

MODELADO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO ALCOHOL A COMBUSTIBLE DE AVIACIÓN (ATJ) A PARTIR DE BIOETANOL

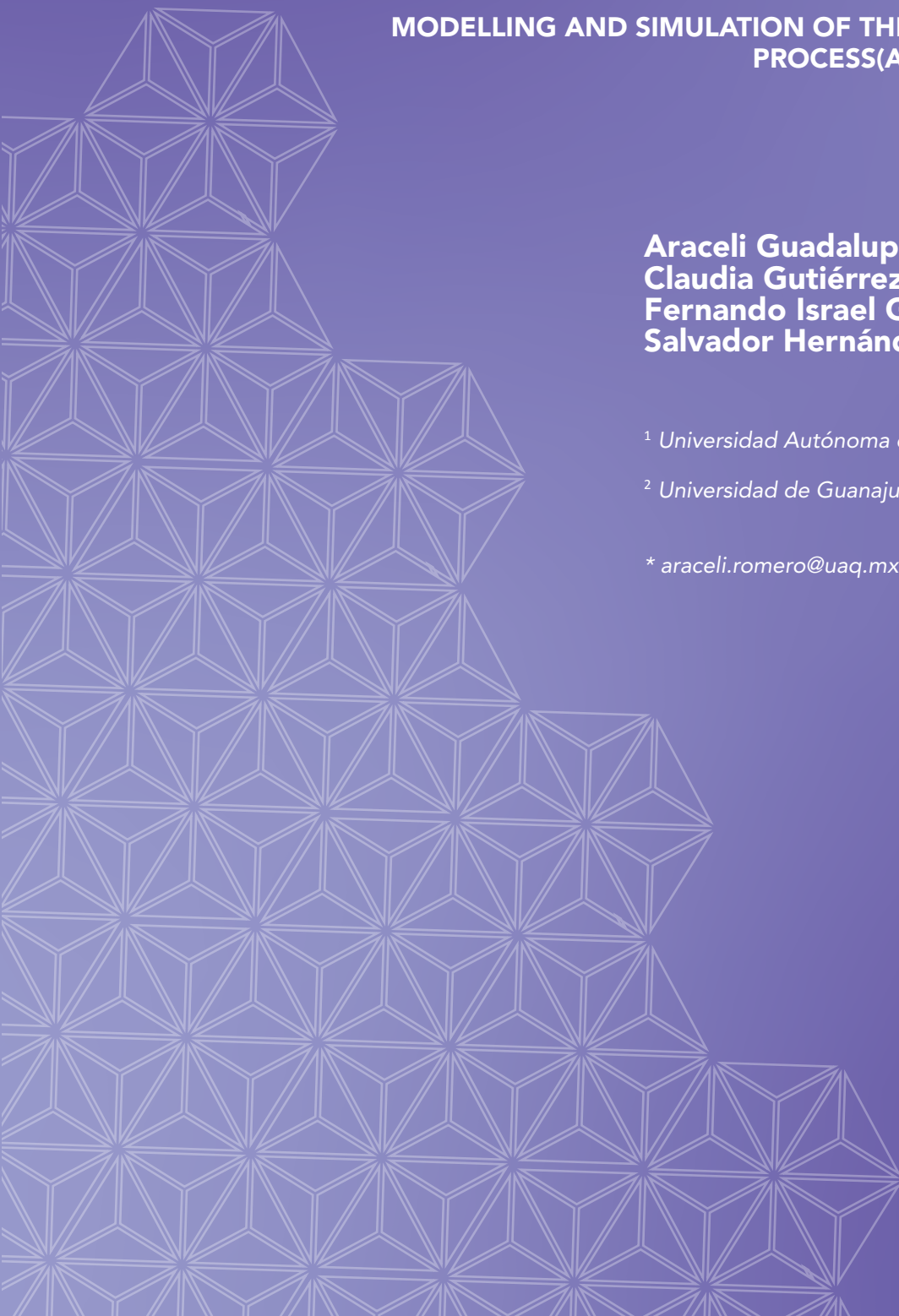
MODELLING AND SIMULATION OF THE ALCOHOL TO JET-FUEL
PROCESS(ATJ) FROM BIO-ETHANOL

Araceli Guadalupe Romero Izquierdo^{1*}
Claudia Gutiérrez Antonio¹
Fernando Israel Gómez Castro²
Salvador Hernández Castro²

