

# Diseño compacto de un reactor químico asistido por calentamiento multifrecuencia con microondas

Alberto Frisa-Rubio<sup>(1),(2)</sup>, María Campo-Valera<sup>(2)</sup>, Ignacio Rodríguez-Rodríguez<sup>(3)</sup>  
afrisa@fcirce.es, maria.campo@upct.es, ignacio.rodriguez@ic.uma.es.

<sup>(1)</sup>CIRCE-Centro Tecnológico, Av. Ranillas, Edificio Dinamiza 3D, 50018, Zaragoza, Spain.

<sup>(2)</sup>Dpto. Tecnologías de la Información y las Comunicaciones, Universidad Politécnica de Cartagena, Antigonos, 30202, Cartagena, Spain.

<sup>(3)</sup>Dpto. Ingeniería de comunicaciones, Universidad de Málaga, 29010 Málaga, Spain.

**Abstract**—Este trabajo propone un diseño de reactor químico con calentamiento por microondas, con dos innovaciones clave: la combinación de la cavidad resonante y el recipiente en el mismo volumen, con la integración de antenas como puertos aplicadores para la transmisión de energía. El reactor se optimiza con cuatro antenas emisoras y se evalúa mediante un modelo de simulación numérico utilizando el software COMSOL Multiphysics. Las simulaciones muestran el proceso de calentamiento por microondas en el reactor químico y demuestran que la implementación de guías de onda estándar no sería posible debido al tamaño incompatible requerido. Estos resultados allanan el camino para la construcción de un reactor de microondas para el reciclaje químico de polímeros a gran escala.

## I. INTRODUCCIÓN

El reciclaje convencional de plástico da como resultado la degradación de los polímeros, por lo que la tecnología del reciclaje químico pretende recuperar los elementos más básicos que lo componen, o monómeros, para que puedan utilizarse para producir nuevos polímeros o productos. A pesar de la generación masiva de residuos plásticos, sólo el 9% se recicla, el 12% se quema y el 79% se almacena en vertederos o se libera en el medio ambiente [1]. El reciclaje químico busca mejorar las técnicas existentes y conseguir la despolimerización mediante el uso de reactores químicos y la aportación de calor como catalizador, siendo la tecnología de calentamiento por microondas más eficiente y efectiva [2]–[5]. Este trabajo busca validar un diseño innovador de reactor de microondas mediante simulaciones, integrando antenas en lugar de guías de onda para transmitir energía hacia la cavidad y lograr un diseño flexible.

Los instrumentos de microondas utilizados en la síntesis química se dividen en dos tipos: reactor monomodo y reactor multimodo [6]. Los reactores monomodo son ideales para la irradiación de un recipiente de tamaño reducido, lo que permite una alta intensidad de potencia y tasas de calentamiento rápidas [6], lo que resulta en una onda estacionaria. Por otro lado, los reactores multimodo son adecuados para cavidades y volúmenes más grandes [7], lo que permite calentar uno o varios recipientes simultáneamente aunque su distribución de campo electromagnético es menos homogénea y requieren agitadores de modo para optimizar su eficiencia [6]. Debido a las características de la aplicación presentada, donde se requieren altos volúmenes de proceso, solo se puede utilizar un reactor multimodo.

También se presenta como novedad un reactor donde se combina la cavidad resonante metálica y el vaso donde

se deposita el material a procesar, reduciendo las partes y materiales de construcción al mismo tiempo que se resuelven problemas como la resistencia del material contra la operación a presión o a la corrosión [8].

En el campo del reciclaje químico de plásticos, estos suelen reciclarse mediante procesos de hidrólisis a alta presión, donde se pueden emplear microondas. En este proceso, las microondas ayudan al agua a penetrar en la estructura química del polímero, mejorando la ruptura de sus enlaces y, por lo tanto, alcanzar una alta tasa de degradación en comparación con el calentamiento convencional [9]–[11].

Con esta propuesta, las antenas como aplicadoras de la energía son una alternativa interesante debido a su simplicidad, flexibilidad y alta eficiencia en la transferencia de energía desde la fuente de microondas (magnetron) directamente al medio [12]. Sin embargo, requiere de un estudio numérico y experimental inicial para definir tanto los aspectos experimentales como de seguridad importantes para su correcta implementación.

