

**Escuela Superior Politécnica del Litoral**

**Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas**

Valorización de residuos agroindustriales: simulación de producción de furfural  
a partir de la cascarilla de arroz

INGE-3001

**Proyecto Integrador**

Previo la obtención del Título de:

**Ingeniero Químico**

Presentado por:

Bohórquez Córdova Romina Nicole

Reyes Ortiz Stefany Dayana

Guayaquil - Ecuador

Año: 2025

## Dedicatoria

---

A mi abuelito, quien partió sin despedidas en medio de la incertidumbre, pero cuya fe inquebrantable en mí nunca vaciló. Antes de que siquiera comenzara este camino universitario, ya decías con certeza que lo lograría, que ya era parte de esta institución. Hoy, después de tu partida, cumplo esa convicción que siempre tuviste. Esta meta es tuya también, abuelito.

Donde quiera que estés, espero que sepas que lo logré, tal como siempre lo creíste.

**Romina Bohórquez Córdoba**

## Dedicatoria

---

De manera especial, dedico este trabajo a mis padres, quienes, con su ejemplo de responsabilidad y constancia, me enseñaron el valor del esfuerzo y la importancia de luchar por mis metas. A mi gran ejemplo en la industria, la Ing. Lisbeth Peñafiel, por ser la primera en brindarme la oportunidad de demostrar mis habilidades en el campo profesional. A Kevin, Natasha y Romina, por ser siempre un apoyo incondicional, representar el verdadero significado de la amistad y acompañarme como mis futuros colegas.

**Stefany Reyes Ortiz**

## Agradecimientos

---

Quiero expresar mi profundo agradecimiento a quienes hicieron posible este logro. A dios, por ser mi guía en los momentos de incertidumbre. A mis padres, por ser mi pilar inquebrantable y por entenderme incluso cuando ni yo misma lo hacía.

A mi enamorado Angel, por enseñarme a tener paciencia, a confiar en mí misma y a crecer como persona.

A Stefany, mi compañera de tesis y futura colega, por emprender juntas este último trayecto académico.

Y finalmente, a mis compañeros de 4 patitas, mis gatitos, cuya presencia silenciosa en incontables amanecidas fue el refugio emocional que necesitaba.

**Romina Bohórquez Córdova**

## Agradecimientos

---

Mi más sincero agradecimiento a mis docentes y tutores, en especial a la MSc. Andrea Barcia y a la Ing. Myriam Santos, quienes con sus conocimientos, orientación y exigencia académica contribuyeron significativamente a mi crecimiento profesional y personal, fomentando en mí el pensamiento crítico y el compromiso con la ingeniería y la ciencia.

**Stefany Reyes Ortiz**

## Declaración Expresa

---

Nosotras Bohórquez Córdova Romina Nicole y Reyes Ortiz Stefany Dayana acordamos y reconocemos que: La titularidad de los derechos patrimoniales de autor (derechos de autor) del proyecto de graduación corresponderá al autor o autores, sin perjuicio de lo cual la ESPOL recibe en este acto una licencia gratuita de plazo indefinido para el uso no comercial y comercial de la obra con facultad de sublicenciar, incluyendo la autorización para su divulgación, así como para la creación y uso de obras derivadas. En el caso de usos comerciales se respetará el porcentaje de participación en beneficios que corresponda a favor del autor o autores. La titularidad total y exclusiva sobre los derechos patrimoniales de patente de invención, modelo de utilidad, diseño industrial, secreto industrial, software o información no divulgada que corresponda o pueda corresponder respecto de cualquier investigación, desarrollo tecnológico o invención realizada por nosotros durante el desarrollo del proyecto de graduación, pertenecerán de forma total, exclusiva e indivisible a la ESPOL, sin perjuicio del porcentaje que nos corresponda de los beneficios económicos que la ESPOL reciba por la explotación de nuestra innovación, de ser el caso. En los casos donde la Oficina de Transferencia de Resultados de Investigación (OTRI) de la ESPOL comunique a los autores que existe una innovación potencialmente patentable sobre los resultados del proyecto de graduación, no se realizará publicación o divulgación alguna, sin la autorización expresa y previa de la ESPOL

Guayaquil, 17 de octubre del 2025.

---

Romina Nicole

Bohórquez Córdova

---

Stefany Dayana

Reyes Ortiz

## **Evaluadores**

---

**MSc. María Verónica Ordoñez**

**Pazmiño**

Profesor de Materia

---

**MSc. Andrea Fernanda Barcia**

**Quimí**

Tutor de proyecto

## Resumen

El sector arrocero ecuatoriano genera anualmente 388.885 toneladas de cascarilla. Este residuo se dispone de manera inadecuada mediante quema, lo que contribuye con 54,62 kt CO<sub>2</sub>eq de emisiones anuales. Este trabajo evalúa la producción de furfural mediante hidrólisis ácida como una alternativa sostenible para valorizar este subproducto agroindustrial.

Se implementó un modelo cinético de cuatro reacciones en Aspen Plus V14 que considera las transformaciones simultáneas de xilosa-intermediario-furfural-productos de degradación. Para validar el modelo, comparamos sus predicciones con datos experimentales de Ershova et al. (2015) y obtuvimos resultados excelentes: un coeficiente de determinación  $R^2 = 94.19\%$  y un error relativo promedio de 8.78%.

Aplicamos un diseño experimental factorial  $3 \times 2 \times 3$  variando temperatura (160-200°C), concentración de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (0.5-1.0M) y tiempo de residencia (30-90 min). Las condiciones óptimas identificadas fueron 180°C, 0.5M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> y 60-90 minutos. Estas condiciones maximizan el rendimiento (57-59%) mientras minimizan la formación de huminas.

El análisis económico determinó una inversión de capital (CAPEX) de \$8.2 millones y costos operativos anuales (OPEX) de \$14.5 millones. Con un período de recuperación de 5 años y una TIR del 20%, los resultados confirman la viabilidad técnico-económica del proceso para la industria arrocera ecuatoriana.

**Palabras Clave:** Hidrólisis ácida, Biomasa lignocelulósica, Simulación Aspen Plus, Bioeconomía circular, Xilosa.

## **Abstract**

*The Ecuadorian rice sector generates annually 388,885 tons of rice husk. This residue is inadequately disposed of through burning, which contributes 54.62 kt CO<sub>2</sub>eq of annual emissions. This work evaluates furfural production via acid hydrolysis as a sustainable alternative for valorizing this agroindustrial byproduct.*

*A four-reaction kinetic model was implemented in Aspen Plus V14 that considers the simultaneous transformations of xylose-intermediate-furfural-degradation products. To validate the model, we compared its predictions with experimental data from Ershova et al. (2015) and obtained excellent results: a coefficient of determination  $R^2 = 94.19\%$  and an average relative error of 8.78%.*

*We applied a  $3 \times 2 \times 3$  factorial experimental design varying temperature (160-200°C), H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> concentration (0.5-1.0M), and residence time (30-90 min). The optimal conditions identified were 180°C, 0.5M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, and 60-90 minutes. These conditions maximize yield (57-59%) while minimizing humin formation.*

*The economic analysis determined a capital investment (CAPEX) of \$8.2 million and annual operating costs (OPEX) of \$14.5 million. With a payback period of 5 years and an IRR of 20%, the results confirm the techno-economic feasibility of the process for the Ecuadorian rice industry.*

**Keywords:** *Acid hydrolysis, Lignocellulosic biomass, Aspen Plus simulation, Circular bioeconomy, Xylose.*

## Índice general

Resumen.....	8
Abstract.....	9
Índice general.....	10
Índice de ilustraciones.....	13
Índice de tablas .....	14
Capítulo 1.....	15
1.    Introducción .....	16
1.2.    Justificación del problema.....	19
1.3    Objetivos .....	20
1.3.1.    Objetivo general.....	20
1.3.2.    Objetivos Específicos.....	20
1.4    Marco teórico .....	21
1.4.1.    Contexto de la producción arroceras y generación de residuos en Ecuador .....	21
1.4.1.1.    Economía circular como solución a gestión de la cascarilla.....	22
1.4.1.2.    Prácticas actuales de disposición en Ecuador: Impacto ambiental y económico	
22	
1.4.2.    Cascarilla de arroz.....	23
1.4.2.1    Compuestos derivables de la cascarilla de arroz.....	24
1.4.3    Producción de furfural .....	25
1.4.3.1    Fundamentos del proceso de hidrólisis ácida.....	25

1.4.3.2.	Deshidratación de xilosa .....	26
1.4.3.3.	Reacciones secundarias y pérdida de rendimiento.....	27
2.	Metodología.....	30
2.1.	Formulación de alternativas de solución.....	30
2.2.	Recopilación de parámetros y desarrollo del modelo cinético.....	32
2.3.	Identificación de variables y factores del sistema.....	35
2.4.	Simulación del proceso completo .....	36
2.5.	Validación estadística del modelo cinético .....	1
2.6.	Diseño experimental factorial .....	3
2.7.	Análisis estadístico mediante ANOVA.....	4
2.7.1.	Análisis de curvas de comportamiento químico .....	5
2.8.	Análisis Técnico-Económico .....	5
3.	Resultados y análisis.....	9
3.1	Parámetros cinéticos del modelo implementado .....	9
3.2.	Validación del modelo cinético.....	10
3.2.1.	Planteamiento de la hipótesis estadística .....	10
3.2.2.	Comparación con datos experimentales.....	11
3.2.3.	Análisis de las métricas de validación .....	12
3.2.4.	Evaluación de la hipótesis y conclusión de validación .....	13
3.3.	Análisis paramétrico: Influencia de las variables operativas .....	14
3.3.1.	Efecto de la temperatura .....	14

3.3.2.	Efecto de la concentración del ácido sulfúrico .....	16
3.3.3.	Efecto del tiempo de residencia .....	18
3.3.4.	Selectividad.....	19
3.3.5.	Selección de las condiciones operacionales.....	21
3.4.	Análisis estadístico .....	24
3.4.1.	Validación del modelo cinético mediante regresión .....	24
3.4.2.	ANOVA univariado .....	26
3.4.3.	Modelo Lineal General: Efectos de temperatura y tiempo de residencia .....	26
3.4.4.	Integración del análisis estadístico y cinético: Análisis de curvas de sensibilidad	
	27	
3.5	Análisis de Rentabilidad del Proceso .....	28
3.5.1.	Impacto ambiental.....	31
4.	Conclusiones y recomendaciones .....	34
4.1.	Conclusiones .....	34
4.2.	Recomendaciones.....	35
5.	Referencias.....	37
6.	Apéndice .....	42

## Índice de ilustraciones

<b>Ilustración 1</b> .....	31
<b>Ilustración 2</b> .....	1
<b>Ilustración 3</b> .....	12
<b>Ilustración 4</b> .....	15
<b>Ilustración 5</b> .....	15
<b>Ilustración 6</b> .....	16
<b>Ilustración 7</b> .....	16
<b>Ilustración 8</b> .....	17
<b>Ilustración 9</b> .....	18
<b>Ilustración 10</b> .....	19
<b>Ilustración 11</b> .....	20
<b>Ilustración 12</b> .....	22
<b>Ilustración 13</b> .....	23
<b>Ilustración 14</b> .....	27

## Índice de tablas

<b>Tabla 1</b> .....	9
<b>Tabla 2</b> .....	11
<b>Tabla 3</b> .....	12
<b>Tabla 4</b> .....	21
<b>Tabla 5</b> .....	25
<b>Tabla 6</b> .....	25
<b>Tabla 7</b> .....	26
<b>Tabla 8</b> .....	27
<b>Tabla 9</b> .....	29
<b>Tabla 10</b> .....	29
<b>Tabla 11</b> .....	30
<b>Tabla 12</b> .....	31

# Capítulo 1

## 1. Introducción

El sector agrícola desempeña un papel fundamental en la economía del Ecuador, al aportar aproximadamente el 9,5 % del PIB global (Banco Mundial, 2024); no obstante, los residuos generados tras la cosecha y el procesamiento de productos agrícolas suelen carecer de una gestión y aprovechamiento adecuados. En este contexto, el presente trabajo aborda la valorización de la cascarilla de arroz, considerando que el cultivo de arroz es el cuarto con mayor producción al nivel del Ecuador, cosechándose alrededor de 1,944 millones de toneladas por año que generan alrededor del 20% de cascarilla (Instituto Nacional de Estadística y Censos, 2025). El propósito es analizar distintos aspectos asociados a su aprovechamiento, con el fin de generar beneficios sociales y económicos al ofrecer a los trabajadores rurales la posibilidad de comercializar este residuo y fomentar nuevas fuentes de empleo. Asimismo, este trabajo busca identificar alternativas ambientales, mediante la reducción de prácticas inadecuadas de disposición, como la quema y la consecuente mitigación de la huella ecológica de la agroindustria. Particularmente, la producción de compuestos químicos plataforma como el furfural, a partir de residuos agrícolas, cobró creciente interés en las últimas décadas con un mercado global que se valoró en USD 556,74 millones en 2022 y que se proyecta en más de USD 954 millones para 2030 (IMARC Group, 2025), evidenciando su potencial económico y estratégico dentro de la bioeconomía circular.

En el contexto ecuatoriano, la provincia del Guayas concentra el 67,7% de la producción nacional de arroz, generando aproximadamente 263.000 toneladas de cascarilla (INEC, 2024) destacándose los cantones Daule (capital arrocería del Ecuador) y Nobol. En estas zonas, la práctica predominante de quema a cielo abierto genera material particulado que deteriora la calidad del aire y la salud de las comunidades rurales, además de provocar pérdidas de

nutrientes del suelo y riesgos de incendios no controlados. Esta problemática evidencia la necesidad urgente de alternativas sostenibles de gestión para este residuo agroindustrial.

Frente a esta situación, la simulación de procesos constituye una metodología de bajo costo que permite evaluar técnica y económicamente alternativas de valorización antes de comprometer inversiones de capital. Este enfoque basado en un modelado computacional genera información cuantitativa confiable sobre rendimientos esperados y viabilidad económica, proporcionando a actores del sector arrocero herramientas objetivas para la toma de decisiones.

### **1.1.Descripción del problema**

El presente proyecto se desarrolla en colaboración con una piladora de arroz ubicada en el cantón Nobol, provincia del Guayas, zona de alta producción arrocera en el Ecuador, tal como se menciona en la introducción de este proyecto. Se trata de una empresa familiar de pequeña escala que cuenta con cinco trabajadores permanentes y se dedica al descascarillado y pulido de arroz para productores locales que genera aproximadamente 8 toneladas mensuales de cascarilla, acumulando entre 40 y 50 toneladas anuales. La infraestructura es limitada y no dispone de sistemas de almacenamiento ni de aprovechamiento del residuo, lo que dificulta su gestión adecuada.

La acumulación de cascarilla de arroz es un problema operativo, económico y ambiental. En lo operativo, el residuo ocupa espacio útil porque la cascarilla, aunque liviana, es muy voluminosa; por ejemplo, la producción de ocho toneladas al mes llena de 65 a 80 metros cúbicos que se acumulan en el área lateral del galpón principal, la cual tiene alrededor de 40 a 50 metros cuadrados. La cascarilla cae allí de forma directa desde el proceso de descascarillado, que no tiene techado. Por lo tanto, esta acumulación interfiere en el trabajo diario: el polvillo ensucia el área, daña motores de los equipos y provoca un paro en la operación. Además, afecta

a los estibadores cuando necesitan despachar sacos a los camiones, incluso crea una condición peligrosa, ya que la cascarilla en el piso puede volverse resbaladiza.

A esto se suma el riesgo de combustión. La cascarilla queda expuesta al sol y, al ser muy seca y tiene un contenido alto de sílice, aumenta la posibilidad de incendio. Además, la acumulación a cielo abierto atrae plagas, ya que animales e insectos buscan restos de alimento. En invierno, la cascarilla absorbe humedad con facilidad, lo cual favorece la aparición de gorgojos que, posteriormente, contaminan el arroz almacenado.

Desde el punto de vista económico, la gestión de la cascarilla representa un problema significativo. La piladora genera 8 toneladas mensuales para las cuales apenas existen alternativas de disposición. Según la normativa vigente, las empresas agroindustriales deben manejar sus propios residuos; por consiguiente, no reciben apoyo municipal ni del servicio de recolección, el cual carece de capacidad para transportar estos volúmenes. La única opción viable es contratar un volquete privado: cada viaje cuesta entre 30 y 50 dólares y solo puede transportar de 3 a 4 toneladas debido al carácter voluminoso del material. Retirar la producción mensual completa requiere de 2 a 3 viajes, lo que representa un gasto de 90 a 150 dólares exclusivamente en transporte.

A esto costo se añade el de las horas laborales perdidas cuando se detiene la producción para cargar el material, equivalente a 15 o 20 dólares por jornada de carga. Sumando ambos rubros, la disposición mensual alcanza entre 105 y 170 dólares. La venta del residuo tampoco constituye una alternativa económicamente factible: los compradores ocasionales pagan apenas entre 2 y 5 dólares por tonelada, lo que genera ingresos totales de 16 a 40 dólares mensuales por las 8 toneladas producidas. Al restar estos ingresos de los costos operativos, la comercialización a estos precios no resulta viable ni rentable para la empresa.

Desde la perspectiva ambiental, la quema del residuo libera gases de efecto invernadero y material particulado que deteriora la calidad del aire y la salud de las comunidades rurales cercanas.

