UNIVERSIDAD ESTATAL AMAZÓNICA

DECANATO DE POSGRADO

MAESTRÍA EN INGENIERÍA AMBIENTAL CON MENCIÓN EN SANEAMIENTO AMBIENTAL



PROYECTO DE TITULACIÓN CON COMPONENTES DE INVESTIGACIÓN Y /O DESARROLLO PREVIO A LA OBTENCIÓN DEL TÍTULO DE:

MAGISTER EN INGENIERÍA AMBIENTAL CON MENCIÓN EN SANEAMIENTO AMBIENTAL

TEMA:

ANÁLISIS DEL PROCESO DE PIRÓLISIS PARA CONVERSIÓN DE MASCARILLAS DESCARTABLES EN COMBUSTIBLES COMO FUENTE DE ENERGÍA ALTERNATIVA MEDIANTE ASPENPLUS.

AUTOR:

CHRISTIAN ORLANDO CAMACHO LÓPEZ

DIRECTOR DEL TRABAJO DE TITULACIÓN: PhD. REINIER ABREU NARANJO

PUYO – ECUADOR

2022



UNIVERSIDAD ESTATAL AMAZÓNICA DECANATO DE POSGRADO FORMATO DP-UT-013A

FORMATO DP-UT-013A: DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y CESIÓN DE DERECHOS

DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y CESIÓN DE DERECHOS

Yo, CAMACHO LÓPEZ CHRISTIAN ORLANDO, con cédula de identidad 1804639894, declaro ante las autoridades educativas de la Universidad Estatal Amazónica, que el contenido del Proyecto de titulación con componentes de investigación aplicada y/o desarrollo titulado "Análisis del proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustibles como fuente de energía alternativa mediante ASPENPLUS", es absolutamente original, auténtico y personal.

En tal virtud y según lo establecido por la Ley de Propiedad Intelectual, por su Reglamento y por la normatividad institucional vigente, certifico libremente que los criterios y opiniones que constan en el Proyecto de titulación son de exclusiva responsabilidad de la autora; y que los resultados expuestos pertenecen a la Universidad Estatal Amazónica.

CAMACHO LÓPEZ CHRISTIAN ORLANDO CI. 1804639894



UNIVERSIDAD ESTATAL AMAZÓNICA DECANATO DE POSGRADO FORMATO DP-UT-013B

FORMATO DP-UT-013B: CERTIFICADO DE APROBACIÓN DEL TRIBUNAL DE EVALUACIÓN DEL TRABAJO FINAL DE TITULACIÓN

EL TRIBUNAL DE EVALUACIÓN DEL TRABAJO FINAL DE TITULACIÓN

CERTIFICA QUE:

El presente trabajo "Análisis del proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustibles como fuente de energía alternativa mediante ASPENPLUS", bajo la responsabilidad del/la maestrante CAMACHO LÓPEZ CHRISTIAN ORLANDO, ha sido meticulosamente revisado, autorizando su presentación:

MIEMBROS DEL TRIBUNAL

PHD. YOEL RODRÍGUEZ PRESIDENTE DE TRIBUNAL EVALUADOR DEL TRABAJO DE TITULACIÓN

PHD. JOSÉ ROMERO MIEMBRO 1

PHD. CARLOS BRAVO MIEMBRO 2



UNIVERSIDAD ESTATAL AMAZÓNICA DECANATO DE POSGRADO FORMATO DP-UT-011

FORMATO DP-UT-011: AVAL DEL DIRECTOR DE TRABAJO TITULACIÓN

MAESTRÍA EN INGENIERÍA AMBIENTAL. MENCIÓN EN SANEAMIENTO AMBIENTAL

COHORTE: I

FECHA ELABORACIÓN: 30/09/2022

INFORME FINAL Y AVAL

Quien suscribe, **REINIER ABREU NARANJO** portador de la cédula de identidad número: 1756454847, en calidad de Director del trabajo de titulación denominado: Análisis del proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustibles como fuente de energía alternativa mediante AspenPlus, opción Proyecto de trabajo de titulación con componentes de investigación aplicada y/o desarrollo, a cargo del maestrante Christian Orlando Camacho López, portador del número de cédula de identidad: 1804639894, certifico haber acompañado y revisado el documento entregado a mi persona, considero que cumple con los objetivos planteados, los lineamientos y orientaciones establecidas en la normativa vigente de la institución.

Por lo antes expuesto se avala el trabajo de titulación para que sea presentado para la sustentación correspondiente.

ELABORADO POR:

REINIER ABREU NARANJO CI: 1756454847 **DIRECTOR DE TRABAJO DE TITULACIÓN**



UNIVERSIDAD ESTATAL AMAZÓNICA DECANATO DE POSGRADO FORMATO DP-UT-013C

FORMATO DP-UT-013C: CERTIFICADO DE PORCENTAJE DE SIMILITUD EN EL SISTEMA ANTIPLAGIO

CERTIFICADO DE PORCENTAJE DE SIMILITUD EN EL SISTEMA ANTIPLAGIO

Quien suscribe el presente PhD. Reinier Abreu Naranjo con CI: 1756454847, certifica que el Proyecto final de titulación con componentes de investigación aplicada y/o de desarrollo titulado: "Análisis del proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustibles como fuente de energía alternativa mediante ASPENPLUS" ha sido examinado a través del sistema Antiplagio URKUND y presenta un porcentaje de similitud del 2%.

En el cantón Pastaza, a los 04 días del mes de noviembre del 2022.

PhD. Reinier Abreu Naranjo DIRECTOR DEL PROYECTO DE TITULACIÓN

Incluir la primera hoja del reporte de similitud de la herramienta antiplagio.

AGRADECIMIENTO

A Dios por bendecir cada momento de mi vida y permitirme lograr cada meta trazada durante mi vida personal y profesional, a mis abuelos Inés y Orlando por acompañarme y educarme en los diferentes aspectos de la vida, a mi padre Edwin por siempre apoyarme sobre todo en los momentos más difíciles del camino y a mis profesores sobre todo a mi tutor PhD. Reinier Abreu por su apoyo constante durante el desarrollo de la presente investigación.

Christian Camacho

DEDICATORIA

A Dios que guía mi camino siempre y a mi familia que siempre me ha apoyado en cada aspecto de mi vida sobre todo a mis abuelos Orlando e Inés, a mi padre Edwin y a mi hermano Mathias.

Christian Camacho

RESUMEN

El aumento de casos de COVID 19 por todo el mundo, ha conllevado al aumento significativo de mascarillas desechables, lo cual ha generado un nuevo desafío para su correcta disposición final, evitando su acumulación en la naturaleza. El presente estudio tiene como objetivo simular a través del software AspenPlus un proceso pirolítico eficiente que permita la conversión de mascarillas desechables a combustibles sintéticos, mediante el análisis de su producción a diferente presión y temperatura. El proceso inicia con el triturado de las mascarillas, para su posterior descomposición y pirólisis, cuyos productos de interés son los líquidos condensados ya que pueden ser utilizados como combustible sintético. De acuerdo con los resultados obtenidos en la simulación, se obtuvo una composición másica de antraceno (18,9 %), naftaleno (16,7 %) y fluoreno (10,5 %), como principales componentes. Mientras que, los productos gaseosos no condensables como metano (45,34 %), fueron aprovechados para la generación de calor en el proceso de pirólisis. Finalmente, se determinó que, para las condiciones de operación de 923 K y 1 atm, se obtuvo el combustible líquido de mayor capacidad calorífica (24889,38 kJ/kg), el cual es comparable con el poder calórico del alcohol comercial y equivalente a 177,4 BEP/h (1117,62*10⁶ kJ/h). A partir de los datos de la simulación se demostró que la pirólisis puede ser una alternativa de tratamiento para las mascarillas y a la vez, una fuente de combustible. Sin embargo, se recomienda realizar futuras investigaciones a escala de laboratorio para corroborar los resultados obtenidos en la simulación.

Palabras clave: Termodinámico, modelo, synfuel, syngas, simulación.

ABSTRACT

The increase of COVID 19 cases worldwide has led to a significant increase of disposable masks, which has generated a new challenge for their correct final disposal, avoiding their accumulation in nature. The present study aims to simulate through AspenPlus software an efficient pyrolytic process that allows the conversion of disposable masks to synthetic fuels, by analyzing their production at different pressure and temperature. The process starts with the shredding of the masks, for their subsequent decomposition and pyrolysis, whose products of interest are the condensed liquids that can be used as synthetic fuel. According to the results obtained in the simulation, a mass composition of anthracene (18.9 %), naphthalene (16.7 %) and fluorene (10.5 %), as main components, was obtained. Meanwhile, non-condensable gaseous products such as methane (45.34 %) were used for heat generation in the pyrolysis process. Finally, it was determined that, for operating conditions of 923 K and one atm, the liquid fuel with the highest heat capacity was obtained (24889.38 kJ/kg), which is comparable to the caloric power of commercial alcohol and equivalent to 177.4 BEP/h (1117.62*106 kJ/h). From the simulation data, it was shown that pyrolysis can be an alternative treatment for the masks and at the same time, a source of fuel. However, it is recommended to carry out future research at laboratory scale to corroborate the results obtained in the simulation.

Keywords: Thermodynamic, model, synfuel, syngas, simulation.

ÍNDICE

| CAPÍTULO I | 1 |
|--|-----|
| 1. INTRODUCCIÓN | 1 |
| 1.1. Justificación | 3 |
| 1.2. Formulación del problema | 5 |
| 1.3. Hipótesis | 5 |
| 1.4. Objetivos | 6 |
| 1.4.1. Objetivo general | 6 |
| 1.4.2. Objetivos específicos | 6 |
| CAPÍTULO II | 7 |
| 2. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA DE LA INVESTIGACIÓN | 7 |
| 2.1. Generación de residuos de EPP durante el brote de COVID-19 | 7 |
| 2.2. Mascarillas faciales descartables | 7 |
| 2.2.1. Características y Composición | 8 |
| 2.2.2. Gestión como residuos plásticos | 8 |
| 2.3. Prácticas disponibles para la gestión de mascarillas faciales descartables | 9 |
| 2.4. Tecnologías de conversión de residuos en energía | 12 |
| 2.4.1. Conversión termoquímica | 12 |
| 2.5. Pirólisis | 13 |
| 2.5.1. Tipos de pirólisis | 13 |
| Pirólisis convencional o lenta (no isotérmica) | 13 |
| Pirólisis rápida o instantánea (isotérmica) | 14 |
| Pirólisis ultrarrápida o flash | 14 |
| 2.5.2. Productos de pirólisis de residuos plásticos | 14 |
| 2.5.3. Condiciones de funcionamiento del proceso de pirólisis | 15 |
| 2.6. Ventajas de utilizar la tecnología de pirólisis en la gestión de mascarillas faciales | S |
| descartables | 17 |
| 2.7. Economía circular en la conversión de mascarillas faciales descartables en energ | ,ía |
| sostenible | 18 |

| | 2.8. | Técnicas de Modelación y Simulación | . 20 |
|----|-------|--|------|
| | 2.8. | 1. Simuladores modulares secuenciales: | . 20 |
| | 2.8. | 2. Simulación global u orientada a ecuaciones: | . 21 |
| | 2.8. | 3. Proceso de Modelado y Simulación | . 22 |
| | 2.8. | 4. Advanced System for Process Engineering plus - Aspen Plus | . 23 |
| C | APÍTU | JLO III | . 25 |
| 3. | MÉ | TODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN | . 25 |
| | 3.1. | Localización | . 25 |
| | 3.2. | Tipo de Investigación | . 25 |
| | 3.3. | Métodos de investigación | . 25 |
| | 3.4. | Metodología o procedimiento de investigación | . 26 |
| | 3.4. | 1. Caracterízación de la materia prima de las mascarillas desechables | . 26 |
| | 3.4. | 2. Desarrollo del modelo conceptual del proceso de pirólisis de mascarillas | |
| | dese | chables | . 26 |
| | 3.4. | 3. Establecimiento de las consideraciones para la simulación de la pirólisis de | |
| | mas | carillas desechables | . 27 |
| | 3.4. | 4. Identificación de las fómulas y correlaciones utilizadas en el desarrollo de la | |
| | simı | ılación de pirolisis de mascarillas desechables | . 29 |
| | 3.4. | 5. Identificación del modelo con mayor producción de combustible líquido | . 33 |
| | 3.4. | 6. Evaluación de la producción del combustible líquido | . 33 |
| | 3.4. | 7. Evaluación del beneficio ambiental del combustible líquido | . 33 |
| C | APÍTU | JLO IV | . 34 |
| 4. | RES | SULTADOS Y DISCUSIÓN | . 34 |
| | 4.1. | Diagrama de flujo del proceso de simulación de pirolisis de mascarillas desechabl | les |
| | media | nte el software AspenPlus | . 34 |
| | 4.2. | Trituración | . 35 |
| | 4.3. | Descomposición | . 36 |
| | 4.4. | Pirolisis | . 37 |
| | 4.5. | Separación de componentes pirolíticos | . 40 |

| 4.6. | Evaluación de la producción del combustible líquido | |
|-------|--|----|
| 4.7. | Evaluación del beneficio ambiental del combustible líquido | |
| CAPÍT | ULO V | |
| 5. CC | ONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES | 46 |
| 5.1. | Conclusiones | |
| 5.2. | Recomendaciones | |
| REFER | ENCIAS | 47 |

