia con el fin de obtener los productos que requiere (Nizami & Rehan, 2016).

Temperatura

La temperatura es un parámetro operativo más importantes en la pirólisis, debido a q controla la reacción de craqueo de la cadena de polímeros. Las moléculas se atraen entre sí por la fuerza de Van der Waals y esto genera que las moléculas no se colapsen. Cuando

aumenta la temperatura en un sistema, la vibración de las moléculas dentro del sistema será mayor y las moléculas tienden a evaporarse de la superficie del objeto.

Tipo de reactor

El tipo de reactor es un parámetro importante en la mezcla de plásticos y catalizadores, transferencia de calor y tiempo de residencia para conseguir una eficacia en el producto deseado.

Presión

En un proceso de pirólisis la presión generalmente es atmosférica. La baja presión que puede ser al vacío o en presencia de un diluyente inerte beneficia la producción de productos gaseosos.

Catalizador

Los catalizadores se utilizan ampliamente en la industria con el objetivo de optimizar la distribución del producto y aumentar la selectividad del producto. Por lo tanto, la degradación catalítica es un proceso importante para obtener productos de gran interés comercial, como es el combustible diésel, gasolina y las olefinas C₂-C₄, que tienen una gran demanda en la industria petroquímica. El catalizador reduce la temperatura óptima requerida y esto es muy crucial ya que el proceso de pirólisis requiere alta energía (Dayana et al., 2016).

Tiempo de residencia

El tiempo de residencia es un parámetro que se define como la cantidad media de tiempo que la partícula atraviesa por un el reactor y puede influir en la distribución del producto. Un mayor tiempo de residencia aumenta la conversión del producto primario, por lo que se obtiene un producto más estable térmicamente, como hidrocarburos de peso molecular ligero y gas no condensable (Nizami & Rehan, 2016).

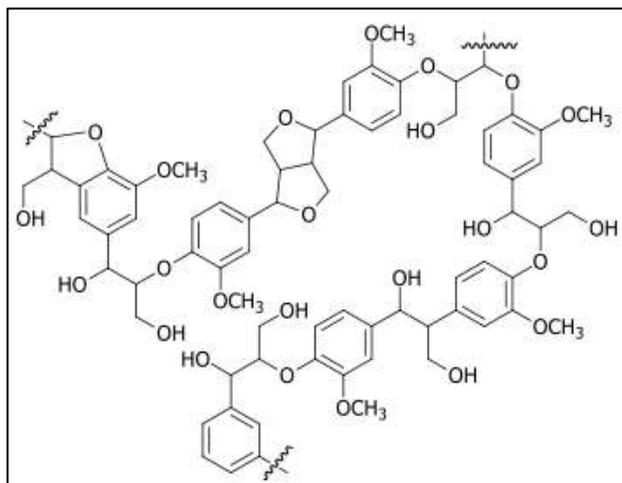
Reformado con vapor

El reformado con vapor es el proceso por el cual, el metano y otros hidrocarburos del gas natural se convierten en hidrógeno y monóxido de carbono por reacción con vapor sobre un catalizador de níquel sobre un soporte cerámico a una temperatura hasta de 950°C. El hidrógeno y el monóxido de carbono se utilizan como materia prima para muchos otros procesos industriales. En general, los catalizadores a base de níquel se utilizan industrialmente en reformado de vapor de hidrocarburos debido a sus rápidos índices de renovación, su estabilidad a largo plazo y su bajo costo (Natesakhawat, 2005).

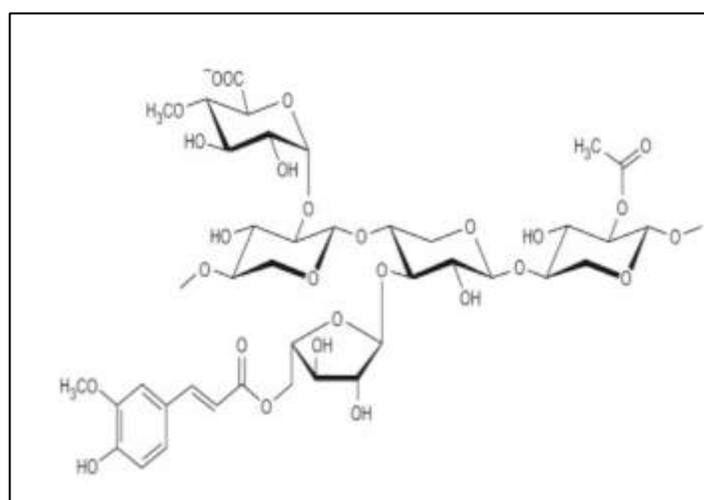
Biomasa

La biomasa es un recurso renovable que se utiliza como fuente energética, ocupando un lugar destacado en todos los principales escenarios de suministro energético mundial, ya que los recursos de biomasa son potencialmente la mayor y más sostenible fuente de energía del mundo. La energía de la biomasa se obtiene fácilmente de la madera, las ramas, la paja, el estiércol, los residuos agrícolas, entre otros. La biomasa se quema directamente para obtener calor o para generar electricidad y mediante el proceso de gasificación se produce un gas de alto valor energético. La biomasa se encuentra compuesta por celulosa, hemicelulosa y lignina (Rosillo Calle et al., 2007).

La celulosa se le define como un homopolisacárido que está compuesto por unidades de D-glucosa, estas unidades están unidas por enlaces glicosídicos. Las hemicelulosas son heteropolisacáridos que están constituidos por diferentes unidades monosacáridas como es la pentosa, hexosa y ácidos urónicos, que de igual manera se encuentran unidos por enlaces glicosídicos. Presenta una estructura amorfa y se asocia con la celulosa mediante interacciones polisacárido-polisacárido. La lignina es una molécula resultante de la unión entre los alcoholes fenilpropílicos y varios ácidos. De manera aleatoria los radicales se acoplan para dar origen a una estructura tridimensional, es decir, un polímero amorfo (Álvarez Rodríguez et al., 2012).

Figura 1*Estructura lignina*

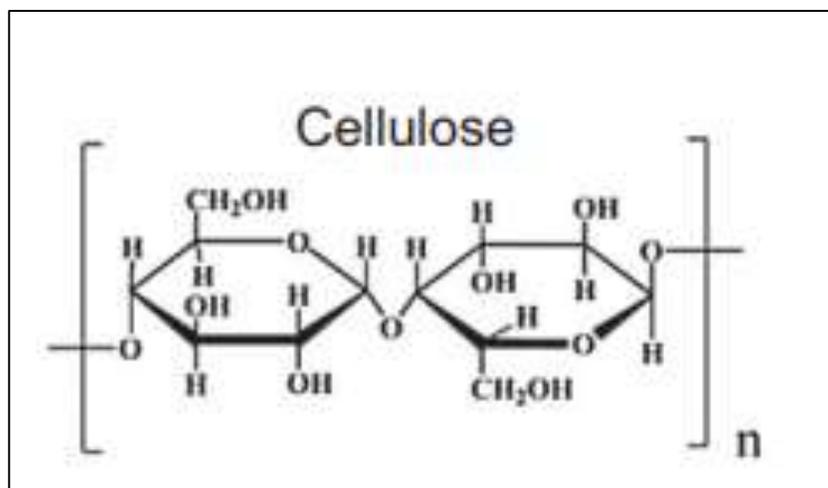
Nota. Tomado de Lignina, estructura y aplicaciones: métodos de despolimerización para la obtención de derivados aromáticos de interés industrial (p.17), por Chavez, 2013, *Avances en Ciencias e Ingeniería*.

Figura 2*Estructura Hemicelulosa*

Nota. Tomado de *Hydrolysis of Biopolymers in Near-Critical and Subcritical Water*, (p.90), por Machmudah, (2017), *Water Extraction of Bioactive Compounds*.

Figura 3

Estructura Celulosa



Nota. Tomado de *Hydrolysis of Biopolymers in Near-Critical and Subcritical Water* (p.85), por Machmudah, (2017), *Water Extraction of Bioactive Compounds*.

Tabla 2

Composiciones de biomasa

Biomasa	Lignina	Hemicelulosa	Celulosa
Eucalipto	21.5	18.8	54.3
Pino	26.5	24	45.7
Álamo	15.5-16.3	26.2-28.7	58.8-53.3
Roble	35.4	21.9	43.2
Pino	26.8	24.0	45.6
Tallo de maíz	15.59	43.01	22.82

Biomasa	Lignina	Hemicelulosa	Celulosa
Residuos de banano	14	14.7	13.7
Cáscara de arraz	14.3	24.3	31.3
Caña de azúcar	22.9	31.3	45.9
Cáscara de coco	28.7	25.1	36.3
Bagazo	18.2	22.7	41.5

Nota. Tomado de Experimental investigation of thermal properties of Lignocellulosic biomass: A review (p.6), por Olatunji, (2018), *Materials Science and Engineering*.

Tabla 3

Biomasa disponible en la provincia de Cotopaxi

Producto	Producción absoluta (t/año)	Residuos (t/año)
Banano	113400.30	74844.20
Forestal	16932.21	36404.25
Cacao	5053.69	62570.80
Palma Africana	9388.23	24055.46
Plátano	11845.01	7817.71

Nota. Tomado de “Atlas Bioenergético de Ecuador”, por ESIN Consultora S.A., 2014

Diseño de procesos

El diseño de proceso es una actividad compleja, envuelve aceptar como entrada una descripción abstracta de los deseos de una organización y ofrecer una descripción detallada de un producto, proceso o sistema concreto que satisfaga esos deseos. de un producto, proceso o sistema concreto que satisfaga esos deseos. El diseño comienza con el planteamiento del problema. Una vez que se ha especificado adecuadamente el problema de diseño, el siguiente paso es la generación de alternativas. Una vez generadas las alternativas, el siguiente paso es el análisis de estas, en este paso se aplica a cada alternativa un análisis de ingeniería que suele comenzar con balances de masa y energía. Se aplica a cada alternativa generada para hacer predicciones sobre el rendimiento esperado del sistema. El resultado de este paso puede ser una lista de las entradas y salidas del proceso, incluidos los caudales, las composiciones, la presión, la temperatura y el estado físico de todos los flujos de materiales, así como la tasa de consumo de energía de las distintas fuentes (Cano & McRae, 1998).

Simulación de procesos

La simulación de procesos puede utilizarse para predecir el rendimiento en diversas circunstancias, el valor de estas predicciones depende de la calidad del modelo de simulación. Cabe recalcar, en muchas situaciones la calidad del modelo de simulación deja mucho que desear. Se pueden presentar los siguientes problemas como es el proceso se ha modelado de forma incorrecta, no se han recogido suficientes datos para poder parametrizar el modelo y el lenguaje no permite la modelar comportamientos más sutiles. Los dos primeros problemas pueden abordarse mediante formación y una mejor validación del modelo. Esto puede solucionarse en parte con mejores técnicas de modelización, por ejemplo, con parámetros adicionales que describan las características de los recursos. La idea clave de la simulación es ejecutar un modelo repetidamente. La razón para hacer los experimentos repetidamente es para no llegar a un único valor La simulación de procesos (modelización) desempeña un papel crucial

en todas las actividades de ingeniería de procesos, incluyendo la investigación y desarrollo, el diseño del proceso y su funcionamiento (Aalsta, 2014).

Capítulo III

Metodología

Introducción

Para el proceso de pirólisis de los residuos de polipropileno y la cáscara de cacao para la producción de gas de síntesis se realizó mediante un modelado hipotético y empleando el software de simulación Aspen Plus V10. Los paquetes termodinámicos empleados en el software fueron NRTL.

