

ANÁLISIS ENERGÉTICO DEL PROCESO DE DESORCIÓN EN REACTORES

ENERGY ANALYSIS OF THE DESORPTION PROCESS IN REACTORS

Fernando B. Sanchez Sarmiento y Miguel A. Cavaliere

*Laboratorio de Investigación, Desarrollo y Transferencia de la Universidad Austral (LIDTUA),
Facultad de Ingeniería, Universidad Austral, Mariano Acosta 1611, B1629WWA Pilar, Argentina.
fsanchez@austral.edu.ar & mcavaliere@austral.edu.ar;*

Palabras clave: Desorción Térmica, Secado de Materiales Porosos, Modelo Térmico con Elementos Finitos, Generación Automática de Malla, Optimización Geométrica.

Resumen. La desorción térmica es una tecnología de remediación de suelos que emplea calor para separar contaminantes volátiles y semivolátiles presentes en suelos, lodos y sedimentos. Se clasifica como un proceso de separación física, no destructivo. El procedimiento consiste en calentar el material contaminado en un desorbedor térmico, provocando la evaporación de los contaminantes. Estos vapores son posteriormente capturados y tratados, mientras que el suelo descontaminado puede reutilizarse, comúnmente como material de relleno. Para optimizar este proceso, es fundamental que el modelo térmico represente con precisión los mecanismos de transferencia de calor, permitiendo predecir la distribución de temperatura en el suelo y la eficiencia de la vaporización de los contaminantes. En este estudio se analizan las dimensiones características del equipo con el fin de estimar el tiempo requerido para el tratamiento. Se obtienen curvas de diseño que permiten dimensionar adecuadamente las resistencias térmicas y determinar su disposición óptima.

Keywords: Thermal Desorption, Drying of Porous Materials, Thermal Modeling with Finite Elements, Automatic Mesh Generation, Geometric Optimization.

Abstract. Thermal desorption is a soil remediation technology that uses heat to separate volatile and semi-volatile contaminants present in soils, sludges, and sediments. It is classified as a physical, non-destructive separation process. The procedure involves heating the contaminated material in a thermal desorber, causing the contaminants to evaporate. These vapors are subsequently captured and treated, while the decontaminated soil can be reused, commonly as backfill material. To optimize this process, it is essential that the thermal model accurately represents the heat transfer mechanisms, enabling the prediction of temperature distribution within the soil and the efficiency of contaminant vaporization. This study analyzes the characteristic dimensions of the equipment in order to estimate the treatment time. Design curves are obtained to properly size the thermal resistances and determine their optimal arrangement.

1. INTRODUCCIÓN

La creciente explotación de recursos no convencionales ha intensificado la generación de residuos contaminantes, especialmente en suelos afectados por hidrocarburos y compuestos orgánicos persistentes. En este contexto, la desorción térmica se ha consolidado como una tecnología eficaz para la remediación ambiental ([U.S. Environmental Protection Agency, 2001](#)), al permitir la separación física de contaminantes mediante la aplicación controlada de calor. Este proceso no destructivo posibilita la recuperación del suelo tratado, que puede reutilizarse como material de relleno, sin alterar su estructura física ([Zhang et al., 2019](#); [Vidonish et al., 2016](#)).

La eficiencia del proceso depende críticamente de alcanzar temperaturas adecuadas para volatilizar los contaminantes. En particular, la eliminación de carburos y compuestos semivolátiles requiere rangos térmicos elevados, típicamente entre 360 °C y 540 °C, mientras que los compuestos más volátiles pueden ser removidos a temperaturas más bajas ([Public Services and Procurement Canada, 2025](#)). La correcta distribución de las resistencias calefactoras y el diseño térmico del equipo son factores clave para garantizar una transferencia de calor eficiente y homogénea en el medio poroso.

Sin embargo, en este trabajo se considera exclusivamente el proceso de eliminación de humedad, como etapa preliminar del tratamiento térmico. Esta simplificación permite optimizar la geometría y disposición de las resistencias calefactoras, evaluando su influencia sobre los tiempos de calentamiento y la eficiencia energética del sistema. La humedad, al ser el primer componente en evaporarse, condiciona la dinámica térmica inicial y su remoción efectiva es esencial para preparar el suelo para etapas posteriores de desorción de hidrocarburos.

