

Escuela Superior Politécnica del Litoral

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Diseño conceptual del proceso para la obtención de adipato de dimetilo a
partir de Nylon residual

Proyecto Integrador

Previo la obtención del Título de:

Ingeniero químico

Presentado por:

Eva Victoria Miranda Peñafiel

Luis Alberto Rebelo Fonseca

Guayaquil - Ecuador

Año: 2024

Dedicatoria

Con profunda admiración y agradecimiento, dedico el presente proyecto a Dios por guiarme y darme sabiduría en todo este trayecto, a mis mamás Jenny Fonseca y María Herrera por darme siempre ese amor incondicional, por sus sacrificios y por enseñarme que con dedicación y disciplina todo es posible.

A mi hermano Mike Rebelo por todo el apoyo y porque siempre he deseado ser un ejemplo de vida para ti. A toda mi familia Fonseca porque siempre me enseñaron a creer en mí mismo y a nunca rendirme a pesar de las adversidades.

A mis amigos de toda la vida Sebastián Moreira, Steven Valencia, Ninfa Torres, Mario Pozo y Clarisse Zambrano por siempre motivarme y creer en mí.

A Tiffany Guzmán quien con su amor, paciencia y apoyo incondicional ha sido mi mayor fortaleza en este camino.

Luis Rebelo Fonseca

Dedicatoria

A mis padres, Romúlo y Fanny, por su apoyo incondicional, su sacrificio y presencia constante en cada paso que doy. A mi hermana, Rosa, por motivarme a seguir y ayudarme a creer en mí. A mi adorado sobrino, Matthew, porque me ha enseñado el significado de constancia y perseverancia. A mi angelito en el cielo, Samantha, que sé que está muy orgullosa de su tía. A mi familia, los “Peñañiel” y los “Miranda”, por sus consejos.

A mis hermanos del alma, Milena, Kelly, Roxana, Denisse y Ariel, por estar siempre dispuestos a escucharme, aconsejarme y darme ánimos en los momentos más difíciles.

A mi compañero de vida, Javier; por su apoyo inquebrantable, por motivarme a ser mejor cada día y ser mi pilar y fuerza cada vez que te necesito y no solo en los momentos difíciles.

A mis queridos, “Quimikitos”, hermanos de aventuras académicas, por hacer este camino más llevadero con sus risas y apoyo mutuo. Y finalmente, me dedico esto a mí misma, por no rendirme, por confiar en mis capacidades y por demostrar que, a pesar de los obstáculos, los sueños se pueden alcanzar.

Eva Victoria Miranda Peñañiel

Agradecimientos

Expresamos nuestro más profundo agradecimiento a nuestros tutores, PhD. Yris González y PhD. Joan Vera, por su invaluable guía y acompañamiento durante estos meses de intenso trabajo. Su experiencia y dedicación han sido fundamentales en este proceso.

A los ingenieros Alexander Espinoza y Julio de la Paz, por su extraordinaria paciencia, constante apoyo y dedicación en el desarrollo de este proyecto.

A nuestros padres, hermanos y amigos; que actualmente serán nuestros colegas; Clarisse, Renata, Melanie, Joey, Cecilia, Michael, Cristhel y Luis, pilares esenciales en esta travesía académica; su apoyo incondicional ha sido la fuerza que nos permitió perseverar y alcanzar esta meta.

Y por encima de todo, agradecemos a Dios, fuente inagotable de nuestra fortaleza y guía suprema en este camino.

Eva Miranda & Luis Rebelo

Declaración Expresa

Nosotros Luis Alberto Rebelo Fonseca y Eva Victoria Miranda Peñafiel acordamos y reconocemos que:

La titularidad de los derechos patrimoniales de autor (derechos de autor) del proyecto de graduación corresponderá al autor o autores, sin perjuicio de lo cual la ESPOL recibe en este acto una licencia gratuita de plazo indefinido para el uso no comercial y comercial de la obra con facultad de sublicenciar, incluyendo la autorización para su divulgación, así como para la creación y uso de obras derivadas. En el caso de usos comerciales se respetará el porcentaje de participación en beneficios que corresponda a favor del autor o autores.

La titularidad total y exclusiva sobre los derechos patrimoniales de patente de invención, modelo de utilidad, diseño industrial, secreto industrial, software o información no divulgada que corresponda o pueda corresponder respecto de cualquier investigación, desarrollo tecnológico o invención realizada por nosotros durante el desarrollo del proyecto de graduación, pertenecerán de forma total, exclusiva e indivisible a la ESPOL, sin perjuicio del porcentaje que nos corresponda de los beneficios económicos que la ESPOL reciba por la explotación de nuestra innovación, de ser el caso.

En los casos donde la Oficina de Transferencia de Resultados de Investigación (OTRI) de la ESPOL comunique 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, 9 de octubre del 2024.



Luis Alberto Rebelo Fonseca



Eva Victoria Miranda Peñafiel

Evaluadores

María Verónica Ordóñez Pazmiño, MSc.

Profesor de Materia Integradora

PhD. Yris Kenelma González Triana

Tutor de proyecto

Resumen

El aumento en la producción y desecho de neumáticos debido a la creciente demanda del sector automotriz ha intensificado los desafíos ambientales, especialmente por la acumulación de residuos no degradables como el nylon 6,6 presente en las fibras textiles de los neumáticos. Este compuesto representa un pasivo ambiental crítico debido a su resistencia técnica y química, dificultando su disposición adecuada. En este contexto, el presente proyecto tuvo como objetivo desarrollar una estrategia sostenible para la valorización del nylon residual mediante su transformación en adipato de dimetilo, un compuesto de alto valor agregado utilizado en la industria petroquímica.

Se implementó un diseño experimental central compuesto para optimizar las condiciones de esterificación, analizando las variables de temperatura y tiempo de reacción. Los experimentos se llevaron a cabo en mini reactores y la simulación se realizó en el simulador Aspen Batch Process Developer permitiendo el escalado del proceso. Los resultados destacaron una conversión máxima de 61.45% en las condiciones ideales determinadas y la escalabilidad alcanzó una producción industrial de 270 kg.

Además, se realizó un análisis tecno económico para evaluar la viabilidad financiera del proceso diseñado. Este incluyó la estimación de costos de capital (CAPEX) y operativos (OPEX), así como indicadores clave como el período de recuperación de la inversión (PBP) y la tasa interna de retorno sobre la inversión (ROROI). Los resultados confirmaron la rentabilidad y escalabilidad del proceso, validando su potencial como una solución sostenible dentro de la economía circular.

Palabras Clave: Nylon 6,6, adipato de dimetilo, diseño de experimentos, Aspen Batch Process Developer, análisis tecno económico.

Abstract

The increase in the production and disposal of tires due to the growing demand in the automotive sector has intensified environmental challenges, particularly due to the accumulation of non-degradable waste such as nylon 6,6 found in the textile fiber of tires. This compound represents a critical environmental liability due to its technical and chemical resistance, making proper disposal difficult. In this context, the present project aimed to develop a sustainable strategy for the valorization of residual nylon through its transformation into dimethyl adipate, a high-value compound used in the petrochemical industry.

A central composite experimental design was implemented to optimize the esterification conditions, analyzing the variable of temperature and reaction time. Experiments were conducted in mini reactors, and the process simulation was conducted using Aspen Batch Process Developer, enabling process scaling. The results highlighted a maximum conversion of 61.45% under the determined ideal conditions, with scalability reaching an industrial production of 270 kg.

Additionally, a techno-economic analysis was conducted to evaluate the financial feasibility of the designed process. This analysis included the estimation of capital expenditures (CAPEX) and operating expenses (OPEX), as well as key indicators such as the payback period (PBP) and the rate of return on investment (ROROI). The results confirmed the profitability and scalability of the process, validating its potential as sustainable solution within the circular economy.

Keywords: Nylon 6,6, dimethyl adipate, experimental design, Aspen Batch Process Developer, techno-economic analysis.

Índice general

Resumen	VII
Abstract	VIII
Índice general	IX
Abreviaturas	XIII
Simbología	XIV
Índice de ilustraciones.....	XV
Índice de tablas.....	XVIII
Capítulo 1	1
1. Introducción	2
1.1 Descripción del Problema.....	2
1.2 Justificación del Problema	4
1.3 Objetivos.....	6
1.3.1 <i>Objetivo general</i>	6
1.3.2 <i>Objetivos específicos</i>	6
1.4 Marco teórico	6
1.4.1 <i>Reciclaje de neumáticos</i>	6
1.4.2 <i>Nylon 6,6</i>	7
1.4.3 <i>Método de despolimerización del nylon residual</i>	8
1.4.4 <i>Reacción de esterificación de Fischer</i>	9

1.4.5	<i>Adipato de dimetilo</i>	11
1.4.6	<i>Técnicas de caracterización</i>	12
1.4.8	<i>Aspen Batch Process Developer</i>	14
Capítulo 2		15
2. Metodología		16
2.1	Materiales, reactivos y equipos.....	16
2.2	Proceso de laboratorio.....	17
2.2.1	<i>Etapas de despolimerización</i>	18
2.2.2	<i>Etapas de esterificación</i>	19
2.2.3	<i>Etapas de separación</i>	20
2.3	Diseño de Experimentos	22
2.4	Caracterización fisicoquímica.....	25
2.4.1	<i>Espectroscopía infrarroja (IR)</i>	25
2.4.2	<i>Punto de ebullición</i>	26
2.5	Desarrollo de caso base en simulador Aspen Batch Process Developer	26
2.5.1	Algoritmo general del proceso.....	27
2.5.2	Desarrollo de la receta	30
2.5.2.1	Algoritmo de desarrollo de la receta.....	30
2.5.2.2	Selección de componentes	32
2.5.2.3	Mezclas	33

2.5.2.4	Reacciones	33
2.5.2.5	Operaciones lógicas	34
2.5.3	Diseño y Escalamiento de caso base.....	35
2.5.3.1	Algoritmo de diseño.....	35
2.5.3.2	Algoritmo de escalado	38
2.6	Evaluación tecno económica.....	40
Capítulo 3	42
3. Resultados y análisis	43
3.1	Diseño de experimentos	43
3.1.1	Método de superficie de respuesta	44
3.2	Optimización de la etapa de esterificación	46
3.3	Caracterización del adipato de dimetilo.....	50
3.3.1	Caracterización por FTIR	50
3.3.2	Punto de ebullición, Índice de refracción	51
3.4	Receta de laboratorio	53
3.4.1	Caso con recicló	53
3.4.2	Caso sin recicló	54
3.5	Escalamiento	64
3.5.1	Escala piloto 1.6 kg.....	64
3.5.2	Intensificación del proceso	67

3.5.2.1	Batch máxima producción	67
3.5.2.2	Escala industrial	68
3.5.2.3	Batch a semicontinuo	73
3.6	Análisis tecno-económico - Caso proceso intensificado (270 kg)	77
3.6.1	Costos de los equipos	77
3.6.2	Análisis de gasto de capital (CAPEX)	78
3.6.3	Análisis del Gasto Operativo (OPEX)	79
3.6.4	Indicadores tecno económicos	80
3.6.5	Análisis de incertidumbre	82
3.7	Layout	87
Capítulo 4	89
4.	Conclusiones y recomendaciones	90
4.1	Conclusiones	90
4.2	Recomendaciones	91

Abreviaturas

ABPD Aspen Batch Process Developer

ADMD Adipato de Dimetilo

DOE Diseño de experimentos

ESPOL Escuela Superior Politécnica del Litoral

GLC Cromatografía Gas-Líquido

IR Espectroscopía Infrarroja

NA No aplica

PE Punto de ebullición

PM Peso molecular

Simbología

$C_8H_{14}O_4$	Adipato de dimetilo
$C_6H_{10}O_4$	Ácido adípico
HCl	Ácido clorhídrico
H ₂ O	Agua
$(C_2H_5)_2O$	Dietil éter
$C_6H_{16}N_2$	Hexametilendiamina
$(C_{12}H_{22}N_2O_2)_n$	Nylon 6,6
CH ₃ OH	Metanol

Índice de ilustraciones

Ilustración 1. <i>Mecanismo de esterificación de Fischer del ácido adípico con metanol en medio ácido.</i>	10
Ilustración 2. <i>Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo con recirculación.</i>	18
Ilustración 3. <i>Gráfico del diseño de experimentos en función de los rangos de cada variable: temperatura y tiempo.</i>	24
Ilustración 4. <i>Algoritmo general para la configuración del proceso en Aspen Batch Process Developer.</i>	28
Ilustración 5. <i>Algoritmo de desarrollo de receta.</i>	30
Ilustración 6. <i>Algoritmo de diseño conceptual del proceso para la obtención de adipato de dimetilo.</i>	36
Ilustración 7. <i>Algoritmo de escalamiento.</i>	38
Ilustración 8. <i>Superficie de respuesta para la conversión del nylon 6,6 en función de la temperatura y el tiempo.</i>	48
Ilustración 9. <i>Gráfico de contornos.</i>	49
Ilustración 10. <i>Espectro FTIR del adipato de dimetilo.</i>	51
Ilustración 11. <i>Receta de laboratorio con recirculación.</i>	54
Ilustración 12. <i>Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo sin recirculación.</i>	55
Ilustración 13. <i>Receta de laboratorio sin recirculación.</i>	55
Ilustración 14. <i>Capacidad usada por los equipos a nivel laboratorio.</i>	63

Ilustración 15. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso nivel laboratorio.</i>	63
Ilustración 16. <i>Capacidad usada por los equipos a nivel piloto.</i>	66
Ilustración 17. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala piloto de 1.6 kg.</i>	66
Ilustración 18. <i>Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo máxima producción.</i>	68
Ilustración 19. <i>Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 100 kg de producción.</i>	70
Ilustración 20. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 100 kg de producción.</i>	70
Ilustración 21. <i>Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 270 kg de producción.</i>	72
Ilustración 22. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 270 kg de producción.</i>	72
Ilustración 23. <i>Diagrama de flujo del escalamiento del adipato de dimetilo a partir de nylon residual.</i>	74
Ilustración 24. <i>Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial - intensificación.</i>	76
Ilustración 25. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial - intensificado.</i>	76
Ilustración 26. <i>Porcentaje de los costos de equipos para escalamiento industrial.</i>	78
Ilustración 27. <i>Distribución del Gasto de Capital (CAPEX) en el escalamiento.</i>	79

Ilustración 28. <i>Distribución del Gasto Operativo (OPEX) en el escalamiento.</i>	80
Ilustración 29. <i>Flujo de caja del proyecto a 10 años.</i>	82
Ilustración 30. <i>Impacto de la Conversión en el Período de Recuperación de la Inversión (PBP).</i>	84
Ilustración 31. <i>Impacto de la Conversión en la Recuperación del Costo de Capital (CCR).</i>	85
Ilustración 32. <i>Impacto de la Conversión en la Posición Acumulada de Caja (USD).</i>	86
Ilustración 33. <i>Impacto de la tasa de retorno sobre la inversión.</i>	87
Ilustración 34. <i>Layout del diseño conceptual del proceso para la obtención de adipato de dimetilo.</i>	88
Ilustración 35. <i>Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 200 kg de producción.</i>	99
Ilustración 36. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 200 kg de producción.</i>	100
Ilustración 37. <i>Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 250 kg de producción.</i>	102
Ilustración 38. <i>Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 250 kg de producción.</i>	102

Índice de tablas

Tabla 1. <i>Materiales y equipos usados durante las pruebas en el laboratorio.</i>	16
Tabla 2. <i>Reactivos utilizados en el proceso de laboratorio.</i>	17
Tabla 3. <i>Condiciones de operación para la reacción de despolimerización del nylon 6,6 residual.</i>	18
Tabla 4. <i>Parámetros de operación para las reacciones de esterificación del nylon 6,6 residual variando la temperatura y porcentaje de catalizador.</i>	19
Tabla 5. <i>Condiciones empleadas para la extracción líquido-líquido del adipato de dimetilo.</i>	21
Tabla 6. <i>Rango de las variables de temperatura y tiempo.</i>	23
Tabla 7. <i>Diseño de experimentos con dos factores: temperatura y tiempo.</i>	23
Tabla 8. <i>Ingreso de propiedades de los componentes en el simulador ABPD.</i>	32
Tabla 9. <i>Preparación de la mezcla de HCl al 37%.</i>	33
Tabla 10. <i>Ingreso de reacciones al simulador.</i>	33
Tabla 11. <i>Descripción de las reacciones y operaciones principales del proceso en ABPD.</i>	34
Tabla 12. <i>Resultado del diseño de experimentos con las conversiones obtenidas.</i>	43
Tabla 13. <i>Comparación estadística de modelos ajustados.</i>	44
Tabla 14. <i>Condiciones ideales que maximizan la conversión.</i>	47
Tabla 15. <i>Propiedades físicas del adipato de dimetilo: punto de ebullición e índice de refracción.</i>	51
Tabla 16. <i>Descripción de etapas del proceso.</i>	60
Tabla 17. <i>Balance de masa de la receta escala laboratorio sin recirculación.</i>	61

Tabla 18. <i>Capacidad de los equipos escala laboratorio.....</i>	61
Tabla 19. <i>Balance de masa por equipos escala piloto para una producción de 1.6 kg. ..</i>	65
Tabla 20. <i>Capacidad de los equipos escala piloto de 1.6 kg.</i>	65
Tabla 21. <i>Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 100 kg.</i>	69
Tabla 22. <i>Capacidad de los equipos escala industrial para una producción de 100 kg. .</i>	69
Tabla 23. <i>Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 270 kg.</i>	71
Tabla 24. <i>Capacidad de los equipos escala industrial producción de 270 kg.....</i>	72
Tabla 25. <i>Balance de masa por equipos escala industrial - intensificación.....</i>	75
Tabla 26. <i>Capacidad de los equipos escala industrial - intensificación.....</i>	75
Tabla 27. <i>Indicadores Económicos del Proyecto: Análisis de Viabilidad Financiera.</i>	81
Tabla 28. <i>Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 200 kg.</i>	98
Tabla 29. <i>Capacidad de los equipos escala industrial producción de 200 kg.....</i>	99
Tabla 30. <i>Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 250 kg.</i>	100
Tabla 31. <i>Capacidad de los equipos escala industrial producción de 250 kg.....</i>	101

Capítulo 1

1. Introducción

La gestión de residuos industriales, especialmente los neumáticos, representa un desafío crítico a nivel global y en Ecuador, donde se desechan anualmente cerca de cuatro millones de unidades. Su compleja composición, que incluye caucho, fibras textiles y metales dificulta su reciclaje, siendo el nylon 6,6 uno de los mayores retos debido a su resistencia térmica y química. Este material, al no gestionarse adecuadamente, se convierte en un pasivo ambiental de larga duración.

A pesar de su complejidad, el nylon 6,6 tiene el potencial de ser transformado en compuesto valiosos como el adipato de dimetilo, un producto clave en la industria petroquímica. Sin embargo, estas transformaciones han sido explorada únicamente a nivel laboratorio, dejando una brecha en su escalamiento industrial. Este proyecto propone una solución innovadora que combina la sostenibilidad y valorización de residuos, buscando convertir el nylon 6,6 en un recurso económico viable y reduciendo significativamente el impacto ambiental asociados a los neumáticos.

1.1 Descripción del Problema

En el Ecuador, la industria automotriz genera el 56% de la contaminación con neumáticos desechados (Revista Gestión, 2024). A pesar de las regulaciones establecidas por el Acuerdo Ministerial 098, que exige a importadores y fabricantes reciclar al menos el 30 % de su producción anual (Ministerio del Ambiente, 2015), cada año se desechan aproximadamente cuatro millones de neumáticos en el país (El universo, 2024). Los neumáticos están compuestos principalmente por 50% de caucho natural o sintético, 25% de carbono negro, 10% de metal;

principalmente acero, 1% de azufre, 1% de óxido de zinc y pequeñas cantidades de otros compuestos (Zhong, 2021).

Es prioritario tratar los residuos de neumáticos debido al espacio que ocupan como pasivos ambientales y al impacto significativo que general al ser quemados al aire libre, lo que provoca serios problemas para la salud humana y el medio ambiente. Esta situación se complica por la composición compleja de los neumáticos, que incluye caucho, metales y fibras textiles de donde se obtiene el nylon 6,6. Este último es especialmente difícil de reciclar, ya que, su resistencia térmica y química impide su degradación natural, convirtiéndolo en un pasivo ambiental de larga duración si no se maneja adecuadamente. En respuesta a este desafío, se han desarrollado diversas alternativas a nivel global para el tratamiento de residuos de neumáticos entre ellas; pirólisis, la gasificación y la incineración (Echterhof, 2021).

Actualmente, la fibra textil de nylon 6,6, obtenida del reciclaje de llantas, es incinerada debido a su alto valor calórico, siendo esta una de las prácticas más comunes para la eliminación de neumáticos usados. Sin embargo, este método es poco eficiente, debido a que, los polímeros del nylon 6,6 presentan alta resistencia a la biodegradación y, durante la combustión liberan hidrocarburos aromáticos policíclicos que contaminan el aire (Echterhof, 2021). Además, la incineración incrementa de manera considerable las emisiones de gases de efecto invernadero, profundizando los problemas ambientales.

Aunque el nylon 6,6 posee un gran potencial para ser transformado en ácido adípico mediante procesos de despolimerización, estas tecnologías se han limitado únicamente a ensayos de laboratorio y no han sido escaladas industrialmente. Esta falta de implementación no solo impide aprovechar el valor económico de los monómeros recuperados, sino que también prolonga los problemas de almacenamiento de residuos y contribuye a la contaminación

ambiental, desaprovechando una oportunidad para integrar estos materiales en cadenas de valor sostenibles.

1.2 Justificación del Problema

El manejo de residuos de neumáticos en Ecuador representa un desafío ambiental y económico significativo. Cada año, el volumen de neumáticos desechados continúa creciendo, lo que aumenta la urgencia de encontrar soluciones sostenibles para su tratamiento. Entre los componentes más problemáticos se encuentra el nylon 6,6, una fibra textil utilizada en la fabricación de neumáticos debido a su alta resistencia térmica y química. Sin embargo, estas propiedades impiden su degradación natural, convirtiéndolo en un pasivo ambiental por su lenta biodegradación (Prasad Chavhan, 2022).

Actualmente, el método más común para deshacerse de este material es la incineración, el cual genera emisiones contaminantes significativas como es el caso de los gases de efecto invernadero. También, se generan hidrocarburos aromáticos policíclicos que representan un riesgo tanto para el medio ambiente como para la salud pública. Este enfoque es ineficiente, costoso e insostenible a largo plazo, ya que, no solo perpetúa los problemas de almacenamiento de residuos, sino que también agrava la contaminación atmosférica y desaprovecha el potencial económico de los materiales obtenidos de los neumáticos (Peñaloza, 2022).

La presente investigación propone el desarrollo de una estrategia innovadora para abordar este problema, basada en la transformación de un residuo problemático y tóxico como el nylon 6,6 para convertirlo en un producto valioso y comercializable como es el caso del adipato de dimetilo. Esta conversión se realizará mediante el diseño de un proceso industrial que incluye etapas claves como la despolimerización del nylon 6,6, seguida de la esterificación para obtener adipato de dimetilo, ofreciendo un enfoque sostenible y económicamente viable. En lugar de

desechar o quemar el nylon 6,6, este proyecto busca aprovechar su estructura polimérica para recuperar monómeros valiosos que puedan integrarse en la cadena de valor de la industria petroquímica.

El adipato de dimetilo es un compuesto de gran relevancia en la industria, puesto a que, es utilizado como materia prima en la producción de plásticos, resinas y otros polímeros de alto valor añadido (Guo et al., 2023). Sin embargo, la falta de implementación de tecnologías adecuadas para el tratamiento del nylon 6,6 impide no solo la valorización económica de sus monómeros, sino que también prolonga los problemas de almacenamiento de residuos y contribuye a la contaminación ambiental. Esto representa una oportunidad para integrar estos compuestos en cadenas de valor sostenibles, reduciendo el impacto ambiental y fomentando la economía circular.

Para superar este desafío, se aplicará un diseño de experimentos (DOE) que permitirá identificar las condiciones más adecuadas para la reacción de esterificación, evaluando factores clave como el tiempo y la temperatura de la reacción (Zhang, T., Smith, L., & Allen, J. , 2020). Una vez obtenidas estas condiciones, se procederá a realizar una simulación computacional del proceso utilizando el software Aspen Batch Process Developer (ABPD), el cual facilitará el control preciso del proceso y proyectará su escalabilidad a nivel industrial. La combinación del diseño de experimentos y la simulación en ABPD ayudará a replicar las condiciones más favorables a diferentes escalas, promoviendo un enfoque sostenible y económicamente viable para la industria petroquímica y de reciclaje, en el marco de una economía circular en la que los residuos se convertirán en recursos valiosos.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo general

Diseñar un proceso conceptual para la obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual mediante reacciones de despolimerización y esterificación para su escalabilidad usando el software Aspen Batch Process Developer.

1.3.2 Objetivos específicos

1. Definir las condiciones ideales de la etapa de esterificación del ácido adípico proveniente de la despolimerización del nylon 6,6 realizado a nivel de laboratorio mediante un diseño de experimentos.
2. Simular el proceso en Aspen Batch Process Developer utilizando datos experimentales mediante el uso de herramientas de modelado y simulación computacional.
3. Evaluar la escalabilidad y viabilidad económica del proceso diseñado para la proyección de su implementación a nivel industrial mediante un análisis tecno-económico.

1.4 Marco teórico

1.4.1 Reciclaje de neumáticos

El reciclaje de neumáticos es una actividad fundamental en la gestión de residuos sólidos, ya que, permite transformar los neumáticos fuera de uso en nuevos productos o fuentes de energía. Los neumáticos contienen materiales valiosos como el caucho, fibras textiles y metales, pero su composición completa dificulta su reciclaje eficiente. En muchos países, la gestión inadecuada de neumáticos se ha traducido en su acumulación en vertederos o en su incineración. Estas prácticas generan emisiones contaminantes como lo son los gases de efecto invernadero e

hidrocarburos aromáticos policíclicos, afectando la calidad del aire y la salud pública (Torres, 2015).

Existen diferentes métodos para el reciclaje de neumáticos, los cuales serán detallados a continuación: la trituración mecánica, donde los neumáticos son cortados en pequeñas partículas que se van a utilizar luego como asfalto modificado y como material de relleno en obras civiles (El universo, 2024). En el caso del pirólisis, es un proceso termoquímico en el que los neumáticos se descomponen en ausencia de oxígeno generando productos como el gas, carbón y aceites que pueden ser utilizados como combustibles (Echterhof, 2021). Por último, el reciclaje químico implica el proceso de despolimerización de los polímeros como el nylon 6,6, para recuperar sus monómeros y reintegrarlos en procesos industriales. Este enfoque reduce la dependencia de materias primas vírgenes y minimiza los impactos ambientales (El universo, 2024).

El reciclaje de neumáticos no solo reduce la acumulación de pasivos ambientales, sino que también abre oportunidades para la creación de productos de alto valor, alineándose con los principios de la economía circular. En este proyecto, se propone el uso del nylon 6,6, recuperado de neumáticos fuera de uso, con el objetivo de contribuir tanto al cuidado ambiental como a la generación de empleo. Además, la transformación de este residuo en materiales útiles impulsa una gestión más sostenible de los recursos, reduciendo la dependencia de materias primas vírgenes y promoviendo prácticas industriales responsables.

