

Escuela Superior Politécnica del Litoral

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Título del trabajo:

Evaluación de la producción de Furfural a partir hidrólisis ácida de cascarilla de arroz mediante simulación.

ING-2694

Proyecto Integrador

Previo la obtención del Título de:

Ingeniero Químico

Presentado por:

Ronald Sebastian Bastidas Llaguno

Stephanie Priscilla Quimí Vélez

Guayaquil - Ecuador

Año: 2024

Dedicatoria

El presente proyecto se lo dedico a mis padres, Ileana y Ronald, quienes me dieron la vida, una educación y su apoyo incondicional durante toda mi vida. Su amor y dedicación han sido mi mayor fortaleza. Asimismo, quiero dedicárselo a mis abuelitos, Jorge e Irma, quienes, junto a mis padres, siempre velaron por el bienestar mío y de mis hermanos, que gracias a su cuidado, amor y sabiduría nos hemos convertido en las personas que somo ahora. También quiero dedicar este trabajo a mi mejor amiga y amada hermana Alejandra, ya que su presencia y apoyo ha sido un pilar fundamental en mi vida. Por último, extendo esta dedicatoria a dos personas que han sido fundamentales en mis años universitario. Finalmente, a mi enamorada, Stephanie Quimí, y a mi mejor amigo, Alexander Salinas, por hacer de mis años universitarios una experiencia inolvidable.

Ronald Bastidas Llaguno

Dedicatoria

El presente proyecto lo dedico a mis padres, Rose y Robert, quienes han sido un pilar fundamental en mi camino profesional, brindándome su amor, apoyo y guía incondicional. A mis hermanos, que siempre me alentaron a seguir adelante con confianza y determinación. A Ronald, a quien conocí inesperadamente y cuya presencia se ha convertido en una inspiración invaluable en esta etapa de mi vida. A Paula y Patrick, cuyo respaldo constante me motivó en cada etapa de este viaje académico.

Stephanie Quimí Vélez

Agradecimientos

Queremos expresar nuestro más sincero agradecimiento a la Ingeniera Andrea Barcia, cuya guía y valiosos consejos hicieron posible el desarrollo y la redacción de cada fase de este trabajo.

De igual forma, agradecemos profundamente a la Ingeniera Kelly Beltrán, cuyas ideas y orientación fueron clave para superar los desafíos que surgieron a lo largo de este proyecto.

Ronald Bastidas Llaguno

Stephanie Quimí Vélez

Declaración Expresa

Nosotros Ronald Sebastian Bastidas Llaguno y Stephanie Priscilla Quimí Vélez 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 mí/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 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, 24 de enero del 2025.



Ronald Sebastian
Bastidas Llaguno



Stephanie Priscilla
Quimí Vélez

Evaluadores

MSc. Nadia Magaly Flores Manrique

Profesor de Materia

MSc. Andrea Fernanda Barcia

Quimi

Tutor de proyecto

Resumen

El presente trabajo evalúa la producción de furfural a partir de cascarilla de arroz mediante hidrólisis ácida, utilizando herramientas de modelado y simulación en Python. Esta investigación aborda la gestión sostenible de los residuos agroindustriales en Ecuador, donde la cascarilla de arroz posee un alto potencial económico y ambiental. La metodología incluye la recopilación de datos experimentales, el desarrollo de un modelo cinético para describir las reacciones involucradas y la implementación de simulaciones para determinar las condiciones adecuadas del proceso. Los parámetros críticos evaluados fueron la concentración de ácido, la temperatura y el tiempo de reacción, validando los resultados con estudios previos. Se realizó un análisis estadístico mediante un diseño experimental y superficie de respuesta, complementado con evaluaciones tecno-económicas y ambientales. Los resultados indican que la producción de furfural puede maximizarse a 160 °C, con una concentración de ácido sulfúrico de 0.33 M y un tiempo de reacción de 30 minutos, logrando un rendimiento del 56.79%. Además, el análisis ambiental sugiere que el uso de cascarilla de arroz contribuye a la economía circular y reduce las emisiones de CO_2 .

Palabras Clave: Rendimiento, Modelo Cinético, Condiciones Óptimas, Residuo.

Abstract

This study evaluates the production of furfural from rice husk through acid hydrolysis, using modeling and simulation tools in Python. This research addresses the sustainable management of agro-industrial waste in Ecuador, where rice husk represents a resource with high economic and environmental potential. The methodology includes the collection of experimental data, the development of a kinetic model to describe the reactions involved, and the implementation of simulations to determine the appropriate process conditions. Critical parameters such as acid concentration, temperature, and reaction time were evaluated, validating the results with previous studies. A statistical analysis was conducted using experimental design and response surface methodology, complemented by techno-economic and environmental assessments. The results indicate that furfural production can be maximized at 160 °C with a sulfuric acid concentration of 0.33 M and a reaction time of 30 minutes, achieving a yield of 56.79%. Additionally, the environmental analysis suggests that using rice husk as raw material contributes to the circular economy and reduces CO₂ emissions.

Keywords: Yield, Kinetic Model, Optimal Conditions.

Índice general

Evaluadores	6
Resumen	7
<i>Abstract</i>	8
Índice general	9
Índice de figuras	11
Índice de tablas	11
Capítulo 1	12
1. Introducción.....	13
1.1 Descripción del Problema.....	14
1.2 Justificación del Problema	15
1.3 Objetivos	16
<i>1.3.1 Objetivo general</i>	16
<i>1.3.2 Objetivos específicos</i>	16
1.4 Marco teórico.....	16
<i>1.4.1 Furfural a partir de cascarilla de arroz</i>	16
<i>1.4.2 Proceso de síntesis de furfural</i>	18
<i>1.4.3 Etapas reactiva y condiciones de operación</i>	20
<i>1.4.4 Rol de las simulaciones</i>	23
Capítulo 2	24
2. Metodología.....	25
2.1 Mecanismo de reacción	25
2.2 Obtención de datos experimentales	26
2.3 Determinación de parámetros cinéticos	27
2.4 Deducción del modelo cinético global.....	31
<i>2.4.1 Formulación del modelo cinético global</i>	31
2.5 Simulación del proceso de producción de Furfural en Python	33

2.5.1 Implementación del Modelo en Python	33
2.6 Validación del modelo cinético propuesto	34
2.7 Diseño de experimentos y análisis estadístico	34
2.8 Análisis tecno-económico.....	37
2.9 Análisis ambiental	38
Capítulo 3	39
3. Resultados y análisis.....	40
3.1 Validación del modelo cinético	40
3.2 Resultados del diseño de experimentos	44
3.3 Análisis estadístico y determinación de condiciones óptimas.....	51
3.3.1 Resultados del análisis de varianza (ANOVA).....	52
3.3.2 Análisis de regresión.....	55
3.3.3 Determinación y validación de las condiciones óptimas.....	57
3.4 Análisis Económico	62
3.5 Análisis Ambiental:.....	63
Capítulo 4	67
4. Conclusiones y recomendaciones	68
4.1 Conclusiones.....	68
4.2 Recomendaciones.....	69
5. Referencias.....	70

Índice de figuras

Figura 1 <i>Producto y subproductos generados durante la etapa reactiva</i>	19
Figura 2 <i>Reacción de hidrólisis ácida de celulosa y hemicelulosa</i>	21
Figura 3 <i>Conversión de xilosa (X) a furfural (F) y subproductos</i>	27
Figura 4 <i>Esquema del mecanismo de reacción para la deshidratación de xilosa.</i>	28
Figura 5 <i>Graficas de conversión de Xilosa y rendimiento de Furfural</i>	40
Figura 6 <i>Evolución de Xilosa, Furfural e Intermedios según el Modelo Cinético</i>	43
Figura 7 <i>Efecto de la concentración del catalizador ácido en el rendimiento de Furfural</i>	49
Figura 8 <i>Resultados del análisis de varianza (ANOVA) de la Serie A</i>	53
Figura 9 <i>Resultados del análisis de varianza (ANOVA) de la Serie B</i>	54
Figura 10 <i>Gráficos de Superficie de Respuesta de la Serie A</i>	58
Figura 11 <i>Gráficos de Superficie de Respuesta de la Serie B</i>	60
Figura 12 <i>Contribución de cada componente a la huella de carbono (kg CO₂ eq)</i>	65

Índice de tablas

Tabla 1 <i>Propiedades físicas del furfuraldehído</i>	17
Tabla 2 <i>Ordenes de reacción y constantes de velocidad</i>	30
Tabla 3 <i>Serie A</i>	36
Tabla 4 <i>Serie B</i>	36
Tabla 5 <i>Porcentajes de error entre conversión de Xilosa y rendimiento de Furfural</i>	42
Tabla 6 <i>Resultados de la Serie A</i>	44
Tabla 7 <i>Resultados de la Serie B</i>	45
Tabla 8 <i>Coefficientes del modelo de regresión</i>	57
Tabla 9 <i>Condiciones óptimas de las Serie A</i>	59
Tabla 10 <i>Condiciones óptimas de las Serie B</i>	61
Tabla 11 <i>Criterios de rentabilidad de la producción de Furfural</i>	63

Capítulo 1

1. Introducción

La investigación se enfoca en la evaluación de la producción de furfural a partir de la cascarilla de arroz mediante hidrólisis ácida. En Ecuador, la cascarilla de arroz es un subproducto generado en grandes volúmenes por la agroindustria, y su gestión inadecuada ocasiona problemas ambientales significativos, tales como la contaminación del suelo y la emisión de gases contaminantes. Pese a su potencial como fuente de materias primas de valor agregado, la falta de estrategias eficientes para su aprovechamiento representa un desafío. Este estudio plantea transformar este residuo en furfural, un compuesto químico valioso, evaluando la viabilidad de un proceso mejorado mediante simulación.

El objetivo general de este proyecto es valorar el proceso de producción de furfural a partir de cascarilla de arroz mediante hidrólisis ácida, aplicando herramientas de modelado y simulación en Python para mejorar la eficiencia del rendimiento.

Esta investigación resulta relevante debido a la necesidad de soluciones sostenibles en el manejo de residuos agroindustriales en Ecuador. La transformación de la cascarilla de arroz en furfural no solo propone un uso innovador y económico de un residuo abundante, sino que también apoya el modelo de economía circular. La producción de furfural ofrece múltiples aplicaciones industriales en sectores como el químico, farmacéutico y de biocombustibles, lo que contribuye a diversificar la economía ecuatoriana y generar valor agregado en la agroindustria (Rojas-González et al., 2019).

Para el desarrollo de este estudio y lograr el objetivo planteado, se empleará el análisis de superficie de respuesta (ASR) para la determinación de las condiciones de operación óptimas. Sin embargo, su aplicación requiere de diversas técnicas estadísticas. Las cuales son, el diseño de experimentos, en base a las variables de operación consideradas, y regresión lineal. Por otro lado, se realizará la validación experimental del proceso con las condiciones obtenidas del ASR.

1.1 Descripción del Problema

La cascarilla de arroz es un subproducto agroindustrial generado en grandes volúmenes en países con fuerte producción agrícola, como Ecuador, donde el sector agroalimentario representa el 15% del Producto Interno Bruto (PIB) (FAO, 2024). Este residuo, resultante del procesamiento del arroz, a menudo es desechado de manera ineficiente, contribuyendo a problemas ambientales significativos. La falta de gestión adecuada, tecnología y el desperdicio de recursos impiden aprovechar todo su potencial como fuente renovable.

Una característica destacada de la cascarilla de arroz es su alto contenido de hemicelulosa, convirtiéndola en una materia prima prometedora para la producción de furfural, una plataforma química usada en diversas industrias (Aguilar et al., 2022). Sin embargo, los procesos actuales de producción de furfural mediante hidrólisis ácida presentan importantes desafíos técnicos, como la baja eficiencia de conversión, la formación de subproductos no deseados, entre otros.

Estos obstáculos técnicos limitan la viabilidad industrial de la conversión de la cascarilla de arroz en furfural, lo que a su vez imposibilita el desarrollo de soluciones sostenibles para el manejo de este residuo. En Ecuador, donde la agroindustria es clave para el desarrollo económico, el desaprovechamiento de estos desechos afecta tanto a los productores como al medio ambiente, perpetuando una problemática que podría mitigarse. (Santos et al., 2018)

La necesidad de desarrollar un proceso eficiente que maximice la conversión de la cascarilla en furfural es crítica para hacer viable este enfoque. En este contexto, la simulación del proceso de hidrólisis ácida se presenta como una herramienta útil para evaluar los factores clave que impactan su rendimiento, como: concentración del ácido empleado, temperatura y tiempo de reacción. Identificarlos permitiría mejorar el proceso, y reducir subproductos no deseados, posibilitando un aprovechamiento sostenible de la cascarilla de arroz en aplicaciones industriales de alto valor agregado. Además, que permitiría el fortalecimiento del sector agroindustrial, creando nuevos empleos y fomentando una mayor sostenibilidad económica (Ponce, 2016).

1.2 Justificación del Problema

El proyecto aborda una problemática significativa en Ecuador, donde la cascarilla de arroz, un subproducto agroindustrial, es generado en grandes volúmenes y su manejo inadecuado tiene un impacto ambiental considerable. La falta de estrategias eficientes para aprovechar estos residuos contribuye a la degradación del entorno y desperdicia un recurso con gran potencial económico.

En términos de sostenibilidad, la transformación de la cascarilla de arroz en furfural, un compuesto químico clave en diversas industrias representa una oportunidad para reducir el impacto ambiental negativo generado por la acumulación de estos residuos. El proceso de hidrólisis ácida permite la obtención de furfural a partir de biomasa lignocelulósica como la cascarilla de arroz, debido a su alto contenido de hemicelulosa, lo que la convierte en una materia prima ideal para este propósito (Rojas-González et al., 2019). Sin embargo, los desafíos técnicos actuales, como la baja eficiencia de conversión y la formación de subproductos no deseados, limitan la viabilidad de este proceso a nivel industrial (Bariani et al., 2021).

Además de lo antes expuesto, el proyecto también cobra relevancia en el contexto de la economía circular, un modelo económico que busca el aprovechamiento máximo de los recursos y la minimización de residuos. La utilización de la cascarilla de arroz para la producción de furfural no solo aborda la problemática del manejo de residuos, sino que también fomenta la creación de nuevos productos de alto valor añadido, contribuyendo a la sostenibilidad del sector agroindustrial en Ecuador (National Geographic, 2022). Al implementar un proceso más eficiente a través de simulaciones, esta investigación puede fortalecer la agroindustria, creando empleo, mejorando la gestión de residuos y reduciendo el impacto ambiental negativo.

En adición, la obtención de furfural es estratégica para diversas industrias como la química, la farmacéutica y la producción de biocombustibles, ampliando las aplicaciones de este subproducto y promoviendo una economía más diversificada y sostenible en Ecuador (Rojas-

González et al., 2019) . Esta investigación también contribuirá a la generación de conocimiento técnico que puede ser aplicado en otros contextos agrícolas y agroindustriales, mejorando la gestión de residuos y favoreciendo el desarrollo de tecnologías más limpias y eficientes.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Valorar el proceso de producción de furfural a partir de cascarilla de arroz mediante hidrólisis ácida, aplicando herramientas de modelado y simulación en Python para mejorar el rendimiento.

