

Evaluación de Modelos de Simulación de Reactores utilizados en la Combustión con Chemical Looping Combustión (CLC): Un enfoque en la integración industrial eficiente

Analysis of Reactors Simulation Models used in Combustion with Chemical Looping Combustion (CLC) as an Alternative and Potencial for Integration in Industrial Processes

Sandra Peña*
Ana Santamaría*
Mayra Olaya*

Abstract

Chemical Looping Combustion (CLC) is an emerging technology that enables energy generation with inherent CO₂ capture, positioning itself as a sustainable alternative to conventional methods. This study evaluates reactor simulation models ranging from equilibrium-based approaches to kinetic models implemented in software such as ANSYS Fluent and COMSOL Multiphysics. Key applications include power generation, hydrogen production, and fossil fuel processing, alongside challenges such as material selection, cost reduction, and adaptability to diverse feedstocks. The manganese minerals OXMN009 and OXMN009P demonstrate high efficiency, confirming that the optimization of models and materials is crucial for the industrial viability of CLC.

Keywords: chemical looping combustion, reactor simulation, industrial integration, kinetic modeling, CO₂ capture.

Resumen

La Combustión con Chemical Looping Combustion (CLC) es una tecnología emergente que permite generar energía con captura inherente de CO₂, posicionándose como alternativa sostenible frente a métodos convencionales. Este estudio evalúa modelos de simulación de reactores, desde enfoques de equilibrio hasta modelos cinéticos, aplicados en softwares como ANSYS Fluent y COMSOL Multiphysics. Se destacan aplicaciones en generación eléctrica,

How to cite:

Peña, S*; Santamaría, A; Olaya, M. (2026) Analysis of Reactors Simulation Models used in Combustion with Chemical Looping Combustion (CLC) as an Alternative and Potencial for Integration in Industrial Processes. Universidad de Guayaquil. *Revista Iberoamericana De educación*, 9 (3).

Received: April, 2026
Approved: July, 2026

DOI: <https://doi.org/10.31876/rie.v9i1.283>

<http://www.revista-iberoamericana.org/index.php/es>

Magister
*Sandra Emperatriz Peña Murillo
sandra.penam@ug.edu.ec
<https://orcid.org/0000-0002-7848-8021>
Universidad de Guayaquil
Ecuador- Guayaquil

Magister
Ana María Santamaría Robles
<https://orcid.org/0000-0002-7733-723X>
ana.santamaria@ug.edu.ec
Universidad de Guayaquil
Ecuador – Guayaquil

Ing. Mayra Odalis Olaya Raza
molaya@inspi.gob.ec
<https://orcid.org/0009-0008-0441-459X>
Instituto Nacional de Investigación en Salud
Pública Dr. Leopoldo Izquieta Pérez.
Ecuador - Guayaquil

producción de hidrógeno y procesamiento de combustibles fósiles, junto con retos como selección de materiales, reducción de costos y adaptación a diversas fuentes. Los minerales de manganeso OXMN009 y OXMN009P muestran alta eficiencia, confirmando que la optimización de modelos y materiales es clave para la viabilidad industrial del CLC

Palabras Clave: combustión en CLC, simulación de reactores, integración industrial, modelado cinético, captura de CO₂.

Resumo

A Combustão por Ciclo Químico (CLC) é uma tecnologia emergente que possibilita a geração de energia com captura inerente de CO₂, posicionando-se como uma alternativa sustentável aos métodos convencionais. Este estudo avalia modelos de simulação de reatores variando desde abordagens baseadas no equilíbrio até modelos cinéticos implementados em softwares como ANSYS Fluent e COMSOL Multiphysics. As principais aplicações incluem a geração de energia, a produção de hidrogênio e o processamento de combustíveis fósseis, juntamente com desafios como a seleção de materiais, a redução de custos e a adaptabilidade a diversas matérias-primas. Os minerais de manganês OXMN009 e OXMN009P demonstram alta eficiência, confirmando que a otimização de modelos e materiais é crucial para a viabilidade industrial da CLC.

Palavras-chave: combustão por looping químico, simulação de reatores, integração industrial, modelagem cinética, captura de CO₂.

INTRODUCTION

La creciente demanda energética y las preocupaciones ambientales han impulsado el desarrollo de tecnologías de combustión con menores emisiones de carbono. La Combustión con Chemical Looping Combustion (CLC) emerge como una alternativa viable para la generación de energía con captura inherente de CO₂. Esta tecnología se basa en el uso de materiales transportadores de oxígeno, los cuales permiten una combustión sin contacto directo entre el combustible y el aire, lo que facilita la separación y captura del CO₂.