2. EQUIPO

El material se calienta mediante resistencias calefactoras. Se ubican extractores para eliminar la humedad evaporada del material. También se ubican termocuplas para medir la temperatura del material y de las resistencias. Un sistema de control de lazo cerrado opera las resistencias, para que su temperatura cumpla un calentamiento establecido. Cuando la termocupla del material se ubica en forma centrada con tres resistencias la configuración se llama triangular, figura 1. También se puede acomodar siguiendo un hexágono ([Xu et al., 2022](#)), en ese caso, se ubica el sensor equidistantemente de 6 resistencias.

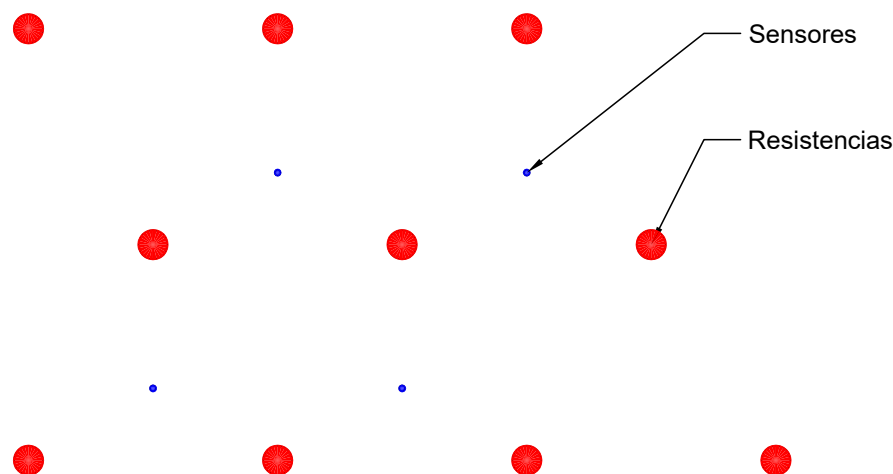


Figura 1: Esquema triangular, ubicación de las resistencias y los sensores de temperatura en el interior del equipo.

El objetivo de este trabajo es determinar tiempos de secado para distintas configuraciones geométricas del equipo, por lo tanto, se define en forma genérica la distancia entre las resistencias y los sensores como L , y el diámetro de la resistencias como d , figura 2 (a).

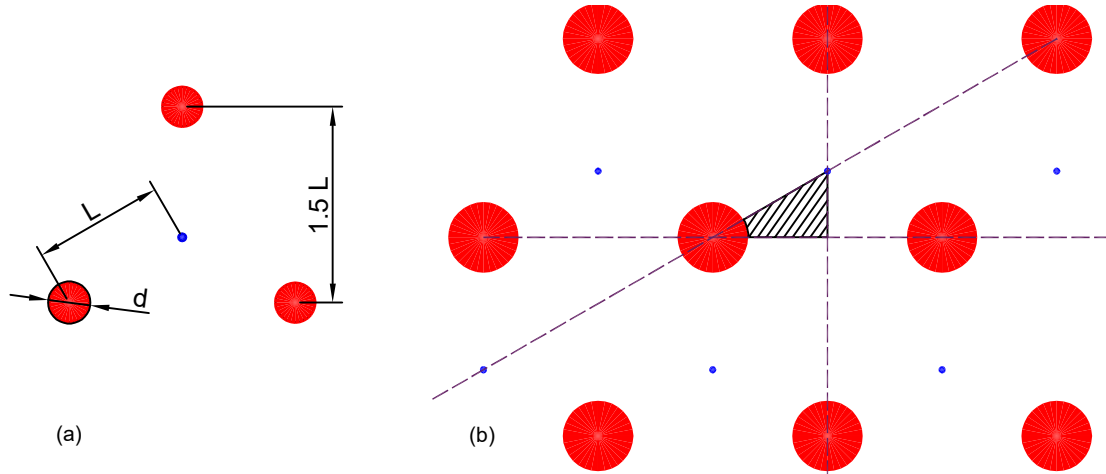


Figura 2: Geometría característica (a); condiciones de simetría y dominio resultante (b) .

Dado que los equipos son muy grandes se aplican una gran cantidad de resistencias, por lo que el patrón triangular se repite una cantidad indefinida de veces. Despreciando los efectos de borde en las paredes del equipo, se pueden utilizar condiciones de simetría para achicar el dominio del análisis. En la figura 2 (b) se muestran las rectas de simetría utilizadas con línea de puntos, y el dominio resultante con sombreado.