## **1.2. Justificación del problema**

La presente investigación transforma un modelo cinético teórico en una herramienta ingenieril validada que permita el diseño confiable de procesos de producción de furfural obtenido de la cascarilla de arroz, cerrando una brecha crítica de conocimiento aplicado que limita el desarrollo de bioprocesos en Ecuador. La validación sistemática del modelo, mediante simulación rigurosa y comparación estadística con datos experimentales de estudios internacionales, es fundamental porque reduce drásticamente la incertidumbre técnica en etapas tempranas de desarrollo. Sin validación, los errores en predicción de rendimientos pueden alcanzar  $\pm 50\%$ , propagándose a estimaciones de viabilidad económica (VAN, TIR), haciendo que proyectos potencialmente rentables sean descartados, o, peor aún, que proyectos inviables sean implementados con pérdidas financieras significativas. Con un modelo validado, la incertidumbre se reduce a rangos manejables, permitiendo la toma de decisiones fundamentada en datos cuantitativos confiables. Este trabajo resulta particularmente relevante en el contexto ecuatoriano por tres razones convergentes: en primer lugar, por la magnitud del recurso disponible; a nivel nacional, las 388.885 toneladas de cascarilla de arroz generadas anualmente representan un importante potencial teórico de producción. En segundo lugar, por la urgencia ambiental; la quema de cascarilla, práctica común en el sector, emite aproximadamente 54,62 *kt de CO<sub>2</sub> – eq* y afecta la salud pública en zonas arroceras densamente pobladas como Guayas y Los Ríos. Finalmente, en tercer lugar, por el alineamiento con los compromisos internacionales, pues este proyecto contribuye directamente con las metas de la II Contribución Determinada a Nivel Nacional (NDC) del Ecuador, mediante la cual el país se compromete a

reducir en un 7% las emisiones de gases de efecto invernadero entre enero de 2026 y diciembre de 2035.

Desde la perspectiva del conocimiento científico-tecnológico, este estudio representa un avance en ingeniería de reacción química aplicada a biomasa, campo donde predominan modelos empíricos de "caja negra" con limitada capacidad predictiva extrapolable. Finalmente, el proyecto se justifica por su viabilidad metodológica, pues no requiere inversión en equipamiento experimental costoso ni consumibles de laboratorio, siendo ejecutable completamente mediante *software* de simulación de acceso académico y datos abiertos de literatura científica, maximizando la eficiencia de recursos en contexto universitario.

### **1.3 Objetivos**

#### ***1.3.1. Objetivo general***

Evaluar el proceso de conversión de cascarilla de arroz en furfural mediante simulación de hidrólisis ácida para la valorización del residuo agroindustrial.

#### ***1.3.2. Objetivos Específicos***

1. Validar el modelo cinético de la reacción de hidrólisis a escala piloto mediante su implementación en una herramienta de simulación de procesos químicos.
2. Seleccionar las condiciones operativas del proceso que maximicen el rendimiento de furfural.
3. Evaluar el desempeño técnico-económico del proceso optimizado mediante balances de masa y energía, y estimación de costos de inversión y operación.

## 1.4 Marco teórico

### *1.4.1. Contexto de la producción arroceras y generación de residuos en Ecuador*

En Ecuador, el arroz es uno de los cultivos de mayor importancia en la economía agrícola del país. Según datos del Instituto Nacional de Estadística y Censos en el año 2024 la superficie sembrada de arroz a nivel nacional alcanzó las 404.932 hectáreas, con una producción total de 1.944.426 toneladas métricas de arroz en cáscara. La distribución geográfica de esta producción muestra una mayor concentración en la provincia del Guayas, que aporta el 67.7% de la producción total, seguida de Los Ríos con el 27.3% y Manabí con 4.9%, según los datos de participación en superficie sembrada del año 2023 (INEC, 2024).

Esta concentración productiva implica que anualmente se genera aproximadamente 388.885 toneladas de cascarilla de arroz a nivel nacional, de las cuales cerca de 263.000 toneladas corresponden únicamente a la provincia del Guayas, los cantones con mayor actividad arroceras incluyen Daule, Samborondón, Yaguachi, Santa Lucía, Palestina y Nobol, conformando una zona productiva.

La estructura de la cadena productiva del arroz en Ecuador presenta particularidades: los productores, en su mayoría pequeños y medianos (el 79% cultiva menos de 5 hectáreas según datos del SIPA), cultivan y cosechan el arroz en cáscara, pero no procesan el grano (Ibarra et al., 2023). El procesamiento se realiza en piladoras independientes que funcionan como prestadoras de servicio de descascarado y pulido, cobrando por tonelada procesada o mediante acuerdos de compra directa del arroz en cáscara.

Según el Ministerio de Agricultura y Ganadería, existen aproximadamente 500 piladoras a nivel nacional, concentradas principalmente en las provincias de Guayas y Los Ríos (Ibarra et al., 2023). Solo en la provincia del Guayas operan 181 piladoras activas, mientras que Los Ríos cuenta con 39 (Ministerio del Ambiente, 2024)

#### ***1.4.1.1. Economía circular como solución a gestión de la cascarilla***

La economía circular emerge como paradigma que replantea la relación entre producción, consumo y gestión de residuos. Este concepto, popularizado por la Fundación Ellen MacArthur (2021), propone sistemas donde los materiales circulan continuamente manteniendo su valor, en contraste con el modelo lineal “extraer, producir, consumir y desechar”. Aplicado al sector agrícola, este enfoque transforma la concepción de residuos orgánicos desde “desechos” hacia “recursos con potencial de aprovechamiento”. Según Reséndiz Vega et al. (2024), este paradigma busca mantener productos, componentes y materiales en su máxima utilidad y valor en todo momento.

#### ***1.4.1.2. Prácticas actuales de disposición en Ecuador: Impacto ambiental y económico***

La problemática asociada al manejo inadecuada de la cascarilla de arroz se evidencia en las prácticas actuales de disposición. Actualmente, el 35% de este subproducto se utiliza de manera productiva, principalmente en la industria florícola como sustrato y en la alimentación de criaderos de animales, el 65% restante se maneja inadecuadamente; aproximadamente el 50% se quema directamente en las piladoras, el 25% se abandona en terrenos baldíos. El 15% se coloca en borden de carreteras, el 5% se deposita en ríos y esteros, y el 5% restante es dispersado por el viento (López et al., 2021). Esta práctica de quema indiscriminada tiene consecuencias ambientales severas, contribuyendo significativamente a las Emisiones de Gases de Efecto Invernadero. De acuerdo con el Inventario Nacional de Gases de Efecto Invernadero de Ecuador (Ministerio de Ambiente y Energía, 2024), la quema de residuos agrícolas en campos de cultivo generó  $54,62 \text{ kt } CO_2 - eq$  en el año 2022, representando el 0.5% de las emisiones totales del sector agrícola, la cual a su vez contribuyó con  $183,01 \text{ kt } CO_2 - eq$  (0.27% del total nacional de emisiones de  $CO_2$ ). Estas cifras evidencian que, aunque la contribución porcentual pueda parecer modesta, el volumen de emisiones derivadas de la

quemado de biomasa agrícola, incluyendo la cascarilla de arroz, constituye una fuente relevante de contaminación atmosférica. Además, estas emisiones no solo incluyen  $CO_2$ , sino también metano ( $CH_4$ ), óxidos de nitrógeno ( $NO_x$ ) y material particulado, todos con efectos perjudiciales sobre la salud humana y el medio ambiente.

#### **1.4.2. Cascarilla de arroz**

La cascarilla constituye la capa protectora externa del grano de arroz y representa aproximadamente el 20% del peso total del arroz cosechado. La composición química de la cascarilla de arroz es única y la diferencia de otros residuos agrícolas. Según Robinson Ubau et al. (2022), su estructura está conformada principalmente por 3 componentes poliméricos: celulosa (334,40 – 45,85%), hemicelulosa (29,30 – 45,48%) y lignina (18,49 – 26,10%). La presencia importante de hemicelulosa rica en pentosanos como la xilosa, hace que la cascarilla sea una excelente materia prima para producir furfural, un compuesto orgánico de alto valor agregado.

Un componente distintivo de la cascarilla de arroz es su elevado contenido de sílice ( $SiO_3$ ), que oscila entre 15% y 20% del peso seco, significativamente superior al encontrado en otros residuos agrícolas como bagazo de caña (2-3%), o cascarilla de café (1-2%). Esta característica tiene implicaciones como que la sílice hace que la cascarilla sea inadecuada para alimentación directa de animales, limita su uso como sustrato en compostaje, y plantea diseños técnicos de procesos de combustión por tendencia a formar depósitos vítreos en equipos (Bakili et al., 2025).

La fracción de hemicelulosa presenta gran composición en pentosanos, y a diferencia de la hemicelulosa de maderas blandas (ricas en hexosanos como mananos y galactanos), la hemicelulosa de cascarilla de arroz está constituida principalmente por xilano, un polímero de

xilosa con ramificaciones de arabinosa. Según análisis de cascarilla ecuatoriana reportados por Bastidas & Quimi (2024), el contenido de pentosanos oscila entre 18% y 22% en base seca, valores comparables con bagazo de caña de azúcar (25-30%) pero superiores a residuos forestales típicos (12-16%). La fracción de hemicelulosa presenta gran composición en pentosanos, y a diferencia de la hemicelulosa de maderas blandas (ricas en hexosanos como mananos y galactanos), la hemicelulosa de cascarilla de arroz está constituida principalmente por xilano, un polímero de xilosa con ramificaciones de arabinosa.

#### ***1.4.2.1 Compuestos derivables de la cascarilla de arroz***

La biomasa lignocelulósica – básicamente celulosa, hemicelulosa y lignina – puede convertirse en una variedad de productos químicos útiles. Este potencial ha captado la atención tanto de investigadores como de la industria, especialmente ahora que se busca alternativas más sostenibles a los combustibles fósiles.

Cada fracción de esta biomasa tiene su propio camino de transformación. La hemicelulosa, puede hidrolizarse para obtener xilosa, que luego se deshidrata a furfural. Cuando las condiciones se optimizan bien, usando sistemas bifásicos, se alcanzan rendimientos superiores al 77% (Pierrat & García-Triñanes, 2024). La celulosa toma otra ruta, primero se hidroliza a glucosa, que puede isomerizarse a fructosa y después deshidratarse para dar 5-hidroximetilfurfural (HMF). Este HMF es particularmente valioso porque sirve como precursor del ácido levulínico, logrando rendimientos de hasta 85% con los catalizadores adecuados (Wang et al., 2019). Y la lignina, esa fracción que usualmente se desaprovecha, resulta ser la mina de oro para compuestos aromáticos como vainillina y siringaldehído, especialmente cuando se fraccione mediante procesos catalíticos reductivos con catalizadores de Ru/C, donde se obtienen hasta 24% de monómeros aromáticos.

### ***1.4.3 Producción de furfural***

El furfural (2-furaldehído) es un aldehído heterocíclico aromático de cinco miembros que se ha consolidado como uno de los compuestos más versátiles que se pueden obtener de biomasa lignocelulósica y este compuesto se lo utiliza como precursor para fabricar resinas furánicas empleadas en fundición metalúrgica, alcohol furfúrico para resinas termoestables, ácido levulínico como intermediario para biocombustibles, tetrahidrofurano como solvente de laboratorio y diversos productos farmacéuticos y agroquímicos. Adicionalmente, el furfural ha ganado relevancia en el contexto de la transición energética como portador orgánico líquido de hidrógeno (LOHC, por sus siglas en inglés), donde actúa como molécula transportadora que facilita el almacenamiento y transporte seguro de hidrógeno.

#### ***1.4.3.1 Fundamentos del proceso de hidrólisis ácida***

El proceso para producir furfural se basa en la hidrólisis ácida de las pentosanas presentes en la hemicelulosa, usando catalizadores como ácido sulfúrico y clorhídrico. Durante esta etapa, la hemicelulosa se hidroliza en monosacáridos como xilosa y arabinosa bajo condiciones ácidas, y en sistemas catalíticos homogéneos, la hidrólisis de hemicelulosa se considera una reacción de primer orden. Como explican Edumujeze et al. (2025), “El furfural, una importante molécula plataforma obtenida exclusivamente a partir de la ciclodeshidratación de la xilosa, tiene numerosas aplicaciones en una amplia gama de sectores”.

Durante esta transformación, los polímeros de xilano se rompen liberando xilosa, la cual pierde tres moléculas de agua para formar el anillo característico del furfural. Las materias primas con alto contenido de pentosas o pentosanos se calientan a temperaturas entre 150 y 200°C bajo condiciones ácidas, y el furfural se forma a través de múltiples pasos de deshidratación desde la xilosa. Sherif et al. (2021) reporta que en su proceso de hidrólisis de paja de arroz “la reacción de hidrólisis fue estudiada por Hua et al. A una temperatura de funcionamiento de 160

– 200°C y un tiempo de retención de 3h. El rendimiento de furfural fue del 75% en condiciones óptimas” (p.35).

La cinética de estas reacciones es compleja y dependiente de las condiciones operativas. La temperatura al aumentar acelera tanto la hidrólisis de la hemicelulosa como la deshidratación de la xilosa a furfural, pero también se promueven reacciones secundarias indeseadas. La concentración del catalizador también es importante, Almhofer et al. (2023), observó que en general, la conversión de furfural aumenta con la disminución del valor de pH de la solución, lo que apoya una ruta hidrolítica de degradación del furfural. Sin embargo, a concentraciones muy altas de ácido pueden favorecerse vías de degradación que compiten con la formación deseada de furfural.

El tiempo de reacción debe balancearse, debido a que se necesita suficiente tiempo para que la hemicelulosa se hidrolice y la xilosa se deshidrate, pero cada minuto adicional que el furfural permanece en el medio ácido a alta temperatura es una oportunidad más para que se degrade. Finalmente, la relación sólido-líquido afecta tanto a la transferencia de masa como la concentración efectiva de reactantes y productos. Wang et al. (2019), investigaron la conversión de mazorca de maíz bajo relaciones agua/sólido extremadamente bajas y lograron un alto rendimiento de furfural bajo una carga de sólidos alta y con una relación agua/sólido de 0.5:1 (v/p), lo cual permitió que después de la reacción, no existiera fase acuosa y el furfural se acumulara completamente en la fase de tolueno, facilitando así la separación posterior.

#### ***1.4.3.2. Deshidratación de xilosa***

El furfural se forma cuando la xilosa sufre deshidratación en medio ácido. La reacción arranca cuando uno de los grupos hidroxilo de la xilosa se protona y libera una molécula de agua. Ese paso genera un carbocatión. A partir de ahí, el anillo de la xilosa se abre y ocurre una serie de

deshidrataciones que eliminan tres moléculas de agua en total. Después, la estructura se vuelve a cerrar y se forma el anillo furánico que da origen al furfural (Tortajada, 2024)

La conversión catalítica de xilosa a furfural demanda condiciones de temperatura elevada y la presencia de catalizadores ácidos de alta actividad. Los catalizadores ácidos líquidos convencionales, tales como  $H_2SO_4$ ,  $HCl$  y  $H_3PO_4$ , han demostrado ser altamente efectivos en diversos procesos industriales debido a sus elevadas constantes de acidez ( $K_a$ ) y su capacidad de interacción eficiente con las moléculas reactivas (Sánchez et al., 2025).

#### ***1.4.3.3. Reacciones secundarias y pérdida de rendimiento***

El proceso de obtención de furfural tiene sus complicaciones. Una vez que se forma el furfural, este puede degradarse en las mismas condiciones ácidas y de alta temperatura del reactor. Puede reaccionar con otros compuestos para formar resinas insolubles (huminas), como lo menciona Edumujeze et al. (2025)“El proceso de producción industrial se ve limitado actualmente por la degradación de la xilosa y el furfural a huminas en el medio acuoso”, las cuales representan pérdida directa de producto. Por lo tanto, el furfural puede reaccionar con otros compuestos presentes para formar estas huminas, el anillo puede abrirse generando ácidos orgánicos, o puede polimerizarse formando productos no deseados.

La degradación del furfural ocurre a través de llamados “reacciones de resinificación”.Al Ghatta et al. (2023) menciona que, bajo condiciones básicas, el furfural “sufre descomposición... lo que da lugar a subproductos de humina, que son perjudiciales para la actividad catalítica” (p.304), lo cual implica un problema porque estas huminas no solo representan pérdida de producto, sino que también puede depositarse sobre los catalizadores y equipos, reduciendo la eficiencia del proceso con el tiempo.

El furfural tiene múltiples grupos funcionales, y por lo tanto pueden ocurrir diversas reacciones secundarias, como sustituciones electrofílicas, reacciones aldólicas o de Diels-Alder, que reducen la eficiencia del proceso (Almhofer et al., 2023). Los rendimientos industriales típicamente rondan el 50%, Sherif et al. (2021) reporta que “La cantidad de furfural obtenida como producto final del proceso representa un rendimiento del 73 % por cada 100 kg/h de paja de arroz procesada” (p. 38) en su proceso optimizado, lo cual es considerado un buen rendimiento. La diferencia entre el rendimiento teórico y los valores prácticos se deben principalmente a las reacciones de degradación.

El tipo de reactor también influye en el rendimiento. Las configuraciones de reactor tipo batch causan que el furfural permanezca demasiado tiempo en el medio ácido acuoso, permitiendo que ocurran reacciones de degradación. Por eso los sistemas con extracción continua ha mostrado mejores resultados.