LISTA DE TABLAS

| Tabla 1. Parámetros operativos y rendimientos del producto para los tipos de pirólisis | . 14 |
|--|------|
| Tabla 2. Procedimientos de modelado y simulación. | . 22 |
| Tabla 3. Características de alimentación de mascarillas desechables | . 26 |
| Tabla 4. Potenciales productos de la pirolisis de mascarillas desechables | . 28 |
| Tabla 5. Elementos de las corrientes de entrada y salida del reactor de rendimiento bloc | que |
| DESCOMP | . 36 |
| Tabla 6. Principales componentes pirolíticos en la corriente GAS a 573 K y 1 atm | . 41 |
| Tabla 7. Principales componentes pirolíticos no condensados corriente Pyro-Gas | . 41 |
| Tabla 8. Principales componentes pirolíticos condensados corriente Pyro-Oil | . 42 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| Figura 1. El ciclo de vida de la mascarilla facial (MF) desechable en el ambiente |
|---|
| Figura 2. Descripción general sobre el destino del MICROPLÁSTICO de las mascarillas |
| desechables en el ambiente10 |
| Figura 3. Tecnologías convencionales e innovadoras para la gestión de residuos plásticos y |
| residuos COVID |
| Figura 4. Procesos de conversión termoquímica y sus productos |
| Figura 5. Beneficios potenciales de la economía circular en la industria química: recuperación |
| de monómero de etileno a través de pirólisis de polietileno |
| Figura 6. Procedimiento de modelado y simulación según Yin & McKay 23 |
| Figura 7. Modelo conceptual utilizado para la obtención de combustibles mediante pirolisis de mascarillas desechables |
| Figura 8. Diagrama de flujo para la obtención de combustibles sintéticos a partir de mascarillas |
| descartables en Aspen Plus |
| Figura 9. Distribución del tamaño de partícula de la corriente de salida posterior a trituración |
| Figura 10. Producción de gas en función de la temperatura del reactor de Gibbs |
| Figura 11. Producción de combustibles líquidos en función de la temperatura del reactor de Gibbs |
| Figura 12. Producción de gas en función de la presión del reactor de Gibbs 39 |
| Figura 13. Producción de combustibles líquidos en función de la presión del reactor de Gibbs |
| Figura 14. Variación de los principales productos condensables con respecto a la presión 43 |
| Figura 15. Variación de los principales productos condensables con respecto a la temperatura |
| |

CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN

La pandemia de coronavirus 19 (COVID-19) que enfrenta el mundo actualmente ha provocado una gran demanda de productos plásticos de un solo uso, impulsando el consumo masivo de equipos de protección personal (EPP) a nivel global. Las mascarillas faciales de un solo uso son uno de los EPP más utilizados para prevenir la transmisión del virus. Se estima que 6,8 mil millones de máscaras faciales descartables se utilizan en todo el mundo cada día durante la pandemia, solo para terminar en vertederos o contaminar nuestros océanos (Torres & De-la-Torre, 2021).

Con el aumento significativo del uso de mascarillas faciales, existe una preocupación por la eliminación segura de estos materiales de desecho. No obstante, la mala gestión de dichos materiales amenaza el ambiente con una nueva forma de contaminación plástica. Específicamente, la manipulación de mascarillas faciales descartables de desecho está agravando los problemas ambientales actuales constituidos por el gran volumen de diversos plásticos que se desechan en los cuerpos de agua (Nzediegwu & Chang, 2020).

Ya que las mascarillas descartables están hechas de polímeros como polipropileno, poliuretano, poliacrilonitrilo, poliestireno, policarbonato, polietileno o poliéster y no son biodegradables, el reciclaje es la mejor opción de eliminación de EPP, aunque esta práctica no se realiza fácilmente debido a un alto potencial biológico peligroso persistente en el material y a la dificultad de separarlos correctamente (Fadare & Okoffo, 2020).

Si bien la eliminación y el manejo de mascarillas faciales usadas y otros materiales relacionados con la pandemia pueden presentar un desafío ambiental, estos materiales residuales pueden convertirse en valiosos bioproductos. En este contexto, la destrucción térmica a través de procesos termoquímicos ofrece una ruta de eliminación confiable para los EPP. Entre estos procesos, la incineración de EPP se practica comúnmente, pero adolece de fallas técnicas en términos de control de contaminación del aire (CCA) (Oginni, 2021).

Así, los EPP son incinerados a una temperatura superior a 1100 °C, al igual que los desechos biomédicos públicos. En consecuencia, varias toxinas son generadas en el proceso de la

incineración tales como el furano, y las dioxinas, las cuales causan graves problemas de salud. Adicionalmente, la incineración junto con la purificación de gas combustible también requiere costos y cargas adicionales para el trabajador. Es decir, la operación de una instalación de incineración con limpieza de gas combustible para una pequeña cantidad de desechos de EPP no es factible y aplicable para el manejo de tecnologías alternativas (Aragaw, 2020).

Por consiguiente, es de vital importancia encontrar una plataforma de eliminación fiable de EPP más allá de la incineración, con la que se logre recuperar energía y sustancias químicas valiosas de los EPP. Bajo esta premisa, la pirólisis se presenta como una tecnología de conversión termoquímica que implica la descomposición térmica de un material a una temperatura por encima de 400 °C en ausencia de oxígeno para producir bioaceite, biocarbón, y el gas no condensable (Oginni & Singh, 2019).

La pirólisis ofrece un medio eficaz para recuperar energía y sustancias químicas mediante la reordenación del carbono. En este sentido, los materiales de carbono con los que se fabrican los EPP pueden convertirse en diferentes fases de productos pirogénicos, incluido el gas de síntesis o syngas, los hidrocarburos líquidos y los residuos sólidos (biocarbón o biochar).

En consecuencia, la distribución de carbono de los EPP probablemente podría derivarse en pirolizados líquidos y gaseosos (Jung et al, 2021). No obstante, es posible obtener mezclas de productos líquidos, sólidos y/o gaseosos en proporción y composición diferentes, dependiendo de la temperatura a la cual se lleve a cabo la pirólisis y de otros parámetros de operación del proceso (tales como presión, velocidad de calentamiento, flujos o carga de materia prima, tiempo de exposición, etc.) (Li, et al., 2021).

Así, los productos gaseosos son categorizados como gas de síntesis (syngas), los cuales se tratan de gases no condensables como CO, CO_2 , H_2 , C_2H_6 , CH_4 , C_2H_4 , entre otros, mientras que, el producto líquido está compuesto por fenoles, olefinas y compuestos aromáticos que carecen de oxígeno como sustituto, por ejemplo, benceno, tolueno, antraceno, naftaleno, e indeno, entre otros, y suele clasificarse como biocombustible o combustible sintético (Amar et al., 2019).

1.1. JUSTIFICACIÓN

El reciente aumento en el total de casos de contagios por coronavirus 19 (COVID-19) y la propagación de los brotes de este virus en todo el mundo, ha conllevado el aumento significativo del uso de equipos de protección personal (EPP), principalmente mascarillas faciales descartables.

Según las estimaciones de la Organización Mundial de la Salud (OMS), se necesitaron aproximadamente 89 millones de mascarillas médicas para responder al COVID-19 cada mes (Organización Mundial de la Salud, 2020). Esta demanda ha dado lugar a un aumento sin precedentes en la producción mundial de mascarillas descartables que se producen con materiales poliméricos (Fadare & Okoffo, 2020).

El aumento en la producción y el consumo de mascarillas descartables en todo el mundo ha dado lugar a un nuevo desafío ambiental, que se suma a la gran cantidad de plástico y partículas de plástico que se desperdician tanto en el ambiente terrestre como acuático (Aragaw, 2020). Además, desafortunadamente, no existe una regulación internacional unificada sobre la regulación de los residuos de EPP y la gestión de la contaminación de estos materiales, principalmente por su alto potencial biopeligroso (Oginni & Singh, 2019).

Debido a su naturaleza de hidrocarburos, las mascarillas descartables pueden ser convertidas en bioproductos valiosos como son: el gas de síntesis, el bioaceite y biocarbono. Esto implica que, la gran cantidad de mascarillas faciales descartables usadas pueden servir como materia prima confiable para la síntesis de bioproductos a través de un proceso de pirólisis (Jung et al., 2021). La pirólisis tiene un mérito superior a la contaminación y una disminución en la huella de carbono de los productos plásticos en comparación con otros tratamientos térmicos (Burra & Gupta, 2018).

Además, dado que la duración persistente del coronavirus disminuye a medida que aumenta la temperatura, el uso de mascarillas descartables contaminadas como precursor de la producción de bioproductos no presentará ningún peligro de transmisión secundaria ya que el virus no podría sobrevivir a la temperatura a que está teniendo lugar este proceso de conversión termoquímica (Oginni, 2021).

La composición y distribuciones de carbono en los procesos pirolíticos trifásicos se pueden controlar modificando los parámetros operativos (velocidad de calentamiento, temperatura, duración, etc.) y adoptando catalizadores durante el proceso, lo cual puede ser modelado y estimado con la ayuda de softwares específicos tales como el programa AspenPlus (Amar et al., 2019).

En Ecuador, los lineamientos del Servicio Nacional de Gestión de Riesgos y Emergencias (COE Nacional) para el uso obligatorio de mascarillas descartables ante la epidemia de COVID-19 fueron bien recibidos por la ciudadanía en general; no obstante, la ignorancia y la apatía en el manejo de estos tipos de residuos sólidos tiene una influencia significativa en los ecosistemas (Alarcón, 2020).

Según reportes de la Empresa Pública Metropolitana de Gestión Integral de Residuos Sólidos (EMGIRS EP), solo en la ciudad de Quito, se registró un incremento del 40%, es decir, 600 toneladas diarias adicionales de residuos sólidos durante la emergencia. Pese a que se trataban de residuos domésticos, dentro de éstos también se desecharon mascarillas, guantes, medicamentos u otros artículos contaminados que se podían mezclar fácilmente con la basura doméstica (Lara & Lescano, 2020).

En Ecuador, trabajos de investigación de esta índole son escasos o casi nulos, debido a que los pocos estudios que existen abarcan experimentos a escala de laboratorio con materiales o residuos plásticos en general, como es el caso de los estudios de Mancheno, et al. (2016) y Gutiérrez (2020), con resultados prometedores.

En este sentido, la presente investigación alineándose con la línea de investigación institucional de gestión y conservación ambiental, busca analizar el proceso de pirólisis de mascarillas descartables mediante simulaciones desarrolladas en Aspen Plus, ofreciendo un proceso computacional que permita estudiar su transformación en combustibles comerciales mediante transformación termoquímica, recuperando el valor energético de desechos de difícil tratamiento.

1.2. FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

¿Cuáles son las variables teóricas y la ruta de conversión pirolítica más adecuada utilizando el programa Aspen Plus para la conversión de mascarillas descartables en combustible comercial, como fuente de energía alternativa, con rendimiento teórico mínimo de 80 %?

1.3. HIPÓTESIS

El análisis del proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustible comercial mediante el software AspenPlus permitirá identificar las variables teóricas y la ruta de conversión pirolítica para lograr un mínimo de 80 % de rendimiento teórico y estimar la producción de combustible.

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo general

Simular mediante AspenPlus el proceso de pirólisis para conversión de mascarillas descartables en combustible como fuente de energía alternativa con un mínimo de 80 % de rendimiento teórico.

1.4.2. Objetivos específicos

➢ Identificar las variables y equipos teóricos para el modelo de conversión de mascarillas descartables en combustible mediante AspenPlus.

Precisar la ruta de conversión pirolítica más adecuada para la conversión de mascarillas descartables en combustible mediante AspenPlus, como fuente de energía alternativa.

Estimar el rendimiento teórico de producción de combustible mediante el proceso de pirolisis usando como materia prima mascarillas descartable en AspenPlus.

CAPÍTULO II

2. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA DE LA INVESTIGACIÓN

2.1. Generación de residuos de EPP durante el brote de COVID-19

El brote de la pandemia causada por el Síndrome Respiratorio Agudo Severo Coronavirus versión 2 (SARS-CoV-2), ha afectado a 220 países y territorios a nivel mundial, causando 169`648 062 casos confirmados de infección y 3`525 426 muertes confirmadas, hasta mayo de 2021. Motivo por el cual, los hospitales han generado grandes cantidades de desechos médicos (principalmente mascarillas, guantes, batas, jeringas, objetos punzocortantes, etc.) y en el exterior, se observa el notorio crecimiento de la contaminación por la cantidad de equipos de protección personal (EPP), especialmente mascarillas faciales descartables y guantes debido a su inadecuado manejo. La gestión eficaz de los residuos de EPP que se generaron durante el COVID-19 se puede lograr mediante la adopción de medidas específicas como la identificación precisa, la recolección, la segregación, el almacenamiento, el transporte, los tratamientos y la disposición final (Ilyas et al., 2020).

En el sector de la salud, la demanda de diferentes productos básicos como caretas, guantes, bolsas de basura y mascarillas faciales también aumenta la demanda de diferentes tipos de polímeros como el polipropileno (PP), el policloruro de vinilo (PVC) y el tereftalato de polietileno (PET) generando una gran cantidad de residuos plásticos. Si bien los gigantes comerciales intentan aprovechar la oportunidad, el flujo de residuos resultantes contribuyen a generar cada vez más residuos relacionados con el COVID. En todo el mundo, todos los sectores gubernamentales han recibido instrucciones para tratar los residuos de EPP como una prioridad pública urgente e importante que reduciría sus efectos secundarios sobre la salud de las personas y el ambiente (Dharmaraj et al., 2021).

2.2. Mascarillas faciales descartables

Las mascarillas descartables (máscaras faciales de un solo uso) son un tipo de EPP que se usan para proteger la boca y la nariz de salpicaduras de fluidos corporales, microorganismos (bacterias y virus), y filtran el aire antes de inhalarlo (Fadare & Okoffo, 2020).