3. METODOLOGÍA

3.1. Formulación del modelo matemático

La ecuación

$$(\rho c_P)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda_{\text{eff}} \nabla T) - \rho \gamma_{\text{eff}} \dot{m} \quad (1)$$

describe el balance de energía térmica en un medio poroso heterogéneo durante el proceso de desorción térmica. A continuación se detallan los parámetros involucrados:

- ρ : densidad del medio [kg/m³]
- c_P : capacidad calorífica a presión constante [J/(kg·°C)]
- λ : conductividad térmica [W/(m·°C)]
- γ : calor latente de evaporación [J/kg]
- \dot{m} : flujo másico de evaporación [kg/s]

En la fórmula anterior, el subíndice *eff* surge de homogeneizar las propiedades térmicas teniendo en cuenta la presencia de suelo, humedad e hidrocarburos. Sin embargo, en este estudio se tuvo en cuenta el hecho de que la energía requerida exclusivamente por el proceso de desorción es mucho menor que la energía requerida para el calentamiento del suelo, por lo cual el análisis del efecto de la distribución de las resistencias calefactoras sobre el proceso de calentamiento se efectúa desacoplando los fenómenos de calentamiento y desorción.

Bajo estas hipótesis, el modelo se focaliza sobre los aspectos difusivos, de forma tal que la ecuación 1 resulta:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T \quad (2)$$

siendo α la difusividad térmica la cual se considera dependiente de la temperatura de la siguiente manera

$$\alpha(T) = \left[2 + \frac{T - 10^\circ\text{C}}{400^\circ\text{C} - 10^\circ\text{C}} \right] \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s} \quad (3)$$

para tener en cuenta el efecto del proceso de desorción sobre las propiedades térmicas del material que se está tratando. En este caso en particular, se ha considerado un aumento lineal de la difusividad de $2 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ a $3 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ cuando la temperatura aumenta de 10°C a 400°C respectivamente.

3.2. Formulación numérica

Para la resolución numérica del modelo térmico se adopta el método de elementos finitos utilizando una formulación iso-paramétrica. Dado que las resistencias calefactoras se disponen en forma vertical cubriendo toda la altura del material a tratar, a los efectos de este análisis es suficiente con discretizar las dos dimensiones horizontales para lo cual se utilizan elementos finitos de 4 nodos que se muestran en la figura (3.2).

Las siguientes son las ecuaciones de las funciones de forma referidas al sistema de referencia propio de cada elemento:

$$\begin{aligned} h_1 &= \frac{(1+r)(1+s)}{4} \\ h_2 &= \frac{(1-r)(1+s)}{4} \\ h_3 &= \frac{(1-r)(1-s)}{4} \\ h_4 &= \frac{(1+r)(1-s)}{4} \end{aligned} \quad (4)$$

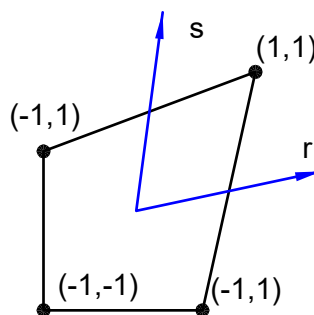


Figura 3: Elemento paramétrico lineal de 4 nodos.

La evolución térmica se calcula integrando numéricamente en el tiempo mediante un método de segundo orden, implícito e incondicionalmente estable (Crank y Nicolson, 1947) para lo cual en cada paso de tiempo Δt se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones lineales con las rutinas de la biblioteca *numpy*. La difusividad térmica α se actualiza en cada instante utilizando

la temperatura media de cada elemento. Esta simplificación evita el costo computacional de resolver iterativamente la no linealidad del problema, resultando efectiva dado que se trata de una no linealidad suave, definida por la ecuación 3, y los pasos de tiempo utilizados son pequeños frente a la duración del proceso de calentamiento.

$$A T^{p+1} = b \quad (5)$$

siendo

$$A = \frac{C_g}{\Delta t} + 0,5K_g \quad (6)$$

$$b = \left(\frac{C_g}{\Delta t} - 0,5K_g \right) T^p \quad (7)$$

Las matrices globales C_g y K_g surgen del ensamble de las siguientes matrices elementales.