## **Capítulo 2**

## **2. Metodología.**

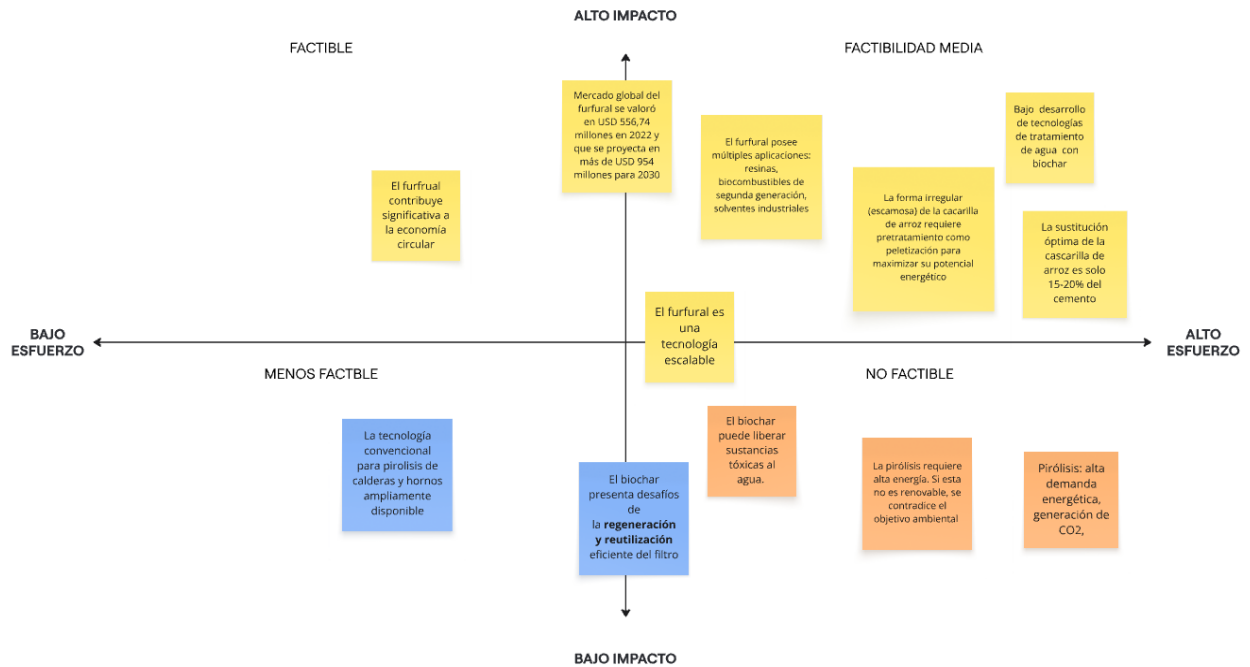
### **2.1. Formulación de alternativas de solución**

La valorización de la cascarilla de arroz presentó múltiples alternativas tecnológicas con diferentes niveles de viabilidad económica. Las rutas convencionales incluyen la combustión directa para generación de energía (Lantasi et al., 2020), el uso de cenizas como sustituto parcial del cemento (Patah & Dasar, 2022), la producción de biochar como adsorbente de metales pesados y compuestos orgánicos volátiles (Khalil et al., 2020) y la producción de furfural mediante hidrólisis ácida. Esta última alternativa destacó por representar la mayor generación de valor agregado, con un mercado global de USD 556.74 millones en 2022 proyectado a USD 954 millones para 2030 (IMARC Group, 2025).

La producción de furfural mediante hidrólisis ácida se selecciona como la alternativa óptima después de evaluar una matriz de impacto-dificultad de la ilustración 1. Esta ruta se ubicó en el cuadrante de alto impacto con factibilidad técnica media, distinguiéndose por su escalabilidad y múltiples aplicaciones industriales en sectores farmacéutico, petroquímico y de resinas, mientras que las alternativas de biochar y pirólisis se ubicaron en bajo impacto por desafíos de regeneración y reutilización. La composición rica en pentosanos de la cascarilla de arroz confirmó su idoneidad para este proceso, con contenidos reportados de xilano entre 18% y 22% en base seca (Cárdenas, 2023).

## Ilustración 1

### Matriz de impacto dificultad - Mejor alternativa de valorización de la cascarilla de arroz



Una vez seleccionada la ruta de furfural, el desafío consistió en determinar condiciones operacionales que maximizaran el rendimiento del producto deseado, considerando las cuatro reacciones simultáneas: conversión de xilosa a un intermediario, formación de furfural a partir del intermediario, condensación entre especies que genera productos de degradación solubles, y degradación térmica.

Dada la naturaleza exploratoria del proyecto, se optó por una metodología basada en simulación computacional. Este enfoque permitió desarrollar un modelo cinético fundamentado en parámetros de literatura validada, realizar experimentación virtual mediante *software* de simulación de procesos, y aplicar análisis estadístico para cuantificar la significancia de efectos.

El trabajo adoptó enfoque mixto integrando componentes cualitativos y cuantitativos. La metodología cualitativa se aplicó en la recopilación de datos mediante revisión bibliográfica

sistemática para identificar y extraer parámetros cinéticos reportados en literatura. La metodología cuantitativa aplicó experimentación mediante simulador con técnicas de manejo de variables, midiendo constantes cinéticas, rendimientos, conversiones y consumos energéticos procesados mediante análisis estadístico inferencial.

Para implementar esta metodología mixta, el trabajo se estructuró en siete fases: recopilación de parámetros cinéticos, desarrollo de código computacional, simulación exploratoria del proceso con múltiples combinaciones, validación estadística del modelo mediante comparación con datos experimentales de literatura, diseño experimental factorial, análisis de varianza (ANOVA), y evaluación técnico-económica del proceso óptimo identificado. Esta secuencia garantizó flujo lógico desde fundamentos teóricos hasta conclusiones de factibilidad, maximizando trazabilidad y reproducibilidad.

## **2.2. Recopilación de parámetros y desarrollo del modelo cinético**

La revisión bibliográfica se enfocó en obtener factores pre-exponenciales y energías de activación para las cuatro reacciones del mecanismo propuesto. Se realizó búsquedas en bases de datos especializadas como ScienceDirect, Web of Science y Scopus, identificando estudios sobre hidrólisis ácida de pentosas que reportaran parámetros cinéticos mediante metodologías experimentales. En ese sentido, se priorizaron investigaciones en las que los rangos de condiciones operacionales (temperatura, concentración del catalizador y concentración de reactivos) estuvieran relacionados con los de interés, maximizando así la aplicabilidad directa de los parámetros extraídos.

El modelo cinético se fundamentó en el mecanismo de reacción propuesto por Bastidas & Quimi (2024), el cual consideró cuatro etapas cinéticas principales que ocurren simultáneamente en el reactor de hidrólisis. La primera reacción (Ecuación 1.1) representa la deshidratación de xilosa para formar un intermediario reactivo de tipo pentosa deshidratada.

La segunda reacción (Ecuación 1.2) describe la ciclización y deshidratación posterior de este intermediario para generar furfural. La tercera reacción (Ecuación 1.3) corresponde a la condensación entre especies reactivas que conduce a la formación de productos de degradación solubles. Finalmente, la cuarta reacción (Ecuación 1.4) describe la degradación térmica del furfural mismo hacia resinas insolubles.



Donde:

X = Xilosa (reactivo principal)

I = Intermediario

F = Furfural (producto deseado)

D1 = Subproducto de condensación

D2 = Subproducto de degradación

Cada reacción se modeló mediante expresiones de velocidad de reacción tipo ley de potencia con dependencia de temperatura según ecuación de Arrhenius (Ecuación 1.5), donde las constantes cinéticas se expresaron como función exponencial de la temperatura, incorporando las energías de activación como parámetros característicos de cada transformación.

$$K = A e^{-EA/RT} \quad \text{Ecuación 1.5}$$

Los parámetros de energía de activación y factor pre-exponencial se obtuvieron a partir de las investigaciones de Köchermann, et al. (2018), además, se incorporó el efecto catalítico del ácido sulfúrico mediante una dependencia potencial de las constantes cinéticas respecto a la concentración de iones hidronio. Una característica clave de este modelo es la consideración de la dependencia cuadrática de las constantes cinéticas respecto a la concentración de iones hidronio ( $H_3O^+$ ) debido a las condiciones de alta acidez presentes en el proceso. Este término de catálisis ácida se fundamentó en el mecanismo de protonación de grupos funcionales en las moléculas de azúcar, el cual acelera las reacciones de deshidratación. El orden de reacción respecto al catalizador se estableció considerando el mecanismo de catálisis homogénea reportado en literatura, donde la concentración de protones disponibles determina la velocidad de las transformaciones químicas.

Finalizada la recopilación de literatura, se desarrolló un código Python que implementó la resolución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que describen el comportamiento dinámico del reactor, también se incluyó funcionalidades para el cálculo de las constantes cinéticas en función de la temperatura mediante la ecuación de Arrhenius, considerando las energías de activación previamente recopiladas.

Por otro lado, el dominio operacional se estableció con tres niveles de temperatura (160, 180 y 200°C), tres niveles de tiempo (30, 60 y 90 minutos), además de dos niveles de concentración de  $H_2SO_4$  (0.5 y 1M), generando una matriz de 18 combinaciones. Para cada combinación, el código calculó las 4 constantes cinéticas correspondientes a las reacciones R1, R2, R3 y R4, generando visualizaciones tridimensionales que permitieron identificar las regiones del espacio paramétrico en el que las velocidades de reacción alcanzaron valores extremos, facilitando así la comprensión del comportamiento cinético del sistema y la posterior alimentación del modelo de simulación.

### **2.3. Identificación de variables y factores del sistema**

Las variables del proceso se clasificaron según su naturaleza y rol en el estudio. La variable de respuesta principal se definió como el rendimiento de furfural expresado en porcentaje másico, calculado como el cociente entre masa de furfural producida y masa teórica de la xilosa. Esta métrica constituyó el criterio determinante para evaluar viabilidad técnica de condiciones operacionales, ya que rendimientos bajos implican pérdida económica de materia prima y generación de residuos problemáticos que requieren tratamiento adicional.

Asimismo, entre los factores controlables se identificaron la temperatura del reactor, que afecta exponencialmente las constantes cinéticas de todas las reacciones simultáneas; el tiempo de residencia, que determina cuánto tiempo permanecen los reactivos en condiciones de reacción y por tanto el grado de conversión alcanzado; y la concentración del catalizador ácido sulfúrico, que modula las velocidades de reacción mediante el mecanismo de catálisis homogénea.

En tanto, el factor perturbador crítico identificado fue la variabilidad composicional lote a lote de la composición química de la cascarilla, específicamente su contenido de xilosa y otros componentes lignocelulósicos, ya que presenta variaciones inherentes entre diferentes lotes debidos a factores como condiciones de cultivo, época de cosecha, variedad de arroz y condiciones de almacenamiento. Cabe destacar que esta variabilidad es inevitable en la práctica industrial, pues no existen dos lotes de biomasa idénticos. Si bien la composición se mantiene dentro de rangos límite establecidos por estándares de calidad del material, las fluctuaciones entre el límite inferior y superior introducirían variabilidad experimental que dificultaría aislar el efecto puro de las variables de proceso controlables.

Para abordar esta realidad, el modelo de simulación empleó una composición química promedio de cascarilla de arroz, calculada a partir de múltiples análisis composicionales reportados en la literatura sobre biomasa de la región ecuatoriana.

## 2.4. Simulación del proceso completo

Se implementó el *software* de Aspen Plus V14 para realizar la simulación del proceso de producción de furfural. La configuración de dicho modelo comenzó con la definición de componentes químicos: xilosa como materia prima cuya concentración en la alimentación se estableció según la composición promedio de cascarilla de arroz determinada en la fase previa; el intermediario reactivo postulado en el mecanismo cinético; furfural como producto objetivo; dos categorías de productos de degradación distinguidos según su origen en condensación o degradación térmica; agua como solvente principal del sistema reactivo; ácido sulfúrico como catalizador homogéneo; y solvente orgánico para la etapa de extracción líquido – líquido.

Se seleccionaron y configuraron operaciones unitarias siguiendo el esquema de proceso adaptado de Sherif et al. (2021), como se presenta en la Ilustración 2. El diseño incluyó el acondicionamiento de la alimentación, reacción en fase líquida bajo condiciones controladas, separación del furfural mediante destilación extractiva, recuperación del catalizador ácido y tratamiento de corrientes residuales.

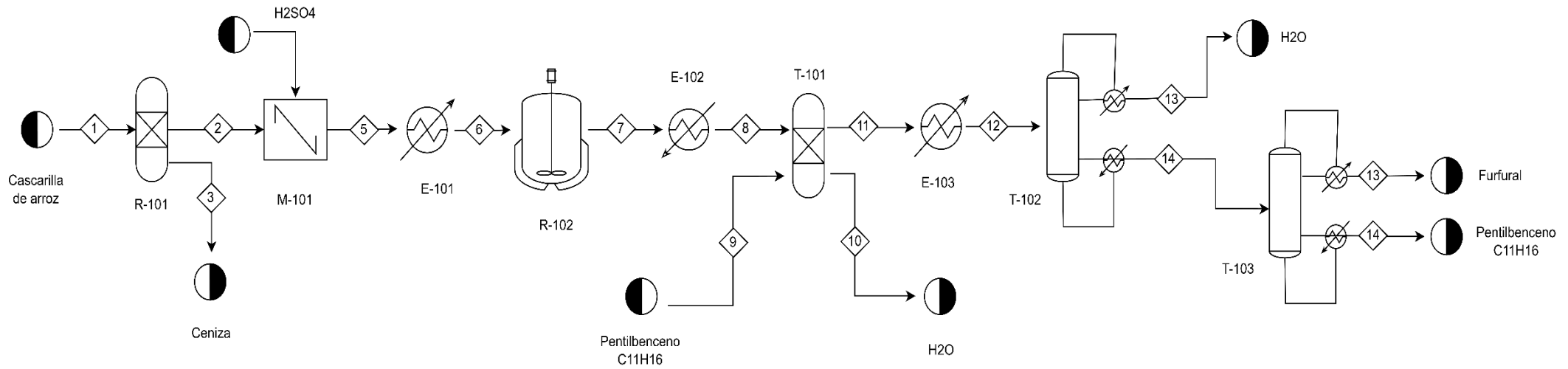
El reactor de pretratamiento R-101, modelado como reactor de rendimiento (yield reactor), descompuso la cascarilla de arroz en sus componentes principales, liberando la xilosa contenida en la fracción hemicelulósica. La corriente resultante pasó al mezclador M-101 dentro del cual se combinó con ácido sulfúrico como catalizador antes de ser alimentada al intercambiador E-101, que elevó la temperatura hasta las condiciones requeridas para la hidrólisis. El reactor de hidrólisis ácida R-102, constituyó el núcleo del proceso donde ocurrieron simultáneamente las cuatro reacciones cinéticas descritas previamente. Este equipo se modeló como reactor tipo tanque agitado continuo (CSTR) con reacciones cinéticas implementando las expresiones de velocidad de reacción previamente desarrolladas.

El separador E-102 implementó una separación *flash* líquido-vapor que retiró vapores de agua y compuestos volátiles. La corriente líquida, conteniendo furfural disuelto junto con subproductos y reactivos no convertidos, se dirigió al extractor líquido-líquido T-101, donde se contactó con pentilbenceno ( $C_{11}H_{16}$ ) como solvente orgánico, transfiriendo preferencialmente el furfural hacia la fase orgánica debido a su mayor afinidad por solventes no polares.

La primera columna de destilación T-102 separó el agua residual de la mezcla furfural-solvente, mientras que la segunda columna de destilación T-103 realizó la separación final entre furfural y pentilbenceno, permitiendo obtener furfural de alta pureza como producto destilado y recuperar el solvente como corriente de fondo para el respectivo reciclaje. El intercambiador E-103 acondicionó térmicamente las corrientes previas a la destilación. Esta configuración integrada maximizó la conversión de xilosa a furfural, mientras minimizaba la formación de subproductos, garantizando la recuperación eficiente del producto deseado y los materiales auxiliares del proceso.

## Ilustración 2

### Diagrama de flujo de proceso



R-101 : Reactor pretratamiento  
 R-102: Reactor de hidrólisis ácida  
 M-101: Mezclador  
 E-101,102,103: Intercambiador de calor  
 T-101:Extractor Líquido-Líquido  
 T-102, 103: Torre de destilación

Se seleccionó el modelo termodinámico NRTL – RK para representar el comportamiento de las fases presentes en el sistema. Este modelo híbrido integra la ecuación NRTL (Non-Random Two-Liquid) para la fase líquida y la ecuación de estado de Redlich – Kwong para la fase vapor. El modelo NRTL resultó apropiado para representar el comportamiento no ideal de la fase líquida, particularmente en mezclas acuosas con componentes orgánicos y electrolitos presentes, capturando adecuadamente las no idealidades derivadas de interacciones específicas entre moléculas de polaridad muy diferente. Por otro lado, la ecuación de Redlich-Kwong se implementó para la fase vapor, siendo apropiada para sistemas a presiones moderadas y temperaturas por encima del punto crítico reducido. Esta ecuación de estado cúbica representa adecuadamente el comportamiento de gases y vapores en las condiciones operacionales del proceso de producción de furfural, donde las presiones típicamente no exceden valores extremos. Los parámetros de interacción binaria necesarios se obtuvieron de la base de datos integrada del *software*.

Se programaron expresiones de velocidad de reacción correspondientes a cada transformación química en el reactor de hidrólisis. Estas expresiones no se ingresaron como valores fijos, sino que se evaluaron dinámicamente según la tabla de constantes cinéticas generada por el código de Python. El dominio operacional explorado abarcó tres niveles de temperatura (160, 180 y 200°C), tres niveles de tiempo (30, 60 y 90 minutos), y dos niveles de concentración de ácido sulfúrico (0.5 y 1M), generando una matriz de 18 combinaciones principales para la exploración preliminar del espacio operacional.