Actualmente, la aplicación de CLC en la industria se encuentra en fase de investigación y desarrollo, con estudios experimentales y simulaciones computacionales que buscan optimizar su rendimiento y viabilidad económica. Diferentes tipos de reactores han sido propuestos para este proceso, incluyendo reactores de lecho fluidizado burbujeante, lecho fluidizado circulante y lecho fijo, cada

uno con características específicas que influyen en la eficiencia del sistema.

Uno de los aspectos clave en el desarrollo del CLC es la selección de materiales transportadores de oxígeno adecuados, dado que su estabilidad térmica y reactividad afectan directamente la eficiencia del proceso. Según Peña Murillo et al. (2024), el uso de minerales de manganeso como transportadores de oxígeno ha demostrado ser una opción prometedora debido a su alta capacidad de transporte de oxígeno y su bajo costo. En particular, el mineral OXMN009 y su versión mejorada OXMN009P, que incorpora impregnación con cobre, han mostrado una mayor reactividad y eficiencia en el proceso de combustión con captura de CO₂ (Peña et al., 2024).

Este artículo se enfoca en el análisis de los modelos de simulación de reactores utilizados en CLC, destacando su papel en la optimización del diseño y operación de estos sistemas. Además, se analiza la integración de los sistemas de CLC en procesos industriales, examinando el funcionamiento de sus componentes clave, como reactores y sistemas de control, para comprender su aplicación en la generación de energía, producción de hidrógeno y otros procesos industriales. Se presentan ejemplos de integración en la industria y se identifican los desafíos tecnológicos que deben abordarse, como la selección de materiales transportadores de oxígeno más eficientes, la reducción de costos operativos y la adaptabilidad de CLC a distintas fuentes de combustible.

Finalmente, se discuten las perspectivas futuras para la implementación a gran escala de esta tecnología, considerando aspectos como la regulación ambiental, la aceptación por parte de la industria y la mejora de la infraestructura existente para su incorporación en procesos industriales ya establecidos.

MATERIALS AND METHODS

Este estudio se centra en la revisión de literatura y el análisis comparativo de modelos de simulación utilizados en la Combustión con Chemical Looping Combustion (CLC). La metodología aplicada en esta investigación se sustenta en el examen de múltiples fuentes académicas, incluyendo artículos científicos, informes técnicos y estudios experimentales que abordan los principios teóricos y las aplicaciones prácticas del CLC en la industria (Bolaños & Tobon, 2020).

La revisión bibliográfica permitió identificar las tecnologías actuales, los desarrollos recientes y las innovaciones en el diseño y operación de reactores CLC. Se analizaron estudios previos que han evaluado la eficiencia de los sistemas CLC, su capacidad para reducir emisiones de gases de efecto invernadero y su viabilidad económica para su implementación en procesos industriales (García-Labiano et al., 2005). La selección de estudios se basó en criterios como el impacto del artículo, la validez de los datos experimentales y la metodología utilizada.

Además, se realizó un análisis comparativo de los modelos de simulación disponibles, considerando aspectos como su nivel de precisión, las herramientas computacionales utilizadas y su aplicabilidad en distintos escenarios industriales. Este análisis se apoyó en el uso de herramientas especializadas de simulación, como ANSYS Fluent y COMSOL Multiphysics, las cuales permiten la evaluación detallada del comportamiento de los reactores bajo diferentes condiciones operativas (Adánez-Rubio et al., 2013).

Uno de los aspectos clave en la modelización de CLC es la caracterización y selección de los materiales transportadores de oxígeno. Según el estudio de Peña Murillo et al. (2024), se han evaluado minerales de manganeso como el OXMN009 y su versión mejorada OXMN009P, que incorpora impregnación con cobre, mediante termogravimetría (TGA) para analizar su comportamiento cinético y capacidad de transporte de oxígeno. Los resultados han demostrado que el OXMN009P exhibe una mayor reactividad y eficiencia en la combustión con combustibles gaseosos, como metano (CH_4), monóxido de carbono (CO) e hidrógeno (H_2), debido a su alta capacidad de transferencia de oxígeno y estabilidad térmica.