¹ Universidad Autónoma de Querétaro, México

² Universidad de Guanajuato, México

* araceli.romero@uaq.mx





RESUMEN

La gran dependencia del ser humano hacia los combustibles fósiles como fuente de energía ha producido severos daños ambientales. Varios autores han propuesto y estudiado alternativas limpias y sostenibles. En 2020, frente a la pandemia por covid-19, se identificó a las energías renovables como las únicas resilientes y de bajo impacto. En este sentido, el sector del transporte aéreo continúa con el objetivo de reducir sus emisiones de CO₂ rumbo al 2050 utilizando como estrategia prioritaria el combustible de aviación renovable. Uno de los procesos certificados por la Sociedad Americana de Pruebas y Materiales (ASTM) para su obtención es el de alcohol a combustible de aviación (ATJ), que utiliza como materia prima alcoholes generados desde biomasa; sin embargo, este ha sido poco desarrollado a nivel comercial para producir bioturbosina. Así, los esfuerzos deben enfocarse en proponer estrategias para reducir sus costos. Una manera de analizarlas se basa en el uso de modelos de simulación. En este trabajo se presentan el modelado y la simulación del ATJ a partir de

Con el objetivo de reducir las emisiones de dióxido de carbono hacia el año 2050, la industria de la aviación busca migrar de los combustibles fósiles hacia alternativas más ecológicas. Aquí se describe el proceso de simulación de una manera de convertir alcohol natural en combustible de aviación.

bioetanol, que se obtiene previamente de la conversión de residuos lignocelulósicos, para la producción de combustible de aviación renovable. La simulación se lleva a cabo en el software Aspen Plus V.10.0 y se evalúa en términos del costo total anual y las emisiones de CO₂ generadas. Según los resultados, se obtiene 21.1

% de conversión a bioturbosina respecto al bioetanol de alimentación, lo que representa el 35.3 % de los productos generados. Por su parte, el 86.3 % del costo anual

total corresponde al del hidrógeno requerido. En lo que respecta a las emisiones de CO₂, se tiene un ahorro anual estimado de 65 741.04 t debido a que los requerimientos eléctricos constituyen solo el 23.7 % de la energía generada por las turbinas acondicionadoras de las corrientes de proceso. De acuerdo con este análisis, el ATJ es una alternativa promisoría para la obtención de bioturbosina.

Palabras clave: bioturbosina, modelado de procesos, proceso ATJ, simulación de procesos.

ABSTRACT

The energy dependence of mankind regarding fossil fuels has caused severe environmental damage; thus, alternative, clean and sustainable energy sources have been proposed and studied. This situation has been confirmed in 2020 due to the pandemic caused by COVID-19, wherein the renewables energies have been identified as the only resilient source with low impact. In this sense, the transport sector, specifically aviation continues with the objective of reducing its CO₂ emissions for 2050, using as primary strategy the biojet fuel. One of the certified processes by the American Society for Testing and Materials to produce biojet fuel is the Alcohol to Jet process (ATJ), which uses alcohols from biomass sources as raw material. However, this process has been barely developed; for this reason, efforts should focus on strategies to reduce their production costs. Simulation models are useful tools to reach such objective. In this work, the modelling and simulation of the ATJ process to produce biojet fuel from bio-ethanol generated previously from lignocellulosic residues con-

version is presented. The process simulation is carried out in Aspen Plus V.10.0 software. This process is evaluated and analyzed by the total annual cost and CO₂ emissions counting. Results show that, 21.1% biojet fuel conversion is obtained, regarding to bio-ethanol feeding, which represented 35.3% of total obtained products. On the other hand, 86.3% of total anual cost is due to hydrogen. In regard to CO₂ emissions has been estimated an annual saving of 65 741.04 ton CO₂, due to total power requirements being only 23.7% of electricity generated by the turbines, collocated to conditioning process streams. Based on this analysis, the ATJ process is a promissory option to produce biojet fuel.

Keywords: biojet fuel, process modeling, ATJ process, process simulation.

INTRODUCCIÓN

Desde antes de 2019, el incremento en la demanda de energía de las sociedades modernas, las severas problemáticas ambientales causadas por el uso excesivo de combustibles fósiles, así como su pronosticado agotamiento, condujeron a la búsqueda de fuentes alternativas, limpias y sustentables. En 2020, debido al colapso de las economías y al cambio en el modo de vida ocasionado por la pandemia de covid-19, la Agencia Internacional de Energía (IEA, por sus siglas en inglés) identificó a las energías renovables como las únicas con demanda creciente, impulsada por su resiliencia y bajo impacto. Señaló, además, que la transición a estas debe estar al frente de los planes de recuperación económica [1].

