



APLICACIÓN DE CFD AL RECICLAJE CUATERNARIO DE PET

Laura Luz Romero Martínez ^a, Edilberto Murrieta Luna ^{a*}, Beatriz Eugenia Rubio Campos ^b, Maria del Carmen Cisneros Rivas ^a, Mario Alberto Rodríguez Angeles ^a

^a Universidad Politécnica de Juventino Rosas, Departamento de Ingeniería en Plásticos, Santa Cruz de Juventino Rosas, Gto., C.P. 38400, México. emurrieta@upjr.edu.mx

^b Escuela Nivel Medio Superior de Guanajuato, Universidad de Guanajuato, Alameda s/n, Guanajuato, Gto., 36000, México.

Resumen

El PET es uno de los materiales que más residuos sólidos genera. Uno de los métodos usados para tratar estos residuos es el reciclaje cuaternario en donde el PET es incinerado generando hasta 475.73 KJ/Kg de energía, quedando solo un 30% en masa de residuos. El objetivo de esta investigación es desarrollar una metodología utilizando CFD para probar la factibilidad de la combustión de PET, aplicada a un horno de crisol para fundir aluminio. El PET genera su ignición mediante una flama generada por la combustión de metano el cual se alimenta a un quemador de gas a 15 m/s. El aire ingresa a 25 m/s y el polvo de PET es alimentado por la parte superior del quemador y es arrastrado por aire caliente. Para la simulación se generó una geometría representativa del horno, la cual se malló en tetraedros híbridos (141,880). Se utilizó el modelo k-epsilon para simular la turbulencia y se consideraron 9 productos de reacción y 10 reacciones químicas. La simulación se llevó a cabo en estado transitorio para 1000 pasos de tiempo. Se obtuvieron resultados hidrodinámicos en los cuales se analizó la forma del flujo. La temperatura promedio alcanzada fue de 1200 K, lo que la hace adecuada para fundir aluminio. La fracción másica de los gases de combustión en la salida del horno tuvo concentraciones muy bajas para aromáticos, considerándose combustión limpia.

Palabras clave: Reciclaje cuaternario; combustión; PET; CFD.

CFD APPLICATION TO PET QUATERNARY RECYCLING

Abstract

PET is a main materials that generates the most solid waste. One of the methods used to process this waste is quaternary recycling, where incinerated PET generates 475.73 KJ/Kg of energy and only 30% by mass of waste. The objective of this work is to develop a methodology using CFD to test the feasibility of PET combustion, applied to a crucible furnace for melting aluminum. PET ignition is generated by the flame



resulting from the combustion of methane which is fed to a gas burner at 15 m/s. Air enter at 25 m/s and the PET particles are fed in from the top, by a hot air stream. For the simulation, a representative geometry of the furnace was generated, which was meshed in hybrid tetrahedrons (141,880). The k-epsilon model was used to simulate turbulence and 9 reaction products and 10 chemical reactions were considered. The simulation was realized in transient state for 1000 time steps. Hydrodynamic results were obtained and the flow profile was analysed. The average temperature was 1200 K, making it suitable for melting aluminium. The mass fraction of gases at the furnace outlet had very low concentrations for aromatics, which is considered clean combustion.

Keywords: Quaternary recycling; combustión; PET; CFD.

1. Introducción

El PET virgen es considerado uno de los polímeros de ingeniería más importantes utilizados en la actualidad. Con el PET se producen fibras sintéticas y envases alimenticios y bebidas (Awaja y Pavel, 2015). El motivo de utilizar este material son las excelentes propiedades que tiene el PET, especialmente su resistencia a la tracción y al impacto, el peso muy bajo, transparencia, resistencia química, procesabilidad, capacidad de color y una resistencia térmica razonable (Sabu y col., 2018), (Welle, 2011). Debido a su utilidad, diariamente se generan toneladas de residuos posconsumo de PET y estos llegan al medio ambiente, lamentablemente solo el 7% se recicla en la producción de productos plásticos de baja calidad (Girija y col., 2005).