2.2.1. Características y Composición.

Las mascarillas faciales de un solo uso son fabricadas a partir de polímeros como polipropileno, poliuretano, poliacrilonitrilo, poliestireno, policarbonato, polietileno o poliéster. Se componen de tres capas; una capa interna (fibras blandas), una capa intermedia (filtro fundido por soplado) y una capa externa (fibras no tejidas, que son resistentes al agua y generalmente coloreadas). El filtro fundido por soplado es la principal capa filtrante de la máscara producida por la fabricación convencional de micro y nanofibras, donde el polímero fundido se extruye a través de pequeñas boquillas, con gas de soplado de alta velocidad (Fadare & Okoffo, 2020).

2.2.2. Gestión como residuos plásticos.

Aunque en la actualidad no existe una regulación internacional unificada sobre la regulación de plásticos y la gestión de su contaminación, pocos países han implementado medidas estrictas para frenar la proliferación incesante de desechos plásticos. Por ejemplo, se espera que el Proyecto de Residuos Marinos de la Administración Nacional Oceánica y Atmosférica (NOAA), aprobado bajo las Leyes de Acción de Residuos Marinos de la Comisión Europea, promueva la concienciación sobre la contaminación por partículas plásticas a través del programa de educación pública. Así mismo, países como Irlanda impusieron impuestos a los consumidores de bolsas de un solo uso; China y Sudáfrica combinaron la prohibición y los impuestos a los minoristas (Li et al., 2019). Desafortunadamente, no se ha logrado una plataforma confiable de eliminación de EPP debido a que la mayoría de las mascarillas desechables utilizadas en áreas altamente contaminación con COVID-19. Además, su naturaleza heterogénea dificulta el establecimiento de una plataforma de reciclaje fiable (Oginni & Singh, 2019).

Como se muestra en la Figura 1, en general, las mascarillas faciales descartables deberían ser tratadas y desechadas adecuadamente para eliminar cualquier virus residual. La OMS recomienda un tratamiento previo de estos materiales con desinfectantes para, posteriormente ser incinerados, destruyendo los patógenos residuales. Sin embargo, como las instalaciones de recolección de mascarillas faciales son limitadas en la mayoría de los países, se pueden encontrar mascarillas usadas esparcidas por las calles, mismas que podrían terminar fácilmente en ríos, lagos y bahías por acción de la lluvia o el viento (Li et al., 2022).



Figura 1. El ciclo de vida de la mascarilla facial (MF) desechable en el ambiente.

Fuente: Adaptado de Environmental risks of disposable face masks during the pandemic of COVID-19: Challenges and management por Li et al., 2022.

2.3. Prácticas disponibles para la gestión de mascarillas faciales descartables

Se ha estimado que durante el brote de COVID-19, la cantidad de residuos plásticos ha aumentado considerablemente, representando casi un 44,8% de envases y un 13,2% de otros (médicos). Este aumento se debe principalmente a la adquisición de productos en línea en consecuencia a las medidas restrictivas de movilización, así como a ciertos consumibles como

desinfectante para manos, espray desinfectante, agentes de limpieza, toallitas desechables, mascarillas, guantes, etc (Dharmaraj et al., 2021).

Previo al brote de COVID-19, los residuos sólidos generados eran manipulados por personal sanitario y luego transportados a los centros de gestión de residuos. Sin embargo, después del brote de COVID-19, los desechos que se han generado se consideran de naturaleza peligrosa, resultando fácilmente en contaminación y daños ambientales graves, ya que pueden contener agentes infecciosos, y necesitan instalaciones separadas de manipulación, tratamiento y eliminación como se visualiza en la Figura 2 (Dharmaraj et al., 2021).

Si los residuos de COVID no son eliminados adecuadamente, pueden mezclarse con los residuos municipales y presentar un riesgo de transmisión entre los manipuladores sanitarios y la población en general. Por lo tanto, un sistema de gestión de residuos sólidos por separado es una medida requerida de inmediato para la correcta gestión de este tipo de residuos, por lo que deben ser eliminados en un entorno controlado de tratamiento térmico para destruir cualquier patógeno vivo (Ilyas et al., 2020).



Figura 2. Descripción general sobre el destino del MICROPLÁSTICO de las mascarillas desechables en el ambiente.

Fuente: Adaptado de Environmental risks of polymer materials from disposable face masks linked to the COVID-19 pandemic por Du et al., 2022.

El enfoque más común para el actual flujo de residuos de COVID es incinerar (por combustión) los desechos. Con referencia a la facilidad de operación, la técnica de incineración se utiliza como un tratamiento *"in situ"* de los residuos de COVID, lo que no sucede con otras opciones como el vertido. Sin embargo, la incineración no es un enfoque de gestión de residuos eficiente o ecológico en el uso de los recursos, ya que es una ruta para la destrucción directa, no para la recuperación o reciclado. A su vez, la incineración recibe críticas negativas por su enorme huella

de carbono producida por la combustión de cualquier tipo de residuo sólido (biomasa y plástico) (Olufemi & Olagboye, 2017).

En países en desarrollo como la India, la creciente cantidad de envases de plásticos desechables como el polipropileno (PP), el polietileno de baja densidad (LDPE), el polietileno de alta densidad (HDPE), el tereftalato de polietileno (PET) y el poliestireno (PS) está creando una enorme presión en vertederos a cielo abierto y vertederos controlados. Los materiales desechados, incluidos mascarillas, guantes y EPP contaminados, pueden agravar los problemas ambientales y de salud, particularmente en países en desarrollo. Países en los que el sistema de gestión de desechos sólidos aún se encuentra en fase de implementación y todavía se debe alcanzar una etapa totalmente dedicada a la disposición para reciclar dentro de toda la cadena de desechos (Mallapur, 2020).

En la Figura 3 se detallan, de manera general, las tecnologías convencionales que se utilizan actualmente para la gestión de residuos plásticos y que se aplican a su vez a aquellos residuos de EPP y residuos COVID, junto con las tecnologías actuales innovadoras:



Figura 3. Tecnologías convencionales e innovadoras para la gestión de residuos plásticos y residuos COVID.

Fuente: Adaptado de Plastics waste management: A review of pyrolysis technology por Uzochukwuet al., 2021.

2.4. Tecnologías de conversión de residuos en energía.

La conversión de residuos en energía o WTE (por sus siglas en inglés) es el proceso de recuperación de energía, en forma de electricidad y/o calor, de los residuos. Los procesos de conversión de residuos en energía recuperan la energía contenida en éstos, a través de la conversión termoquímica directa (incineración, pirólisis y gasificación) o la producción de combustibles en forma de metano, hidrógeno y otros combustibles sintéticos (digestión anaerobia, tratamiento biológico mecánico y combustible derivado de residuos) (Bosmans et al., 2013).

2.4.1. Conversión termoquímica.

La conversión termoquímica es básicamente un proceso de alteración de la estructura química y física de los residuos sólidos urbanos (RSU) mediante la aplicación de calor con el objetivo de obtener el máximo rendimiento de combustible y productos químicos del recurso RSU. Estos procesos son principalmente pirólisis, gasificación e incineración o combustión; cada una abarca una amplia gama de condiciones de funcionamiento (Amar et al., 2019).

Tanto la pirólisis como la gasificación se diferencian de la combustión en que pueden utilizarse para recuperar el valor químico de los residuos, más que su valor energético, a través de la generación de nuevos compuestos como se visualiza en la Figura 4 (Bosmans et al., 2013). La tecnología de pirólisis y gasificación de RSU es una forma atractiva de tratamiento con menos emisiones contaminantes comparado con otros métodos, ambos procesos ofrecen el potencial para una mayor eficiencia energética. No obstante, la pirólisis se considera una alternativa ambientalmente atractiva para la recuperación de materiales de hidrocarburos de una amplia gama de flujos de desechos poliméricos, como los desechos plásticos (Anuar Sharuddin et al., 2016).





Fuente: Adaptado de Experimental investigation and Aspen Plus simulation of the MSW pyrolysis process por Ansah (2013), tesis de posgrado, North Carolina Agricultural & Technical State University, https://digital.library.ncat.edu/theses/104.

2.5. Pirólisis.

La pirólisis es un proceso termoquímico irreversible de tratamiento de materiales a temperaturas elevadas en una atmósfera inerte. Es básicamente un proceso de carbonización en el que se descompone un material orgánico para producir un residuo sólido con un alto (o mayor) contenido de carbono y algunos productos volátiles. Las reacciones de descomposición van acompañadas en general de reacciones de polimerización e isomerización. Los productos finales de la pirólisis incluyen coproductos residuales sólidos y cenizas, gases no condensables y líquidos condensables. Estos productos se pueden controlar optimizando los parámetros de pirólisis, como la temperatura y el tiempo de residencia (Hassan, 2020).

2.5.1. Tipos de pirólisis.

Pirólisis convencional o lenta (no isotérmica). Se define como la pirólisis que ocurre bajo una velocidad de calentamiento lenta, caracterizada por un proceso de 2 horas y una velocidad de calentamiento lenta de 0,07 °C/s hasta 550 °C. El líquido producido durante la pirólisis lenta de residuos plásticos suele ser aceitoso en lugar de ceroso. La fracción de gasolina, C₆–C₁₂, puede componer hasta el 90 % en peso del producto líquido, lo que la hace valiosa para reemplazar la gasolina convencional (Papari et al., 2021).

Pirólisis rápida o instantánea (isotérmica). En el proceso de pirólisis rápida, se utiliza un tiempo de residencia corto de 0,5 a 10 segundos y una velocidad de calentamiento de 10 a 200 °C/s. La pirólisis instantánea de desechos plásticos produce más gas que líquido, en contraste con la pirólisis flash de biomasa, que produce los rendimientos más altos de bioaceite con los rendimientos más bajos de sólidos y gases (Pandey U. et al., 2020). El método de pirólisis rápida catalítica, por otro lado, crea un líquido rico en hidrocarburos (C₁₁-C₂₀) con características térmicas y químicas comparables al diésel. Además, utilizando la pirólisis flash, es posible recuperar hasta el 75 % en peso de los monómeros del material plástico, etileno y propileno. (Papari et al., 2021). La pirólisis rápida proporciona una condición para maximizar la producción del líquido, se considera que el reactor opera isotérmicamente. Es el más común de los métodos, tanto en investigación como en uso práctico en pirólisis de plásticos (Uzochukwu et al., 2021).

Pirólisis ultrarrápida o flash. Se trata de una pirólisis de descomposición térmica extremadamente rápida y una alta tasa de calentamiento, siendo los principales productos generados gases y bioaceite (Uzochukwu et al., 2021). Las tasas de calentamiento pueden variar de 100 a 10 000 °C/s y los tiempos de residencia son cortos, como se visualiza en la Tabla 1.

| Tipos de | Tiempo de | Tasa de | Temperatura | Rendimiento |
|--------------|--------------|---------------|---------------|-------------|
| pirólisis | retención | calentamiento | (° C) | líquido (%) |
| Lenta | 5–30 minutos | Bajo | 300–650 | <30 |
| Rápida | <2 s | Muy alto | 450-600 | 50-75 |
| Ultrarrápida | <1 s | Elevado | 450-1000 | >75 |

Tabla 1. Parámetros operativos y rendimientos del producto para los tipos de pirólisis.

Fuente: Adaptado de Recycling of Waste Plastics into Pyrolytic Fuels and Their Use in IC Engines por Sinan Erdogan (2020).

2.5.2. Productos de pirólisis de residuos plásticos.

Los productos obtenidos de la pirólisis de residuos plásticos (de todos los tipos, solos o mezclados) se clasifican en (Lewandowski et al., 2020):

- <u>Sólido:</u> Biocarbón: carbón vegetal (en caso de descomposición de la madera) y ceniza.
- <u>Gas:</u> Una mezcla de CO, CO₂, H₂, hidrocarburos gaseosos (CH₄, C₂H₆) y vapores de hidrocarburos líquidos, p. ej., C₃H₈, C₄H₁₀ y vapor, con un poder calorífico de aprox. 12 MJ/kg.
- Líquido: Aceite y brea, que son una mezcla de hidrocarburos, fenoles y alrededor de 200 compuestos orgánicos alifáticos y aromáticos diversos, saturados e insaturados. Hasta un 85 % en peso de biocombustibles primarios líquidos se genera directamente como resultado de la pirólisis flash de alto rendimiento. Estos tienen una baja viscosidad, se pueden mezclar hasta en un 35-50 por ciento con agua y se queman rápidamente en calderas, hornos y motores. Estos combustibles son menos estables, más sensibles a la temperatura y pueden polimerizarse con el tiempo en comparación con los combustibles derivados del petróleo. La pirólisis típica o lenta con menor eficiencia, que no supera el 20% en peso, produce biocombustibles secundarios líquidos. Estos tienen una alta viscosidad y una baja tolerancia al agua. La disección ocurre cuando la cantidad de agua en el cuerpo supera el 20% en peso. Estas características no los desacreditan como combustibles, pero constituyen un cierto impedimento técnico (Papari et al., 2021).

2.5.3. Condiciones de funcionamiento del proceso de pirólisis.

- *Temperatura*. La temperatura óptima de pirólisis para la degradación térmica de los desechos plásticos en combustible líquido se encuentra en el rango de 450 a 700 °C. Sin embargo, la adición de un catalizador aumenta la degradación de los plásticos a temperaturas más bajas (230 °C–350 °C). A temperaturas de 230–450 °C el producto es principalmente líquido con solo pequeñas cantidades de componentes gaseosos. A temperaturas más altas (450 °C–700 °C), se produce una cantidad considerable de gas junto con el líquido pirolítico (Uzochukwu et al., 2021).
- Tiempo de retención. Junto con la temperatura, la residencia o duración de retención del vapor en el reactor, también conocida como zona caliente, es un componente crítico que influye en los rendimientos y composiciones de los productos de pirólisis. Los vapores son propensos a romperse o repolimerizarse posteriormente en condiciones de pirólisis. Se recomienda mantener períodos de residencia de vapor de unos pocos segundos a unos pocos minutos para obtener los mejores rendimientos de bioaceite por pirólisis. Vale la pena señalar

que la generación de bioaceite libre de oxígeno se beneficia de las altas temperaturas y las largas duraciones de residencia. (Aragaw & Mekonnen, 2021). Sin embargo, debido a los límites de transporte de calor en la superficie de las partículas, la conversión de biomasa total es difícil de lograr. Como resultado, se recomienda optimizar los tiempos de residencia del proceso de pirólisis para producir un alto rendimiento y una mayor calidad del aceite. Aumenta la duración en un proceso por lotes, reduce el rendimiento líquido al tiempo que aumenta la producción de carbón y sólidos (López et al., 2011).