En el Ecuador, SENA (2022), menciona que la producción de residuos de polipropileno en el año 2021 se encuentra en un total aproximado de 78053. 89866 toneladas. ESIN Consultora S.A. (2014), menciona que en el año 2014 la producción de residuos de cacao fue de 2014727.89 toneladas. Mencionada la cantidad existente de residuos en el Ecuador se tomó como referencia 63 kton/año para el flujo de alimentación tanto del polipropileno como de la cáscara del cacao.

Modelado de la descomposición del polipropileno

En el proceso de la descomposición del polipropileno se generan un gran número de reacciones al aplicar calor, para lo cual se plantea un mecanismo hipotético. Los productos que se generan en su mayoría en estas reacciones son los alquenos que están representados en un 50%.

Budsareechai (2019), menciona que en el proceso de pirólisis del polipropileno $(C_3H_6)_n$ puede generarse en la primera y en la segunda reacción productos predominantes en fase líquida como es el 3-octadeceno $(C_{18}H_{36})$ y 2,6 dimetil-1-hepteno C_9H_{18} .



Miskolczi (2009), menciona que para un tercera reacción en la descomposición del polipropileno los productos más predominantes que se obtienen en fase gaseosa son el etileno (C_2H_4) y el propileno (C_3H_6), estos productos son de gran importancia para el siguiente proceso de reformado con vapor ya que me permite la obtención de gas de síntesis.

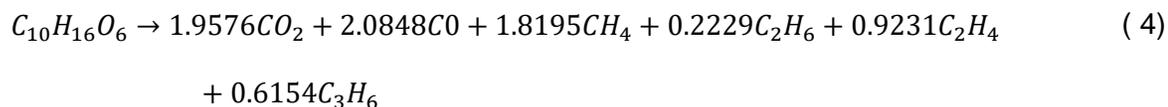


Modelado de la biomasa

Los residuos del cacao presentan un 54.74% de celulosa, 19.06% de hemicelulosa y un 26.2% de lignina. Mediante el proceso de pirólisis de esta biomasa los productos más predominantes que se pueden obtener son CO , CO_2 , CH_4 y trazas de otros componentes en pequeñas cantidades (Bajus, 2010).

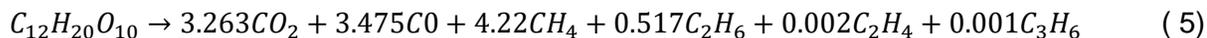
Hemicelulosa

Para la reacción de la hemicelulosa se tomó una forma simplificada ($C_{10}H_{16}O_6$) como se muestra en la ecuación 4.



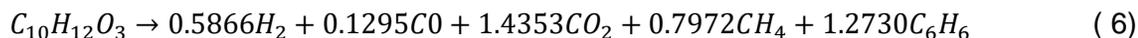
Celulosa

Para la reacción de la celulosa se tomó una forma simplificada ($C_{12}H_{20}O_{10}$) como se muestra en la ecuación 5.



Lignina

Para la reacción de la lignina se tomó una forma simplificada ($C_{10}H_{12}O_3$) como se muestra en la ecuación 6.



Modelado de las reacciones de reformado con vapor

Natesakhawat (2005), menciona sobre las posibles reacciones en equilibrio que se pueden presentar en un proceso de reformado con vapor que son:



Se plantearon estas reacciones para todos los hidrocarburos livianos como el metano, etano, propileno y etileno, que serán ingresados en el proceso de reformado con vapor.

Parámetros cinéticos

Los parámetros cinéticos para la celulosa, hemicelulosa y lignina se tomaron de Borrero et al. (2021), estos datos se obtuvieron mediante un modelado de una sola etapa para las reacciones de la celulosa, hemicelulosa y lignina que son reacciones de primer orden. En la tabla 4 se muestran los valores de la constante de velocidad (k) y la energía de activación (E) a 240°C.

Tabla 4*Parámetros cinéticos de la biomasa*

Componente	k [s^{-1}]	E [kJ/mol]
Hemicelulosa	29400	85.48
Celulosa	2690	87.54
Lignina	59.4	69.41

Nota. Tomado de Medellín the reactions of cellulose, hemicellulose and lignin submitted to hydrothermal treatment (p.20), por Borrero, 2021, *Hal Open Science*.

Para el polipropileno, los parámetros cinéticos como la constante de velocidad y la energía de activación fueron calculados como se muestran en el Anexo1. En la tabla 5 se muestra los valores de la constante de velocidad (k) y la energía de activación (E) para las reacciones de polipropileno a una temperatura de 740°C.

Tabla 5*Parámetros cinéticos del polipropileno*

Reacción de descomposición	k [s^{-1}]	E [kJ/mol]
1	0.01495	2.59
2	16.13	29.81
3	1.773	43.96

Equipos

- **Reactor tubular de flujo pistón R-plug**

Los reactores de flujo pistón se utilizan para reacciones en fase líquida o fase gaseosa, que operan en estado estacionario, las reacciones en cada fase son controladas por su estequiometría o cinética. Este tipo de reactores permiten aumentar las conversiones mediante su número de tubos.

- **Reactor de equilibrio**

Son reactores con equilibrios químicos y de fases simultáneas. Realiza equilibrio químico y de fases mediante cálculos estequiométricos. Este tipo de reactor permite obtener una conversión en equilibrio similar a la conversión de reacciones irreversibles.

- **Sep**

Permite separar los componentes.

- **Separador flash**

Este equipo trabaja en estado estacionario generando dos corrientes, por la parte superior la corriente de vapor y por la parte inferior la corriente líquida.

- **Compresores, válvulas y bombas**

Son equipos auxiliares que permiten cambiar la presión.

- **Intercambiador de calor**

Es un equipo que requiere de dos corrientes de proceso, una corriente caliente y una fría.

- **Heater**

Intercambiador de calor, requiere de una sola corriente de proceso.

- **Mixer**

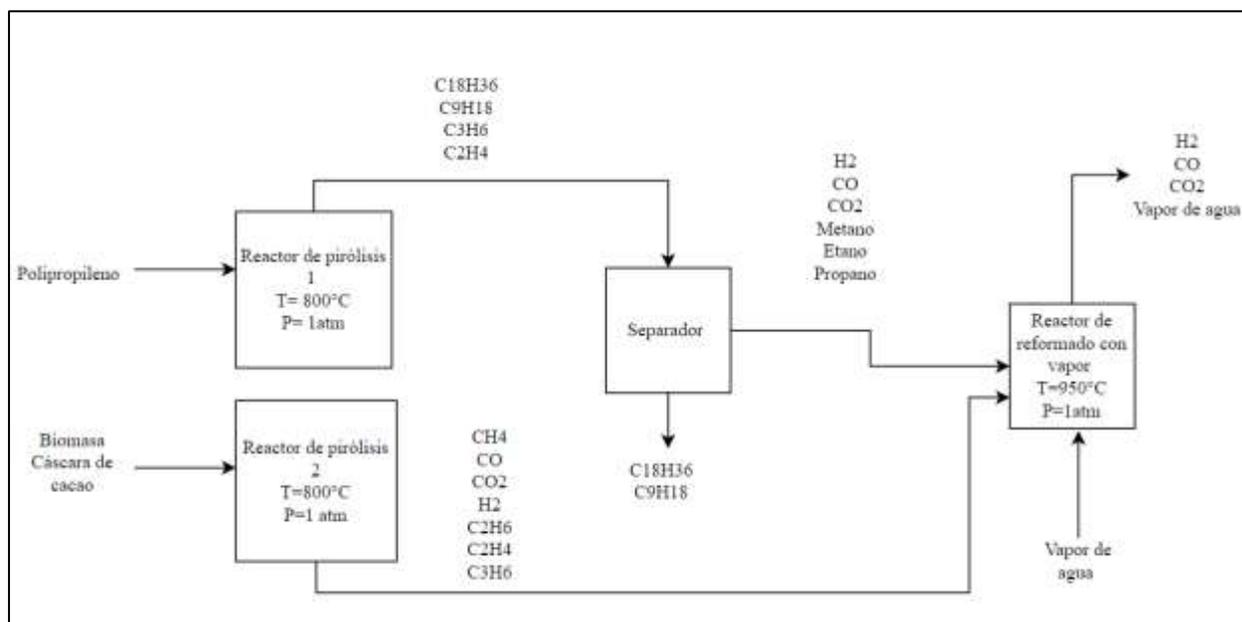
Es un mezclador que combina dos o más entradas para producir una única salida.

Diagrama de bloques

En la figura 4 se muestra el proceso simplificado y las operaciones unitarias involucradas en la obtención de gas de síntesis mediante un diagrama de bloques.

Figura 4

Diagrama de bloques del proceso



Simulación

Selección del modelo termodinámico

Se seleccionó el paquete termodinámico NRTL, debido a que calcula los coeficientes de actividad de la fase líquida, basándose en un modelo UNIFAC que calcula los coeficientes de actividad partiendo de los grupos funcionales que conforman cada molécula. El paquete termodinámico NRTL considera que la fase de vapor es un gas ideal. Este paquete se utiliza en mezclas líquidas de hidrocarburos, mezclas de compuestos no polares, mezclas polares y no polares, mezclas de agua y especies no polares (Jana, 2011).

Ingreso de componentes no disponibles en el software de Aspen Plus

En el software Aspen Plus no dispone en su librería los componentes polipropileno y biomasa. Para ingresar los componentes no disponibles se introdujeron gráficamente las estructuras del polipropileno y los componentes de la biomasa que son la celulosa, hemicelulosa y lignina. Al ingresar las estructuras de estos componentes el software determina fácilmente las propiedades de cada componente. De cada componente se tomó una estructura representativa es decir un monómero.

Para ingresar la estructura del componente no disponible en el software Aspen plus se da un clic en la ventana Components y luego en la opción User Defined para ingresar el nombre del componente, posteriormente dar next y dar clic en la opción Draw como se muestran en la figura 5, figura 6 y la figura 7.

Figura 5

Ventana de selección de componentes

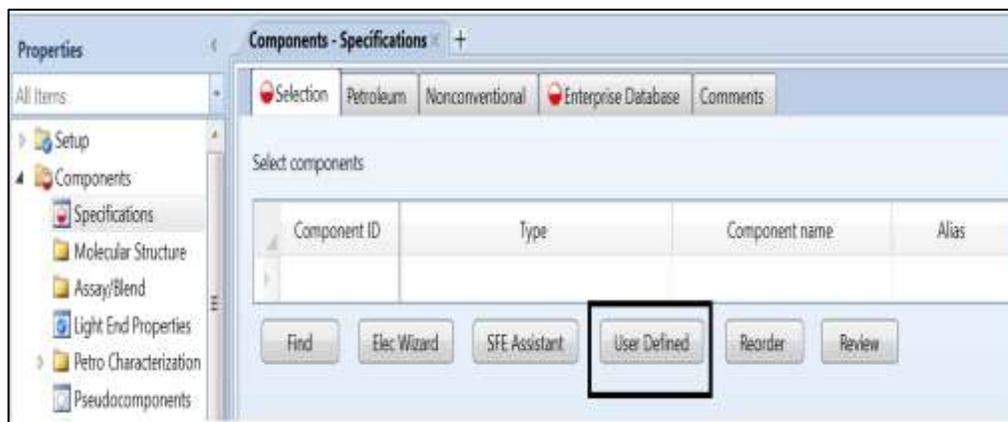


Figura 6

Ventana User-Defined Component

The screenshot shows the 'User-Defined Component Wizard' window. The title bar reads 'User-Defined Component Wizard'. The main area contains a welcome message: 'Welcome to the User-Defined Component Wizard, the quickest way to enter properties for user-defined component. This wizard will lead you through the steps to enter the required physical properties for the user-defined component based on its type.' Below this, there are two input fields: 'Component ID:' with the value 'PPROPENE' and 'Type:' with a dropdown menu set to 'Conventional'. An 'Alias' field contains 'POLYPROPENE'. A text box lists 'Required properties for conventional components include: Molecular weight, normal boiling point, molecular structure, vapor pressure and ideal gas heat capacity'. At the bottom, there are four buttons: 'Cancel', '<Back', 'Next>', and 'Finish'. A note at the bottom left says 'Click Next> to continue or Finish to accept the component and exit.'