1.3.2 Objetivos específicos

1. Identificar las condiciones óptimas de operación para la conversión de furfural mediante la simulación del proceso de hidrólisis ácida de cascarilla de arroz, utilizando Python.
2. Analizar el impacto de los parámetros de operación: concentración de ácido, temperatura y tiempo de reacción, sobre el rendimiento, a partir de los resultados de la simulación.
3. Validar las condiciones de operación identificadas mediante un análisis comparativo con los resultados reportados en estudios previos.

1.4 Marco teórico

1.4.1 Furfural a partir de cascarilla de arroz

El furfural, cuyas propiedades físicas se detallan en la Tabla 1, es un compuesto químico valioso que se produce a partir de la hidrólisis y deshidratación de biomasa lignocelulósica en un medio ácido. Este compuesto es ampliamente utilizado como precursor en la fabricación de productos químicos industriales, tales como biocombustibles, resinas, disolventes y aditivos (Sun et al., 2020). El proceso de producción de furfural implica la despolimerización de hemicelulosa a altas temperaturas, donde los residuos agrícolas ricos en hemicelulosa se convierten primero en pentosas, que posteriormente se deshidratan para formar furfural. Entre las materias primas

utilizadas se encuentran residuos como mazorcas de maíz, pajas y cascarillas de arroz (Yong et al., 2022).

Tabla 1

Propiedades físicas del furfuraldehído

Parámetros	Datos
Peso molar (g/mol)	96.08
Densidad a 20°C (g/mL)	1.16
Punto de ebullición (°C)	161.7
Punto de fusión (°C)	-36.5
Presión Crítica (MPa)	5.502
Temperatura Crítica (°C)	397
Solubilidad a 25 °C en agua	8.3
Densidad de vapor	3.3
Viscosidad a 25°C (mPa s)	1.49

Nota. Las propiedades físicas del furfural, como su solubilidad y viscosidad, son fundamentales para entender su comportamiento en procesos industriales, especialmente en aplicaciones químicas. Obtenida de (Yong et al., 2022).

La biomasa lignocelulósica, compuesta principalmente por celulosa, hemicelulosa y lignina, se presenta como una alternativa sostenible al uso de recursos fósiles en la industria química (Yu M. et al., 2020). La hemicelulosa, uno de los principales componentes de esta biomasa, contiene xilano, un polímero que, mediante hidrólisis ácida, puede convertirse en xilosa y posteriormente en furfural (Santos et al., 2018).

Entre los materiales lignocelulósicos, la cascarilla de arroz es especialmente adecuada para la producción de furfural debido a su composición química: 16-18% de hemicelulosa, 37.1% de

celulosa y 24.1% de lignina (Yong et al., 2022). Este subproducto del procesamiento del arroz, que representa entre el 20-25% del peso seco del grano, está disponible en grandes cantidades a nivel mundial, lo que lo convierte en un recurso ideal para la generación de compuestos químicos de alto valor. Su uso no solo proporciona una solución ecológica al manejo de residuos, sino que también genera oportunidades económicas en sectores industriales clave (Kasangana et al., 2022).

1.4.2 Proceso de síntesis de furfural

La producción de furfural a partir de biomasa lignocelulósica, como la cascarilla de arroz, se lleva a cabo en tres etapas principales: pretratamiento, etapa reactiva y purificación. Estas etapas son interdependientes y determinan, en conjunto, la eficiencia del proceso de producción.

Pretratamiento

En la primera etapa, el pretratamiento tiene como objetivo descomponer la estructura compleja de la biomasa, facilitando el acceso de los catalizadores ácidos a la hemicelulosa y mejorando la liberación de los xilanos. Entre los métodos de pretratamiento más utilizados se encuentran los procesos hidrotermales, explosión de vapor, uso de ácidos diluidos y tratamiento alcalino (Ahn et al., 2024). Otros pretratamientos incluyen la ozonólisis, que ha demostrado ser eficaz para degradar selectivamente la lignina sin afectar la celulosa ni la hemicelulosa, facilitando así la posterior hidrólisis (Travaini et al., 2016). Por otro lado, la explosión de vapor con amoníaco también ha sido efectiva en la producción de furfural, según Behera et al., (2014).

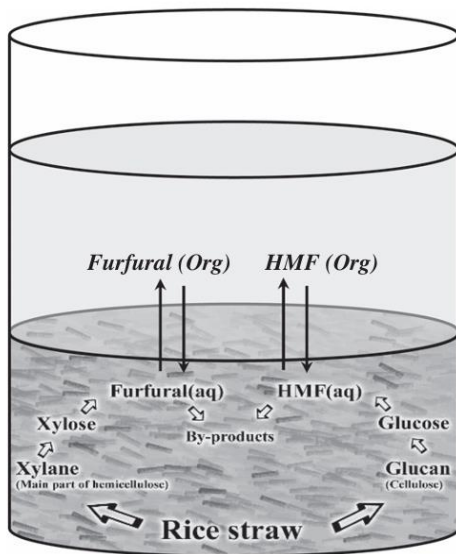
Etapas reactiva

En la etapa reactiva, se emplea un medio ácido para catalizar dos reacciones clave: hidrólisis y deshidratación. Durante la hidrólisis, la hemicelulosa se descompone en xilosa, que posteriormente es deshidratada para producir furfural. Este proceso es catalizado principalmente por ácidos minerales como H_2SO_4 , HCl , HNO_3 o H_3PO_4 , que son económicos, pero generan desafíos ambientales debido a la dificultad de eliminar los residuos ácidos (Yu M. et al., 2020).

Además, según indican Ahn et al (2024) , Yong et al (2022) y Bariani et al (2021), la temperatura, la concentración de ácido y el tiempo de reacción son variables clave que afectan el rendimiento de furfural. Y que definir los valores óptimos para estas variables presenta un desafío a nivel de laboratorio, lo cual limita la adopción de este proceso a escala industrial.

Figura 1

Producto y subproductos generados durante la etapa reactiva



Nota. La imagen muestra la hidrólisis de dos de los componentes principales de la paja de arroz, la hemicelulosa y la celulosa, los cuales, se degradan a productos de alto valor como lo son el Furfural y el HMF. Obtenida de (Amiri et al., 2010).

Por su parte, Amiri et al (2010), destaca el uso de sistemas bifásicos en esta etapa del proceso, con la finalidad de evitar reacciones secundarias con el furfural que disminuyan su rendimiento. Estos sistemas utilizan solventes orgánicos, como tetrahidrofurano, tolueno o pentilbenceno, que ayudan a extraer el furfural durante la reacción, evitando su degradación. La cual ocurre como efecto de su fraccionamiento en sustancias más simple o reacciones secundarias con productos derivados de la hidrólisis de celulosa. Esta situación se muestra en las Figuras 1 y 2.

Purificación

La última etapa del proceso es la purificación del furfural, que generalmente se realiza mediante destilación. Sin embargo, este procedimiento presenta dos grandes desafíos. En primer lugar, la solución de furfural suele ser muy diluida debido al alto contenido de agua, lo que aumenta el consumo energético. En segundo lugar, a medida que la concentración de furfural alcanza aproximadamente el 35.5% w/w, se forma un azeótropo que dificulta su separación.

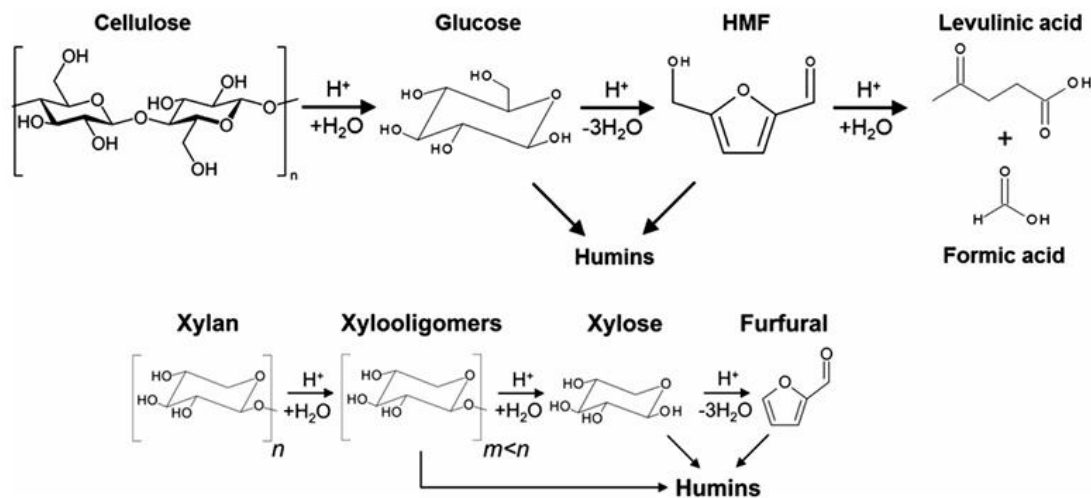
Para superar esta limitación Yong et al., (2022) sugiere, el empleo de la destilación azeotrópica, que permite una separación más eficiente. Alternativamente, los sistemas bifásicos también son útiles en esta etapa, ya que evitan la formación de azeótropos y facilitan la extracción del furfural mediante destilación simple (Contreras-Zarazúa et al., 2022).

1.4.3 Etapas reactiva y condiciones de operación

La síntesis de furfural a partir de cascarilla de arroz se lleva a cabo mediante dos reacciones fundamentales. Sherif et al., (2021), explica que primero, se realiza la hidrólisis de las hemicelulosas presentes en la cascarilla, principalmente del xilano, que se convierte en xilosa. Posteriormente, la xilosa se somete a un proceso de deshidratación catalizado para transformarse en furfural. Esta secuencia de reacciones se observa en la Figura 2. El éxito de este proceso depende en gran medida de la correcta identificación de las condiciones óptimas para cada reacción, ya que estas influyen directamente en el rendimiento final.

Figura 2

Reacción de hidrólisis ácida de celulosa y hemicelulosa



Nota. La figura detalla las reacciones químicas que ocurren durante la hidrólisis y deshidratación de celulosa y xilano, destacando los productos principales y los subproductos generados. Obtenida de (Yu M. et al., 2020).

Condiciones óptimas de la hidrólisis

Según Kasangana et al., (2022), es posible obtener un rendimiento de xilosa del 80.8% a 121 °C, con una concentración de ácido sulfúrico del 1.8% y un tiempo de reacción de 41.4 minutos. Por su parte, Suxia et al., (2012) reporta un rendimiento del 97.89% de xilosa a 110 °C, con una concentración de ácido del 2.5%, un tiempo de reacción de tres horas y una relación biomasa-solvente de 1:8, lo cual sugiere que el proceso de extracción de xilosa puede llevarse a cabo a temperaturas y concentraciones de ácido moderadas. Estos resultados sugieren que es posible obtener altos rendimientos de xilosa bajo condiciones moderadas de temperatura y concentración de ácido, lo que favorece la eficiencia energética del proceso.

Condiciones óptimas de producción de furfural

En procesos de producción de furfural de una sola etapa, donde las reacciones de hidrólisis y deshidratación ocurren simultáneamente en una única unidad, las condiciones de operación suelen ser más severas. Normalmente, las temperaturas varían entre 180 y 230 °C, con tiempos de reacción de 10 a 105 minutos, y se emplean concentraciones de ácido sulfúrico de 0.05% a 3% en

peso. Además, se ha demostrado que la incorporación de técnicas adicionales, como el uso de ultrasonido, mejora la conversión de hemicelulosa en furfural (Bizzi et al., 2019).

En el caso específico de la cascarilla de arroz, Bariani et al., (2021) identificaron condiciones óptimas para maximizar el rendimiento de furfural. Este estudio reportó un rendimiento equivalente al 6.0% del peso de la cascarilla seca (55% del rendimiento teórico) al operar a 200 °C, con una concentración de ácido sulfúrico de 0.10% y un tiempo de reacción de 40 minutos. Los resultados indicaron que el rendimiento de furfural aumenta gradualmente al incrementar la temperatura, la concentración de ácido o el tiempo de reacción, pero solo hasta un punto crítico. Superar este umbral conduce a una disminución del rendimiento debido a la aparición de reacciones secundarias que degradan el furfural formado.

Limitaciones y formación de subproductos

A temperaturas elevadas, concentraciones de ácido más altas o tiempos de reacción prolongados, el furfural generado comienza a descomponerse, promoviendo la formación de ácidos secundarios como el acético, fórmico y levulínico (Suxia et al., 2012). Estos subproductos se incrementan bajo condiciones de tratamiento más agresivas, lo que sugiere que el uso de condiciones extremas promueve la degradación del furfural en productos secundarios no deseados, limitando así el rendimiento general. Este comportamiento sugiere que condiciones de reacción extremas no solo reducen el rendimiento de furfural, sino que también incrementan la formación de productos secundarios, afectando negativamente la viabilidad económica y técnica del proceso.

En conclusión, la síntesis de furfural a partir de cascarilla de arroz requiere un balance delicado entre las condiciones operativas para garantizar altos rendimientos y reducir la formación de subproductos. Si bien temperaturas más elevadas o concentraciones de ácido mayores pueden mejorar inicialmente la conversión de xilosa a furfural, condiciones excesivamente severas promueven reacciones de degradación que disminuyen la eficiencia del proceso. Por lo tanto, la

identificación de parámetros óptimos, como se observa en los estudios mencionados, resulta esencial en este proceso.

1.4.4 Rol de las simulaciones

Las simulaciones computacionales desempeñan un papel crucial en la mejora de procesos químicos, como la producción de furfural. Herramientas como Python permiten modelar y simular las condiciones de operación, evaluando múltiples variables simultáneamente para identificar combinaciones óptimas de temperatura, concentración de ácido y tiempo de reacción. Además, las simulaciones reducen la necesidad de experimentación física, lo que ahorra tiempo y recursos, mientras minimizan los riesgos asociados al escalamiento industrial.

Estudios como el de Ahn et al., (2024) han demostrado cómo los análisis basados en modelos matemáticos y simulaciones pueden predecir el rendimiento de furfural bajo diferentes escenarios operativos. La integración de estos enfoques en este proyecto permitirá validar las condiciones óptimas propuestas y garantizar la viabilidad del proceso antes de su implementación a escala industrial.

Capítulo 2

2. Metodología.

2.1 Mecanismo de reacción

La determinación del mecanismo de reacción es esencial para comprender las rutas moleculares y los factores que influyen en la formación de productos deseados, como el furfural, y productos indeseados. Más allá de describir las reacciones involucradas, el análisis de estas rutas constituye una herramienta clave para proponer modelos cinéticos que permitan ajustarse de manera precisa a los datos experimentales.

En este contexto, se propone como base el mecanismo desarrollado por (Krzelj et al., 2020), dado su éxito en describir la deshidratación de xilosa bajo condiciones experimentales controladas de alta acidez (0.1 M a 2.0 M de ácido sulfúrico) y temperaturas elevadas (120 °C a 160 °C). Este mecanismo incluye tres pasos fundamentales:

1. Conversión de xilosa (X) a intermediarios (I).
2. Formación de furfural (F) y productos de degradación primaria ($D1$) a partir de los intermediarios.
3. Degradación secundaria de furfural a un producto final indeseado ($D2$).

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^+), especialmente relevante en condiciones de alta acidez (> 1 M). Además, se destaca el papel de los intermediarios de reacción, cruciales para explicar la pérdida de selectividad hacia furfural en determinadas condiciones experimentales.