1.4.2 Nylon 6,6

El nylon 6,6 es un polímero perteneciente a la familia de las poliamidas, el cual se usa ampliamente en la industria automotriz, debido a su alta resistencia mecánica, estabilidad térmica y resistencia química. Este material se obtiene mediante la polimerización por condensación del

ácido adípico y la hexametilendiamina, lo que confiere una estructura molecular fuerte y duradera. Estas propiedades lo hacen ideal para su uso en la industria automotriz, especialmente en la fabricación de neumáticos donde se utiliza como refuerzo en forma de fibras textiles que otorgan mayor resistencia y durabilidad (Coeck, R., & De, D. E., 2024).

No obstante, la misma resistencia que hace al nylon 6,6 un material capaz durante la vida útil de los productos se convierte en un desafío al final de su ciclo. Este polímero es altamente resistente a la degradación natural, lo que significa que si no se gestiona adecuadamente puede permanecer en el medio ambiente durante décadas sin lograr descomponerse. En la actualidad, la eliminación de residuos de nylon 6,6 se realiza en su mayoría mediante la incineración lo cual contribuye a la emisión de gases de efecto invernadero y otros compuestos tóxicos, como los hidrocarburos aromáticos policíclicos (Prasad Chavhan, 2022).

Aparte de que solo se use en neumáticos, el nylon 6,6 también es usado en otras aplicaciones industriales como lo es la fabricación de cuerdas, tejidos técnicos y componentes electrónicos, lo que genera una creciente demanda de este material (Peñaloza, 2022). Sin embargo, su gestión como residuo plantea desafíos significativos debido a la falta de infraestructura adecuada para su reciclaje químico en países como en Ecuador. El presente proyecto busca abordar este problema mediante la recuperación del nylon 6,6 para su transformación en productos químicos valiosos, como el adipato de dimetilo contribuyendo así a una gestión más eficiente y sostenible de estos residuos (Arcos & Landívar, 2022).

1.4.3 Método de despolimerización del nylon residual

La despolimerización es un proceso químico fundamental en el reciclaje del nylon 6,6, puesto a que, permite transformar las largas cadenas poliméricas en sus monómeros originales, facilitando su reutilización en nuevos productos industriales. En el caso del nylon 6,6; los

monómeros resultantes de la despolimerización como el ácido adípico y la hexametildiamina poseen un valor alto comercial y son ampliamente utilizados en la industria petroquímica (Coeck, R., & De, D. E., 2024). Existen tres métodos para despolimerizar el nylon 6,6 los cuales son la hidrólisis, la alcoholólisis y ammonólisis.

La hidrólisis, consiste en la ruptura de los enlaces poliméricos mediante la reacción con agua en presencia de catalizadores, bajo condiciones controladas de temperatura y presión. Este método es eficiente para obtener ácido adípico y hexametildiamina, es el mismo que se utilizará en este proyecto debido a su simplicidad y eficiencia (Xu et al., 2023). En el caso de alcoholólisis, este implica la reacción del nylon con alcoholes para obtener productos intermedios que pueden ser utilizados en procesos industriales. Esta técnica es útil, pero a la vez es compleja y menos eficiente si lo que se desea es recuperar el ácido adípico (Coeck, R., & De, D. E., 2024).

Finalmente, se tiene la ammonólisis en donde se utiliza amoniacó para romper las cadenas poliméricas, generando productos amínicos útiles en la industria farmacéutica y química, pero con mayor complejidad para su operación y altos costos (Xu et al., 2023).

1.4.4 Reacción de esterificación de Fischer

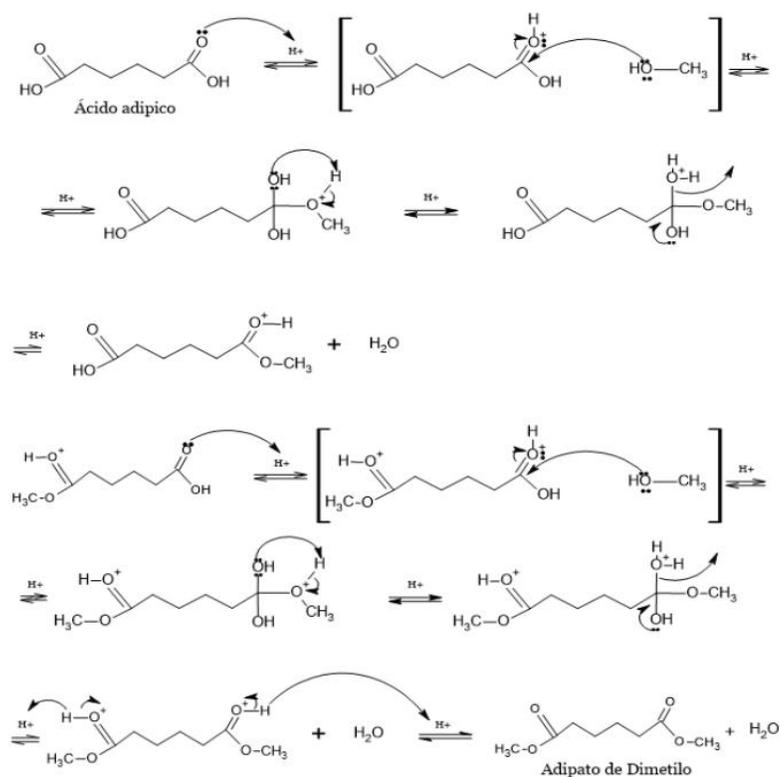
La esterificación de Fischer es una técnica clásica basada en la obtención de un éster a partir de un ácido carboxílico, una de sus características principales es el uso de un catalizador en medio ácido, donde al menos un grupo hidroxilo es reemplazado por un alcohol, provocando la formación de un éster y agua como productos de la reacción debido a que es una reacción de condensación (Albanese, 2023).

Para la obtención de adipato de dimetilo a partir de ácido adípico, el proceso de esterificación de Fischer involucra la reacción del ácido adípico con metanol en presencia de un

catalizador ácido. Durante la reacción, los grupos carboxilo en ambas extremidades del ácido adípico reaccionan con el metanol para formar adipato de dimetilo y agua como subproducto. Este éster es importante en aplicaciones industriales como plastificante y en la fabricación de polímeros. La reacción puede optimizarse ajustando la cantidad de catalizador ácido y eliminando el agua formada para evitar la reversibilidad y maximizar la producción de adipato de dimetilo.

Ilustración 1

Mecanismo de esterificación de Fischer del ácido adípico con metanol en medio ácido.



Fuente: Gráfico proporcionado por (Basantes & Saico, 2023)

1.4.5 Adipato de dimetilo

El adipato de dimetilo es un diéster que se obtiene de la esterificación de Fischer proveniente del ácido adípico mediante alcohol en exceso presente en un medio ácido, entre sus características principales se tiene que es inmisible en agua, y presenta miscibilidad en alcoholes y éteres, su punto de ebullición se encuentra en un rango de 215 °C a 225 °C a presión atmosférica, su índice de refracción es 1.4283 (Thermo Fisher Scientific, 2023). El adipato de dimetilo es un compuesto ampliamente utilizado en la industria petroquímica como intermedio químico. Este producto tiene ventajas significativas desde una perspectiva comercial, ya que, presenta una alta demanda en la industria y su obtención a partir de residuos contribuye a la reducción de pasivos ambientales (Guo et al., 2023).

1.4.6 Técnicas de caracterización

1.4.6.1 Espectroscopia infrarroja (IR).

La espectroscopia infrarroja es una de las técnicas más realizadas a nivel de laboratorio para la caracterización de compuestos orgánicos, es una herramienta muy importante para identificar los grupos funcionales presentes en las moléculas orgánicas, es un método no destructivo. La espectroscopia IR mide la absorción de la radiación electromagnética en la región infrarroja por una muestra colocada en el camino de la luz. La frecuencia a la que se produce la absorción dependerá de la naturaleza de la muestra y, por lo tanto, puede utilizarse para identificar la naturaleza de la muestra. A diferencia del espectro UV, que consta de muy pocos picos, esta técnica proporciona un espectro que contiene un gran número de bandas de absorción de las que se puede derivar más información sobre la estructura de los compuestos orgánicos. La espectroscopia IR cubre el rango de 10 cm^{-1} a 13.000 cm^{-1} (Voonna, 2024).

La identificación de los grupos funcionales presentes en la molécula de interés, como los grupos éster ($-\text{COO}-$) característicos en el adipato de dimetilo. Los picos en el espectro FTIR de un éster como el adipato de dimetilo se asignan a vibraciones de estiramiento y flexión de los enlaces C-H, C=O y C-O, lo que facilita la confirmación de la estructura del compuesto. Además, el análisis de FTIR también ayuda a verificar la pureza del producto y detectar posibles impurezas o productos secundarios (Siddique, 2024).

1.4.6.2 Propiedades físicas

Las propiedades físicas para caracterizar un compuesto y compararlo con sus valores teóricos son el punto de fusión, punto de ebullición e índice de refracción con respecto al compuesto estándar, son propiedades físicas clave que se utilizan para caracterizar compuestos orgánicos. El punto de fusión se determina mediante un aparato de capilar o un termómetro de

fusión, en el que el compuesto sólido se calienta gradualmente hasta que se funde. El punto de ebullición se mide mediante un termómetro en un dispositivo de ebullición controlada, lo que permite conocer la temperatura a la cual el compuesto pasa de líquido a gas. Estas propiedades son útiles no solo para confirmar la identidad del compuesto, sino también para evaluar su pureza, ya que, impurezas en el compuesto pueden alterar significativamente tanto el punto de fusión como el de ebullición (Liu & Chen, 2014).

1.4.7 Estrategias estadísticas para el tratamiento de datos

El diseño de experimentos (DOE) es una metodología estadística que permite planificar, diseñar y analizar experimentos de manera eficiente, maximizando la información obtenida al evaluar múltiples factores y sus interacciones de forma simultánea (Montgomery, 2017)

Dependiendo del tipo de estudio, el diseño de experimentos (DOE) puede emplear diseños factoriales, de superficie de respuesta o de experimentos fraccionados, cada uno adecuado para evaluar diferentes combinaciones de factores y niveles. Este enfoque permitirá evaluar de forma sistemática cómo las condiciones de reacción afectan la formación del adipato de dimetilo, maximizando la eficiencia del proceso y minimizando costos y recursos (Nnenna et al., 2022).

El uso de este diseño permite explorar el efecto lineal y cuadrático de cada factor, así como las interacciones entre ellos, asegurando que se identifiquen las condiciones que maximizan la respuesta del sistema. Además, los puntos axiales y centrales incluidos en este diseño brindan mayor precisión en la estimación de la curvatura del modelo, lo que mejora la robustez del análisis. El diseño de experimentos para este proceso cuenta con 2 factores principales como lo es el tiempo y la temperatura de la reacción (Joglekar, A., & May, C., 2020).

1.4.8 Aspen Batch Process Developer

Aspen Batch Process Developer es una herramienta avanzada de simulación y modelado empleada ampliamente en la ingeniería química, cuyo propósito es facilitar el diseño y análisis detallado de procesos complejos. Este software es particularmente efectivo en el caso de procesos que involucran reacciones múltiples y condiciones de operación específicas, como la despolimerización y esterificación del nylon residual, ya que permite simular de forma precisa no solo las reacciones, sino también cada operación unitaria implicada (Zhang, T., Smith, L., & Allen, J. , 2020).

Aspen Batch Process Developer proporciona un análisis completo de los balances de masa y energía del sistema, lo cual es fundamental para evaluar el consumo de recursos, identificar posibles puntos de desperdicio, y optimizar el uso de materiales y energía. Esta capacidad de simulación permite anticipar y resolver problemas antes de que ocurran en una implementación a gran escala, mejorando la sostenibilidad del proceso al reducir desechos y emisiones. A través de esta simulación integral, el proyecto busca no solo asegurar la viabilidad técnica del proceso, sino también explorar su potencial de escalabilidad industrial, asegurando que se mantenga una eficiencia operativa en términos tanto económicos como ambientales (Chen, R., & Kapoor, A. , 2021).

Capítulo 2

2. Metodología

Para el presente proyecto integrador se planteó los métodos utilizados para la obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual, abordando desde la preparación de muestras hasta la caracterización del producto. Se implementó un diseño experimental para obtener las condiciones ideales el cual se implementó en el software para simular y escalar el proceso a nivel industrial. Este enfoque permitió maximizar el rendimiento del adipato de dimetilo, garantizando la reproducibilidad y escalabilidad del proceso, contribuyendo así a reducir el impacto ambiental de los residuos del nylon 6,6.

2.1 Materiales, reactivos y equipos

Para el desarrollo de este proyecto, se plantearon los siguientes materiales, reactivos y equipos esenciales los cuales fueron detallados en la Tabla 1 y 2 para hacer uso de estos durante las pruebas de laboratorio.

Tabla 1.

Materiales y equipos usados durante las pruebas en el laboratorio.

Materiales	Capacidad	Equipos	Marca
Matraz volumétrico	100, 500 mL	Balanza analítica	OHAUS
Pipeta	2, 5, 10 mL	Estufa	REBELK, MEMMERT
Embudo	20 mL	Rotavapor	IKA, BUCHI
Pera de succión	-	Reactor 8	NA
Vaso de precipitación	50, 100 mL	Reactor 32	NA
Vidrio reloj	-		

Embudo de decantación	100 mL	Espectrofotómetro IR	THERMO SCIENTIFIC
Espátulas	-	Medidor de VSG	STUART
Papel filtro	-	Centrífuga	BIOBASE

Tabla 2.

Reactivos utilizados en el proceso de laboratorio.

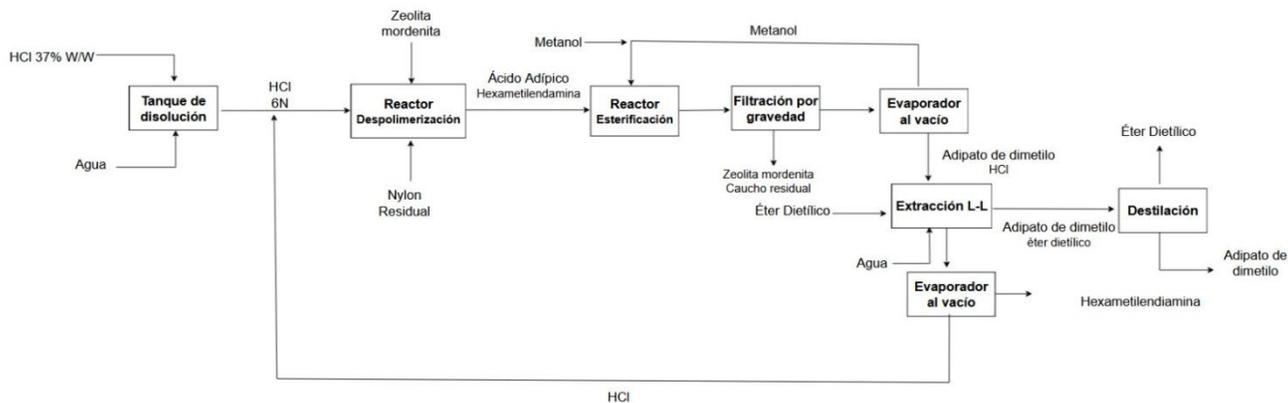
Reactivos
Ácido clorhídrico 6N
Nylon Residual
Zeolita Mordenita
Metanol grado reactivo 99 %
Éter dietílico
Sulfato de Sodio anhidro
Agua destilada

2.2 Proceso de laboratorio

El proceso de laboratorio para la obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual incluyó tres etapas principales: despolimerización, esterificación y separación. Estas etapas, representadas esquemáticamente en la Ilustración 2, se llevaron a cabo de manera secuencial para maximizar la productividad del adipato de dimetilo y garantizar la reproducibilidad del procedimiento experimental.

Ilustración 2.

Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo con recirculación.



Nota: Elaboración propia

2.2.1 Etapa de despolimerización

En la etapa de despolimerización, se replicaron las condiciones y cantidades reportadas por (Mendoza & Olivero, 2024) en la Tabla 3, utilizando dos reactores de una capacidad de 20 mL (R-8 y R-32). Las masas de nylon residual y zeolita fueron medidas con precisión para posteriormente, añadirle ácido clorhídrico 6N, asegurando que el volumen no superara el 75% de la capacidad de los reactores para evitar pérdidas. Los reactores sellados fueron sometidos a condiciones controladas de temperatura y tiempo en la estufa (Rebelk, Memmert).

Tabla 3.

Condiciones de operación para la reacción de despolimerización del nylon 6,6 residual.

Componentes	Cantidades
Masa de nylon residual (g)	0.15
Masa de zeolita mordenita (g)	0.0525
Concentración de HCl (N)	6

Volumen de HCl (ml)	10
Tiempo de reacción (°C)	140
Temperatura de reacción (h)	6

Nota: Datos tomados de (Mendoza & Olivero, 2024).

2.2.2 Etapa de esterificación

La reacción de esterificación se realizó utilizando el ácido adípico producido en la etapa de despolimerización, agregando 2 mL de metanol como agente esterificante para asegurar la formación de adipato de dimetilo. La mezcla de ácido adípico y metanol fue introducida en los reactores R-8 y R-32, los cuales fueron sometidos a condiciones controladas de temperatura en la estufa. Estas condiciones operacionales se encuentran detalladas en la Tabla 4, las cuales se establecieron en base al estudio realizado por (Basantes & Saico, 2023), cuya metodología proporciona las directrices necesarias para el diseño y ejecución de la experimentación.

Tabla 4.

Parámetros de operación para las reacciones de esterificación del nylon 6,6 residual variando la temperatura y porcentaje de catalizador.

Parámetro de operación	Unidad	Valor
Temperatura	°C	100, 120, 140
Porcentaje del catalizador	% w/w	0, 5, 10, 15
Relación Nylon:Metanol	g: ml	1:10
Tiempo	h	4

Nota: Datos tomados de (Basantes & Saico, 2023), (Nagarkar, 2022).

Al término del tiempo de reacción, el nylon residual no reaccionado fue separado mediante filtración, empleando un embudo y papel filtro previamente pesado en una balanza analítica. Este

procedimiento permitió determinar la conversión del nylon residual empleando la Ecuación 2.1, definida como la relación entre la masa inicial y la masa reaccionada.

$$\% \text{ conversión} = \frac{\text{masa de nylon residual reaccionó(g)}}{\text{masa de nylon residual alimentado (g)}} \times 100\% \quad (2.1)$$

2.2.3 Etapas de separación

- 1. Filtración por gravedad:** En la primera etapa de separación, la filtración por gravedad se realizó utilizando un embudo y papel filtro. Este procedimiento permitió separar los residuos sólidos no reaccionados, como fragmentos de nylon residual, zeolita mordenita no reaccionada en el proceso y partículas de caucho remanentes. Estos residuos se retuvieron en el papel filtro, dejando pasar únicamente la fase líquida que contiene el producto de interés.
- 2. Evaporación para la recuperación de metanol:** En la etapa de evaporación, se procesó la mezcla constituida por adipato de dimetilo, HCl y metanol, utilizando un rotavapor (IKA) para llevar a cabo la separación del metanol mediante evaporación controlada. Las condiciones operativas empleadas incluyeron una temperatura constante de 40 °C y un tiempo de residencia de 30 minutos, lo que permitió una evaporación eficiente del metanol sin comprometer la estabilidad de los compuestos presentes en la fase líquida remanente. Al concluir la operación, se obtuvo una fase líquida enriquecida en adipato de dimetilo y HCl, mientras que el metanol evaporado fue recuperado y destinado nuevamente como reactivo en la reacción de esterificación.
- 3. Extracción Líquido-Líquido:** Una vez concentrada la solución proveniente de la evaporación, se empleó la técnica de extracción líquido-líquido debido a la proximidad de los puntos de ebullición de los compuestos y la afinidad de estos hacia el solvente seleccionado. Las pruebas de extracción se llevaron a cabo en un embudo de decantación

de 100 mL, utilizando éter dietílico como solvente para poder fortalecer la parte orgánica y agua a 5°C para poder separar las impurezas presentes en la mezcla, las condiciones específicas para esta etapa se detallan en la Tabla 5.

Tabla 5.

Condiciones empleadas para la extracción líquido-líquido del adipato de dimetilo.

Componentes	Unidad	Cantidades
Adipato de dimetilo	mL	1
Éter dietílico	mL	2
Agua	mL	3

Nota: Condiciones obtenidas de (Basantes & Saico, 2023)

- 4. Destilación:** En la etapa de destilación, se llevó a cabo una separación simple para recuperar el éter dietílico empleado como solvente en la etapa de extracción. Esta operación se realizó bajo condiciones específicas de presión atmosférica y una temperatura de 34.6 °C (Thermo Fisher Scientific, 2023), correspondiente al punto de ebullición del éter dietílico, con el objetivo de garantizar una evaporación eficiente del solvente sin afectar la composición del producto residual. Durante el proceso, el éter dietílico se evaporó y fue recolectado en su fase gaseosa, posteriormente condensada y almacenada para su reutilización en futuras operaciones de extracción. Simultáneamente, el adipato de dimetilo permaneció en el fondo del destilador, ya que, su punto de ebullición es significativamente más alto que el del éter dietílico, lo que permitió su separación efectiva y su posterior procesamiento en las siguientes etapas del sistema.

5. Evaporación para la recuperación de ácido clorhídrico: En la última etapa de separación, se llevó a cabo una evaporación para separar el ácido clorhídrico presente en el sistema, con el objetivo de su reutilización en la reacción de despolimerización. Esta operación se realizó bajo presión atmosférica y una temperatura de 50 °C durante 45 minutos, condiciones cuidadosamente seleccionadas para garantizar una evaporación eficiente del ácido clorhídrico sin degradar los compuestos residuales. Durante este proceso, el ácido clorhídrico en fase gaseosa fue recolectado mediante un sistema de condensación, permitiendo su almacenamiento y posterior reciclaje en el proceso inicial. Adicionalmente, debido a la presencia de agua en el sistema, se presentó la formación de clorhidrato de hexametildiamina como un subproducto, el cual permaneció en el residuo sólido tras la evaporación.

2.3 Diseño de Experimentos

El método de superficie de respuesta fue implementado en la presente experimentación para modelar y analizar los efectos combinados de la temperatura y el tiempo de reacción sobre el porcentaje de conversión del nylon 6,6 en la etapa de esterificación, se utilizó un diseño de experimentos factorial central compuesto, basado en los datos obtenidos por (Basantes & Saico, 2023), permitió estructurar un enfoque sistemático para evaluar las condiciones de la etapa de esterificación. Este diseño fue utilizado para definir los rangos de las variables claves, como el tiempo y la temperatura, y establecer un conjunto de experimentos que permitan explorar su efecto sobre el sistema. Su finalidad fue proporcionar una base metodológica que guíe la experimentación y permita identificar las condiciones más favorables para mejorar la conversión de nylon 6,6 residual, considerando posibles interacciones entre las variables estudiadas. Los parámetros

seleccionados y los niveles asociados se presentan en la Tabla 6, donde se describen las condiciones experimentales evaluadas en el laboratorio.

Tabla 6.

Rango de las variables de temperatura y tiempo.

Parámetro	Bajo (-1)	Centro (0)	Alto (+1)
Temperatura (°C)	100	120	140
Tiempo (h)	2	3	4

Nota: Datos obtenidos de (Basantes & Saico, 2023).

Además, se hizo uso de Microsoft Excel para estructurar y organizar el diseño de experimentos, definiendo tanto el número como el orden de las corridas experimentales en la etapa de esterificación. Las corridas experimentales se llevaron a cabo en un orden aleatorio, estrategia conocida como "aleatorización", la cual es ampliamente utilizada para minimizar el error aleatorio y evitar sesgos sistemáticos en la recopilación de datos (Montgomery, 2017). Este enfoque asegura que las variaciones observadas en los resultados sean atribuidas a los factores controlados y no a posibles interferencias externas. Véase, en la Ilustración 3 y Tabla 7, la información detallada del orden y distribución del diseño experimental, proporcionando una guía clara para la ejecución y análisis de las corridas realizadas.

Tabla 7.

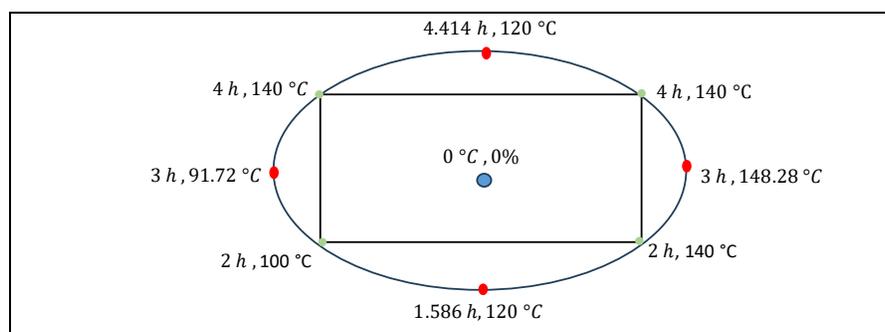
Diseño de experimentos con dos factores: temperatura y tiempo.

Orden	Orden	TipoPt	Bloques	Tiempo	Temperatura
Aleatorio	Corrida			(Horas)	(°C)
4	1	1	1	4	140

5	2	-1	1	1.5858	120
11	3	0	1	3	120
10	4	0	1	3	120
12	5	0	1	3	120
13	6	0	1	3	120
9	7	0	1	3	120
2	8	1	1	4	100
1	9	1	1	2	100
8	10	-1	1	3	148.2843
3	11	1	1	2	140
7	12	-1	1	3	91.7157
6	13	-1	1	4.4142	120

Ilustración 3.

Gráfico del diseño de experimentos en función de los rangos de cada variable: temperatura y tiempo.



Nota: Elaboración propia.

El diseño experimental permitió establecer el número y la secuencia de los experimentos para la etapa de esterificación. La librería rsm de RStudio fue utilizada para analizar y modelar la respuesta experimental obtenida durante la etapa de esterificación. Este paquete especializado en

superficies de respuesta permitió construir un modelo estadístico cuadrático a partir de los datos experimentales, evaluando los efectos principales, las interacciones y los términos cuadráticos de las variables independientes, como tiempo y temperatura (RPubs , 2021). A través del análisis de varianza (ANOVA), se determinó la significancia estadística de los coeficientes del modelo, así como la idoneidad del ajuste, lo que validó la utilidad del modelo para representar el comportamiento del sistema en las condiciones evaluadas.

Posteriormente, se emplearon las herramientas de visualización de la librería, como gráficos tridimensionales y mapas de contorno, para identificar el punto estacionario del modelo, que representa las condiciones experimentales ideales dentro del rango estudiado. Este análisis permitió determinar las combinaciones de tiempo y temperatura que maximizan la conversión del nylon en la etapa de esterificación. Los resultados obtenidos a través de rsm no solo proporcionaron un entendimiento más profundo del sistema, sino que también sirvieron como base para proponer condiciones experimentales en futuras optimizaciones o estudios complementarios.

2.4 Caracterización fisicoquímica

Se realizó la caracterización fisicoquímica del adipato de dimetilo para confirmar sus propiedades, pureza y compatibilidad con aplicaciones industriales. Este proceso incluyó el análisis detallado de las propiedades físicas y químicas del compuesto, comparando los resultados obtenidos con datos reportados en la literatura. Las técnicas aplicadas permitieron identificar parámetros clave como el punto de ebullición, índice de refracción y espectro infrarrojo, asegurando así la calidad y la identidad del producto obtenido.