- Velocidad de calentamiento. Según diversas investigaciones, se ha demostrado que la tasa de calentamiento afecta en gran medida el rendimiento de bioaceite (o alquitrán) de la biomasa. Los efectos de la velocidad de calentamiento en partículas diminutas se deben esencialmente al hecho de que, entre otras cosas, una velocidad de calentamiento rápida puede preferir la ruptura simultánea de enlaces (producción volátil) sobre los eventos de recombinación (carbonización). La relevancia de la velocidad de calentamiento varía según los biopolímeros que componen la biomasa (celulosa, hemicelulosas y lignina) (Qureshi, et al., 2020).
- *Caudal de gas de barrido*. El gas de barrido elimina los productos de la zona caliente, lo que reduce las reacciones secundarias, como el craqueo térmico, la repolimerización y la recondensación que se producen cuando los vapores de pirólisis que salen entran en contacto con el entorno sólido circundante. Esto da como resultado un mayor rendimiento de líquido en la pirólisis rápida, y vale la pena señalar que no se espera que el barrido de gas afecte la producción de líquido de pirólisis. Sin embargo, para la generación de aceite líquido de pirólisis rápida, se considera una característica secundaria. Los gases inertes como N2, Ar y vapor de agua se utilizan para purgar rápidamente el vapor de pirólisis caliente. Debido a su bajo costo, el gas nitrógeno sigue siendo el gas de barrido más popular en la mayoría de las investigaciones. El flujo de nitrógeno afecta el tiempo de residencia de la fase de vapor producida por la pirólisis, por lo que las tasas de flujo más altas provocan una eliminación rápida de los productos del medio de reacción y minimizan las reacciones secundarias, como la formación de carbonilla (Anuar Sharuddin, et al., 2016).
- *Tamaño de las partículas de alimentación*. El tamaño de las partículas de alimentación juega un papel muy importante en el rendimiento y las propiedades del aceite líquido y también

afecta las limitaciones de transferencia de calor. En general, se prefieren los tamaños de partículas pequeñas en los sistemas de pirólisis rápida (Dharmaraj et al., 2021).

2.6. Ventajas de utilizar la tecnología de pirólisis en la gestión de mascarillas faciales descartables.

Alto poder calorífico

El combustible líquido procedente de residuos plásticos suele ser más pesado en comparación con el combustible comercial convencional, por lo que tiene un poder calorífico superior ligeramente inferior o superior a 10 000 kcal/L. Esta propiedad es una ventaja para el combustible utilizado en calderas, fábricas de cemento, acerías y fábricas de vidrio (Panda et al., 2020).

Selectividad de alimentación

La tecnología de pirólisis se puede utilizar para descomponer prácticamente cualquier forma de basura plástica, ya sea limpia o sucia y sin clasificar. No hay necesidad de triturar residuos plásticos en una instalación de pirólisis de residuos plásticos por lotes. Todas las operaciones, desde el plástico hasta el combustible, tienen lugar dentro del reactor de pirólisis de residuos y su sistema de accesorios, lo que es extremadamente fácil y ahorra tiempo. También ha habido informes de coprólisis de plásticos con papel de desecho, biomasa e incluso polímeros de desechos médicos (Supramono et al., 2018).

Pirólisis de residuos plásticos mixtos

Una de las principales ventajas de la tecnología de pirólisis para la gestión de residuos plásticos es su capacidad para utilizar varios tipos y clases de plásticos como materia prima única sin necesidad de desmontarlos y clasificarlos. A diferencia del reciclaje, la pirólisis no requiere una clasificación cuidadosa de los diferentes plásticos. La mayoría de los plásticos no son compatibles entre sí, por lo que no se pueden procesar juntos durante el reciclaje. Por ejemplo, una pequeña fracción de PVC en el flujo de reciclaje de PET degradará toda la resina de PET haciéndola amarillenta y quebradiza (Hopewell et al., 2009).

2.7. Economía circular en la conversión de mascarillas faciales descartables en energía sostenible.

El concepto de economía circular ha ganado un gran interés en la industria como una poderosa estrategia para reducir los impactos sin dejar de ser económicamente competitivo. Desde esta perspectiva, la pirólisis es una de las técnicas que se han utilizado para el tratamiento de los residuos sólidos urbanos especialmente residuos domésticos, de pequeñas industrias y algunos de hospitales comunes. Estos incluyen componentes como papeles, plásticos, partículas de metal, ropa textil, desechos orgánicos, contenido de cuero, caucho, vidrios, cerámica y otros materiales. En los últimos días, el proceso está recibiendo mucha atención debido a su flexibilidad para generar la proporción mixta de productos sólidos, líquidos y gaseosos, con el único requerimiento de una variación en los parámetros operativos como diferentes temperaturas o velocidades de calentamiento (Anuar Sharuddin, et al., 2016).

La tecnología de pirólisis tiene la capacidad de transformar materiales de baja densidad energética en combustibles de alta energía. Por ende, servirá como una tecnología alternativa y posiblemente sostenible para manejar el actual flujo de desechos de COVID a corto y largo plazo. En comparación con la incineración, se informa que la pirólisis es un proceso más ecológico y eficiente en el uso de los recursos (Park et al., 2021). Como un enfoque de ingeniería verde bien conocido, la pirólisis se ha adoptado durante mucho tiempo, basada en la economía circular, para reciclar múltiples tipos de residuos sólidos, incluidos los de biomasa y plásticos. Así, la Figura 5 representa como la pirólisis de PE residual puede ser una ruta atractiva para cerrar el ciclo en el proceso de producción de etileno, promoviendo así la adopción de principios de economía circular dentro del sector de plásticos y productos químicos. A pesar de la producción de ingeniería de la calta de la incineración, ningún flujo de productos está directamente abierto al ambiente, lo que lo convierte en un proceso ecológico (Somoza-Tornos et al., 2020).





Fuente: Adaptado de Realizing the Potential High Benefits of Circular Economy in the Chemical Industry: Ethylene Monomer Recovery via Polyethylene Pyrolysis por Somoza-Tornos et al., (2020)

La pirólisis está ganando terreno en el campo del procesamiento de plásticos a gran escala para combustible. Actualmente, se han creado muchos tipos de procedimientos de pirólisis, cada uno de los cuales utiliza ciertos tipos de reactores para tratar una cantidad específica de desechos y producir productos definidos (Dharmaraj et al., 2021). Debido a las ventajas de los métodos de pirólisis y su efectividad en el tratamiento de la basura municipal, también pueden usarse para manejar los desechos de COVID-19. El método emplea combustión a alta temperatura, que puede usarse para degradar por completo los patógenos entregados en el mismo contenedor que la basura COVID-19. El principal factor por abordar es el transporte seguro de este tipo de basura a una instalación que trate y elimine los desechos médicos ordinarios. El marco también es aplicable a los desechos de COVID (como mascarillas) recolectados en lugares públicos, restaurantes, y tiendas, así como aquellas que generan una cantidad sustancial de desechables y otros residuos poliméricos. Esto permitirá que el recurso circule a lo largo de la cadena de valor en un "flujo cerrado", conforme a los principios de la economía circular. En el tiempo posterior a la pandemia, la planta continuaría funcionando como una instalación principal de gestión de residuos para tratar todos los demás desechos poliméricos sintéticos de las ciudades que se generen en el futuro (HalogA. & Anieke, 2021; Dharmaraj et al., 2021).

2.8. Técnicas de Modelación y Simulación

El modelado y la simulación implican un proceso de diseño de un modelo de un mundo real o un sistema anticipado, para luego realizar experimentos con el modelo con el fin de comprender el rendimiento del sistema en diferentes condiciones operativas y evaluar estrategias de gestión ayudando a procesos de toma de decisiones alternativos. La tecnología de modelado y simulación se considera cada vez más como una tercera metodología de investigación científica, además de los enfoques deductivos e inductivos tradicionales. El propósito del modelado y simulación incluye la evaluación del desempeño, la prueba, la predicción, el descubrimiento, la capacitación, el entretenimiento y la educación (Abar et al., 2017).

2.8.1. Simuladores modulares secuenciales:

El enfoque de cálculo se codifica como una estrategia de diagrama de simulación en los simuladores modulares secuenciales (Arteaga, 2009). A continuación, se enlista las ventajas y desventajas de su aplicación:

Ventajas (Arteaga, 2009):

- Debido a que las unidades se calculan por separado, se pueden obtener grandes diagramas de flujo.
- Los ingenieros "no especialistas en simulación" pueden entender la simulación.
- Estrategias de convergencia fiables y robustos (Sustitución Directa, Wegstein, etc.).
- Los datos ingresados por el usuario son fáciles de interpretar y verificar.

Desventajas (Arteaga, 2009):

- Los diagramas de flujo con varias corrientes recirculantes tienen problemas de convergencia.
- Lento para diagramas de flujo grandes con muchos flujos de recirculación y requisitos de diseño complejos.

Las corrientes de salida de las operaciones unitarias precedentes se utilizan para calcular las operaciones unitarias individuales. El orden de cálculo se correlaciona aproximadamente con la dirección del flujo de la planta (Arteaga, 2009).

Entre los simuladores modulares secuenciales, los de mayor uso e importancia para la industria de procesos son los siguientes (Arteaga, 2009):

- Aspen Plus (Aspen Technology, USA),
- HYSYS (Hyprotech, Canadá),
- DESIGN II (Advanced Engineering Software),
- CHEMCAD (Chemistations, USA),
- SuperPro Designer (Intelligen INC).
- Pro II (Simulations Sciences, USA),

2.8.2. Simulación global u orientada a ecuaciones:

La simulación global se ha reducido a ecuaciones, un modelo matemático que describe el proceso mediante la construcción de un vasto sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. Un ejemplo de ello, son las simulaciones típicas de columnas de destilación que utilizan técnicas rigurosas donde el sistema de ecuaciones del problema puede tener más de mil variables. El tamaño del sistema que representa el modelo de una planta completa se deriva de este cálculo (Arteaga, 2009).

Ventajas (Arteaga, 2009):

- Convergencia óptima en diagramas de flujo con varias corrientes de reciclo.
- Comportamiento seguro en la convergencia.

Desventajas (Arteaga, 2009):

- Requiere amplio espacio para almacenamiento.
- Presenta dificultades para hallar los errores.
- Se deben especificar los valores iniciales.
- A medida que el sistema se vuelve más complicado, los hallazgos se vuelven menos confiables y hay más problemas de convergencia (soluciones sin significado físico).

2.8.3. Proceso de Modelado y Simulación

Por una variedad de razones, como cambios en la descripción del problema, el objetivo de los estudios de simulación, las preferencias de los experimentadores y las limitaciones de las tecnologías de simulación utilizadas, las metodologías específicas utilizadas para replicar situaciones del mundo real pueden variar (Arteaga, 2009).

Las contribuciones al desarrollo de procesos de modelado y simulación incluyen varios criterios de investigadores que han propuesto diferentes procedimientos en base a los estudios que desarrollaron, como se detalla en la Tabla 2.

| Autor | Shannon | Seila |
|---------------|---|---|
| Procedimiento | Definición del sistema Formulación del modelo Preparación de datos Traducción de modelos Validación Planificación estratégica Planificación Táctica Experimentación Interpretación Implementación Documentación | Declaración del problema y objetivos Análisis de sistemas Análisis de Distribución de Entradas Construcción del modelo Diseño y Codificación del Programa de Simulación Verificación del Programa de Simulación Verificación del Programa de Simulación Diseño de análisis de datos de salida Validación del Modelo Diseño experimental Realización de corridas de producción Análisis Estadístico de Datos Implementación Documentación Final |
| Referencias | (Shannon, 1983) | (Seila, 1995) |

Tabla 2. Procedimientos de modelado y simulación.

Yin & McKay (2018) proponen un procedimiento de simulación diseñado para guiar las actividades de investigación y los experimentos en un estudio de caso de resolución de problemas del mundo real. El proceso se evaluó a través de la aplicación a un caso de estudio descrito en la Figura 6 donde la intención de la investigación fue explorar el desempeño durante

el desarrollo de un nuevo producto, con miras a identificar el recurso tiempo utilizado por los equipos de trabajo en el proceso y proponer mejores estrategias de gestión para reducir los tiempos del ciclo de desarrollo de productos.



Figura 6. Procedimiento de modelado y simulación según Yin & McKay. Fuente: Tomado de *Introduction to Modeling and Simulation Techniques* por Yin & McKay (2018, p. 3).

2.8.4. Advanced System for Process Engineering plus - Aspen Plus

El software comercial, ASPEN Plus de AspenTech, Inc., es una plataforma de simulación ampliamente utilizada para analizar el balance de masa y energía en un proceso de ingeniería química. Es un software orientado a procesos que facilita el cálculo de parámetros físicos, químicos y biológicos, manejando fases sólidas, líquidas y de vapor en el proceso. Pequeñas secciones del sistema complejo e integrado se pueden modelar y probar aquí como módulos separados antes de que se integren con el proceso (Haydary, 2018).