## **2.5. Validación estadística del modelo cinético**

Para validar la capacidad predictiva del modelo cinético desarrollado, se compararon las predicciones de la simulación con datos experimentales independientes reportados en la literatura. Se seleccionó el estudio de Ershova et al. (2015) como fuente de datos experimentales de referencia.

Se replicaron en el simulador las condiciones experimentales exactas empleadas por Ershova et al.: concentración de ácido sulfúrico de 0.1M, y temperaturas de reacción de 180 °C, 200°C y 220°C. Para cada una de estas condiciones, se calcularon las constantes cinéticas correspondientes utilizando el código Python desarrollado, el cual implementó las ecuaciones de Arrhenius con las energías de activación previamente establecidas. Estas constantes se introdujeron en el modelo de simulación de Aspen Plus, permitiendo así generar predicciones de rendimiento de furfural bajo las mismas condiciones de los experimentos reportados.

Los rendimientos de furfural obtenidos en el simulador se extrajeron a la salida del reactor de hidrólisis (corriente S7). Esta selección permitió comparar directamente con los datos experimentales reportados, los cuales corresponden a mediciones en la corriente de producto del reactor. Se compilaron en una tabla los valores de rendimiento experimental reportados por Ershova et al. (2015) junto con los valores predichos por el modelo para cada combinación de temperatura y concentración de catalizador evaluada.

El análisis de validación cuantitativa se realizó mediante el cálculo de múltiples métricas estadísticas. El error absoluto se calculó como la diferencia aritmética entre el valor experimental y el valor predicho para cada punto de datos. El error relativo se expresó como porcentaje, normalizando el error absoluto respecto al valor experimental correspondiente. Estas métricas permitieron cuantificar la magnitud de las desviaciones entre predicciones del modelo y observaciones experimentales.

Se calculó el coeficiente de determinación  $R^2$  mediante análisis de regresión lineal entre valores experimentales y valores predichos. Esta métrica proporcionó una medida de la capacidad del modelo para explicar la variabilidad observada en los datos experimentales, con valores cercanos a 1.0 indicando alta concordancia entre predicciones y observaciones. El análisis de regresión lineal se realizó utilizando el software Minitab, el cual generó gráficos de paridad

que permitieron visualizar la concordancia entre valores experimentales y predichos, así como identificar posibles sesgos sistemáticos o patrones en los residuos.

Se formuló una prueba de hipótesis estadística para determinar formalmente si el modelo desarrollado cumplía con criterios de adecuación establecidos. La hipótesis nula ( $H_0$ ) postuló que el modelo no predice adecuadamente los datos experimentales, definida operacionalmente como  $R^2 < 0.70$  o error relativo promedio  $> 15\%$ . La hipótesis alternativa ( $H_1$ ) postuló que el modelo predice adecuadamente, con  $R^2 \geq 0.70$  y error relativo promedio  $\leq 15\%$ . Estos umbrales se establecieron considerando las prácticas estándar en modelado de procesos químicos y las incertidumbres típicas asociadas con mediciones experimentales en sistemas complejos.

Los criterios de aceptación requirieron que ambas condiciones se cumplieran simultáneamente. Si ambas métricas alcanzaban los valores umbral establecidos, se aceptaba la hipótesis alternativa, concluyendo que el modelo desarrollado era válido y apropiado para realizar predicciones dentro del rango de condiciones validado. Si cualquiera de las dos condiciones fallaba, se rechazaba la hipótesis alternativa, indicando la necesidad de refinar el modelo o los parámetros cinéticos empleados.

## **2.6. Diseño experimental factorial**

Una vez validado el modelo cinético, se procedió a implementar un diseño experimental factorial para explorar el efecto de las variables de proceso sobre el rendimiento de furfural. Esta fase permitió la identificación de las condiciones operacionales óptimas y cuantificar la significancia estadística de cada factor y sus interacciones.

Se identificaron tres factores controlables de interés: temperatura del reactor (Factor A), concentración de ácido sulfúrico (Factor B), y tiempo de residencia (Factor C). Para cada factor se establecieron niveles que cubrieran un rango operacional amplio pero realista desde el punto de vista de implementación industrial. La temperatura se varió en tres niveles (bajo, medio,

alto) correspondientes a 160°C, 180°C y 200°C, abarcando así desde condiciones de conversión moderada hasta condiciones de alta reactividad donde comienzan a predominar reacciones de degradación.

La concentración de ácido sulfúrico se evaluó en dos niveles: 0.5M y 1.0M. Esta selección se fundamentó en los resultados de la exploración preliminar, donde se observó que concentraciones menores a 0.5 M resultaban en cinética excesivamente lenta, mientras que concentraciones superiores a 1.0 M aceleraban desproporcionadamente las reacciones de degradación, reduciendo la selectividad hacia furfural. El tiempo de residencia se consideró mediante evaluación de los perfiles temporales de conversión, identificando tiempos que capturaran diferentes grados de avance de reacción.

La combinación factorial de los niveles seleccionados generó un conjunto de corridas experimentales virtuales. Cada combinación de condiciones constituyó una corrida en la cual se extrajo del simulador el valor de la variable respuesta, en este caso, el rendimiento de furfural a la salida del reactor de hidrólisis (corriente S7), expresado en kg/h.

## **2.7. Análisis estadístico mediante ANOVA**

Después de realizar las corridas en el simulador, se procedió a realizar el análisis estadístico de los resultados del diseño experimental mediante Análisis de Varianza (ANOVA). Esta técnica permitió determinar cuáles factores y cuáles interacciones entre factores ejercían efectos estadísticamente significativos sobre el rendimiento de furfural, proporcionando así una comprensión cuantitativa de la importancia relativa de cada variable de proceso.

Se implementó el análisis de varianza de ANOVA de un solo factor, el cual permitió evaluar independientemente el efecto de cada variable controlable (temperatura, concentración de catalizador, tiempo de residencia) sobre el rendimiento, determinando si las diferencias observadas entre los niveles de cada factor eran estadísticamente significativas.

Se estableció un nivel de significancia  $\alpha = 0.05$  como criterio de decisión, de modo que efectos con valores  $p$  inferiores a 0.05 se considerarían estadísticamente significativos. Adicionalmente, se calcularon los coeficientes de determinación  $R^2$  para evaluar la bondad de ajuste del modelo estadístico y su capacidad predictiva.

El análisis ANOVA se complementó con pruebas de comparaciones múltiples post-hoc, específicamente el test de Tukey, para identificar cuáles niveles específicos de los factores significativos diferían entre sí. Este análisis permitió determinar, por ejemplo, si las tres temperaturas evaluadas producían rendimientos estadísticamente diferentes, o si algunos niveles eran equivalentes dentro del error estadístico.

### ***2.7.1. Análisis de curvas de comportamiento químico***

Si bien el análisis de varianza proporcionó conclusiones estadísticas sobre la significancia de los factores operacionales y permitió identificar las combinaciones que generaban los rendimientos más altos, resultó necesario complementar este análisis con una evaluación fundamentada en principios de ingeniería química. El ANOVA cuantifica diferencias entre tratamientos, pero no proporciona información sobre el balance entre reacciones deseadas y reacciones de degradación.

Para abordar esta limitación, se construyeron curvas de rendimiento de furfural y de formación de productos degradados (D1 y D2) en función de las variables operacionales. Estas representaciones gráficas permitieron visualizar las tendencias del sistema y evaluar no solamente qué combinación producía mayor rendimiento absoluto, sino también cuál ofrecía el mejor balance entre selectividad hacia furfural y minimización de degradación.

## **2.8. Análisis Técnico-Económico**

La última fase metodológica consistió en un análisis técnico-económico preliminar del proceso diseñado, con el objetivo de evaluar la viabilidad económica potencial de la configuración

seleccionada e identificar los principales factores de costo que impactan la competitividad del proceso. Este análisis se realizó en un nivel de ingeniería conceptual, apropiado para la etapa exploratoria del proyecto.

El análisis técnico se centró en la cuantificación de los requerimientos de equipos principales, dimensionamiento preliminar basado en balances de materia y energía de la simulación, y estimación de condiciones de operación críticas como presiones, temperaturas, y materiales de construcción necesarios para manejar medios corrosivos. Se identificaron los equipos más costosos y críticos del proceso, típicamente el reactor de hidrólisis por sus requerimientos de materiales resistentes a corrosión ácida a alta temperatura, y la columna de destilación extractiva por su complejidad y número de etapas.

El análisis económico se fundamentó en estimaciones paramétricas de costos de capital (CAPEX) mediante correlaciones de escalamiento tipo ley de potencia, que relacionan el costo de equipos con su capacidad o tamaño mediante exponentes característicos. Se utilizaron factores de Lang o similares para estimar el costo total de planta instalada a partir del costo de equipos principales, incorporando multiplicadores para tuberías, instrumentación, instalación, ingeniería, contingencias, y capital de trabajo.

Los costos de operación (OPEX) se estimaron considerando las siguientes categorías principales: materias primas (biomasa pretratada o xilosa, ácido sulfúrico, solvente de extracción), utilidades (vapor, agua de enfriamiento, electricidad), mano de obra, mantenimiento, y costos generales y administrativos. Se utilizaron precios de mercado actuales o proyecciones para cada insumo, ajustados según disponibilidad regional y economías de escala.

Se calcularon indicadores económicos fundamentales como el costo de producción por unidad de furfural, el precio de equilibrio (breakeven price) que iguala ingresos y egresos, y la

rentabilidad conceptual comparando el costo de producción estimado con precios de mercado del furfural. Se realizó un análisis de sensibilidad paramétrico para identificar cuáles variables económicas (precio de materias primas, costos de utilidades, precio de venta del producto) ejercían mayor influencia sobre la viabilidad del proceso.

## **Capítulo 3**

### 3. Resultados y análisis

#### 3.1 Parámetros cinéticos del modelo implementado

Antes de proceder con la validación, se presenta los parámetros cinéticos que caracterizan el modelo de cuatro reacciones, obtenidos según la metodología descrita en el Capítulo 2. Las constantes de velocidad siguen la forma de Arrhenius modificada (Ecuación 3.1) y la resolución de las EDO's.

$$k_i = A_i^0 \times [H^+]^{m_i} \times e^{(-E_i/RT)} \quad \text{Ecuación 3.1}$$

Donde el exponente  $m = 2$  refleja la dependencia cuadrática con la concentración del catalizador ácido, característica del mecanismo de deshidratación de pentosas catalizado por ácido (Krzelj et al., 2020).

**Tabla 1**

*Parámetros cinéticos del modelo*

Reacción	Ao	Ea (kJ/mol)	Unidades de Ao	m
$k_1 (X \rightarrow I)$	$2.69 \times 10^{11}$	116.5	$\text{min}^{-1} \cdot M^{-2}$	2
$k_2 (I \rightarrow F)$	$5.24 \times 10^{10}$	91.8	$\text{min}^{-1} \cdot M^{-2}$	2
$k_3 (I \rightarrow D1)$	149	19.8	$L \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1} \cdot M^{-2}$	2
$k_4 (F \rightarrow D2)$	337	44.2	$\text{min}^{-1} \cdot M^{-2}$	2

*Nota:* X=xilosa, I=intermediarios, F=furfural, D1=huminas, D2=productos de degradación secundaria.

Como se observa en la tabla 1, las energías de activación muestran que las reacciones de formación ( $k_1$  y  $k_2$ ) presentan una alta sensibilidad a la temperatura, en comparación con las

reacciones de degradación ( $k_3$  y  $k_4$ ). Esta diferencia implica que el aumentar la temperatura favorece exponencialmente las reacciones deseadas de formación de furfural, sin embargo, también acelera las reacciones indeseables de degradación, aunque de mejor medida. Este comportamiento sugiere la existencia de una temperatura óptima donde se maximiza el balance entre producción y degradación.

### 3.2. Validación del modelo cinético

#### 3.2.1. Planteamiento de la hipótesis estadística

Para evaluar la validez del modelo cinético propuesto, se estableció una hipótesis estadística formal basada en dos criterios cuantitativos de aceptación:

- Hipótesis nula ( $H_0$ ): El modelo NO predice adecuadamente los datos experimentales ( $R^2 < 0.70$  o error relativo promedio  $> 15\%$ ).
- Hipótesis alternativa ( $H_1$ ): El modelo predice adecuadamente los datos experimentales ( $R^2 \geq 0.70$  o error relativo promedio  $\leq 15\%$ )

#### Criterios de decisión

- Si ambos criterios se cumplen  $\rightarrow$  Aceptar  $H_1$  (modelo válido).
- Si alguno falla  $\rightarrow$  Rechazar  $H_1$  (modelo no válido).

Estos criterios fueron establecidos considerando los estándares de diversas disciplinas científicas para validación de modelos. En ciencias físicas e ingeniería generalmente se esperan valores de  $R^2$  superiores a 0.70 para ser considerados buenos (Gupta et al., 2024). En el contexto de modelos cinéticos aplicados a procesos de conversión de biomasa, un  $R^2 \geq 0.70$  indica que al menos el 70% de la variabilidad experimental es explicada por el modelo, mientras que un error relativo promedio  $\leq 15\%$  garantiza precisión práctica aceptable para simulación de procesos.

### 3.2.2. Comparación con datos experimentales

El modelo cinético de cuatro reacciones propuesto por Bastidas & Quimi fue comparado sistemáticamente con los datos experimentales reportados por Ershova et al. (2015), quienes trabajaron con cascarilla de arroz bajo condiciones controladas de hidrólisis ácida.

La validación se realizó bajo un rango amplio de condiciones operativas (tabla 2) que cubren temperaturas entre 180 – 220 °C, concentración fija de ácido sulfúrico de 0.1M, y tiempos de residencia de 30, 60 y 90 minutos, replicando exactamente las condiciones experimentales reportadas. Esta selección de condiciones permitió evaluar la capacidad predictiva del modelo en el rango de alta temperatura donde las reacciones de degradación se vuelven más pronunciadas.

**Tabla 2**

*Comparación entre rendimientos experimentales y predichos por el modelo*

T (°C)	Tiempo de residencia (min)	$C_{H_2SO_4}$ (M)	Rendimiento del furfural (%) - Salida del reactor	Rendimiento del furfural (%) - PAPER	Error Absoluto (%)	Error Relativo (%)
180	30	0,1	9%	8%	1%	15%
180	60	0,1	15%	14%	2%	14%
180	90	0,1	21%	22%	1%	6%
200	30	0,1	19%	21%	2%	10%
200	60	0,1	29%	29%	0%	0%
200	90	0,1	35%	31%	4%	14%
220	30	0,1	29%	30%	1%	2%
220	60	0,1	24%	26%	2%	6%
220	90	0,1	12%	14%	2%	12%

### 3.2.3. Análisis de las métricas de validación

Los resultados muestran que el modelo captura adecuadamente las tendencias observadas experimentalmente, con un coeficiente de determinación de  $R^2 = 0.9419$ , como se muestra en la tabla 3. Este valor indica que el 94.19% de la variabilidad en los rendimientos experimentales es explicada por el modelo cinético propuesto. Este valor supera ampliamente el criterio mínimo establecido en la hipótesis ( $R^2 \geq 0.70$ ), con un margen de 24.19 puntos porcentuales, demostrando una correlación excelente entre predicciones y observaciones.

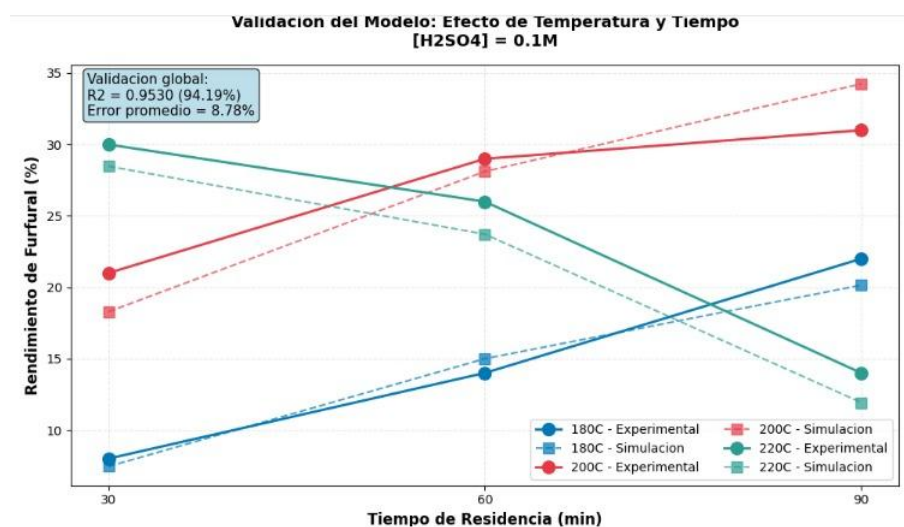
**Tabla 3**

*Tabla de validación del modelo cinético con métricas*

Desviación estándar (S)	R-cuadrado
0,0214848	94,19%

### Ilustración 3

*Efecto de la temperatura vs tiempo*



En la ilustración 3 se puede apreciar de manera gráfica esta correspondencia entre los datos experimentales y las predicciones del modelo para las diferentes temperaturas evaluadas,

evidenciando visualmente la capacidad predictiva del modelo a lo largo del rango de condiciones operativas estudiadas.

Además, el error relativo promedio alcanzó el 8.78%, significativamente inferior al 15% establecido como límite aceptable en la hipótesis. La distribución de estos errores, observada en la tabla 2, muestra mayor precisión en el rango de temperaturas intermedias (180 – 200°C), donde los errores típicamente no superan el 14%. Las mejores predicciones se obtuvieron a 200°C y 60 minutos (error relativo de 0%), así como a 220°C y 30 minutos (error relativo de 2%), demostrando la capacidad del modelo para capturar con precisión el máximo de rendimiento y su ubicación temporal.