2.4.1 *Espectroscopía infrarroja (IR)*

Se utilizó la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) para identificar los grupos funcionales presentes en el adipato de dimetilo. Esta técnica midió las vibraciones

moleculares causadas por la absorción de radiación infrarroja, generando un espectro característico. Para ello, se colocó 1 mL del éster en el cristal de ZnSe^+ , teniendo como resultado que los picos más relevantes correspondieron a las vibraciones de los enlaces C=O y C-O, características de los ésteres. Este análisis permitió confirmar la formación del adipato de dimetilo y detectar posibles impurezas en el producto final.

2.4.2 Punto de ebullición

El punto de ebullición del adipato de dimetilo fue determinado mediante el uso del dispositivo Stuart SMP30 Melting Point Apparatus detallado en la Tabla 1, donde se colocó el éster en un capilar para su análisis. Adicionalmente, se siguieron las condiciones de operación para esta etapa de (Basantes & Saico, 2023), en el cual se estableció una temperatura inicial de 230°C en función del rango teórico de $215\text{-}225^{\circ}\text{C}$. Durante el análisis, se monitoreó la transición del compuesto de estado líquido a gaseoso bajo condiciones específicas de presión. Los resultados obtenidos fueron comparados con los valores teóricos reportados, lo que permitió validar la identidad del compuesto y evaluar su pureza.

2.5 Desarrollo de caso base en simulador Aspen Batch Process Developer

El simulador Aspen Batch Process Developer fue utilizado para modelar las etapas claves del proceso desde la disolución del ácido clorhídrico y la despolimerización del nylon residual hasta la esterificación con el fin de obtener adipato de dimetilo. Este enfoque permitió replicar condiciones experimentales de laboratorio en un entorno virtual, facilitando así el análisis del desempeño bajo condiciones controladas y su preparación para el escalado junto a su evaluación tecno económica.

2.5.1 Algoritmo general del proceso

El presente diagrama mostrado en la Ilustración 4, representa el flujo general del proceso implementado en el simulador Aspen Batch Process Developer (ABPD) para la obtención de adipato de dimetilo. Este algoritmo integra las tres etapas fundamentales del desarrollo del proceso: desarrollo de receta, diseño conceptual y escalamiento, las cuales son descritas en detalle en las secciones 2.5.2, 2.5.3 y 2.5.4 respectivamente. La integración secuencial de estas etapas asegura una transición metódica desde la configuración inicial hasta la validación final del proceso, garantizando su reproducibilidad y escalabilidad.

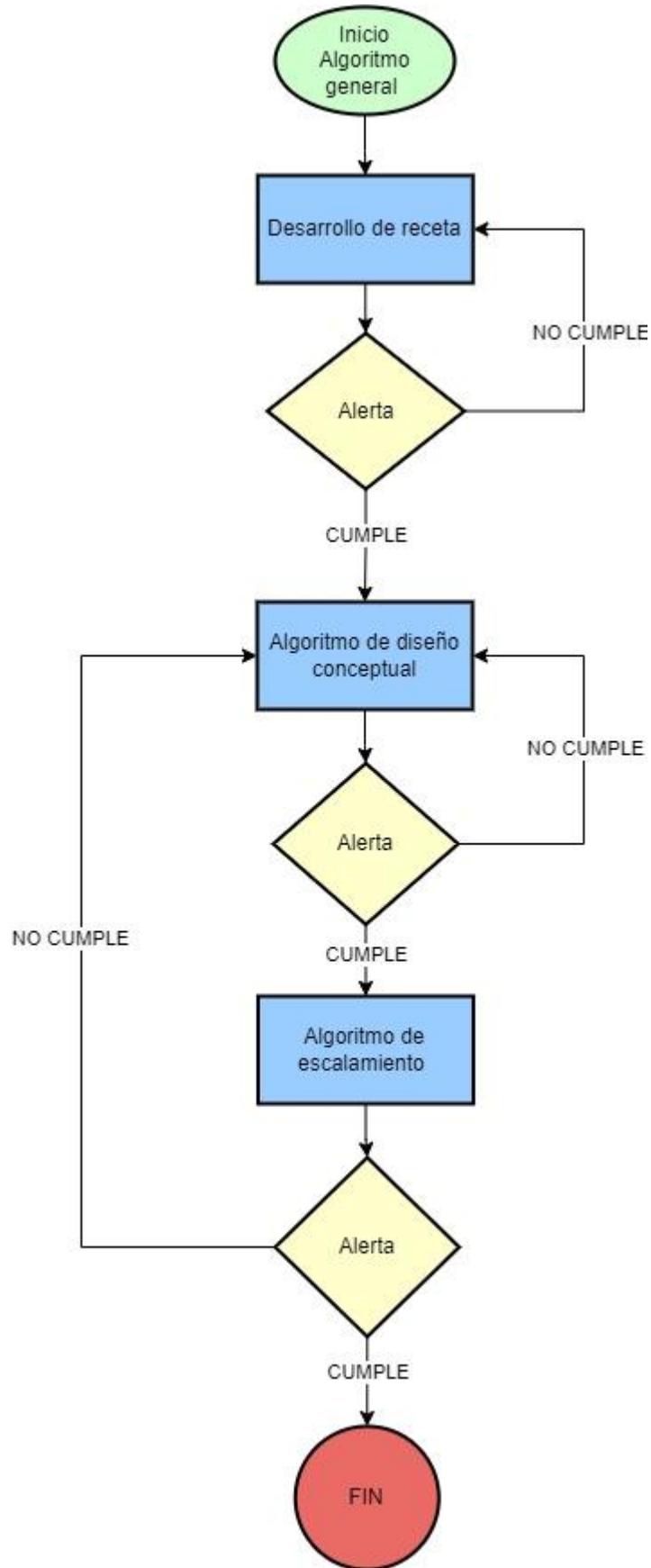
En este algoritmo se identificaron y centralizaron los warnings o puntos críticos que estuvieron presente durante el proceso, puesto a que, son clave para evaluar las discrepancias o posibles ajustes que son necesarios en cada etapa del proceso. Estos warnings permiten garantizar que el diseño cumpla con las condiciones operativas, técnicas y económicas establecidas, evitando así problemas en etapas posteriores. A continuación, se detallan los warnings presentes:

- 1. Warning de propiedades termodinámicas:** Durante el desarrollo de la receta se validaron las propiedades físicas y termodinámicas de los componentes que fueron ingresados. En caso de detectar inconsistencias o valores fuera de los rangos aceptables, se emitió un warning; lo que obligó a ajustar los parámetros antes de continuar con la simulación. Esta validación aseguró la viabilidad técnica del diseño en etapas posteriores (Sastre Galmés, 2019).
- 2. Warning de discrepancias en balances:** Esto se dio en las etapas de diseño conceptual y escalamiento, por lo que, se tuvieron que evaluar los reportes del balance de materia y energía. Si las discrepancias superaron el 5% en los balances, se emitió un warning que requería la corrección inmediata de los datos o condiciones operativas para evitar errores acumulativos en el proceso (Zhang, T., Smith, L., & Allen, J. , 2020).

- 3. Warning de capacidad de equipos:** En el diseño conceptual, se verificó que la capacidad de los equipos no sea mayor al 90% de su límite operativo. Este warning permitió evitar cuellos de botella y sobrecargas que pudieran comprometer la operación y la seguridad del proceso. Además, garantizó la selección óptima de los equipos para cumplir con los objetivos de producción establecidos (González & Castellanos, 2020).
- 4. Warning de costos operativos y de capital:** En el diseño conceptual y escalamiento, se evaluaron los costos asociados al proceso, tanto operativos (OPEX) como de capital CAPEX). Si estos costos excedían los límites predefinidos, se emitía un warning que requería ajustes en la configuración del proceso o la selección de equipos para garantizar la viabilidad económica del proyecto (Turton et al., 2018).
- 5. Warning de producción seleccionada:** Durante la etapa de escalamiento, si no se cumplía con la producción deseada tras la selección de parámetros y condiciones, se generaba un warning que obligaba evaluar nuevamente el algoritmo de diseño conceptual para ajustar las condiciones necesarias. Este paso aseguró que la producción cumpliera con los objetivos establecidos y permitiera la viabilidad del escalamiento industrial (Sastre Galmés, 2019). Estos warnings desempeñaron un papel esencial en la identificación de errores permitiendo iteraciones y ajustes en el diseño o escalamiento del proceso. Este enfoque metodológico aseguró que el proceso cumpliera con los objetivos técnicos, económicos y de producción, facilitando su implementación a nivel industrial.

Ilustración 4.

Algoritmo general para la configuración del proceso en Aspen Batch Process Developer.



2.5.2 Desarrollo de la receta

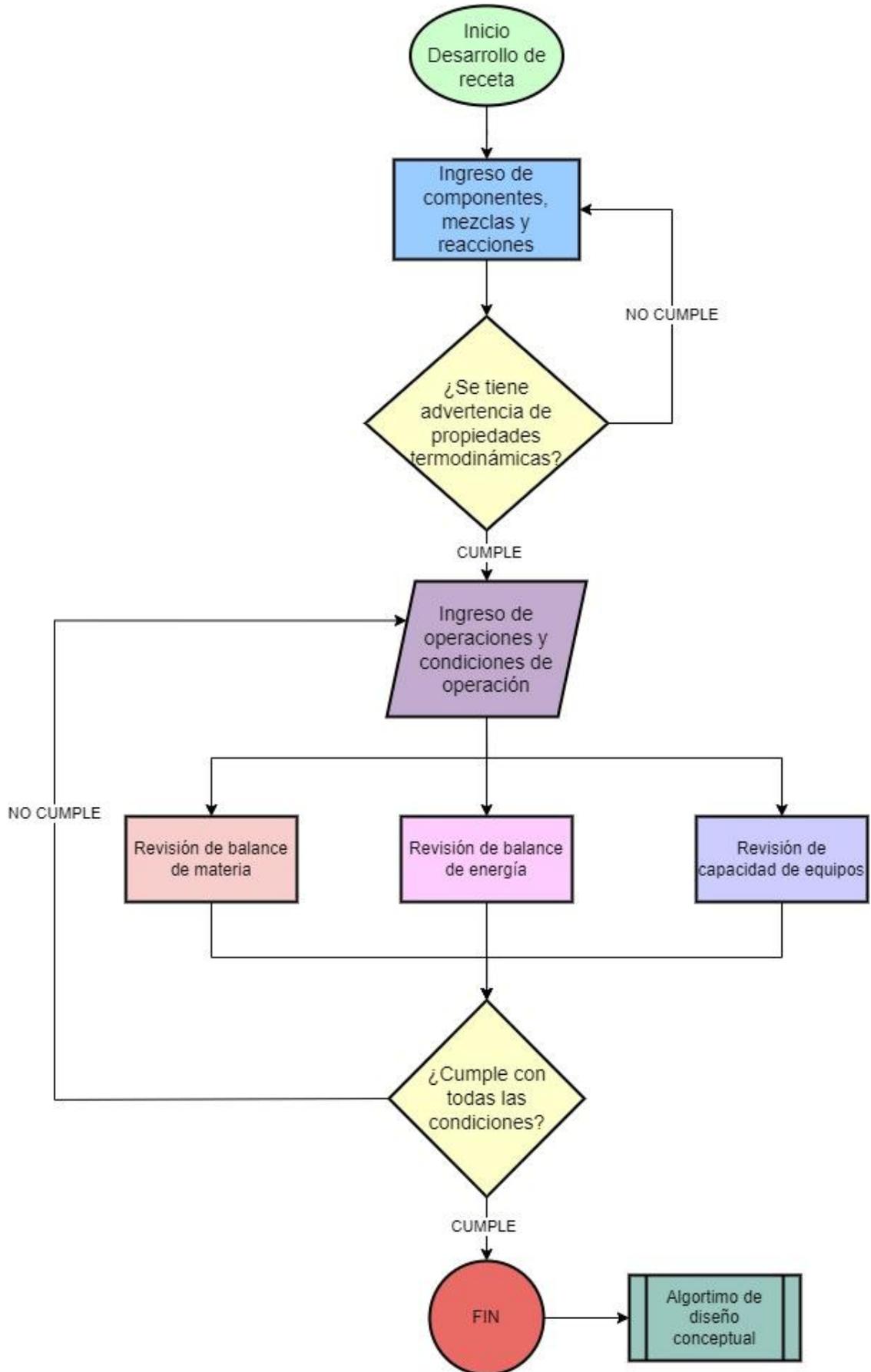
En esta sección se describió el proceso inicial de desarrollo de la receta usando el simulador ABPD. Se detallaron los componentes ingresados, mezclas y reacciones clave, mientras se evaluaron advertencias para identificar posibles inconsistencias en los datos iniciales. Estas advertencias aseguraron que las condiciones operativas fueran sólidas antes de proceder al ingreso de parámetros específicos y operaciones unitarias, sentando así las bases de un diseño reproducible y confiable del proceso.

2.5.2.1 Algoritmo de desarrollo de la receta

Este diagrama mostrado en la Ilustración 5 comenzó con el ingreso de los componentes y mezclas definidas en la sección 2.5.2.2 y 2.5.2.3 respectivamente, junto a las reacciones clave descritas en la sección 2.5.2.4; asegurando que toda la información inicial fuera completa y correcta. Este primer paso incluyó la evaluación de propiedades termodinámicas de los datos ingresados, con el objetivo de identificar posibles inconsistencias en condiciones como temperatura, porcentaje de conversión, coeficiente de las reacciones, entre otras. Si las condiciones iniciales resultaron aceptables, se procedió al ingreso de las operaciones y parámetros del proceso detallado en la sección 2.5.2.5. Posteriormente, se llevaron a cabo revisiones críticas las cuales incluyeron evaluaciones de balances de materia y energía (Warning de discrepancia en balances), así como verificaciones de parámetros operativos (Warning de capacidad de equipos). Estas revisiones se realizaron de acuerdo con los criterios establecidos en la sección 2.5.1. En el caso de que se cumplieran todas las condiciones establecidas, el desarrollo de la receta se consideró completo, permitiendo avanzar al siguiente algoritmo de diseño conceptual. Caso contrario, se realizaron las correcciones pertinentes antes de proceder al siguiente paso.

Ilustración 5.

Algoritmo de desarrollo de receta.

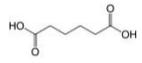


2.5.2.2 Selección de componentes

Se ingresaron al simulador las propiedades fisicoquímicas de todos los componentes involucrados en el proceso, tales como el peso molecular, densidad y otras propiedades relevantes detallados en la Tabla 8. Además, se validaron las bases de datos del simulador para confirmar que los valores ingresados coincidieran con las características reales de los componentes.

Tabla 8.

Ingreso de propiedades de los componentes en el simulador ABPD.

Componentes	Fase	Propiedades	Databank	Estructura molecular
Nylon 6,6	Sólido	PM: 226.31 g/mol	APV140.POLYMER	NA
Agua	Líquido	PM: 18 g/mol PE: 100°C	APV140.PURE40	H ₂ O
Ácido clorhídrico	Líquido	PM: 36.46 g/mol	APV140.PUREAQUOSO	HCl
Ácido adípico	Líquido	PM: 146.14 g/mol PE: 337°C	APV140.NIST	
Hexametildiamin a	Líquido	PM: 116.2 g/mol PE: 205°C	APV140.NIST	
Metanol	Líquido	PM: 32.04 g/mol PE: 64.7°C	APV140.PURE40	H ₃ C—OH
Zeolita mordenita	Sólido	Densidad: 2300 kg/m ³	NA	NA
Adipato de dimetilo	Líquido	PM: 174.2 g/mol PE: 197°C	APV140.NIST	

2.5.2.3 Mezclas

En esta etapa, se configuró la preparación de la solución de ácido clorhídrico al 37% en el simulador ABPD. La mezcla fue configurada considerando la disociación completa del HCl en agua, tal como se detalla en la Tabla 9.

Tabla 9.

Preparación de la mezcla de HCl al 37%.

Componente	Cantidad
Ácido clorhídrico (HCl)	37 g
Agua	63 g

2.5.2.4 Reacciones

En esta sección, se describieron las principales reacciones químicas ingresadas al simulador en la Tabla 10, incluidas sus ecuaciones químicas y las respectivas conversiones alcanzadas en cada etapa del proceso. Este paso permitió modelar con precisión cada etapa del proceso, comenzando con la disolución del ácido clorhídrico (2.2), seguida de la despolimerización del nylon residual (2.3) y, por último, la esterificación para la obtención de adipato de dimetilo (2.4).

Tabla 10.

Ingreso de reacciones al simulador.

Sección	Reacción	Conversión	Ecuación
Disolución	$HCl + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + Cl^-$	100%	(2.2)

Despolimerización	$(C_{12}H_{22}N_2O_2)_n + 2 H_2O \rightleftharpoons C_6H_{10}O_4 + C_6H_{16}N_2$	73%	(2.3)
Esterificación	$1 C_6H_{10}O_4 + 2 CH_3OH \rightleftharpoons C_8H_{14}O_4 + 2H_2O$	100%	(2.4)

2.5.2.5 Operaciones lógicas

En esta sección se configuró el proceso de transformación del nylon 6,6 residual en el simulador ABPD, dividiéndolo en tres etapas principales como lo es la disolución, despolimerización y esterificación. Cada etapa fue diseñada utilizando operaciones unitarias clave que se describen en la Tabla 11, lo que garantizó una simulación precisa y representativa de las condiciones experimentales.

Tabla 11.

Descripción de las reacciones y operaciones principales del proceso en ABPD.

Operaciones	Significado	Descripción
Charge	Cargar	Indica la adición de reactivos en un equipo, permitiendo iniciar las reacciones químicas o procesos de mezcla.
Transfer	Transferir	Representa el movimiento de los reactivos o productos entre otros equipos, como reactores.
React	Reaccionar	Simula las reacciones químicas, definiendo condiciones de temperatura, presión, tiempo, relaciones estequiométricas, conversiones y productos generados.
Cool	Enfriar	Se empleó para reducir la temperatura del sistema después de las reacciones estabilizando los productos antes de la siguiente etapa.
Filter	Filtrar	Se usó para separar los compuestos sólidos de los líquidos mediante el uso de medios filtrantes garantizando la eliminación de impurezas no deseadas.

Decantar	Decantar	Separa los compuestos específicos utilizando un solvente adecuado optimizando la purificación.
Wash	Lavar	Eliminó trazas de reactivos o productos secundarios al contactar con un medio líquido adecuado.
Distill	Destilar	Se evapora el compuesto más volátil mediante presión y temperatura.

2.5.3 *Diseño y Escalamiento de caso base*

El diseño y escalamiento constituyeron dos etapas fundamentales en el desarrollo del proceso para la obtención de adipato de dimetilo. El diseño estableció las condiciones ideales del proceso a escala de laboratorio, considerando las propiedades químicas y físicas de los reactivos y productos, además de las operaciones unitarias necesarias para cumplir con los objetivos de producción (Sastre Galmés, 2019). Por su parte, el escalamiento trasladó dichas condiciones a nivel de una planta genérica, validando la viabilidad técnica y económica mediante ajustes en equipos y costos asociados al capital y operacional (Turton et al., 2018). En este proceso, trabajó con escalas progresivas para validar la reproducibilidad del diseño conceptual, Estas escalas se definieron en un factor de 10, comenzando con 1g hasta 200 ton. Este enfoque permitió identificar posibles discrepancias y realizar las correcciones necesarias para garantizar que el proceso cumpliera con los objetivos propuestos.

2.5.3.1 Algoritmo de diseño

El diagrama mostrado en la Ilustración 6, detalla las etapas necesarias para seleccionar la escala de producción en el diseño y garantizar la viabilidad técnica antes de proceder al escalamiento (Sastre Galmés, 2019). En primer lugar, se definió la cantidad deseada de producción y el tiempo de operación correspondiente. Posteriormente, se evaluó si el proceso podía implementarse experimentalmente en escala de laboratorio para su validación, caso contrario se

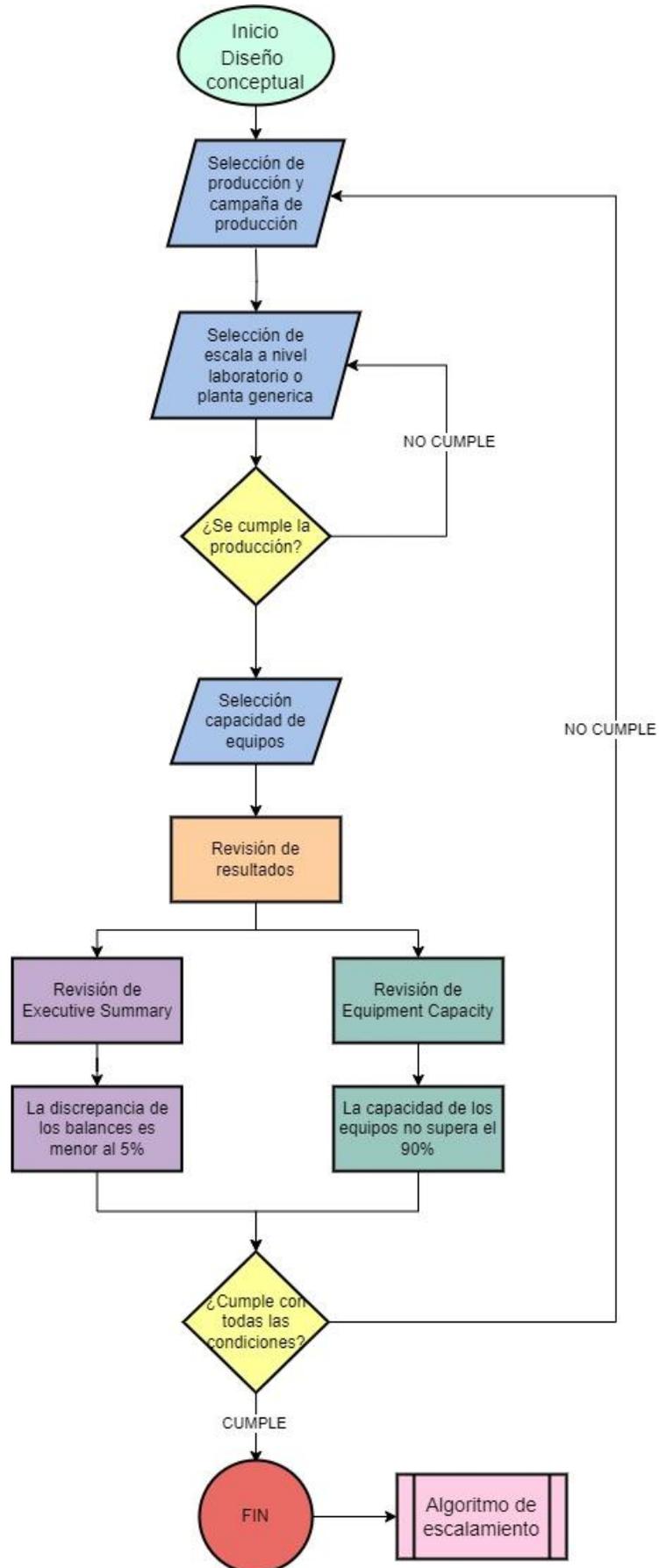
realizaron ajustes para seleccionar la planta genérica. Una vez validada la producción, se seleccionaron los equipos más apropiados en función de sus capacidades operativas, tomando en cuenta tres criterios principales con el objetivo de evitar cuellos de botella:

- 1. Menor capacidad:** Para garantizar precisión en las operaciones a pequeña escala, reduciendo el riesgo de desperdicio de recursos (Aspentech, 2015).
- 2. Mayor capacidad:** Cuando se requiera estabilidad en lotes grandes o condiciones prolongadas de operación (Aspentech, 2015).
- 3. Equipo más cercano:** Para minimizar costos logísticos y operativos, asegurando una integración eficiente en la línea de producción (Aspentech, 2015).

Como se describió en la sección 2.5.1 en el algoritmo general, los análisis para garantizar el cumplimiento de las condiciones del diseño incluyeron el monitoreo de warnings clave. Si alguna condición no se cumplía, el proceso retornaba a las etapas de ajuste de producción y selección de equipos. En caso de cumplir con todos los criterios, el diseño se consideraba aprobado y se procedía al algoritmo de escalamiento.

Ilustración 6.

Algoritmo de diseño conceptual del proceso para la obtención de adipato de dimetilo.



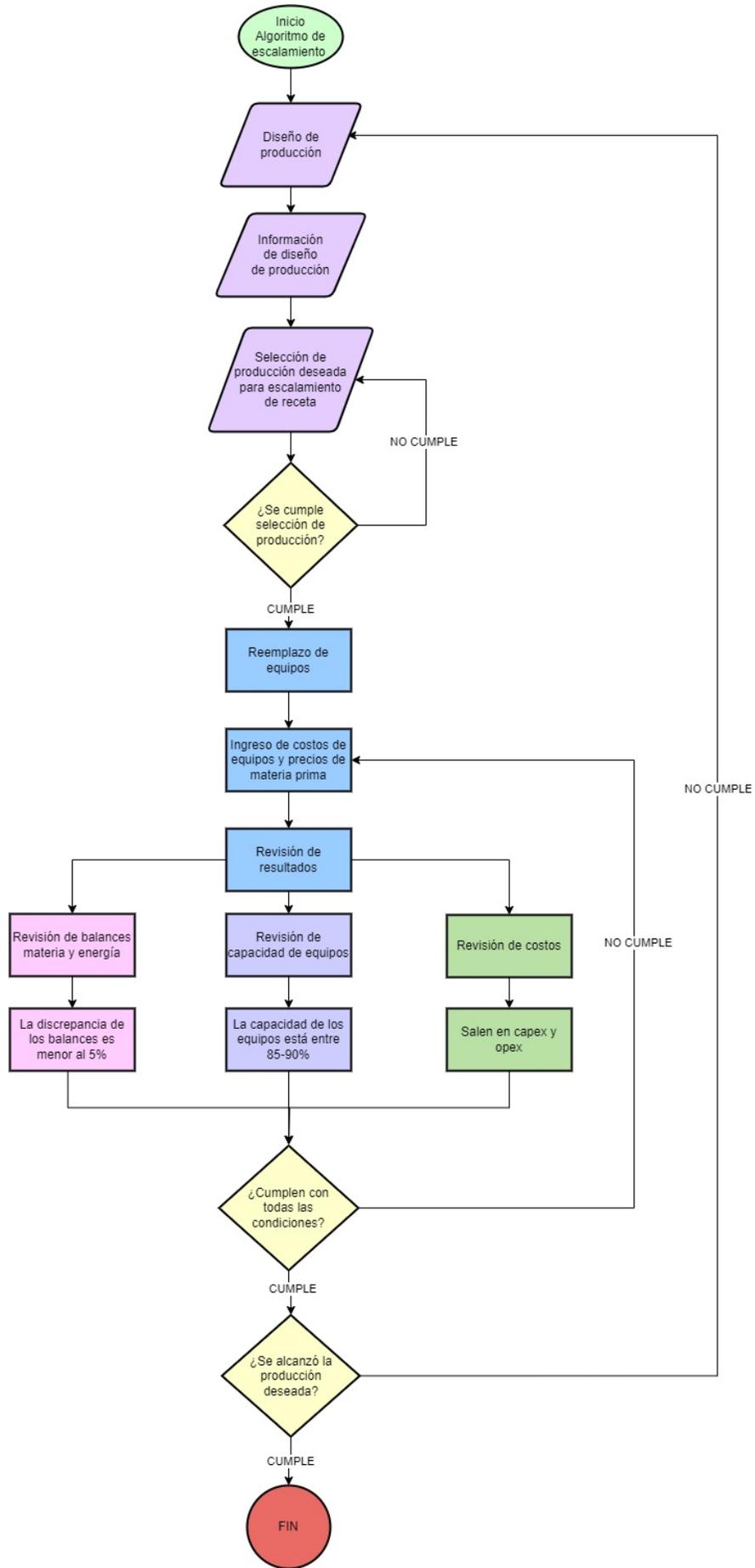
2.5.3.2 Algoritmo de escalado

El algoritmo de escalamiento representado en la Ilustración 7, se centró en identificar y evaluar los parámetros técnicos necesarios para desarrollar el proceso a partir de los objetivos de producción establecidos. Inicialmente, se definió la meta de producción considerando el tiempo y la capacidad de los equipos disponibles, asegurando que las condiciones operativas fueran viables. Se evaluó la capacidad de los equipos en función de su desempeño histórico, priorizando aquellos que presentaban menores cuellos de botella, mayor eficiencia y menor discrepancia.