$$C_e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 H(r, s) H(r, s)^T \det(J(r, s)) dr ds \quad (8)$$

$$K_e = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \nabla H_{x,y}(r, s) \alpha (\nabla H_{x,y}(r, s))^T \det(J(r, s)) dr ds \quad (9)$$

donde el arreglo H contiene a las funciones de forma (ecuación 4). El gradiente espacial de las mismas se calcula como

$$\nabla H_{x,y}(r, s) = \nabla H_{r,s}(r, s) (J(r, s))^{-1} \quad (10)$$

a través del gradiente local y el jacobiano de la transformación entre coordenadas globales y locales.

$$\nabla H_{r,s}(r, s) = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_1}{\partial r} & \frac{\partial h_1}{\partial s} \\ \frac{\partial h_2}{\partial r} & \frac{\partial h_2}{\partial s} \\ \frac{\partial h_3}{\partial r} & \frac{\partial h_3}{\partial s} \\ \frac{\partial h_4}{\partial r} & \frac{\partial h_4}{\partial s} \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$J(r, s) = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial s} & \frac{\partial y}{\partial s} \end{bmatrix} \quad (12)$$

Las temperaturas de las resistencias, definidas por el sistema de control a lazo cerrado, se imponen como condiciones de borde esenciales (Dirichlet) en el extremo izquierdo de la malla. En el resto de los contornos del dominio de cálculo se aplican condiciones de simetría, tal como se muestra en la figura 2 b). En los problemas térmicos, la condición de simetría requiere que el gradiente térmico normal a dicho contorno sea nulo por lo cual también resulta adiabático. Por este motivo, no es necesario imponer condiciones de borde adicionales en esos contornos, ya que la formulación débil del problema térmico conduce naturalmente a condiciones adiabáticas. La corrida se realiza hasta que la temperatura del nodo correspondiente a la termocupla supera

los 100°C, por lo que el código imprime como resultado el tiempo hasta que se seca el material.

Toda la formulación numérica fue implementada en lenguaje Python mediante un código propio desarrollado en la Universidad Austral por el primer autor, denominado *ThermAU.v1*.

3.3. Malla de elementos finitos

Como se requerían hacer múltiples corridas para distintos valores de L y d , se realizó un código que genera la malla de elementos finitos de manera sistemática. El código se puede ver en el anexo.

Se construye la malla para el dominio visto en la figura 2 b. Con una sucesión aritmética se definen las coordenadas radiales de n puntos desde la superficie de la resistencia hasta la posición de la termocupla:

$$p_0 = d/2 \quad (13)$$

$$p_{n-1} = L \cos(\pi/6) \quad (14)$$

Los parámetros de la sucesión son;

$$S = p_{n-1} - p_0 \quad (15)$$

$$N = n - 1 \quad (16)$$

$$d = 2 \frac{\frac{S}{N} - a}{N - 1} \quad (17)$$

Por lo que la sucesión resulta:

$$p_{i+1} = p_i + id + a; 0 \leq i \leq n - 2 \quad (18)$$

La primera fila de nodos tiene el valor de p en la coordenada x y 0 en la coordenada y . Luego, la segunda fila y la tercera filas son rotaciones $\pi/12$ y $\pi/6$ desde el centro de la resistencia.

Las coordenadas resultan:

$$x_i = p_i, y_i = 0 \quad 0 \leq i < m \quad (19)$$

$$x_i = p_i \cos(\pi/12), y_i = p_i \sin(\pi/12) \quad m \leq i < 2m \quad (20)$$

$$x_i = p_i \cos(\pi/6), y_i = p_i \sin(\pi/6) \quad 2m \leq i < 3m \quad (21)$$

donde m es la cantidad de elementos de la sucesión p .

La matriz de conectividad para las dos filas se construye de la siguiente manera:

$$e_i = [i, i + 1, i + 1 + m, i + m] \quad 0 \leq i < m - 1 \quad (22)$$

$$e_i = [i + m, i + 1 + m, i + 1 + 2m, i + 2m] \quad m - 1 \leq i < m - 2 \quad (23)$$

En la figura 4 puede verse la malla de elementos finitos obtenida para el caso de $d = 150 \text{ mm}$ y $L = 1 \text{ m}$.