El enfoque metodológico de este trabajo también incluyó la clasificación de los modelos de simulación en función de su capacidad para representar la cinética química y las interacciones entre los transportadores de oxígeno y el combustible. Se consideraron modelos de equilibrio, que asumen condiciones ideales, y modelos cinéticos, que integran parámetros dinámicos y reacciones químicas en tiempo real (Mendiara et al., 2012).

La validación de los datos obtenidos a partir de la revisión bibliográfica se llevó a cabo mediante la comparación con estudios experimentales y pruebas de simulación previas. Esta metodología

permitió identificar los principales desafíos tecnológicos en la implementación del CLC y definir estrategias para mejorar su eficiencia y reducir los costos operativos.

Modelos Estudiados

Para el análisis de los modelos de simulación de reactores en CLC, se consideraron dos enfoques principales: modelos de equilibrio y modelos cinéticos. Estos modelos permiten comprender la interacción entre los transportadores de oxígeno y el combustible, optimizando la eficiencia del proceso y reduciendo las emisiones contaminantes (Seepana et al., 2021)

Modelos de Equilibrio

Los modelos de equilibrio se basan en el principio de equilibrio termodinámico para predecir la composición final de los productos de reacción en condiciones ideales. Estos modelos son fundamentales para evaluar la conversión completa del combustible y determinar la eficiencia teórica del proceso (Abad et al., 2018). En este contexto, se han utilizado herramientas computacionales que permiten estimar la distribución de especies químicas y la transferencia de masa y energía dentro del reactor (Abad et al., 2017).

Dado que los modelos de equilibrio no consideran las velocidades de reacción ni las variaciones en las condiciones operativas, su aplicación en la simulación de procesos industriales es limitada. Sin embargo, proporcionan una referencia inicial para la optimización del diseño de reactores y la selección de materiales transportadores de oxígeno con alta estabilidad térmica y química (Arango & Vasquez, 2016).

Modelos Cinéticos

Los modelos cinéticos consideran la velocidad de reacción y la influencia de factores como la temperatura, la presión y la composición del transportador de oxígeno en el desempeño del reactor. Estos modelos son esenciales para analizar el comportamiento dinámico de los reactores y predecir la evolución de las reacciones químicas en el tiempo (Abad et al., 2018).

Para operar eficazmente, el sistema CLC requiere mantener temperaturas específicas en ambos reactores; el reactor de reducción opera a temperaturas entre 800 y 1000°C, mientras que el reactor de oxidación trabaja a temperaturas algo inferiores. Estas condiciones

aseguran una reactividad óptima del portador de oxígeno y la completa conversión del combustible (Arango, 2020).

Los modelos cinéticos también consideran la estabilidad y reactividad del portador de oxígeno a lo largo de múltiples ciclos de oxidación y reducción. Para ello, se han estudiado materiales como óxidos de níquel (NiO), hierro (Fe_2O_3) y cobre (CuO), que presentan alta estabilidad térmica y mecánica, esenciales para un funcionamiento eficiente a largo plazo (Abad et al., 2018).

Uno de los principales desafíos en la modelización cinética es la determinación de los coeficientes de reacción y los mecanismos de interacción entre los transportadores de oxígeno y los combustibles. En este sentido, los estudios experimentales han permitido refinar los modelos y mejorar la precisión de las simulaciones (Seepana et al., 2021).

En el análisis comparativo de los modelos, se identificaron las principales ventajas y limitaciones de cada enfoque. Mientras que los modelos de equilibrio proporcionan una visión general del rendimiento esperado en condiciones ideales, los modelos cinéticos permiten evaluar con mayor precisión la dinámica de reacción en escenarios operativos reales (Peña et al., 2025; Peña & López, 2020). Esta combinación de enfoques es fundamental para la optimización del diseño y operación de reactores en la industria, asegurando un rendimiento eficiente y sostenible del proceso CLC (Pérez-Vega et al., 2017).

La aplicación del software como ANSYS Fluent y COMSOL Multiphysics es importante para simular y analizar el comportamiento de los reactores y sistemas de combustión, debido a que permiten modelar fenómenos complejos de transferencia de calor, transferencia de masa y reacciones químicas fundamentales en la compresión y optimización del proceso de Combustión en Bucle Químico (CLC) (Faizal & Deshpande, 2023).

Permite realizar simulaciones detalladas de la dinámica de los fluidos, transferencia de calor y cinética de reacción dentro de los reactores de lecho fluidizado, proporcionando información sobre la eficiencia del proceso, distribución de temperatura y captura de dióxido de carbono. Además, son prácticos para modelar la interacción entre los transportadores de oxígeno, los combustibles y los productos de reacción, contribuyendo a la compresión integral del proceso (Faizal & Deshpande, 2023).