Los productos de PET tienen una tasa de descomposición natural lenta, pues se sabe que en los vertederos se degradan aproximadamente en 150 años, liberando compuestos orgánicos volátiles como benceno, tolueno, xilenos, etilbencenos y trimetilbencenos, ya sea como gases o lixiviados. De manera similar, la incineración conduce a la formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos, bifenilos policlorados, metales pesados, carbono nocivo, radicales basados en oxígeno y gases de efecto invernadero por lo que no lo consideran una buena alternativa (Bharadwaj y col., 2024). Para el reciclaje de PET posconsumo se han desarrollado técnicas mecánicas, biológicas y químicas, pero se han presentados dificultades, ya que por ejemplo en el reciclaje mecánico el PET sufre



degradación termomecánica, después de varios ciclos. Del reciclaje químico se obtienen productos puros, pero es costoso, de igual manera, el reciclaje biológico o biodegradación es costosa y tarda mucho tiempo en realizarse (Bharadwaj y col., 2024), (Bifulcoa y col., 2024). Sin embargo, estudios realizados a la pirolisis y combustión de PET, revelan que mientras se realice una combustión controlada, los productos tóxicos se generan en cantidades muy pequeñas y que los residuos se disminuyen en un 70 % en masa (Stanislav y col., 2018), (Martín-Gullón y col., 2001). Además, se han realizado estudios experimentales y numéricos donde se aprovecha la energía generada de la combustión de plásticos (Filho y col., 2024).

La búsqueda del aprovechamiento de la energía generada por la combustión del PET y el uso de nuevas tecnologías dan como resultado el desarrollo de proyectos que involucran la simulación de procesos que requieren energía calorífica, como es el caso de la fundición de aluminio. La finalidad es desarrollar equipos con los cuales se ahorre energía y se maximice su eficiencia. Mediante las técnicas de CFD se han desarrollado quemadores (Denev y col., 2017), hornos de crisol regenerativos (Cadavid y col., 2010) y hornos rotatorios

(Wang y col., 2016), los cuales son utilizados en fundición de metales o en la industria cementera con buenos resultados. Los diseños abarcan desde modelación de combustibles gaseosos (Cecere y col., 2016), líquidos (Zhang y col., 2019) y sólidos (Hashimoto y Watanabe, 2016), además de realizar análisis de radiación (Xu y col., 2021) y emisión de gases tóxicos como NO_x (Chang y col., 2021).

2. Ecuaciones Gobernantes

2.1. Ecuación de conservación de masa.

La ecuación (1) representa la conservación de masa, o ecuación de continuidad (ANSYS FLUENT, 2021).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (1)$$

donde ρ es la densidad, v el vector velocidad y S_m es un término fuente.

2.2. Ecuación de conservación de momentum

La ecuación de conservación de momentum esta descrita por (2), (ANSYS FLUENT, 2021):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2)$$



2.3. Modelación de la turbulencia (Modelo k - ε Estandar)

El modelo k - ε estándar es un modelo semiempírico basado en la solución de las ecuaciones de transporte para la energía cinética (k), ecuación (3) y su velocidad de disipación (ε), ecuación (4) (ANSYS FLUENT, 2021).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{(Pr_t)_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon + S_k \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{(Pr_t)_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{K} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} + S_\varepsilon \quad (4)$$

en estas ecuaciones, G_k representa la generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes de velocidad, G_b es la generación de energía cinética turbulenta debido a la flotabilidad, $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ son constantes y S_k y S_ε son funciones definidas por el usuario. La viscosidad turbulenta (remolino), μ_t , es calculada combinando k y ε .