Este mecanismo se propone como la base para el desarrollo de un modelo cinético robusto que no solo describa las rutas de reacción observadas, sino que también se ajuste de manera confiable a los datos experimentales disponibles. De este modo, proporciona una herramienta integral para maximizar la formación de furfural mientras minimiza la generación de productos indeseados, mejorando así la eficiencia y selectividad del proceso.

2.2 Obtención de datos experimentales

Con el propósito de desarrollar un modelo cinético acorde con el mecanismo de reacción de deshidratación de xilosa, fue necesario determinar las constantes cinéticas asociadas a cada reacción involucrada. Estas constantes incluyen la velocidad específica de reacción (k), el orden de reacción (n), la energía de activación (E_A) y el factor pre-exponencial (A). Generalmente, estos parámetros se obtienen mediante ensayos experimentales en los que se varían las condiciones de temperatura, concentración del catalizador ácido y tiempo de reacción.

Mediante revisión bibliográfica se recopilaron datos experimentales relevantes del estudio desarrollado por Krzelj et al., (2020). Este artículo proporciona un modelo cinético validado para la deshidratación de xilosa bajo un rango de concentraciones de ácido (0.1 M a 2.0 M) y temperaturas (120 °C a 160 °C).

El artículo presentó los resultados experimentales en formato gráfico, incluyendo:

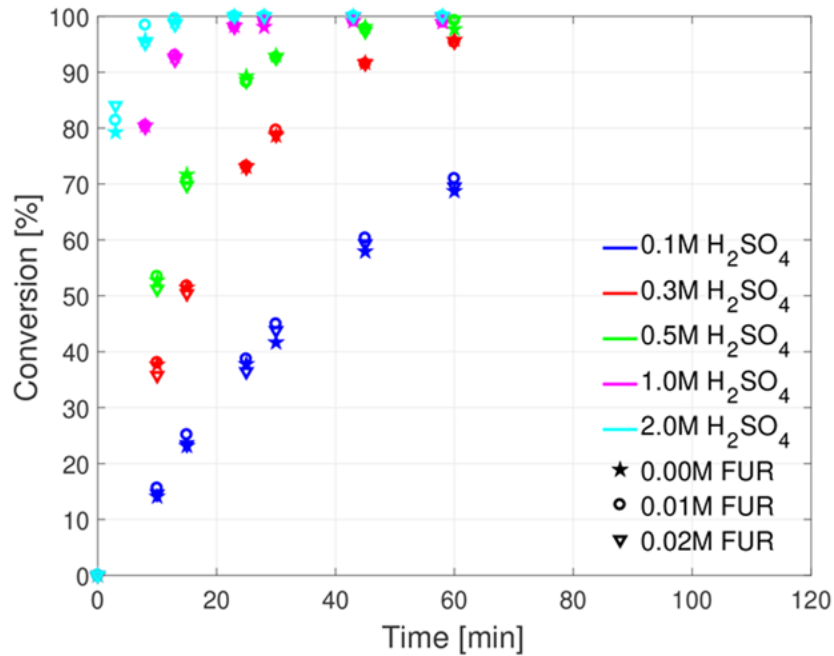
1. Gráficos de conversión de xilosa en función del tiempo.
2. Gráficos derivados del método integral para reacciones de primer orden.
3. Gráficos de constantes de velocidad (k) frente a la concentración de iones hidronio (H_3O^+).

Dado que los datos no se presentaron en formato tabular, se utilizaron herramientas gráficas para su extracción. Y para minimizar la incertidumbre, se verificó la coherencia de los datos extraídos mediante la comparación de tendencias en los diferentes gráficos.

Cada gráfico incluía representaciones para cuatro temperaturas de reacción (120 °C, 130 °C, 140 °C y 150 °C) y cinco concentraciones de ácido sulfúrico (0.1 M, 0.3 M, 0.5 M, 1 M y 2 M), diferenciadas por colores como se observa en la figura 3. Esta estructura permitió organizar los datos experimentales de forma sistemática, con un total de 20 conjuntos de datos por gráfico.

Figura 3

Conversión de xilosa (X) a furfural (F) y subproductos



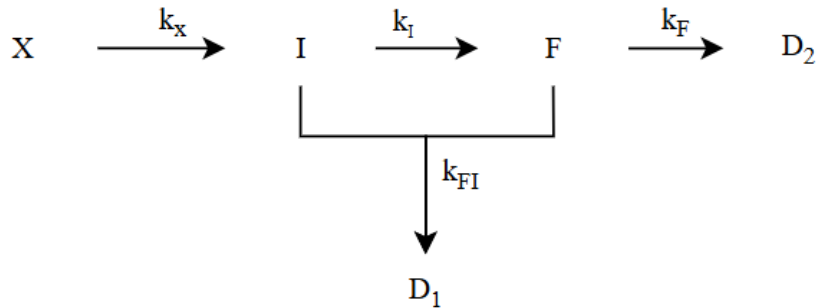
Nota. El gráfico muestra la conversión de xilosa (X) en función del tiempo para diferentes concentraciones de ácido sulfúrico (H_2SO_4) a una temperatura de 160 °C y una concentración inicial de xilosa de 0.069 M. Los símbolos representan las concentraciones de furfural (F): estrella para 0.00 M, círculo para 0.01 M y triángulo para 0.02 M. Adaptado de (Krzelj et al., 2020).

2.3 Determinación de parámetros cinéticos

A partir de los datos experimentales recopilados del estudio de Krzelj et al. (2020), se procedió a determinar los parámetros cinéticos asociados al mecanismo de deshidratación de xilosa, el cual se presenta en la figura 4. Este proceso se basó en el uso de modelos cinéticos establecidos y herramientas gráficas, alineados con las condiciones experimentales descritas en el artículo.

Figura 4

Esquema del mecanismo de reacción para la deshidratación de xilosa.



Nota. El esquema muestra el mecanismo de conversión de xilosa (X) en furfural (F) mediante un intermedio (I), acompañado de reacciones competitivas que generan los subproductos ($D1$) y ($D2$). Las constantes de velocidad (k_x, k_I, k_{FI}, k_F) determinan la selectividad del proceso.

1. Conversión de Xilosa a Intermediario de reacción

La primera etapa del mecanismo presentado en la figura 1, corresponde a la generación del intermedio (I) a partir de la xilosa (X). Esta reacción, representada por la ecuación (2.1), se describió mediante un modelo cinético de primer orden, cuya ley de velocidad se encuentra expresada en la ecuación (2.2).



$$r_x = \frac{dX}{dt} = -k_x[X] \quad (2.2)$$

Con los datos obtenidos de los gráficos de conversión versus tiempo presentes en el artículo de referencia, se aplicó el método integral para ajustar los datos experimentales al modelo de primer orden, que está representado por la ecuación (2.3) en términos de concentración y por la ecuación (2.4) en términos de conversión, y que se obtiene de la integración de la ecuación (2.2).

Este ajuste se llevó a cabo graficando $\ln\left(\frac{1}{1-X_X}\right)$ versus tiempo, obteniendo una curva lineal cuya pendiente corresponde a la constante de velocidad k_X .

$$\ln\left(\frac{C_{i_0}}{C_i}\right) = kt \quad (2.3)$$

$$\ln\left(\frac{1}{1-X_i}\right) = kt \quad (2.4)$$

El procedimiento fue repetido para cada combinación de temperatura y concentración de ácido, verificando la linealidad mediante coeficientes de correlación ($R^2 > 0.95$) y considerando la posible incertidumbre derivada del método gráfico de extracción de datos.

2. Conversión de Intermediario a Furfural y reacción de degradación primaria

Este segundo y tercer paso del mecanismo abarca las siguientes reacciones:

1. Conversión del intermediario (I) a furfural, representada por la ecuación (2.5) y (2.6).



$$r_I = \frac{dI}{dt} = k_I[I] \quad (2.6)$$

2. Formación de un producto de degradación primaria (D_1) a partir de furfural, descrita por la ecuación (2.7) y (2.8).



$$r_I = r_F = \frac{dF}{dt} = -k_{FI}[I][F] \quad (2.8)$$

Los valores de k_I y k_{FI} fueron obtenidos directamente de los gráficos de k frente a la concentración de H_3O^+ , utilizando el método descrito previamente.

3. Segunda reacción de degradación de Furfural

El último paso del mecanismo considera la degradación secundaria de furfural (F) hacia un producto indeseado (D_2), descrita por la ecuación (2.9) y (2.10), esta última es la expresión de velocidad de reacción respecto al furfural.



$$r_F = -k_F F \quad (2.10)$$

Los datos de los gráficos de $\ln\left(\frac{C_{F0}}{C_F}\right)$ versus tiempo, obtenidos del artículo, se ajustaron a una reacción de primer orden representada por la ecuación (2.3). Las pendientes de las curvas ajustadas proporcionaron los valores de k_F para cada combinación de concentración de ácido y temperatura, verificando nuevamente la consistencia del modelo mediante análisis de correlación.

Tabla 2

Ordenes de reacción y constantes de velocidad

Etapa	Orden de reacción	Constante de Velocidad específica [min^{-1}]	Autor del artículo
1	1	0.4760	(Krzelj et al., 2020)
2	1	0.6450	(Krzelj et al., 2020)
3	1	5.4000	(Krzelj et al., 2020)
4	1	0.0056	(Krzelj et al., 2020)

Nota. Se muestran los valores de las constantes cinéticas de cada etapa del mecanismo de reacción, correspondientes a las condiciones específicas de 0.5 M de ácido sulfúrico y 150 °C de temperatura de reacción. Datos tomados de (Krzelj et al., 2020).

Energía de activación (E_A) y factor pre-exponencial (A)

Para determinar estos parámetros se utilizó la ecuación de Arrhenius en su forma linealizada, dada por la ecuación (2.11).

$$\ln(k) = \ln(A) - E_A \frac{1}{RT} \quad (2.11)$$

Se generaron gráficos independientes para cada combinación de concentración y temperatura, obteniendo valores diferenciados de E_A y A . Este enfoque permitió identificar cómo estos parámetros dependen directamente de la concentración de iones hidronio (H_3O^+).

2.4 Deducción del modelo cinético global

El desarrollo del modelo cinético global se basa en la integración de las expresiones cinéticas individuales obtenidas para cada etapa del mecanismo de reacción presentado en la Figura 4. Este modelo proporciona una representación matemática que describe la evolución de las concentraciones de xilosa (X), intermediario (I), furfural (F) y subproductos (D_1 y D_2) de manera simultánea, considerando las interacciones y las constantes cinéticas asociadas.

2.4.1 Formulación del modelo cinético global

La deducción del modelo global implica combinar las leyes de velocidad para las etapas elementales, determinando la velocidad neta para cada componente del mecanismo.

- **Xilosa**

$$\frac{dX}{dt} = -k_x[X] \quad (2.12)$$

- **Intermediario**

$$\frac{dI}{dt} = k_x[X] - k_I[I] - k_{FI}[I][F] \quad (2.13)$$

- **Furfural**

$$\frac{dF}{dt} = k_I[I] - k_{FI}[I][F] - k_F[F] \quad (2.14)$$

- **Producto de degradación primaria (D₁)**

$$\frac{dD_1}{dt} = k_{FI}[I][F] \quad (2.15)$$

- **Producto de degradación primaria (D₂)**

$$\frac{dD_2}{dt} = k_F[F] \quad (2.16)$$

Consideraciones del modelo global

- Se asumió el estado estacionario para el intermediario (*I*), lo que implica que su concentración no varía significativamente a lo largo del tiempo ($\frac{dI}{dt} = 0$).
- El modelo considera dependencias cuadráticas en las constantes cinéticas respecto a la concentración de iones hidronio (H_3O^+), según lo descrito por Krzelj et al. (2020).
- El primer paso del mecanismo es el paso lento, como efecto de que presenta la mayor energía de activación según los resultados de Krzelj et al. (2020).

Expresión cinética global

Combinando las ecuaciones anteriores y resolviendo bajo la suposición de estado estacionario para *I*, se obtiene la expresión cinética global para la evolución de *F*, representada por la ecuación (2.12).

$$\frac{dF}{dt} = \frac{k_I k_X [X]}{k_I + k_{FI} [F]} - \frac{k_X k_{FI} [X] [F]}{k_I + k_{FI} [F]} - k_F [F] \quad (2.17)$$

Esta ecuación describe la formación y consumo de furfural, incluyendo las interacciones con los intermediarios y las rutas de degradación hacia los subproductos D₁ y D₂.

2.5 Simulación del proceso de producción de Furfural en Python

La simulación del modelo cinético de deshidratación de xilosa se realizó utilizando el lenguaje de programación Python, debido a su versatilidad y la disponibilidad de potentes bibliotecas científicas como SciPy y NumPy, que permiten la resolución numérica eficiente de las ecuaciones diferenciales que describen las reacciones involucradas. El objetivo principal de la simulación es explorar el comportamiento de la conversión de xilosa bajo diversas condiciones experimentales y obtener las mejores condiciones para la maximización de furfural y la minimización de productos indeseados, en línea con los objetivos de la tesis.

2.5.1 Implementación del Modelo en Python

La simulación en Python se desarrolló utilizando el siguiente enfoque:

- **Estructura del Código:** El modelo cinético global, derivado como una expresión única que combina todas las etapas del mecanismo de reacción (descrito en la Sección 2.4), fue implementado como una ecuación diferencial no lineal. Esta ecuación describe simultáneamente la evolución de las concentraciones de xilosa (X), intermediario (I), furfural (F) y subproductos (D_1 y D_2) en función del tiempo. Las variables del modelo se estructuraron de la siguiente manera:
 - **Variable independiente:** Tiempo (t), que controla el progreso de la reacción.
 - **Variables dependientes:** Concentraciones de X , I , F , D_1 y D_2 , concentración del ácido (iones H_3O^+), temperatura (T), y constantes cinéticas.
 - **Constantes:** Concentraciones iniciales de los componentes.
- **Bibliotecas utilizadas:** Para la integración numérica de las ecuaciones diferenciales, se emplearon las funciones de integración disponibles en SciPy, específicamente `odeint` (integrador de ecuaciones diferenciales ordinarias). En adición, se utilizó NumPy para la manipulación de matrices y la implementación de los cálculos matemáticos necesarios, como las dependencias cuadráticas de las constantes cinéticas con respecto a la

concentración de iones hidronio. Por otro lado, las gráficas se generaron utilizando la librería matplotlib, proporcionando una visualización clara de la dinámica de las concentraciones y el rendimiento del proceso de producción de furfural.

- **Condiciones Iniciales:** Las condiciones iniciales del sistema se establecieron a partir de los datos experimentales. Se consideró una concentración inicial de xilosa (C_0) de 0.069 M y las concentraciones de ácido sulfúrico (H_3O^+) varían entre 0.1 M y 2.0 M, de acuerdo con las condiciones experimentales reportadas en la literatura. Las temperaturas de operación fueron consideradas entre 120°C y 160°C, con valores específicos para cada simulación.