Figura 7

Ventana User-Defined Component

The screenshot shows the 'User-Defined Component Wizard' window at the 'Basic data for conventional component' step. The title bar reads 'User-Defined Component Wizard'. The main area contains the following fields: 'Component ID: PPROPENE' and 'Alias: POLYPROPENE'. Under the heading 'Enter molecular structure', there are two buttons: 'Draw/Import/Edit structure' (highlighted with a black box) and 'Define molecule by its connectivity'. Below this is the section 'Enter available property data' with five rows of input fields and units: 'Molecular weight:' (empty field), 'Normal boiling point:' (empty field, unit dropdown set to 'C'), 'Specific gravity at 60 deg. F:' (empty field), 'Ideal gas enthalpy of formation:' (empty field, unit dropdown set to 'cal/mol'), and 'Ideal gas Gibbs energy of formation:' (empty field, unit dropdown set to 'cal/mol'). At the bottom, there are four buttons: 'Cancel', '<Back', 'Next>', and 'Finish'.

Desde la figura 8 hasta la Figura 11 se muestran las gráficas de las estructuras ingresadas de los componentes que no están disponibles en las librerías.

Figura 8

Estructura del componente polipropileno

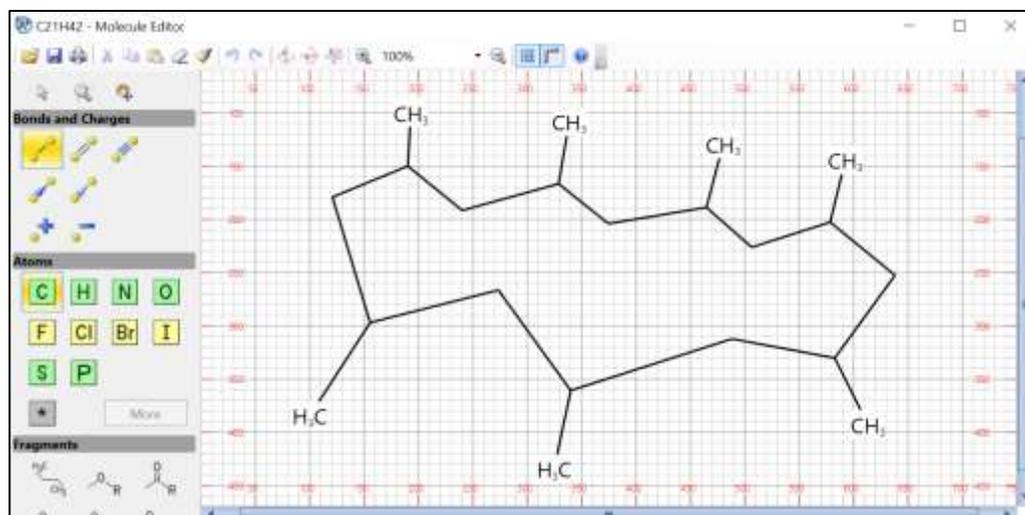


Figura 9

Estructura de la hemicelulosa

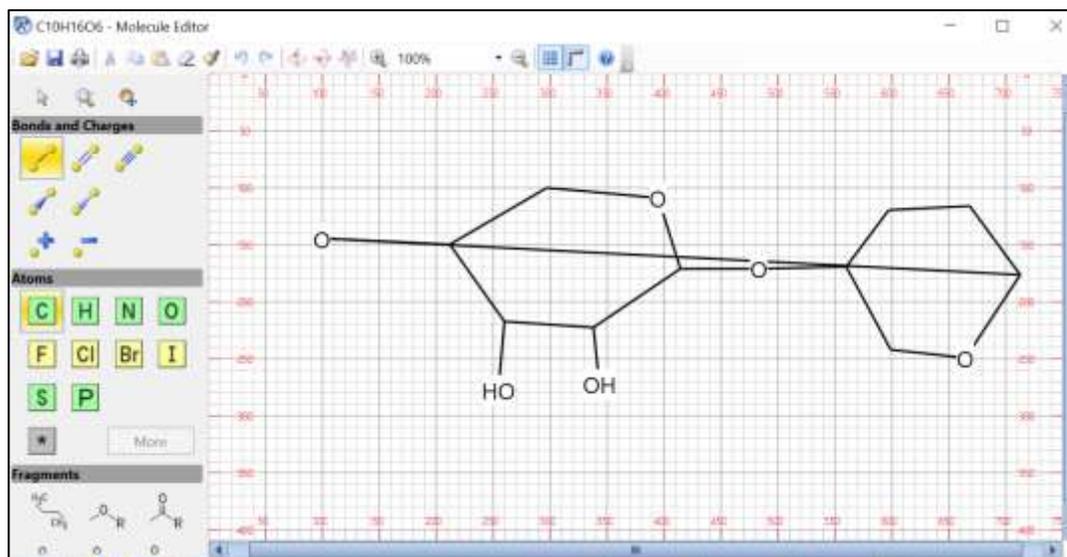
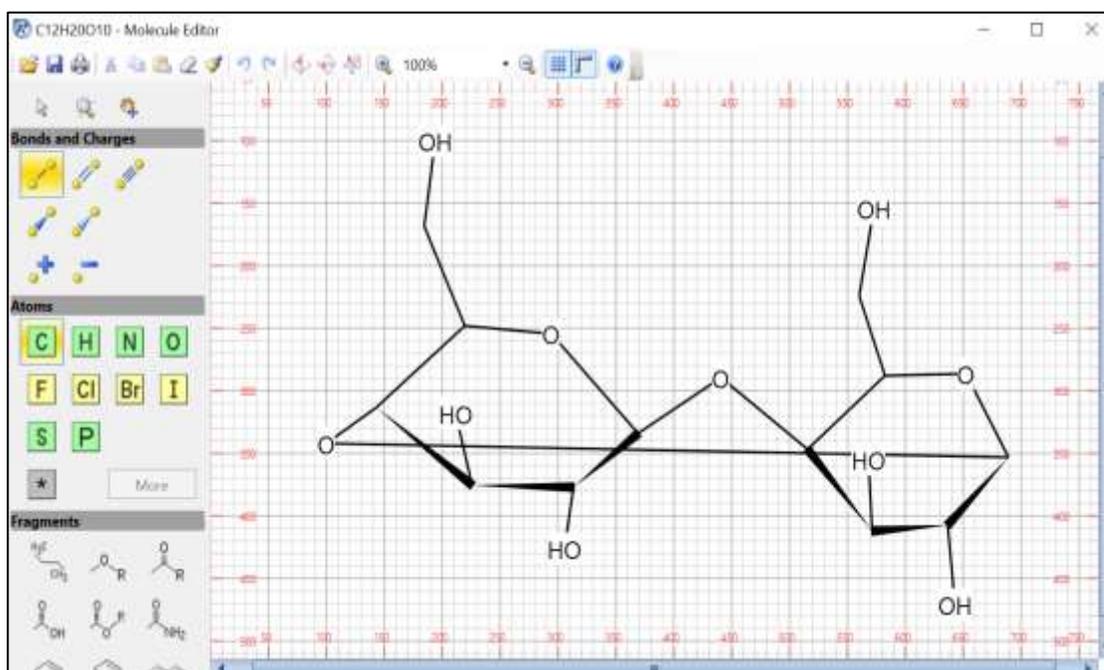
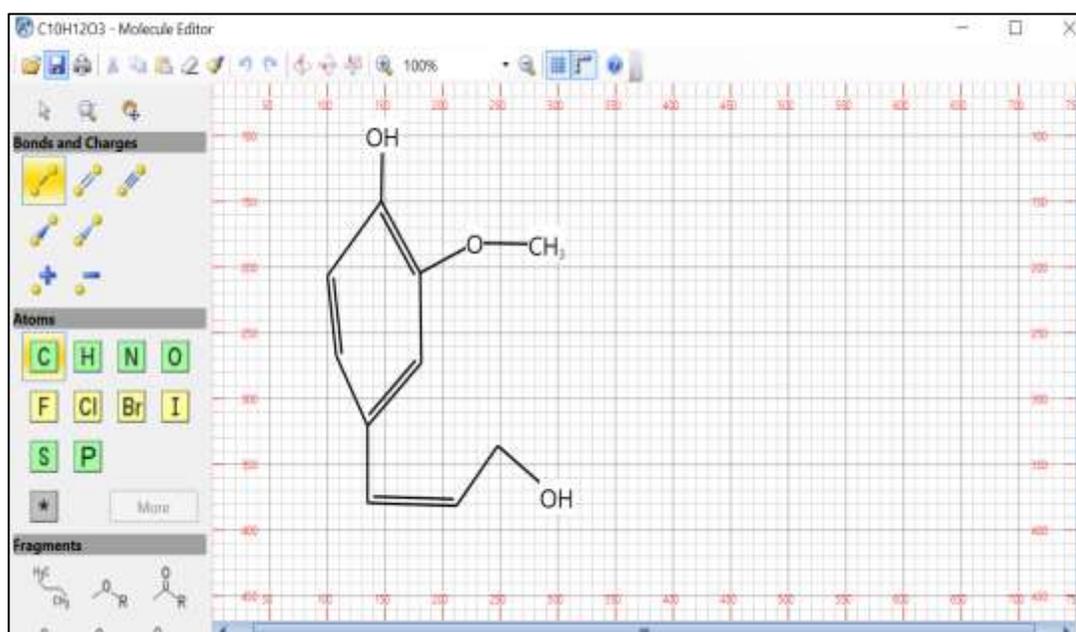


Figura 10*Estructura de la celulosa***Figura 11***Estructura de la lignina*

Mediante el ingreso de las estructuras de los componentes al software, se puede determinar propiedades de cada estructura como se muestra en la figura 12.