2.4. Ecuación de conservación de energía

La ecuación de conservación de energía se describe por (5), (ANSYS FLUENT, 2021):

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + \nabla \cdot [\vec{v}(\rho e_t + p)] = -\nabla \cdot \left[\sum_j h_j J_j \right] + S_h \quad (5)$$

donde e_t es la energía interna total, h_j entalpía de especies, J_j es el flux másico y S_h es el término fuente de generación de energía.

3. Metodología

Se diseñó en CAD el modelo de un horno de crisol, y está basado en un modelo original que tiene una capacidad de fundir hasta 60 kilos de aluminio el cual se puede apreciar en la Figura 1. El horno tiene forma cilíndrica con una altura de 0.73 m y un diámetro de 0.70 m. El crisol tiene forma parabólica y está truncado en la base (0.25 m) y en la parte superior (0.53 m). El quemador está colocado en la parte inferior y fue adaptado para alimentar PET molido como combustible



Figura 1. Horno de crisol.

La malla utilizada que se muestra en la Figura 2, es una malla no estructurada, esto debido que el modelo presenta formas irregulares en todo su dominio y este tipo de malla facilita su adaptación al modelo. El modelo mallado consta de una malla



tetraédrica híbrida, en donde se generó un total de 141,880 volúmenes de control y 29,581 nodos. El análisis de sensibilidad de malla fue omitido para este trabajo, debido a que existe evidencia de que resulta impráctico, según Murrieta y col. (2019), pues el estudio se realiza sin el cálculo de interfase y en estado transitorio. Por esta razón, el mallado del modelo se realizó buscando evitar inestabilidades numéricas y errores de cálculo que se pudieran presentar por desajustes en las celdas o su relación de aspecto.



Figura 2. Modelo del horno mallado.

Las simulaciones fueron realizadas en estado transitorio para un tiempo de 10 s. Para favorecer la ignición del PET se consideran precalentadas las paredes del horno y crisol a 900 K. El PET es alimentado en forma de polvo a razón de 0.1 kg/s, por lo que requiere ser arrastrado por una corriente de aire que ingresa a 2 m/s y $T = 600$ K. El aire del

quemador es alimentado a una velocidad de 30 m/s. el gas metano se alimenta por los orificios pequeños del quemador y entra a una velocidad de 25 m/s. Se realizaron las simulaciones considerando solamente 9 productos de reacción, involucrados en 10 reacciones químicas (Figura 3). La turbulencia fue modelada mediante el modelo k-épsilon estándar. Para el transporte de materia se utilizó el modelo Species Transport. Las ecuaciones gobernantes fueron acopladas mediante el modelo COPUPLED y la presión se discretizó por el método PRESTO.

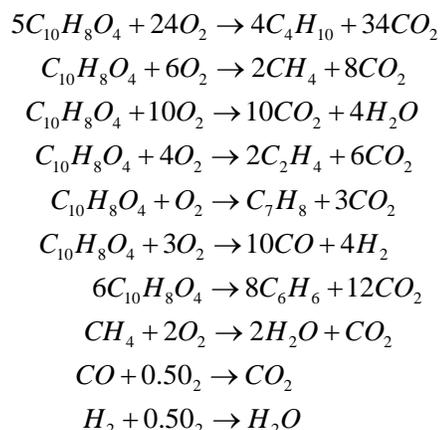


Figura 3. Reacciones químicas.

4. Resultados

El modelado en 3D de la combustión en un horno de crisol mediante el uso de CFD proporciona información sobre los fenómenos físicos que suceden en la cámara de combustión, los cuales de forma natural



no son fáciles de observar, debido a lo complejo del proceso.

4.1. Líneas de corriente

Los resultados hidrodinámicos obtenidos muestran la forma en que los gases presentes se mueven por la cámara de combustión. Los gases alimentados chocan con la pared del refractario del horno y del crisol, lo que provoca que tengan un movimiento guiado por la cámara de combustión. Al dar la primera vuelta, chocan con el cono de la flama, provocando turbulencia y que una parte de los gases tiendan a subir en forma de espiral hasta la salida del horno y la otra parte continúe con un movimiento circular por la parte inferior de los gases alimentados, esto se puede apreciar en la Figura 4. Dentro del horno se obtuvo que la velocidad máxima que fue alcanzada en la cámara de combustión es de 30.5 m/s, mientras la velocidad promediada es de 10.2 m/s.