A temperaturas extremas (220°C con tiempos prolongados), el modelo tiende a subestimar ligeramente el rendimiento, con errores que alcanzan el 12%. Este comportamiento puede atribuirse a la complejidad inherente del sistema de reacciones competitivas. A temperaturas muy elevadas ( $\geq 210^\circ\text{C}$ ), las reacciones de degradación secundaria se vuelven dominantes, y factores como fenómenos de transferencia de masa o readsorción del furfural sobre la matriz sólida, no contemplados explícitamente en el modelo cinético homogéneo, pueden introducir desviaciones menores. No obstante, incluso bajo estas condiciones extremas, los errores permanecen dentro del rango aceptable establecido.

#### ***3.2.4. Evaluación de la hipótesis y conclusión de validación***

Con base en los resultados obtenidos, se procede a evaluar formalmente la hipótesis planteada:

##### **Criterio 1 - Coeficiente de determinación:**

- Valor obtenido:  $R^2 = 0.9419$  (94.19%)
- Criterio requerido:  $R^2 \geq 0.70$  (70%)
- Cumple: Sí (supera por 24.19 puntos porcentuales)

##### **Criterio 2 - Error relativo promedio:**

- Valor obtenido: 8.78%

- Criterio requerido:  $\leq 15\%$
- Cumple: Si (margen de 6.22 puntos porcentuales)

Por lo tanto, dado que ambos criterios se cumplen satisfactoriamente, se acepta la hipótesis alternativa  $H_1$ . Por lo tanto, se concluye que el modelo cinético implementado predice adecuadamente los rendimientos experimentales de furfural reportador por Ershova, validando su capacidad predictiva para las condiciones evaluadas.

Un aspecto particularmente valioso de la validación fue la capacidad del modelo para predecir no solo el rendimiento máximo de furfural, sino también la evolución temporal del sistema. Al comparar las curvas de concentración predichas con los perfiles experimentales reportados por Ershova, se observó concordancia tanto en la ubicación temporal del máximo de furfural como en la forma de las curvas de formación y consumo. Esto sugiere que el mecanismo cinético de cuatro etapas captura adecuadamente la secuencia: xilosa  $\rightarrow$  intermediarios  $\rightarrow$  furfural  $\rightarrow$  productos de degradación.

### **3.3. Análisis paramétrico: Influencia de las variables operativas**

Una vez establecida la confiabilidad del modelo, el siguiente paso consistió en explorar sistemáticamente cómo cada variable de proceso afecta el desempeño del sistema. Para este análisis paramétrico se empleó un diseño experimental diferente al de validación, evaluando temperaturas de 160, 180 y 200 °C, concentraciones de ácido sulfúrico de 0.5 y 1.0 M, y tiempos de residencia de 30, 60 y 90 minutos, resultando en un diseño factorial 3x2x3 con 18 combinaciones experimentales.

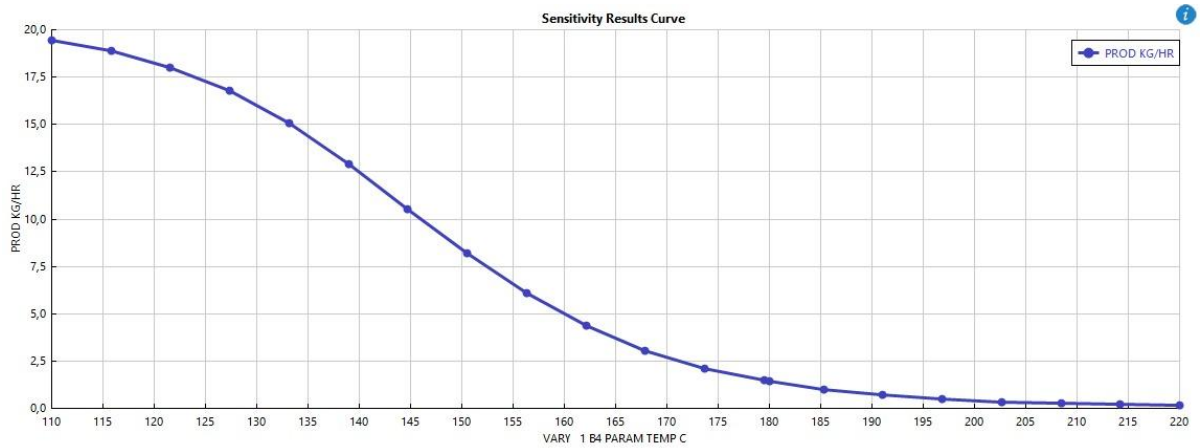
#### ***3.3.1. Efecto de la temperatura***

La temperatura se considera la variable de mayor impacto sobre el rendimiento de furfural, un resultado esperado dado su efecto exponencial sobre las constantes de velocidad según la ecuación de Arrhenius (Ecuación 3.1). Sin embargo, la relación entre temperatura y

rendimiento dista de ser monotónica, exhibiendo un máximo bien definido que refleja la competencia entre reacciones deseadas e indeseadas.

#### Ilustración 4

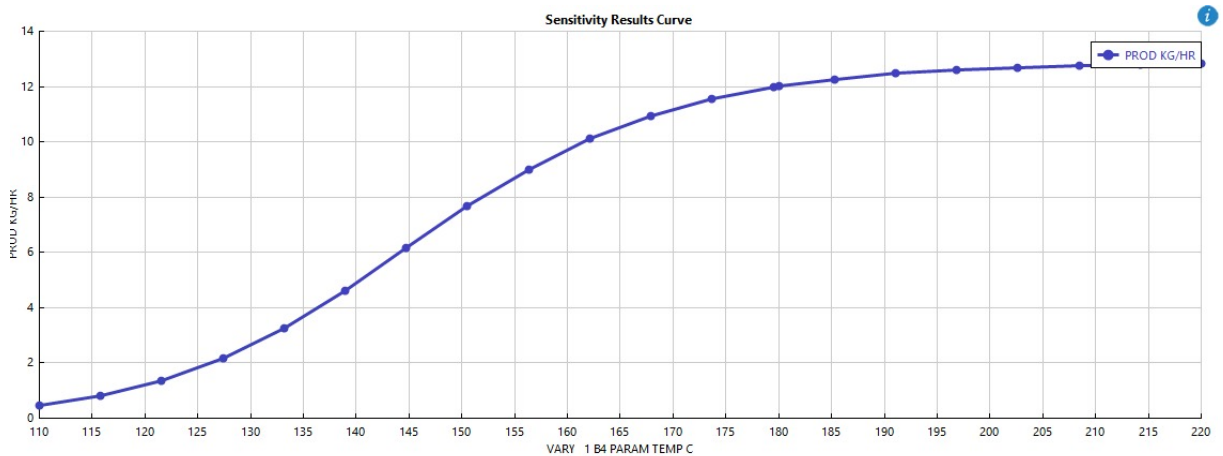
*Consumo del reactivo xilosa vs temperatura*



Como se muestra en la ilustración 4, a partir de los 160°C la presencia de xilosa permanece incompleta incluso después de tiempos de reacción prolongados. Bajo estas condiciones, la hidrólisis de hemicelulosa procede lentamente, limitando la disponibilidad de xilosa como precursor.

#### Ilustración 5

*Producción de furfural vs temperatura*



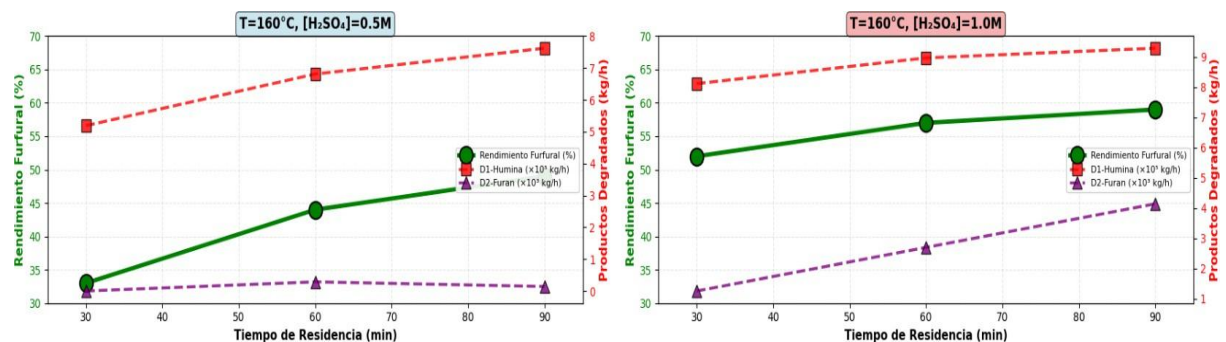
Asimismo, en la ilustración 5, muestra un comportamiento crítico, aunque la producción aumenta continuamente con la temperatura hasta alcanzar 12.5 kg/h alrededor de 190°C, la tasa de incremento se desacelera notablemente después de 180°C, evidenciando que el sistema entra en un régimen donde las reacciones de degradación ( $k_4$ ) comienzan a competir significativamente con la formación de furfural.

### 3.3.2. Efecto de la concentración del ácido sulfúrico

El rango evaluado (0.5 – 1.0 M), la concentración de catalizador ácido presenta una influencia compleja. A diferencia de la validación realizada a 0.1M (donde la actividad catalítica es limitada), estas concentraciones moderadas, alta generan dinámicas más complejas.

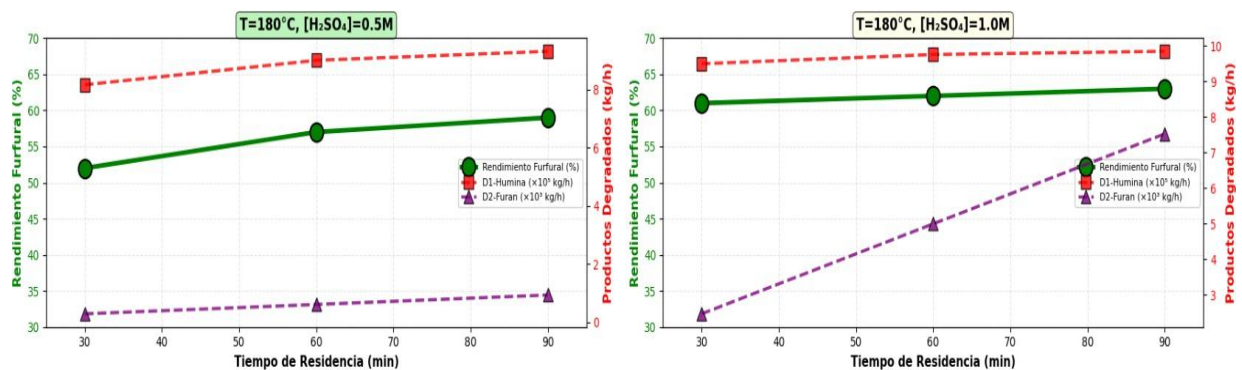
#### Ilustración 6

Rendimiento vs temperatura 160°C



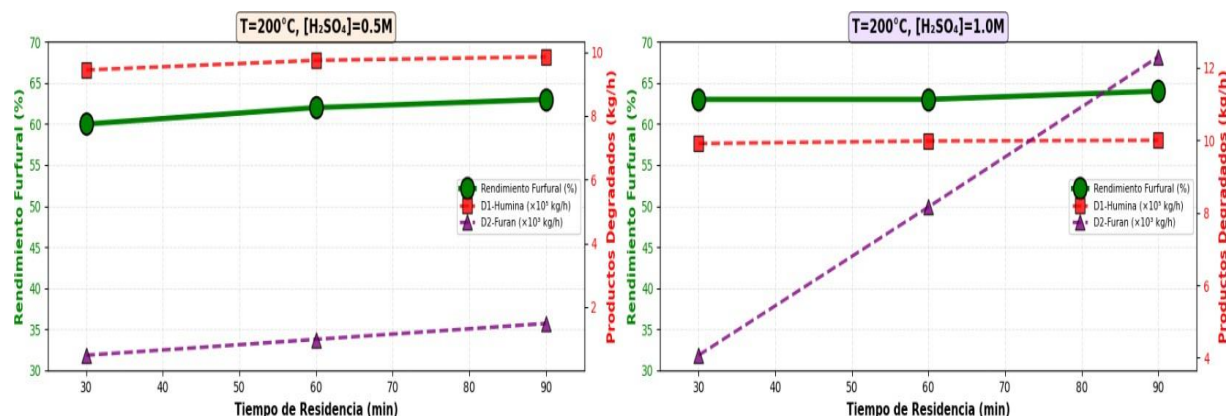
#### Ilustración 7

Rendimiento vs temperatura 180 °C



## Ilustración 8

### Rendimiento vs temperatura 200 °C



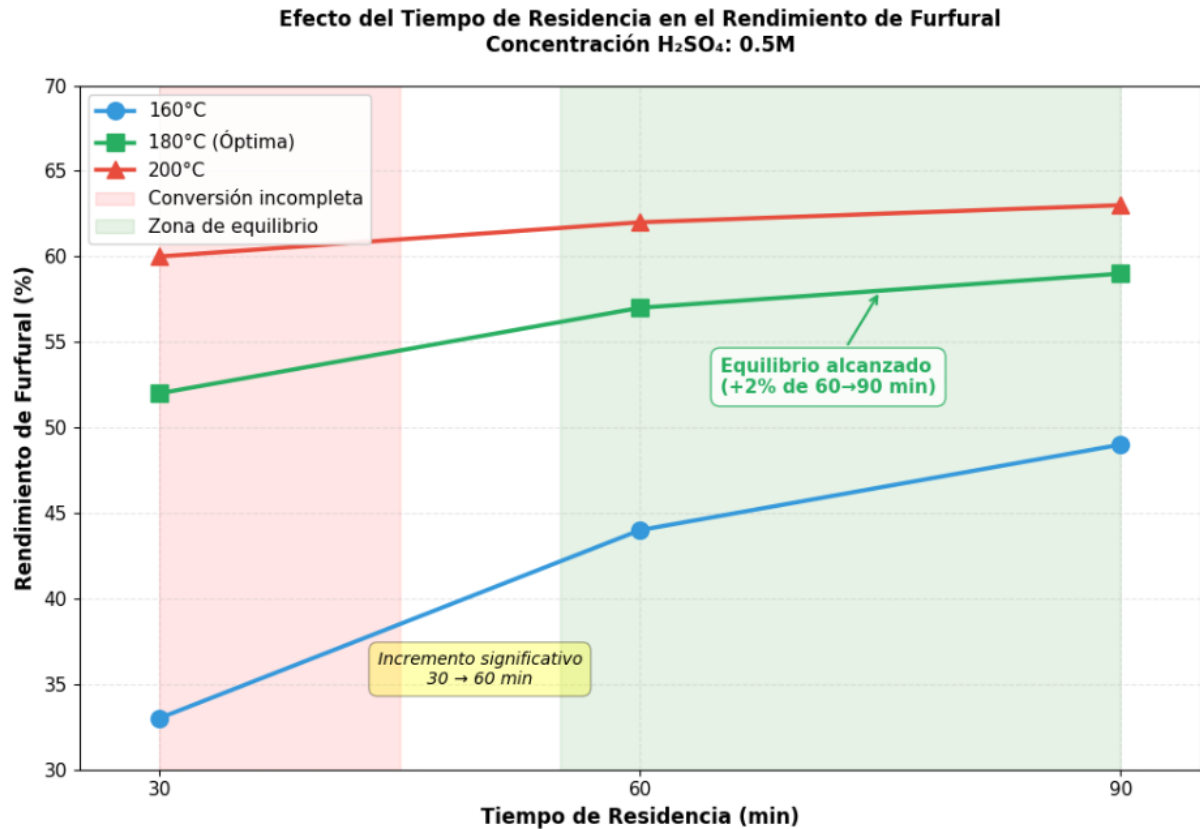
Como se puede evidenciar en las ilustraciones 6, 7 y 8, a una concentración de 0.5M el sistema exhibe buen balance catalítico en el rango 160 – 180 °C. En particular, a 180°C el rendimiento de furfural alcanza valores entre 57% a los 60 minutos y a 59% a los 90 minutos de tiempo de residencia, indicando que esta concentración proporciona actividad catalítica suficiente sin promover excesivamente las reacciones de degradación.

Por otro lado, al aumentar la concentración a 1.0 M, se observa que el incremento de catalizador, si bien acelera inicialmente la conversión de xilosa (especialmente a bajas temperaturas donde las reacciones de degradación son lentas), también acelera desproporcionalmente las reacciones de degradación del furfural a temperaturas más altas. Por lo tanto, este comportamiento confirma que a concentraciones moderadas (0.5 M) son preferibles cuando se opera a temperaturas óptimas (180°C), ya que maximizan el rendimiento mientras minimizan las pérdidas por degradación.

### 3.3.3. Efecto del tiempo de residencia

#### Ilustración 9

Rendimientos a diferentes temperaturas vs tiempo de residencia



El tiempo de residencia determina cuánto tiempo permanecen los reactivos y productos bajo las condiciones de reacción, lo que influye directamente en el grado de conversión y en la formación de las reacciones secundarias. A diferencia de la temperatura y la concentración de ácido, que afectan las velocidades de reacción, el tiempo de residencia simplemente determina cuánto puede progresar el sistema a esas velocidades establecidas.