Posteriormente, se realizó una validación técnica y económica mediante análisis de simulación, considerando el balance de materia y energía. En caso de detectarse alertas de discrepancia en los balances, capacidad de equipos o costos operativos y de capital, el diseño retornaba a una fase iterativa donde se ajustaron los parámetros y se validó el proceso hasta que se cumpliera con los objetivos definidos en el algoritmo general en la sección 2.5.1. Finalmente, cuando se verificaron todas las condiciones técnicas y económicas, se aprobó el diseño y se procedió al proceso de escalamiento, en el caso de que no se cumplió la producción deseada se debe retornar al algoritmo de diseño, caso contrario; se da por finalizado el proceso.

Ilustración 7.

Algoritmo de escalamiento.



2.6 Evaluación tecno económica

El análisis económico del proceso de obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual se centró en evaluar la viabilidad técnica y financiera bajo parámetros establecidos para una planta química con una vida útil de 12 años y una tasa de interés del 5% según las recomendaciones de (Turton et al., 2018). Este análisis permitió identificar la factibilidad del proyecto desde la perspectiva de inversión y operación.

2.6.1 Análisis económico

El estudio consideró los costos de inversión inicial (CAPEX) y los costos operativos (OPEX), clasificados de la siguiente manera:

- CAPEX: Incluyó el costo de adquisición de los reactores, sistemas de control, unidades de separación y otros equipos relacionados.
- OPEX: Consideró el consumo energético, el costo de reactivos químicos como HCl y metanol, así como los gastos asociados al manejo de residuos y mantenimiento.

Con base en estos costos, se calcularon indicadores financieros clave utilizando las siguientes formulas:

1. **Beneficio neto:** Determinó la diferencia entre ingresos y egresos considerando impuestos y depreciación.

$$\text{Beneficio neto} = \text{Ingresos} - \text{OPEX} - \text{Impuestos} + \text{Depreciación} \quad (2.5)$$

2. **Tiempo de recuperación de la inversión:** Estimó los años requeridos para recuperar la inversión inicial, resultando en una recuperación favorable dentro de la vida útil planteada de 12 años.

$$PBP = \frac{CAPEX}{\text{Beneficio neto}} \quad (2.6)$$

- 3. Retorno sobre la inversión:** Midió la eficiencia del capital invertido, mostrando un porcentaje positivo dentro de los límites esperados para proyectos químicos de esta naturaleza.

$$RROI = \frac{\text{Beneficio neto}}{\text{CAPEX}} \times 100\% \quad (2.7)$$

- 4. Valor presente neto:** Evaluó la rentabilidad total del proyecto al descontar flujos futuros al 5% de interés, confirmando la viabilidad económica del proceso.

$$\sum_{k=1}^N \frac{FCN_k}{(1+i)^k} \quad (2.8)$$

Capítulo 3

3. Resultados y análisis

3.1 Diseño de experimentos

A partir de la sección 2.3 se obtuvo el diseño de experimentos central compuesto y en la Tabla 12 se muestra el diseño de experimentos con sus respectivas conversiones. Este enfoque permitió evaluar de manera sistemática las variables claves involucradas en la etapa de esterificación: temperatura de reacción y tiempo de reacción.

Tabla 12.

Resultado del diseño de experimentos con las conversiones obtenidas.

Orden Aleatorio	Orden Corrida	TipoPt	Bloques	Tiempo (Horas)	Temperatura (°C)	% conversión
4	1	1	1	4	140	65.3944
5	2	-1	1	1.5858	120	38.6786
11	3	0	1	3	120	57.4074
10	4	0	1	3	120	57.6923
12	5	0	1	3	120	57.9774
13	6	0	1	3	120	56.4568
9	7	0	1	3	120	56.8407
2	8	1	1	4	100	49.5003
1	9	1	1	2	100	35.7328
8	10	-1	1	3	148.2843	66.474
3	11	1	1	2	140	52.0205
7	12	-1	1	3	91.7157	31.5789
6	13	-1	1	4.4142	120	62.2137

Se observa que, a temperaturas más altas (140°C), la conversión incrementa significativamente, alcanzando valores superiores al 65%, lo que evidencia una fuerte dependencia de la reacción a la energía térmica suministrada. Por otro lado, el tiempo de reacción también juega un rol importante, como se puede notar en el caso de tiempos cercanos a 4 horas, que muestran un aumento en la conversión. Sin embargo, valores extremos de temperatura y tiempo pueden no siempre ser ideales, como se refleja en la disminución de conversión en ciertas combinaciones específicas, posiblemente debido a limitaciones cinéticas o efectos secundarios como la degradación de reactivos.

3.1.1 Método de superficie de respuesta

Se construyeron y evaluaron tres modelos estadísticos: uno de segundo orden con interacciones, otro de segundo orden sin interacciones y un modelo cúbico de tercer orden. Los resultados obtenidos, que incluyen indicadores como el R-cuadrado, el lack of fit, el estadístico F y el valor-p, se presentan en la Tabla 13, permitiendo comparar el desempeño y la adecuación de cada modelo.

Tabla 13.

Comparación estadística de modelos ajustados.

Modelo	R-squared	Lack of fit (Valor p)	Estadístico F	Valor-p
Cuadrático con interacciones	0.9699	0.002189	45.05	3.559x10⁻⁵
Cuadrático sin interacciones	0.9698	0.003457	64.31	4.039x10⁻⁶
Cúbico	0.9978	0.2179	449.70	1.089x10⁻⁷

El modelo cuadrático con interacciones presentó un R-cuadrado de 0.9699, indicando que explica aproximadamente el 96.99% de la variabilidad en los datos. Este nivel de ajuste es considerablemente alto, sugiriendo que el modelo captura bien la relación entre las variables independientes y la de respuesta. Sin embargo, el lack of fit obtenido fue de 0.002189, un valor inferior al umbral aceptable de 0.05, lo que sugiere discrepancias significativas entre los valores observados y predichos, indicando que el modelo no describe adecuadamente la relación funcional entre las variables (Gralla, 2022). El estadístico F (45.05), aunque notable, es menor en comparación con el modelo cúbico, y el valor-p (3.559×10^{-5}) confirma la significancia del modelo, aunque menos robusta que en modelos más complejos.

En el modelo cuadrático sin interacciones, el R-cuadrado de 0.9698 es prácticamente idéntico al del modelo con interacciones, evidenciando un ajuste igualmente fuerte a los datos. No obstante, la exclusión de las interacciones limita su capacidad para capturar relaciones complejas entre las variables independientes. Su lack of fit 0.003457, aunque ligeramente superior al del modelo con interacciones, sigue siendo menor al umbral aceptable de 0.05, indicando un ajuste deficiente. El estadístico F presentó un valor de 64.31 que es más alto que el del modelo con interacciones, lo que sugiere una mayor relación explicativa de los factores individuales, pero su aplicación sigue siendo limitada. El valor-p 4.039×10^{-6} refuerza la significancia estadística del modelo, aunque con menor confiabilidad para describir el sistema en detalle.

El modelo cúbico de tercer orden es claramente superior, con un R-cuadrado de 0.9978, lo que refleja que el 99.78% de la variabilidad total de los datos es explicada por este modelo, asegurando un ajuste casi perfecto. Su lack of fit 0.2179 supera ampliamente el nivel de significancia de 0.05, indicando que las diferencias entre los valores observados y predichos no son estadísticamente significativas, lo que lo hace adecuado para modelar el sistema. El estadístico F (449.70) es

significativamente más alto que en los modelos de segundo orden, resaltando su capacidad para describir tanto los efectos principales como las interacciones complejas. Finalmente, el valor-p (1.089×10^{-7}) evidencia una significancia estadística excepcional, reforzando la idoneidad del modelo cúbico para el diseño del experimento.

Por lo tanto, el modelo cúbico de tercer orden es seleccionado como el ideal debido a su alto R-cuadrado (0.9978), lack of fit (0.2179) aceptable, mayor estadístico F (449.70) y un valor-p (1.089×10^{-7}) que valida su significancia estadística. Estos factores garantizan su capacidad para describir con precisión las relaciones no lineales y las interacciones entre las variables independientes, proporcionando una herramienta robusta para predecir el proceso de conversión del nylon 6,6 en la etapa de esterificación.

3.2 Optimización de la etapa de esterificación

A partir de los resultados obtenidos de la sección 3.1.1, el modelo cúbico fue empleado como base para analizar el análisis de optimización, utilizando la librería Rsm de RStudio para determinar los puntos estacionarios a partir de la ecuación de optimización.

La ecuación 3.1 describe la relación entre la conversión del nylon 6,6 y las variables independientes, $x_1 = \text{temperatura}$, $x_2 = \text{tiempo}$, expresada de la siguiente forma:

$$y = 0.0153x_1^3 + 0.0429x_2^3 - 0.0318x_1^2 - 0.0389x_2^2 + 0.0524x_1 + 0.0374x_2 + 0.5727 \quad (3.1)$$

Los puntos estacionarios se calcularon como el conjunto de condiciones que maximizan la respuesta del sistema, obteniéndose una temperatura óptima de 129.62 °C y un tiempo de reacción de 3.42 horas. Estas condiciones, dentro del rango experimental, predicen una conversión teórica máxima de 61.45%. Este resultado refleja la interacción significativa entre las variables evaluadas, donde tanto la temperatura como el tiempo contribuyen de manera conjunta a la mejora del rendimiento del proceso de esterificación.

Tabla 14.

Condiciones ideales que maximizan la conversión.

Parámetro	Valor
Temperatura	129.62 °C
Tiempo	3.42 horas
Conversión teórica	61.45 %

El análisis de los puntos estacionarios permite no solo identificar condiciones óptimas, sino también establecer parámetros operativos prácticos para maximizar la eficiencia del sistema. Es importante destacar que, aunque el modelo describe estas condiciones como ideales, cualquier desviación podría reducir la conversión esperada, lo que resalta la importancia de operar cerca de los valores óptimos calculados.

Para determinar la naturaleza del punto estacionario identificado, se analizó la matriz Hessiana correspondiente, cuyos valores son los siguientes:

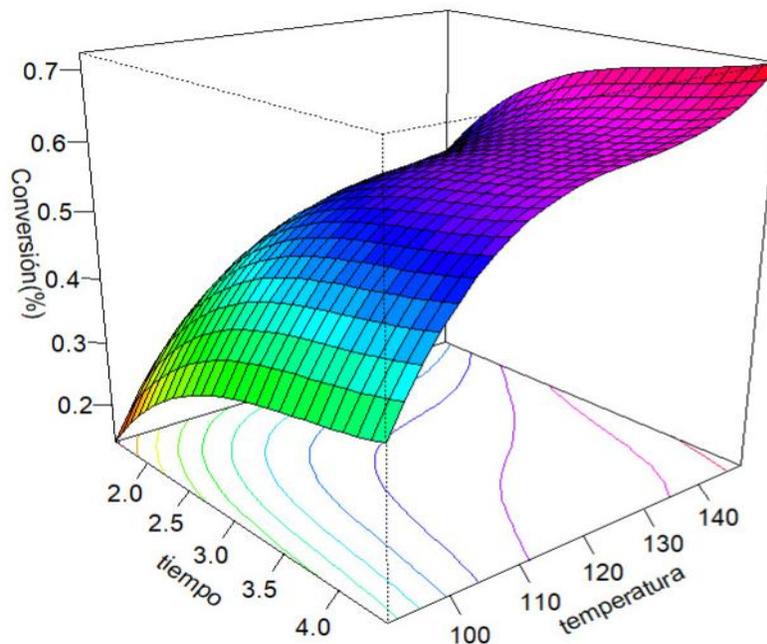
$$\begin{bmatrix} -0.0318 & 0 \\ 0 & -0.0389 \end{bmatrix}$$

La matriz Hessiana se utiliza para clasificar los puntos estacionarios en máximos locales, mínimos locales o puntos de silla. En este caso, ambos valores diagonales son negativos, lo que indica que la matriz es definida negativa. Según (Tanaka, 2007), una matriz definida negativa implica que el punto estacionario corresponde a un máximo local. Esto confirma que las condiciones de 129.62 °C y 3.42 horas representan los valores óptimos dentro del rango experimental para maximizar la conversión. La validación matemática a través de la matriz Hessiana refuerza la robustez del modelo cúbico para predecir el comportamiento del sistema y destaca su utilidad en la identificación de condiciones óptimas.

La ilustración 8 proporciona una representación visual del comportamiento de la conversión en función de las variables independientes. En este gráfico, se observa cómo la conversión aumenta progresivamente con el incremento de la temperatura y el tiempo, alcanzando un máximo cercano a los puntos estacionarios calculados. Este comportamiento respalda la interacción significativa entre las variables evaluadas y refuerza la hipótesis de que ambas contribuyen de manera conjunta al rendimiento del sistema. Además, el gráfico permite identificar tendencias importantes, como la reducción de la conversión fuera del rango óptimo. A temperaturas más bajas o tiempos excesivos, se observan disminuciones en el porcentaje de conversión, lo que puede estar relacionado con limitaciones cinéticas o efectos secundarios no deseados, como la degradación de reactivos. Esta representación tridimensional no solo valida los resultados obtenidos, sino que también proporciona información valiosa para el diseño y la operación del proceso.

Ilustración 8.

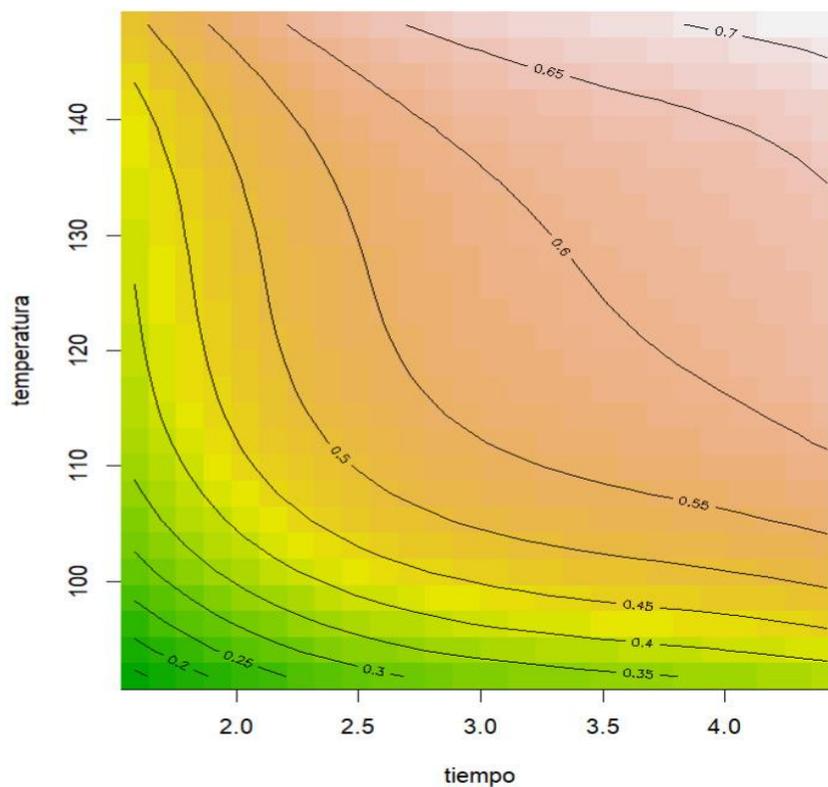
Superficie de respuesta para la conversión del nylon 6,6 en función de la temperatura y el tiempo.



El gráfico de contorno representado en la Ilustración 9 complementa el análisis tridimensional al mostrar curvas de nivel que representan regiones de conversión constante en el espacio definido por las variables independientes permitiendo identificar combinaciones alternativas de temperatura y tiempo que podrían ofrecer conversiones cercanas al máximo. Por ejemplo, temperaturas ligeramente inferiores combinadas con tiempos ajustados pueden proporcionar rendimientos similares. Las curvas más cerradas alrededor de los puntos estacionarios indican una región de máximo local, confirmando que las condiciones óptimas calculadas son robustas y bien definidas.

Ilustración 9.

Gráfico de contornos.



3.3 Caracterización del adipato de dimetilo

3.3.1 Caracterización por FTIR

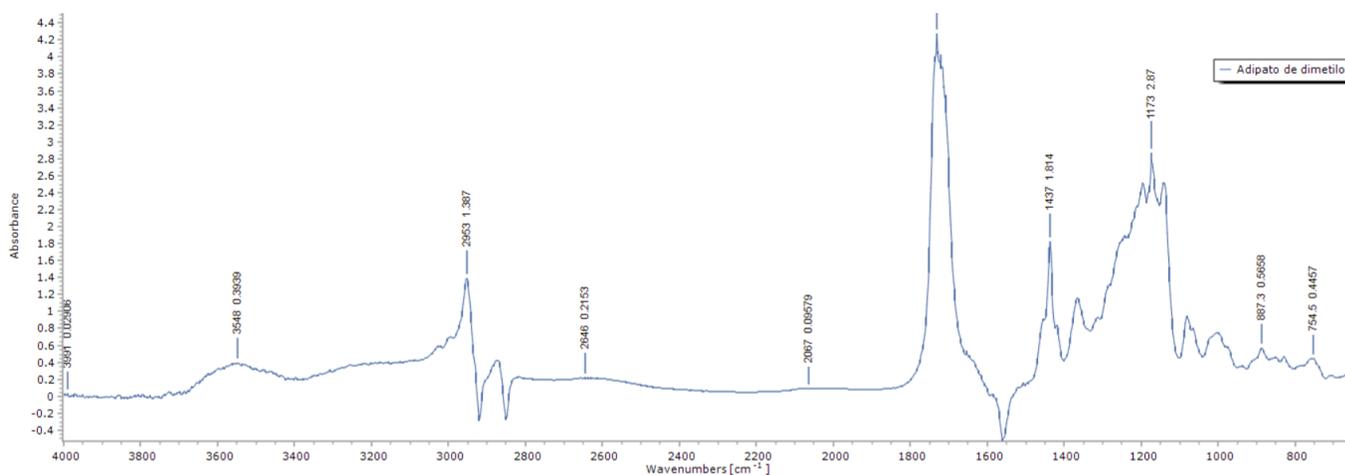
En la Ilustración 10. Espectro FTIR del adipato de dimetilo se observan los picos característicos de un éster. La banda atribuida al estiramiento del grupo carbonilo (C=O) se encuentra en 1732.27 cm^{-1} , lo que confirma la presencia del enlace éster, consistente con los valores reportados en la literatura para compuestos similares (Liu & Chen, 2014). Además, las bandas correspondientes al estiramiento del enlace C–O aparecen en 1172.27 y 1087.0 cm^{-1} , lo que respalda aún más la identificación de este compuesto como un éster.

En la región de 2953.1 cm^{-1} , se observan señales correspondientes al estiramiento de los enlaces C–H en los grupos metilo (CH_3) y metileno (CH_2), lo cual es característico de cadenas alifáticas presentes en el adipato de dimetilo. Por otro lado, no se observan señales significativas en la región de $3300\text{-}3500\text{ cm}^{-1}$, lo que indica la ausencia de grupos hidroxilo (–OH) libres, sugiriendo una pureza adecuada del éster sintetizado.

El análisis del espectro FTIR confirma la presencia de los grupos funcionales clave del adipato de dimetilo, validando la estructura química esperada del producto. Estos resultados son consistentes con las características espectrales reportadas para ésteres alifáticos en estudios previos (Nakamoto, 2009), reforzando la confiabilidad del proceso de síntesis llevado a cabo.

Ilustración 10.

Espectro FTIR del adipato de dimetilo.



3.3.2 Punto de ebullición, Índice de refracción

En esta sección se describen las propiedades físicas fundamentales del adipato de dimetilo, las cuales son esenciales para confirmar su identidad y pureza, así como para evaluar su comportamiento en aplicaciones químicas específicas. Estas propiedades incluyen el punto de ebullición, y el índice de refracción, los resultados obtenidos se presentan de manera detallada en la Tabla 15, parámetros que fueron determinados experimentalmente y validados con valores reportados en la literatura.

Tabla 15.

Propiedades físicas del adipato de dimetilo: punto de ebullición e índice de refracción.

Propiedades	Unidad	Valor teórico	Valor	Porcentaje de
			experimental	error (%)
Punto de ebullición	°C	215-225	217	1.36

Índice de refracción	-	1.4283	1.4285	0.0140
----------------------	---	--------	--------	--------

Los resultados experimentales reportados en la Tabla 14 muestran una buena correlación con los valores teóricos reportados en la literatura (Thermo Fisher Scientific, 2023), lo que respalda la calidad del compuesto sintetizado y la precisión de los procedimientos experimentales utilizados. En el caso del punto de ebullición, el valor experimental obtenido fue de 217 °C, mientras que el valor teórico se encuentra en un rango de 215–225 °C, con un valor medio de 218 °C. El porcentaje de error calculado fue de 1.36%, lo que indica que las condiciones experimentales fueron controladas de manera adecuada, permitiendo obtener un valor consistente con las referencias bibliográficas. Este resultado valida la identidad del adipato de dimetilo y su comportamiento térmico en procesos de alta temperatura.

El índice de refracción experimental fue determinado como 1.4285, mientras que el valor teórico reportado es de 1.4283. El porcentaje de error fue de 0.0140 %, siendo el más bajo entre las propiedades evaluadas. Este resultado refleja una alta precisión en las mediciones experimentales y confirma que el compuesto sintetizado cumple con las características ópticas reportadas en la literatura (Liu & Chen, 2014). Este parámetro es particularmente útil para confirmar la pureza del adipato de dimetilo y su consistencia estructural, ya que, el índice de refracción es muy sensible a la presencia de impurezas.

En conjunto, los resultados obtenidos para el punto de ebullición, y el índice de refracción confirman la identidad y pureza del adipato de dimetilo sintetizado. Los bajos porcentajes de error observados, todos inferiores al 7% (Pan & Breuer, 2008) , demuestran la eficacia de los procedimientos experimentales y las condiciones controladas durante las mediciones. Estos resultados respaldan la validez del compuesto como producto final, para aplicaciones químicas e

industriales específicas, además de proporcionar una base sólida para futuras caracterizaciones y estudios del material.

3.4 Receta de laboratorio

Durante el desarrollo experimental, se plantearon dos enfoques estratégicos para las recetas en Aspen Batch Process Developer: una receta con recirculación y otra sin recirculación. Estos dos casos fueron diseñados con el propósito de evaluar y comparar la viabilidad para mejorar la eficiencia del proceso y establecer el modelo más adecuado para el escalado.

3.4.1 Caso con recicló

La receta con recirculación, visualizada en la Ilustración 11; se planteó como una alternativa ideal para mejorar la eficiencia del proceso mediante la reutilización de corrientes internas. Este enfoque buscó minimizar las pérdidas de reactivos, reducir la generación de residuos y replicar un modelo sostenible. Este diseño conceptual, representado en el diagrama de bloques del proceso en la Ilustración 2, véase sección 2.2 de este proyecto; fue conceptualizado para minimizar costos y optimizar recursos en la obtención de adipato de dimetilo, replicando un enfoque sostenible y económico característico de procesos industriales modernos.

No obstante, durante la simulación en ABPD, se identificaron limitaciones técnicas significativas que comprometieron la implementación efectiva de este modelo. El simulador presentó dificultades para modelar de manera precisa las interacciones entre las corrientes recicladas y los balances de masa. Esto reflejó que el algoritmo no lograra determinar un escenario factible para el escalado, principalmente debido a su complejidad asociada con los recicló. Como resultado, el sistema no pudo converger hacia una solución operativa viable dentro del rango de parámetros establecidos. Aunque este diseño no permitió proyectarse hacia escalas mayores, fue útil para identificar puntos críticos dentro del proceso como la necesidad de ajustes en equipos y variables

clave, incluyendo el flujo reciclado y la acumulación de productos intermedios. A pesar de ser la idea central del proyecto, la receta con recirculación no pudo ser utilizada como base para la validación del proceso debido a las limitaciones técnicas del simulador.

Ilustración 11.

Receta de laboratorio con recirculación.

Recipe: Laboratorio (Reciclo)		Recipe: Laboratorio (Sin reciclo)	
1. Disolución	1.1. Charge Erlenmeyer 100 ml with 53 ml of WATER.		
	1.2. Charge Erlenmeyer 100 ml with 27 ml of HCl 37 %. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.		
	1.3. React in unit Erlenmeyer 100 ml via disolución. Reaction occurs over 3 min. The final temperature of the batch is 25 C. The final pressure in the unit is 1 atm. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.		
	1.4. Transfer contents of unit Erlenmeyer 100 ml to contenedor de teflón (125 ml). Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.		
2. Despolimerización	2.1. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 2 g of nylon residual. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 0.7 g of ZeoliteM.		
	2.2. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via Depolimerización. Reaction occurs over 6 h. The final temperature of the batch is 160 C. The final pressure in the unit is 3 atm.		
	2.3. Cool unit contenedor de teflón (125 ml) to 25 C. The cooling time is 1 h.		
3. Esterificación	3.1. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 20 ml of METHANOL. Recycle part of the material from ST METHANOL. Recycle 16 ml of METHANOL. Recycle all or nothing. Satisfy total amount with the feed.		
	3.2. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via Esterificación. Reaction occurs over 3 h. The final temperature of the batch is 140 C. The final pressure in the unit is 3 atm.		
	3.3. Cool unit contenedor de teflón (125 ml) to 25 C. The cooling time is 1 h.		
	3.4. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via disolución 2. Reaction occurs over 5 min. The final temperature of the batch is 25 C. The final pressure in the unit is 1 atm.		
4. Filtración	4.1. Filter the batch from unit contenedor de teflón (125 ml) in filter Filter Flask. 125 ml. The transfer time of the slurry is 30 min. Transfer 100% of the batch to the filter. The mother liquor is sent to ST LICOR MADRE. The filter separates 100% of all solids.		
	4.2. Wash the cake in unit Filter Flask. 125 ml. For each wash, use 10 ml of WATER. Spent Wash Stream. The stream is sent to LAVADO.		
	4.3. Transfer contents of unit Filter Flask. 125 ml to ST ZEOLITA. The transfer time is 5 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste.		
5. Evaporación metanol	5.1. Transfer contents of unit ST LICOR MADRE to Column. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.		
	5.2. Distill the batch in unit Column. The overhead, named METHANOL, is sent to ST METHANOL. The bottoms pressure is 26.66 kPa. The bottoms temperature is 40 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 20 C. The condenser pressure is 26.66 kPa. Conveyor C is used. Separation is: 98% of METHANOL goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.		
	5.3. Transfer contents of unit Column to Separating funnel. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.		
6. Extracción L-L	6.1. Charge Separating funnel with 249.21 ml of WATER. Charge Separating funnel with 166.14 ml of DIETHYL-ETHER. Recycle part of the material from DESTILLATE DIETHYL ETHER. Recycle 149.5 ml of DIETHYL-ETHER. Recycle all or nothing. Satisfy total amount with the feed.		
	6.2. Decant in unit Separating funnel over 90 min. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Top and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Top. Unspecified materials go to Bottom. Upper Layer Transfer Stream: The stream is sent to ST ADIPATO DIMETILO Y DIETIL ETHER. Transfer using Conveyor C. The transfer time is 20 min.		
	6.3. Transfer contents of unit Separating funnel to ST PARTE INORGANICA EXTRACCION. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Inorganic Waste. Transfer using Conveyor C.		
	6.4. Transfer contents of unit ST ADIPATO DIMETILO Y DIETIL ETHER to Evaporator 1. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste. Transfer using Conveyor C.		
7. Destilación Dietil Eter	7.1. Distill the batch in unit Evaporator 1. The operation time is 1 h. The overhead, named DIETHYL ETHER, is sent to DESTILLATE DIETHYL ETHER. The bottoms pressure is 1 atm. The bottoms temperature is 50 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 C. The condenser pressure is 1 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Bottoms and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.		
	7.2. Transfer contents of unit Evaporator 1 to TK-101 DISTILLATE ETHER. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.		
8. Evaporación HCl	8.1. Transfer contents of unit ST PARTE INORGANICA EXTRACCION to R3. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.		
	8.2. Distill the batch in unit R3. The overhead, named HCl, is sent to ST HCl. The bottoms pressure is 6 atm. The bottoms temperature is 60 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 C. The condenser pressure is 6 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of WATER goes to Overhead and 98% of HYDROGEN-CHLORIDE goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.		
	8.3. Transfer contents of unit R3 to TK-HCl. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min.		