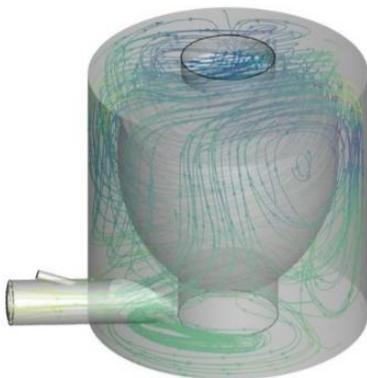


Figura 4. Líneas de corriente.

4.2. Análisis de la Presión

Los gases generados en este proceso tienen temperaturas elevadas, lo que provoca que su densidad disminuya y que sea menor a la densidad del aire exterior. El movimiento de los gases calientes, provoca una presión menor a la presión atmosférica, lo que permite la introducción del aire hacia dentro de la cámara de combustión, mejorará el mezclado e incrementará la transferencia de calor por convección. La presión total promediada medida a un tiempo de 0.5 s es de 200 Pa, esto está representado por el color verde (Figura 5).

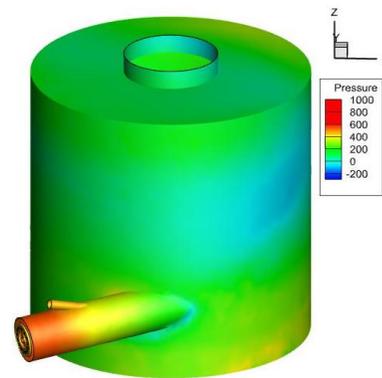


Figura 5. Contornos de presión a un tiempo de 0.5 s

La máxima presión total promediada alcanzada es de 800 Pa medida en un tiempo de 5 s.

4.3. Análisis de la Temperatura

Al generar la reacción de combustión, esta libera energía, la cual genera una flama tipo



abanico, que envuelve al crisol. las mayores temperaturas se dan en las partes laterales de la flama. La Figura 6 muestra una isosuperficie de temperatura con valor de 850 K. La escala de colores presentada indica que le valor mínimo de temperatura es 300 K y que le máximo es de 1200 K. Si se sabe que el aluminio funde a 933 K aproximadamente, el calor generado por esta reacción exotérmica sería suficiente para fundir este metal.

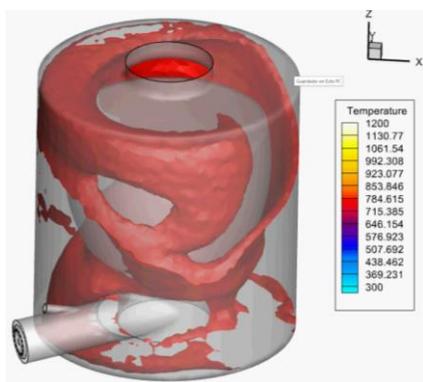


Figura 6. Isosuperficie de temperatura, 900 K.

La Figura 7 muestra un gráfico de tiempo contra temperatura, en la cual se observa que la temperatura asciende rápidamente, pues inicialmente se alimenta el metano el cual se encuentra a una temperatura de 278.15 K, pero al iniciar el proceso de combustión, la temperatura se eleva, alcanzando los 1200 K. La grafica muestra al final una elevación de forma rápida, esto se debe a que en este momento ya se generó la reacción de

oxidación de todos los reactivos. Se midió la temperatura de los gases de salida en la tapa del horno, promediando 857 K.