2.6 Validación del modelo cinético propuesto

El modelo cinético implementado en Python fue validado comparando sus resultados con los datos experimentales reportados por (Krzelj et al., 2020). Para esta validación, se realizaron simulaciones replicando las mismas condiciones experimentales descritas en el artículo, incluyendo la concentración inicial de xilosa, las temperaturas de reacción y las concentraciones de ácido. Los rendimientos simulados fueron evaluados en varios puntos temporales específicos y comparados con los valores experimentales correspondientes, extraídos de gráficos presentados en el artículo. Aunque los gráficos tienen alta resolución, su escala es ambigua, lo que introduce un grado de incertidumbre en la estimación de los valores. Por esta razón, el criterio de aceptación para la validación del modelo fue ajustado, estableciendo un margen de error máximo permitido del 15%, a fin de reflejar esta fuente adicional de incertidumbre.

2.7 Diseño de experimentos y análisis estadístico

El diseño experimental tuvo como propósito obtener el rendimiento de furfural a partir de la hidrólisis ácida de la cascarilla de arroz, basándose en el estudio de (Bariani et al., 2021). En dicho artículo, se proporcionaron datos experimentales y gráficos que describían el

comportamiento de los parámetros críticos de la reacción, tales como temperatura, tiempo de reacción y concentración de ácido. Estos gráficos mostraron la influencia de dichas variables en el rendimiento de furfural y la formación de subproductos, lo que permitió establecer un rango de condiciones operativas. La información obtenida se utilizó como referencia principal para definir los parámetros del modelo de simulación empleado, asegurando que las condiciones evaluadas fueran representativas y validadas.

Este proceso implica la descomposición de los enlaces glicosídicos en la hemicelulosa para liberar pentosas, que luego se deshidratan a furfural en presencia de ácido. En cuanto al tiempo de reacción, se determina cuánto tiempo están expuestas las pentosas y el furfural producido a las condiciones reactivas.

En este estudio, se seleccionaron diferentes rangos de tiempo de reacción y concentraciones de ácido sulfúrico con el objetivo de incrementar la producción de furfural a partir de cascarilla de arroz. Para catalizar el proceso, se utilizaron soluciones de ácido sulfúrico en concentraciones de 0.1 a 2.0 M, asegurando un balance entre la eficiencia en la conversión de pentosas y la minimización de reacciones secundarias que pudieran inhibir la formación de furfural. Estos valores fueron escogidos cuidadosamente para evitar la aparición de subproductos y mantener la estabilidad del medio ácido durante la reacción.

Asimismo, se evaluaron tiempos de reacción de 10 a 90 minutos para analizar su influencia en la conversión de azúcares hacia furfural y en la formación de compuestos secundarios. Este rango de tiempos permite determinar el punto óptimo en el que se maximiza el rendimiento de furfural, evitando tanto reacciones incompletas como la degradación del producto debido a exposiciones prolongadas a las condiciones del reactor.

La combinación de estos parámetros permitió establecer un entorno de reacción controlado que favorece la producción de furfural, proporcionando una base sólida para evaluar posibles ajustes y mejorar las condiciones del proceso en futuras aplicaciones industriales. En este estudio,

se emplearon dos diseños factoriales: uno de $3 \times 3 \times 2$ para la serie A y otro de $5 \times 3 \times 3$ para la serie B.

En la serie A, se utilizaron únicamente dos niveles de concentración de ácido, mientras que en la serie B se incluyeron cinco niveles de temperatura y tres niveles de concentración, lo que permitió una evaluación más precisa de las interacciones entre temperatura y concentración dentro de un conjunto más específico de condiciones. Estas series de experimentos se muestran en la Tabla 3 y Tabla 4, respectivamente. Este enfoque favoreció un control más estricto de las combinaciones experimentales, enfocándose en las variaciones dentro de rangos más delimitados. De esta manera, se logró un análisis más detallado del impacto de cada nivel de temperatura en el comportamiento del sistema experimental, contribuyendo a una mejor comprensión del proceso y al incremento del rendimiento de furfural.

Tabla 3

Serie A

VARIABLES	Nivel 1°	Nivel 2°	Nivel 3°
Tiempo [min]	30	60	90
Temperatura [°C]	160	170	180
Concentración del ácido sulfúrico [M]	-	1	2

Tabla 4

Serie B

VARIABLES	Nivel 1°	Nivel 2°	Nivel 3°	Nivel 4°	Nivel 5°
Tiempo [min]	30	60	90	-	-
Temperatura [°C]	160	170	180	190	200

Concentración del ácido sulfúrico [M]	0.1	0.3	0.5	-	-
---------------------------------------	-----	-----	-----	---	---

Para el análisis de los resultados experimentales, se empleó la Metodología de Superficie de Respuesta este método permite modelar y aumentar el rendimiento de furfural, ajustando una función matemática que describe la relación entre las variables independientes y dependientes.

Incluyendo:

- Análisis de varianza (ANOVA), para evaluar el impacto de cada variable y sus interacciones sobre el rendimiento de furfural.
- Análisis de regresión el cual se aplicó mediante el método de eliminación hacia atrás, para el desarrollo un modelo matemático que sea robusto y estadísticamente significativo para cada serie de experimentos.
- Identificación de las condiciones óptimas para maximizar el rendimiento.
- Validación de las condiciones óptimas a través de la comparación con los resultados obtenidos de estudios previos.

Para la aplicación de cada uno de estos métodos estadísticos se empleó Python, en donde librerías como pandas, statsmodels.api, y sklearn. metrics fueron esenciales para el desarrollo del código de programación.

Por otro lado, para desarrollar el análisis tecno-económico y ambiental descrito a continuación, se llevó a cabo una simulación en Aspen Plus, basada en el proceso descrito por (Sherif et al., 2021). Esto se realizó con el objetivo de determinar los consumos de agua y energía requeridos por el proceso de síntesis bajo las condiciones óptimas de operación identificadas.

2.8 Análisis tecno-económico

Se planteó una evaluación preliminar basada en parámetros estándar de procesos químicos y datos obtenidos de literatura científica relevante. Este análisis buscó determinar la viabilidad

económica de la producción de furfural a partir de cascarilla de arroz. Se consideraron factores clave como los costos de inversión, operación y mantenimiento, así como los ingresos potenciales derivados de la comercialización del furfural y la valorización de subproductos.

Para el análisis económico, se empleó la herramienta CAPCOST. Esta herramienta permitió calcular los costos de los equipos principales en función de sus capacidades y especificaciones operativas, además de considerar factores como instalación, servicios auxiliares, tuberías y costos indirectos (Turton et al., 2018). Con base en los datos obtenidos de la simulación del proceso en Aspen Plus, detallada en el artículo de (Sherif et al., 2021), se determinaron los tamaños y capacidades de los equipos requeridos para la producción de furfural. Posteriormente, CAPCOST se utilizó para generar una estimación detallada del costo total de inversión y los costos anuales de operación, lo que permitió integrar estos datos para evaluar su viabilidad.

2.9 Análisis ambiental

Para evaluar el impacto ambiental de la producción de furfural a partir de la cascarilla de arroz, se utilizó la herramienta Ecochain, que permite realizar análisis de ciclo de vida basados en datos estandarizados de bases de datos reconocidas, como Ecoinvent v3.9.1. Este enfoque permitió modelar cada etapa del proceso, incluyendo materias primas, transporte, producción y el fin de vida, considerando factores como las emisiones de CO₂ que se generan en cada etapa del proceso y el consumo energético. Según estudios previos, la quema directa de biomasa, como la cascarilla de arroz, genera aproximadamente 1.47 kg de CO₂ por kilogramo (Servitje, 2024). Este enfoque busca proporcionar una base sólida para demostrar la sostenibilidad del proceso y su alineación con los Objetivos de Desarrollo Sostenible, destacando el potencial de la producción de furfural como un producto químico con aplicaciones industriales.

Capítulo 3

3. Resultados y análisis

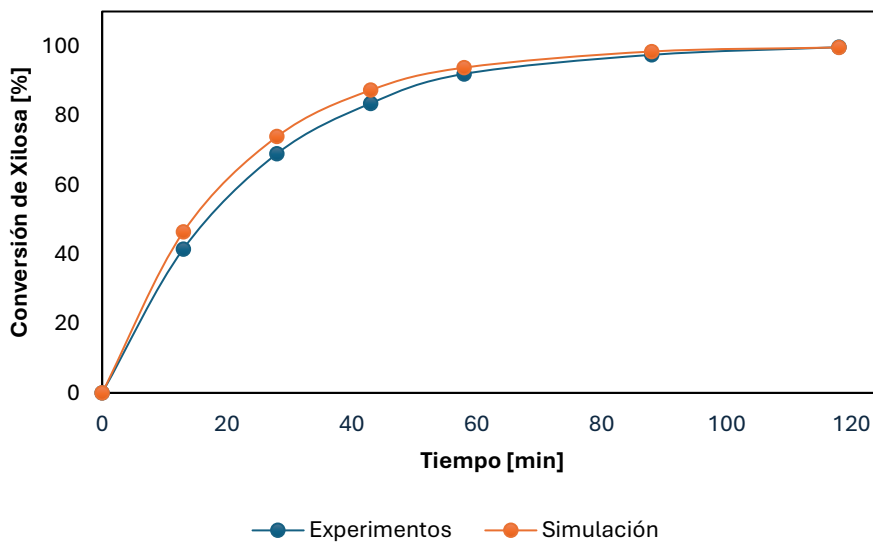
En esta sección se analizan los resultados obtenidos, comenzando con la evaluación de las tendencias mediante representaciones gráficas y el cálculo del porcentaje de error para verificar la validez del modelo cinético propuesto. A continuación, se examinan los rendimientos derivados del modelo en cada diseño experimental descrito, analizando la influencia de las variables experimentales. Finalmente, se presentan los hallazgos del análisis de regresión y la determinación de las condiciones óptimas empleando la metodología de superficie de respuesta.

3.1 Validación del modelo cinético

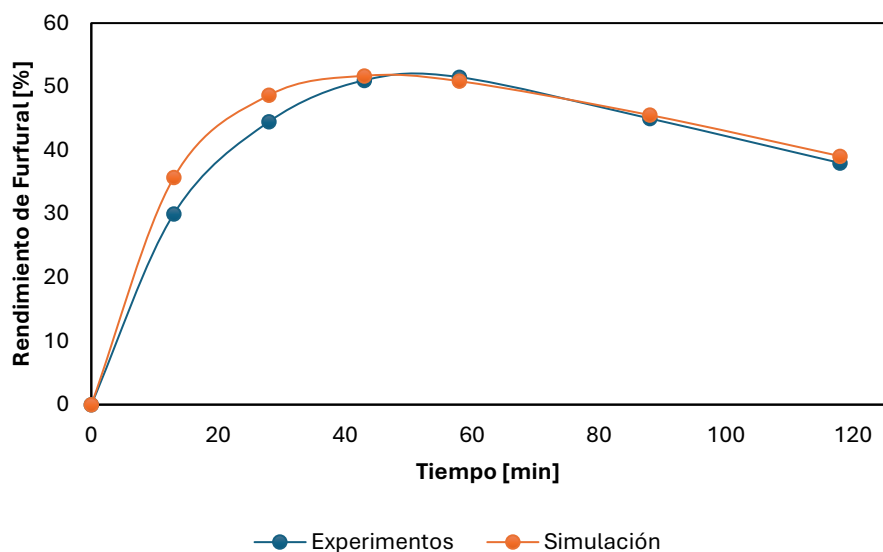
Para comprobar la capacidad del modelo cinético desarrollado para predecir los resultados, se analizó la tendencia de los datos experimentales y se comparó con las predicciones del modelo. Para ello, se generaron gráficas que muestran la conversión de xilosa y el rendimiento de furfural en función del tiempo de reacción, empleando tanto los datos experimentales obtenidos gráficamente como los resultados de las simulaciones realizadas en Python.

Figura 5

Graficas de conversión de Xilosa y rendimiento de Furfural



(a)



(b)

Nota. La figura muestra la variación de la conversión de xilosa, y el rendimiento de furfural con el tiempo de reacción, a 150°C de temperatura y 0.5 M de concentración de ácido sulfúrico. La curva azul corresponde a los resultados obtenidos mediante el modelo cinético, mientras que la curva naranja corresponde a los datos extraídos de los gráficos obtenidos del estudio realizado por Krzelj et al. (2020).

En la Figura 5 a, que representa la conversión de xilosa respecto al tiempo, se observa que las curvas correspondientes a los datos experimentales y al modelo cinético muestran un ajuste bastante cercano. Durante la fase inicial del proceso (0 - 20 minutos), se detecta una diferencia, donde el modelo predice un incremento en la conversión más rápido que el observado experimentalmente. Esto se refleja en los porcentajes de error reportados en la Tabla 5, donde el valor alcanza un 11.83% a los 13 minutos. Sin embargo, a partir de los 40 minutos, las dos curvas convergen de manera notable, con errores que disminuyen significativamente, como el 4.55% a los 43 minutos y menos del 1% en las etapas finales (0.07% a los 118 minutos).

Tabla 5

Porcentajes de error entre conversión de Xilosa y rendimiento de Furfural

Conversión de Xilosa	Rendimiento de Furfural
% Error	% Error
0.00	0.00
11.83	11.46
7.12	8.13
4.55	1.39
1.97	1.22
0.98	1.20
0.07	2.84

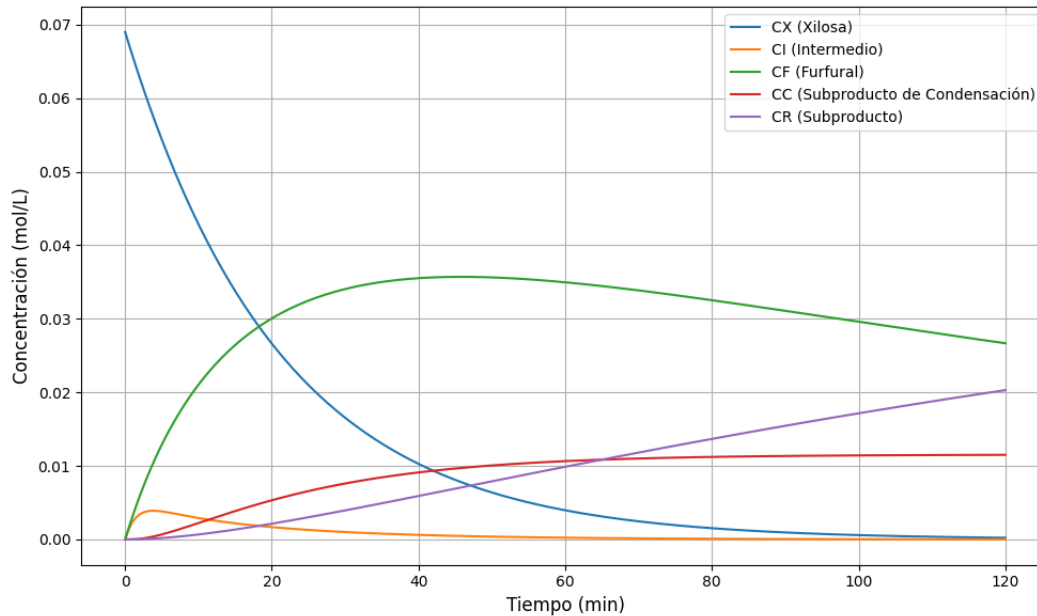
Por otro lado, la gráfica de concentraciones de la Figura 6, generada por el modelo cinético respalda el comportamiento descrito por ambas curvas, mostrando cómo la xilosa decrece exponencialmente, en correspondencia con las tendencias observadas en la Figura 5 a. Esto indica que el modelo describe con precisión el comportamiento de la conversión en la mayor parte del tiempo, siendo particularmente confiable en las etapas intermedias y finales.