3.4.2 Caso sin reciclo

Tras los desafíos presentados en la implementación de la receta con recirculación que limitó la capacidad del simulador ABPD, se optó por desarrollar una receta sin recirculación para simplificar el proceso y así, validar el modelo. Es importante aclarar que un batch o lote hace referencia a una cantidad específica de material procesada en un ciclo completo de producción. Este enfoque asegura uniformidad en el proceso facilitando su control y trazabilidad durante el escalado.

La receta desarrollada se diseñó bajo este principio, lo que permitió validar el proceso en condiciones específicas, asegurando la consistencia del producto final. La validación se realizó con base en la receta sin recirculación, ingresando las condiciones obtenidas del diseño de experimentos quedando finalmente el proceso de laboratorio como se muestra en la Ilustración 12. Finalmente, la receta ingresada en el simulador para esta etapa puede ser visualizada en la Ilustración 13.

Ilustración 12.

Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo sin recirculación.

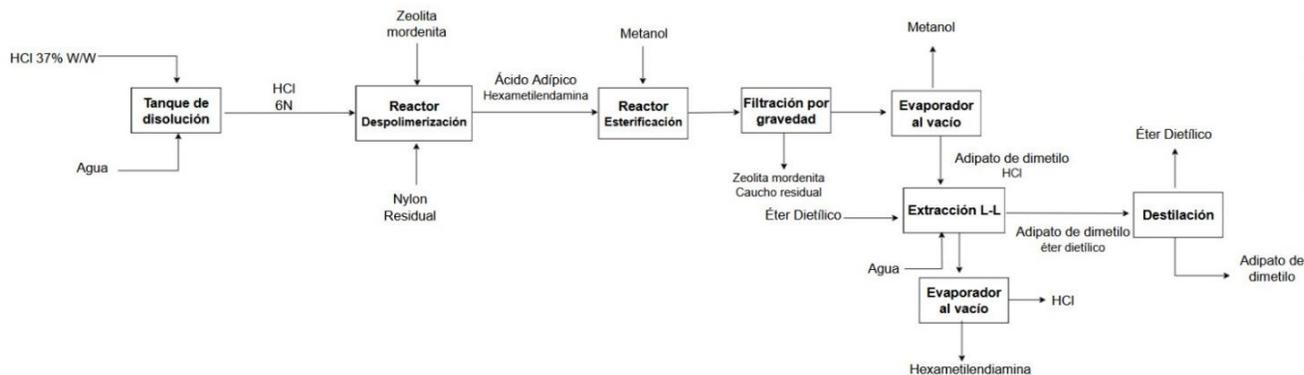


Ilustración 13.

Receta de laboratorio sin recirculación.

Recipe: Laboratorio (Reciclo)	Recipe: Laboratorio (Sin reciclo)
1. Disolución	
1.1. Charge Erlenmeyer 100 ml with 53 ml of WATER.	
1.2. Charge Erlenmeyer 100 ml with 27 ml of HCl 37 %. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.	
1.3. React in unit Erlenmeyer 100 ml via disolución. Reaction occurs over 3 min. The final temperature of the batch is 25 C. The final pressure in the unit is 1 atm. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.	
1.4. Transfer contents of unit Erlenmeyer 100 ml to contenedor de teflón (125 ml). Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.	
2. Despolimerización	
2.1. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 2 g of nylon residual. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 0.7 g of ZeoliteM.	
2.2. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via Despolimerización. Reaction occurs over 6 h. The final temperature of the batch is 160 C. The final pressure in the unit is 3 atm.	
2.3. Cool unit contenedor de teflón (125 ml) to 25 C. The cooling time is 1 h.	
3. Esterificación	
3.1. Charge contenedor de teflón (125 ml) with 20 ml of METHANOL.	
3.2. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via Esterificación. Reaction occurs over 3 h. The final temperature of the batch is 140 C. The final pressure in the unit is 3 atm.	
3.3. Cool unit contenedor de teflón (125 ml) to 25 C. The cooling time is 1 h.	
3.4. React in unit contenedor de teflón (125 ml) via disolución 2. Reaction occurs over 5 min. The final temperature of the batch is 25 C. The final pressure in the unit is 1 atm.	
4. Filtración	
4.1. Filter the batch from unit contenedor de teflón (125 ml) in filter Filter Flask. 125 ml. The transfer time of the slurry is 30 min. Transfer 100% of the batch to the filter. The mother liquor is sent to ST LICOR MADRE. The filter separates 100% of all solids.	
4.2. Wash the cake in unit Filter Flask. 125 ml. For each wash, use 10 ml of WATER. Spent Wash Stream. The stream is sent to ST LAVADO.	
4.3. Transfer contents of unit Filter Flask. 125 ml to ST 2EOLITA. The transfer time is 5 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste.	
5. Evaporación metanol	
5.1. Transfer contents of unit ST LICOR MADRE to Column. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.	
5.2. Distill the batch in unit Column. The overhead, named METHANOL, is sent to ST METHANOL. The bottoms pressure is 26.66 kPa. The bottoms temperature is 40 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 20 C. The condenser pressure is 26.66 kPa. Conveyor C is used. Separation is: 98% of METHANOL goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.	
5.3. Transfer contents of unit Column to Separating funnel. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.	
6. Extracción L-L	
6.1. Charge Separating funnel with 166.14 ml of DIETHYL-ETHER. Charge Separating funnel with 249.21 ml of WATER.	
6.2. Decant in unit Separating funnel over 30 min. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Top and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Top. Unspecified materials go to Bottom. Upper Layer Transfer Stream: The stream is sent to ST ADIPATO DIMETILO Y DIETIL-ETHER. Transfer using Conveyor C. The transfer time is 30 min.	
6.3. Transfer contents of unit Separating funnel to ST PARTE INORGANICA EXTRACCION. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Inorganic Waste. Transfer using Conveyor C.	
6.4. Transfer contents of unit ST ADIPATO DIMETILO Y DIETIL-ETHER to Evaporator 1. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste. Transfer using Conveyor C.	
7. Destilación Dietil Eter	
7.1. Distill the batch in unit Evaporator 1. The operation time is 1 h. The overhead, named DIETHYL-ETHER, is sent to DESTILLATE DIETHYL-ETHER. The bottoms pressure is 1 atm. The bottoms temperature is 50 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 C. The condenser pressure is 1 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Bottoms and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.	
7.2. Transfer contents of unit Evaporator 1 to TK 101 DISTILLATE ETHER. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.	
8. Evaporación HCl	
8.1. Transfer contents of unit ST PARTE INORGANICA EXTRACCION to R3. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.	
8.2. Distill the batch in unit R3. The overhead, named HCl, is sent to ST HCl. The bottoms pressure is 6 atm. The bottoms temperature is 60 C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 C. The condenser pressure is 6 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of WATER goes to Overhead and 98% of HYDROGEN-CHLORIDE goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.	
8.3. Transfer contents of unit R3 to TK HCl. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min.	

1. Disolución

1.1 Charge T-101 with 53 ml of WATER.

1.2 Charge T-101 with 27 ml of HCl 37%. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.

1.3 React in unit T-101 via disolución. Reaction occurs over 3 min. The final temperature of the batch is 25 °C. The final pressure in the unit is 1 atm. Dissolve the following components: 100% of HYDROGEN-CHLORIDE.

1.4 Transfer contents of unit T-101 to R-101. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.

2. Despolimerización

2.1 Charge R-101 with 2 g of nylon residual. Charge R-101 with 0.7 g of ZeoliteM.

2.2 React in unit R-101 via Despolimerización. Reaction occurs over 6 h. The final

temperature of the batch is 160 °C. The final pressure in the unit is 3 atm.

2.3 Cool unit R-101 to 25 °C. The cooling time is 1 h.

3. Esterificación

3.1 Charge R-101 with 20 ml of METHANOL.

3.2 React in unit R-101 via Esterificación. Reaction occurs over 3 h. The final temperature of the batch is 140 °C. The final pressure in the unit is 3 atm.

3.3 Cool unit R-101 to 25 °C. The cooling time is 1 h.

3.4 React in unit R-101 via disolución 2. Reaction occurs over 5 min. The final temperature of the batch is 25 °C. The final pressure in the unit is 1 atm.

4. Filtración

4.1 Filter the batch from unit R-101 in filter F-101. The transfer time of the slurry is 30 min. Transfer 100% of the batch to the filter. The mother liquor is sent to T-102. The filter separates 100% of all solids.

4.2 Wash the cake in unit F-101. For each wash, use 10 ml of WATER. Spent Wash Stream: The stream is sent to T-103.

4.3 Transfer contents of unit F-101 to T-104. The transfer time is 5 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste.

5. Evaporación Metanol

5.1 Transfer contents of unit T-102 to C-101. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.

5.2 Distill the batch in unit C-101. The overhead, named METHANOL, is sent to T-105. The bottoms pressure is 26.66 kPa. The bottoms temperature is 40 °C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 20 °C. The condenser pressure is 26.66 kPa. Conveyor C is used. Separation is: 98% of METHANOL goes to Overhead.

Unspecified materials go to Bottoms.

5.3 Transfer contents of unit C-101 to E-101. The transfer time is 5 min.

6. Extracción L-L

6.1 Charge E-101 with 166.14 ml of DIETHYL-ETHER. Charge E-101 with 249.21 ml of WATER.

6.2 Decant in unit E-101 over 90 min. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Top and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Top. Unspecified materials go to Bottom. Upper Layer Transfer Stream: The stream is sent to T-106. Transfer using Conveyor C. The transfer time is 20 min.

6.3 Transfer contents of unit E-101 to T-107. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Inorganic Waste. Transfer using Conveyor C.

6.4 Transfer contents of unit T-106 to C-102. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min. The transfer stream belongs to category: Organic Waste. Transfer using Conveyor C.

7. Destilación Dietil Éter

7.1 Distill the batch in unit C-102. The operation time is 1 h. The overhead, named DIETHYL-ETHER, is sent to T-108. The bottoms pressure is 1 atm. The bottoms temperature is 50 °C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 °C. The condenser pressure is 1 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of DIMETHYL-ADIPATE goes to Bottoms and 98% of DIETHYL-ETHER goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.

7.2 Transfer contents of unit C-102 to T-109. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.

8. Evaporación HCl

8.1 Transfer contents of unit T-107 to C-103. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 5 min.

8.2 Distill the batch in unit C-103. The overhead, named HCl, is sent to T-110. The bottoms pressure is 6 atm. The bottoms temperature is 60 °C. The process condenser is Condenser. The outlet temperature of the condenser is 40 °C. The condenser pressure is 6 atm. Conveyor C is used. Separation is: 98% of WATER goes to Overhead and 98% of HYDROGEN-CHLORIDE goes to Overhead. Unspecified materials go to Bottoms.

8.3 Transfer contents of unit C-103 to T-111. Transfer 100% of vessel contents. The transfer time is 10 min.

La evaluación de los equipos utilizados en la escala de laboratorio permitió identificar las capacidades máximas y el nivel de utilización de cada unidad durante el proceso para la obtención de adipato de dimetilo. Las etapas y los equipos presentes para esta etapa se detallan en la Tabla 16; sabiendo que las unidades involucradas siguen la nomenclatura propuesta por (Turton et al., 2018). En el caso de los tanques T-101, el T-102 y T-103, son utilizados principalmente para el almacenamiento temporal y mezcla de corrientes en diferentes etapas del proceso mientras que el T-105, actúa como receptor en operaciones específicas asegurando la continuidad en el flujo de las corrientes.

El balance de masa presentado en la Tabla 17 para la receta sin recirculación muestra una discrepancia del 0.0028%, significativamente menor al límite aceptable del 5% (Turton et al., 2018). Esto valida la precisión del modelo propuesto y sus capacidades para replicar el comportamiento real del sistema en condiciones de laboratorio. La salida incluye productos clave como el adipato de

dimetilo (0.57 g por lote) y ácido adípico (15.58 g por lote), con una recuperación eficiente de solventes como el dietil éter y el metanol.

Por otro lado, como se observa en la Tabla 18 y en la Ilustración 14, el R-101 que es el reactor usado en el laboratorio, destaca con un 100% de ocupación y un 98.40% de su capacidad máxima utilizada, desempeñando un rol esencial en las etapas críticas del proceso como la despolimerización y la esterificación. Los equipos como el T-104, que se utiliza principalmente para almacenamiento y recuperación en etapas específicas, presentó un valor mínimo de utilización con un 0.68% de ocupación. El extractor E-101 tuvo una utilización del 50.37% de su capacidad máxima, desempeñando un papel clave en la extracción líquido-líquido, donde se logra la separación de fases esenciales. Por otro lado, las columnas C-101 y C-102 presentan porcentajes de ocupación del 66.57% y 65.67%, respectivamente, reflejando su importancia en la destilación de subproductos y la recuperación de componentes clave. Asimismo, el tiempo de ocupación mostrado en la Ilustración 15 destaca el uso intensivo del R-101, seguido del extractor E-101 que opera en la extracción líquido-líquido por 140 minutos. Por otro lado, los equipos como el T-104 y T-11 debido a su uso puntual en etapas finales, solo registraron tiempos de ocupación de 10 minutos (1.37%) y 5 minutos (0.68%), respectivamente.

Tabla 16.

Descripción de etapas del proceso.

Etapas del proceso	Equipos involucrados	Función
Dilución	T-101, T-102, T-103, T-104, T-105	Almacenamiento y mezcla inicial
Despolimerización	R-101	Conversión del nylon a adipato de dimetilo
Esterificación	R-101	Reacción para formar el producto final
Filtración	F-101	Separación de sólidos
Evaporación del metanol	T-103, T-104	Recuperación del metanol

Extracción Líquido-Líquido	E-101	Separación de fases
Evaporación del ácido clorhídrico	T-104, T-111	Recuperación de HCl
Transferencia de reactivos	C-101, C-102, C-103	Transporte y bombeo de corrientes
Separación de subproductos	T-109, T-110	Aislamiento de productos y control de calidad

Tabla 17.

Balance de masa de la receta escala laboratorio sin recirculación.

Receta de laboratorio sin recirculación		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	0.7	0.7
Metanol	15.79	15.58
Ácido Clorhídrico	11.89	11.89
Dietil Eter	119.53	119.53
Nylon 6,6	1.2	-
Estireno-Butadieno-Caucho	0.8	0.8
Agua	330.52	330.45
Ácido Adípico	-	15.58
Adipato de Dimetilo	-	0.57
Hexametilendiamina	-	0.62
Nitrógeno	8.74	8.74
Oxígeno	2.65	2.65
Total	491.82	491.82
Discrepancia		0.0028%

Tabla 18.

Capacidad de los equipos escala laboratorio.

Unidad	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	100.00	100.00	85.33	mL	85.33	38.00	5.21
R-101	Reactor	125.00	125.00	123.00	mL	98.40	730.00	100.00

F-101	Filtro	50.00	50.00	1.77	mL	3.55	35.00	4.79
T-102	Tanque	250.00	250.00	105.49	mL	42.20	40.00	5.48
T-103	Tanque	250.00	250.00	10.29	mL	4.12	0.00	0.00
T-104	Tanque	250.00	250.00	1.48	mL	0.59	5.00	0.68
C-101	Columna	250.00	250.00	105.49	mL	42.20	130.00	17.81
T-105	Tanque	500.00	500.00	19.11	mL	3.82	120.00	16.44
E-101	Extractor	1,000.00	1,000.00	503.66	mL	50.37	140.00	19.18
T-106	Tanque	250.00	250.00	164.19	mL	65.68	40.00	5.48
T-107	Tanque	400.00	400.00	339.47	mL	84.87	90.00	12.33
C-102	Columna	250.00	250.00	164.19	mL	65.67	75.00	10.27
T-108	Tanque	250.00	250.00	163.80	mL	65.52	60.00	8.22
T-109	Tanque	500.00	500.00	3.83	mL	0.77	5.00	0.68
T-110	Tanque	500.00	500.00	339.46	mL	67.89	135.00	18.49
C-103	Columna	500.00	500.00	332.12	mL	66.42	120.00	16.44
T-111	Tanque	500.00	500.00	11.60	mL	2.32	10.00	1.37

Ilustración 14.

Capacidad usada por los equipos a nivel laboratorio.

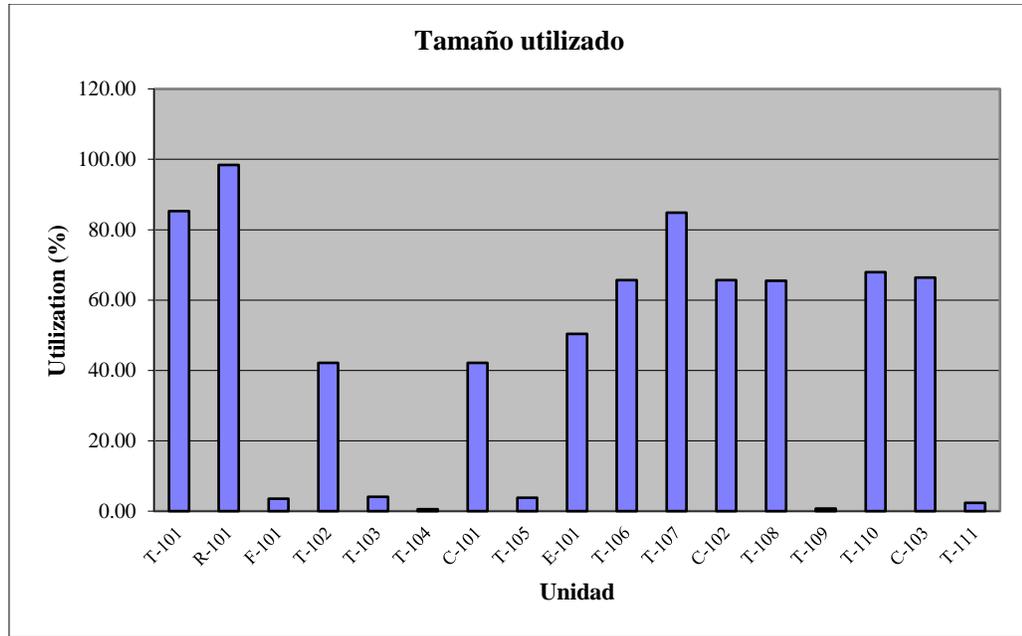
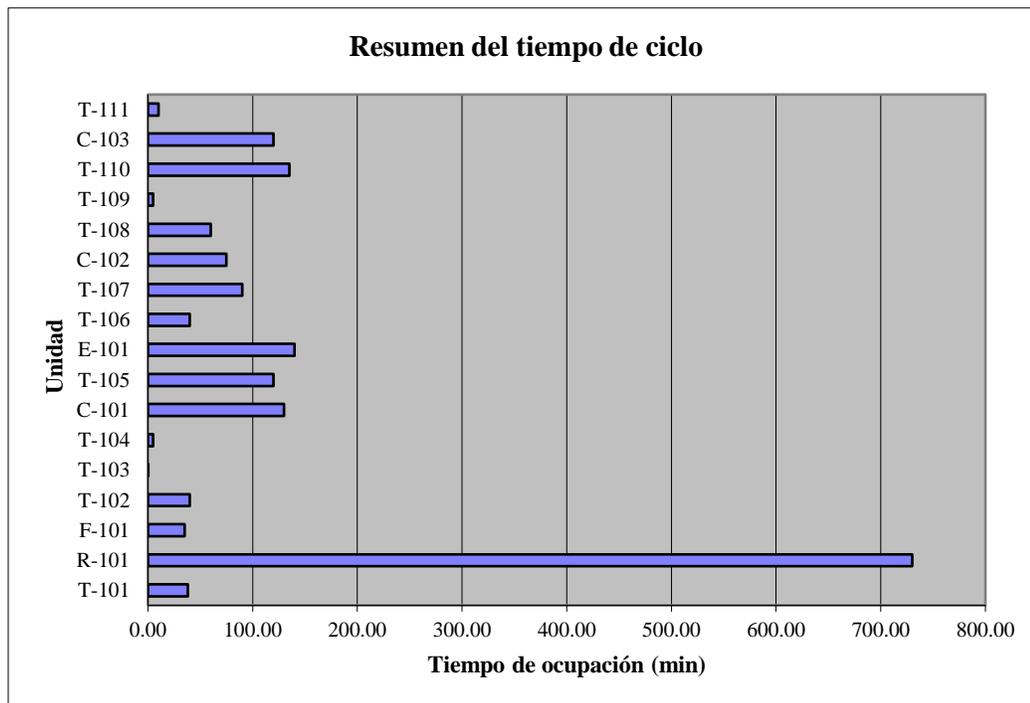


Ilustración 15.

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso nivel laboratorio.



3.5 Escalamiento

3.5.1 *Escala piloto 1.6 kg*

El escalado a la escala piloto de 1.6 kg implicó un incremento significativo en la capacidad de producción, requiriendo ajustes en las unidades de proceso del simulador para adaptarlas a los nuevos requisitos de la receta. Estos cambios garantizaron un flujo constante de material en todas las etapas del proceso, evitando cuellos de botella y manteniendo la eficiencia global. Asimismo, se empleó la nomenclatura estándar de equipos como recomienda **(Turton et al., 2018)**, para facilitar la interpretación y replicabilidad del diseño.

La Tabla 19 muestra el balance de masa de las corrientes de entrada y salida en la escala piloto, evidenciando una discrepancia de tan solo el 0.025% lo que respalda la consistencia y precisión del modelo. Por otro lado, en la Tabla 20 y en las Ilustraciones 16 y 17 destacan la capacidad y ocupación de los equipos utilizados. El R-101 desempeñó un rol crítico al alcanzar un 100% de ocupación y un 55.82% de su capacidad máxima utilizada. Otros equipos, como el extractor E-101 tuvo una alta demanda debido a su participación clave en la extracción líquido-líquido, alcanzando un 72.56% de tiempo de ocupación y un 45.71% de su capacidad máxima utilizada. Las columnas C-101 y C-102, con ocupaciones del 49.67% y 48.61% respectivamente, reflejan su importancia en la destilación y recuperación de componentes clave. En contraste, unidades como el T-104 y el T-109 reflejaron un bajo porcentaje de ocupación, con valores de 0.68% y 0.03% respectivamente, debido a su uso limitado en etapas de purificación.

Tabla 19.

Balance de masa por equipos escala piloto para una producción de 1.6 kg.

Piloto - 1.6 kg		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	635.33	635.33
Metanol	14333.20	14333.20
Ácido Clorhídrico	10789.79	10789.79
Dietil Eter	108487.21	108487.21
Nylon 6,6	1089.14	-
Estireno-Butadieno-Caucho	726.09	726.09
Agua	299984.83	299984.83
Ácido Adípico	-	271.12
Adipato de Dimetilo	-	515.12
Hexametilendiamina	-	559.24
Nitrógeno	62874.70	62874.70
Oxígeno	19094.38	19094.38
Total	518014.67	518014.65
Discrepancia		0.025%

Tabla 20.

Capacidad de los equipos escala piloto de 1.6 kg.

Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	5,000.00	5,000.00	77.45	L	1.55	38.00	5.21
R-101	Reactor	200.00	200.00	111.63	L	55.82	730.00	100.00
F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	1.61	L	0.16	35.24	4.83
T-102	Tanque	2,000.00	2,000.00	95.74	L	4.79	40.24	5.51
T-103	Tanque	10,000.00	10,000.00	9.34	L	0.09	0.24	0.03
T-104	Tanque	16,000.00	16,000.00	1.34	L	0.01	5.00	0.68
C-101	Columna	630,000.00	630,000.00	95.74	L	0.02	130.00	17.81
T-105	Tanque	7,500.00	7,500.00	17.36	L	0.23	120.00	16.44
E-101	Extractor	630.00	630.00	457.13	L	72.56	140.00	19.18
T-106	Tanque	250.00	250.00	149.02	L	59.61	40.00	5.48
T-107	Tanque	800.00	800.00	308.10	L	38.51	90.00	12.33
C-102	Columna	300.00	300.00	149.02	L	49.67	75.00	10.27
T-108	Tanque	1,000.00	1,000.00	148.63	L	14.86	60.00	8.22
T-109	Tanque	10,000.00	10,000.00	3.38	L	0.03	5.00	0.68
T-110	Tanque	770.00	770.00	308.10	L	40.01	135.00	18.49
C-103	Columna	1,000.00	1,000.00	301.43	L	30.14	120.00	16.44
T-111	Tanque	7,500.00	7,500.00	10.43	L	0.14	10.00	1.37

Ilustración 16.

Capacidad usada por los equipos a nivel piloto.