ASPEN Plus se puede utilizar para desarrollar modelos de procesos de equilibrio. Los modelos de equilibrio son importantes para predecir la mayor conversión o eficiencia térmica que se puede obtener de un proceso dado. ASPEN Plus tiene abundantes modelos de biblioteca para diferentes operaciones unitarias, como reacciones, separación e intercambio de calor (Espínola, 2017). También es posible que los usuarios desarrollen sus propios modelos utilizando códigos FORTRAN anidados al archivo de entrada ASPEN Plus. Otra ventaja de ASPEN Plus es que tiene una gran base de datos de las propiedades de diferentes productos químicos comunes, como el agua y el etanol (Kabir et al., 2015).

La mayor parte de simulaciones en Aspen plus de la conversión termoquímica de biomasa en biocombustibles se ha centrado en gran medida en los procesos de gasificación. Aspen plus se ha utilizado para simular la gasificación de biomasa en un reactor de lecho fluidizado, optimizar la gasificación de residuos plásticos, analizar sistemas de ciclo combinado de gasificación integrada de biomasa en plantas de etanol de maíz, entre otros (Ansah, 2013).

CAPÍTULO III

3. MÉTODOLOGÍA DE LA INVESTIGACIÓN

3.1. Localización

El desarrollo de la investigación se llevó a cabo en el laboratorio de Estudios Ambientales de la Universidad Estatal Amazónica (UEA), que se encuentra ubicada en el kilómetro 2 ½ de la vía Puyo – Tena (paso lateral) de la ciudad de Puyo, provincia de Pastaza, Ecuador.

3.2. Tipo de Investigación

El presente proyecto de investigación según su propósito fue una investigación aplicada ya que se enfoca en encontrar estrategias para lograr obtener combustible sintético y ponerlo en práctica, según la profundidad del objeto de estudio fue una investigación descriptiva ya que se enfoca describir el proceso de obtención de combustibles sintético. (Hernández Sampieri et al., 2014).

Por otro lado, según los datos empleados fue considerada como una investigación cuantitativa ya que se analizó una gran cantidad de datos de diferentes fuentes para identificar el proceso más eficiente para producir combustible mediante pirólisis de mascarillas desechables y finalmente, según el grado de manipulación de las variables la investigación fue experimental ya que se manipularon algunas variables como presión y temperatura para evaluar su efecto en la producción de combustibles líquidos provenientes de pirólisis (Hernández Sampieri et al., 2014).

3.3. Métodos de investigación

Los métodos de la investigación experimental son las diferentes maneras en que se pueden recopilar datos para llevar a cabo el objetivo de estudio. En el caso de la presente investigación experimental se utilizaron modelos informáticos a través del software AspenPlus, para replicar un proceso especifico (Pirólisis). El método de modelación y simulación es usado comúnmente en ingeniería e investigación operativa con fines de aprendizaje y como una herramienta para estimar los posibles resultados de una investigación real, si se hacen las aproximaciones correctas (Yin & McKay, 2018).

3.4. Metodología o procedimiento de investigación

3.4.1. Caracterízación de la materia prima de las mascarillas desechables

Los valores utilizados para la generación del presente modelo fueron los correspondientes al análisis inmediato y elemental, provenientes del estudio físico de mascarillas de triple capa generado en la investigación denominada "Thermal degradation of hazardous 3-layered COVID-19 face mask through pyrolysis: Kinetic, thermodynamic, prediction modelling using ANN and volatile product characterization" (Nawaz & Kumar, 2022). Las características de alimentación de mascarillas desechables se encuentran especificadas en la Tabla 3.

| Análisis Inmediato en base húmeda (%) | | |
|---------------------------------------|-------|--|
| Humedad | 0,31 | |
| Materia volátil | 95,4 | |
| Carbono fijo | 4,14 | |
| Cenizas | 0,15 | |
| Análisis elemental (%) | | |
| Carbono | 83,68 | |
| Hidrógeno | 14,58 | |
| Azufre | 0 | |
| Nitrógeno | 0 | |
| Oxígeno | 1,74 | |
| Análisis Calorífico | | |
| Valor calorífico [MJ/kg] | 34,64 | |

Tabla 3. Características de alimentación de mascarillas desechables

Adaptado de (Nawaz & Kumar, 2022)

3.4.2. Desarrollo del modelo conceptual del proceso de pirólisis de mascarillas desechables

La presente simulación se desarrolló en cinco fases como se presenta en el modelo conceptual de la Figura 7, utilizando como materia prima mascarillas desechables con las características

definidas en el literal 3.4.1. La primera fase del modelo consta de un sistema de trituración que permitió disminuir el tamaño de las mascarillas para una mejor descomposición química del material, posteriormente en la segunda fase el reactor permitió la pirólisis de los componentes del material generando componentes sólidos (ceniza) y gases que son divididos en la fase 3. Luego en la fase 4 los gases generados se dividieron en gases no condensables y líquidos combustibles (biofuel). Finalmente, para hacer el modelo sustentable en la fase 5 se generó un sistema de combustión que permitió aprovechar los gases no condensables obtenidos en el sistema de pirólisis.



Figura 7. Modelo conceptual utilizado para la obtención de combustibles mediante pirolisis de mascarillas desechables

3.4.3. Establecimiento de las consideraciones para la simulación de la pirólisis de mascarillas desechables

La presente simulación fue ejecutada utilizando el programa Aspen Plus ®, a través de diferentes operaciones unitarias denominadas bloques que se ejecutaron de manera consecutiva, siguiendo las siguientes consideraciones:

- 1) Todas las operaciones unitarias se realizaron a una presión de 1 atmosfera (Isobárico).
- Se simuló el proceso de pirólisis a temperaturas entre 573 K y 923 K, considerando 68 posibles productos obtenidos de revisión bibliográfica cómo se visualiza en la Tabla 4.
- Se consideraron a las mascarillas desechables (Materia prima) y a la ceniza como sólidos no convencionales, es decir, son especificados por factores que representan su

composición elemental y no son componentes químicos puros, sin embargo, pueden ser caracterizados por una fórmula molecular.

- Se estableció el carbono como un sólido convencional, es decir, presenta una estructura molecular fija y propiedades termodinámicas que permiten el cálculo de propiedades físicas.
- 5) Todos los demás componentes o elementos del sistema se establecieron como convencionales.
- 6) El modelo termodinámico de cálculo para el sistema fue el método IDEAL, que permite trabajar con componentes puros, orgánicos, inorgánicos y agua a condiciones de presión menores a 10 atm.
- 7) Los componentes sólidos no convencionales (mascarillas desechables y ceniza) utilizaron los modelos HCOALGEN (Modelo general para el cálculo de la entalpía del carbón) y DCOALIGT (Modelo para el cálculo de la densidad del carbón) para el cálculo de entalpía y densidad, respectivamente.
- 8) Para el modelo HCOALGEN se ingresaron los valores del análisis inmediato (PROXANAL), análisis elemental (ULTANAL) y contenido de azufre (SULFANAL) de las mascarillas desechables obtenidos de la revisión bibliográfica.
- Para el modelo DCOALIGT se utilizó el análisis elemental y contenido de azufre ingresado previamente.

| Ν | Nombre del Componente | Fórmula | Ν | Nombre del Componente | Fórmula |
|----|---------------------------|----------------|----|-----------------------|-----------------|
| 1 | 1,1-Dimetilciclohexano | C_8H_{16} | 35 | Etano | C_2H_6 |
| 2 | 1,1-Dimetilciclopentano | $C_{7}H_{14}$ | 36 | Etilbenceno | $C_{8}H_{10}$ |
| 3 | 1,2,3,4-Tetrametilbenceno | $C_{10}H_{14}$ | 37 | Etilciclohexano | C_8H_{16} |
| 4 | 1,2,3-Trimetilindeno | $C_{12}H_{14}$ | 38 | Etilciclopentano | $C_{7}H_{14}$ |
| 5 | 1-Buteno | C_4H_8 | 39 | Etileno | C_2H_4 |
| 6 | 1-Butino | C_4H_6 | 40 | Fluoreno | $C_{13}H_{10}$ |
| 7 | 1-Etilnaftaleno | $C_{12}H_{12}$ | 41 | Hidrógeno | H_2 |
| 8 | 1-Metilnaftaleno | $C_{11}H_{10}$ | 42 | Indeno | C_9H_8 |
| 9 | 1-Noneno | C_9H_{18} | 43 | Isopropilbenceno | $C_{9}H_{12}$ |
| 10 | 1-N-Pentilnaftaleno | $C_{15}H_{18}$ | 44 | Metano | CH ₄ |
| 11 | 1-Octeno | C_8H_{16} | 45 | Metilciclohexano | $C_{7}H_{14}$ |
| 12 | 1-Pentadeceno | $C_{15}H_{30}$ | 46 | Metilciclopentano | $C_{6}H_{12}$ |
| 13 | 1-Pentino | C_5H_8 | 47 | Metil-Etil-Cetona | C_4H_8O |

Tabla 4. Potenciales productos de la pirolisis de mascarillas desechables

| 14 | 1-Trans-3,5-Trimetilciclohexano | C9H18 | 48 | Naftaleno | $C_{10}H_8$ |
|----|---------------------------------|-------------------|----|-------------------|------------------|
| 15 | 2,2,4-Trimetilpentano | C_8H_{18} | 49 | N-Butano | C_4H_{10} |
| 16 | 2,2-Dimetilhexano | $C_{8}H_{18}$ | 50 | N-Butanol | $C_4H_{10}O$ |
| 17 | 2,5-Dimetil-1,5-Hexadieno | C_8H_{14} | 51 | N-Heptadecano | $C_{17}H_{36}$ |
| 18 | 2,6-Dimetilnaftaleno | $C_{12}H_{12}$ | 52 | N-Hexadecano | $C_{16}H_{34}$ |
| 19 | 2-Metilnaftaleno | $C_{11}H_{10}$ | 53 | N-Nonadecano | $C_{19}H_{40}$ |
| 20 | 4-Metilheptano | $C_{8}H_{18}$ | 54 | N-Pentadecano | $C_{15}H_{32}$ |
| 21 | 7-Metil-1-Octeno | $C_{9}H_{18}$ | 55 | N-Pentano | $C_{5}H_{12}$ |
| 22 | Acenaftaleno | $C_{12}H_{8}$ | 56 | N-Propilbenceno | C9H12 |
| 23 | Acenafteno | $C_{12}H_{10}$ | 57 | N-Tridecano | $C_{13}H_{28}$ |
| 24 | Acetona | C_3H_6O | 58 | N-Undecano | $C_{11}H_{24}$ |
| 25 | Alfa-Metil-Estireno | $C_{9}H_{10}$ | 59 | O-Tilfenol | $C_8H_{10}O$ |
| 26 | Alfa-Pineno | $C_{10}H_{16}$ | 60 | Fenantreno | $C_{14}H_{10}$ |
| 27 | Antraceno | $C_{14}H_{10}$ | 61 | Fenol | C_6H_6O |
| 28 | Benceno | C_6H_6 | 62 | Propano | C_3H_8 |
| 29 | Ácido Benzoico | $C_7H_6O_2$ | 63 | Propileno | C_3H_6 |
| 30 | Benzofenona | $C_{13}H_{10}O$ | 64 | P-Tert-Butilfenol | $C_{10}H_{14}O$ |
| 31 | Dióxido De Carbono | CO_2 | 65 | P-Xileno | $C_{8}H_{10}$ |
| 32 | Monóxido De Carbono | CO | 66 | Estireno | C_8H_8 |
| 33 | Dioctiladipato | $C_{22}H_{42}O_4$ | 67 | Tolueno | C7H8 |
| 34 | Difenilo | $C_{12}H_{10}$ | 68 | Agua | H ₂ O |

3.4.4. Identificación de las fómulas y correlaciones utilizadas en el desarrollo de la simulación de pirolisis de mascarillas desechables

Método IDEAL de propiedades

El método consideró la ley de Raoult y la ley de Henry, utilizando el modelo de coeficiente de actividad ideal para la fase líquida ($\gamma = 1$), la ecuación de estado de los gases ideales para la fase vapor y el modelo de Rackett para el volumen molar del líquido

Modelo general para el cálculo de la entalpía del carbón (HCOALGEN)

HCOALGEN es un modelo que permitió calcular la capacidad calorífica, el calor de combustión y el calor de formación mediante diferentes correlaciones para el cálculo de la capacidad calorífica, el calor de combustión y el calor de formación.

1. Capacidad calorífica

Se utilizó la correlación de Kirov que considera el sólido como una mezcla de humedad, ceniza, carbono fijo, así como, materia volátil primaria y secundaria (Aspen Technology, Inc., 2001). Así, la capacidad calorífica de un material fue considerada como la suma ponderada de las capacidades caloríficas de sus constituyentes:

$$C_{p,ij}^d = \sum_{j=1}^{ncn} W_j C_{p,ij} \tag{1}$$

$$C_{p,ij} = a_{i,j1} + a_{i,j2}T + a_{i,j3}T^2 + a_{i,j4}T^3$$
(2)

Donde:

- *i*= *Índice del componente*
- j =*Índice del constituyente j = 1, 2, ...ncn*
- 1 = Humedad
- 2 = Carbono fijo
- *3 = Materia volátil primaria*
- 4 = Materia volátil secundaria
- 5 = Cenizas
- $W_j = Fracción de masa del constituyente j en base seca$

2. Calor de combustión

Valor calorífico bruto expresado en BTU/libra de carbón sobre una base seca libre de materia mineral, las condiciones estándar para medir el valor calorífico bruto según la norma ASTM D-2015 son una presión de oxígeno inicial de 20 a 40 atmósferas, se presentaron los productos en forma de ceniza, agua líquida y CO₂, SO₂ y NO₂ gaseosos. Para su cálculo se utilizaron las siguientes correlaciones:

• Correlación de Boie (Marlair, Cwiklinski, & Tewarson, 1999)

$$\Delta H = 35.160 C + 116.225 H - 11.090 O + 6.280 N + 10.465 S \quad (3)$$

• Correlación de Dulong (Marlair, Cwiklinski, & Tewarson, 1999)

$$\Delta H = 33.8 \, C + 144.2 \, H - 18.03 \, 0 \tag{4}$$

• Correlación de Mott y Spooner (Marlair, Cwiklinski, & Tewarson, 1999)

$$\Delta H = 33.61 C + 141.9 H - 14.52 O + 9.417 S (si O_2 < 15\%)$$
(5)

$$Q = 33.61C + 141.9H - (15.32 - 7.200)O + 9.417S$$
(6)

Dónde ΔH es el calor bruto de combustión, C representa al contenido de carbono, H de hidrógeno, O de oxígeno, N de nitrógeno y S de azufre, utilizando además para el cálculo la correlación de Grummel y Davis.