Por otra parte, en la Figura 5 b, que corresponde al rendimiento de furfural respecto al tiempo, se encuentra un comportamiento similar en términos de ajuste entre las dos curvas. Durante la fase inicial (0 – 20 minutos), el modelo registra rendimientos ligeramente superiores, con un porcentaje de error máximo de 11.46% a los 13 minutos, tal como se observa en la Tabla 5. Sin embargo, en el intervalo intermedio (20 – 60 minutos), las dos curvas coinciden de manera casi perfecta, con errores extremadamente bajos (1.39% a los 43 minutos). Incluso en la etapa final (60 – 120 minutos), el modelo mantiene un ajuste razonable, con errores inferiores al 3%. Además, este comportamiento se puede observar claramente en la gráfica de concentraciones, donde el

furfural sigue un patrón en forma de campana, alcanza un pico máximo entre los 40 y 60 minutos y luego comienza a disminuir. Esto demuestra cómo se forma y degrada el furfural, indicando que el modelo logra representar bien este proceso.

Figura 6

Evolución de Xilosa, Furfural e Intermedios según el Modelo Cinético



Nota. Gráfica generada a partir del modelo cinético desarrollado en Python, que muestra la evolución de las concentraciones de las diferentes especies durante el proceso de reacción. Las curvas representan las concentraciones de xilosa, intermedio, furfural, subproducto de condensación y subproducto en función del tiempo. Este análisis refleja la dinámica del sistema y respalda la validez del modelo para describir el comportamiento del proceso bajo las condiciones evaluadas.

Además, la gráfica de concentraciones muestra en detalle cómo evoluciona el sistema. En ella se observa que el intermediario alcanza su pico máximo entre los 10 y 15 minutos y luego disminuye rápidamente. Esto ayuda a entender las diferencias iniciales en el rendimiento del furfural, ya que los cambios rápidos entre el intermediario y los productos podrían no estar completamente representados debido a la suposición de estado estacionario para el intermediario.

Por otro lado, el comportamiento del furfural y los subproductos confirma lo que se observa en las gráficas de conversión y rendimiento: el furfural llega a su punto máximo en las etapas intermedias, mientras que los subproductos se acumulan al final, lo que contribuye a la caída del rendimiento. Estos patrones muestran que las ecuaciones cinéticas logran representar bien la formación y acumulación de subproductos.

En consecuencia, es correcto decir que el modelo cinético demuestra una gran capacidad para predecir los resultados experimentales. Aunque las discrepancias iniciales son perceptibles, estas no son significativas y pueden deberse a las consideraciones realizadas al momento de determinar el modelo cinético. No obstante, a medida que avanza el proceso, los porcentajes de error disminuyen considerablemente, mostrando que el modelo captura de manera precisa las dinámicas del sistema. La gráfica de concentraciones desarrollada a partir del modelo refuerza este análisis, mostrando que el modelo representa adecuadamente las tendencias, desde la disminución de reactivos hasta la formación y degradación de productos y subproductos. Esto confirma la validez del modelo para describir y predecir el comportamiento del sistema bajo las condiciones evaluadas.

3.2 Resultados del diseño de experimentos

Luego de realizar la validación del modelo, se utilizó el mismo para desarrollar los 18 y 45 ensayos, correspondientes a los diseños de experimentos planteados, en la Tabla 3 y 4, denominados “Serie A” y “Serie B”. Las Tablas 6 y 7 muestran los rendimientos obtenidos para cada ensayo, que involucra la combinación de cada nivel de las variables independientes.

Tabla 6

Resultados de la Serie A

Experimento	Temperatura [C]	Concentración [M]	Tiempo [min]	Rendimiento de Furfural [%]
0	160	1	10	39.96

1	160	1	20	37.49
2	160	1	30	31.8
3	160	2	10	42.26
4	160	2	20	30.47
5	160	2	30	18.91
6	170	1	10	34.31
7	170	1	20	25.61
8	170	1	30	18.77
9	170	2	10	33.53
10	170	2	20	14.58
11	170	2	30	5.98
12	180	1	10	24.4
13	180	1	20	14.93
14	180	1	30	9.13
15	180	2	10	18.7
16	180	2	20	4.29
17	180	2	30	0.98

Tabla 7

Resultados de la Serie B

Experimento	Temperatura [C]	Concentración [M]	Tiempo [min]	Rendimiento de Furfural [%]
0	160	0.1	30	31.50
1	160	0.1	60	41.61

2	160	0.1	90	45.04
3	160	0.3	30	51.39
4	160	0.3	60	51.46
5	160	0.3	90	46.24
6	160	0.5	30	50.14
7	160	0.5	60	40.12
8	160	0.5	90	31.29
9	170	0.1	30	34.13
10	170	0.1	60	36.37
11	170	0.1	90	35.10
12	170	0.3	30	50.44
13	170	0.3	60	42.95
14	170	0.3	90	36.07
15	170	0.5	30	40.72
16	170	0.5	60	28.28
17	170	0.5	90	19.64
18	180	0.1	30	25.97
19	180	0.1	60	24.41
20	180	0.1	90	22.45
21	180	0.3	30	43.17
22	180	0.3	60	34.35
23	180	0.3	90	27.33
24	180	0.5	30	31.01

25	180	0.5	60	18.37
26	180	0.5	90	10.88
27	190	0.1	30	16.22
28	190	0.1	60	14.63
29	190	0.1	90	13.19
30	190	0.3	30	36.02
31	190	0.3	60	36.82
32	190	0.3	90	19.97
33	190	0.5	30	22.33
34	190	0.5	60	10.65
35	190	0.5	90	5.08
36	200	0.1	30	9.88
37	200	0.1	60	9.46
38	200	0.1	90	8.73
39	200	0.3	30	29.55
40	200	0.3	60	20.28
41	200	0.3	90	13.92
42	200	0.5	30	14.91
43	200	0.5	60	5.32
44	200	0.5	90	1.9

En las Tablas 6 y 7 se analiza la influencia de las variables temperatura, concentración y tiempo de reacción sobre el rendimiento de furfural. Los datos de la Tabla 6 muestran que el

rendimiento de furfural disminuye con el aumento de la temperatura. A 160°C, se registra el mayor rendimiento de 42.26%, seguido de una disminución progresiva conforme la temperatura incrementa. Un comportamiento similar se observa en la Tabla 7, donde el rendimiento máximo alcanza un 51.39% también a 160°C. Estos resultados sugieren que temperaturas más altas favorecen reacciones secundarias. Comportamiento que describe Namhaed et al. (2024), el cual realiza un estudio cinético de la deshidratación de xilosa a furfural usando ácido fórmico.

En cuanto a la concentración, la Tabla 6 indica que una concentración de 1 M genera rendimientos superiores a los obtenidos con 2 M. Por ejemplo, a 160°C y 30 minutos de reacción, el rendimiento con 1 M alcanza 31.80%, mientras que con 2 M disminuye a 18.91%. En contraste, los datos de la Tabla 7 evidencian un comportamiento distinto: el aumento de la concentración de 0.1 M a 0.3 M mejora el rendimiento en todas las condiciones evaluadas, alcanzando un máximo a 0.3 M. Sin embargo, al incrementar la concentración a 0.5 M, los rendimientos disminuyen, lo que sugiere una relación cuadrática entre la concentración y el rendimiento.

Respecto al tiempo de reacción, según la Tabla 6, tiempos cortos (10 minutos) producen los mayores rendimientos, mientras que tiempos prolongados (30 minutos) resultan en una disminución significativa. Por ejemplo, a 170°C y 2 M, el rendimiento disminuye de 33.53% a 5.98% al extender el tiempo de reacción. En la Tabla 7, se observa una tendencia similar, con menores rendimientos asociados a tiempos prolongados. Sin embargo, a una concentración de 0.1 M, se presenta un comportamiento atípico: a temperaturas más bajas (160°C - 170°C), el aumento del tiempo tiene un efecto positivo sobre el rendimiento. Pero esto no ocurre en todo el rango de temperaturas, si se observa, para los ensayos por encima de los 170°C se exhibe la disminución del rendimiento con el tiempo.

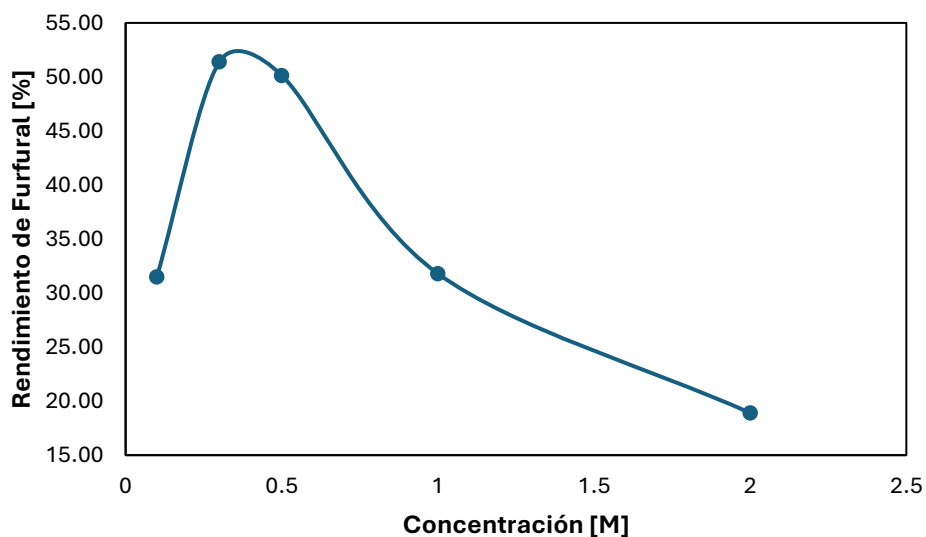
Por otro lado, también se observa una relación entre el tiempo y la concentración, en la Tabla 6 que a mayores concentraciones y tiempo más largos el rendimiento disminuye. Mientras que en la Tabla 7 se logran ver dos efectos, cuando la concentración se incrementa de 0.1 M a 0.3

M, los tiempos prolongados mejoran el rendimiento, pero cuando la concentración aumenta de 0.3 M a 0.5 M ocurre el efecto contrario, este efecto se puede observar en la Figura 7 b y c en la cuales se incrementa el tiempo de 60 a 90 minutos.

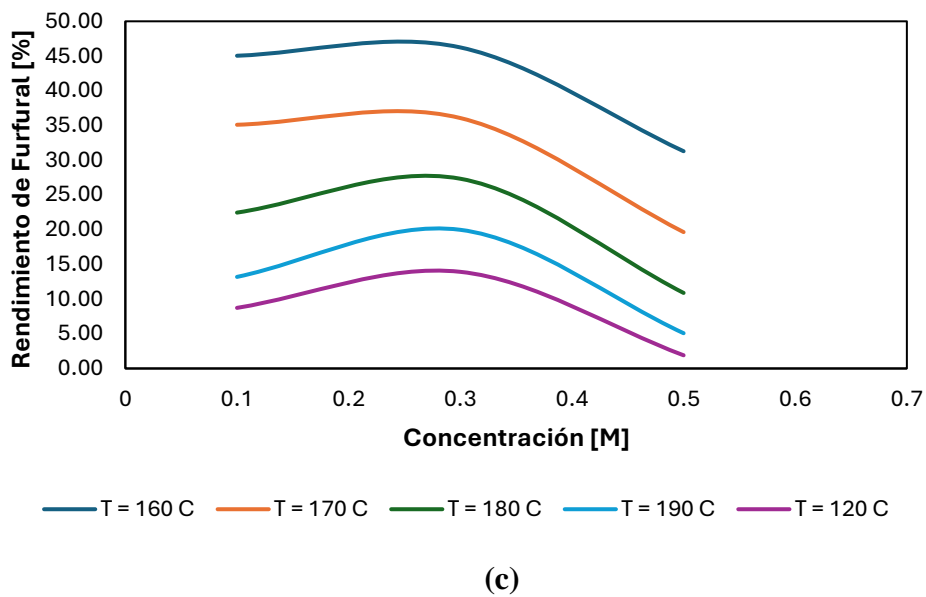
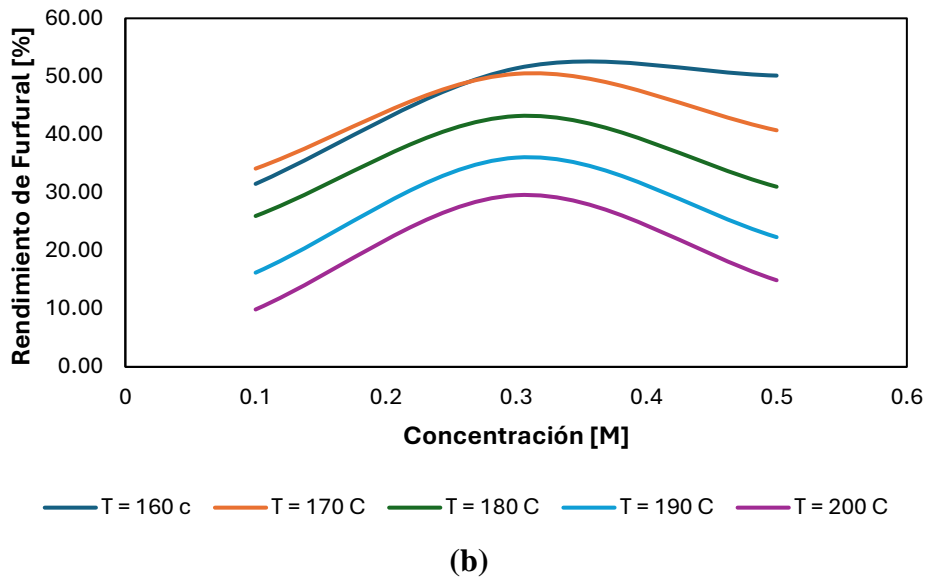
Estudios como los de Bariani et al. (2021) y Namhaed et al. (2024) confirman que la severidad de las condiciones de reacción afecta directamente el rendimiento de furfural. En condiciones agresivas, como altas temperaturas, concentraciones elevadas o tiempos prolongados, el rendimiento disminuye debido a un aumento en las reacciones secundarias o de competencia. Esto explica por qué los rendimientos de la Tabla 7 son mayores que los de la Tabla 6. Según estos estudios, al mantener constantes dos variables, como temperatura (160°C - 180°C), tiempo (30 minutos), y variar la tercera, en este caso la concentración (de 0.1 M a 2.0 M), se observa una disminución en el rendimiento, como se muestra en la Figura 7 a. De manera similar, al variar otras combinaciones de variables, los rendimientos disminuyen en todos los ensayos de las Tablas 6 y 7.

Figura 7

Efecto de la concentración del catalizador ácido en el rendimiento de Furfural



(a)



Nota. La figura muestra el comportamiento del rendimiento respecto a las concentraciones del ácido sulfúrico: (a) Concentración: 0.1 M a 2.0 M, Temperatura: 160°C y Tiempo: 30 minutos. (b) Concentración: 0.1 M a 0.5 M, Temperaturas: 160°C a 200°C, Tiempo: 60 minutos. (c) Concentración: 0.1 M a 0.5 M, Temperaturas: 160°C a 200°C, Tiempo: 90 minutos.