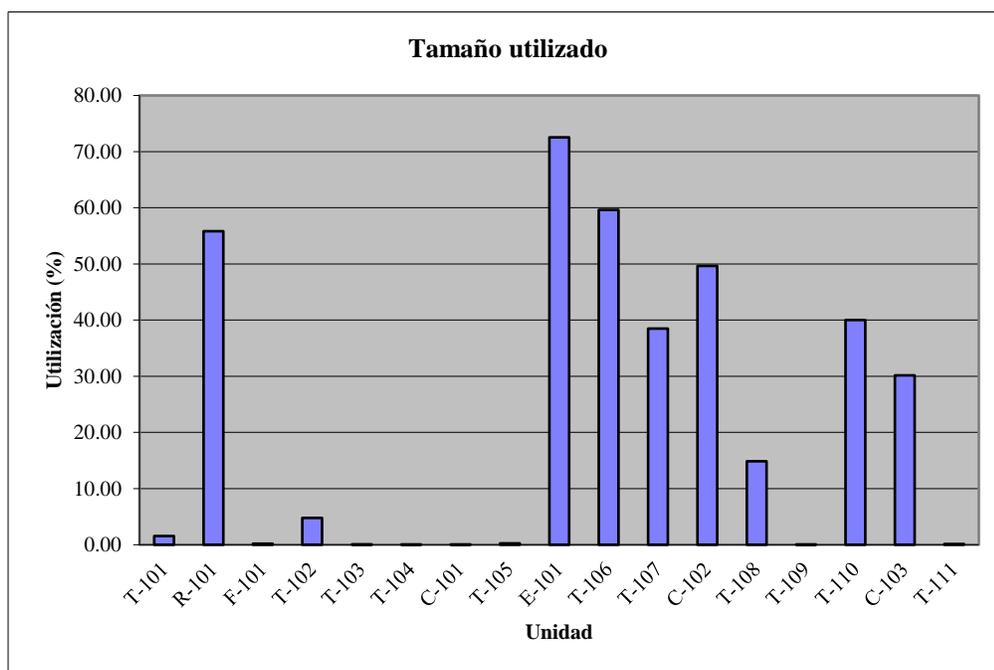
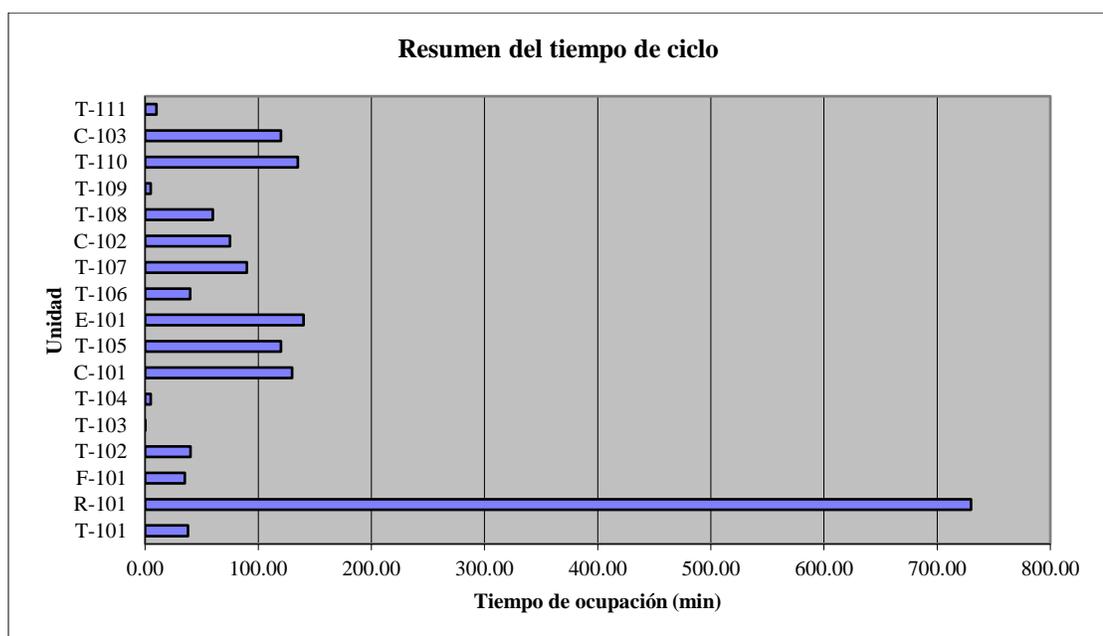


Ilustración 17.

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala piloto de 1.6 kg.



3.5.2 Intensificación del proceso

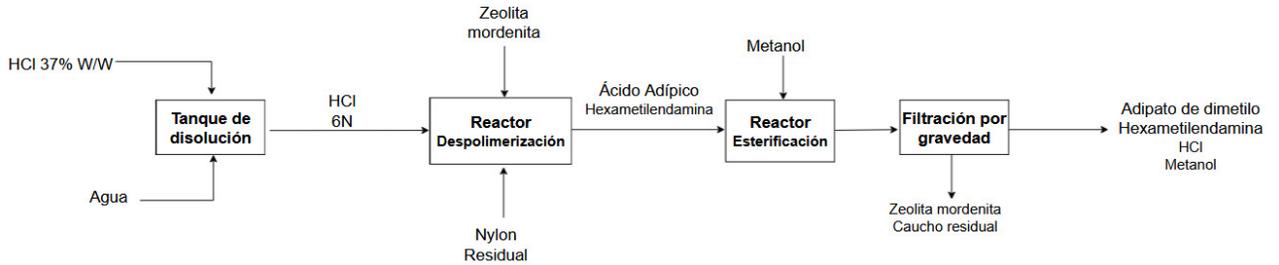
3.5.2.1 Batch máxima producción

En la escala industrial, no se alcanzó la producción requerida debido a limitaciones en el simulador, como el uso de columnas con una capacidad máxima de 600 litros. Como fue el caso de la producción de 100 kg, la corriente de alimentación en la columna es de 720 litros, generando desbordamiento en el equipo o para la producción de 270 kg, que la corriente de alimentación ascendió a los 2025 litros superando ampliamente la capacidad del equipo. Esta restricción genera cuellos de botella en las etapas posteriores, impidiendo alcanzar mayores capacidades de procesamiento. Por ello, fue necesario plantear un cambio hacia un proceso semicontinuo, eliminando las etapas de purificación realizadas en batch y optimizando así el diseño para ajustarse a las necesidades de la escala industrial.

Este cambio no solo responde a las limitaciones del simulador, sino que también busca evitar posibles restricciones operativas en un proceso de mayor escala. Mediante el simulador, se diseñó la máxima producción alcanzada para las etapas principales del proceso como lo son la disolución (T-101, T-102), despolimerización (R-101), esterificación (R-101) y filtración (F-101, T-103, C-101 y T-104) tal como se encuentra detallada en la Ilustración 18. Con este enfoque, se logró determinar una máxima producción 270 kg, siendo esta la capacidad máxima ajustada a las condiciones de diseño. Este diseño refleja un balance entre las capacidades de los equipos y las operaciones realizadas permitiendo optimizar el proceso en función de las limitaciones detectadas. Además, la transición hacia un enfoque semicontinuo asegura la viabilidad del escalamiento y establece una base para futuras intensificaciones del proceso a mayor capacidad.

Ilustración 18.

Diagrama de bloque del proceso para la obtención de adipato de dimetilo máxima producción.



3.5.2.2 Escala industrial

Este diseño permitió proyectar una producción máxima de 270 kg por lote de adipato de dimetilo, destacando las capacidades y limitaciones de los equipos involucrados; aunque este no incorporó recirculación, sentó una base sólida para el escalado.

- **Producción 100 kg**

La evaluación de los equipos utilizados en la escala industrial para una producción de 100 kg permitió identificar las capacidades máximas, niveles de ocupación y la utilización de cada unidad en el proceso. Dentro de los equipos involucrados se encuentran el T-101, el R-101, el F-101, el T-102, el T-103 y el T-104, los cuales cumplen funciones específicas dentro de las etapas principales del proceso como disolución, despolimerización, esterificación y filtración. Como se observa en la Tabla 21, el balance de masa evidencia una coherencia operativa significativa, presentando una discrepancia del 1.50% lo cual es aceptable para procesos de escala industrial. En esta tabla, se detalla que los materiales claves como el Nylon 6,6, el metanol y el ácido clorhídrico son procesados eficientemente, transformándose en productos como el adipato de dimetilo y ácido adípico. Esta baja discrepancia valida la aplicabilidad del modelo simulado y la reproducibilidad del proceso a mayor escala.

Por otro lado, en la Tabla 22 y las Ilustraciones 19 y 20, resumen las capacidades y el uso de los equipos. El R-101, alcanza el 100% de su tiempo de ocupación y el 67.01% de utilización en tamaño, destacando su importancia en etapas críticas del proceso. El T-101 presenta un alto porcentaje de utilización del 92.97%, siendo esencial para el manejo de líquidos en las operaciones iniciales. En contraste, equipos como el F-101 y el T-104 muestran los valores más bajos de ocupación y utilización, reflejando su menor demanda en el proceso.

Tabla 21.

Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 100 kg.

Industrial - 100 kg		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	38135.61	38135.61
Metanol	860348.87	848973.55
Ácido Clorhídrico	647656.05	647656.05
Nylon 6,6	65375.38	-
Estireno-Butadieno-Caucho	43583.58	43583.58
Agua	4513734.69	4509721.38
Ácido Adípico	-	16273.94
Adipato de Dimetilo	-	30920.27
Hexametildiamina	-	33568.29
Nitrógeno	25907.02	25907.02
Oxígeno	7867.69	7867.69
Total	6202608.87	6202607.38
Discrepancia		1.50%

Tabla 22.

Capacidad de los equipos escala industrial para una producción de 100 kg.

Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	5,000.00	5,000.00	4,648.72	L	92.97	38.00	5.21
R-101	Reactor	10,000.00	10,000.00	6,700.71	L	67.01	730.00	100.00

F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	96.69	L	9.67	49.53	6.78
T-102	Tanque	7,500.00	7,500.00	5,746.97	L	76.63	30.00	4.11
T-103	Tanque	800.00	800.00	560.76	L	70.10	14.53	1.99
T-104	Tanque	250.00	250.00	80.72	L	32.29	5.00	0.68

Ilustración 19.

Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 100 kg de producción.

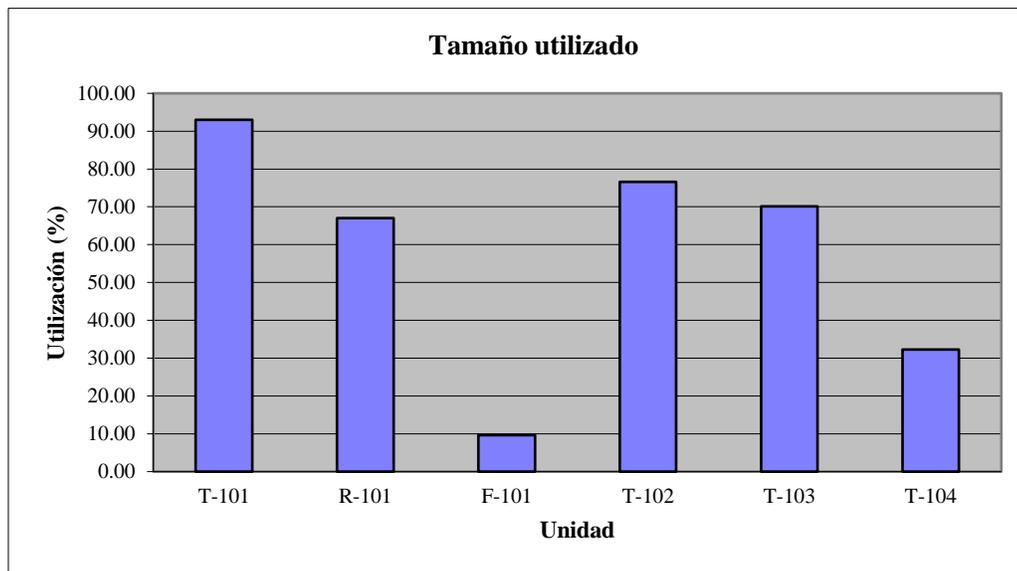
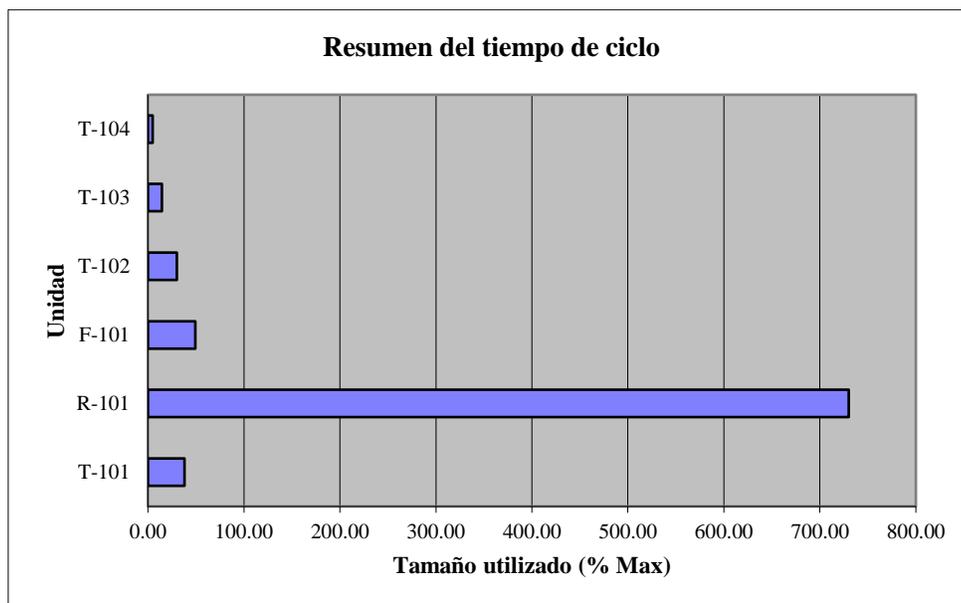


Ilustración 20.

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 100 kg de producción.



- **Producción 270 kg**

La evaluación de los equipos utilizados en la escala industrial para una producción de 270 kg permitió identificar las capacidades máximas, los niveles de ocupación y la utilización de cada unidad en el proceso. Dentro de los equipos involucrados se encuentran el T-101, el R-101, el F-101, el T-102, el T-103, y el T-104, los cuales cumplen funciones específicas dentro de las etapas principales del proceso como disolución, despolimerización, esterificación y filtración. En la Tabla 23, se detalla el balance de masa correspondiente a esta escala, donde se observa una discrepancia del 4.05% que si bien es mayor al límite observado en escalas menores, sigue siendo aceptable para modelar la producción en escala industrial.

En la Tabla 24 y las Ilustraciones 21 y 22, el R-101 destaca con una ocupación del 100% y 730 minutos de operación, siendo el esencial para las etapas críticas del proceso como la despolimerización y esterificación. En el caso de los equipos como el F-101 y el T-104 reflejan menos demanda con ocupaciones de 10.17% y 0.68% respectivamente, mostrando roles más específicos dentro del proceso.

Tabla 23.

Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 270 kg.

Industrial - 270 kg		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	102966.14	12176247.47
Metanol	2322941.88	2292228.54
Ácido Clorhídrico	1748671.29	1748671.29
Nylon 6,6	176513.51	-
Estireno-Butadieno-Caucho	117675.68	117675.68
Agua	12187083.4	12176247.47
Ácido Adípico	-	43939.63
Adipato de Dimetilo	-	83484.73
Hexametildiamina	-	90634.38
Nitrógeno	56925.84	56925.84

Oxígeno	17287.77	17287.77
Total	16730065.52	16730061.47
Discrepancia		4.05%

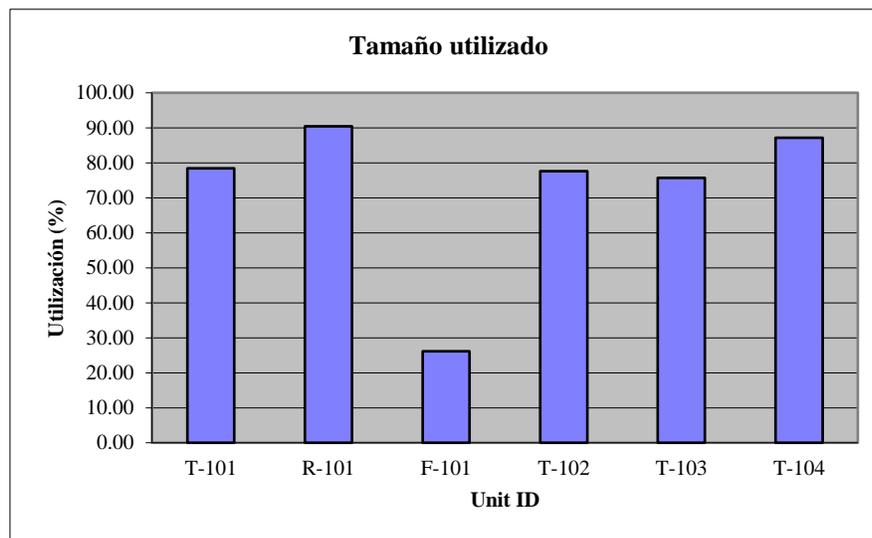
Tabla 24.

Capacidad de los equipos escala industrial producción de 270 kg.

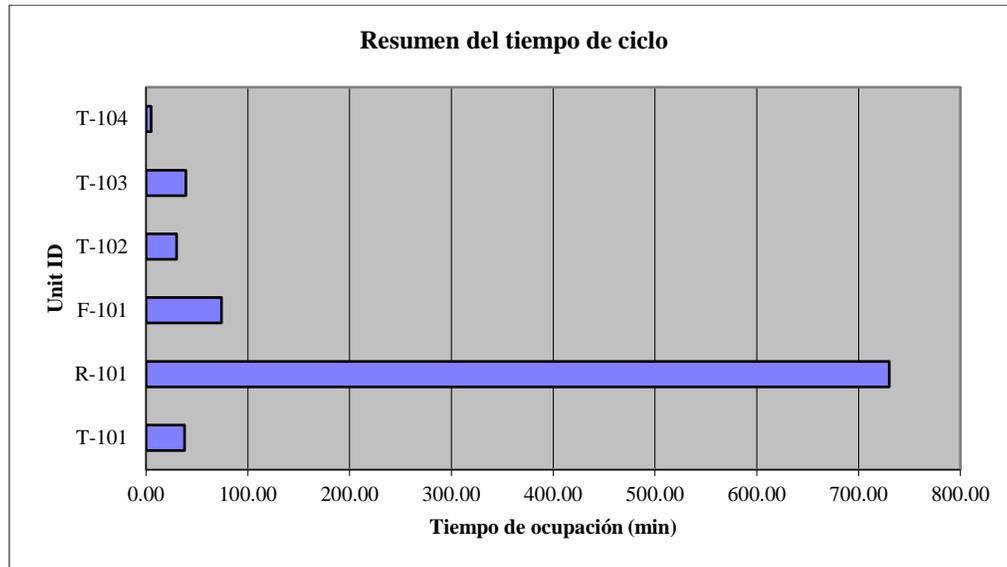
Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	16,000.00	16,000.00	12,551.55	L	78.45	38.00	5.21
R-101	Reactor	20,000.00	20,000.00	18,091.92	L	90.46	730.00	100.00
F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	261.07	L	26.11	74.23	10.17
T-102	Tanque	20,000.00	20,000.00	15,516.82	L	77.58	30.00	4.11
T-103	Tanque	2,000.00	2,000.00	1,514.05	L	75.70	39.23	5.37
T-104	Tanque	250.00	250.00	217.96	L	87.18	5.00	0.68

Ilustración 21.

Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 270 kg de producción.

**Ilustración 22.**

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 270 kg de producción.



3.5.2.3 Batch a semicontinuo

Para esta etapa, se implementó un cambio significativo en el diseño del proceso, pasando de un enfoque batch a uno semicontinuo. Este ajuste responde a la necesidad de incrementar la capacidad productiva y minimizar las limitaciones inherentes al diseño batch. El máximo escenario de escalamiento considerado fue de 270 kg, basado en las restricciones identificadas en la capacidad de los equipos y el balance de masas. A partir de este escenario, se implementaron modificaciones en el diseño para garantizar un flujo continuo, evitando cuellos de botella y mejorando la eficiencia operativa. Las etapas principales incluyeron la reacción despolimerización y esterificación, filtración por gravedad de los sólidos residuales como: zeolita modernita que no reaccionó y caucho residual, recuperación de metanol, extracción líquido-líquido del adipato de dimetilo y éter dietílico, destilación del éter dietílico y finalmente la recuperación del ácido clorhídrico como puede ser observado en la Ilustración 23.

En la Tabla 25, se detalla el balance de masa asociado a la intensificación del proceso, donde se observan los flujos de entrada y de salida con una discrepancia de 4.05% validando la precisión

del modelo. Asimismo, la Tabla 26 junto a las Ilustraciones 24 y 25; resumen las capacidades y el ciclo de uso de los equipos utilizados, destacando al R-101 con una capacidad máxima utilizada del 90.46% acompañado de un alto tiempo de utilización de 730 minutos por rol crítico en el proceso. En contraste, el T-104 registró la mínima utilización, debido a su rol puntual en etapas finales de recuperación.

Por otro lado, se tiene a los equipos T-108 y C-103 que tuvieron una elevada demanda en cuanto a tiempo de operación alcanzando 1,989.78 minutos y 894.44 minutos respectivamente. Esto evidencia su importancia en las operaciones posteriores como la purificación y separación. En contraste, los equipos T-104 y T-103 mostraron menor utilización en las necesidades específicas del proceso. Cabe mencionar que, debido a la naturaleza de los equipos continuos como C-101, C-102, E-101 y C-103; no se observa la capacidad usada en los gráficos de la Ilustración 24, ya que, estos equipos no operan bajo condiciones de llenado total sino en un flujo continuo durante el proceso.

Ilustración 23.

Diagrama de flujo del escalamiento del adipato de dimetilo a partir de nylon residual.

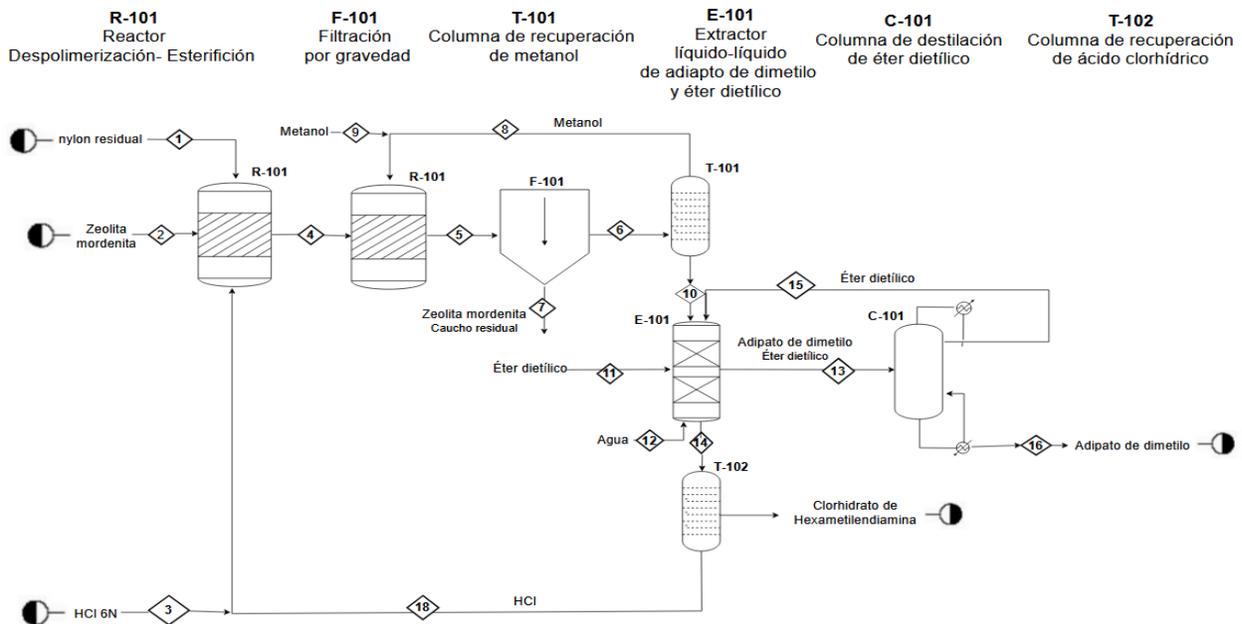


Tabla 25.*Balance de masa por equipos escala industrial - intensificación.*

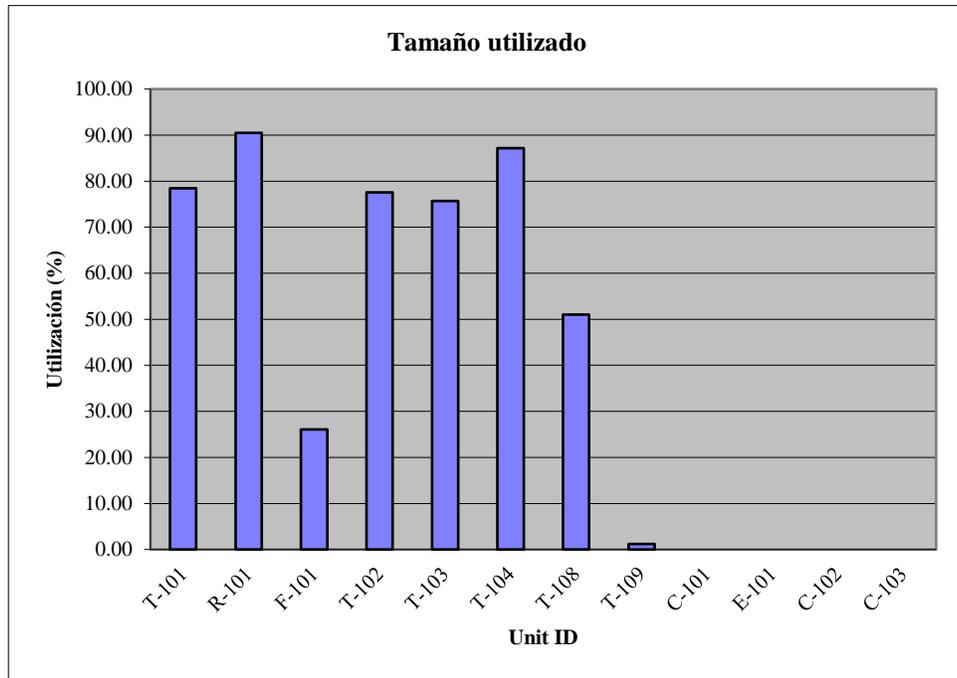
Intensificación		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	102966.14	635.33
Metanol	2322941.88	2292228.54
Ácido Clorhídrico	1748671.29	1748671.29
Dietil Eter	18574452.96	18574452.96
Nylon 6,6	176513.51	-
Estireno-Butadieno-Caucho	117675.68	117675.68
Agua	50673625.34	299984.83
Ácido Adípico	-	43939.63
Adipato de Dimetilo	-	83484.73
Hexametilendiamina	-	90634.38
Nitrógeno	184230.57	184230.57
Oxígeno	55948.87	55948.87
Total	73957026.26	73957022.21
Discrepancia		4.05%

Tabla 26.*Capacidad de los equipos escala industrial - intensificación.*

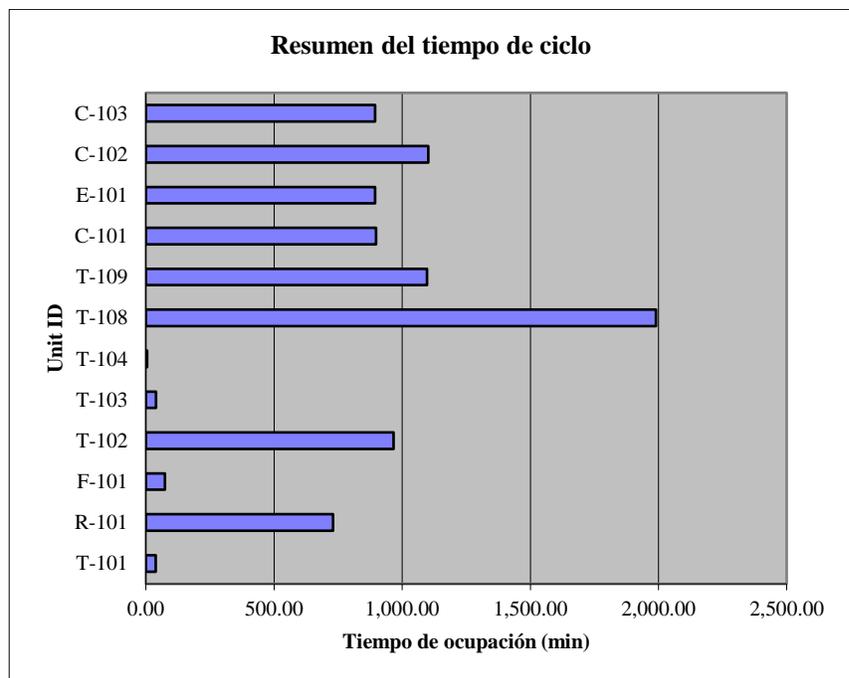
Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	16,000.00	16,000.00	12,551.55	L	78.45	38.00	1.91
R-101	Reactor	20,000.00	20,000.00	18,091.92	L	90.46	730.00	36.69
F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	261.07	L	26.11	74.23	3.73
T-102	Tanque	20,000.00	20,000.00	15,516.82	L	77.58	966.95	48.60
T-103	Tanque	2,000.00	2,000.00	1,514.05	L	75.70	39.23	1.97
T-104	Tanque	250.00	250.00	217.96	L	87.18	5.00	0.25
T-108	Tanque	50,000.00	50,000.00	25,504.37	L	51.01	1,989.78	100.00
T-109	Tanque	50,000.00	50,000.00	592.19	L	1.18	1,097.06	55.13
C-101	Columna Continua					0.00	898.48	45.15
E-101	Extractor Continuo					0.00	893.88	44.92
C-102	Columna Continua					0.00	1,101.36	55.35
C-103	Columna Continua					0.00	894.44	44.95

Ilustración 24.

Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial - intensificación.

**Ilustración 25.**

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial - intensificado.



3.6 Análisis tecno-económico - Caso proceso intensificado (270 kg)

El análisis económico se centró en las etapas clave del proceso intensificado para la despolimerización del nylon residual y la obtención de adipato de dimetilo a escala industrial. Este estudio consideró los balances de masa, capacidad de los equipos y costos asociados a la materia prima y operaciones con base en los resultados presentados en la sección 3.5.2.1 que trata sobre la escala industrial intensificada.

El diseño del proceso incluyó la despolimerización asistida por catalizadores, la recuperación de monómeros mediante extracción líquido-líquido y la purificación de los productos utilizando un evaporador al vacío. Además, se asumió una tasa de recuperación del 80% para reactivos clave como el ácido clorhídrico y el metanol, optimizando el consumo de recurso y reduciendo los costos operativos. Con una producción proyectada de 270 kg por lote, el análisis de estas etapas permitió evaluar la eficiencia económica del proceso y su viabilidad técnica para futuras implementaciones a mayor escala.

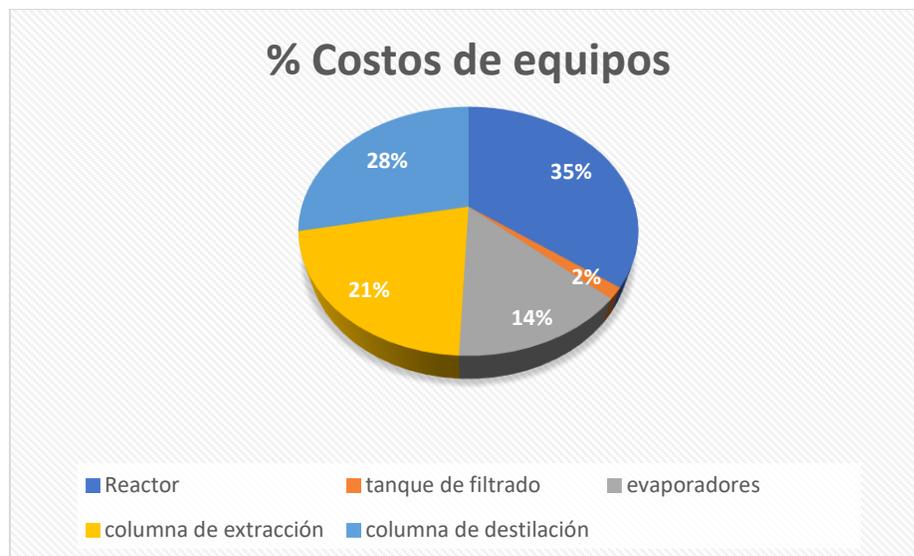
3.6.1 Costos de los equipos

Los porcentajes de costos de los equipos son fundamentales para evaluar la viabilidad económica y técnica del proceso, considerando una conversión del 61.45% y una producción anual proyectada de 720 lotes, equivalente a un total de 57,364.12 kg anuales de producto. La Ilustración 26 presenta la distribución porcentual de los costos asociados a los equipos, destacando al reactor con un (35%) como el componente más relevante debido a su papel central en la despolimerización y esterificación del nylon residual, etapas críticas del proceso. La columna de extracción, que representa el (21%) del costo total, es esencial para la separación efectiva de monómeros y subproductos, asegurando la calidad y pureza del adipato de dimetilo. La columna de destilación,

que concentran el (28%) del costo, cumple una función vital en la recuperación de solventes y en la concentración del producto final. Aunque los costos asignados al tanque de filtrado (2%) y a los evaporadores (14%) son relativamente menores, su rol es indispensable en las etapas de purificación y manejo de las corrientes del proceso. Este desglose permite apreciar cómo la asignación de costos refleja la importancia técnica de cada equipo en la operación global del proceso intensificado.

Ilustración 26.

Porcentaje de los costos de equipos para escalamiento industrial.



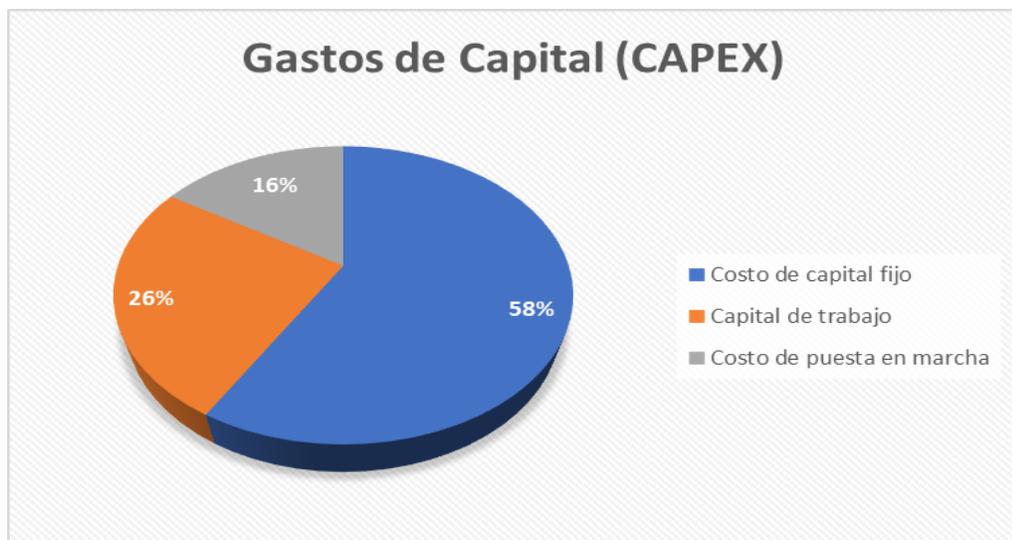
3.6.2 Análisis de gasto de capital (CAPEX)

El análisis del Gasto de Capital (CAPEX), representado en la Ilustración 27, destaca tres componentes esenciales que influyen directamente en la viabilidad económica del proyecto. El Costo de capital fijo, que constituye el 58% del CAPEX, es fundamental debido a su relación directa con la inversión en infraestructura, maquinaria y equipos necesarios para el funcionamiento continuo del proceso (Turton et al., 2018). Este componente asegura la estabilidad operativa a largo plazo, siendo el pilar estructural del proyecto. Por otro lado, el capital de trabajo, que representa el 26%, es crucial para mantener el flujo operativo, financiando materias primas, energía y otros costos

recurrentes. Finalmente, el costo de puesta en marcha, que equivale al 16%, abarca los gastos relacionados con las pruebas iniciales, ajustes técnicos y la capacitación del personal, garantizando que el proceso alcance su rendimiento óptimo desde el inicio. La gráfica resalta cómo estos porcentajes reflejan la importancia estratégica de cada componente en el diseño y escalamiento del proceso, asegurando tanto su viabilidad técnica como económica.

Ilustración 27.

Distribución del Gasto de Capital (CAPEX) en el escalamiento.



3.6.3 Análisis del Gasto Operativo (OPEX)

El análisis del Gasto Operativo (OPEX), representado en la Ilustración 28, detalla la distribución de los costos asociados con el funcionamiento continuo del proceso. Los costos dependientes de las instalaciones, que representan el 42% del OPEX, son los más significativos, ya que incluyen gastos de mantenimiento, reparaciones y servicios básicos necesarios para garantizar la operatividad y la confiabilidad de la infraestructura. Los costos dependientes de la mano de obra, que constituyen el 17%, reflejan la importancia del personal capacitado para la supervisión, operación y mantenimiento de los equipos. Por su parte, los costos de materias primas, con un 24%,

son relevantes debido al consumo continuo de insumos esenciales para el proceso productivo. Los costos de energía, que abarcan el 9%, son fundamentales para el funcionamiento de los equipos principales y auxiliares, mientras que los costos de laboratorio/control de calidad/aseguramiento de calidad, que corresponden al 8%, aseguran que el producto final cumpla con los estándares establecidos. Esta distribución muestra cómo cada componente del OPEX es clave para la sostenibilidad técnica y económica del proyecto, destacando el equilibrio necesario entre los costos recurrentes y la productividad operativa.

Ilustración 28.

Distribución del Gasto Operativo (OPEX) en el escalamiento.



3.6.4 Indicadores tecno económicos

En la Tabla 27 se presentan los indicadores clave que evalúan la viabilidad económica del proyecto, destacando el Período de Recuperación de la Inversión (PBP) de 6.35 años, que representa el tiempo necesario para recuperar la inversión inicial, siendo un indicador esencial para medir el riesgo financiero y la sostenibilidad a mediano plazo. La Recuperación del Costo de Capital (CCR), con un valor de 2.08, refleja la capacidad del proyecto para cubrir y superar los costos asociados al capital invertido, lo que asegura su viabilidad financiera. Por su parte, la Posición Acumulada de

Caja (CCP), con 942.33 unidades monetarias, evidencia una liquidez adecuada que garantiza la sostenibilidad operativa y la capacidad de afrontar contingencias. Finalmente, la Tasa de Retorno sobre la Inversión (ROROI), del 17%, indica una rentabilidad competitiva, posicionando al proyecto como una alternativa económica sólida frente a otras opciones de inversión. Estos resultados confirman que el proyecto es financieramente viable, con un balance positivo entre riesgo, liquidez y rentabilidad (Turton et al., 2018).

Tabla 27.

Indicadores Económicos del Proyecto: Análisis de Viabilidad Financiera.

Indicador	Valor
Período de recuperación de la inversión(años)	6.35
Recuperación del Costo de Capital	2.08
Posición Acumulada de Caja	942.33
Tasa de Retorno sobre la Inversión (%)	17%

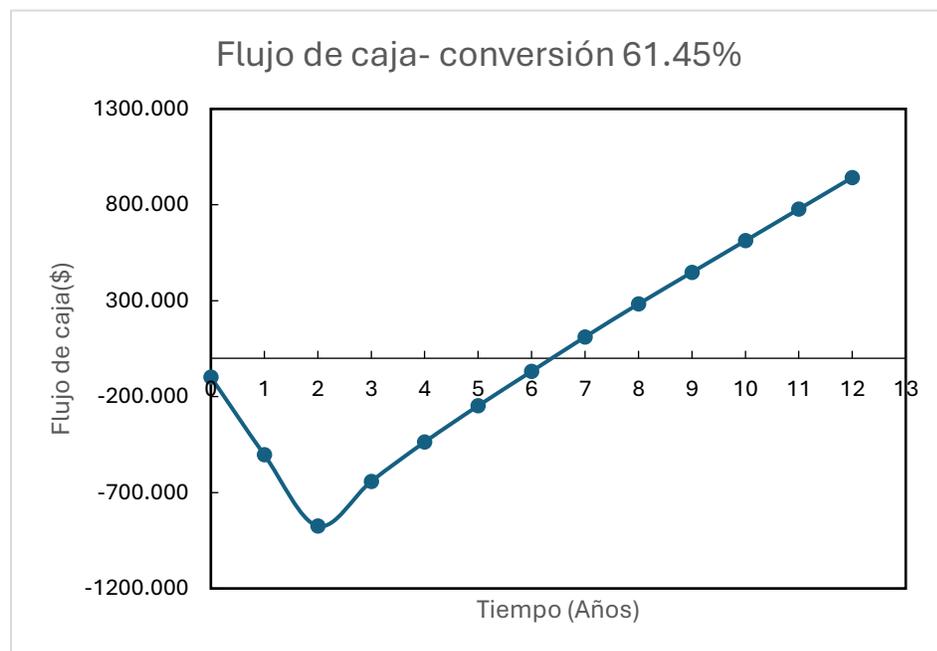
La Ilustración 29 evidencia la evolución del flujo de caja acumulado del proyecto a lo largo de un horizonte de 10 años, correspondiente a la vida útil del mismo. Se observa una tendencia inicial negativa, con un punto mínimo cercano a los -1,000,000 unidades monetarias alrededor del tercer año, lo cual representa los costos iniciales asociados a la inversión en equipos, puesta en marcha y operación durante los primeros años del proyecto. El flujo de caja alcanza el punto de equilibrio aproximadamente en el sexto año, lo que coincide con el Período de Recuperación de la Inversión (PBP) previamente calculado en 6.35 años.

Posterior al punto de equilibrio, el flujo de caja muestra una recuperación sostenida, reflejando la generación de ingresos netos significativos, impulsados por la eficiencia operativa derivada de la conversión del 61.45%. Al finalizar el décimo año, el flujo acumulado asciende a cerca de 800,000 unidades monetarias, evidenciando la capacidad del proyecto para no solo recuperar la inversión

inicial, sino también generar una rentabilidad atractiva para los inversionistas. Este comportamiento confirma la viabilidad técnica y económica del proceso intensificado, destacando su sostenibilidad financiera en el tiempo y el cumplimiento de los objetivos planteados para su vida útil de una década.

Ilustración 29.

Flujo de caja del proyecto a 10 años.



3.6.5 Análisis de incertidumbre

En esta sección se realizó un análisis de incertidumbre enfocado en evaluar el impacto de diferentes escenarios de conversión sobre los indicadores tecno económicos del proyecto. El estudio consideró desde el mejor caso, correspondiente a la conversión teórica del 61.45%, hasta escenarios progresivamente menos favorables con conversiones del 51.45%, 41.52% y 31.55%, valores obtenidos a partir del diseño experimental. Este enfoque permitió analizar cómo las variaciones en la conversión afectaron la rentabilidad y viabilidad económica del proceso, proporcionando una perspectiva integral sobre su desempeño en condiciones reales. A través de este análisis, se

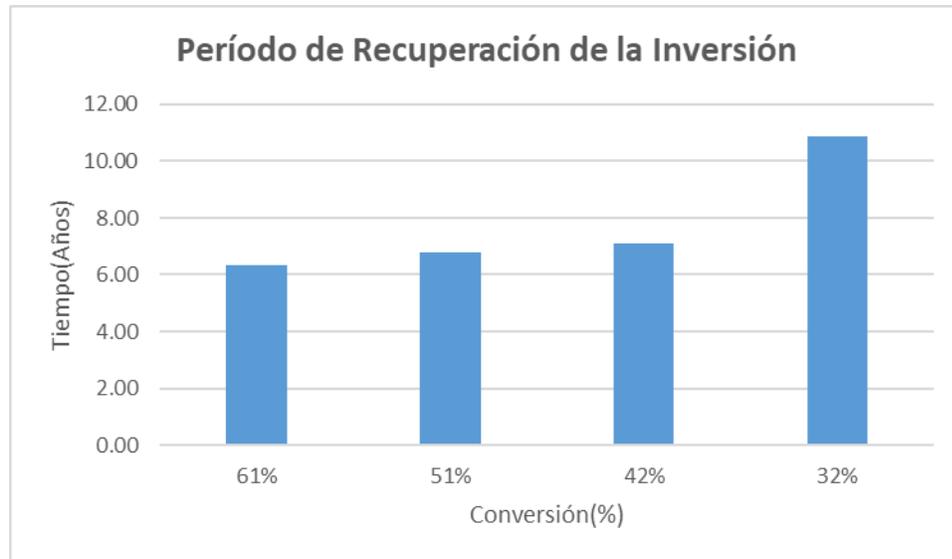
identificaron los límites de operatividad del proyecto y su capacidad para mantenerse rentable en escenarios de menor eficiencia.

En la Ilustración 30, se analiza el comportamiento del Período de Recuperación de la Inversión (PBP) bajo diferentes escenarios de conversión, desde el valor teórico del 61.45% hasta conversiones más bajas del 51.45%, 41.52% y 31.55%. En el mejor caso, correspondiente al 61.45%, el PBP es de aproximadamente 6.35 años, lo que refleja un desempeño económico favorable con un tiempo de recuperación razonable. A medida que la conversión disminuye, el PBP incrementa progresivamente, alcanzando 7.8 años al 51.45%, 9 años al 41.52%, y un valor crítico de 11.8 años al 31.55%, lo que indica una pérdida significativa en la eficiencia económica del proyecto.

Esta comparación evidencia que la viabilidad del proyecto está fuertemente vinculada a la conversión alcanzada. En los escenarios de menor conversión, el aumento en el PBP compromete la capacidad del proyecto para recuperar la inversión dentro de un período competitivo, incrementando el riesgo financiero. Por otro lado, el caso de conversión teórica confirma la sostenibilidad del proceso bajo condiciones óptimas. Este análisis subraya la importancia de mantener conversiones cercanas al máximo teórico para garantizar la rentabilidad y competitividad del proyecto en el mercado.

Ilustración 30.

Impacto de la Conversión en el Período de Recuperación de la Inversión (PBP).

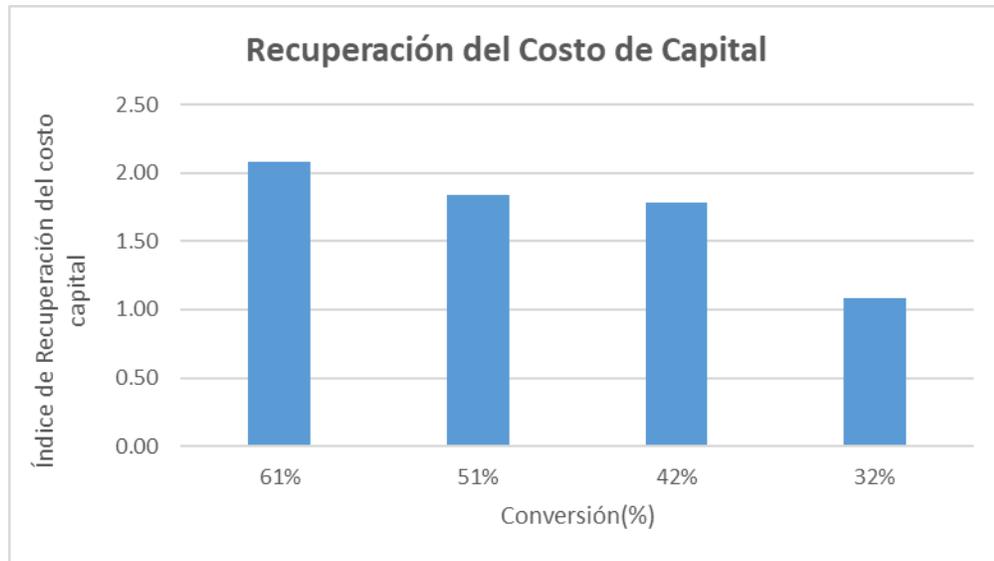


En la Ilustración 31, se evalúa el impacto de diferentes niveles de conversión en la Recuperación del Costo de Capital (CCR), considerando escenarios que van desde el valor teórico de 61.45% hasta conversiones reducidas de 51.45%, 41.52% y 31.55%. En el caso de mayor conversión (61.45%), el CCR alcanza un valor de 2.08, lo que evidencia una recuperación sólida del capital invertido y un margen considerable de rentabilidad. Conforme la conversión disminuye, el CCR se reduce gradualmente, situándose en 1.75 para el 51.45%, 1.50 para el 41.52% y cayendo a 1.13 en el escenario de 31.55%, acercándose al umbral crítico de viabilidad económica.

Estos resultados demuestran que el CCR está estrechamente relacionado con la eficiencia del proceso, ya que, los valores más bajos de conversión limitan la capacidad del proyecto para generar retornos suficientes. Si bien los escenarios intermedios mantienen cierta rentabilidad, el margen financiero se vuelve menos atractivo, especialmente en el caso más desfavorable. Este análisis destaca la necesidad de operar en condiciones óptimas para maximizar el retorno del capital y asegurar la sostenibilidad del proyecto frente a variaciones en la eficiencia del proceso.

Ilustración 31.

Impacto de la Conversión en la Recuperación del Costo de Capital (CCR).

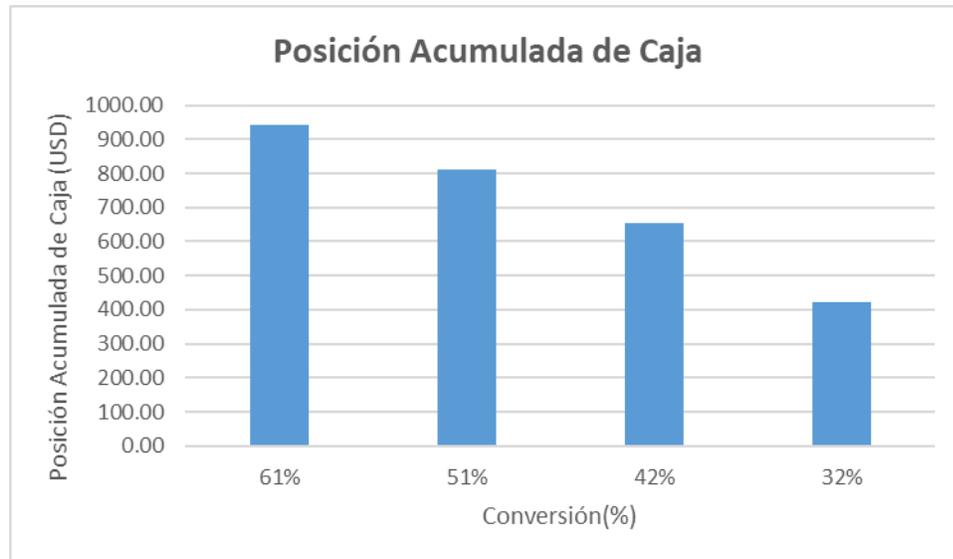


La Ilustración 32 muestra la relación directa entre la conversión y la Posición Acumulada de Caja, destacando la sensibilidad del flujo financiero ante cambios en la eficiencia del proceso. En el escenario más favorable, con una conversión del 61.45%, se logra la mayor acumulación, alcanzando aproximadamente 942.33 USD, lo que asegura un margen financiero sólido. Sin embargo, al reducirse la conversión al 51.45%, la acumulación disminuye a 820 USD, seguida de 690 USD al 41.52%, y finalmente 510 USD al 31.55%, reflejando una pérdida significativa en el excedente generado.

Estos resultados resaltan que, aunque el proyecto sigue siendo viable en escenarios intermedios, las reducciones en la conversión impactan directamente en la generación de flujos positivos, disminuyendo la capacidad de afrontar imprevistos o reinversiones estratégicas. Este análisis refuerza la importancia de optimizar la eficiencia del proceso para mantener la estabilidad financiera, maximizando los beneficios económicos y reduciendo el riesgo asociado a menores conversiones.

Ilustración 32.

Impacto de la Conversión en la Posición Acumulada de Caja (USD).



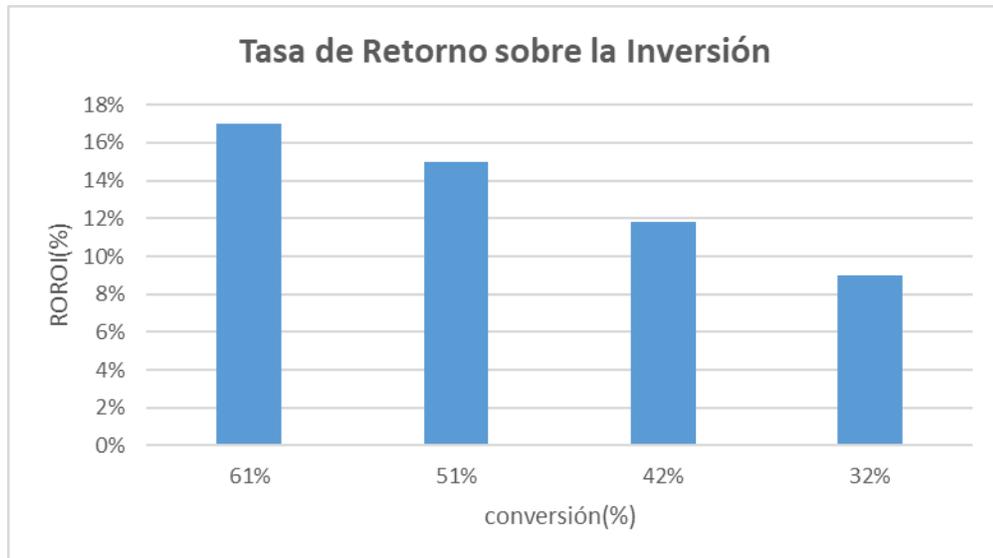
Por último, la Ilustración 33 presenta la variación de la Tasa de Retorno sobre la Inversión (ROROI) en función de los niveles de conversión, reflejando el impacto de la eficiencia del proceso sobre la rentabilidad global del proyecto. En el escenario más favorable, con una conversión del 61.45%, la ROROI alcanza un máximo del 17%, indicando una rentabilidad atractiva y competitiva para los inversionistas. A medida que la conversión disminuye, se observa una reducción progresiva en la ROROI, situándose en 14% para el 51.45%, 11% para el 41.52%, y alcanzando su punto más bajo en 8% al 31.55% de conversión.

Esta disminución evidencia cómo la reducción en la eficiencia del proceso impacta directamente en la capacidad del proyecto para generar retornos proporcionales a la inversión inicial. Aunque la rentabilidad sigue siendo positiva en los escenarios de menor conversión, el atractivo del proyecto se ve comprometido frente a alternativas más competitivas. Este análisis subraya que mantener una conversión cercana entre el 61.45 % y 42% de conversión no solo maximiza la rentabilidad, sino que también asegura la sostenibilidad del proyecto en condiciones de

mercado exigentes. La importancia de este indicador radica en su capacidad para orientar decisiones estratégicas hacia la optimización operativa y financiera del proceso.

Ilustración 33.

Impacto de la tasa de retorno sobre la inversión.