Como se puede observar en la ilustración 9, a tiempos cortos (30 minutos), la conversión de xilosa es incompleta excepto a temperaturas elevadas ( $\geq 200^{\circ}\text{C}$ ). Bajo condiciones moderadas ( $160\text{-}180^{\circ}\text{C}$ ,  $0.5\text{-}1.0\text{ M}$ ), solo se alcanza  $40\text{-}50\%$  de rendimiento, indicando que el tiempo es insuficiente para completar la hidrólisis y deshidratación.

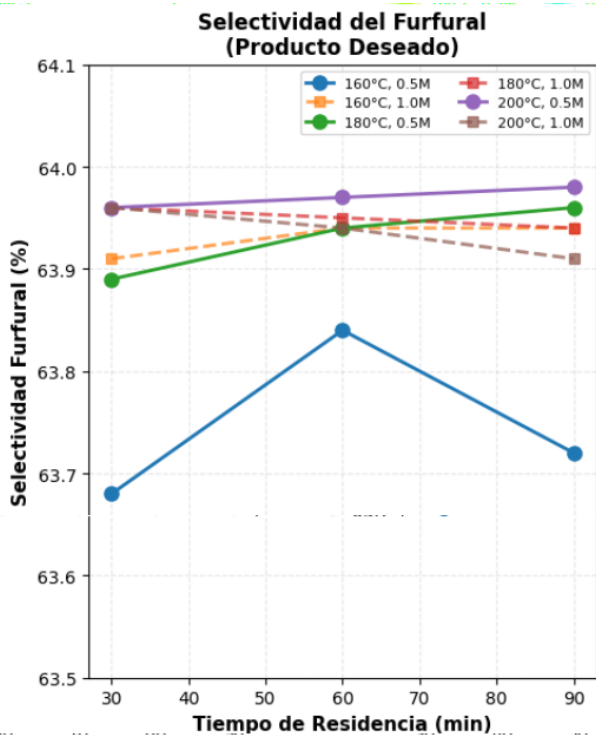
El análisis del tiempo de residencia revela un patrón de dos fases claramente diferenciadas en todas las temperaturas evaluadas. En la primera fase, conversión activa (30 a 60 minutos), se observa un incremento significativo en el rendimiento, con aumentos de 2 a 11 puntos porcentuales dependiendo de la temperatura. El sistema se encuentra en fase de reacción activa, donde la conversión de xilosa aún está en progreso.

Por otro lado, en la segunda fase, equilibrio químico (60 a 90 minutos), las curvas se aplanan notablemente, con incrementos marginales menores al 2% en todas las temperaturas. Esto indicia que el sistema alcanza un balance entre la formación y degradación de furfural. Más allá de este tiempo óptimo, el rendimiento se estabiliza o incluso puede disminuir ligeramente si las reacciones de degradación comienzan a dominar, especialmente a temperaturas más altas donde  $k_4$  (furfural  $\rightarrow$  productos de degradación) se vuelve significativa.

### 3.3.4. Selectividad

#### Ilustración 10

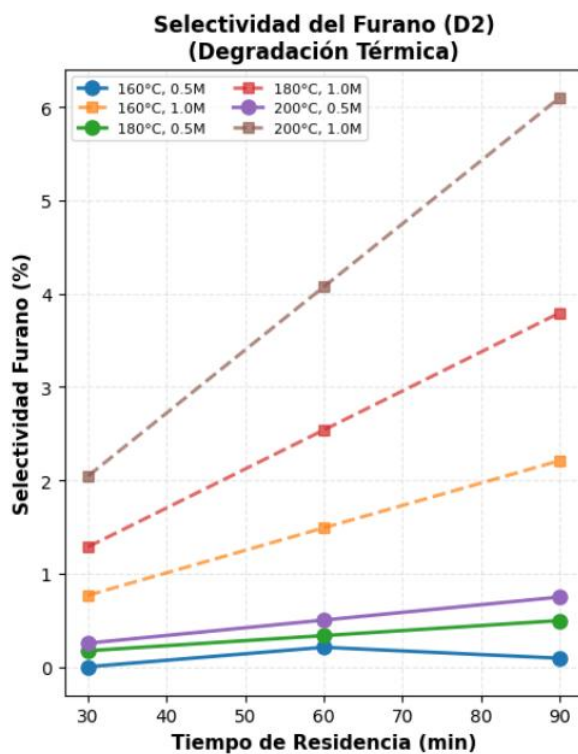
##### Selectividad del furfural



La selectividad es un parámetro cinético que mide la especificidad de una reacción química hacia la formación del producto deseado en relación con el total de reactivo transformado, expresándose como el cociente entre los moles de reactivo convertidos en el producto objetivo y los moles totales de reactivo que reaccionaron. En el contexto de la producción de furfural a partir de cascarilla de arroz, la ilustración 10 presenta la selectividad hacia furfural (producto deseado), la cual se mantiene notablemente estable alrededor de 63.7-64.0% en todas las condiciones evaluadas (160-200°C, 0.5-1.0M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, 30-90 min), evidenciando que el tiempo de residencia tiene un impacto mínimo sobre la distribución de productos primarios de la hidrólisis de xilosa.

### Ilustración 11

*Selectividad del Furano (D2)*



Por otro lado, la ilustración 11 muestra la selectividad hacia furano (D2), un producto de degradación térmica del furfural, donde se observa un incremento significativo a temperaturas elevadas (200°C) con concentraciones altas de ácido (1.0M) y tiempos de residencia prolongados, alcanzando valores hasta 6.2%, mientras que bajo condiciones más moderadas

(160-180°C, 0.5M) esta selectividad permanece inferior al 1%, confirmando que condiciones operativas severas favorecen reacciones secundarias indeseables de sobredegradación del producto objetivo.

### 3.3.5. Selección de las condiciones operacionales

Como se mencionó anteriormente, las simulaciones se realizaron inicialmente considerando dos niveles de concentración de ácido sulfúrico (0.5M y 1.0M), combinados con diferentes temperaturas (160, 180 y 200°C) y tiempos de residencia (30, 60 y 90 minutos). Sin embargo, al evaluar los resultados obtenidos, se observó que las condiciones con concentración de 1.0M generaban cantidades significativas de productos de degradación indeseables que comprometían la selectividad del proceso hacia furfural.

**Tabla 4**

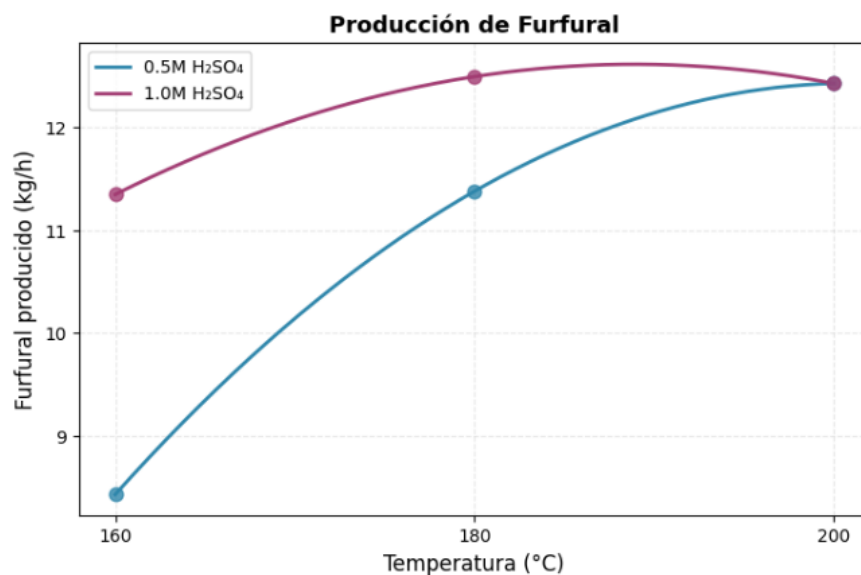
*Resultados predominantes de la simulación*

<b>T</b> <b>(°C)</b>	<b>Tiempo de</b> <b>residencia (min)</b>	<b><math>C_{H_2SO_4}</math></b> <b>(M)</b>	<b>Rendimiento del</b> <b>furfural (%) -</b> <b>Salida del reactor</b>	<b>D1 - Humina</b> <b>S7 (kg/h)</b>	<b>D2 - Furan</b> <b>S7 (kg/h)</b>
180	30	0,5	52%	8,16E-05	2,85E-04
180	60	0,5	57%	9,00E-05	6,08E-04
180	90	0,5	59%	9,31E-05	9,32E-04
200	30	0,5	60%	9,44E-05	4,82E-04
200	60	0,5	62%	9,74E-05	9,81E-04
200	90	0,5	63%	9,85E-05	1,48E-03

Como se observa en la tabla 4, las condiciones operadas a 0.5 M muestran valores de D1 (huminas) que oscilan entre  $8.16 \times 10^{-5}$  y  $9.85 \times 10^{-5} \text{ kg/h}$ , manteniéndose en un rango estrecho y controlado. Para D2 (productos de degradación de furfural), se observan valores entre  $2.85 \times 10^{-4}$  y  $1.48 \times 10^{-3} \text{ kg/h}$ , con aumento esperado a mayores tiempos de residencia debido a la acumulación de furfural que puede degradarse. Esta degradación controlada resulta aceptable desde el punto de vista de la eficiencia del proceso, ya que permite alcanzar rendimientos de furfural entre 52% y 63%.

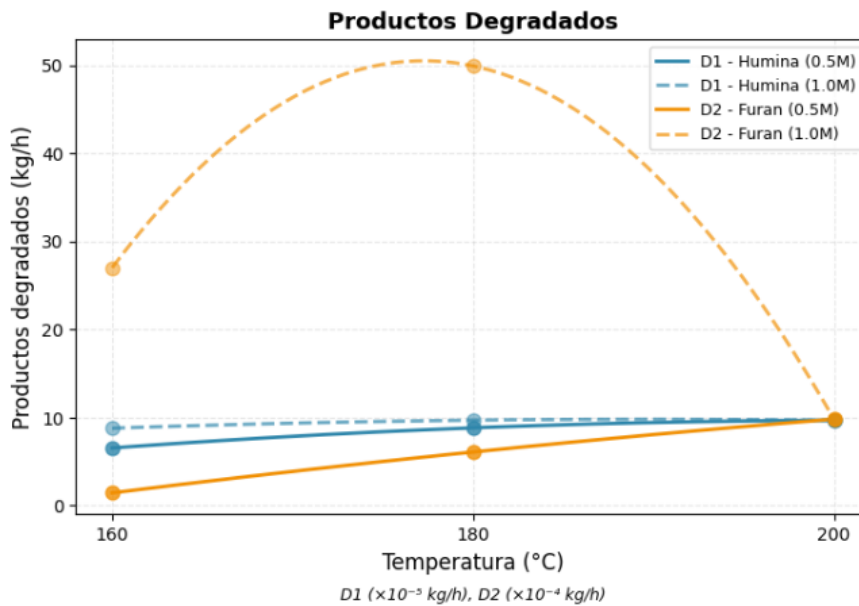
### Ilustración 12

*Comparación de producción de furfural a diferentes concentraciones*



### Ilustración 13

Comparación de producción de productos degradados a diferentes concentraciones



En contraste, aunque no se muestran en la tabla 4, las simulaciones con 1.0M generaron valores de D1 entre  $8.16 \times 10^{-5}$  y  $1.00 \times 10^{-4}$  kg/h, y más crítico aún, valores de D2 entre  $2.85 \times 10^{-4}$  y  $1.23 \times 10^{-2}$  kg/h, es decir, hasta un orden de magnitud superiores a los obtenidos con 0.5M. Esta degradación excesiva resulta contraproducente desde el punto de vista de la eficiencia del proceso, aunque se podría alcanzar mayores rendimientos instantáneos de furfural (debido a la mayor velocidad de las reacciones productivas  $k_1$  y  $k_2$ ), como se evidencia en la ilustración 12, la pérdida de furfural por reacciones secundarias ( $k_4$ ) (ilustración 13) reduce el rendimiento final aprovechable. Por esta razón, se tomó la decisión de trabajar exclusivamente con los datos correspondientes a 0.5 M de  $H_2SO_4$ , concentración que mostró un balance más favorable entre rendimiento de furfural y control de subproductos degradados.

Consecuentemente, el análisis estadístico se enfocó en evaluar únicamente el efecto de la temperatura y el tiempo de residencia como variables independientes sobre el rendimiento del proceso.

### 3.4. Análisis estadístico

#### 3.4.1. Validación del modelo cinético mediante regresión

Para proporcionar una validación independiente del modelo cinético desarrollado en las secciones anteriores, se realizó un análisis de regresión comparando los rendimientos predichos por el modelo de simulación con los datos experimentales de Ershova et al. (2015). Este análisis es análogo al presentado en la sección 3.2 pero aplicado específicamente a las condiciones del análisis estadístico (0.5M en lugar de 0.1M).

La validación del modelo mediante la comparación entre los rendimientos predichos por las simulaciones y los datos experimentales reportados por Ershova demostró una correlación excelente, con un coeficiente de determinación  $R^2$  de 94.19%. Esto significa que el 94.19% de la variabilidad observada en los datos experimentales de Ershova es explicada por las predicciones del modelo de simulación, lo que indica un ajuste casi perfecto entre ambos conjuntos de datos. El modelo de regresión lineal obtenido (Ecuación 3.4), muestra una pendiente muy cercana a la unidad (0.9288) y un intercepto prácticamente nulo (0.0157).

$$\text{Rendimiento Ershova} = 0,0157 + 0,9288 \text{ Rendimiento simulación} \quad \text{Ecuación 3.4}$$

Los coeficientes estimados se detallan en la tabla 5, donde se observa que el coeficiente de la pendiente (0.9288) presenta un valor p altamente significativo ( $p < 0.001$ ), confirmando que la relación entre las predicciones de simulación y los datos experimentales no es producto del azar sino que refleja una asociación real y fuerte. El error estándar del coeficiente es 0.0872, relativamente pequeño en comparación con el valor del coeficiente mismo (9.4% del valor del coeficiente), lo que indica una estimación precisa con bajo nivel de incertidumbre.

**Tabla 5***Coefficientes de la validación*

<b>Término</b>	<b>Coef</b>	<b>EE del coef.</b>	<b>Valor T</b>	<b>Valor p</b>
Constante	0,0157	0,0201	0,78	0,460
Rendimiento simulación	0,9288	0,0872	10,65	0,000

En la tabla 6 se presenta el resumen del modelo de validación, donde el  $R^2$  de 94.19% demuestra la elevada capacidad explicativa del modelo. Este valor es idéntico al reportado en la sección 3.2.3, confirmando la consistencia de la validación.

**Tabla 6***Resumen del modelo de la validación*

<b>Desviación estándar (S)</b>	<b>R-cuadrado</b>
0,0214848	94,19%

Este alto grado de concordancia entre simulación y experimento proporciona confianza en la capacidad del modelo cinético para describir el comportamiento real del sistema y justifica su uso como herramienta de diseño y optimización del proceso. La validación exitosa confirma que las constantes cinéticas (Tabla 1), mecanismos de reacción (esquema de cuatro reacciones) y parámetros termodinámicos incorporados en el modelo de simulación son representativos del sistema físico real.

### 3.4.2. ANOVA univariado

En la tabla 7 se presenta el análisis de varianza univariado que permite identificar la significancia estadística de cada factor mediante la prueba F. Un valor F alto indica que la variabilidad explicada por el factor es mucho mayor que la variabilidad residual.

Por lo tanto, el análisis estadístico confirma que la temperatura es el único factor con efecto significativo sobre el rendimiento de furfural ( $F = 22.23, p = 0.042 < 0.05$ ), mientras que el tiempo de residencia no mostró influencia estadística en el rango evaluado ( $F = 6.08, p = 0.141 > 0.05$ ). Este resultado valida que la temperatura es el factor predominante que controla el proceso, en concordancia con el análisis paramétrico previo.

**Tabla 7**

*ANOVA univariado de tiempo de residencia y temperatura*

<b>Fuente</b>	<b>GL</b>	<b>Valor F</b>	<b>Valor p</b>	<b>Interpretación</b>
Temperatura	1	22.23	0,042	Significativo
Tiempo	2	6.08	0,141	No significativo

### 3.4.3. Modelo Lineal General: Efectos de temperatura y tiempo de residencia

El análisis mediante un modelo lineal general permitió evaluar simultáneamente el efecto de ambos factores sobre el rendimiento de furfural. Los resultados presentados en la tabla 8 muestran que el modelo ajustado explica el 94.50% de la variabilidad observada en el rendimiento ( $R^2 = 0.945$ ), lo cual indica un excelente ajuste estadístico. Además, el alto coeficiente de determinación sugiere que las dos variables estudiadas capturan de manera efectiva los principales factores que gobiernan el proceso.