La integración de CLC en un ciclo combinado para la producción de energía eléctrica es una estrategia prometedora para mejorar la eficiencia energética y reducir las emisiones de dióxido de carbono, esta integración combina un ciclo Brayton con un ciclo Rankine, aprovechando el calor residual generado en el proceso de combustión, un buen control permite integrar el proceso en ciclos combinados de generación de electricidad, por ende, incrementa la eficiencia energética.

La producción de hidrógeno mediante el proceso de Reformado Químico en Bucle (CLR) es una de las aplicaciones más prometedoras dentro de la tecnología de Bucle Químico. Este proceso emplea transportadores sólidos de oxígeno que permiten una transferencia controlada de oxígeno al combustible, por ejemplo, los minerales de manganeso OXMN009 y OXMN009P que influyen directamente la eficiencia y captura de dióxido de carbono en la generación de energía (Peña et al., 2024).

En el proceso de CLC para los combustibles fósiles, permitiendo una combustión altamente eficiente con captura integrada de dióxido de carbono. En este proceso un portador de oxígeno oxida el combustible en un reactor de reducción, produciendo CO₂ y vapor de agua como subproductos. En este contexto la evaluación de minerales como el de manganeso OXMN009 y OXMN009P es una opción efectiva para la captura de dióxido de carbono provocado por los óxidos metálicos (Peña et al., 2024).

RESULTS

Los modelos de equilibrio y cinéticos desempeñan un papel fundamental en la comprensión y diseño de reactores para procesos de combustión, debido a que permiten simular el comportamiento de las reacciones químicas, así evaluando la eficiencia del sistema y optimización de las condiciones operativas. En la Tabla 1 se muestran la comparativa entre el modelo de equilibrio y el modelo cinético.

Tabla 1. *Diferencias entre el modelo en equilibrio frente al modelo cinético (Teng & Zhang, 2020).*

Modelos de Equilibrio	Modelos Cinéticos
Propone predecir las condiciones en las que las reacciones químicas alcanzando el equilibrio, y de evaluar el rendimiento termodinámico. Describe la velocidad de las reacciones químicas mediante ecuaciones como la de Arrhenius.	
Factores determinantes	
Temperatura del sistema.	
Presión del sistema.	
Componentes iniciales y finales de los reactantes y productos. Constantes de velocidad y energía de activación.	
Influencia de la temperatura, presión y tamaño de partículas.	
Evaluación de etapas isotérmicas y no isotérmicas.	

Aplicaciones en C.L.C.

Es utilizado para determinar la composición de gases de combustión y la eficiencia de separación inherente de CO(Teng & Zhang, 2020) bajo diferentes condiciones de trabajo. Analiza la reactividad de los transportadores de oxígeno (óxidos metálicos), optimizando la transferencia de masa y calor entre las fases.

El CLC se relaciona con la generación eléctrica, debido a que ofrece una forma innovadora de combustión con captura de CO₂, además de que se integra en ciclos combinados para la producción de energía eléctrica demostrando mejoras significativas en la eficiencia energética y reducción de emisiones de gases, dirigiendo su potencial para contribuir a la generación eléctrica sostenible.

En relación con la producción de hidrógeno, el CLC ofrece oportunidades prometedoras mediante el CLR, consecuencia de la transferencia controlada de oxígeno al combustible, tomando relevancia para la producción eficiencia y sostenible de hidrógeno. Por otro lado, ofrece bajas emisiones de NO_x y la capacidad de capturar el CO₂ de manera eficiente siendo importante en el procesamiento de combustibles fósiles de manera sostenible.

Uno de los desafíos claves en la implementación industrial del CLC es garantizar la estabilidad operativa, la investigación y desarrollo continuo son fundamentales para abordar los desafíos de estabilidad y garantizar un rendimiento consistente. La búsqueda de nuevos materiales con mejores propiedades y menor costo es una oportunidad importante para mejorar el rendimiento y eficiencia, por ejemplo, los minerales de manganeso como transportadores de oxígeno. Además, la optimización de los reactores es crucial para maximizar la eficiencia y minimizar la formación de contaminantes.

CONCLUSIONS

Los modelos de simulación en CLC, incluyendo los modelos de equilibrio y cinéticos, han demostrado ser herramientas fundamentales para optimizar el diseño y la operación de los reactores, proporcionando un mejor entendimiento de los fenómenos de transferencia de masa y calor. La comparación de modelos ha permitido identificar las fortalezas y limitaciones de cada enfoque, lo que contribuye a la mejora continua de la tecnología CLC.