3. Calor de formación

Se consideraron dos correlaciones para calcular el calor estándar de formación, la primera basada en el calor de combustión y la segunda de manera directa.

• Correlación basada en el calor de combustión

Estuvo basada en la oxidación completa de todos los elementos menos las cenizas y compuestos de azufre, los cuales son considerados inertes. Así, los coeficientes numéricos fueron una combinación de los coeficientes estequiométricos y los calores de formación de las especies oxidadas H₂O, CO₂, HCl, NO₂ a 298,15K

$$\Delta_f h_i^d = \Delta_c h_i^d - \left(1.418 * 10^6 w_{H,i}^d + 3.278 * 10^5 w_{C,i}^d - 2.418 * 10^6 w_{N,i}^d - 1.426 * 10^4 w_{Cl,i}^d\right) 10^2$$
(7)

Donde:

- $\Delta_{fh} = Calor \ específico \ de \ formación$
- $\Delta_c h = Calor \ especifico \ de \ combustión$
- w = Fracción de peso
- C = Carbono
- Cl = Cloro
- H = Hidrógeno
- N = Nitrógeno
- d = Base seca

• Correlación directa

Permitió disminuir errores debido a la relación variable con el calor de combustión, utilizando datos de la Base de Datos de Penn State, considerando una desviación estándar de 112,5 BTU/lb.

$$\Delta_f h_i^d = \left[a_{1i} w_{C,i}^{dm} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} w_{H,i}^d + a_{4i} w_{Sp}^d + a_{5i} w_{Ss}^d \right] 10^2 + a_{6i} R_{o,i} \tag{8}$$

Modelo de densidad del carbón IGT

Permitió calcular la densidad real (esquelética o en fase sólida) del sólido en base seca, para ello se utilizó el análisis elemental y de azufre, mediante las siguientes fórmulas del IGT:

$$\rho_i = \frac{\rho_i^{dm}}{[\rho_i^{dm} \left(0.42w_{A,i}^d - 0.15w_{Sp,i}^d\right) + 1 - 1.13w_{A,i}^d - 0.5475w_{Sp,i}^d]} \tag{9}$$

$$\rho_i^{dm} = \frac{1}{a_{1i} + a_{2i} w_{H,i}^{dm} + a_{3i} (w W_{H,i}^{dm}) + a_{2i} (w_{H,i}^{dm})^3}$$
(10)

$$W_{H,i}^{dm} = \frac{10^2 \left(W_{H,i}^d - 0.013 w_{A,i}^d + 0.02 w_{Sp,i}^d \right)}{\left(1 - 1.13 w_{A,i}^d - 0.475 w_{Sp,i}^d \right)}$$
(11)

Donde:

- $\rho = Densidad específica$
- w = Fracción de peso
- A = Ceniza
- *Sp* = *Azufre pirítico*
- d = Base seca
- *m* = *Base libre de materia mineral*

Subrutinas de FORTRAN para sólidos no convencionales

Para convertir los elementos no convencionales a los elementos convencionales se utilizaron los datos del análisis elemental y proximal de las mascarillas desechables mediante el uso de subrutinas de FORTRAN a través de la herramienta *Calculator* utilizando las siguientes afirmaciones:

- FACT=(100-WATER) /100
- $H_2O=WATER/100$
- ASH=ULT (1) /100*FACT
- C=ULT (2) /100*FACT
- H₂=ULT (3) /100*FACT
- N₂=ULT (4) /100*FACT
- CL₂=ULT (5) /100*FACT
- S=ULT (6) /100*FACT
- $O_2=ULT(7)/100*FACT$ (12)

3.4.5. Identificación del modelo con mayor producción de combustible líquido

El modelo conceptual fue ejecutado utilizando diferentes condiciones de simulación, variando la temperatura desde 573 K a 923 K con intervalos de 50 K, y la presión fue analizada desde 1 a 3 atmósferas considerando un intervalo de 0,5 atm, utilizando la herramienta *Sensitivity*, obteniendo como resultado la fracción de gas y líquido, así como, su composición estimada.

3.4.6. Evaluación de la producción del combustible líquido

El rendimiento de la producción de combustible líquido generado del proceso de pirólisis de mascarillas fue obtenido relacionando la masa de materia prima utilizada y la masa de combustible líquido generado, obteniendo como resultado el porcentaje de la conversión.

3.4.7. Evaluación del beneficio ambiental del combustible líquido

La evaluación del beneficio ambiental se calculó obteniendo la capacidad calorífica del combustible líquido utilizando el modelo HCOALGEN a través del software Aspen Plus y relacionando los flujos másicos y el caudal de producción del synfuel para obtener los valores por unidades de masa y volumen para poder compararlos con otros combustibles, e identificar si el modelo ayuda al ambiente disminuyendo la cantidad de combustibles fósiles producidos.

CAPÍTULO IV

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1. Diagrama de flujo del proceso de simulación de pirolisis de mascarillas desechables mediante el software AspenPlus

El presente estudio de simulación se desarrolló utilizando 9 bloques, como se visualiza en la Figura 8. La primera etapa consistió en el triturado de las mascarillas desechables (MASK) mediante el Bloque TRITUR (Crusher) disminuyendo su tamaño de 12x18cm² a un diámetro de partícula de 5mm(MASKTRIT), en la segunda etapa a través de un reactor de rendimiento (RYield) el bloque DESCOMP permitió estimar la composición de las mascarillas descartables en elementos convencionales mediante el uso de subrutinas de FORTRAN que posteriormente través de un reactor de Gibbs en el bloque REACTOR permitió simular las reacciones generadas durante el proceso de pirolisis de las mascarillas desechables.

Así, posterior al proceso pirolítico los productos se dividieron en dos corrientes a través del bloque SEP1 (SSplit), una corriente de sólidos no convencionales remanentes que en base al modelo se asume que contiene solo ceniza, y otra corriente gaseosa que posterior a su enfriamiento a través del bloque INTERCAM (Heater) llega a una temperatura de 298K, cuya mezcla se divide en el bloque SEP2 (Flash) en productos gaseosos no condensables a través de la corriente PYRO-GAS y combustibles sintéticos condensados a través de la corriente PIRO-OIL, que corresponde a la corriente que permite obtener el producto final de aprovechamiento.

Finalmente, la corriente PYRO-GAS fue recirculada al rector RStoic del bloque COMBUST para obtener el calor necesario para lograr la temperatura de pirólisis en el sistema mediante la combustión de los componentes, cuya única salida EXIT contiene los productos finales luego de ser aprovechados, siendo en su mayoría dióxido de carbono.



Figura 8. Diagrama de flujo para la obtención de combustibles sintéticos a partir de mascarillas descartables en Aspen Plus

4.2. Trituración

El proceso de trituración se realizó utilizando un triturador tipo giratorio que opera en modo primario generando un diámetro máximo de partícula de 10mm como se visualiza en la Figura 9, utilizando un Índice de Molturabilidad de Hardgrove (HGI) de 2, el mismo que permite conocer la resistencia del material a la trituración.



Figura 9. Distribución del tamaño de partícula de la corriente de salida posterior a trituración

La Figura 9 muestra la distribución de tamaño de partícula obtenida luego del proceso de trituración que disminuyó el tamaño de las mascarillas de $12x18cm^2$ a 7mm de diámetro D₈₀ utilizando una potencia de trabajo de 3,15MW y considerando que el rango máximo de tamaño oscila entre 10 y 20 mm.

Así, la disminución del tamaño de partícula de las mascarillas desechables es importante ya que como menciona Erdogan, 2020, el rendimiento en la producción pirolítica de combustibles sintéticos aumenta con la disminución del tamaño de las partículas.

4.3. Descomposición

El reactor de rendimiento trabajó utilizando una temperatura de 873K a una atmósfera de presión transformando los elementos no convencionales de las mascarillas desechables a elementos convencionales como se visualiza en la Tabla 5.

| Variables o Componente | MASKTRIT | MASKDESC | | |
|-------------------------------|----------|----------|--|--|
| Temperatura (K) | 298 | 780 | | |
| Presión (atm) | 1 | 1 | | |
| Fracción másica líquida | 0 | 0,157 | | |
| Fracción másica sólida | 1 | 0,843 | | |
| Flujo másico (kg/hr) | 100 | 100 | | |
| Flujo volumétrico (l/min) | 3,42 | 7464,8 | | |
| Densidad (kg/m ³) | 488 | 0,223 | | |
| Flujo másico por componente | | | | |
| Carbono (C) | 0 | 80,4 | | |
| Hidrógeno (H ₂) | 0 | 14,0 | | |
| Oxígeno (O ₂) | 0 | 1,67 | | |
| Mascarillas desechables | 100 | 0 | | |
| Cenizas | 0 | 3,98 | | |

Tabla 5. Elementos de las corrientes de entrada y salida del reactor de rendimiento bloque

El proceso de conversión de un componente no convencional como las mascarillas desechables a elementos convencionales, como se describe en la Tabla 4, permitió que el sistema pueda identificar la constitución elemental de la materia prima, siendo fraccionada en sus elementos constituyentes como carbono e hidrógeno, lo cual, permitió identificar los posibles productos que se generan de su reacción pirolítica.

DESCOMP

4.4. Pirolisis

El proceso pirolítico fue llevado a cabo utilizando un reactor Gibbs estableciendo temperaturas desde 573 K a 923 K, y presiones entre 1 y 3 atm mediante la herramienta *Sensitivity* con la finalidad de identificar las condiciones en las cuales existe una mayor producción de compuestos líquidos que serán utilizados como combustible sintético.

El reactor de Gibbs (RGibbs) del bloque REACTOR fue utilizado ya que simula un comportamiento ideal de los procesos, proporcionando la cantidad de derivados pirolíticos mediante el cálculo de las reacciones en equilibrio químico y de fase.





La Figura 10 muestra la variación de generación de gas en un proceso pirolítico a 1 atmósfera de presión y una variación de temperatura de 573 K a 923 K demostrando que existe una relación directamente proporcional entre la producción másica de gas pirolitico y la temperatura del reactor de Gibbs, es decir a mayor temperatura mayor producción de gas.

Los resultados obtenidos en la investigación se sustentan con el trabajo de Kwapinski et al. 2010, quien menciona que, a una alta temperatura, baja tasa de calentamiento y un largo tiempo de residencia del gas se maximiza el rendimiento del gas combustible, desde el punto de vista ambiental, la producción de gas combustible ayuda a la producción de energía eléctrica o calórica, misma que en la presente investigación será utilizada para generar el calor requerido para el proceso de pirólisis mediante su combustión generando un proceso sustentable.

Por otro lado, la Figura 11 muestra la variación de generación de líquidos, en un proceso pirolítico similar al previamente citado, demostrando que existe una relación inversamente proporcional entre la producción másica de producto líquido y la temperatura del reactor de Gibbs, es decir a mayor temperatura menor rendimiento del producto líquido.





La relación entre la variación de temperatura y la producción de combustibles condensables detallada en la presente investigación, corrobora el trabajo de Kwapinski et al. 2010, que menciona que el rendimiento de los productos líquidos se maximiza en condiciones de baja temperatura, alta tasa de calentamiento y un corto tiempo de residencia del gas.

Desde del punto de vista ambiental, la producción de combustibles líquidos condesables permite el aprovechamiento de desechos sólidos como las mascarillas desechables, que en vez de pasar una degradación natural de miles de años permite generar combustible sintético reduciendo la extracción y refinación de combustiles fósiles, utilizando el método de pirólisis, que según Angin 2013, es un proceso que permite una alta recuperación de energía y produce menos contaminantes que otras opciones, como la incineración. Así mismo, la presente experimentación demuestra que la producción de gas disminuye conforme aumenta la presión en el sistema presentado una producción mayor de 50,18 kg/h a 1 atm mientras que a 3 atm produce 49,83 kg/h, como se presenta en la Figura 12, es decir, existe una relación inversamente proporcional entre la producción de gas y la presión del reactor de Gibbs que fue diseñado con una temperatura de 573 K, condición en la que se supone existe mayor cantidad de producción de líquido pirolítico.



Figura 12. Producción de gas en función de la presión del reactor de Gibbs

Basado en la investigación de Kaur et al. (2015), en general, la pirólisis lenta se lleva a cabo a presión atmosférica o cerca de ella, sin embargo, el aumento de presión disminuye la producción de gas, lo cual, se asemeja a lo expuesto en la presenta investigación que determina que existe una relación inversa entre la producción de gas y la presión.

Desde el punto de vista ambiental, la disminución de la producción de gas a efectos de una mayor presión disminuye la producción de gases de efecto invernadero que puedan ser liberados a la atmósfera, sin embargo, al ser utilizados mediante combustión en los procesos pirolíticos de la investigación permiten mejorar el rendimiento del proceso sin ocupar energía externa.

Por otro lado, la Figura 13 presenta la relación directamente proporcional que existe entre la presión del reactor de Gibbs y el rendimiento en la producción de material líquido posterior al proceso pirolítico cuyos parámetros de trabajo son iguales a los analizados previamente, es decir, existe mayor producción de combustible líquido a mayor presión, evidenciando que existe mayor producción de combustible líquido a 3 atm obteniendo 46.18 kg/h.