Por otro lado, bajo condiciones menos severas, se aprecia un comportamiento opuesto: el rendimiento aumenta cuando una de las variables incrementa su magnitud. Esto explica los resultados inusuales de la Tabla 7 a 160°C y 30 minutos, donde el rendimiento aumenta al pasar

de una concentración de 0.1 M a 0.3 M, pero disminuye al incrementarla a 0.5 M. Este comportamiento sugiere que, bajo condiciones suaves, existe un punto óptimo para la variable que no se fija; superado este límite, las condiciones de reacción se vuelven severas, disminuyendo el rendimiento, como se ilustra en la Figura 7 b y c.

Finalmente, estos resultados encuentran también sustento en las observaciones de Amiri et al. (2010) que destaca que el incremento simultáneo de variables como la concentración y la temperatura tiene un efecto negativo sobre el rendimiento debido a las constantes de velocidad asociadas a las reacciones involucradas. En particular, se ha comprobado que las constantes de velocidad de las reacciones de degradación del furfural son mayores que las de su formación, lo que provoca que el furfural generado se consuma más rápido de lo que se produce. Este fenómeno se evidencia también en la Tabla 2, donde la constante de velocidad más alta corresponde a la reacción de condensación entre el intermediario de reacción y el furfural, lo que confirma su impacto negativo en el rendimiento global.

Estos hallazgos no solo explican la disminución del rendimiento al incrementar la temperatura y la concentración, sino que también subrayan la importancia de determinar la combinación adecuada de variables experimentales para maximizar la producción de furfural.

3.3 Análisis estadístico y determinación de condiciones óptimas

En la sección previa, se presentaron y discutieron los rendimientos obtenidos en los ensayos de las Series A y B, destacando la influencia de las variables experimentales (temperatura, concentración y tiempo de reacción) sobre la producción de furfural. Si bien se identificaron tendencias importantes, como la disminución del rendimiento bajo condiciones severas y la existencia de puntos óptimos en ciertas combinaciones de variables, es fundamental complementar estos hallazgos con un análisis estadístico riguroso y técnicas de ajuste de condiciones.

En esta sección, se presenta un análisis estadístico y de ajuste para profundizar en la interpretación de los resultados obtenidos y determinar las condiciones óptimas que maximizan el

rendimiento de furfural. Primero, se realizará un análisis ANOVA para evaluar la significancia de las variables independientes y sus interacciones. Posteriormente, se aplicará un análisis de regresión mediante el método de eliminación hacia atrás, con el objetivo de construir un modelo que describa la relación entre las variables experimentales y el rendimiento. Por último, se aplicará la metodología de superficie de respuesta para encontrar las combinaciones óptimas de variables y visualizar cómo se comporta el sistema, lo que permitirá mejorar el proceso de manera más efectiva.

3.3.1 Resultados del análisis de varianza (ANOVA)

El análisis de varianza (ANOVA) es una herramienta estadística utilizada para evaluar la influencia de las variables experimentales y sus interacciones sobre el rendimiento de furfural. Este método permite identificar qué factores tienen un efecto significativo en el proceso y proporciona información clave para desarrollar el análisis de regresión. En este caso, se evaluaron los efectos principales de la temperatura (X_1), concentración (X_2), y tiempo (X_3), así como sus interacciones.

El ANOVA se realizó para cada serie de experimentos (A y B), y se empleó el lenguaje de programación Python, en donde los componentes evaluados incluyen la suma de cuadrados, los grados de libertad, el estadístico F, y el nivel de significancia (p-valor). Un p-valor menor a 0.05 indica que el efecto del factor es estadísticamente significativo, lo que implica que tiene una influencia relevante sobre el rendimiento de furfural.

Serie A

La Figura 8 presenta los resultados del ANOVA correspondientes al conjunto de datos de la Serie A, cuyos valores pueden consultarse en la Tabla 6. Este análisis evidencia que las variables experimentales (temperatura, concentración y tiempo de reacción) tienen una influencia significativa sobre el rendimiento de furfural, como lo demuestran los valores $p < 0.05$ obtenidos.

Este hallazgo es consistente con los reportados por Bariani et al. (2021), donde se establece que estas tres variables tienen un impacto crucial en el rendimiento del proceso.

Entre las variables estudiadas, la temperatura destaca como el factor más influyente, ya que tiene el valor p más bajo y el estadístico F más alto. Esto confirma la tendencia observada anteriormente: al aumentar la temperatura y el tiempo, se produce una mayor disminución del rendimiento en comparación con los cambios en la concentración. Este efecto se debe probablemente a que las reacciones secundarias no deseadas son más favorecidas en condiciones de mayor temperatura y tiempo. Esto resalta la importancia de optimizar cuidadosamente estos parámetros para reducir las pérdidas y mejorar la eficiencia del proceso.

Figura 8

Resultados del análisis de varianza (ANOVA) de la Serie A

	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Estadístico F	Valor p
X1	1375.164300	1.0	204.332499	5.549825e-08
X2	247.160556	1.0	36.725018	1.219611e-04
X1:X2	3.944533	1.0	0.586109	4.616148e-01
X3	964.634008	1.0	143.332747	2.985902e-07
X1:X3	0.273800	1.0	0.040683	8.441944e-01
X2:X3	73.260208	1.0	10.885566	8.022597e-03
X1:X2:X3	20.288450	1.0	3.014614	1.131652e-01
Residual	67.300322	10.0	NaN	NaN

Nota. La imagen muestra los resultados del análisis de varianza para la serie de experimentos A, los cuales se pueden visualizar en la Tabla 6.

En cuanto a las interacciones, los resultados muestran que solo la interacción entre concentración y tiempo ($X_2:X_3$) es significativa para el rendimiento, mientras que las demás interacciones no lo son, al presentar valores $p > 0.05$. Este hecho indica que el efecto de cada variable (o combinación de variables en el caso de la interacción triple) es, en su mayoría,

independiente de las demás (Pardo & Garrido, 2010). En el caso específico de la interacción concentración y tiempo, su significancia implica que el efecto de la concentración sobre el rendimiento depende del tiempo de reacción. Este comportamiento se observa en la Tabla 6, donde a tiempos más largos, un incremento en la concentración reduce significativamente el rendimiento, como se explicó en el análisis anterior.

Serie B

La Figura 9 presenta los resultados del ANOVA para la Serie B, basada en los datos de la Tabla 7. Similar al análisis de la Serie A, los resultados confirman que la temperatura es el factor con mayor impacto sobre el rendimiento de furfural, al presentar el menor valor $p < 0.05$ y el estadístico F más alto. Adicionalmente, el tiempo también muestra un efecto significativo sobre el rendimiento. Sin embargo, a diferencia de la Serie A, la concentración (X_2) no tiene un impacto estadísticamente significativo en la Serie B, ya que su valor p es mayor al nivel de significancia considerado (0.05).

Figura 9

Resultados del análisis de varianza (ANOVA) de la Serie B

	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Estadístico F	Valor p
X1	5420.670454	1.0	103.370149	2.914678e-12
X2	48.260083	1.0	0.920302	3.436230e-01
X1:X2	0.988167	1.0	0.018844	8.915590e-01
X3	755.510083	1.0	14.407293	5.294163e-04
X1:X3	27.351002	1.0	0.521573	4.747113e-01
X2:X3	471.711845	1.0	8.995368	4.819518e-03
X1:X2:X3	59.755802	1.0	1.139521	2.926694e-01
Residual	1940.258461	37.0	NaN	NaN

Nota. La imagen muestra los resultados del análisis de varianza realizado al conjunto de datos de la Serie B, que se pueden observar en la Tabla 7.

Este cambio en la significancia de la concentración (X_2) puede atribuirse a las condiciones experimentales específicas de la Serie B. Uno de los factores más evidentes es el rango más limitado de concentración evaluado en esta serie (0.1 M a 0.5 M), en comparación con la Serie A (1 M y 2 M). Según Box et al. (2005), los factores que abarcan un rango reducido suelen mostrar menor variabilidad en los datos, lo que dificulta la detección de efectos estadísticamente significativos. En este caso, el rango reducido puede no haber sido suficiente para generar cambios perceptibles en el rendimiento, lo que explica por qué no se observa una disminución significativa del rendimiento al aumentar la concentración mientras las demás variables permanecen constantes. Por ejemplo, en la Serie A, a una temperatura de 160°C y un tiempo de reacción de 20 minutos, el rendimiento disminuye de 31.8% a 18.9% al aumentar la concentración de 1 M a 2 M, mientras que, en la Serie B, este efecto no es evidente.

Aunque la concentración no es significativa como efecto principal en la Serie B, la interacción entre concentración y tiempo ($X_2:X_3$) sí lo es. Esto sugiere que el impacto de la concentración depende del nivel del tiempo de reacción. Por ejemplo, a tiempos cortos, los cambios en la concentración pueden no tener un impacto notable en el rendimiento. Sin embargo, a tiempos más prolongados, los efectos de las reacciones secundarias o indeseadas pueden amplificarse, reduciendo el rendimiento de furfural. Este fenómeno también es descrito por Danon et al. (2014), en su estudio sobre el impacto de la presencia de glucosa y arabinosa en el rendimiento de furfural. Esta observación destaca la importancia de evaluar de manera conjunta las combinaciones de factores operativos, para determinar las condiciones para maximizar el rendimiento y minimizar la formación de productos secundarios no deseados.

3.3.2 Análisis de regresión

El análisis de regresión se emplea para desarrollar un modelo matemático que describe la relación entre las variables experimentales y el rendimiento del proceso, complementando así los resultados del ANOVA. Mientras este último identifica la significancia estadística de las variables

y sus interacciones, la regresión permite no solo predecir el comportamiento del sistema, sino también mejorar las condiciones operativas.

Se utilizó el método de eliminación hacia atrás, considerando términos lineales, cuadráticos e interacciones entre las variables experimentales. Este enfoque iterativo elimina progresivamente los términos menos significativos ($p > 0.05$), logrando un modelo robusto y estadísticamente significativo que captura tanto las tendencias lineales como las posibles curvaturas en la relación entre las variables y el rendimiento.

Los análisis se realizaron para las Series A y B, y se validaron mediante métricas como el coeficiente de determinación (R^2) y los residuos.

Serie A y Serie B

El análisis de regresión a la Serie A y la Serie B, dio como resultado un modelo matemático robusto y estadísticamente significativo que describe con precisión la relación entre las variables experimentales (temperatura, concentración y tiempo de reacción) y el rendimiento de furfural, en cada serie. Para la Serie A el modelo alcanzó un coeficiente de determinación (R^2) de 0.967 y un R^2 ajustado de 0.946, mientras que para la Serie B estos valores fueron de 0.952 y 0.946. Lo que indica que para ambos modelos más del 95% de la variabilidad observada en el rendimiento puede explicarse por las variables independientes consideradas. Además, el bajo error cuadrático medio (MSE) de 9.30 refuerza la precisión y capacidad del modelo para predecir el comportamiento del sistema. Los modelos se expresan mediante la ecuación (3.1), y los coeficientes para cada una de las series se muestra en la tabla 8.

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_2 X_3 + \beta_5 X_2^2 \quad (3.1)$$

Los modelos consideran como términos significativos las variables lineales de temperatura (X_1), concentración (X_2) y tiempo de reacción (X_3), junto con la interacción entre concentración y tiempo ($X_2:X_3$). Estos resultados son consistentes con los hallazgos obtenidos previamente mediante el análisis ANOVA, reforzando su validez. Adicionalmente, se consideró significativo

el término cuadrático de la concentración (X_2)² lo que evidencia un comportamiento no lineal en esta variable, indicando la existencia de un punto óptimo más allá del cual el rendimiento disminuye. Estos hallazgos subrayan la complejidad del sistema y la importancia de los términos cuadráticos e interacciones en la caracterización y mejora del proceso.

Tabla 8

Coefficientes del modelo de regresión

Término	Serie A Coeficientes	Serie B Coeficientes
Intercepto	157.3234	144.5167
X ₁	-1.0705	-0.7761
X ₂	94.6413	232.5183
X ₃	-0.1553	0.0755
X ₂ X ₃	-0.4942	-0.8094
X ₂ ²	-30.7230	-317.1583

3.3.3 Determinación y validación de las condiciones óptimas

Con base en los modelos matemáticos obtenidos mediante el análisis de regresión, se procederá a implementar la metodología de superficie de respuesta. Esta técnica utiliza los modelos ajustados para generar representaciones gráficas tridimensionales y curvas de contorno que describen la relación entre las variables independientes y la variable respuesta. Con el objetivo de estimar las condiciones óptimas de operación que maximicen el rendimiento de furfural. Luego dichas condiciones serán validadas mediante la comparación con las obtenidas en estudios previos.

3.3.3.1 Condiciones óptimas de la Serie A

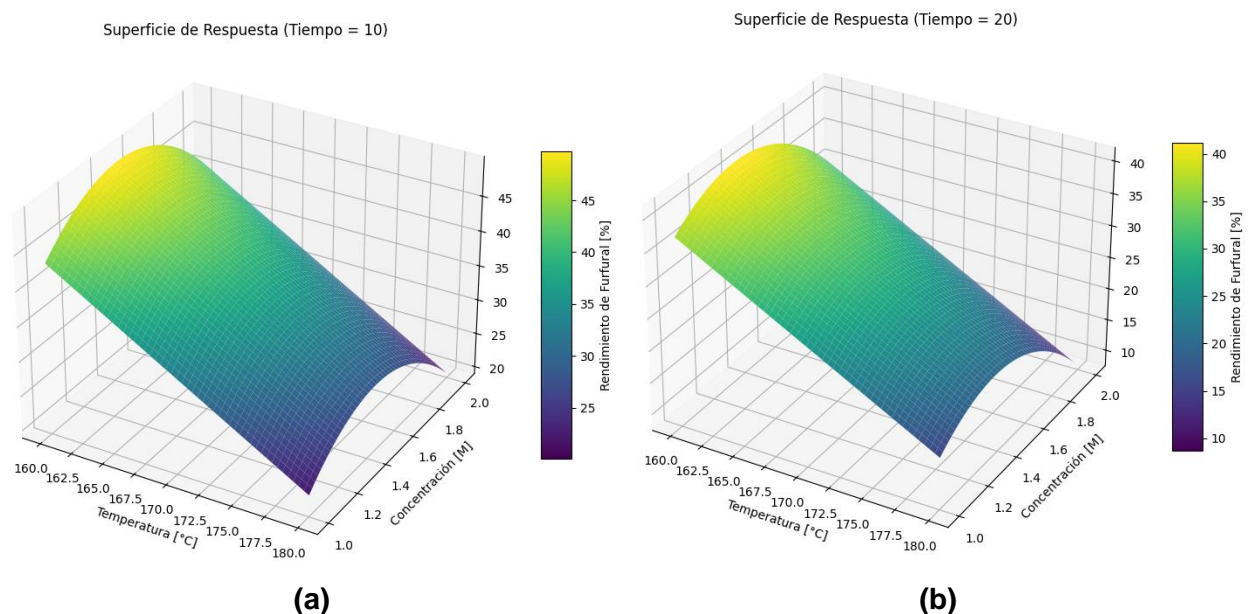
En las gráficas, se observa una clara dependencia del rendimiento con respecto a la temperatura y la concentración, cuya relación se encuentra modulada por el tiempo de reacción. En el caso del tiempo igual a 10 minutos (Figura 10 a), el rendimiento máximo se localiza en

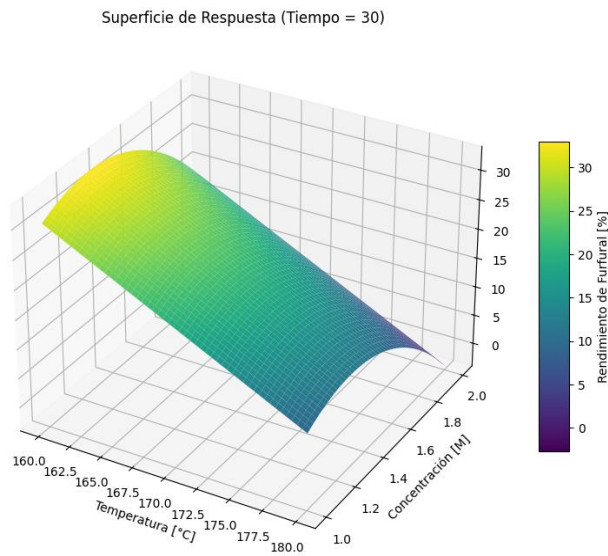
valores intermedios de temperatura (160 - 165 °C) y concentraciones altas (1.4 - 1.6 M). Sin embargo, al incrementar el tiempo de reacción a 20 minutos (Figura 10 b), el rendimiento máximo se desplaza hacia concentraciones ligeramente menores (1.2 - 1.5 M), evidenciando el impacto de las interacciones entre estas variables. Finalmente, para tiempos prolongados de 30 minutos (Figura 10 c), el rendimiento disminuye considerablemente, especialmente a temperaturas más altas, lo que confirma que condiciones más severas favorecen reacciones secundarias no deseadas.