**Tabla 8**

*Resumen estadístico del Modelo Lineal General para rendimiento vs temperatura y tiempo de residencia*

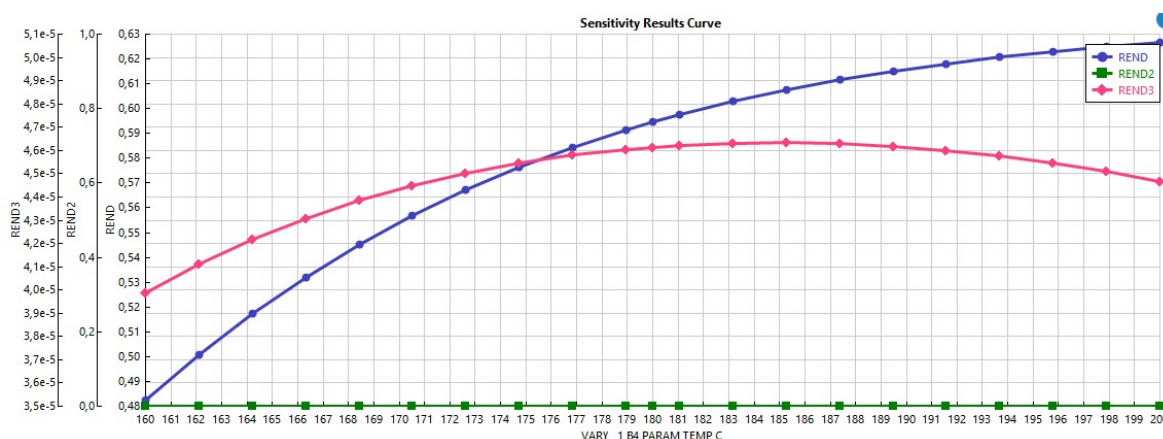
Desviación estándar (S)	R-cuadrado
0,0147196	94,50%

**3.4.4. Integración del análisis estadístico y cinético: Análisis de curvas de sensibilidad**

Si bien el análisis estadístico demostró que 200°C produce el mayor rendimiento de furfural, un análisis más profundo desde la perspectiva de ingeniería química y simulación de proceso revela que las condiciones óptimas reales corresponden a 180°C, 0.5M, con 60-90 minutos de residencia.

**Ilustración 14**

*Curvas de sensibilidad de rendimientos*



*Nota:* REND (azul): rendimiento de furfural, REND2 (verde): rendimiento de la humina, REND3 (rosa): rendimiento del furano

La ilustración 14 presenta las curvas de sensibilidad que muestran la evolución de los diferentes rendimientos en función de la temperatura, aunque el rendimiento del furfural (curva azul)

aumenta continuamente con la temperatura hasta alcanzar el máximo cercano a 220°C. En contraste, la formación de huminas (línea rosada, D2) que es el producto de la degradación térmica, aumenta progresivamente con la temperatura, pero de manera más pronunciada por encima de 180°C.

La tabla 4 respalda cuantitativamente esta observación. A 180°C con 60-90 minutos, se obtienen rendimientos de 57-59% con generación controlada de productos de degradación: D2 entre  $6.08 \times 10^{-4}$  y  $9.32 \times 10^{-4}$  kg/h. En contraste, a 200°C con 60-90 minutos, aunque el rendimiento aumenta ligeramente a 62-63%, la generación de D2 alcanza valores de  $9.81 \times 10^{-4}$  a  $1.48 \times 10^{-3}$  kg/h, representando un incremento de hasta 59% en productos de degradación. Este incremento desproporcionado en las reacciones secundarias compromete la selectividad global del proceso.

Desde una perspectiva de optimización de procesos químicos, las condiciones óptimas no son necesariamente aquellas que maximizan el rendimiento bruto, sino las que optimizan el balance rendimiento – selectividad – estabilidad operacional.

A 180°C (60 – 90 min) se alcanza 57-59%, apenas 3 – 4 puntos porcentuales menos que a 200°C (62 – 63%), por lo tanto, esta pequeña diferencia (5 – 6 % relativo) no justifica operar a condiciones donde la degradación es significativamente mayor.

### **3.5 Análisis de Rentabilidad del Proceso**

Los resultados económicos obtenidos demuestran una viabilidad financiera favorable del proyecto de producción de furfural a partir de cascarilla de arroz. El análisis revela que con una inversión de capital inicial (CAPEX) de \$8,216,850 USD y costos operativos anuales de \$14,533,500 USD, el proceso genera ventas totales proyectadas de \$43,076,100 USD al año. Esta estructura de costos e ingresos resulta en un margen operativo considerable, donde los ingresos por ventas superan significativamente los costos combinados de operación y materias primas, los cuales ascienden a aproximadamente \$3678.57 USD anuales.

**Tabla 9***Costos de operación (OPEX)*

<b>Concepto</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Calor total requerido (Total heating duty)	kJ/s	369.19
Enfriamiento total requerido (Total cooling duty)	kJ/s	359.086
Calor neto (Calor total – Enfriamiento total)	kJ/s	10.104
Costo total de calentamiento	\$/h	3.29106
Costo total de enfriamiento	\$/h	0.178
Costo neto (Calentamiento + Enfriamiento)	\$/h	3.46
Costo total de utilidades	\$/h	3.46
Costo neto de las corrientes de alimentación	\$/h	1232.89
Costo neto de las corrientes de producto	\$/h	4914.92
Costo neto Global	\$/h	3678.57

**Tabla 10***Costo de inversión de capital (CAPEX)*

<b>Concepto</b>	<b>Unidad</b>	<b>Valor</b>
Costo total de capital	USD	8216850
Costo total de operación	USD/año	5759810
Costo total de materias primas	USD/año	10805500

Ventas totales de productos	USD/año	43076100
Costo total de utilidades	USD/año	528846
Tasa de retorno deseada	%/año	20
Período de recuperación (Payback)	años	5.92
Costo de equipos	USD	6357000
Costo total instalado	USD	7733800

El período de recuperación de la inversión (payback) calculado es de 5 años, valor que se encuentra dentro del rango estándar para proyectos de biorrefinería en la industria química, donde típicamente se aceptan períodos de recuperación entre 3 y 6 años. Este indicador demuestra que el proyecto es financieramente viable, ya que la inversión inicial se recuperaría en un plazo razonable considerando la naturaleza del proceso y el sector industrial. Si bien representa un compromiso de capital a mediano plazo, el proyecto cumple con la tasa de retorno deseada del 20% anual, confirmando que genera valor económico superior al costo de oportunidad del capital invertido.

### **Tabla 11**

#### *Costos de utilidades*

<b>Descripción</b>	<b>Fluido</b>	<b>Costo por hora</b>	<b>Cost Units</b>
Electricidad	-	50,321292	USD/H
Utilidad -B5	Agua	0,178118	USD/H
Utilidad-B3	Vapour	2,383268	USD/H

Utilidad-B7	Vapor	0,161066	USD/H
Steam @400PSI	Vapor	0,34363	USD/H

**Tabla 12**

*Costos de materia prima y productos*

Descripción	Tasa por hora LB/h	Costo/kg \$/LB	Costo por hora \$/h
Pentilbenceno	440,920	0.45	89.983965
Cascarilla de arroz	255.29	1.44	166.722327
Furfural	559.67	8.78	4913.99323

El análisis detallado de costos revela que el componente más significativo en la estructura de gastos corresponde a las materias primas, con \$10,805,500 USD anuales, seguido por los costos de operación de \$5759810 USD anuales. Sin embargo, el alto valor agregado del producto final, con un precio de venta de furfural de \$8.78/kg comparado con el costo de la cascarilla de arroz de \$1.44/kg, permite obtener márgenes de utilidad robustos que justifican la implementación del proceso. Los costos de utilidades, que incluyen vapor de alta y media presión, agua de enfriamiento y electricidad, representan una fracción menor del costo total (\$528,846 USD anuales), lo que indica una eficiencia energética adecuada del diseño propuesto y una gestión optimizada de los recursos energéticos en las etapas de calentamiento, enfriamiento y destilación.

### ***3.5.1. Impacto ambiental***

La implementación del proceso de producción de furfural genera un impacto ambiental positivo significativo al sustituir la práctica convencional de quema directa de cascarilla por una ruta de

valorización química. Para cuantificar este beneficio, se realizó una simulación comparativa de emisiones de CO<sub>2</sub> entre ambos escenarios.

La simulación de combustión completa de cascarilla de arroz, representativa del método actual de disposición en piladoras ecuatorianas, arrojó una tasa de emisión de 396 kg/h de CO<sub>2</sub>. En contraste, el proceso integrado de producción de furfural, incluyendo las emisiones asociadas a la generación de utilidades (vapor, electricidad) y operaciones unitarias (reacción, separación, destilación), genera 78.6 kg/h de CO<sub>2</sub>, equivalente al 19.85% de las emisiones del escenario de quema directa.

Esta diferencia representa una reducción del 80.15% en emisiones de dióxido de carbono, equivalente a 317.4 kg CO<sub>2</sub>/h evitados por cada tonelada de cascarilla procesada. Considerando una operación continua de 8,000 horas anuales (factor de carga típico para plantas químicas), el proceso de valorización evitaría aproximadamente 2,539 toneladas de CO<sub>2</sub> por año en comparación con el método de disposición convencional. Este beneficio ambiental se suma a la eliminación de emisiones de material particulado (PM<sub>2.5</sub>, PM<sub>10</sub>), óxidos de nitrógeno (NO<sub>x</sub>) y compuestos orgánicos volátiles (COVs) asociados a la combustión incontrolada a cielo abierto, los cuales no fueron cuantificados en este análisis, pero representan impactos adicionales sobre la calidad del aire y la salud pública en zonas arroceras.

## **Capítulo 4**

## 4. Conclusiones y recomendaciones

### 4.1. Conclusiones

- Este trabajo representa un paso importante en la valorización de residuos agroindustriales ecuatorianos. El modelo cinético estudiado en este trabajo fue tomado de una tesis de pregrado previa enfocada en el desarrollo del modelo para el proceso de producción de furfural. De esta manera, hemos logrado transformar dicho modelo cinético teórico en una herramienta de simulación validada que predice con precisión el comportamiento del proceso de producción de furfural a partir de cascarilla de arroz. La mayor fortaleza del estudio está en su validación estadística rigurosa. El modelo cinético demostró una capacidad predictiva decente ( $R^2 = 94.19\%$ , error relativo =  $8.78\%$ ) al compararse con datos experimentales independientes de literatura especializada. Esta validación es crucial porque transforma el modelo de una simple aproximación teórica en una herramienta confiable para diseñar y analizar procesos industriales.
- Al integrar simulación computacional con análisis estadístico factorial, pudimos identificar las mejores condiciones operacionales. No nos limitamos a buscar el rendimiento máximo. También consideramos el balance global entre rendimiento, selectividad y viabilidad económica. Los resultados muestran que las condiciones de  $180^\circ\text{C}$ ,  $0.5\text{M H}_2\text{SO}_4$  y 60-90 minutos representan el punto operacional de mejores resultados. Bajo estas condiciones logramos un rendimiento de 57-59% con formación controlada de productos de degradación. Es cierto que temperaturas superiores ( $200^\circ\text{C}$ ) incrementan ligeramente el rendimiento a 62-63%. Sin embargo, este pequeño beneficio no justifica el aumento desproporcionado en la generación de huminas (incremento del 59% en D2), que compromete tanto la selectividad como la eficiencia económica global del proceso.

- El proceso de producción de furfural mediante hidrólisis ácida de cascarilla de arroz presenta viabilidad técnico-económica favorable con inversión de capital (CAPEX) de \$8.2 millones USD, costos operativos anuales (OPEX) de \$14.5 millones USD, e ingresos proyectados de \$43.1 millones USD anuales. El período de recuperación de la inversión de 5 años y la tasa interna de retorno (TIR) del 20% anual sitúan al proyecto dentro de rangos aceptables para biorrefinerías industriales. El análisis de costos identificó las materias primas (\$10.8 millones/año) y operación (\$14.5 millones/año) como componentes principales, mientras que las utilidades energéticas (\$411,201/año) representan fracción menor, indicando eficiencia energética adecuada del diseño propuesto.

Reconocemos algunas limitaciones metodológicas importantes. La principal es que el estudio se basa exclusivamente en simulación computacional. No incluye validación experimental directa con cascarilla de arroz ecuatoriana. Aunque el modelo fue validado con datos de Ershova et al., sabemos que la biomasa local presenta variabilidad composicional que podría introducir desviaciones respecto a nuestras predicciones.

Además, el modelo cinético asume un comportamiento de reactor ideal (CSTR). Esto significa que no considera las limitaciones de transferencia de masa sólido-líquido que probablemente sean significativas a escala industrial. Por otro lado, el análisis económico proporciona estimaciones útiles de viabilidad, pero se fundamenta en costos paramétricos de literatura. Estos valores necesitan actualizarse con cotizaciones locales de equipos y utilidades en el contexto ecuatoriano para tener mayor precisión.

#### **4.2.Recomendaciones**

- Es necesario validar experimentalmente el modelo cinético utilizando cascarilla de arroz ecuatoriana proveniente de diferentes regiones productoras (Guayas, Los Ríos, Manabí).

Esto permitirá cuantificar cómo la variabilidad composicional de la biomasa local afecta el rendimiento real de furfural.

- La experimentación debe incluir una caracterización fisicoquímica completa de la biomasa: contenido de pentosanos, humedad, cenizas y sílice. Posteriormente, los resultados experimentales deben compararse directamente con las predicciones del modelo bajo condiciones idénticas de temperatura, concentración de catalizador y tiempo de residencia. Solo así podremos confirmar si las predicciones del modelo se ajustan a la realidad de nuestra materia prima.
- El modelo cinético actual asume un comportamiento de reactor ideal, lo que significa que no considera las limitaciones de transferencia de masa sólido-líquido. Estas limitaciones pueden ser significativas cuando pasamos a escala industrial.
- Para abordar esto, las investigaciones futuras deben incorporar cinética heterogénea y modelado CFD del reactor de hidrólisis. También es fundamental realizar estudios de mezclado que evalúen cómo la distribución de tiempos de residencia afecta la selectividad del proceso. Estos fenómenos de transporte pueden marcar la diferencia entre un proceso eficiente y uno que no logra los rendimientos esperados a escala comercial.
- El diseño actual emplea destilación extractiva con pentilbenceno como solvente. Sin embargo, vale la pena evaluar alternativas de separación que podrían mejorar la eficiencia global del proceso.
- Entre las opciones prometedoras están la extracción reactiva con aminas terciarias y los sistemas bifásicos orgánicos-acuosos. Estas tecnologías permitirían la extracción in-situ del furfural, reduciendo su tiempo de exposición al medio ácido. Esto es importante porque menos tiempo en contacto con el ácido significa menos reacciones de degradación secundaria y, por tanto, mayor rendimiento y selectividad.

- Aunque el proyecto aborda la reducción de emisiones por quema de cascarilla (54.62 kt CO<sub>2</sub>eq/año), necesitamos profundizar el análisis ambiental. Un análisis de ciclo de vida (LCA) completo cuantificaría la huella de carbono real del proceso, el consumo de agua, la generación de efluentes ácidos. Este análisis también debe incluir estrategias concretas para el tratamiento de aguas residuales ácidas y la valorización de corrientes secundarias como la lignina residual y las cenizas ricas en sílice. No basta con evitar la quema de cascarilla; debemos asegurarnos de que todo el proceso sea genuinamente sostenible y que aprovechemos al máximo todos los subproductos generados.

## 5. Referencias

- Al Ghatta, A., Perry, J. M., Maeng, H., Lemus, J., & Hallett, J. P. (2023). Sustainable and efficient production of furoic acid from furfural through amine assisted oxidation with hydrogen peroxide and its implementation for the synthesis of alkyl furoate. *RSC Sustainability*, 1(2), 303–309. <https://doi.org/10.1039/D2SU00102K>
- Almhofer, L., Bischof, R. H., Madera, M., & Paulik, C. (2023). Kinetic and mechanistic aspects of furfural degradation in biorefineries. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 101(4), 2033–2049. <https://doi.org/10.1002/cjce.24593>
- Bakili, S., Kivevele, T., Kichonge, B., Salifu, A. A., & King'onde, C. K. (2025). Furfural from lignocellulose biomass a comprehensive review of hydrolysis methods production technologies and integration into the circular economy. *Discover Sustainability*, 6(1), 870. <https://doi.org/10.1007/s43621-025-01644-5>
- Banco Mundial. (2024). *Agricultura, silvicultura y pesca, valor agregado (% del PIB) – Ecuador*. Banco Mundial. Banco Mundial. <https://datos.bancomundial.org/indicador/NV.AGR.TOTL.ZS?locations=EC>

- Bastidas, R., & Quimi, S. (2024). *Evaluación de la producción de Furfural a partir hidrólisis ácida de cascarilla de arroz mediante simulación*. Escuela Superior Politécnica del Litoral.
- Edumujeze, D., Fournier-Salaün, M.-C., & Leveneur, S. (2025). Production of furfural: From kinetics to process assessment. *Fuel*, 381, 133423. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133423>
- Gupta, A., Stead, T. S., & Ganti, L. (2024). Determining a Meaningful R-squared Value in Clinical Medicine. *Academic Medicine & Surgery*. <https://doi.org/10.62186/001c.125154>
- Ibarra, A., Molina, J., Crespo, B., Pozo, M., & Ramírez, L. (2023). Análisis de la cadena agroalimentaria de arroz en Ecuador. *Polo Del Conocimiento*, 8(5).
- IMARC Group. (2025). *Furfural Prices, Trend, Chart, Demand, Market Analysis, News, Historical and Forecast Data Report 2025 Edition*. <https://www.imarcgroup.com/furfural-pricing-report>
- INEC. (2024). *Encuesta de Superficie y Producción Agropecuaria Continua (ESPAC)*. Instituto Nacional de Estadística y Censos. (2025). *Encuesta de Superficie y Producción Agropecuaria Continua ESPAC 2024: Presentación de resultados*. [https://www.ecuadorencifras.gob.ec/documentos/web-inec/Estadisticas\\_agropecuarias/espac/2024/Presentacion\\_de\\_resultados\\_ESPAC\\_2024.pdf](https://www.ecuadorencifras.gob.ec/documentos/web-inec/Estadisticas_agropecuarias/espac/2024/Presentacion_de_resultados_ESPAC_2024.pdf)
- Khalil, U., Bilal Shakoore, M., Ali, S., Rizwan, S., Nasser Alyemeni, S., & Wijaya, L. (2020). Adsorption-reduction performance of tea waste and rice husk biochars for Cr(VI) elimination from wastewater. *Journal of Saudi Chemical Society*, 24, 799-810. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2020.07.001>