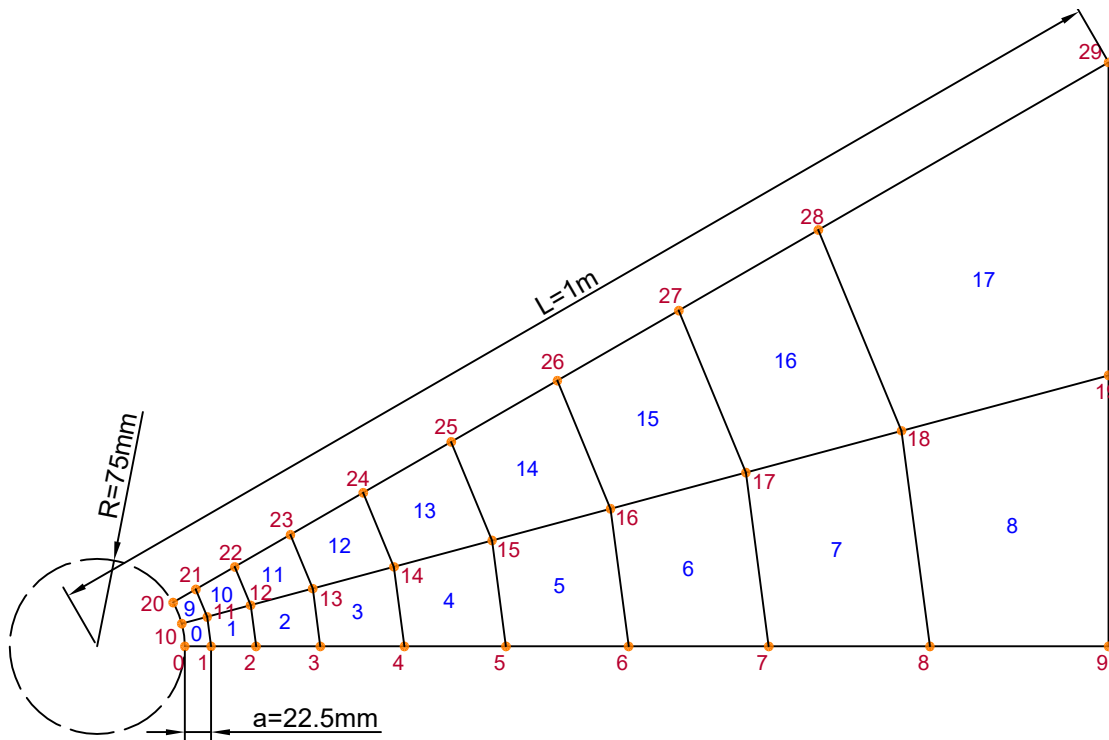


Figura 4: Malla de elementos finitos utilizada para el caso de $d = 150(mm)$ y $L = 1(m)$ y $a = 0,3R$.

4. DATOS DE CORRIDAS Y RESULTADOS

Se realizaron 20 corridas en total, en las cuales se varió el diámetro de la resistencia desde 50 hasta 300 mm y la distancia entre el centro de la resistencia y la termocupla desde 0.75 hasta 1.5 m, ya que estos son valores típicos utilizados en la industria.

Se aplicó una temperatura constante de $350^{\circ}C$ a los nodos de las resistencias. El incremento temporal es de 1 hora. La corrida termina cuando el punto de la termocupla, el más alejado de la resistencia, alcanza los $100^{\circ}C$.

Como caso particular, $d = 150\text{ mm}$ y $L = 1\text{ m}$, se muestran las temperaturas en la 2da fila de nodos, en 4 instantes de tiempo en la figura 5. Puede notarse como se eleva la temperatura progresivamente desde la resistencia a las zonas más alejadas.