Este trabajo presenta un estudio de diseño de un reactor que combina la cavidad resonante y vasija, e implementa antenas como aplicadores de energía para procesos de calentamiento durante la depolimerización de plásticos en el reciclado químico. Este artículo está organizado de la siguiente forma: La sección II describe la metodología y el marco de la innovación presentada. En la sección III se especifica el modelado numérico, seguido de la sección IV donde los autores presentan el análisis de los resultados de la simulación FEM centrados en el campo eléctrico y la temperatura. Finalmente, en la Sección V se presentan los principales logros y conclusiones.

## II. METODOLOGÍA

La tecnología microondas como método de calentamiento y procesamiento de materiales ha ganado cada vez más atención en los últimos años debido a sus ventajas, que incluyen tasas de calentamiento más rápidas, calentamiento más uniforme y el potencial de ahorro de energía [13], [14]. En este trabajo, se presenta esta tecnología de calentamiento aplicada a reactores químicos donde la temperatura objetivo se estima entre 150°C y 200°C, siendo un método adecuado una vez que se verifica que los productos químicos utilizados en la mezcla de materiales, como el ácido clorhídrico, son altamente susceptibles de ser calentados por el método de calentamiento propuesto.

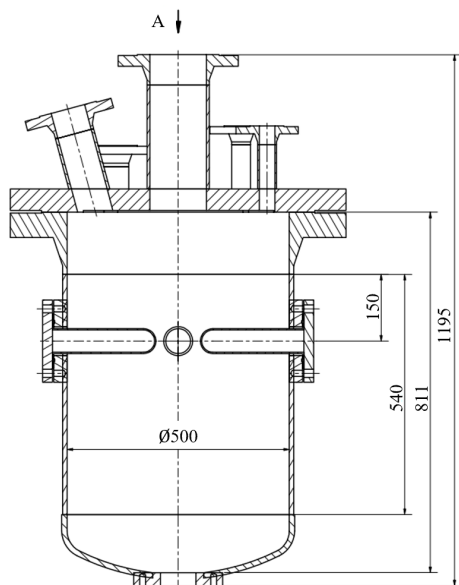


Fig. 1. Dimensiones de la cavidad resonante del modelo, sección transversal (mm).

En este trabajo, se define un reactor de cavidad multimodo, siendo en esencia, cualquier recipiente de metal varias veces más grande que la longitud de onda de las frecuencias implementadas (2.45 GHz y 915 MHz). La energía de microondas, transportada por una guía de onda o una línea de transmisión hacia la cavidad, es absorbida por un material susceptible de ser calentado por microondas colocado en el interior.

La principal innovación presentada por los autores es el uso de antenas en lugar de guías de onda para transmitir energía a la cavidad resonante. Este enfoque permite una mayor flexibilidad en el diseño y tamaño del reactor, ya que la cavidad resonante y el recipiente pueden integrarse en el mismo volumen y utilizar diámetros de reactor más pequeños. Si se utilizaran guías de onda tradicionales para la transmisión de energía, se requerirían dimensiones de cavidad más altas para acomodar la guía de onda estándar de 915 MHz (WR975) e introducir esta energía dentro de la cavidad debido a la longitud de onda de 915 MHz propagada en el aire. Por lo tanto, el uso de antenas proporciona un enfoque más eficiente y adaptable para reacciones químicas asistidas por microondas.

El estudio propone un diseño de reactor con un volumen final de 106 L, que unifica la cavidad del reactor y el recipiente en una misma estructura metálica de Hastelloy capaz de trabajar bajo presión y condiciones corrosivas, e incluye cuatro antenas como aplicadores de energía de microondas. El modelo se muestra en la Fig. 1. Tres de estas antenas aplicadoras emiten 6 kW y operan a una frecuencia de 2.45 GHz, mientras que la cuarta tiene una capacidad de 5 kW y opera a una frecuencia de 915 MHz, consiguiendo un sistema en multifrecuencia con diferente penetración de cada onda en el material para un calentamiento más efectivo. A través de simulaciones, se demuestran las ventajas del uso del calentamiento por microondas sobre los métodos tradicionales, incluyendo tiempos de procesamiento mejorados y reducción en el consumo de energía. A continuación las condiciones de

contorno introducidas en el modelo que se ha definido:

- Volumen principal como dominio definido por la mezcla de material a calentar y el aire.
- Puertos electromagnéticos como entradas coaxiales configurados cada uno según su frecuencia de trabajo, potencia y fase de onda.
- Los límites externos se seleccionan como una condición límite de impedancia que creará la condición de un material que refleja ondas electromagnéticas.