Desde el punto de vista ambiental a mayor producción de combustible líquido en el proceso pirolítico mayor será la cantidad de combustibles fósiles reemplazados, disminuyendo la energía utilizada y afectación ambiental generada durante su explotación, producción y refinamiento.

4.5. Separación de componentes pirolíticos

La separación de los componentes obtenidos de la pirólisis de mascarillas desechables fue generado a través de diferentes operaciones unitarias, primero el separador de flujo SSplit del bloque SEP1 permite obtener dos corrientes, la primera denominada GAS que contiene los productos gaseosos del proceso pirolítico que se visualiza en la Tabla 6 y la segunda corriente denominada CENIZA que está conformada solo por las cenizas generadas durante la pirólisis de mascarillas que es obtenida mediante subrutina FORTRAN generando un valor de corriente másica de 3,97Kg/h.

| Ν | Componente | Fracción másica (%) |
|----|--------------------|---------------------|
| 1 | Metano | 45,3 |
| 2 | Antraceno | 18,9 |
| 3 | Naftaleno | 16,7 |
| 4 | Fluoreno | 10,5 |
| 5 | 2-Metilnaftaleno | 2,29 |
| 6 | Dióxido De Carbono | 2,00 |
| 7 | 1-Metilnaftaleno | 1,40 |
| 8 | Acenafteno | 0,744 |
| 9 | Benceno | 0,653 |
| 10 | Acenaftaleno | 0,619 |

Tabla 6. Principales componentes pirolíticos en la corriente GAS a 573 K y 1 atm

La Tabla 6 presenta los principales productos obtenidos de la reacción pirolítica entre ellos, metano con un flujo másico de 43,54 %, antraceno con 18,14 %, naftaleno con 16,04 % y fluoreno con 10,08 %, evidenciando que la mayor producción pirolítica corresponde a un gas con gran potencial calórico, seguido de productos líquidos que se pueden aprovechar mediante su correcta separación como combustible sintético.

Posterior al bloque SEP1, se utilizó un intercambiador de calor (Heater) en el bloque INTERCAM que permita disminuir la temperatura a 373 K generando una fracción de vapor de 0,9046 que secuencialmente es dividida por un separador Flash (Flash2) en el bloque SEP2, generando 2 corrientes la primera constituida por gases no condensables denominada Pyro-Gas y la segunda formada por el producto líquido de la reacción pirolítica denominada Pyro-Oil, cuyos principales productos se analizan en las Tabla 7 y Tabla 8 respectivamente.

| N | Componente | Fracción másica (%) |
|----|---------------------|---------------------|
| 1 | Metano | 86,7 |
| 2 | Naftaleno | 5,97 |
| 3 | Dióxido De Carbono | 3,83 |
| 4 | Benceno | 1,18 |
| 5 | Monóxido De Carbono | 0,95 |
| 6 | 2-Metilnaftaleno | 0,38 |
| 7 | Fluoreno | 0,24 |
| 8 | 1-Metilnaftaleno | 0,22 |
| 9 | Tolueno | 0,18 |
| 10 | Antraceno | 0,14 |

Tabla 7. Principales componentes pirolíticos no condensados corriente Pyro-Gas

Los principales productos no condensables obtenidos de la pirolisis de mascarillas desechables que fluyen en la corriente Pyro-Gas cuyo flujo másico es de 50,18 kg/h son en primer lugar el metano con 86,76 %, posteriormente el naftaleno con 5,97 %, el dióxido de carbono con 3,83% y benceno 1,18 %, mientras que los demás componentes generados tienen valores por debajo del 1% considerándose trazas de la reacción como se visualiza en la Tabla 8.

Los resultados de la presente investigación se alinean a los hallazgos obtenidos por Amar, Ardila, & Barrera, 2019, que menciona que la fase gaseosa obtenida a través del proceso de pirólisis contiene entre otros, principalmente metano, etano, etileno, hidrógeno, dióxido de carbono y monóxido de carbono. Desde el punto de vista ambiental, la producción de mayor cantidad de gas metano durante el proceso pirolítico permitió que durante el proceso de aprovechamiento energético se genere una sustentabilidad del proceso a lo largo del tiempo.

Tabla 8. Principales componentes pirolíticos condensados corriente Pyro-Oil

| Ν | Componente | Fracción másica (%) |
|----|---------------------|---------------------|
| 1 | Antraceno | 39,4 |
| 2 | Naftaleno | 28,4 |
| 3 | Fluoreno | 21,7 |
| 4 | 2-Metilnaftaleno | 4,37 |
| 5 | 1-Metilnaftaleno | 2,70 |
| 6 | Acenafteno | 1,52 |
| 7 | Acenaftaleno | 1,26 |
| 8 | 2,6-Dimetilnaftalen | 0,268 |
| 9 | Difenilo | 0,155 |
| 10 | Benceno | 0,0770 |

Por otro lado, los componentes con mayor producción en la corriente Pyro-Oil cuyo flujo másico es de 45,84 kg/h se visualizan en la Tabla 8, está conformada por productos pirolíticos condensables como antraceno con 39,41 %, el naftaleno con 28,44 % y fluoreno con 21,73 %, seguido de productos cuyo porcentaje es inferior a 5%, estableciéndose que durante la reacción pirolítica se han generado 4 productos no condensables y 7 productos condensables con porcentajes mayores al 1 % que se superponen a los 57 posibles productos restantes.

Los resultados obtenidos en la presente investigación compaginan a los productos presentados por Amar, Ardila, & Barrera, 2019 que mencionan que durante la pirólisis de PET y HDPE los

principales productos obtenidos en la fase líquida son antraceno, benzofenona, acenafteno, acenaftaleno, benceno, metilnaftaleno, propanona entre otros. Desde el punto de vista ambiental, pero sobre todo energético la presencia de elementos como el naftaleno y fluoreno, que son compuestos con carácter combustible, permitirán que el líquido sintético tenga mayor capacidad calórica y permita competir con los combustibles fósiles convencionales.

4.6. Evaluación de la producción del combustible líquido

Con la finalidad de identificar el modelo más favorable para la producción de combustibles líquidos de carácter sintético se analizaron diferentes escenarios que permitan identificar la generación de compuestos con el mayor potencial de energía calórica para su aprovechamiento en el reemplazo de combustibles fósiles convencionales.



Figura 14. Variación de los principales productos condensables con respecto a la presión

Los productos condensables generados mediante pirolisis lenta a una temperatura de 573 K, pero con variación en la presión del reactor pirolítico desde 1 atm a 3 atm reflejaron leves cambios como se visualiza en la Figura 14, donde el antraceno presenta una leve disminución en su producción conforme aumenta la presión en el reactor pasando de 18,06 kg/h a 16,98 kg/h, de igual manera el naftaleno disminuye su producción de 13,03 kg/h a 11,92 kg/h, mientras que, por otro lado la producción de fluoreno aumenta de 9,96 kg/h a 10,86 kg/h.

Desde una perspectiva energético ambiental, la disminución en la producción de antraceno y el aumento en la producción de fluoreno permite obtener una mayor energía calórica del

combustible sintético aumentando su calidad y permitiendo que logre competir con otros combustibles fósiles más accesibles.



Figura 15. Variación de los principales productos condensables con respecto a la temperatura

Finalmente, se puede evidenciar cambios en los componentes condensables conforme existe un aumento de temperatura de 573 K a 973 K como se visualiza en la Figura 15, donde se refleja una disminución en la producción de antraceno y fluoreno pasando de 18,06 kg/h a 9,285 kg/h y de 9,963 kg/h a 2,649 kg/h respectivamente, mientras que, por otro lado, existe un aumento en la producción de naftaleno de 13,03 kg/h a 16,35 kg/h hasta los 873 K posterior a lo cual comienza a decrecer.

Desde el punto de vista ambiental y energético se hace muy complejo identificar correctamente la temperatura ideal de reacción ya que por un lado el fluoreno disminuye mientras que el naftaleno aumenta, ambos combustibles con gran capacidad energética, este fenómeno puede explicarse en base a la investigación de Ismail, Abbas, Azizi, & Zeaiter, 2017, que mencionan que el aumento de la temperatura favorece la producción de más compuestos aromáticos y menos alquitrán y compuestos no aromáticos.

En base a los resultados teóricos obtenidos en la presente investigación y analizando los costes de producción y la generación de una mayor rentabilidad se identifica que las condiciones óptimas de reacción para el proceso pirolítico de mascarillas desechables son una presión de 1

atm y una temperatura de 923 K para aumentar la producción de naftaleno tratando de obtener la mayor cantidad de combustible sintético de mayor calidad.

4.7. Evaluación del beneficio ambiental del combustible líquido

El proceso de pirólisis de mascarillas desechables generado durante la presente investigación permite dar un aprovechamiento energético de desechos sólidos peligrosos logrando en primer lugar eliminar de manera adecuada las mascarillas desechables utilizadas durante la emergencia sanitaria y en segundo lugar generar combustibles sintéticos que permitan disminuir la producción de combustibles fósiles.

Bajo este contexto, el presente modelo de pirólisis aprovecha los 1,79*10⁶ kJ/h generados durante el proceso de combustión de los gases no condensables producidos durante la pirólisis, utilizándolo en los reactores utilizados para generar el proceso pirolítico gastando alrededor de 1,55*10⁶ kJ/h durante el proceso, eliminando la necesidad de utilizar energía extra o combustibles fósiles, haciendo al proceso sustentable en el tiempo.

Por otro lado, la cantidad de calor combustible generado por el producto líquido obtenido del proceso de pirólisis es de 24889,3806 kJ/kg, el valor es muy similar al generado por el alcohol comercial que se encuentra entre 23860 kJ/kg y 26750 kJ/kg, y es menor al poder calorífico de la gasolina que oscila entre 43950 kJ/kg y 46885 kJ/kg, por lo cual se considera oportuno utilizar el líquido obtenido en solución con gasolina permitiendo generar gasolina extra de menor octanaje pero en mayores cantidades.

Finalmente, se determina que el proceso produce un total de 1085376,108 kJ/h, lo cual, en términos de energía significa 177,4 barriles equivalentes de petróleo (BOE) por hora, es decir, si utilizamos el producto líquido combustible para la generación de energía térmica y consideramos que durante la producción de un barril de petróleo se utilizan $6,3*10^6$ kJ/kg estaríamos disminuyendo la utilización de energía en 1117, $62*10^6$ kJ/h.

CAPÍTULO V

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. CONCLUSIONES

- Se simuló a través del software AspenPlus el proceso de pirólisis para la conversión de mascarillas descartables logrando aprovechar el 96% de su composición elemental para la obtención de productos combustibles en forma de gases y líquidos pirolíticos como metano y naftaleno capaces de utilizarse como fuente de energía alternativa disminuyendo el potencial uso de combustibles fósiles.
- Se identificaron las variables de entrada mediante el análisis inmediato, elemental y de contenido de azufre de las mascarillas desechables, y se seleccionaron como variables de reacción la temperatura (573 K 923 K) y presión (1 atm 3 atm). Los equipos teóricos utilizados fueron una trituradora, un reactor de rendimiento, un reactor de Gibbs, separadores SSplit y Flash, un intercambiador de calor y un reactor estocástico para el proceso de combustión de gas.
- La ruta de conversión pirolítica más adecuada utilizó un proceso termodinámico que consistió en la trituración de la muestra, descomposición (RYield) y pirolisis (RGibbs), para su posterior separación (SSplit y Flash), eliminando sólidos y gases no condensables de los combustibles líquidos, finalmente, se combustionaron los gases no condensables para generar el calor requerido para la pirólisis (RStoic).
- Se establecieron como parámetros óptimos de producción 1 atm y 923 K ya que se genera combustible líquido de mejores carácterísticas caloríficas con 24,9*10³ kJ/kg, similar al poder combustible generado por alcohol comercial, así el rendimiento teórico de producción de combustible es de 96,02% conformando por combustibles gases en un 52,26% y combustibles líquidos con 47,74%.

5.2. RECOMENDACIONES

• Se recomienda generar un modelo cinético y una experimentación a escala de laboratorio de la pirólisis de mascarillas desechables para validar el presente modelo de simulación.