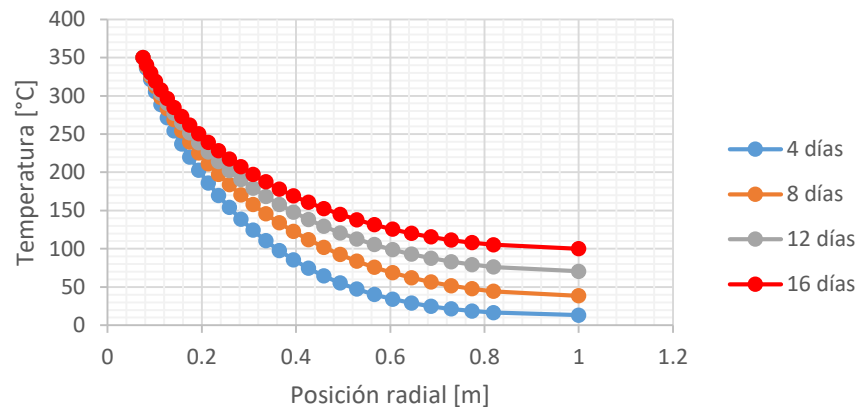


Figura 5: Temperaturas para 2da fila de nodos en 4 instantes de tiempo para el caso de $d = 0,15\text{ m}$ y $L = 1\text{ m}$.

En la figura 6 se muestran los tiempos de secado para los 20 casos analizados, cada curva corresponde a una longitud L particular, y cada punto corresponde a un diámetro de resistencia. El orden de magnitud de los tiempos de secado calculados son comparables con los tiempos reportados en proyectos de remediación de suelos por desorción térmica mediante calentamiento por conducción (Uffer, 2024).

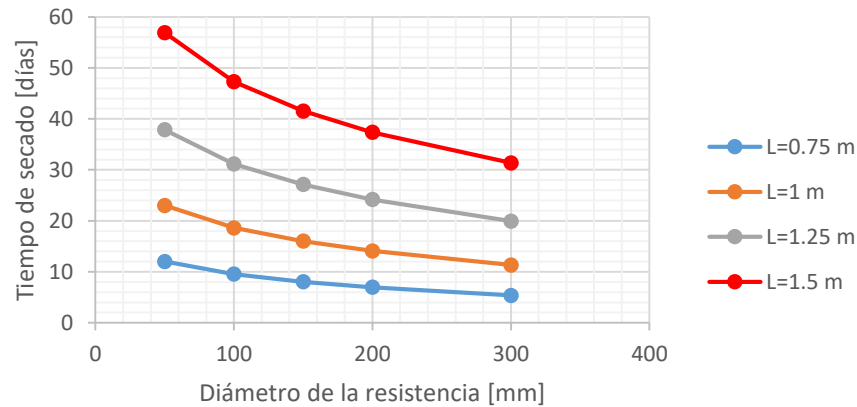


Figura 6: Tiempo de secado dependiendo de la distancia entre la resistencia y el sensor y el radio de la resistencia.

Para verificar la independencia con los resultados con la malla de elementos finitos se realizaron 8 corridas, variando el parámetro n , cantidad de nodos en la discretización de la coordenada radial, figura 7. En el eje principal se muestran los tiempos de secado para cada corrida, y en el eje secundario error porcentual que se obtiene en cada caso. Puede notarse que con la peor malla el error es muy pequeño, 0.014 %.

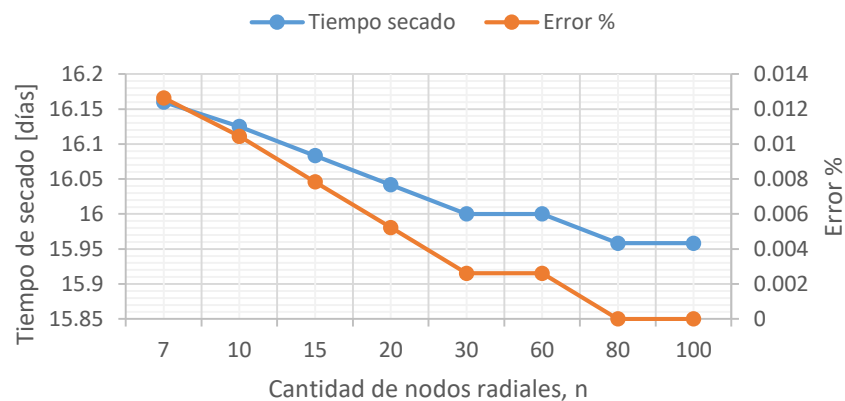


Figura 7: Independencia de malla.

5. CONCLUSIONES

Se determinaron tiempos de secado del material para distintos valores típicos de diámetro de resistencia y distancia entre el centro de la resistencia y la termocupla, figura 6. Esto se hizo para distribución triangular, en la cual la termocupla se ubica a la misma posición de tres resistencias.