Además, la simulación se realiza con los siguientes supuestos:

- 1) El material a calentar se modela como líquido.
- 2) La presión de trabajo dentro del volumen es constante fijada en 12 bares.
- 3) No se considera ningún cambio de fase.
- 4) El movimiento de rotación del fluido se modela aplicando una velocidad descrita que genera un movimiento axial.

### III. MÉTODO NUMÉRICO: CALENTAMIENTO POR MICROONDAS

El calentamiento por microondas es un fenómeno multifísico que combina ondas electromagnéticas y transferencia de calor; por lo tanto, cualquier material expuesto a radiación electromagnética se calentará en función de su permitividad relativa y la potencia aplicada. Esta sección presenta el Método de Elementos Finitos utilizando el software comercial COMSOL Multiphysics [15]. El preprocesamiento, procesamiento y postprocesamiento utilizados en la simulación del recipiente se implementaron según la siguiente metodología:

- Preprocesamiento: La geometría utilizada para la simulación es un recipiente de material cilíndrico con una cavidad de 106 L. En cuanto a las frecuencias utilizadas para las simulaciones, tenemos 915 MHz y 2.45 GHz. El mallado se ha llevado a cabo con  $\lambda/6$  con una frecuencia máxima de 2.45 GHz como se muestra en la Fig. 2.
- Procesamiento: La creación del modelo numérico propuesto utilizando el Método de Elementos Finitos (FEM) implica utilizar el módulo de frecuencia de radio (RF) para simular el proceso de calentamiento electromagnético. El modelo se basa en la suposición de un campo electromagnético armónico en el tiempo y se deriva mediante la implementación de las ecuaciones de Maxwell [16], como se describe en la ecuación acompañante (1).

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \vec{E}) - (\omega^2 \epsilon - i\omega\sigma) \vec{E} = \vec{0} \quad (1)$$

donde  $\nabla$  es el operador de gradiente nabla que calcula el gradiente de un campo escalar;  $i$  es el símbolo imaginario;  $E$  es el campo eléctrico de valor complejo;  $\mu$  es la permeabilidad;  $\omega$  es la frecuencia angular;  $\epsilon$  es la permitividad; y  $\sigma$  es la conductividad eléctrica.

En este modelo, se tienen en cuenta los dos modos de transferencia de calor, es decir, la convección y la difusión. En cuanto a la transferencia de calor en un fluido, se consideran tres contribuciones importantes a la ecuación de calor. La primera, el transporte de energía representado como un término convectivo en la ecuación

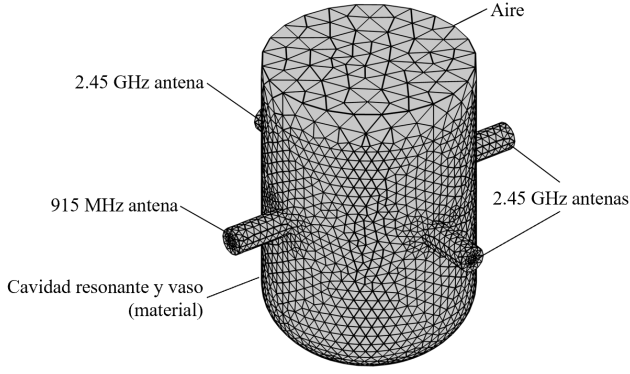


Fig. 2. Configuración y mallado utilizados en el diseño de la cavidad resonante, 106 L.

de calor. La segunda, relacionada con los efectos viscosos producidos por el calentamiento en el fluido. La última, es la densidad del fluido que depende de la temperatura. Teniendo en cuenta estas contribuciones, se obtiene la expresión (2) que representa la ecuación de calor transitoria que rige el campo de temperatura dentro de un fluido.