Figura 12

Propiedades de los componentes

Parameters	Units	Data set	Component CO	Component CO2	Component H2	Component CELLULOSE	Component HCELLULOS	Component LIGNINE	Component METHANE	Component ETHANE
DGFORM	CAL/MOL	1	-32760,1	-94200,8	0	-250182	-116122	-43020,9	-12137	-7870
DHEFORM	CAL/MOL	1	-26359,6	-93990,6	0	-348402	-427808	-156940	-17883,1	-20240
DHAQFM	CAL/MOL	1	-28890,8	-96834,4	-1003,15	0	0	0	-21266,8	-24383,0
DHWLE	CAL/MOL	1	1444	4100	216	40363,2	25137,4	20163,9	1955	3510
HFUS	CAL/MOL	1	200,866	2154,15	27,9689				224,85	682,80
API		1	340	340	340				340	265,5
VC	CC/MOL	1	93,2441	93,9446	64,9115	729,5	545,5	470,5	99,2094	148,17
VCRKT	CC/MOL	1	93,2441	93,9446	64,9115	729,5	545,5	470,5	99,2094	148,17
VLSTD	CC/MOL	1	53,5578	53,5578	53,5578	63,8616	57,2138	71,6734	53,5578	84,7116
S02SE	CAL/MOL-K	1	25,8701	50,3696	31,2124	0	0	0	63,7958	96,379
PC	BAR	1	34,9571	73,7646	12,9696	40,5696	38,3878	39,7552	46,0016	48,838
VB	CC/MOL	1	35,0109	35,6374	28,6127	115,397	92,8071	105,257	37,7482	55,0614
MW		1	28,0104	44,0098	2,01588	324,285	232,233	180,203	16,0428	10,0699
TRCELLS	C	1	35	35	35	35	35	35	35	35

Simulación del primer reactor de pirólisis del polipropileno

Para detallar sobre la simulación se mencionará las corrientes y los equipos utilizados en cada etapa. La corriente de alimentación se encuentra en condiciones de ambiente, para lo cual, antes de ingresar al R-plug se debe previamente acondicionar la materia prima hasta una temperatura de 800 °C y 1 atm utilizando tres heaters. El primer heater representa la zona de convección, el segundo heater representa la zona de escudo y el tercer heater representa la zona de radiación, debido a que la combinación del heater con el reactor representan a un horno de pirólisis. Las reacciones que se presentan en el modelado de la descomposición del polipropileno fueron ingresadas para el primer reactor. Buekens (1998), menciona que en un rango de temperatura de 700°C a 800°C a una presión de 1 atm se puede generar hasta un 49.6% de productos gaseosos en el proceso de pirólisis del polipropileno.

El reactor R-plug 1 es simulado como un reactor multitubular, para lo cual, los datos ingresados en dicho equipo fueron tomados de Sandoval Hinds (2007), menciona que los diámetros comerciales para este tipo de reactor se encuentran en un rango de 2 a 8 pulgadas y la relación de longitud/diámetro debe estar entre un valor de 90 a 120. También menciona sobre que el número de tubo requeridos para este reactor debe ser máximo hasta 5000 tubos.

En la tabla 6 se muestran los datos de alimentación en la corriente de entrada al reactor y en la figura 13 se muestra el diagrama de flujo de la simulación para el proceso de pirólisis del plástico.

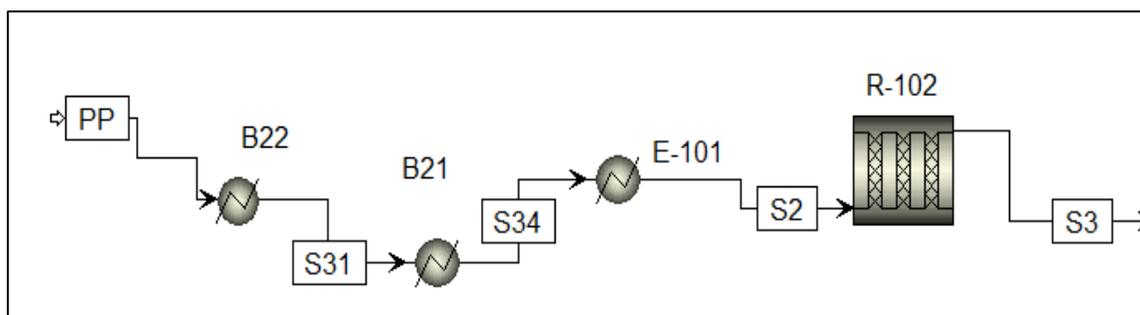
Tabla 6

Datos ingresados al reactor R-plug 1

Corriente	Flujo másico [kton/año]	Temperatura [°C]	Presión [atm]	Longitud [in]	Número de tubos
Polipropileno	63	25	1		1
Equipo	Temperatura [°C]	Presión [atm]	Diámetro [in]	Longitud [in]	Número de tubos
Heater 1	130	1			
Heater 2	260	1			
Heater 3	800	1			
R-plug 1	800	1	6	600	3000

Figura 13

Simulación del reactor 1 de pirólisis del polipropileno



Simulación del segundo reactor de pirólisis de la cáscara del cacao

El flujo másico total de la corriente de alimentación a la entrada del reactor 2 es de 63 kton/año, dicha corriente se encuentra a condiciones ambiente, para lo cual, antes de ingresar al R-plug se debe realizar un precalentamiento de la materia prima utilizando tres heaters hasta llegar a una temperatura de 800°C y a una presión de 1 atm. Bajus (2010), menciona que en el proceso de pirólisis de la biomasa si se utilizan temperaturas bajas favorece la producción de productos líquidos. Las reacciones que se presentan en el modelado de la descomposición de la biomasa fueron ingresadas para el segundo reactor.

Lestinsky & Palit (2016), indica que al aumentar la temperatura en el proceso de pirólisis de la biomasa aumenta la producción de productos gaseosos, a una presión de 1 atm y una temperatura de 300°C se puede obtener un 40% en peso de productos gaseosos, si la temperatura aumenta a 800°C se logra obtener un 90% en peso de productos gaseosos. En la tabla 7 se muestran las composiciones en la corriente de entrada al reactor 2 y en la figura 14 se muestra el diagrama de flujo de la simulación para el proceso de pirólisis de la biomasa.

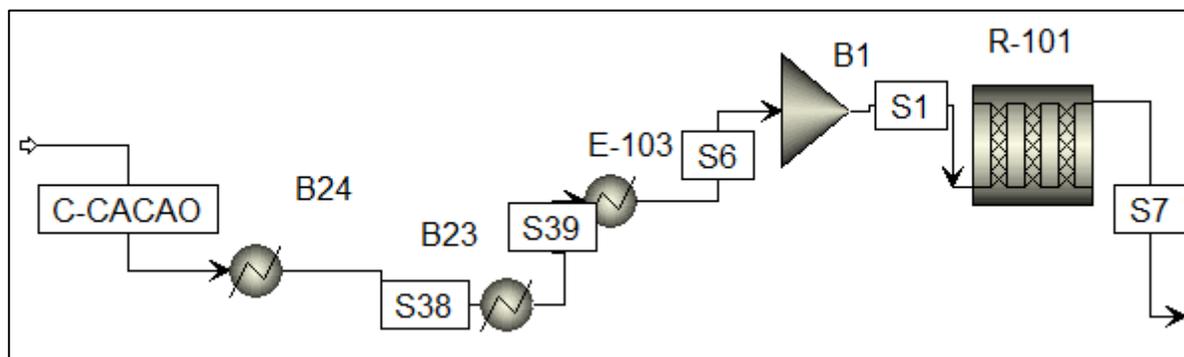
Tabla 7

Datos ingresados al reactor R-plug 2

Corriente	Fracción másica	Temperatura [°C]			Presión [atm]
Celulosa	0.5474	25			1
Hemicelulosa	0.1906	25			1
Lignina	0.262	25			1
Equipo	Temperatura [°C]	Presión [atm]	Diámetro [in]	Longitud [in]	Número de tubos
Heater 4	130	1			
Heater 5	260	1			
Heater 6	800	1			
R-plug 2	800	1	4	400	3000

Figura 14

Simulación del reactor 2 de pirólisis de la biomasa



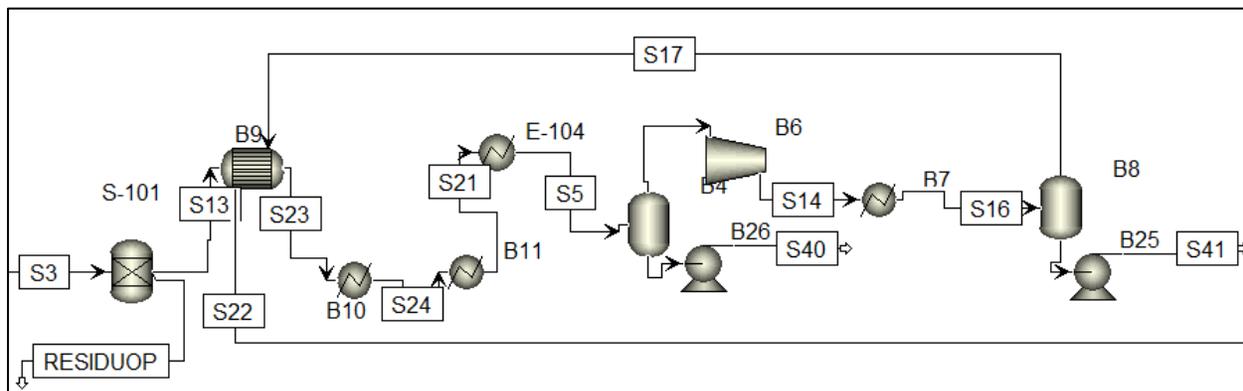
Separación de componentes

Luego del proceso de pirólisis del polipropileno en el reactor R-plug 1, en la corriente de salida S3 se tienen como productos 3-octadeceno, 2,4 dimetil-1-hepteno, propileno, etileno y pequeñas trazas de polipropileno. Para la primera separación se utiliza un sep que permite separar los productos principales de las trazas de polipropileno que no reaccionaron. Luego se requiere separar los productos líquidos de los productos gaseosos, para lo cual, se utiliza un intercambiador de calor (HeatX).

Como se muestra en la figura 15 la corriente S13 ingresa al intercambiador de calor con una temperatura de 800°C, es decir es la corriente caliente, si se desea separar los productos gaseosos de los productos líquidos se requiere enfriar dicha corriente.

Figura 15

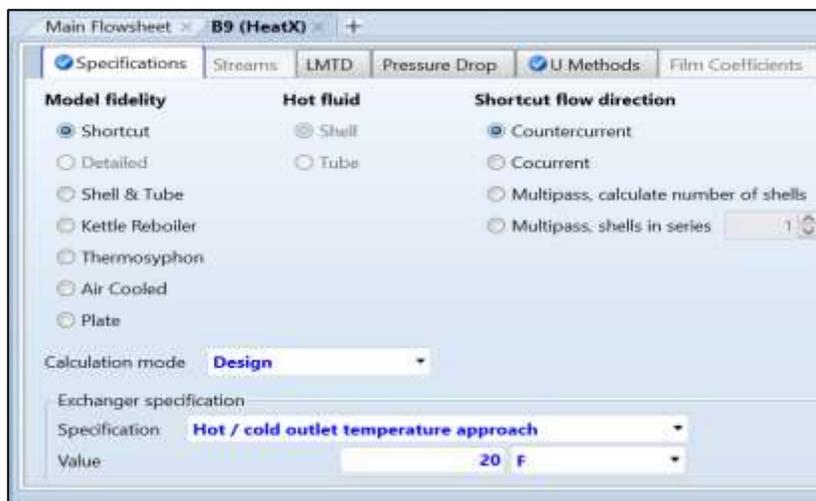
Simulación de la separación de componentes



Para ingresar los datos del intercambiador de calor B9 se tomó como referencia la heurística 26 mencionada en Seider et al. (2009) , donde especifica una temperatura mínima de aproximación de 20 °F como se muestra en la figura 16.

Figura 16

Especificación de la temperatura mínima de aproximación



Como se requiere enfriar la corriente S23 se utiliza un heater B10, los datos que son ingresados a este equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que generar vapor de alta presión se requiere una temperatura de 500 °F como se muestra en la figura 17.