Para estimar las condiciones óptimas de operación, se considera adecuado establecer que la temperatura debe situarse en un rango de 160 a 165 °C, la concentración entre 1.4 y 1.6 M, y un tiempo de reacción de 10 minutos. Este último valor corresponde al nivel de tiempo que muestra el mayor rendimiento experimental. Con base en esta estimación inicial, se utilizó el modelo matemático ajustado a la Serie A para determinar, mediante Python, las condiciones específicas que maximizan el rendimiento. Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 9. El rendimiento máximo fue del 49.96% con respecto a la xilosa, y del 6.46% en relación con la cascarilla de arroz. Esto se explica al considerar que la xilosa constituye aproximadamente el 20.2% del peso total de la cascarilla de arroz (Bariani et al., 2021).

Figura 10

Gráficos de Superficie de Respuesta de la Serie A





(c)

Tabla 9

Condiciones óptimas de las Serie A

Variables	Condiciones óptimas	Rendimiento de Furfural [%]
Temperatura [°C]	160	
Concentración [M]	1.46	49.96
Tiempo [Minutos]	10	

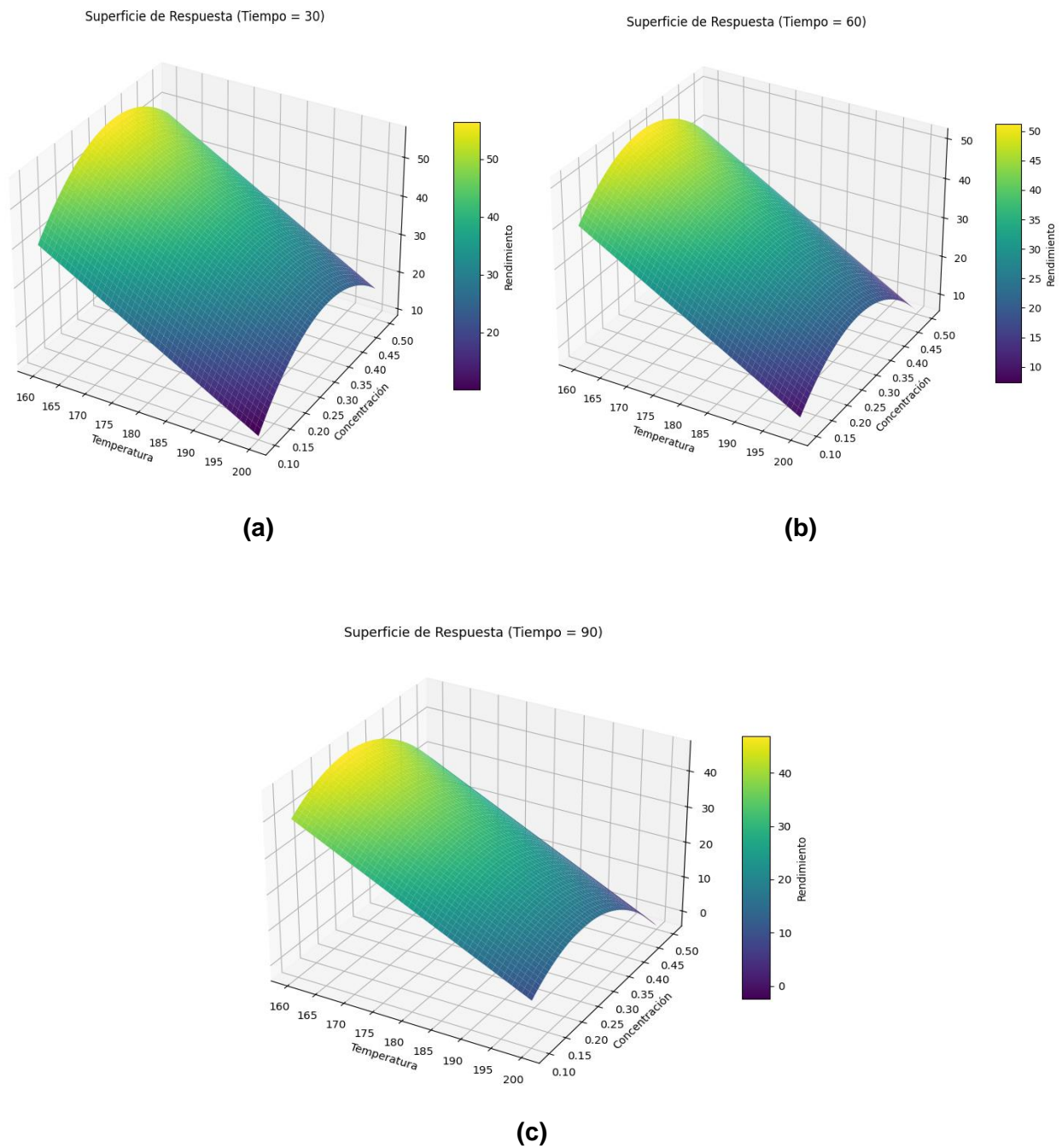
3.3.3.2 *Condiciones óptimas de la Serie B*

De manera similar a lo observado en la Serie A, se puede identificar el impacto negativo de la temperatura sobre el rendimiento. Específicamente, a temperaturas bajas, un incremento en la concentración mejora significativamente el rendimiento. Sin embargo, conforme la temperatura aumenta, en cualquiera de las gráficas presentadas en la Figura 11, el rendimiento disminuye proporcionalmente. Adicionalmente, el aumento del tiempo también influye de manera negativa, no solo reduciendo el rendimiento, sino provocando un desplazamiento del máximo de la superficie hacia condiciones de concentración más bajas. Este comportamiento es evidente al comparar las superficies de respuesta correspondientes a 30 minutos (Figura 11 a) y 60 minutos

(Figura 11 b). Estos resultados destacan la importancia de equilibrar cuidadosamente estas tres variables, temperatura, concentración y tiempo, para alcanzar un rendimiento óptimo.

Figura 11

Gráficos de Superficie de Respuesta de la Serie B



Por otra parte, el máximo rendimiento se alcanza en el tiempo de 30 minutos, dentro de un rango de temperaturas de 160 a 165 °C y concentraciones de 0.25 a 0.45 M. Basándose en esta

estimación preliminar y utilizando el modelo matemático ajustado a la Serie B, se determinaron, con el apoyo de Python, las condiciones de operación específicas que maximizan el rendimiento. Los resultados obtenidos, presentados en la Tabla 10, muestran que el rendimiento máximo fue del 56.79% con respecto a la xilosa, y del 7.34% en relación con la cascarilla de arroz.

Tabla 10

Condiciones óptimas de las Serie B

Variables	Condiciones óptimas	Rendimiento de Furfural [%]
Temperatura [°C]	160	
Concentración [M]	0.33	56.79
Tiempo [Minutos]	30	

Los resultados obtenidos en este estudio presentan diferencias significativas en comparación con los reportados en investigaciones previas, lo que destaca las particularidades de las condiciones operativas empleadas. En nuestro caso, se logró el mayor rendimiento de furfural del 56.79% respecto a la xilosa y del 7.34% respecto a la cascarilla de arroz, bajo las condiciones de 160 °C, 0.33 M de H₂SO₄ (1.6% en peso aproximadamente) y un tiempo de reacción de 10 minutos. Comparativamente, Bariani et al. (2021), emplearon condiciones similares en cuanto al tiempo de reacción (10 minutos) y una concentración menor de ácido sulfúrico (1.5% en peso), pero a una temperatura superior (185 °C), obteniendo solo un 7% de rendimiento respecto a la cascarilla de arroz.

Por otro lado, Mansilla et al. (1998), utilizaron una concentración de ácido considerablemente mayor (20% en peso) a una temperatura más baja (125 °C) durante 30 minutos, alcanzando un rendimiento de apenas 3.3%. Así mismo, Ong & Sashikala, (2014), emplearon temperaturas muy elevadas (225°C) y tiempos prolongados (300 minutos) con concentraciones diluidas de H₂SO₄, pero solo lograron un rendimiento del 1.5%.

Finalmente, estudios como el de Bhaumik & Dhepe, (2014), lograron un rendimiento máximo del 92% utilizando un catalizador de zeolita específica, a 170 °C y con un tiempo de reacción prolongado de 8 horas. Este resultado es consistente con investigaciones previas en diferentes biomásas, que destacan a los catalizadores de tipo zeolita como los más eficaces para maximizar el rendimiento de furfural en comparación con los catalizadores ácidos tradicionales. Sin embargo, aunque es posible alcanzar rendimientos elevados, estos suelen implicar tiempos de reacción extensos y mayores demandas de recursos, lo que puede limitar su viabilidad en aplicaciones a gran escala. Por el contrario, los resultados obtenidos en este estudio demuestran un enfoque más balanceado, al combinar un rendimiento competitivo con condiciones operativas más moderadas, lo que podría representar una alternativa más eficiente y práctica para procesos industriales.

3.4 Análisis Económico

En el ámbito económico, resulta fundamental identificar los costos operativos para comprender los factores asociados a la producción. La planta diseñada cuenta con una capacidad de 10 kg de furfural por hora, valor previamente determinado a partir de simulaciones realizadas. Considerando una operación continua de 8,760 horas al año, se calculó una producción anual de 87.6 toneladas de furfural. El costo total de capital de la planta, estimado mediante el software CAPCOST, asciende a 1.78 millones de USD, lo que se encuentra en línea con los valores reportados para instalaciones de escala similar dentro de la industria química. Estas condiciones de operación permitieron alcanzar un 90% en la conversión de xilosa a furfural, con un costo de producción estimado en 4.32 USD/kg. Este valor incluye los costos asociados al suministro de materias primas, mano de obra, mantenimiento y demás gastos operativos vinculados al proceso.

La planta ha sido diseñada bajo un enfoque que prioriza la relación costo-beneficio, garantizando así su competitividad dentro del mercado global de productos químicos de alto valor agregado. El precio de venta, establecido en 8.78 USD/kg.

Para evaluar la viabilidad del proyecto, se calcularon indicadores financieros como el valor actual neto (VAN), la tasa interna de retorno (TIR) y el período de recuperación del capital (PBP) empleando los resultados obtenidos mediante la herramienta CAPCOST. Para este análisis, se asumió una tasa de descuento del 10%, acorde con los estándares internacionales para proyectos industriales.

Tabla 11

Criterios de rentabilidad de la producción de Furfural

Parámetros	Valor
VAN (\$)	719,689
TIR (%)	18.1
PBP (años)	5.2

Como se observa en la tabla 11 se muestran los índices económicos como el valor actual neto (VAN) cuyo valor es positivo, lo cual evidencia que la construcción y operación de la planta generarán beneficios significativos a lo largo de su vida útil. Por otro lado, la tasa interna de retorno (TIR) calculada fue de un valor que supera ampliamente la tasa de descuento asumida, demostrando que el proyecto no solo recupera el capital invertido, sino que genera un retorno económico atractivo. Finalmente, el período de recuperación del capital (PBP) se estima en aproximadamente 5.2 años dentro de una proyección de vida útil de 10 años. Esto implica que, tras un 52% del tiempo de operación, se habrán recuperado los fondos invertidos, permitiendo que el proyecto comience a generar utilidades netas, posicionándose como un modelo sostenible y competitivo para la valorización de residuos agrícolas, como la cascarilla de arroz.

3.5 Análisis Ambiental:

El análisis ambiental se llevó a cabo considerando las etapas principales del proceso de producción de furfural a partir de la cascarilla de arroz. Para este estudio, se asumió que la planta

de producción opera 8,760 horas anual, con una capacidad de producción de 10 kg de furfural por hora, lo que equivale a una capacidad anual estimada de 87,600 kg de furfural.

El análisis evaluó las emisiones de CO_2 equivalente ($CO_2 eq$) generadas a lo largo del ciclo de vida del furfural, delimitando el impacto ambiental en cuatro etapas principales: materias primas, transporte, producción y la etapa final de gestión de residuos. La huella de carbono total obtenida fue de 176 kg de $CO_2 eq$ por cada 10 kg de furfural producido. Este cálculo se realizó utilizando el software Ecochain, que permitió desglosar las emisiones asociadas a cada etapa y cuantificarlas empleando el database disponible en Ecoinvent v3.9.1, ampliamente utilizado en análisis de ciclo de vida.