$$C_p \rho \frac{dT}{dt} + \rho c_p u \cdot \nabla T = \alpha_p T \left( \frac{\delta p}{\delta t} + u \cdot \nabla p \right) + \tau : S + \nabla \cdot (k \nabla T) + q \quad (2)$$

Donde  $C_p$  es la capacidad calorífica efectiva;  $c_p$  es la capacidad calorífica del fluido;  $\rho$  es la densidad del fluido;  $u$  es el campo de velocidad del fluido;  $T$  es la temperatura;  $\alpha_p$  es el coeficiente de expansión térmica lineal;  $k$  es la conductividad térmica efectiva;  $q$  es la fuente de calor.

A partir del desarrollo previamente mencionado del modelo numérico utilizando FEM, las ecuaciones (1) y (2) se incorporan en el modelo multifísico para analizar el proceso de calentamiento asistido por microondas.

- Postprocesamiento: Los resultados se estudian en el dominio de la frecuencia y del tiempo. Se obtienen los valores eléctricos necesarios para convertir la potencia transmitida en calor en el dominio de la frecuencia. En el dominio del tiempo, para cada tiempo estudiado (1 min, 20 min y 40 min), las condiciones de transferencia de calor se aplican al dominio del material por el modelo. Finalmente, el análisis del calentamiento electromagnético dependiente del tiempo implica el acoplamiento de las dos físicas mencionadas anteriormente. En cada tiempo estudiado, el solucionador evalúa la cantidad de energía transferida a cada elemento de la malla evaluando las condiciones de transferencia de calor en la frontera.

#### IV. RESULTADOS

Con el objetivo de comprender cómo se distribuyen los campos eléctricos y la transferencia de calor para incrementar la temperatura, se llevaron a cabo una serie de simulaciones estudiando la distribución del campo eléctrico considerando las frecuencias de 915 MHz y 2.45 GHz individualmente, así

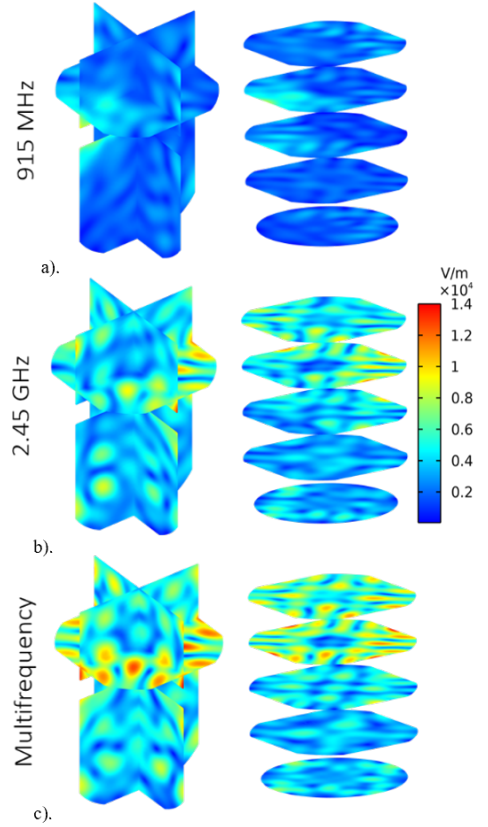


Fig. 3. Campo eléctrico normalizado (V/m) utilizando tres escenarios de frecuencias diferentes. El panel izquierdo muestra la sección longitudinal, mientras que el panel derecho muestra la sección transversal a lo largo del eje Z. Los tres escenarios de frecuencias son los siguientes: (a) 915 MHz, (b) 2.45 GHz, y (c) frecuencias acopladas.

como su efecto acoplado en la generación de calor y su correlación con la formación de puntos calientes y fríos. También se completó el estudio con el efecto de la agitación en la distribución de la temperatura.

##### A. CAMPO ELÉCTRICO

Los resultados obtenidos de la distribución del campo eléctrico para las frecuencias de 915 MHz, 2.45 GHz y las frecuencias de acoplamiento se presentan en la Fig. 3.