Figura 17

Especificación de temperatura para el heater B10

Parameter	Value	Unit
Flash Type	Temperature	
Temperature	500	F
Temperature change		C
Degrees of superheating		C
Degrees of subcooling		C
Pressure	1	atm
Duty		cal/sec
Vapor fraction		

Para el siguiente enfriamiento se utiliza un heater B11 como se muestra en la figura 14, los datos ingresados a este equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que para utilizar agua de enfriamiento se requiere de una temperatura de 120 °F como se muestra en la figura 18.

Figura 18

Especificación de temperatura para el heater B11

Flash specifications	
Flash Type	Temperature
	Pressure
Temperature	120 F
Temperature change	C
Degrees of superheating	C
Degrees of subcooling	C
Pressure	1 atm
Duty	cal/sec
Vapor fraction	
Pressure drop correlation parameter	

Para el tercer enfriamiento se utiliza un heater E-104, los datos ingresados en el equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que para utilizar agua de refrigeración se requiere de una temperatura de 55 °F como se muestra en la figura 19.

Figura 19

Especificación de temperatura para el heater E-104

Flash specifications	
Flash Type	Temperature
	Pressure
Temperature	55 F
Temperature change	C
Degrees of superheating	C
Degrees of subcooling	C
Pressure	1 atm
Duty	cal/sec
Vapor fraction	
Pressure drop correlation parameter	

Luego de realizar el enfriamiento la corriente S5 ingresa a un separador flash, los datos ingresados en el equipo son de 1 atm y opera adiabáticamente como se muestra en la figura 20.

Figura 20

Datos ingresados al separador flash

Flash specifications	
Flash Type	Pressure Duty
Temperature	C
Pressure	1 atm
Duty	0 cal/sec
Vapor fraction	
Valid phases	
Vapor-Liquid	

González (2016), menciona sobre un proceso de compresión y enfriamiento que permite una mayor separación de la fase líquida con la fase de vapor. Después de separar los componentes livianos y pesados, la corriente S9 ingresa a un compresor B6, la especificación de este equipo fue de 5 bares como se muestra en la figura 20.

Figura 21

Datos ingresados al compresor

Main Flowsheet × B6 (Compr) × +

Specifications Calculation Options Power Loss Convergence Integration Parameters

Model and type

Model Compressor Turbine

Type **Isentropic**

Outlet specification

Discharge pressure: bar

Pressure increase: bar

Pressure ratio:

Power required: kW

Use performance curves to determine discharge conditions

Luego se realiza nuevamente un enfriamiento utilizando un heater B7 con agua de refrigeración a una temperatura de 55°F y a una presión de 5 bares como se muestra en la figura 22.

Figura 22

Datos ingresados al heater B7

Main Flowsheet × B7 (Heater) × +

Specifications Flash Options Utility Comments

Flash specifications

Flash Type: **Temperature**

Pressure

Temperature: F

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

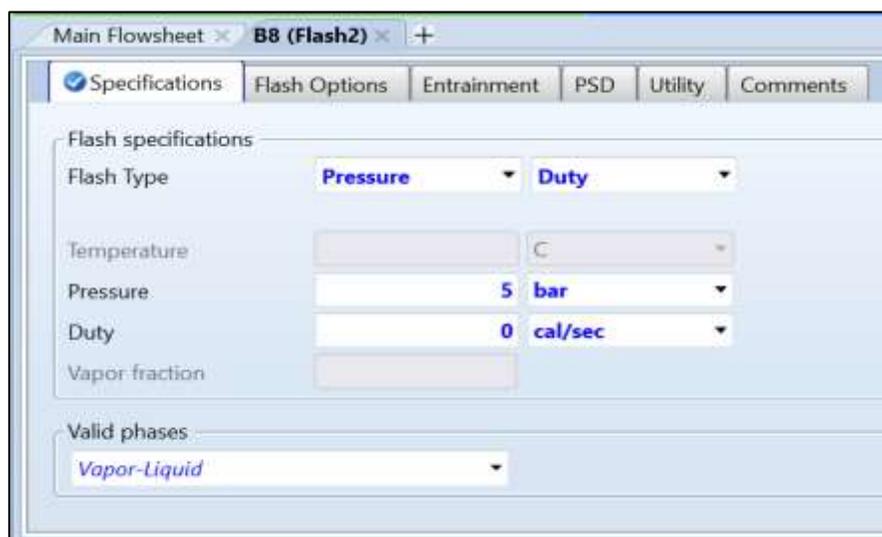
Pressure: bar

Duty: cal/sec

Luego de realizar el último enfriamiento la corriente S16 ingresa a un separador flash, los datos ingresados en el equipo son de 5 bares y opera adiabáticamente como se muestra en la figura 23. La corriente fría S17 de los productos gaseosos ingresa al equipo B9 para intercambiar calor con la corriente S13 para luego dirigirse a la sección de reformado con vapor.

Figura 23

Datos ingresados al separador flash



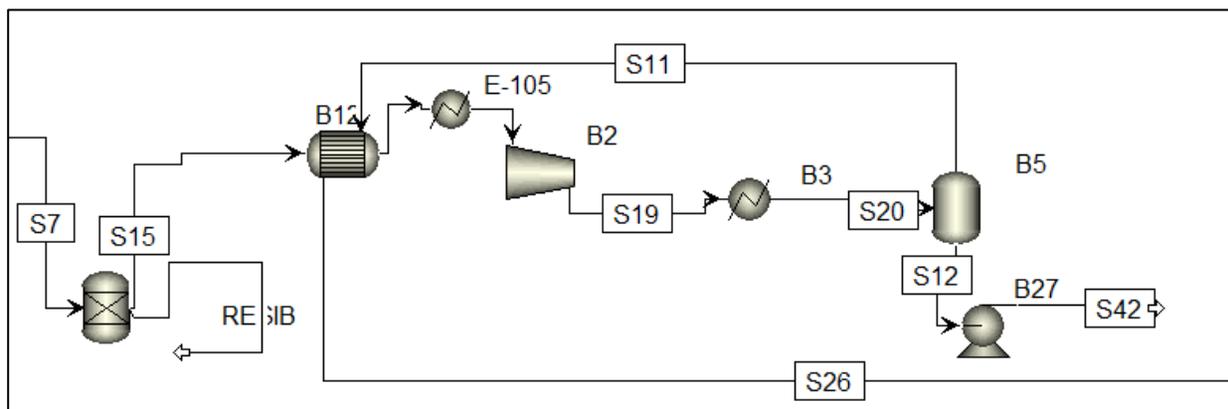
Parameter	Value	Unit
Flash Type	Pressure	Duty
Temperature		C
Pressure	5	bar
Duty	0	cal/sec
Vapor fraction		
Valid phases	Vapor-Liquid	

Para el proceso de separación de los componentes de la biomasa, luego del proceso de pirólisis de la biomasa en el reactor R-plug 2, en la corriente de salida S7 se tienen como productos propileno, etileno, monóxido de carbono, dióxido de carbono, hidrógeno, metano, etano, benceno y trazas de celulosa y lignina que no reaccionaron. Para la primera separación se utiliza un sep que permite separar los productos principales de las trazas de hemicelulosa y lignina que no reaccionaron. Luego se requiere separar los productos líquidos de los productos gaseosos, para lo cual, se utiliza un intercambiador de calor (HeatX).

Como se muestra en la figura 24 la corriente S15 ingresa al intercambiador de calor con una temperatura de 800°C, es decir, es la corriente caliente, si se desea separar los productos gaseosos de los productos líquidos se requiere enfriar dicha corriente.

Figura 24

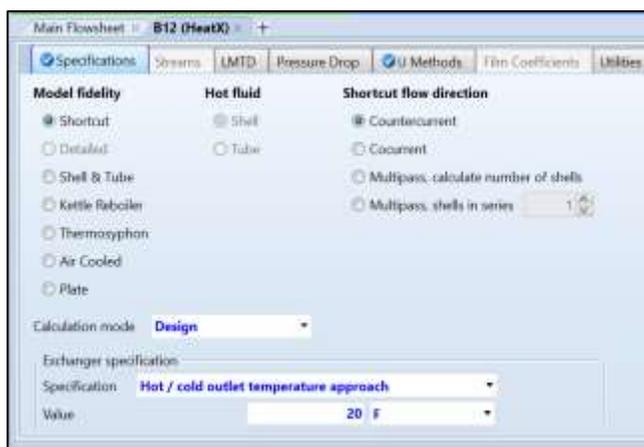
Simulación de la separación de componentes



Para ingresar los datos del intercambiador de calor B12 se tomó como referencia la heurística 26 mencionada en Seider et al. (2009) , donde especifica una temperatura mínima de aproximación de 20 °F como se muestra en la figura 25.

Figura 25

Especificación de la temperatura mínima de aproximación



Para el enfriamiento de la corriente S25 se utiliza un heater E-105 como se muestra en la figura 24, los datos ingresados a este equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que para utilizar agua de enfriamiento se requiere de una temperatura de 110 °F como se muestra en la 26.

Figura 26

Especificación de temperatura para el heater E-105



Tomando en cuenta lo mencionado sobre el proceso de compresión y enfriamiento lo aplicamos para esta separación, para el compresor B2 se ingresan las especificaciones de 5 bares como se muestra en la figura 27.

Figura 27

Datos ingresados al compresor

Main Flowsheet × B2 (Compr) × +

Specifications Calculation Options Power Loss Convergence Integration Parameters

Model and type

Model Compressor Turbine

Type **Isentropic**

Outlet specification

Discharge pressure **5 bar**

Pressure increase bar

Pressure ratio

Power required kW

Use performance curves to determine discharge conditions

Efficiencies

Isentropic Polytropic Mechanical

Para enfriar la corriente S19 se requiere de un heater B3, los datos ingresados en el equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que para utilizar propano de refrigeración se requiere de una temperatura de -28°F como se muestra en la figura 28. El objetivo de tomar esta temperatura es debido a que se necesita que el benceno se condense.

Figura 28

Datos ingresados al heater B3

Main Flowsheet × B3 (Heater) × +

Specifications Flash Options Utility Comments

Flash specifications

Flash Type **Temperature**

Pressure

Temperature **-28 F**

Temperature change C

Degrees of superheating C

Degrees of subcooling C

Pressure **5 bar**

Duty cal/sec

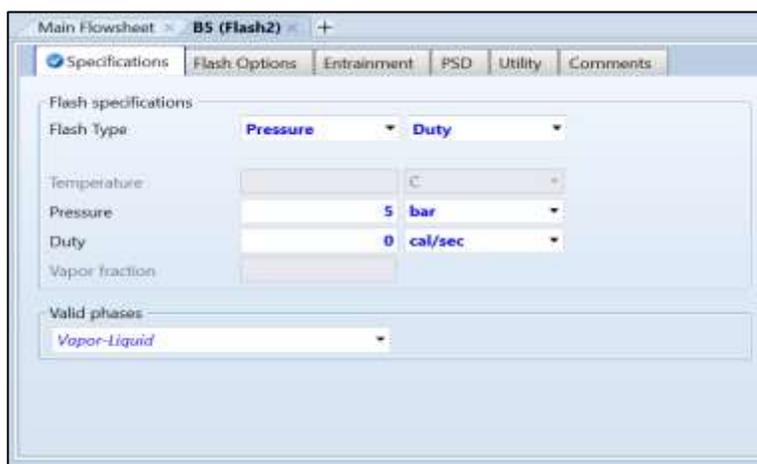
Vapor fraction 0.968

Pressure drop correlation parameter

Luego de realizar el último enfriamiento la corriente S20 ingresa a un separador flash, los datos ingresados en el equipo son de 5 bares y opera adiabáticamente como se muestra en la figura 29. La corriente fría S11 de los productos gaseosos ingresa al equipo B12 para intercambiar calor con la corriente S15 para luego dirigirse a la sección de reformado con vapor.