Tabla 13

Etapas principales del proceso de producción de Furfural y su impacto

Etapas del proceso	Componentes	Emisiones (kg CO2 eq)
Materias primas	• Cascarilla de arroz	
	• Ácido sulfúrico	
	• Pentilbenceno	70.19
	• Agua	
Transporte	• Transporte cascarilla de arroz	
	• Transporte ácido sulfúrico	28.19
	• Transporte pentilbenceno	
Producción	• Etapa de pretratamiento	
	• Etapa de reacción	24.97
	• Etapa de separación	
Residuos	• Agua residual	

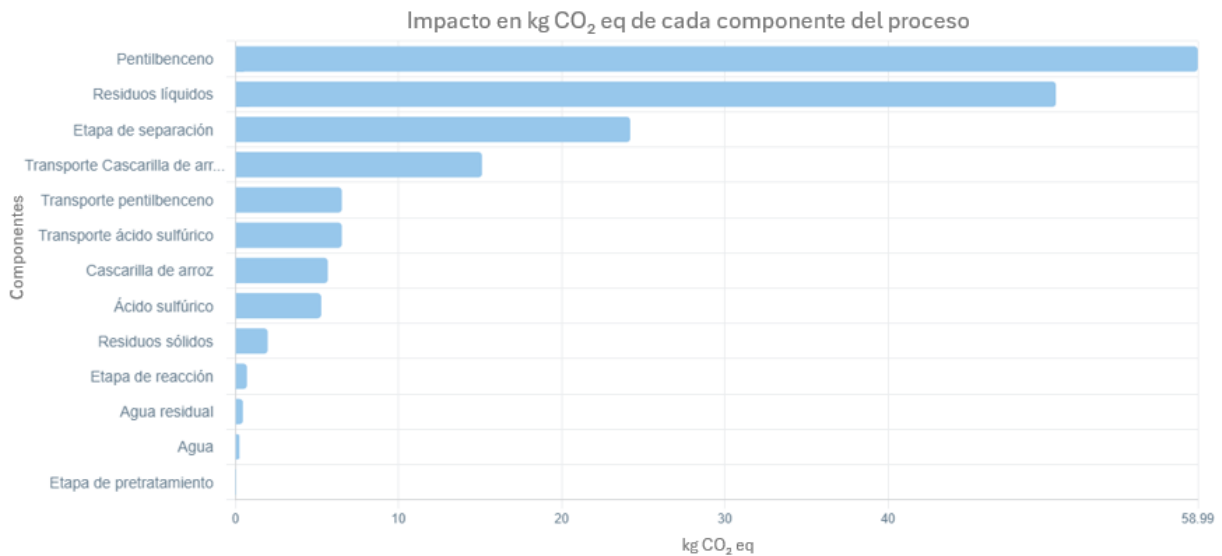
- Residuos líquidos
- Residuos sólidos

52.75

Como se observa, la Figura 12 presenta la contribución de cada componente del proceso a las emisiones totales de CO_2 equivalente (CO_2 eq), permitiendo identificar los elementos más relevantes en el impacto ambiental del sistema.

Figura 12

Contribución de cada componente a la huella de carbono (kg CO_2 eq)



El pentilbenceno se destacó como el mayor contribuyente individual, generando 58.99 kg CO_2 eq, debido a su naturaleza como compuesto orgánico derivado del petróleo. Las emisiones asociadas al pentilbenceno provienen de su síntesis industrial y de los procesos de manipulación, donde se generan emisiones fugitivas.

Por otro lado, los residuos líquidos generaron 50.3 kg CO_2 eq, constituyendo la segunda mayor fuente de emisiones. Esto se debe al consumo energético requerido para su tratamiento y a los subproductos gaseosos liberados durante los procesos de descomposición biológica, que incluyen CO_2 y metano (CH_4).

La etapa de separación fue la tercera mayor contribuyente, generando 24.97 kg $CO_2 eq$, debido a la alta demanda energética asociada con la purificación del furfural. Este proceso, que requiere 2,338 kWh por ciclo, utiliza principalmente fuentes de energía eléctrica. En regiones donde la electricidad proviene mayoritariamente de fuentes no renovables, este consumo energético resulta en un impacto considerable (IEA, 2024).

En el caso del transporte, las emisiones combinadas de los traslados de cascarilla de arroz, pentilbenceno y ácido sulfúrico sumaron 28.19 kg $CO_2 eq$. Este impacto se atribuye a la quema de combustibles fósiles en vehículos de transporte. De acuerdo con el database del software empleado el transporte de insumos químicos en distancias cortas de 25-30 km puede generar entre 0.2 y 0.5 kg $CO_2 eq$ por tonelada-kilómetro dependiendo del tipo de vehículo utilizado.

Por último, las emisiones de la cascarilla de arroz y del ácido sulfúrico fueron moderadas, contribuyendo 7.5 kg $CO_2 eq$ y 6.3 kg $CO_2 eq$, respectivamente. La cascarilla de arroz, al ser un residuo agrícola, genera emisiones relativamente bajas comparada con insumos químicos derivados de procesos industriales. Sin embargo, las etapas de transporte y manejo también aportan al impacto total. En cuanto al ácido sulfúrico, su contribución proviene principalmente de las emisiones indirectas asociadas a su producción, que incluyen la oxidación de dióxido de azufre (SO_2) y el uso de energía en plantas químicas.

Finalmente, los residuos sólidos generaron 3.2 kg $CO_2 eq$, mientras que las emisiones de agua residual y del proceso de pretratamiento fueron menores a 1 kg $CO_2 eq$ cada uno, representando el menor impacto del sistema.

Capítulo 4

4. Conclusiones y recomendaciones

4.1 Conclusiones

- La producción de furfural a partir de cascarilla de arroz mediante hidrólisis ácida fue evaluada mediante el desarrollo de un modelo cinético aplicado en Python, logrando determinar las condiciones operativas para maximizar su rendimiento. El modelo permitió describir con precisión las dinámicas del sistema, identificar los factores críticos que impactan la conversión de xilosa y el rendimiento de furfural. Los resultados obtenidos confirman que este enfoque proporciona una solución eficiente y sustentable para la valorización de este residuo agrícola.
- El modelo cinético desarrollado en Python permitió identificar las condiciones óptimas para la producción de furfural a partir de cascarilla de arroz, destacándose la Serie B como la de mayor rendimiento. En esta serie, se alcanzó un rendimiento máximo del 56.79% respecto a la xilosa, bajo condiciones específicas de operación: temperatura de 160 °C, concentración de ácido de 0.33 M y un tiempo de reacción de 30 minutos.
- El análisis de los parámetros operativos mostró que la temperatura, la concentración del catalizador y el tiempo de reacción, son factores que influyen de manera significativa sobre el rendimiento. Además, de las tres variables, la temperatura es el factor que mayor impacto tiene sobre este. Por otro lado, la concentración de ácido presentó un comportamiento cuadrático, donde concentraciones intermedias resultaron más efectivas para maximizar la producción. Asimismo, se identificó una interacción significativa entre la concentración y el tiempo de reacción: lo que indica que el efecto de la concentración sobre el rendimiento depende del tiempo de reacción.
- La validación de las condiciones de operación identificadas, mediante la comparación con estudios previos, confirmó la efectividad y competitividad del modelo desarrollado. Los rendimientos alcanzados bajo las condiciones óptimas superaron los reportados en

investigaciones anteriores que utilizaron parámetros más extremos y menos eficientes. Estos resultados destacan que el enfoque propuesto logra maximizar el rendimiento de furfural utilizando condiciones operativas moderadas, disminuyendo la incidencia de reacciones secundarias, y reafirmando la viabilidad técnica, económica y práctica del proceso.

4.2 Recomendaciones

- Considerando que la extracción de los datos experimentales se realizó de manera visual, se recomienda emplear herramientas especializadas como Matplotlib Image Extraction o Tesseract OCR, que permiten procesar gráficos y convertir información visual en datos tabulares con alta precisión, lo que facilitaría la validación y refinamiento de los datos extraídos, reduciendo significativamente los errores asociados y garantizando mayor confiabilidad en el análisis.
- Se recomienda llevar a cabo un análisis experimental bajo las condiciones óptimas determinadas mediante simulación. Este análisis permitiría comparar los resultados experimentales con los obtenidos por el modelo, mediante el cálculo del porcentaje de error, validando así la precisión del modelo cinético desarrollado e identificando posibles ajustes necesarios.
- Se recomienda extender el estudio mediante simulaciones centradas en los subproductos generados durante el proceso, evaluando su posible aplicación en diferentes industrias. Esto permitiría maximizar el aprovechamiento de los recursos, fomentando un enfoque más sostenible y alineado con los principios de la economía circular.

5. REFERENCIAS

- Aguiar, S., Estrella, M. E., & Cabadiana, H. U. (2022). Residuos agroindustriales: Su impacto, manejo y aprovechamiento. *AXIOMA*, 27, Article 27. <https://doi.org/10.26621/ra.v1i27.803>
- Ahn, H. G., Lee, J. E., Kim, H., Jung, H. J., Oh, K. K., Heo, S. H., & Kim, J. S. (2024, octubre 2). *Optimized Furfural Production Using the Acid Catalytic Conversion of Xylan Liquor from Organosolv-Fractionated Rice Husk*. <https://www.mdpi.com/2673-4176/5/4/35>
- Amiri, H., Karimi, K., & Roodpeyma, S. (2010). Production of furans from rice straw by single-phase and biphasic systems. *Carbohydrate Research*, 345(15), 2133-2138. <https://doi.org/10.1016/j.carres.2010.07.032>
- Bariani, M., Boix, E., Cassella, F., & Cabrera, M. N. (2021). Furfural production from rice husks within a biorefinery framework. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 11(3), 781-794. <https://doi.org/10.1007/s13399-020-00810-1>
- Behera, S., Arora, R., Nandhagopal, N., & Kumar, S. (2014). Importance of chemical pretreatment for bioconversion of lignocellulosic biomass. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 36, 91-106. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.04.047>
- Bhaumik, P., & Dhepe, P. L. (2014). Exceptionally high yields of furfural from assorted raw biomass over solid acids. *RSC Advances*, 4(50), 26215-26221. <https://doi.org/10.1039/C4RA04119D>
- Bizzi, C. A., Santos, D., Sieben, T. C., Motta, G. V., Mello, P. A., & Flores, E. M. M. (2019). Furfural production from lignocellulosic biomass by ultrasound-assisted acid hydrolysis. *Ultrasonics Sonochemistry*, 51, 332-339. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2018.09.011>
- Box, G. E., Hunter, J. S., & Hunter, W. G. (2018). *Estadística para Investigadores Segunda edición* Diseño, innovación y descubrimiento.

https://www.academia.edu/34386593/Estadística_para_Investigadores_Segunda_edición_Diseño_innovación_y_descubrimiento

- Contreras-Zarazúa, G., Martín-Martín, M., Sánchez-Ramírez, E., & Segovia-Hernández, J. G. (2022). Furfural production from agricultural residues using different intensified separation and pretreatment alternatives. Economic and environmental assessment. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 171, 108569. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2021.108569>
- Danon, B., Hongsiri, W., van der Aa, L., & de Jong, W. (2014). Kinetic study on homogeneously catalyzed xylose dehydration to furfural in the presence of arabinose and glucose. *Biomass and Bioenergy*, 66, 364-370. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2014.04.007>
- FAO. (2024, octubre 9). *Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura: Ecuador ahora cuenta con un Atlas Agroeconómico*. <https://www.fao.org/ecuador/noticias/detail-events/ar/c/1712196/>
- IEA. (2024, octubre). *World Energy Outlook 2024 – Analysis—IEA*. <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2024?language=es>
- Kasangana, Auclair, N., Daassi, R., Rodrigue, D., & Stevanovic, T. (2022). *Impact of pre-extraction on xylose recovery from two lignocellulosic agro-wastes: BioResources*. <https://bioresources.cnr.ncsu.edu/>
- Krzelj, V., Ferreira, J., Papaioannou, M., Schaaf, J. van der, & Neira, M. (2020). (PDF) Kinetic Model of Xylose Dehydration for Wide Range of Sulfuric Acid Concentrations. *ResearchGate*. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c01197>
- Mansilla, H. D., Baeza, J., Urzúa, S., Maturana, G., Villaseñor, J., & Durán, N. (1998). Acid-catalysed hydrolysis of rice hull: Evaluation of furfural production. *Bioresource Technology*, 66(3), 189-193. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(98\)00088-1](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(98)00088-1)

- Namhaed, K., Kiatkittipong, W., Triquet, T., & Cognet, P. (2024). Dehydration of pentose to furfural catalyzed by formic acid – Kinetics and application to real biomass hydrolysates. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 12(5), 113431. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.113431>
- National Geographic. (2022, mayo 12). *Economía circular: ¿qué es y por qué beneficia al medio ambiente?* National Geographic. <https://www.nationalgeographic.com/medio-ambiente/2022/05/economia-circular-que-es-y-por-que-beneficia-al-medio-ambiente>
- Ong, H. K., & Sashikala, M. (2014). *Identification of furfural synthesized from pentosan in rice husk*.
- Pardo, A., & Garrido, J. (2010). *La interacción entre factores en el análisis de varianza: Errores de interpretación*.
- Ponce, J. (2016). *La Política Agropecuaria Ecuatoriana hacia el desarrollo territorial rural sostenible: 2015-2025 Versión 1 | ISBN 978-9942-22-019-6 - Libro (1.ª ed.)*. Sector Público Gubernamental. <https://isbn.cloud/9789942220196/la-politica-agropecuaria-ecuatoriana-hacia-el-desarrollo-territorial-rural-sostenible-2015-2025-/>
- Rojas-González, A. F., Flórez-Montes, C., López-Rodríguez, D. F., Rojas-González, A. F., Flórez-Montes, C., & López-Rodríguez, D. F. (2019). Prospectivas de aprovechamiento de algunos residuos agroindustriales. *Revista Cubana de Química*, 31(1), 31-52.
- Santos, D., Silva, U. F., Duarte, F. A., Bizzi, C. A., Flores, E. M. M., & Mello, P. A. (2018). Ultrasound-assisted acid hydrolysis of cellulose to chemical building blocks: Application to furfural synthesis. *Ultrasonics Sonochemistry*, 40, 81-88. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2017.04.034>
- Servitje, M. (2024, octubre 1). Innovación sostenible: Transformando residuos de cáscara de arroz en soluciones ecológicas - Novsus Novsus. *Novsus*. <https://novsus.com/innovacion-sostenible-transformando-residuos-de-cascara-de-arroz-en-soluciones-ecologicas/>

- 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>
- Sun, Y., Wang, Z., Liu, Y., Meng, X., Qu, J., Liu, C., & Qu, B. (2020). A Review on the Transformation of Furfural Residue for Value-Added Products. *Energies*, 13(1), Article 1. <https://doi.org/10.3390/en13010021>
- Suxia, R., Haiyan, X., Jinling, Z., Shunqing, L., Xiaofeng, H., & Tingzhou, L. (2012). Furfural production from rice husk using sulfuric acid and a solid acid catalyst through a two-stage process. *Carbohydrate Research*, 359, 1-6. <https://doi.org/10.1016/j.carres.2012.07.006>
- Travaini, R., Martín-Juárez, J., Lorenzo-Hernando, A., & Bolado-Rodríguez, S. (2016). Ozonolysis: An advantageous pretreatment for lignocellulosic biomass revisited. *Bioresource Technology*, 199, 2-12. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.08.143>
- Turton, R. A., Shaeiwitz, J. A., Bhattacharyya, D., & Whiting, W. B. (2018). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes, 5th edition | eTextBook Subscription | Pearson+*. <https://www.pearson.com/en-us/pearsonplus/p/9780137459483>
- Yong, K. J., Wu, T. Y., Lee, C. B. T. L., Lee, Z. J., Liu, Q., Jahim, J. M., Zhou, Q., & Zhang, L. (2022). Furfural production from biomass residues: Current technologies, challenges and future prospects. *Biomass and Bioenergy*, 161, 106458. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2022.106458>
- Yu M., I. K., Chen, H., Abeln, F., Auta, H., Fan, J., L, V., James H. Clark, Sophie Parsons, Christopher J. Chuck, Shicheng Zhang, Gang Luo, & Daniel C.W Tsang. (2020, mayo 2). *Chemicals from lignocellulosic biomass: A critical comparison between biochemical, microwave and thermochemical conversion methods: Critical Reviews in Environmental Science and Technology: Vol 51 , No 14—Get Access*. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/10643389.2020.1753632>