- Köchermann, J., Mühlenberg, J., & Klemm, M. (2018). *Kinetics of hydrothermal furfural production from organosolv hemicellulose and d-xylose*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(43), 14417–14427. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b03402>
- Lantasi, A. I. D., Syafrudin, & Budiyo. (2020). *Rice husk as renewable energy for biogas production from biomass: prospect and challenges*. 202, 06024. <https://doi.org/10.1051/E3SCONF/202020206024>
- López, J., Cazorla, X., Zambrano, G., & Chancusig, W. (2021). La economía circular de los desechos generados por la gramínea de arroz frente al efecto ambiental. *Polo Del Conocimiento*, 6.
- MacArthur, E. (2021). *¿Qué es una economía circular?* <https://www.ellenmacarthurfoundation.org/es/temas/presentacion-economia-circular/vision-general>
- Ministerio de Ambiente y Energía. (2024). *Sistema nacional de inventarios de gases de efectos invernaderos*. [https://singei.ambiente.gob.ec/singei/?page\\_id=1446](https://singei.ambiente.gob.ec/singei/?page_id=1446)
- Ministerio del Ambiente, A. y T. E. (MAATE). (2024). *Documento del inventario nacional (din) de gases de efecto invernadero del año 2022 del ecuador*. [https://unfccc.int/sites/default/files/resource/e.%202024.12.27\\_NID\\_5CN1RBT\\_v7\\_final.pdf](https://unfccc.int/sites/default/files/resource/e.%202024.12.27_NID_5CN1RBT_v7_final.pdf)
- O. Ershova, J. Kanervo, S. Hellsten y H. Sixta. (2015). The role of xylulose as an intermediate in xylose conversion to furfural: insights via experiments and kinetic modelling. *RSC Advances* 5, 66727-66737. <https://doi.org/10.1039/c5ra10855a>

- Patah, D., & Dasar, A. (2022). Strength Performance of Concrete Using Rice Husk Ash (RHA) as Supplementary Cementitious Material (SCM). *Civil Engineering Forum*, 261–276. <https://doi.org/10.22146/jcef.3488>
- Pierrat, L., & García-Triñanes, P. (2024). Optimising furfural production from lignocellulosic biomass: Feedstock selection, Process enhancement, and Techno-Economic and Environmental viability. *Chemical Engineering Research and Design*, 212, 261–280. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2024.10.035>
- Reséndiz Vega, M., Molina Morejón, V. M., Palos Cerda, G. C., Morales Rivas, J. G., Rosales Salinas, I. G., Avitia Rodríguez, J. A., Ramírez Hernández, J. J., Sánchez Sulú, N. V., Calvo Contreras, C. M., Sánchez de la Cruz, A., Ramírez Sánchez, J., Peña Cheng, L. M., Prado Rebolledo, I., Mendoza Araujo, L. G., Tinoco Navarro, C. M., Robles Francia, V. H., De la Cruz Caballero, A. M., Martínez Cervantes, N. F., Robles Ramos, V. A., ... Cruz Delgado, D. (2024). *Economía circular, innovación tecnológica y sustentabilidad: Casos de estudio* (P. Rivera Acosta, R. E. Martínez Torres, & J. C. Neri Guzmán, Eds.). Ediciones Comunicación Científica. <https://doi.org/10.52501/cc.186>
- Robinson Ubau, D. B., Torres Martínez, D. U., & Vílchez Pérez, H. J. (2022). Uso sostenible de la cascarilla de arroz para productos de valor añadido. *Revista Ciencia y Tecnología El Higo*, 12(1), 2–27. <https://doi.org/10.5377/elhigo.v12i1.14516>
- Sánchez, A., Gómora, J., & Hoyos, L. (2025). Hidrólisis ácida. Método convencional para la revalorización de biomasa lignocelulósica. *Contactos, Revista de Educación en Ciencias e Ingeniería*. *Revista De Educación En Ciencias E Ingeniería*, 141, 90–100. <https://contactos.izt.uam.mx/index.php/contactos/article/view/524>
- Sherif, N., Gadalla, M., & Kamel, D. (2021). Acid-hydrolysed furfural production from rice straw bio-waste: Process synthesis, simulation, and optimisation. *South African*

*Journal of Chemical Engineering*, 38, 34–40.

<https://doi.org/10.1016/j.sajce.2021.08.002>

Tortajada, P. (2024). *Productos de interés a partir de furfural*. Universidad Politécnica de

Valencia. Wang, Q., Qi, W., Wang, W., Zhang, Y., Leksawasdi, N., Zhuang, X., Yu,

Q., & Yuan, Z. (2019). Production of furfural with high yields from corncob under

extremely low water/solid ratios. *Renewable Energy*, 144, 139–146.

<https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.07.095>

## 6. Apéndice

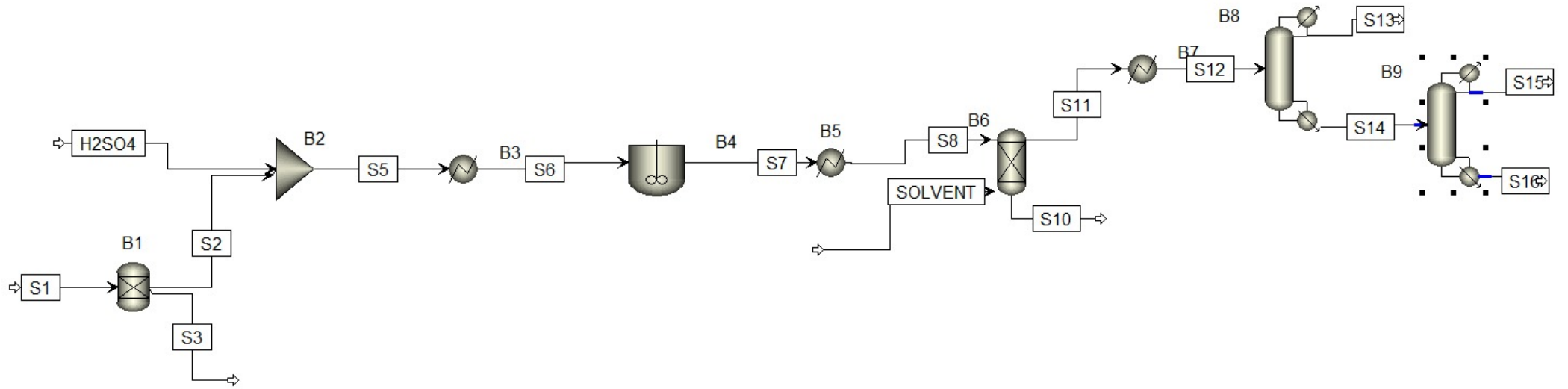
### Apéndice A

Tabla de constantes cinéticas

T_°C	Tiempo de residencia (min)	$C_{H_2SO_4}$ (M)	k1_min-1	k2_min-1	k3_min-1	k4_min-1
160	30	0,5	0,00060001	0,11129618	0,15251361	0,00039812
160	60	0,5	0,00060001	0,11129618	0,15251361	0,00039812
160	90	0,5	0,00060001	0,11129618	0,15251361	0,00039812
160	30	1	0,00240004	0,44518472	0,61005444	0,00159248
160	60	1	0,00240004	0,44518472	0,61005444	0,00159248
160	90	1	0,00240004	0,44518472	0,61005444	0,00159248
180	30	0,5	0,00250174	0,34284286	0,19439994	0,000684
180	60	0,5	0,00250174	0,34284286	0,19439994	0,000684
180	90	0,5	0,00250174	0,34284286	0,19439994	0,000684
180	30	1	0,01000696	1,37137144	0,77759975	0,00273602
180	60	1	0,01000696	1,37137144	0,77759975	0,00273602
180	90	1	0,01000696	1,37137144	0,77759975	0,00273602
200	30	0,5	0,00924493	0,96029035	0,24275836	0,00112262
200	60	0,5	0,00924493	0,96029035	0,24275836	0,00112262
200	90	0,5	0,00924493	0,96029035	0,24275836	0,00112262
200	30	1	0,03697971	3,84116142	0,97103345	0,0044905
200	60	1	0,03697971	3,84116142	0,97103345	0,0044905
200	90	1	0,03697971	3,84116142	0,97103345	0,0044905

## Apéndice B

Proceso de obtención de furfural en Aspen Plus V14





		Material								
Stream Name	Units	S8	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	SOLVENT
<b>Description</b>										
<b>From</b>		B5	B6	B6	B7	B8	B8	B9	B9	
<b>To</b>		B6		B7	B8		B9			B6
<b>Stream Class</b>		CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN	CONVEN
<b>Phase</b>		Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase		Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase	Liquid Phase
<b>Temperature</b>	C	20	20,04229607	20,01225831	180	102,3816681	194,5936696	160,6319866	204,3959448	20
<b>Pressure</b>	bar	1	1,01	1	1	1	1	1	1	1
<b>Mass Flows</b>	kg/hr	573,43	559,5699255	213,8600745	213,8600745	4,855664342	209,0044101	7,949971616	201,0544385	200
<b>D-XYL-01</b>	kg/hr	1,420091587	1,323757672	0,096333914	0,096333914	1,579E-30	0,096333914	1,86071E-57	0,096333914	0
<b>WATER</b>	kg/hr	489,0568542	488,8010362	0,255818031	0,255818031	0,255818031	2,58079E-15	0	0	0
<b>SULFU-01</b>	kg/hr	23,43	21,84059292	1,589407075	1,589407075	1,52678E-22	1,589407076	7,122E-43	1,589407076	0
<b>FURFU-01</b>	kg/hr	12,01132583	0,109440027	11,90188581	11,90188581	4,033557945	7,868327853	7,202153743	0,66617411	0
<b>DEXTR-01</b>	kg/hr	43	42,99160064	0,008399359	0,008399359	1,66555E-18	0,008399359	2,77509E-34	0,008399359	0
<b>N-PEN-01</b>	kg/hr	0	0,297829166	199,7021708	199,7021708	0,566199121	199,1359717	0,747817871	198,3881539	200
<b>VANIL-01</b>	kg/hr	0	0	0	0	0	0	0	0	0
<b>L-ARA-01</b>	kg/hr	4,5	4,194736157	0,305263843	0,305263843	8,68808E-30	0,305263843	1,43634E-56	0,305263843	0
<b>FURAN</b>	kg/hr	0,000932095	0,000868865	6,323E-05	6,323E-05	6,32288E-05	1,21702E-09	1,21702E-09	1,05706E-17	0
<b>CARBO-01</b>	kg/hr	0,000383523	0,000357506	2,60168E-05	2,60168E-05	2,60168E-05	6,62937E-29	0	0	0
<b>C10H1-01</b>	kg/hr	9,31474E-05	8,68286E-05	6,31879E-06	6,31879E-06	2,03431E-22	6,31879E-06	3,30797E-37	6,31879E-06	0
<b>BETA--01</b>	kg/hr	0,010319568	0,009619526	0,000700042	0,000700042	2,16359E-32	0,000700042	3,87871E-59	0,000700042	0

## Apéndice D

### Balance de energía del proceso

Utilities											
	Energy			Greenhouse Gases			Energy Cost Savings		ΔTmin [C]	Status	
	Current [cal/sec]	Target [cal/sec]	Saving Potential [cal/sec]	Current [kg/hr]	Target [kg/hr]	Reduction Potential [kg/hr]	\$/Yr	%			
HP Steam	3611	7,102E+04	-6,741E+04	0	0	0	-22.267	-1.866,94	10,0		
<b>Total Hot Utilities</b>	<b>3611</b>	<b>7,102E+04</b>	<b>-6,741E+04</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>-22.267</b>	<b>-1.866,94</b>		✓	
COOLING	8,78E+04	6,703E+04	2,077E+04	0	0	0	378	23,65	5,0		
<b>Total Cold Utilities</b>	<b>8,78E+04</b>	<b>6,703E+04</b>	<b>2,077E+04</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>378</b>	<b>23,65</b>		✓	

Heat exchanger details												
Heat Exchanger	Status	Type	Ideas for Changes	Base Duty [cal/sec]	Hot Inlet Temperature [C]	Hot Outlet Temperature [C]	Cold Inlet Temperature [C]	Cold Outlet Temperature [C]	Recoverable Duty [cal/sec]	Base Area [sqm]	Overall Heat Transfer Coefficient [W/m²K]	Method
B5	✓	Cooler		8,577E+04	180,0	60,0	24,9	25,0	1,196E+04	2,766	Default	▼
Condenser@B9	✓	Cooler		1336	160,6	160,1	24,9	25,0	1336	0,2176	Default	▼
Condenser@B8	✓	Cooler		693,3	137,8	94,8	24,9	25,0	351,1	0,02743	Default	▼
Reboiler@B8	✓	Heater		821,7	250,0	249,0	188,8	193,3	0,0	0,0363	Default	▼
Reboiler@B9	✓	Heater		1603	250,0	249,0	198,5	202,3	0,0	0,07343	Default	▼
B4_heat_Exchan	✓	Heater	💡	1186	250,0	249,0	180,0	180,5	0,0	0,3704	Default	▼

## Apéndice E

### Resumen de análisis económico en Aspen

Summary	Utilities	Unit operation	Equipment	Agri
▼				
Total Capital Cost [USD]	8.216.850			
Total Operating Cost [USD/Year]	5.759810			
Total Raw Materials Cost [USD/Year]	10.805.500			
Total Product Sales [USD/Year]	43.076.100			
Total Utilities Cost [USD/Year]	528846			
Desired Rate of Return [Percent/Year]	20			
P.O. Period [Year]	5.92			
Equipment Cost [USD]	6.357.000			
Total Installed Cost [USD]	7.733.800			

## Apéndice F

### Emisiones de CO2 actuales

#### COMBUSTION

Summary		
Hierarchy	PLANT ▼	
Scope 1 CO2e	24,8205	kg/hr ▼
Scope 2 CO2e	371,299	kg/hr ▼
Total CO2e	396,12	kg/hr ▼
Net carbon fee / tax	0	\$/hr ▼

## Apéndice G

### Emisiones de CO2 propuesto

Hierarchy	PLANT ▼	
Scope 1 CO2e	0	kg/hr ▼
Scope 2 CO2e	78,6349	kg/hr ▼
Total CO2e	78,6349	kg/hr ▼
Net carbon fee / tax	0	\$/hr ▼

## Apéndice H

*ANOVA univariado temperatura*

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Temperatura	1	0,004817	0,004817	6,28	0,066
Error	4	0,003067	0,000767		
Total	5	0,007883			

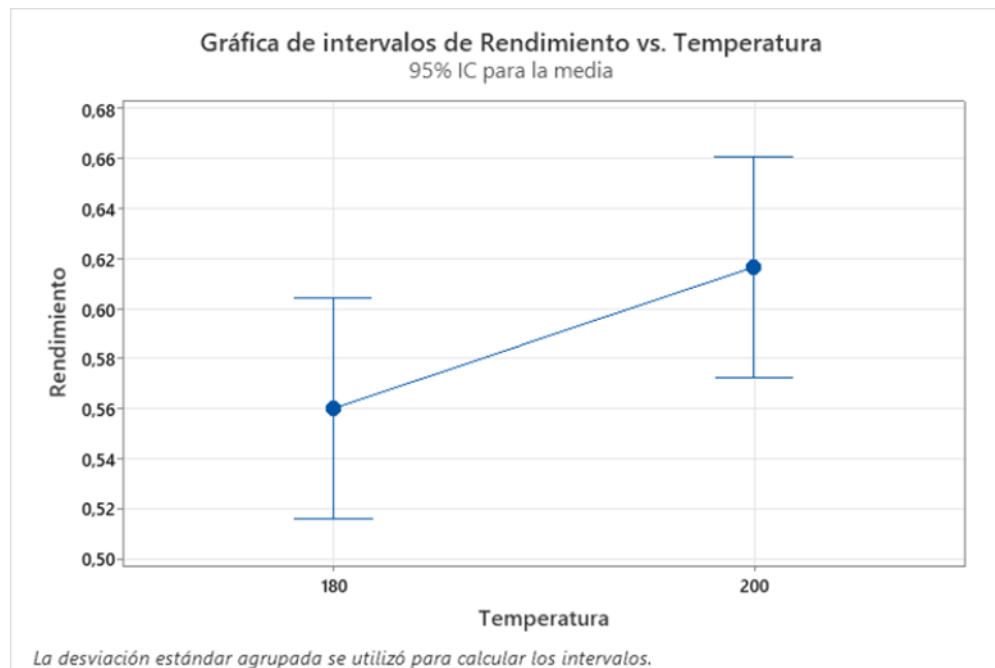
## Apéndice I

*Medias por temperatura*

Temperatura	N	Media	Desv.Est.	IC de 95%
180	3	0,5600	0,0361	(0,5156; 0,6044)
200	3	0,61667	0,01528	(0,57228; 0,66105)

## Apéndice J

Intervalos de confianza vs temperatura



## Apéndice K

*ANOVA univariado tiempo*

Fuente	GL	SC Ajust.	MC Ajust.	Valor F	Valor p
Tiempo de residencia	2	0,002633	0,001317	0,75	0,543
Error	3	0,005250	0,001750		
Total	5	0,007883			

## Apéndice L

*Medias por tiempo*

Tiempos de residencia	N	Media	Desv.Est.	IC de 95%
30	2	0,5600	0,0566	(0,4659; 0,6541)
60	2	0,5950	0,0354	(0,5009; 0,6891)
90	2	0,6100	0,0283	(0,5159; 0,7041)

## Apéndice M

*Intervalos de confianza vs tiempo*