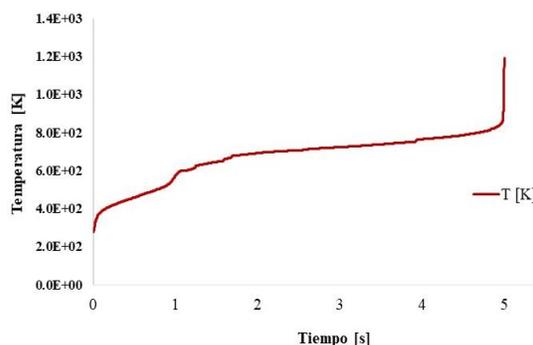


Figura 7. Gráfico de tiempo [s] vs temperatura [K].

4.4. Gases de combustión

La combustión del PET se produce diversos productos secundarios provenientes de reacciones no deseadas, las cuales se presentan durante la reacción de oxidación. La química de la combustión determina la eficiencia del proceso, y ambos dependen directamente del control de las corrientes de alimentación y de las temperaturas de operación del proceso. Por eso se requiere además de un combustible que va generando la flama inicial. En este trabajo se propone la combustión de PET en condiciones controladas, ya que en estudios previos (Guillon y col. (2001)) reportaron que a temperaturas superiores a los 1300 K se obtiene una “Combustión Limpia”. Para ello



se necesita que el horno sea precalentado a 1200 K. ya que así es posible de generar el proceso de combustión pues el PET al no ser un combustible requiere de calor para que se produzca su ignición, la cual ocurre a 900 K. La Figura 8 muestra los contornos de fracción másica del benceno. En allá se puede apreciar que la presencia de este material es muy pequeña, pues solo se la fracción másica máxima reportada es de 1.82×10^{-4} (color amarillo), equivalente a 53 ppm.

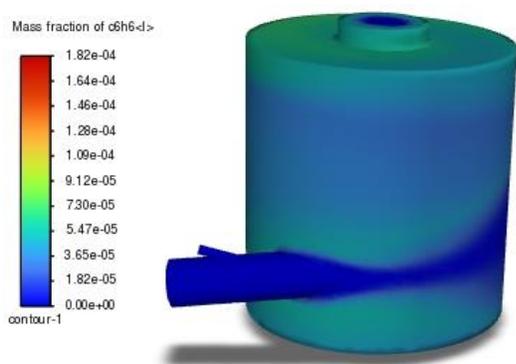


Figura 8. Contornos de fracción másica de C_6H_6 , 53 ppm.

El gráfico de tiempo vs fracción másica de los gases de combustión es presentado en la Figura 9. Se puede observar que el gas que se presenta en mayor cantidad es el CO con una fracción másica de 5.9×10^{-4} , que equivale a 121 ppm. Este resultado indica que el horno está trabajando dentro de los parámetros establecido por la NORMA Oficial Mexicana NOM-085-SEMARNAT-2011

que establece los límites para este compuesto entre 400-500 ppm. Los demás gases están presentes en cantidades bajas, midiéndose fracciones másicas que van desde 1×10^{-4} para el butano, hasta 2×10^{-4} para el tolueno.

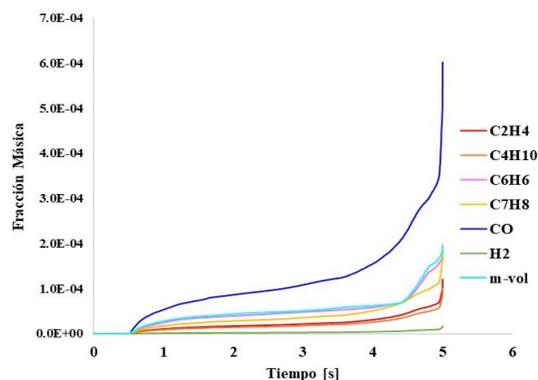


Figura 9. Gráfico de tiempo [s] vs fracción másica de los gases de combustión.

Los productos de la reacción de combustión se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Cantidades de componentes en la cámara de combustión.