Figura 29

Datos ingresados al separador flash

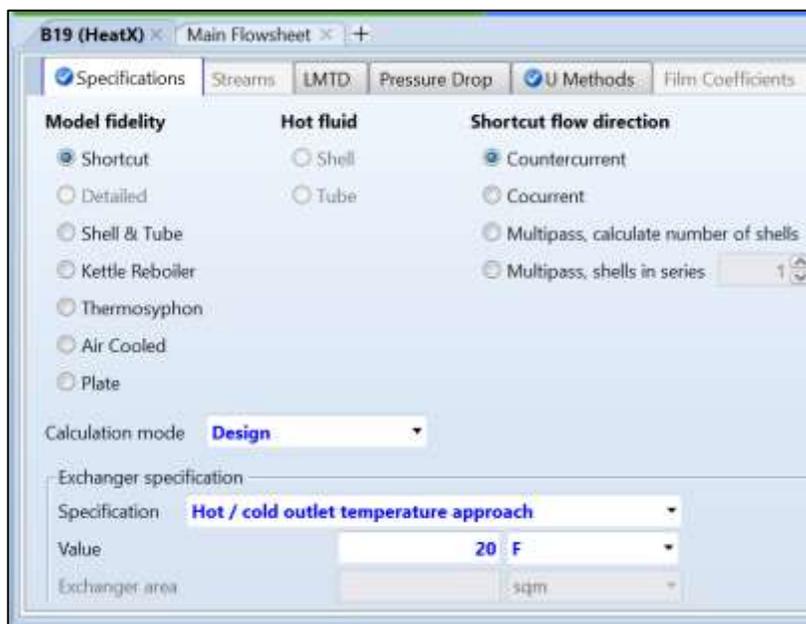


Simulación del reactor de reformado con vapor

Después de separar los hidrocarburos livianos provenientes del proceso de pirólisis se mezclan en un Mixer, posteriormente los componentes que ingresan al reactor de equilibrio son metano, etano, etileno y propileno. Cabe mencionar que el metano y etano provienen de la pirólisis de la biomasa, mientras que el propileno y etileno provienen de la pirolisis del plástico y de la biomasa. La corriente de hidrocarburos antes de ingresar al reactor debe estar precalentada por un heater a 950 °C. Natesakhawat (2005), menciona que las condiciones para el proceso de reformado con vapor está en un intervalo de 500°C hasta 950°C a 1 atm.

Figura 31

Especificación de la temperatura mínima



La corriente S36 se precaliente en un heater a 950°C que es la condición de alimentación para ingresar al reactor de equilibrio.

Para la separación final del proceso es necesario primero enfriar la corriente S33 con el fin de separar toda el agua posible de los productos gaseosos, para enfriar dicha corriente se utiliza un heater B20, los datos ingresados a este equipo son tomados de Seider et al. (2009), donde menciona que para utilizar propano de refrigeración se debe especificar una temperatura de 0 °F como se muestra en la figura 32.

Figura 32

Especificación de temperatura para el heater B20

The image shows a software dialog box titled "B20 (Heater)" with a "Specifications" tab selected. The dialog contains several input fields and dropdown menus for configuring heater parameters. The "Temperature" field is set to "0 F", "Pressure" is set to "1 atm", and "Valid phases" is set to "Vapor-Liquid".

Parameter	Value	Unit
Temperature	0	F
Temperature change		C
Degrees of superheating		C
Degrees of subcooling		C
Pressure	1	atm
Duty		cal/sec
Vapor fraction		
Pressure drop correlation parameter		

Always calculate pressure drop correlation parameter

Valid phases: Vapor-Liquid

Capítulo IV

Resultados y Discusiones

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en la simulación del proceso de pirólisis de los residuos de polipropileno y residuos de cacao en el software de simulación de procesos químicos.

Alimentación del proceso

Para la alimentación del proceso de pirólisis se tomaron los valores que se encuentra en la tabla 8.

Tabla 8

Flujos másicos ingresados al reactor

Componentes	Flujo másico [kton/año]
Polipropileno	63
Biomasa (cáscara de cacao)	63

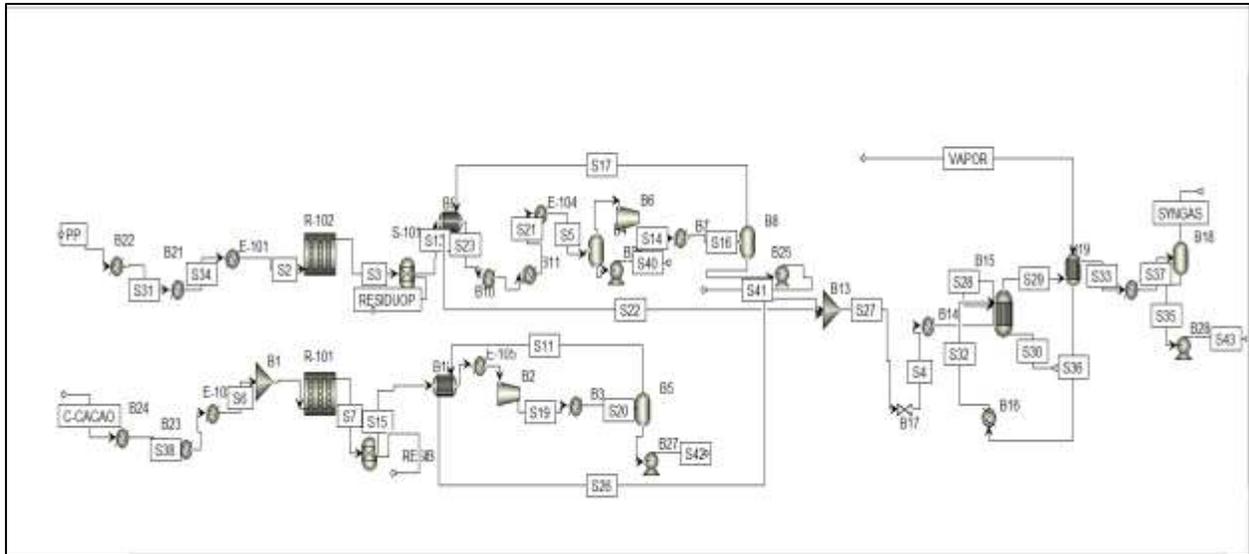
Obtención del gas síntesis

Con base a la revisión bibliográfica, se determinaron los modelados hipotéticos de descomposición de la materia prima y las reacciones presentes en un proceso de reformado con vapor que posteriormente son ingresadas a cada reactor en el proceso de la simulación. En la figura 33 muestra el proceso diseñado en el software de simulación de procesos químicos, donde se observa de forma general la producción de gas de síntesis en 3 etapas. La primera etapa hace referencia a la pirólisis del plástico y la biomasa. La segunda etapa hace referencia a la separación de los componentes pesados y livianos que salen del proceso de pirólisis, dicha separación se realiza mediante el enfriamiento de las corrientes para luego mezclarse en un Mixer que posteriormente ingresa a la sección de reformado con vapor. En la tercera etapa

hace referencia al proceso de reformado con vapor, donde la corriente de productos gaseosos S28 reacciona con vapor de agua para producir gas de síntesis.

Figura 33

Proceso de obtención de gas de síntesis



Balance de masa del proceso

En la tabla 9 muestra todas las corrientes del proceso simulado, donde se observa los flujos másicos de cada componente a la entrada y salida de cada equipo.

Tabla 9

Balance de Masa

Nombre la corriente	Flujo másico [kg/h]										
	S1	S2	S3	ResiduoP	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11
PP		7141.22	355.45	355.45							
$C_{18}H_{36}$			7.10		7.10				3.30E-05	7.10	
C_9H_{18}			871.97		871.97				111.774	760.20	
C_3H_6			3937.91		3937.91		152.20	152.20	3919.45	18.46	140.63
C_2H_4			1968.95		1968.95		152.44	152.44	1967.51	1.45	151.06
H_2O											
CO							1471.91	1471.91			1471.91
CO ₂							2409.4	2409.4			2409.4
H ₂							4.86	4.86			4.86
CEL	3909.10					3909.10	195.7				
HCEL	1361.11					1361.11					
LIG	1871					1871	1129.85				
CH ₄							998.92	998.92			997.859
C ₂ H ₆							217.33	217.33			213.82
C ₆ H ₆							408.976	408.976			12.78

Flujo másico [kg/h]											
Nombre la corriente	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20	S21	S22
PP											
$C_{18}H_{36}$		7.10	3.30E-05		3.30E-05	2.84E-10	3.30E-05			7.10	2.84E-10
C_9H_{18}		871.98	111.77		111.77	19.11	92.65			871.98	19.11
C_3H_6	11.56	3937.92	3919.45	152.203	3919.45	3904.55	14.90	152.20	152.20	3937.92	3904.55
C_2H_4	1.37	1968.96	1967.51	152.44	1967.51	1966.29	1.21	152.44	152.44	1968.96	1966.29
H_2O											
CO	0.44			1471.91				1471.91	1471.91		
CO_2	29.91			2409.4				2409.4	2409.4		
H_2	5.79E-05			4.86				4.86	4.86		
CEL											
HCEL											
LIG											
CH_4	1.06			998.92				998.92	998.92		
C_2H_6	3.50			217.33				217.33	217.33		
C_6H_6	396.19			408.97				408.97	408.97		

Flujo másico [kg/h]											
Nombre la corriente	S23	S24	S25	S26	S27	S28	S29	ResiduoB	S32	S33	S35
PP											
$C_{18}H_{36}$	7.10	7.10			2.84E-10	2.84E-10	2.84E-10			2.84E-10	
C_9H_{18}	871.98	871.98			19.11	19.11	19.11			19.11	19.07
C_3H_6	3937.92	3937.92	152.20	140.63	4045.18	4045.18	8.12E-12			8.12E-12	
C_2H_4	1968.96	1968.96	152.44	151.06	2117.36	2117.36	3.91E-06			3.91E-06	3.64E-08
H_2O							8014.56		18595.4	8014.56	7957.85
CO			1471.91	1471.91	1471.91	1471.91	13907.7			13907.7	5.088
CO_2			2409.4	2409.4	2409.4	2409.4	5533.63			5533.63	64.77
H_2			4.86	4.86	4.86	4.86	2367.85			2367.85	0.041
CEL								0.60			
HCEL								6.26			
LIG											
CH_4			998.924	997.85	997.85	997.85	1.68			1.68	0.002
C_2H_6			217.33	213.82	213.82	213.82	2.81E-07			2.81E-07	4.57E-09
C_6H_6			408.97	12.78	12.78	12.78	12.78			12.78	12.15

Flujo másico [kg/h]				
Nombre la corriente	S36	S37	VAPOR	SYNGAS
PP				
<i>C₁₈H₃₆</i>		2.84E-10		
<i>C₉H₁₈</i>		19.11		0.042
<i>C₃H₆</i>		8.12E-12		
<i>C₂H₄</i>		3.91E-06		3.87E-06
<i>H₂O</i>	18595.4	8014.56	18595.4	56.70
<i>CO</i>		13907.7		13902.6
<i>CO₂</i>		5533.63		5468.86
<i>H₂</i>		2367.85		2367.81
CEL				
HCEL				
LIG				
<i>CH₄</i>		1.68		1.68
<i>C₂H₆</i>		2.81E-07		2.77E-07
<i>C₆H₆</i>		12.78		0.63

Especificación de diseño en el reactor

Se realizó una especificación de diseño en los reactores de pirólisis con el objetivo de determinar el número de tubos específicos para obtener una conversión del 95% de biomasa y polipropileno. En la tabla 10 se muestran los valores obtenidos por el software para alcanzar dicha conversión.