Como es de esperar, los tiempos disminuyen fuertemente con el diámetro de la resistencia, ya que aumenta la superficie de contacto. Y en contraposición, disminuyen con la distancia entre el centro de la resistencia y la termocupla. Esto se debe a que para el mismo espacio se ubican menos resistencias.

Este análisis se hizo para determinar el tiempo necesario para eliminar la humedad del material. Con el mismo procedimiento, cambiando los parámetros de corrida se puede determinar el tiempo hasta que se eliminan otros componentes, como hidrocarburos, por ejemplo.

Si se quiere aplicar el procedimiento a otro material, es necesario conocer las propiedades del material. De todos modos, solo aplica a materiales muy porosos. Ya que aquí se considera que una vez que el material alcanza los 100°C la humedad se evapora y circula libremente por los poros del material hasta los extractores. Un material que no sea tan poroso requiere un modelo de transferencia de masa para la humedad, o del componente que se quiera analizar.

La generación de la malla desde el mismo código resulta un método muy efectivo para analizar múltiples casos geométricos. A su vez, la progresión aritmética es particularmente efectiva para analizar este tipo de problemas, porque en la zona cercana a la resistencia el gradiente es muy elevado y luego decrece.

REFERENCIAS

- Crank J. y Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 43(1):50–67, 1947. <http://doi.org/10.1017/S0305004100023197>.
- Public Services and Procurement Canada. Guidance and orientation for the selection of technologies (GOST). <https://gost.tpsgc-pwgsc.gc.ca/index.aspx?lang=eng>, 2025. Accessed: 2025-09-16.
- Uffer J. Thermal desorption of PFAS in a soil stockpile. <https://www.thermalrs.com/2024/11/27/thermal-desorption-of-pfas-in-a-soil-stockpile/>, 2024. Accessed on 2025-10-02.
- U.S. Environmental Protection Agency. Citizen's guide to thermal desorption. Technology Fact Sheet, EPA 542-F-01-003, 2001. Office of Solid Waste and Emergency Response (5102G).
- Vidonish J.E., Zygourakis K., Masiello C.A., Sabadell G., y Alvarez P.J. Thermal treatment of hydrocarbon-impacted soils: A review of technology innovation for sustainable remediation. *Engineering*, 2(4):426–437, 2016. <http://doi.org/10.1016/J.ENG.2016.04.005>.
- Xu X.Y., Hu N., Wang Q., Fan L.W., y Song X. A numerical study of optimizing the well spacing and heating power for in situ thermal remediation of organic-contaminated soil. *Case Studies in Thermal Engineering*, 33:101941, 2022. ISSN 2214-157X. <http://doi.org/10.1016/j.csite.2022.101941>.
- Zhang Y., Liu J., y Wang L. Thermal treatment of oil-contaminated soil: A comparison of different treatment technologies and their impacts on soil properties. *Chemosphere*, 221:715–725, 2019. <http://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.01.045>.

ANEXO: CÓDIGO IMPLEMENTADO EN PYTHON PARA LA GENERACIÓN DE LA MALLA

```

from numpy import cos , sin , pi
L=1.5
R=0.15
p=[R]
r_min = R
r_max = L*cos(pi/6)
n_points = 30
a = R*0.1
S = r_max - r_min
N = n_points - 1
d = (2*S/N - 2*a) / (N - 1)
distances = [a + i*d for i in range(N)]
p = [r_min]
for dist in distances:
    p.append(p[-1] + dist)
x=[]
y=[]
for i in range(len(p)):
    x.append(p[i])
    y.append(0)
for i in range(len(p)-1):
    x.append(p[i]*cos(pi/12))
    y.append(p[i]*sin(pi/12))
x.append(p[-1])
y.append(L*sin(pi/6)/2)
for i in range(len(p)-1):
    x.append(p[i]*cos(pi/6))
    y.append(p[i]*sin(pi/6))
x.append(p[-1])
y.append(L*sin(pi/6))
Ele=[]
for i in range(len(p)-1):
    Ele.append([i+1+len(p), i+len(p), i, i+1])
for i in range(len(p)-1):
    Ele.append([i+1+len(p)*2, i+len(p)*2, i+len(p), i+1+len(p)])
NBC=[[0, len(p), 2*len(p)]]

```