En este sentido, el sector de aviación continúa con el objetivo de reducir considerablemente sus emisiones de CO₂ rumbo al 2050, al utilizar el combustible renovable como estrategia prioritaria [2]. Su producción está certificada por la Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés) a través de cinco rutas de procesamiento [3]; no obstante, los métodos HEFA (hidroprocesamiento de ésteres y ácidos grasos), Fischer-Tropsch (FT) y ATJ (alcohol a combustible de aviación) son los que presentan mayor desarrollo comercial [3, 4]. Es importante señalar que el ATJ es el único cuyas zonas reactivas han sido previamente examinadas a escala industrial como parte de otros procesos químicos [5]; sin embargo, en conjunto con la producción de bioturbosina a partir de materia prima renovable, solo las compañías privadas, como Byogy Renewables Inc. y Gevo Inc., lo han comercializado [5]. Los insumos para la obtención de bioturbosina a partir del ATJ son alcoholes como el metanol, etanol, isobutanol y otros de cadenas largas que se extraen de biomasa lignocelulósica, azúcares y almidones [6].

En aras de reducir los costos de producción, es necesario contar con modelos de simulación. Por ello, en este trabajo se empleó el simulador Aspen Plus V.10.0 para

presentar el modelado y la simulación del ATJ para la producción de bioturbosina a partir de bioetanol obtenido de residuos lignocelulósicos. Este proceso se evaluó en términos económicos y de emisiones de CO₂. Cabe destacar que este trabajo no describe la ruta de obtención de bioetanol a partir de residuos lignocelulósicos.

MODELADO DEL PROCESO ATJ

El efluente de un reactor de fermentación de residuos lignocelulósicos, el cual se somete a etapas previas de concentración y separación, es la fuente de alimentación del ATJ; esta corriente contiene 257 673 kg/h de etanol con trazas de glicerol, agua y amoníaco. El proceso consta de tres etapas reactivas: deshidratación, oligomerización e hidrogenación, y una de separación por destilación. En la Figura 1 se presenta el diseño conceptual.

En la primera etapa reactiva, el etanol se deshidrata a 450 °C, 11.4 bar y una corriente de vapor saturado para alcanzar 99.5 % de conversión a etileno [7]. El etileno producido se incorpora a la segunda etapa y se oligomeriza a 120 °C y 35 bar [8]. Las reacciones junto con sus datos de conversión se presentan en las Tablas 1 y 2 [6].

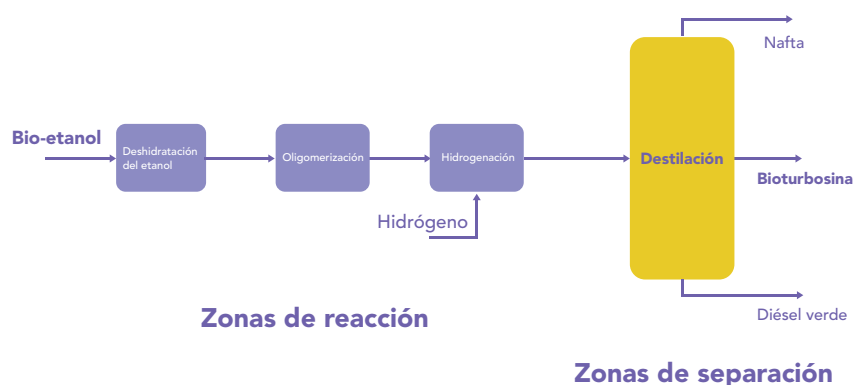


Figura 1. Diseño conceptual del proceso ATJ.



Posteriormente, los alquenos se hidrogenan a 100 °C y 15 bar, utilizando una corriente de hidrógeno hasta alcanzar el 99 % de conversión [9]. Las reacciones de hidrogenación se presentan en la Tabla 3 [6]. El efluente de hidrocarburos de la tercera zona es separado en un tren de destilación compuesto por dos columnas para separar las naftas (C4-C7), la bioturbosina (C8-C16) y el diésel verde (C17-C20).