##### B. TEMPERATURA Y EFECTO DE AGITACIÓN

Se realizó un estudio de la transferencia de calor dependiente del tiempo utilizando simulación multifísica FEM en dos escenarios diferentes, válido para investigar la distribución dinámica del calor dentro de un sistema a medida que evoluciona con el tiempo. Este tipo de análisis es fundamental para evaluar y optimizar el rendimiento de los sistemas de calentamiento por microondas, especialmente en aplicaciones donde la uniformidad de la distribución de la temperatura es crítica. En el primer escenario, se consideró un volumen de material estático y aplicando una distribución desigual de las pérdidas electromagnéticas a lo largo del recipiente, resultando puntos calientes dispersos y una distribución de temperatura altamente no uniforme, como se muestra en la Fig. 4a. Esta distribución de temperatura no uniforme se atribuye principalmente a la pérdida de calor electromagnético, que sirve como fuente principal de calor en el sistema de microondas y

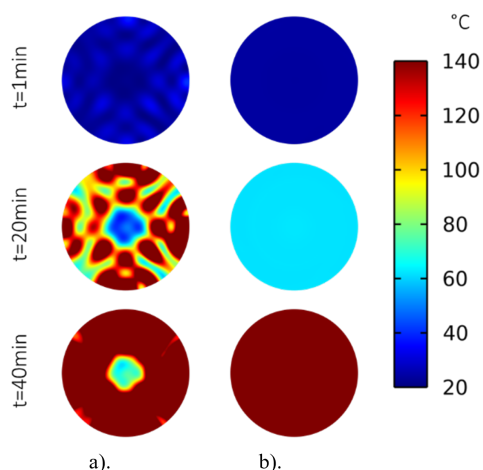


Fig. 4. Comparación entre diferentes distribuciones de temperatura en una sección transversal 0.475 m desde el fondo del reactor. (a) Simulación considerando un material estático bajo calentamiento y (b) fluido en movimiento.

no garantiza condiciones de procesamiento uniformes en todo el lote. También se pueden observar distribuciones de campo eléctrico similares. En el segundo escenario, las propiedades dieléctricas se mantuvieron constantes, pero el material dentro del recipiente se modeló como un fluido en movimiento, lo que resultó en una nueva distribución de temperatura en la que sus valores resultaron uniformes en todo el recipiente, como se muestra en la Fig. 4b.

## V. CONCLUSIONES

Este artículo presenta una innovación en el diseño de reactores químicos asistidos por calentamiento por microondas en cavidades resonantes, que utiliza las ventajas del material metálico como contenedor y la integración de antenas como puertos aplicadores de energía de microondas dentro de la cavidad, lo que permite seleccionar nuevos formatos o dimensiones de la cavidad de forma independiente de la frecuencia implementada. Durante el trabajo se implementaron dos modelos separados por métodos numéricos, lo que ofrece beneficios para futuras fases de diseño y disposiciones del sistema. Los resultados establecen una base para construir un reactor de microondas destinado a avanzar en el proceso industrial de reciclaje químico de polímeros a gran escala.

El estudio del reactor modelado incluyó ajustes en la frecuencia, potencia, número y ubicación de las antenas de microondas, y los resultados demostraron que la combinación de frecuencias (915 MHz y 2.45 GHz) logró una mejor homogeneización del campo electromagnético. La integración de un agitador dentro de la cavidad resonante permitió una temperatura más homogénea de la muestra, minimizando el sobrecalentamiento. El uso de una fuente de calentamiento por microondas permitió una disminución considerable en el tiempo de calentamiento en comparación con las tecnologías de calentamiento tradicionales, debido a que el calentamiento directo aumenta la eficiencia general del proceso enfocándose directamente en el material químico. Además, el uso de antenas permite diseñar y crear formatos y tamaños de reactor más flexibles que con guías de onda tradicionales.

Si bien este modelo valida el diseño conceptual, los futuros esfuerzos se dirigirán a optimizar la posición, el número de

antenas y su diseño para mejorar la uniformidad del campo eléctrico para minimizar la dependencia del agitador.

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha contado con el apoyo de las subvenciones de los proyectos 820665-polynSPIRE y 101058540-PLASTICE, de los programas de investigación e innovación Horizon 2020 y Horizon Europe de la Unión Europea, respectivamente.