3.7 Layout

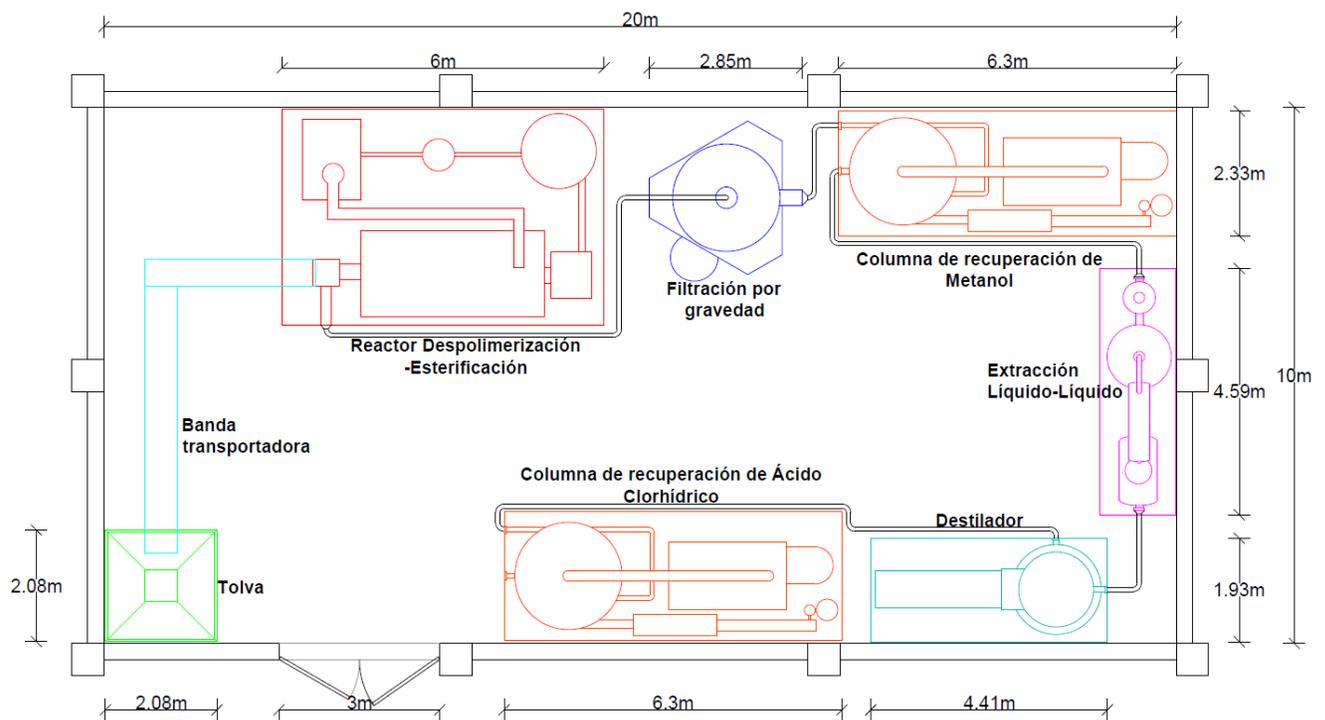
En la Ilustración 34, se muestra el diseño integral del proceso desarrollado para la obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual, incorporando todas las operaciones unitarias necesarias en tres secciones principales. En la selección de despolimerización y esterificación de dimensiones 3.15 m x 3 m, el nylon residual se descompone en presencia de zeolita y ácido clorhídrico a 6N, obteniendo ácido adípico como producto intermedio. Posteriormente, este ácido reacciona con metanol para formar adipato de dimetilo, utilizando un reactor diseñado para un control óptimo de las condiciones operativas.

La sección de separación, de 3.15 m x 2.21 m, incluye operaciones clave para la purificación y recuperación de componentes, como la filtración por gravedad para eliminar residuos sólidos, la evaporación para recuperar metanol, ácido clorhídrico y clorhidrato de hexametildiamina, la

extracción líquido-líquido con éter dietílico y la destilación para purificar solventes y productos. Por último, la sección de almacenamiento y alimentación, con dimensiones de 1.04 m x 2 m, está compuesta por una tolva y una banda transportadora que aseguran un suministro uniforme del nylon residual al reactor, optimizando la eficiencia de la etapa de despolimerización. Este diseño integral permite un flujo continuo y eficiente de materiales, minimizando cuellos de botella y maximizando la recuperación de reactivos y solventes. Además, su enfoque en la sostenibilidad refuerza la reutilización de insumos y promueve una operación segura y eficiente, garantizando así la calidad del producto final.

Ilustración 34.

Layout del diseño conceptual del proceso para la obtención de adipato de dimetilo.



Capítulo 4

4. Conclusiones y recomendaciones

En esta sección se presentan las conclusiones obtenidas tras la ejecución de este proyecto, sintetizando los resultados alcanzados en función de los objetivos planteados. Además, se incluyen recomendaciones que buscan guiar futuros trabajos relacionados, así como optimizar el proceso desarrollado, abordando las oportunidades de mejora y los retos identificados durante el estudio.

4.1 Conclusiones

Las conclusiones reflejan los logros obtenidos en base al cumplimiento del objetivo general y los objetivos específicos del presente proyecto, considerando los resultados experimentales y las simulaciones realizadas.

- Se diseñó un proceso conceptual para la obtención de adipato de dimetilo a partir de nylon residual mediante las reacciones de despolimerización y esterificación. La simulación fue realizada en el software Aspen Batch Process Developer el cual permitió confirmar que el proceso es escalable, obteniendo conversiones del 73% en la etapa de despolimerización y del 61.45% en la esterificación bajo condiciones ideales establecidas.
- El modelo cúbico desarrollado identificó las condiciones ideales para la esterificación del ácido adípico proveniente del nylon 6,6: una temperatura de 129.62 °C y un tiempo de reacción de 3.42 horas, alcanzando una conversión teórica máxima del 61.45%. La validación matemática por análisis gráficos y confirmada mediante el análisis de la matriz Hessiana, destacó que estas condiciones representan un máximo local, evidenciando la interacción significativa entre temperatura y tiempo. Estos resultados establecen parámetros clave para maximizar la eficiencia del proceso, ofreciendo una base sólida para su aplicación a mayor escala.

- La simulación en ABPD replicó las condiciones experimentales obtenidas en el laboratorio, lo que permitió modelar detalladamente los balances de masa y energía y explorar los límites técnicos del sistema. Además, se identificaron cuello de botella operativos y se realizaron los ajustes necesarios para asegurar la eficiencia del proceso a mayor escala. Los resultados confirmaron la escalabilidad del diseño, logrando conversiones del 61.45% en la etapa de esterificación. Este análisis integral aseguró que el proceso planteado no solo es técnicamente viable sino que también estable un camino sólido hacia su implementación a nivel industrial.
- La evaluación tecno económica del proceso diseñado para la obtención de adipato de dimetilo permitió determinar su viabilidad económica y escalabilidad a nivel industrial. Los indicadores clave muestran un Periodo de Recuperación de Inversión (PBY, Pay Back Year) de 6.35 años, una Razón de Costos a Retorno (CCR, Cost to Return Ratio) de 2.08 y un Costo de Producción Total (CCP, Cumulative Cash Position) de 942.33. Además, la Tasa de Retorno sobre la Inversión (ROIROI, Return on Investment Rate) alcanzó un 17%.

4.2 Recomendaciones

Tras culminar el desarrollo y análisis del proceso planteado en este proyecto, se identificaron diversas áreas que pueden ser objeto de mejora y ampliación. Estas recomendaciones están orientadas a fortalecer la viabilidad técnica y económica del proceso, así como fomentar su sostenibilidad y su implementación a escalas mayores.

- Es fundamental llevar a cabo un estudio cinético el cual analice en detalle las velocidades en reacción de las etapas de despolimerización y esterificación. Esto permitirá entender con mayor precisión como las variables operativas como

temperatura, presión y concentración de reactivos afectan la velocidad de cada reacción. Un estudio cinético robusto podría contribuir significativamente a optimizar las condiciones del proceso reduciendo el tiempo de reacción y mejorando el rendimiento global. Además, esta información sería crucial para el diseño de reactores a escala industrial que operen bajo condiciones óptimas.

- Dado que el proceso ya ha sido optimizado únicamente a nivel de laboratorio, se recomienda ampliar los estudios hacia el escalado industrial considerando una mayor capacidad de producción. Este análisis debe enfocarse en identificar y mitigar posibles cuellos de botella en equipos clave, así como en evaluar la transferencia de calor y masa junto al comportamiento de los materiales a mayor escala, manteniendo la conversión.
- La implementación de modelos más avanzados en simuladores como Aspen Plus es esencial para validar estas transiciones de escala y garantizar que el proceso mantenga su eficiencia y calidad en capacidades industriales. El uso de Aspen Plus permitía simular directamente las operaciones del proceso en diferentes escenarios de escalado, asegurando un análisis más completo de las limitaciones de equipos y condiciones operativas.
- Para validar los resultados obtenidos a escala piloto e industrial, se sugiere realizar pruebas en reactores de mayor capacidad, es decir, 1 litro. Esto proporcionará datos más representativos y permitirá evaluar la escalabilidad del proceso, identificando posibles cuellos de botella y ajustando las condiciones operativas a volúmenes industriales con mayor confiabilidad.
- Se recomienda llevar a cabo un análisis económico detallado que contemple no solo los costos de operación y materia prima, sino que también contenga costos asociados

a la infraestructura requerida para el escalamiento y la implementación de quipos de mayor capacidad. Este análisis permitirá identificar oportunidades de reducción de costos y mejorar la rentabilidad del proceso.

Referencias

- Albanese, D. C. (2023). *Conversión de ácido adípico en adipato de bis-2-etilhexilo superando las restricciones de equilibrio: un experimento de laboratorio*. Revista de Educación Química.
- Arcos & Landívar. (2022). *Optimización del proceso de despolimerización y recuperación de monómeros de poliamidas*. Obtenido de Espol.edu.ec.:
<http://www.dspace.espol.edu.ec/handle/123456789/57574>
- Aspentech. (2015). *Aspen Batch Process Developer | Batch Design |*. Obtenido de AspenTech:
<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-batch-process-developer>
- Basantes & Saico, L. (2023). *Desarrollo de una estrategia para la obtención de adipato de dimetilo a partir de fibras textiles proveniente de neumáticos usados*. Obtenido de Espol.edu.ec.: <http://www.dspace.espol.edu.ec/handle/123456789/58545>
- Castle Mountain Zeolites. (2024). *ANZ 38-Castle Mountain Zeolites*. Obtenido de Cmzeolites.com.au: <https://www.cmzeolites.com.au/zeolite-anz---38>
- Chen, R., & Kapoor, A. . (2021). Scale-up analysis of polymer recycling processes using Aspen Batch Process Developer. . En *Chemical Process Modeling Journal* (págs. 32(1), 233-247.).
- Coeck, R., & De, D. E. (2024). *Effective and sustainable depolymerization of Nylon 66 – a transamidation for the complete recycling of polyamides*. . Obtenido de Chemical Communications, 60(11), 1444–1447. : <https://doi.org/10.1039/d3cc05462d>
- Echterhof, T. (2021). *Review on the Use of Alternative Carbon Sources in EAF Steelmaking*. Obtenido de Metals, 11(2), 222–222. : <https://doi.org/10.3390/met11020222>
- El universo . (27 de Agosto de 2024). *Cuatro millones de llantas son desechadas por año en Ecuador*, pág. 5.

- González & Castellanos. (2020). *Principios Básicos de Escalado. Manual Técnico de Escalado de Procesos Químicos*. Matanzas. Obtenido de Manual Técnico de Escalado de Procesos Químicos.
- Gralla, E. J. (2022). Fit As a Diagnostic Tool: An Analytic Review of Approaches to Measure Correspondence Between Technical and Organizational Architectures. *Journal of Mechanical Design*, 144(12)<https://doi.org/10.1115/1.4055150>.
- Guo et al. (2023). *Boosted nitrilation of dimethyl adipate with NH₃ to adiponitrile over bimetallic oxide: Synergetic effect between Nb and W*. Obtenido de Chemical Engineering Science, 281, 119121: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2023.119121>
- Joglekar, A., & May, C. (2020). Design of experiments for process optimization: Applications in chemical engineering. En *Journal of Industrial and Engineering Chemistry* (págs. 50(3), 320–328.).
- Liu, P., & Chen, G. (2014). Characterization Methods: Physical Properties. *Processing and Applications*, 493-532 <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-407788-1.00010-1>.
- Mendoza, G., & Olivero, J. (2024). *Diseño conceptual del proceso de despolimerización de residuos de nylon 66*. Obtenido de espol.edu.ec:
file:///C:/Users/ASUS/Downloads/Materia_INTEGRADORA-PAO2024-1T%20Mendoza%20OliveroYG%20Rev%201%20Final-signed.pdf
- Ministerio del Ambiente, A. y. (2015). *Acuerdo Ministerial 098 - Instructivo Para La Gestión Integral De Neumáticos Usados*. Obtenido de Ministerio del Ambiente, Agua y Transición Ecológica.: <https://www.ambiente.gob.ec/wp-content/uploads/downloads/2018/05/Acuerdo-098.pdf>
- Montgomery, D. (2017). *Design and Analysis of Experiments*. Obtenido de John Wiley & Sons: https://www.researchgate.net/publication/362079778_Design_and_Analysis_of_Experiments_9th_Edition

- Nagarkar, R. A. (2022). *Efficient Process for the Production of Alkyl Esters*. 7(32), 28129–28137. . Obtenido de ACS Omega,: <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c02247>
- Narayanan et al. (2020). *Recent advances in the synthesis and applications of mordenite zeolite – review*. Obtenido de RSC Advances, 11(1):250-267.: doi: 10.1039/D0RA09434J
- Pan, Z., & Breuer, M. (2008). Basing Acceptable Error-Tolerant Performance on Significance-Based Error-rate (SBER). *26th IEEE VLSI Test Symposium (vts 2008)*, 59-66
<https://doi.org/10.1109/vts.2008.51>.
- Peñaloza, V. (2022). *Análisis Económico De Productos A Partir De Reciclados. Caso: Recicladora Verde Neumático*. . Ambato: RES NON VERBA.
- Prasad Chavhan, M. Z. (2022). Obtenido de Recycling of Rubber Scrap Tyres and Its Processes of the Utilization.: <https://doi.org/10.1109/icast55766.2022.10039659>
- Revista Gestión. (24 de 06 de 2024). *En Ecuador, el 56% de las llantas fuera de uso avanza a la contaminación*. Obtenido de Revistagestion.ec: <https://revistagestion.ec/cifras/en-ecuador-el-56-de-las-llantas-fuera-de-uso-avanza-la-contaminacion/>
- RPubs . (2021). *RPubs*. Obtenido de <https://rpubs.com/lev/rsm>
- Saleh Al Arni, M. E. (2023). Waste Tyre Recycling. En M. E. Saleh Al Arni, *Advanced technologies for solid, liquid and gas waste treatment*. (págs. 57-72). CRC Press.
- Samokhin, P. B. (2019). Chromatographic Procedure for the Determination of Products of the Direct Synthesis of Dimethyl Ether. *Journal of Analytical Chemistry*, S17–S23
<https://doi.org/10.1134/S1061934819090181>.
- Sastre Galmés, J. (2019). *Design of a batch plant for quinoline derivatives manufacture*. . Obtenido de Ub.edu. : <https://hdl.handle.net/2445/132808>
- Siddique, I. (2024). Exploring Functional Groups and Molecular Structures: A Comprehensive Analysis using FTIR Spectroscopy. *Chemistry Research Journal*, 9(2):70-76
<http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4886526>.

- Tanaka, T. S. (2007). Efficiency of a Hierarchical RSM with a Hessian Matrix. En *Hierarchical Response Surface Methodology for Parameter Optimization* (págs. 213-217). Springer EBooks. https://doi.org/10.1007/978-4-431-49022-7_43.
- Thermo Fisher Scientific. (2023). *Fisher Scientific*. Obtenido de <https://www.fishersci.es/shop/products/dimethyl-adipate-99-thermo-scientific-1/11344489>
- Torres, M. F. (2015). *Ecología política y geografía crítica de la basura en el Ecuador*. . Letras Verdes.
- Turton et al. (2018). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes (5ª ed.)*. Pearson Education.
- Voonna, T. R. (2024). Futuristic Trends in Chemical Material Sciences & Nano Technology Volume 3 Book 9. En T. R. Voonna, *Futuristic Trends in Chemical Material Sciences & Nano Technology* (págs. 173-184 <https://www.doi.org/10.58532/V3BECS9P6CH2>). IIP Series.
- Xu et al. (2023). "Ammonolysis, Alcoholysis, and Glycolysis Using Ionic Liquids.". Obtenido de Chemical Engineering Journal.: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.145333>
- Zhang, T., Smith, L., & Allen, J. . (2020). Simulation of chemical batch processes using Aspen Batch Process Developer: A case study in process optimization. . En *Journal of Chemical Engineering Research* (págs. 45(3), 105-112.).
- Zhong, Y. X. (2021). *Combustion characteristics of aromatic-enriched oil droplets produced by pyrolyzing unrecyclable waste tire rubber*. Obtenido de <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.107093>

Anexos

- **Producción 200 kg**

La evaluación de los equipos utilizados en la escala industrial para una producción de 200 kg permitió identificar las capacidades máximas, los niveles de ocupación y la utilización de cada unidad del proceso. Dentro de los equipos involucrados se encuentran el T-101, el R-101, el F-101, el T-102, el T-103, y el T-104, los cuales cumplen funciones específicas dentro de las etapas del proceso. En la Tabla 28, se detalla el balance de masa correspondiente a esta escala donde se observa una discrepancia del 3.00% lo cual se encuentra dentro de los límites aceptables para modelar la producción a nivel industrial.

En la Tabla 29 junto a las Ilustraciones 35 y 36, refleja que el equipo R-101 destaca con una ocupación del 100% y 730 minutos de operación, siendo esencial para las etapas críticas del proceso, como la despolimerización y esterificación. Por otro lado, equipos como el F-101 y el T-104 reflejan menos demanda con ocupaciones de 8.77% y 0.68% respectivamente, mostrando roles más específicos y de menor relevancia en términos de tiempo de operación.

Tabla 28.

Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 200 kg.

Industrial - 200 kg		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	76271.22	76271.22
Metanol	1720697.72	1697947.09
Ácido Clorhídrico	1295312.09	1295312.09
Nylon 6,6	130750.75	-
Estireno-Butadieno-Caucho	87167.17	87167.17
Agua	9027469.31	9019442.70
Ácido Adípico	-	32547.87
Adipato de Dimetilo	-	61840.54
Hexametildiamina	-	67136.58
Nitrógeno	44478.88	44478.88
Oxígeno	13507.76	13507.76
Total	12395654.89	12395651.89
Discrepancia		3.00%

Tabla 29.

Capacidad de los equipos escala industrial producción de 200 kg.

Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	10,000.00	10,000.00	9,297.45	L	92.97	38.00	5.21
R-101	Reactor	16,000.00	16,000.00	13,401.42	L	83.76	730.00	100.00
F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	193.38	L	19.34	64.06	8.77
T-102	Tanque	16,000.00	16,000.00	11,493.94	L	71.84	30.00	4.11
T-103	Tanque	2,000.00	2,000.00	1,121.52	L	56.08	29.06	3.98
T-104	Tanque	250.00	250.00	161.45	L	64.58	5.00	0.68

Ilustración 35.

Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 200 kg de producción.

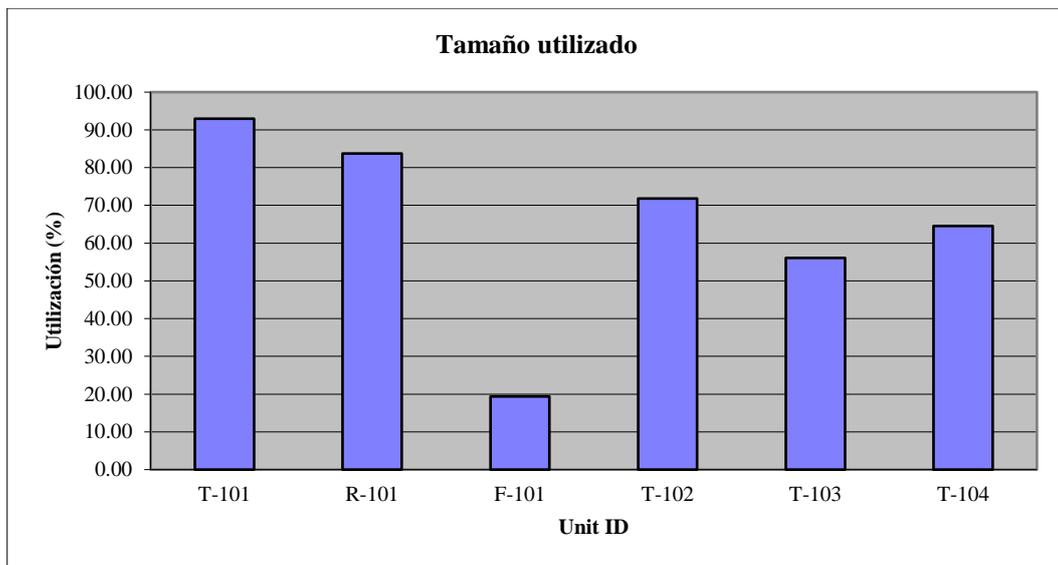
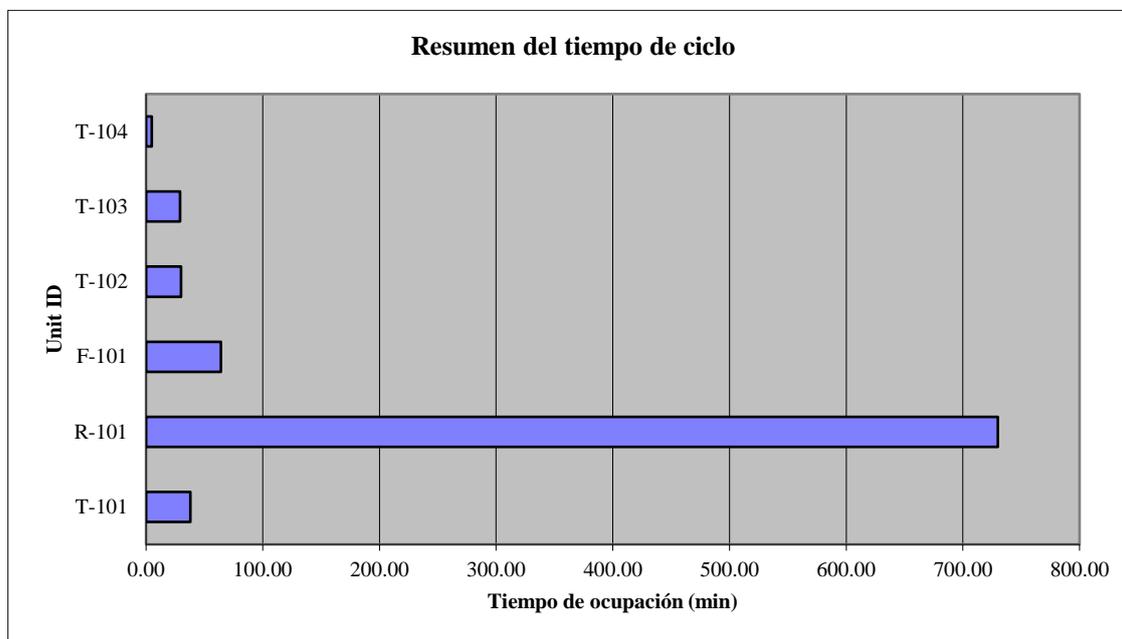


Ilustración 36.

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 200 kg de producción.



- **Producción 250 kg**

Para esta producción de 250 kg, se presenta el siguiente balance de masa visualizado en la Tabla 30, en el cual se tiene 3.75% de discrepancia lo cual se encuentra dentro de los límites aceptables para modelar la producción a nivel industrial. En la Tabla 31 junto a las Ilustraciones 37 y 38, refleja que el equipo R-101 destaca con una ocupación del 100% y 730 minutos de operación, siendo esencial para las etapas críticas del proceso, como la despolimerización y esterificación. Por otro lado, equipos como el F-101 y el T-104 reflejan menos demanda con ocupaciones entre un 10-15% y menos del 1% respectivamente. Esto evidencia que aunque estos equipos son necesarios, uso es muy puntual y no representa un cuello de botella en el proceso para la obtención de adipato de dimetilo.

Tabla 30.

Balance de masa por equipos escala industrial para una producción de 250 kg.

Industrial - 250 kg		
Corriente	Entrada	Salida
Componente	Cantidad por Batch (g)	Cantidad por Batch (g)
Zeolita Mordenita	95339.02	95339.02
Metanol	2150872.13	2122433.85
Ácido Clorhídrico	1619140.10	1619140.10
Nylon 6,6	163438.44	-
Estireno-Butadieno-Caucho	108958.96	108958.96
Agua	11284336.56	11274303.29
Ácido Adípico	-	40684.84
Adipato de Dimetilo	-	77300.67
Hexametilendiamina	-	83920.72
Nitrógeno	58029.34	58029.34
Oxígeno	17622.89	17622.89
Total	15497737.44	15497733.69
Discrepancia		3.75%

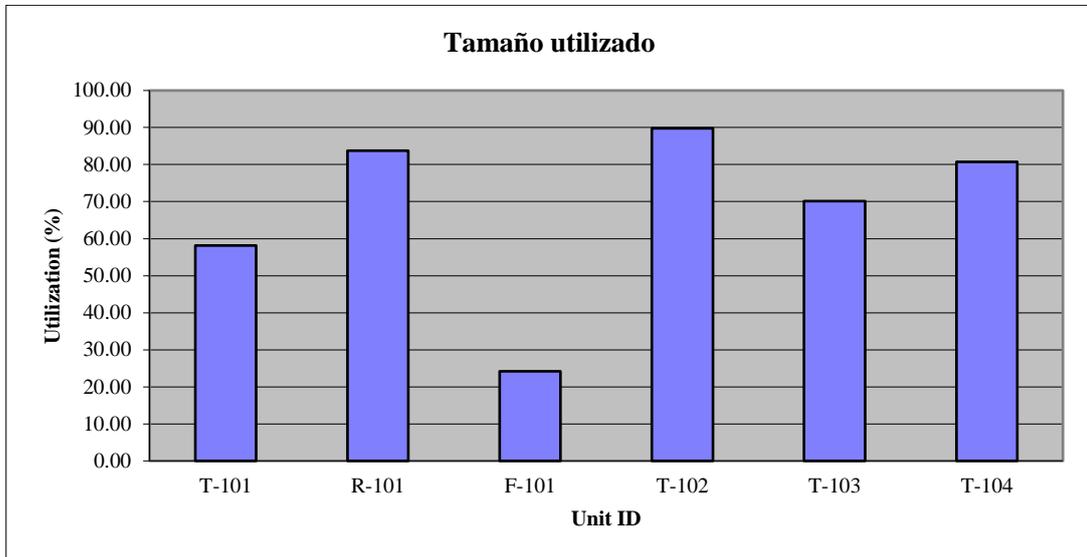
Tabla 31.

Capacidad de los equipos escala industrial producción de 250 kg.

Unidades	Clase	Capacidad	Máx. capacidad	Capacidad utilizada	Unidad de medida	Tamaño utilizado (% Max)	Tiempo de ocupación (min)	Tiempo de utilización (%)
T-101	Tanque	20,000.00	20,000.00	11,621.81	L	58.11	38.00	5.21
R-101	Reactor	20,000.00	20,000.00	16,751.78	L	83.76	730.00	100.00
F-101	Filtro	1,000.00	1,000.00	241.73	L	24.17	71.32	9.77
T-102	Tanque	16,000.00	16,000.00	14,367.43	L	89.80	30.00	4.11
T-103	Tanque	2,000.00	2,000.00	1,401.90	L	70.10	36.32	4.98
T-104	Tanque	250.00	250.00	201.81	L	80.72	5.00	0.68

Ilustración 37.

Capacidad usada de los equipos en el proceso escala industrial de 250 kg de producción.

**Ilustración 38.**

Resumen del tiempo de ocupación de los equipos en el proceso escala industrial de 250 kg de producción.