Compuesto	ppm
MV	57
CO ₂	685
H ₂ O	31
H ₂	3
CO	121
C ₆ H ₆	53
C ₄ H ₁₀	20
C ₇ H ₈	40

Las partículas volátiles medidas alcanzan los 57 ppm, el cual es un valor por debajo del



establecido por la norma para combustión de sólidos (60-350 ppm). El análisis de estos datos indica que las cantidades generadas de subproductos de reacción son muy pequeñas, por lo que se puede considerar que en estas condiciones si se generó una “combustión limpia”.

5. Conclusiones

En este trabajo de investigación se realizó un análisis mediante CFD al proceso de combustión de PET aplicado al aprovechamiento de energía. El proceso se realizó en un modelo de un horno de crisol para la fundición de metales no ferrosos. Se realizaron análisis hidrodinámicos, de energía y reacciones químicas en estado transitorio.

Para modelar la turbulencia se utilizó el modelo de dos ecuaciones K-épsilon estándar, el cual presentó buenos resultados, pues se pudo analizar el flujo dentro de la cámara de combustión. Se generan remolinos dentro del horno, esto debido al choque de las corrientes y la forma del modelo. Se determinó que la velocidad máxima que fue alcanzada es de una concentración de 30.5 m/s y la promediada es de 10.2 m/s. La presión fue discretizada mediante el uso del método PRESTO, obteniendo una presión

máxima medida alcanzada es de 800 Pa mientras la mínima fue de 200 Pa.

La temperatura máxima alcanzada fue de 1200 K, en un tiempo de 5 s. Se midió la temperatura de salida de los gases la cual tuvo un valor de 857 K y la Temperatura promediada dentro de la cámara de combustión fue de 900 K, lo que indica que es factible realizar la fundición de metales no ferrosos como el aluminio. Además, las emisiones de los gases de combustión resultaron más bajas que los permitidos por la NORMA Oficial Mexicana NOM-085-SEMARNAT-2011. De acuerdo a estos parámetros, la combustión de PET bajo las condiciones en que se realizó este proyecto se puede considerar “combustión limpia”.

Referencias bibliográficas

- ANSYS FLUENT, 2021. (2021). *User's and theory guide*. Canonsburg, Pennsylvania, USA: ANSYS, Inc.
- Awaja F. y Pavel, D. (2015). Recycling of PET. *European Polymer Journal*, 41, 1453-1477. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2005.02.005>
- Bharadwaj, C., Purbey, R. Bora, D., Chetia, P., Maheswari, U.R., Duarah, R., Dutta, K., Sadiku, E. R., Varaprasad, K. y Jayaramudu, J. (2024). A review on sustainable PET recycling: Strategies and trends. *Materials Today Sustainability*, 27,



100936.

<https://doi.org/10.1016/j.mtsust.2024.100936>

Bifulcoa, A., Chenb, J., Sekar, A., Klingler, W.W., Gooneie, A. y Gaan, S. (2024). Recycling of flame retardant polymers: Current technologies and future perspectives. *Journal of Materials Science & Technology*, 199, 156-183.

<https://doi.org/10.1016/j.jmst.2024.02.039>

Cadavid, F., Herrera, B. y Amell, A. (2010). Numerical simulation of the flow streams behavior in a self-regenerative crucible furnace. *Applied Thermal Engineering*, 30, 826-832.

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2009.12.011>

Cecere, D., Giacomazzi, E., Arcidiacono, N.M. y Picchia, F.R. (2016). Direct numerical simulation of a turbulent lean premixed CH₄/H₂-Air slot flame. *Combustion and Flame*, 165, 384-401.

<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.12.024>

Chang, J., Wang, X., Zhou, Z., Chen, H. y Niu, H. (2021). CFD modeling of hydrodynamics, combustion and NO_x emission in a tangentially fired pulverized-coal boiler at low load operating conditions. *Advanced Powder Technology*, 32, 290-303.