REFERENCIAS

- Abar, S., Theodoropoulos, G., Lemarinier, P., & O'Hare, G. (2017). Agent Based Modelling and Simulation tools: A review of the state-of-art software. *Computer Science Review*, 24, 13-33. doi:https://doi.org/10.1016/j.cosrev.2017.03.001
- Alarcón, E. (2020). Equipos de protección para coronavirus covid-19 y su impacto ambiental en Playita Mía, Manta. Manabí, Ecuador: Universidad Estatal del Su de Manabí. Obtenido de http://repositorio.unesum.edu.ec/bitstream/53000/2565/1/TESIS%20ALARCON%20J ORGE.pdf
- Amar, S., Ardila, A., & Barrera, R. (2019). Simulación y obtención de combustibles sintéticos a partir de la pirólisis de residuos plásticos. *Ingeniería y Desarrollo*, 37(2), 306-326. doi:10.14482/inde.37.2.1285
- Angın, D. (2013). Effect of pyrolysis temperature and heating rate on biochar obtained from pyrolysis. *Bioresource Technology*, *128*, 593-597.
- Ansah, E. (2013). Experimental Investigation And Aspen Plus Simulation Of The Msw Pyrolysis. Greensboro, North Carolina: Agricultural and Technical State University. Obtenido de https://digital.library.ncat.edu/theses/104?utm_source=digital.library.ncat.edu%2Fthes es%2F104&utm_medium=PDF&utm_campaign=PDFCoverPages
- Anuar Sharuddin, et al., S. (2016). A review on pyrolysis of plastic wastes. *Energy Conversion* and Management, 308-326. doi:https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.02.037
- Aragaw, T. (2020). Surgical face masks as a potential source for microplastic. *Marine Pollution Bulletin*, 159(111517). doi:10.1016/j.marpolbul.2020.111517
- Aragaw, T., & Mekonnen, B. (2021). Current plastics pollution threats due to COVID-19 and its possible mitigation techniques: a waste-to-energy conversion via Pyrolysis. *Environ Syst Res*, 1-11. doi:https://doi.org/10.1186/s40068-020-00217-x

- Arteaga, L. (2009). Diseño de un sistema para la producción integrada de hidrógeno y electricidad empleando etanol. Santa Clara: Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villa.
- Aspen Technology, Inc. (2001). Physical Property Methods and Models 11.1. En Aspen Physical Property System 11.1. Cambridge-USA.
- Bosmans, A., Vanderreydt, I., Geysen, D., & Helsen, L. (2013). The crucial role of Waste-to-Energy technologies in enhanced landfill mining: a technology review, *Journal of Cleaner Production*, 55, 10-23. doi:https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2012.05.032
- Burra, K., & Gupta, A. (2018). Kinetics of synergistic effects in co-pyrolysis of biomass with plastic wastes. *Appl. Energy.*, 220, 408–418. doi:10.1016/j.apenergy.2018.03.117
- Cheng, L., Gu, J., Wang, Y., Zhang, J., Yuan, H., & Chen, Y. (2020). Polyethylene highpressure pyrolysis: Better product distribution and process mechanism analysis. *Chemical Engineering Journal*, 385. doi:https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.123866
- De-la-Torre, G., & Aragaw, T. (2021). What we need to know about PPE associated with the COVID-19 pandemic in the marine environment. *Mar Pollut Bull, 163*(111879). doi:https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111879
- Dharmaraj, S., Ashokkumar, V., Pandiyan, R., Halimatul, S., Wayne, K., Chen, W., & Ngamcharussrivichai, C. (2021). Pyrolysis: An effective technique for degradation of COVID-19 medical wastes. *Chemosphere*, 275, 130092. doi:https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130092
- Du, H., Huang, S., & Wang, j. (2022). Environmental risks of polymer materials from disposable face masks linked to the COVID-19 pandemic. *Science of The Total Environment*, 815(1), 1-9. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.152980
- Erdogan, S. (2020). Recycling of Waste Plastics into Pyrolytic Fuels and Their Use in IC Engines. *Sustainable Mobility*. doi:https://doi.org/10.5772/intechopen.90639
- Espínola, F. (2017). *Tutorial de ASPEN plus : Introducción y modelos simples de operaciones unitarias*. Jaén, España: Servicio de Publicaciones, Universidad de Jaén.

- Fadare, O. O., & Okoffo, E. D. (2020). Covid-19 face masks: A potential source of microplastic fibers in the environment. *Science of The Total Environment*, 737(140279). doi:10.1016/j.scitotenv.2020.140279
- Gutiérrez, E. (2020). *Estudio de la pirólisis rápida de plástico PEBD*. Quito, Ecuador: Universidad San Francisco de Quito. doi:https://repositorio.usfq.edu.ec/bitstream/23000/9240/1/131974.pdf
- HalogA., & Anieke, S. (2021). A review of circular economy studies in developed countries and its potential adoption in developing countries. *Circular Economy and Sustainability*, 1, 209–230. doi:https://doi.org/10.1007/s43615-021-00017-0
- Hassan, I. (2020). Introductory Chapter: Pyrolysi. En Recent Advances in Pyrolysis (págs. 1-12). doi:10.5772/intechopen.90366.
- Haydary, J. (2018). Aspen Simulation of Two-Stage Pyrolysis/Gasification of Aspen Simulation of Two-Stage Pyrolysis/Gasification of. *Chemical Engineering Transactions*, 1033-1038. doi:10.3303/CET1870173
- Hernández Sampieri, R., Fernández, C., & Baptista, M. (2014). El proceso de la investigación cualitativa. En R. Hernández Sampieri, *Metodología de la investigación* (pág. 355).
 México D.F.: McGRAW-HILL / INTERAMERICANA EDITORES, S.A. DE C.V. Obtenido de https://www.uca.ac.cr/wp-content/uploads/2017/10/Investigacion.pdf
- Hopewell, J., Dvorak, R., & Kosior, E. (2009). Plastics recycling: challenges and opportunities. *Philos Trans R Soc London B Biol Sci, 364*, 2115-2126. doi: 10.1098/rstb.2008.0311
- Ilyas, S., Ranjan, R., & Kim, H. (2020). Disinfection technology and strategies for COVID-19 hospital and bio-medical waste management. *Science of The Total Environment*, 749, 141652. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.141652
- Ismail, H., Abbas, A., Azizi, F., & Zeaiter, J. (2017). Pyrolysis of waste tires: A modeling and parameter estimation study using Aspen Plus. Waste management (New York, N.Y.), 60, 482-493. doi:doi:10.1016/j.wasman.2016.10.024

- Jung, S., Lee, S., Dou, X., & Kwon, E. (2021). Valorization of disposable COVID-19 mask through the thermo-chemical process. *Chemical engineering journal (Lausanne, Switzerland : 1996)*, 405(126658). doi:10.1016/j.cej.2020.126658
- Kabir, M., Chowdhury, A., & Rasul, M. (2015). Pyrolysis of Municipal Green Waste: A Modelling, Simulation and Experimental Analysis. *Energies*, 8, 7522-7541. doi:10.3390/en8087522
- Kwapinski, W., Byrne, C., E., K., Wolfram, P., Adley, C., J., L., . . . Hayes, M. (2010). Biochar from Biomass and Waste. *Waste Biomass Valor*, *1*, 177-189.
- Lara , D., & Lescano, M. (11 de Mayo de 2020). *Quito generó 600 toneladas diarias más de desechos durante la pandemia*. Obtenido de Plan V.: https://www.planv.com.ec/historias/sociedad/quito-genero-600-toneladas-diarias-mas-desechos-durante-la-pandemia
- Lewandowski, W., Ryms, M., & Kosakowski, W. (2020). Thermal Biomass Conversion: A Review. *Processes*, 8(516), 1-48. doi:10.3390/pr8050516
- Li, B., Huang, Y., Guo, D., Liu, Y., Liu, Z., Han, J., . . . Xing, B. (2022). Environmental risks of disposable face masks during the pandemic of COVID-19: Challenges and management. *Science of The Total Environment*, 825(15), 153880. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.153880
- Li, C., Busquets, R., & Campos, L. (2019). Assessment of microplastics in freshwater systems: a review. *Sci. Total Environ.*, 707(135578). doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.135578
- Li, C., Yuan, X., Sun, Z., Suvarna, M., Hu, X., Wang, X., & Sik Ok, Y. (2021). Pyrolysis of waste surgical masks into liquid fuel and its life-cycle assessment. *Bioresource Technology*. doi:10.1016/j.biortech.2021.126582
- López, A., de Marco, I., Caballero, B., Laresgoiti, M., & Adrados, A. (2011). Influence of time and temperature on pyrolysis of plastic wastes in a semi-batch reactor. *Chemical Engineering Journal*, 62-71. doi:https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.07.037

- Mahbubani, R. (4 de Marzo de 2020). US medical workers will need 3.5 billion face masks if the coronavirus reaches pandemic status. Obtenido de In: Bus. Insid.: https://www.pulse.ng/bi/politics/us-medical-workers-will-need-35-billion-face-masksif-the-coronavirus-reaches/r6wsxqk
- Mallapur, C. (2020). Sanitation workers at risk from discarded medical waste related to COVID-19. *IndiaSpend*. Obtenido de https://www. indiaspend. com/sanitation-workers-at-riskfrom-discarded-medical-waste-related-tocovid-19/.(accessed 4.26. 20).
- Mancheno, M., Astudillo, S., Arévalo, P., Malo, I., Naranjo, T., & Espinoza, J. (2016). . Aprovechamiento energético de residuos plásticos obteniendo combustibles líquidos, por medio de pirólisis. *LA GRANJA. Revista de Ciencias de la Vida, 23*(1), 53–59. doi:https://doi.org/http://dx.doi.org/10.17163/lgr.n23.2016.06
- Marlair, G., Cwiklinski, C., & Tewarson, A. (1999). An analysis of some practical methods for estimating heats of combustion in fire safety studies. *Interflam*. Obtenido de http://halineris.ccsd.cnrs.fr/ineris-00972167
- Navarro, M., López, J., Veses, A., Callén, M., & García, T. (2018). Kinetic study for the copyrolysis of lignocellulosic biomass and plastics using the distributed activation energy model. *Energy*, *165*, 731–742. doi:10.1016/j.energy.2018.09.133
- Nawaz, A., & Kumar, P. (2022). Thermal degradation of hazardous 3-layered COVID-19 face mask through pyrolysis: Kinetic, thermodynamic, prediction modelling using ANN and volatile product characterization. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 1-14.
- Nzediegwu, C., & Chang, S. X. (2020). Improper solid waste management increases potential for COVID-19 spread in developing countries. *Resour Conserv Recycl.*, *161*(104947). doi:10.1016/j.resconrec.2020.104947
- Oginni, O. (2021). COVID-19 disposable face masks: a precursor for synthesis of valuable bioproducts. *Environ Sci Pollut Res.* doi:https://doi.org/10.1007/s11356-021-15229-y

- Oginni, O. (2021). COVID-19 disposable face masks: a precursor for synthesis of valuable bioproducts. *Environ Sci Pollut Res.* doi:https://doi.org/10.1007/s11356-021-15229-y
- Oginni, O., & Singh, K. (2019). Pyrolysis characteristics of Arundo donax harvested from a reclaimed mine land. *Industrial Crops and Products, 133*, 44-53. doi:10.1016/j.indcrop.2019.03.014
- Olufemi, A., & Olagboye, S. (2017). Thermal conversion of waste plastics into fuel oil. *Int J Petrochem Sci Eng*, 2, 252-257. doi:10.15406/ipcse.2017.02.00064
- Organización Mundial de la Salud (OMS). (3 de Marzo de 2020). *Shortage of personal protective equipment endangering health workers worldwide*. Obtenido de World Health Organization (WHO): https://www.who.int/news/item/03-03-2020-shortage-of-personal-protective-equipment-endangering-health-workers-worldwide
- Panda, A., Alotaibi, A., Kozhevnikov, I., & Shiju, R. (2020). Pyrolysis of Plastics to Liquid Fuel Using Sulphated Zirconium Hydroxide Catalyst. *Waste and Biomass Valorization*, 11, 6337–6345. doi:https://doi.org/10.1007/s12649-019-00841-4
- Pandey U. et al. (2020). Pyrolysis of plastic waste to environmentally friendly products. *Transactions on Ecology and the Environment, 246,* 61-74. doi:doi:10.2495/EPM200071
- Papari, S., Bamdad, H., & Berruti, F. (2021). Pyrolytic Conversion of Plastic Waste to Value-Added Products and Fuels: A Review. *Materials*, 14(2586), 2-16. doi:https://doi.org/10.3390/ma14102586
- Park, C., Choi, H., Lin, K., Kwon, E., & Lee, J. (2021). COVID-19 mask waste to energy via thermochemical pathway: Effect of Co-Feeding food waste. *Energy*, 230(1), 120876. doi:https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.120876
- Qureshi, M., Oasmaa, A., Pihkola, H., Deviatkin, I., Tenhunen, A., Mannila, J., . . . Laine-Ylijoki, J. (2020). Pyrolysis of plastic waste: Opportunities and challenges. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 152, 104804. doi:https://doi.org/10.1016/j.jaap.2020.104804

Seila, A. (1995). Introduction to simulation. Introduction to simulation. Virginia, USA.

- Shannon, R. (1983). Simulation: An overview. *Simulation: An overview, Conference*. Arlington, Virginia, USA.
- Skrzyniarz, M., Sajdak, M., Zajemska, M., Iwaszko, J., Biniek-Poskart, A., Skibiński, A., . . . Niegodajew, P. (2022). Plastic Waste Management towards Energy Recovery during the COVID-19 Pandemic: The Example of Protective Face Mask Pyrolysis. *Energies*, 15(7), 2629. doi:https://doi.org/10.3390/en15072629.
- Somoza-Tornos, A., Gonzalez-Garay, A., Pozo, C., Graells, M., Espuña, A., & Guillén-Gosálbez, G. (2020). Realizing the Potential High Benefits of Circular Economy in the Chemical Industry: Ethylene Monomer Recovery via Polyethylene Pyrolysis. ACS Sustainable Chem. Eng., 8(9), 3561–3572. doi:https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b04835
- Supramono, D., Nabil, M., Setiadi, & Nasikin, M. (2018). Effect of feed composition of copyrolysis of corncobs–polypropylene plastic on mass interaction between biomass particles and plastics. *IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci.*, 105, 012049. doi:10.1088/1755-1315/105/1/012049
- Torres, F., & De-la-Torre, G. (2021). Face mask waste generation and management during the COVID-19 pandemic: An overview and the Peruvian case. *Science of The Total Environment*, 786. doi:https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.147628
- Uzochukwu, W., Umunakwe, R., Chinedu, H., Ifeanyichukwu, M., Chinedu, C., & Chimezie,
 I. (2021). Plastics waste management: A review of pyrolysis technology. *Clean Technologies and Recycling*, 1(1), 50-69. doi:https://doi.org/10.3934/ctr.2021003
- Yin, C., & McKay, A. (2018). Introduction to Modeling and Simulation Techniques. *The 8th International Symposium on Computational Intelligence and Industrial Applications* (ISCIIA2018) - *The 12th China-Japan International Workshop on Information Technology and Control Applications (ITCA2018)* (págs. 1-6). Tengzhou, Shandong, China: White Rose Research Online.