María Campo-Valera agradece el programa postdoctoral Margarita Salas—Ministerio de Universidades de España (financiado por el programa NextGenerationEU de la Unión Europea).

Ignacio Rodríguez-Rodríguez desea dar las gracias al Plan Andaluz de Investigación, Desarrollo e Innovación (PAIDI), Junta de Andalucía, España.

## REFERENCIAS

- [1] C. J. Rhodes, "Plastic pollution and potential solutions," *Science progress*, vol. 101, no. 3, pp. 207–260, 2018.
- [2] H. Li, Z. Zhao, C. Xiouras, G. D. Stefanidis, X. Li, and X. Gao, "Fundamentals and applications of microwave heating to chemicals separation processes," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 114, p. 109316, 2019.
- [3] W. Chen, A. Malhotra, K. Yu, W. Zheng, P. J. Plaza-Gonzalez, J. M. Catala-Civera, J. Santamaría, and D. G. Vlachos, "Intensified microwave-assisted heterogeneous catalytic reactors for sustainable chemical manufacturing," *Chemical Engineering Journal*, vol. 420, p. 130476, 2021.
- [4] K. K. Rana and S. Rana, "Microwave reactors: A brief review on its fundamental aspects and applications," *Open Access Library Journal*, vol. 1, no. 6, pp. 1–20, 2014.
- [5] J. G. Rivera, E. Pulidori, C. Pelosi, C. Ferrari, L. Bernazzani, M. R. Tinè, E. Bramanti, and C. Duce, "20 years of microwave technology developments using a coaxial antenna: From human health to green chemistry applications," *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, vol. 5, p. 100337, 2022.
- [6] S. Dabrowska, T. Chudoba, J. Wojnarowicz, and W. Lojowski, "Current trends in the development of microwave reactors for the synthesis of nanomaterials in laboratories and industries: a review," *Crystals*, vol. 8, no. 10, p. 379, 2018.
- [7] D. Santos, E. C. da Rocha, R. L. Santos, A. J. Cancelas, E. Franceschi, A. F. Santos, M. Fortuny, and C. Dariva, "Demulsification of water-in-crude oil emulsions using single mode and multimode microwave irradiation," *Separation and Purification Technology*, vol. 189, pp. 347–356, 2017.
- [8] J. Sun, W. Wang, and Q. Yue, "Review on microwave-matter interaction fundamentals and efficient microwave-associated heating strategies. materials, 9, 231 (2016)."
- [9] K. Ikenaga, T. Inoue, and K. Kusakabe, "Hydrolysis of pet by combining direct microwave heating with high pressure," *Procedia engineering*, vol. 148, pp. 314–318, 2016.
- [10] A. Largeteau, S. Oree, C. Marzat, and G. Demazeau, "Microwave heating in high pressure reaction vessels," *International Journal of High Pressure Research*, vol. 20, no. 1–6, pp. 281–288, 2001.
- [11] G. S. Sturm, M. D. Verweij, T. Van Gerven, A. I. Stankiewicz, and G. D. Stefanidis, "On the effect of resonant microwave fields on temperature distribution in time and space," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 55, no. 13–14, pp. 3800–3811, 2012.
- [12] G. B. Gentili, M. Linari, I. Longo, and A. S. Ricci, "A coaxial microwave applicator for direct heating of liquids filling chemical reactors," *IEEE transactions on microwave theory and techniques*, vol. 57, no. 9, pp. 2268–2275, 2009.
- [13] H. Goyal, T.-Y. Chen, W. Chen, and D. G. Vlachos, "A review of microwave-assisted process intensified multiphase reactors," *Chemical Engineering Journal*, vol. 430, p. 133183, 2022.
- [14] H. Yang, B. Yan, W. Chen, and D. Fan, "Prediction and innovation of sustainable continuous flow microwave processing based on numerical simulations: A systematic review," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 175, p. 113183, 2023.
- [15] D. W. Pepper and J. C. Heinrich, *The finite element method: basic concepts and applications with MATLAB, MAPLE, and COMSOL*. CRC press, 2017.
- [16] D. A. A. Silos, "Ecuaciones de maxwell," 2020.