<https://doi.org/10.1016/j.appt.2020.12.008>

Denev, J.A., Dinkov, I. y Bockhorn, H. (2017). Burner design for an industrial furnace for thermal post-combustion. *Energy Procedia. NFUB-11th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers*, 120, 484-491.

<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.07.171>

Filho, J.S.P., Penha, B.A.S., Satto, S.V., Lima, E.A.P., Borges, V.L., Silva, V.M., Santos, M.B., Trovó, A.G. y Carvalho, S.R. (2024). Mass yields of products and composition of syngas from pyrolysis of Brazilian plastic solid wastes: Combustion simulation and burner design to minimize CO_x and C_xH_y emissions. *Process Safety and Environmental Protection*, 186, 264-273. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2024.04.027>

Girija, B.G., Sailaja, R.R.N. y Madras, G., (2005). Thermal degradation and mechanical properties of PET blends. *Polymer Degradation and Stability*, 90, 147-153.

<https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2005.03.003>

Hashimoto, N. y Watanabe, H. (2016). Numerical analysis on effect of furnace scale on heat transfer mechanism of coal particles in pulverized coal combustion field. *Fuel Processing Technology*, 145, 20-30.

<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2016.01.024>

Martín-Gullón, I., Esperanza, M. y Font, R. (2001). Kinetic model for the pyrolysis and combustion of poly-(ethylene terephthalate) (PET). *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 58-59, 635-650.

[https://doi.org/10.1016/S0165-2370\(00\)00141-8](https://doi.org/10.1016/S0165-2370(00)00141-8)

Murrieta-Luna, E., Rubio-Campos, B. E., Rodríguez-Ángeles, M. A. y Molina-Bermúdez, D. G. (2019). Simulación de reacción de combustión (CH₄/O₂) en horno de crisol para fundición de metales no-ferrosos. *Acta*



Universitaria, 29, e2146.

<http://doi.org/10.15174.au.2019.2146>

NORMA Oficial Mexicana NOM-085-SEMARNAT-2011, Contaminación atmosférica-Niveles máximos permisibles de emisión de los equipos de combustión de calentamiento indirecto y su medición.

Sabu, T., Krishnan, K., Martin, G.T., Ajay, R., y Abitha, V.K. (2018). *Plastics Design Library. Recycling of Polyethylene Terephthalate Bottles*. En. K.V. Marathe, Karan R. Chavan and Pranav Nakhate (Eds.). *Life Cycle Assessment (LCA) of PET Bottles* (pp. 149-168).

<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811361-5.00008-0>

Stanislav, H.; Kumagai, S., Fedorko, G., Molnár, V. y Yoshioka, T. (2018). Pyrolysis gases produced from individual and mixed PE, PP, PS, PVC, and PET-Part II: Fuel characteristics. *Fuel*, 221, 346-360.

<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.02.074>

Wang, M., Liao, B., Liu, Y., Wang, S., Qing, S. y Zhang, A. (2016). Numerical simulation of

oxy-coal combustion in a rotary cement kiln. *Applied Thermal Engineering*, 103, 491-500.

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.04.028>

Welle F. (2011). Twenty years of PET bottle to bottle recycling—An overview. *Resources, Conservation and Recycling*, 55, 865-875.

<https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2011.04.009>

Xu, Q., Shen, M., Shi, K., Liu, Z., Feng, J., Xiong, Y., Liu, L., Wang, J., Han, J., Tang, Z. y Du, Y. (2021). Influence of jet angle on diffusion combustion characteristics and NO_x emissions in a self-reflux burner. *Case Studies in Thermal Engineering*, 25, 100953.

<https://doi.org/10.1016/j.csite.2021.100953>

Zhang, K., Xinb, Q., Mu, Z., Niu, Z. y Wang, Z. (2019). Numerical simulation of diesel combustion based on n-heptane and toluene. *Propulsion and Power Research*, 8(2), 121-127.

<https://doi.org/10.1016/j.jprr.2019.01.009>