Las aplicaciones industriales del CLC, como la generación de energía eléctrica, la producción de hidrógeno y el procesamiento de combustibles fósiles, destacan el potencial de esta tecnología para abordar los desafíos energéticos y medioambientales actuales. La integración del CLC en ciclos combinados para la generación de energía eléctrica y su relevancia en la producción eficiente de hidrógeno subrayan su papel en la transición hacia fuentes de energía más limpias y sostenibles.

Los desafíos y oportunidades identificados en la estabilidad operativa, la búsqueda de materiales transportadores de oxígeno y la optimización de reactores ofrecen áreas clave para la investigación y el desarrollo continuo en el campo del CLC. Abordar estos desafíos y aprovechar estas oportunidades es fundamental para garantizar la implementación exitosa y sostenible del CLC en aplicaciones industriales, lo que respalda la importancia de la innovación y la mejora continua en esta tecnología.

REFERENCES

- Abad, A., de las Obras-Loscertales, M., García-Labiano, F., de Diego, L. F., Gayán, P., & Adánez, J. (2017). In situ gasification Chemical-Looping Combustion of coal using limestone as oxygen carrier precursor and sulphur sorbent. *Chemical*

- Engineering Journal*, 310, 226–239.
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.10.113>
- Abad, A., Gayán, P., García-Labiano, F., de Diego, L. F., & Adánez, J. (2018). Relevance of plant design on CLC process performance using a Cu-based oxygen carrier. *Fuel Processing Technology*, 171, 78–88.
<https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2017.09.015>
- Adánez-Rubio, I., Abad, A., Gayán, P., de Diego, L. F., García-Labiano, F., & Adánez, J. (2013). Performance of CLOU process in the combustion of different types of coal with CO₂ capture. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 12, 430–440. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2012.11.025>
- Arango, E. (2020). *Desarrollo de transportadores sólidos de oxígeno de bajo costo a base de hierro y/o manganeso disponibles en Colombia Utilizando CO e H₂ como combustibles en la Tecnología de CLC (CHEMICAL LOOPING COMBUSTION)*. Universidad del Valle.
- Arango, E., & Vasquez, F. (2016). Determinación de los parámetros cinéticos para la combustión usando minerales del suroccidente colombiano como transportadores sólidos de oxígeno. In *Escuela de Ingeniería Química: Ingeniero*. <https://bibliotecadigital.univalle.edu.co/handle/10893/16893>
- Bolaños, A., & Tobon, J. (2020). *Estudio de los métodos de densificación de biomasa para su aplicación en la densificación del residuo de corte de caña de azúcar*. Universidad del Valle.
- García-Labiano, F., de Diego, L. F., Adánez, J., Abad, A., & Gayán, P. (2005). Temperature variations in the oxygen carrier particles during their reduction and oxidation in a chemical-looping combustion system. *Chemical Engineering Science*, 60(3), 851–862. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2004.09.049>
- Mendiara, T., Pérez, R., Abad, A., De Diego, L. F., García-Labiano, F., Gayán, P., & Adánez, J. (2012). Low-cost Fe-based oxygen carrier materials for the iG-CLC process with coal. 1. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51(50), 16216–16229. <https://doi.org/10.1021/ie302157y>
- Peña, S., Forero, C., Velasco-Sarria, F., & Arango, E. (2024). Evaluation of the Mineral Manganese OXMN009 and OXMN009P in the Chemical Looping Combustion (CLC) Process Using Thermogravimetry. *Applied Sciences (Switzerland)*, 14(15). <https://doi.org/10.3390/app14156823>
- Pérez-Vega, R., Abad, A., Gayán, P., de Diego, L. F., García-Labiano, F., & Adánez, J. (2017). Development of

(Mn_{0.77}Fe_{0.23})₂O₃ particles as an oxygen carrier for coal combustion with CO₂ capture via in-situ gasification chemical looping combustion (iG-CLC) aided by oxygen uncoupling (CLOU). *Fuel Processing Technology*, 164, 69–79. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2017.04.019>

Teng, Y., & Zhang, D. (2020). Comprehensive study and comparison of equilibrium and kinetic models in simulation of hydrate reaction in porous media. *Journal of Computational Physics*, 404, 109094. <https://doi.org/10.1016/J.JCP.2019.109094>