Tabla 10

Resultados de la especificación de diseño en lo reactores de pirólisis

Equipo	Número de tubos iniciales	Número de tubos para una conversión del 95%
R-102	2000	2548
R-101	2000	962

Análisis de sensibilidad

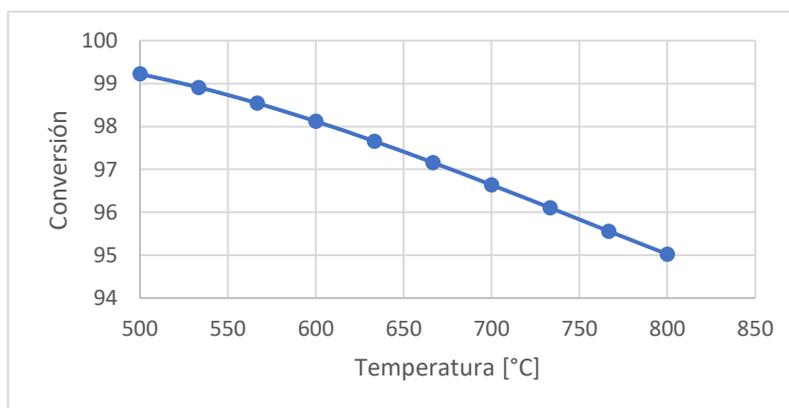
Se realizó el análisis de sensibilidad para los reactores de pirólisis y el reactor de reformado con vapor, con el objetivo de determinar las temperaturas óptimas para obtener una mayor conversión de la materia prima y un mayor rendimiento de gas generado.

En la tabla 11 se muestra como varía la temperatura en función de conversión en el reactor de pirólisis del polipropileno.

Tabla 11*Resultados del análisis de sensibilidad*

Temperatura	Conversión
500	99.22
533.33	98.91
566.66	98.54
600	98.1202045
633.33	97.6559804
666.66	97.1591077
700	96.6387762
733.33	96.1039857
766.66	95.5588686
800	95.022477

En la figura 34 se observa que una temperatura óptima para obtener una conversión del 99% de polipropileno es de 500°C.

Figura 34*Curva de sensibilidad temperatura vs conversión*

En la tabla 12 se muestra como varía la temperatura en función del rendimiento de gas generado en el reactor de pirólisis del polipropileno.

Tabla 12

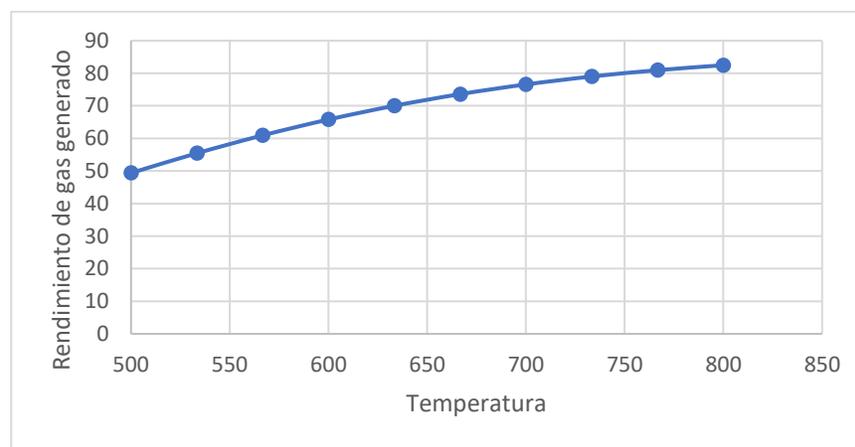
Resultados del análisis de sensibilidad

Temperatura	Rendimiento
500	49.39
533.33	55.44
566.66	60.93
600	65.79
633.33	70.01
666.66	73.58
700	76.56
733.33	79
766.66	80.94
800	82.47

En la figura 35 se observa que una temperatura óptima para obtener un rendimiento del 82% de gas generado es de 800°C.

Figura 35

Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de gas generado



En la tabla 13 se muestra como varía la temperatura en función de conversión en el reactor de pirólisis de la biomasa.

Tabla 13

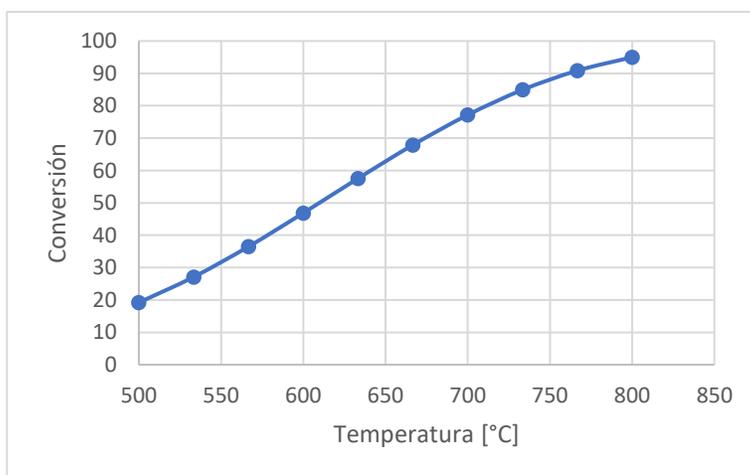
Resultados del análisis de sensibilidad

Temperatura	Conversión
500	19.20
533.33	27.10
566.66	36.48
600	46.86
633.33	57.57
666.66	67.89
700	77.16
733.33	84.92
766.66	90.85
800	94.99

En la figura 36 se observa que una temperatura óptima para obtener una conversión del 95% de la biomasa es de 800°C.

Figura 36

Curva de sensibilidad temperatura vs conversión



En la tabla 14 se muestra como varía la temperatura en función del rendimiento de gas generado en el reactor de pirólisis de la biomasa.

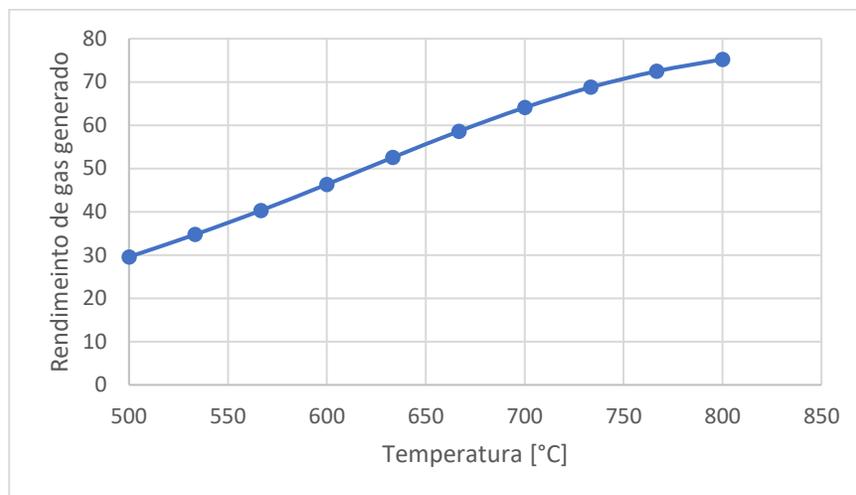
Tabla 14*Resultados del análisis de sensibilidad*

Temperatura	Rendimiento
500	29.56
533.33	34.73
566.66	40.30
600	46.33
633.33	52.55
666.66	58.59
700	64.08
733.33	68.76
766.66	72.47
800	75.22

En la figura 37 se observa que una temperatura óptima para obtener un rendimiento del 75% de gas generado es de 800°C.

Figura 37

Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de gas generado



En la tabla 15 se muestra como varía la temperatura en función de la conversión del metano en el reactor de reformado con vapor.

Tabla 15

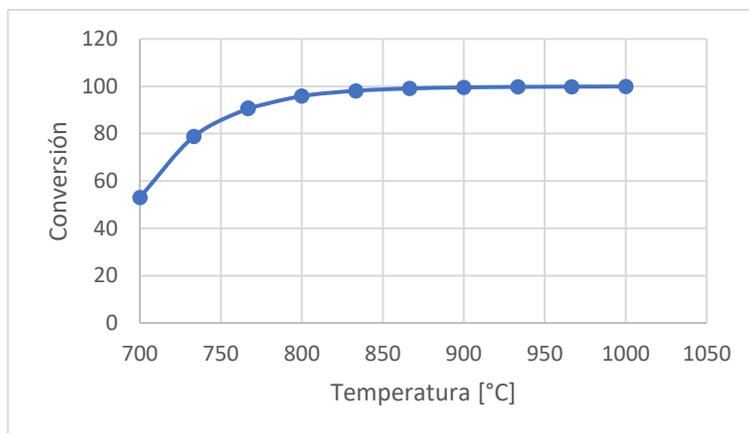
Resultados de análisis de sensibilidad

Temperatura	Conversión
700	53.04
733.33	78.78
766.66	90.69
767	90.77
800	95.86
833.33	98.10
866.66	99.09
900	99.55
933.33	99.76
966.66	99.87
1000	99.93

En la figura 38 se observa que una temperatura óptima para obtener una conversión del 100% de metano es de 1000°C.

Figura 38

Curva de sensibilidad temperatura vs conversión del metano



En la tabla 16 se muestra como varía la temperatura en función del rendimiento del hidrógeno en el reactor de reformado con vapor

Tabla 16

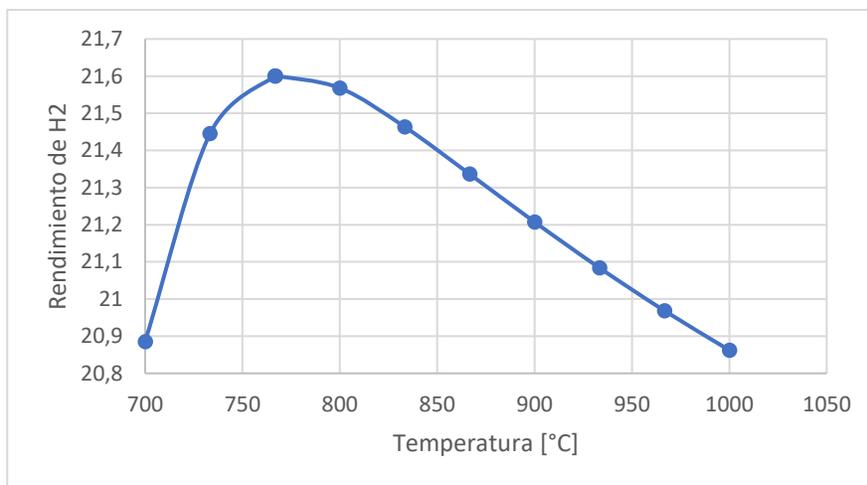
Resultados de análisis de sensibilidad

Temperatura	Rendimiento
700	20.88
733.33	21.44
766.66	21.60
767	21.60
800	21.56
833.33	21.46
866.66	21.33
900	21.20
933.33	21.08
1000	20.86

En la figura 39 se observa que una temperatura óptima para obtener un rendimiento del 21.6% de hidrógeno es de 765°C.

Figura 39

Curva de sensibilidad temperatura vs rendimiento de hidrógeno



Propuesta de biomasa para el proceso de producción de gas de síntesis

Para la simulación del proceso de producción de gas de síntesis se utilizó la cáscara de cacao, se propone utilizar otra biomasa con el objetivo de comparar los resultados de la producción de gas de síntesis. La biomasa a utilizar es la cascara de banano, (C. Mendoza & Vera, 2019), menciona que la composición de la cascara del banano es de 60% de lignina, 25% de celulosa y 15% de hemicelulosa. En la tabla 17 se muestran los resultados de las corrientes de salida del gas de síntesis.

Tabla 17

Composición del gas de síntesis en la corriente de salida del proceso

Biomasa	Fracción molar		
	H_2	CO	CO_2
Cáscara de cacao	0.653	0.275	0.069
Cáscara de banano	0.665	0.258	0.073

En la tabla 17 se observa que las dos biomásas utilizadas producen composiciones molares similares tanto en el hidrógeno, monóxido de carbono y dióxido de carbono. Es decir, las dos biomásas son factibles para obtener gas de síntesis, donde el hidrógeno es el componente más predominante con una fracción molar de 0.66.

Capítulo V

Conclusiones y Recomendaciones

Conclusiones

Mediante una especificación de diseño en el reactor de pirólisis, se logró obtener una conversión del 95% para el polipropileno y la biomasa mediante la variación del número de tubos en el equipo.

Para evaluar la eficacia de las reacciones de pirólisis se realizó un análisis de sensibilidad, en el cual se obtuvo para pirólisis del polipropileno un rendimiento de gas generado del 82% a 800°C, mientras que en la pirólisis de la biomasa se obtuvo un rendimiento de gas generado del 75% a 800°C.

Se realizó la simulación en Aspen Plus, donde se obtuvieron resultados de los flujos másicos de cada corriente en cada equipo. Las composiciones molares del gas de síntesis obtenidos a la salida de la corriente del proceso fueron de 0.6656 H_2 , 0.2587 CO y 0.073 CO_2 .

Las corrientes de salida del proceso de pirólisis se enfriaron con el objetivo de separar los productos gaseosos de los líquidos y aprovechar la temperatura de salida de reactor para calentar la corriente fría en el que están los productos gaseosos.

El agua que se utiliza para el reformado con vapor ingresa de forma líquida a un intercambiador de calor, con el fin de aprovechar la temperatura de salida del reactor, esta corriente es calentada para luego ingresar a la alimentación.

Mediante la investigación realizada se logró establecer un proceso de diagrama de bloques que presentaron condiciones adecuadas para el diseño del proceso de pirólisis y reformado con vapor.

En el proceso de reformado con vapor, el metano es el último componente en reaccionar, para lo cual, se realizó un análisis de sensibilidad para obtener la temperatura óptima en función de la conversión, donde se obtuvo que a una temperatura de 1000°C presenta una conversión del 100%.

Se realizó un análisis de sensibilidad en el reactor de pirólisis del polipropileno para determinar la temperatura óptima en función de la conversión, en donde se obtuvo que a una temperatura 500°C se puede obtener una conversión del 99%.

Mediante la revisión bibliográfica se logró plantear un mecanismo hipotético para las reacciones de descomposición del polipropileno y la biomasa. Para lo cual, se planteó que en las dos primeras reacciones del polipropileno se generan productos en fase líquida como el $C_{18}H_{36}$ y el C_9H_{18} y en una tercera reacción se generan los productos gaseosos como el C_2H_4 y C_3H_6 . Para las reacciones de la hemicelulosa y celulosa se generan productos como CO_2 , CO , CH_4 , C_2H_6 , C_2H_4 , y C_3H_6 . Mientras que, para la reacción de la lignina se obtienen como productos el H_2 , CO , CO_2 , CH_4 y C_6H_6 .

En el proceso de reformado con vapor se realizó un análisis de sensibilidad para determinar la temperatura óptima en función del rendimiento de hidrógeno, para lo cual, se obtuvo una temperatura de 760°C con un rendimiento del 21.6% de hidrógeno.

Mediante un balance de masa en el reactor de pirólisis se determinó los valores de los parámetros cinéticos, como la constante de velocidad (k) y la energía de activación (E) de las reacciones de descomposición del polipropileno.

Recomendaciones

En la simulación del proceso de pirólisis y de reformado con vapor las condiciones de operación están a una presión de 1 atm, para lo cual se recomienda variar la presión en los equipos con el objetivo de observar el comportamiento en las reacciones.

Los residuos obtenidos de los separadores flash del proceso de pirólisis pueden ser utilizados para obtener energía para proceso, mediante un proceso de quemado con aire.

Las composiciones de biomasa permiten predecir la cantidad de hidrocarburos livianos que se va a generar dependiendo de las composiciones de la hemicelulosa, celulosa y lignina. Si se tiene una composición mayor de lignina y menor de hemicelulosa se puede generar mayor cantidad de benceno que de hidrocarburos livianos.

Para el proceso de pirólisis, el reactor R-plug se puede reemplazar por otro reactor como es el reactor de Gibbs con el objetivo de observar que conversión se obtendrá de la materia prima.

Bibliografía

- Aalsta, W. Van der. (2014). Business Process Simulation Revisited. *ResearchGate*, June.
<https://doi.org/10.1007/978-3-642-15723-3>
- Almeida, D., & Marques, M. D. F. (2016). *Thermal and catalytic pyrolysis of plastic waste*. 26(1), 44–51.
- Álvarez Rodríguez, A., Pizarro García, C., & Folgueras Díaz, M. B. (2012).
CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE BIOMASA Y SU RELACIÓN. 1–12.
- Arandes, J., Bilbao, J., & López, D. (2004). Reciclado de residuos plásticos. *Revista Iberoamericana de Polímeros*, 5(1), 28–45.
<http://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=1048871&orden=30219&info=link>
- Bajus, M. (2010). Pyrolysis of Woody Material. *Petroleum & Coal*, 52(3), 207–214.
- Benayoun, S. (2015). Mechanical properties of sol–gel coatings on polycarbonate: a review. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*. <https://doi.org/10.1007/s10971-015-3781-6>
- Borrero, A., Masson, E., Celzard, A., & Fierro, V. (2021). *Modelling the reactions of cellulose , hemicellulose and lignin submitted to hydrothermal treatment* *Modelling the reactions of cellulose , hemicellulose and lignin submitted to hydrothermal treatment*. 919–930.
- Budsareechai, S., Hunt, A. J., & Ngernyen, Y. (2019). Catalytic pyrolysis of plastic waste for the production of liquid fuels for engines. *RSC Advances*, 9(10), 5844–5857.
<https://doi.org/10.1039/c8ra10058f>
- Buekens, A. G., & Huang, H. (1998). Catalytic plastics cracking for recovery of gasoline-range hydrocarbons from municipal plastic wastes. *Resources, Conservation and Recycling*, 23(3), 163–181. [https://doi.org/10.1016/S0921-3449\(98\)00025-1](https://doi.org/10.1016/S0921-3449(98)00025-1)
- Cano, J. ., & McRae, G. (1998). Environmentally conscious chemical process design. *Annual*

Reviews. All Rights Reserved, 499–536.

Cardona, D., Lavernia, C. J., & Alcerro, J. C. (2010). *Polietileno Primera parte. 24(2)*, 123–128.

Dayana, S., Sharuddin, A., Abnisa, F., Mohd, W., & Wan, A. (2016). *A review on pyrolysis of plastic wastes. 115*, 308–326.

ESIN Consultora S.A. (2014). *Atlas Bioenergético del Ecuador* (Primera ed). Atlas Bioenergético del Ecuador.

González, J. S. (2016). *Ingeniería básica de una planta de deshidrogenación de propano para la producción de propileno*. Universidad de Sevilla.

Jana, A. K. (2011). *Chemical Process Modelling and Computer Simulation* (2nd ed.). PHI Learning.

Kaseem, M., Hamad, K., & Gun, Y. (2016). Fabrication and materials properties of polystyrene / carbon nanotube (PS / CNT) composites : A review. *European Polymer Journal, 79*, 36–62. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2016.04.011>

Lestinsky, P., & Palit, A. (2016). Wood Pyrolysis Using Aspen Plus Simulation and Industrially Applicable Model. *GeoScience Engineering, 62(1)*, 11–16. <https://doi.org/10.1515/gse-2016-0003>

Longo, C., Savaris, M., Zeni, M., Brandalise, R. N., Maria, A., & Grisa, C. (2011). *Degradation Study of Polypropylene (PP) and Bioriented Polypropylene (BOPP) in the Environment. 14(4)*, 442–448. <https://doi.org/10.1590/S1516-14392011005000080>

Maddah, H. (2016). Polypropylene as a Promising Plastic : A Review. *American Journal of Polymer Science, 12*. <https://doi.org/10.5923/j.ajps.20160601.01>

Mendoza, C. J., Aire, C., & Dávila, P. (2011). Influencia de las fibras de polipropileno en las

propiedades del concreto en estados plástico y endurecido. *Investigación y Desarrollo*, 2(2), 13.

Mendoza, C., & Vera, J. (2019). *Aprovechamiento de pinzote de banano para la obtención de papel*. 2, 29.

Miskolczi, N., Angyal, A., Bartha, L., & Valkai, I. (2009). Fuels by pyrolysis of waste plastics from agricultural and packaging sectors in a pilot scale reactor. *Fuel Processing Technology*, 90(7–8), 1032–1040. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2009.04.019>

Morocho Delgado, S. K. (2019). *Obtención de combustible mediante pirólisis térmica a partir de polipropileno reciclado (tesis de licenciatura)*. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo. <http://dspace.esPOCH.edu.ec/bitstream/123456789/13804/1/96T00569.pdf>

Natesakhawat, S. (2005). *Investigation of active sites and reaction networks in catalytic hydrogen production : Steam Reforming of Lower*. The Ohio State University.

Nizami, A. S., & Rehan, M. (2016). Catalytic pyrolysis of plastic waste : A review . pdf. *Process Safety and Environmental Protection*.

Pájaro Castro, N. P., & Olivero Verbel, J. T. (2011). Química verde: Un nuevo reto. *Ciencia e Ingeniería Neogranadina*, 21(2), 169. <https://doi.org/10.18359/rcin.265>

Rosillo Calle, P. de G., Hemstock, S., & Woods, J. (2007). *The Biomass Assessment Handbook*. Earthscan.

Saavedra Lopez, J., Lebarbier Dagle, V., Deshmane, A., Kovarik, L., & Wegeng, R. (2019). *Methane and Ethane Steam Reforming over MgAl₂O₄-Supported Rh and Ir Catalysts: Catalytic Implications for Natural Gas Reforming Application*. 19.

Sandoval Hinds, J. E. (2007). *Diseño de guía para especificación de hornos de refinería y simulación por HTRI-Xfh* Diseño de guía para especificación de hornos de refinería y

simulación por HTRI-Xfh. Universidad Simón Bolívar.

Seider, W. D., Seader, J. ., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2009). *Products and process design principles. Synthesis, Analysis, and Evaluation* (3th ed.). John Wiley & Sons, Inc.

SENAE. (2022). *Importaciones – Servicio Nacional de Aduana del Ecuador*.

Stubbins, A., Law, K. L., Bianchi, T. S., & Zhu, L. (2021). *Plastics in the Earth system*. 5, 1–6.

Verma, R., Vinoda, K. S., Papireddy, M., & Gowda, A. N. S. (2016). Toxic Pollutants from Plastic Waste- A Review. *Procedia Environmental Sciences*, 35, 701–708.

<https://doi.org/10.1016/j.proenv.2016.07.069>

Anexos