SIMULACIÓN DEL PROCESO ATJ

La simulación se realiza en el software Aspen Plus V.10.0. El efluente de alimentación, que contiene 98.15 % en peso de etanol, se introduce a 28 °C y 1 bar de presión y se ajusta a las condiciones de operación del reactor de deshidratación. El acondicionamiento consiste en elevar la presión a 11.4 bar mediante la bomba PUMP-1 (módulo *Pump*) y la temperatura hasta 450 °C en el intercambiador de calor EX-1, (módulo *HeatX*). De acuerdo con las condiciones operativas descritas en la sección anterior, así como los datos presentados en las Tablas 1, 2 y 3, la simulación de las tres zonas reactivas se lleva a cabo en el módulo RStoic, en el que se nombra R-DESH, R-OLIGOM y R-HIDROG a cada reactor, respectivamente.

Es preciso señalar que el etileno obtenido del reactor R-DESH debe ser purificado de trazas de etanol y productos secundarios generados. La purificación se logra disminuyendo la presión hasta 1 bar en la turbina TURBI-1 (módulo *Comp*), seguido de lo cual se alimenta a una columna de destilación parcial vapor-líquido simulada con el módulo *RadFrac* y diseñada con 14 etapas para alcanzar el 99 % de recuperación de etileno. La corriente de etileno purificada se adecúa a las condiciones operativas del

Tabla 1. Reacciones y datos de conversión de la etapa de deshidratación [6].

REACCIONES	CONVERSIÓN	REACTIVO DE REFERENCIA
$C_2H_6O \rightarrow C_2H_4 + H_2O$	0.988	Etanol
$2C_2H_6O \rightarrow (C_2H_5)_2O + H_2O$	0.00052	
$C_2H_6O \rightarrow (C_2H_4O) + H_2$	0.002	

Tabla 2. Reacciones y datos de conversión del reactor de oligomerización [6].

REACCIÓN	CONVERSIÓN	REACTIVO DE REFERENCIA
$2C_2H_4 \rightarrow C_4H_8$	0.318513	Etileno
$2.5C_2H_4 \rightarrow C_5H_{10}$	0.00150578	
$3C_2H_4 \rightarrow C_6H_{12}$	0.235531	
$3.5C_2H_4 \rightarrow C_7H_{14}$	0.00150578	
$4C_2H_4 \rightarrow C_8H_{16}$	0.180146	
$4.5C_2H_4 \rightarrow C_9H_{18}$	0.00150578	
$5C_2H_4 \rightarrow C_{10}H_{20}$	0.042545	
$5.5C_2H_4 \rightarrow C_{11}H_{22}$	0.00150578	
$6C_2H_4 \rightarrow C_{12}H_{24}$	0.042545	
$7C_2H_4 \rightarrow C_{14}H_{28}$	0.042545	
$7.5C_2H_4 \rightarrow C_{15}H_{30}$	0.00150578	
$8C_2H_4 \rightarrow C_{16}H_{32}$	0.042545	
$8.5C_2H_4 \rightarrow C_{17}H_{34}$	0.00150578	
$9C_2H_4 \rightarrow C_{18}H_{36}$	0.042545	
$9.5C_2H_4 \rightarrow C_{19}H_{38}$	0.00150578	
$10C_2H_4 \rightarrow C_{20}H_{40}$	0.042545	

reactor R-OLIGOM mediante el compresor COMP-1 (módulo *Compr*) y el intercambiador EX-2. La corriente de salida del R-OLIGOM se mezcla con la corriente de hidrógeno, previamente acondicionada en el COMP-2 y el intercambiador EX-3, antes de introducirlas al reactor R-HIDROG.

La presión del efluente del reactor de hidrogenación se reduce hasta 1 bar mediante la turbina TURB-2 antes de incorporarlo al tren de separación con dos columnas de destilación, las cuales se simulan en el módulo *RadFrac*: COL-1, con 42 etapas; y COL-2, con 85.

Tabla 3. Reacciones y datos de conversión del reactor de hidrogenación [6].

REACCIONES	CONVERSIÓN	REACTIVO DE REFERENCIA
$C_4H_8 + H_2 \rightarrow C_4H_{10}$	0.99	n-Buteno
$C_5H_{10} + H_2 \rightarrow C_5H_{12}$		n-Penteno
$C_6H_{12} + H_2 \rightarrow C_6H_{14}$		n-Hexeno
$C_7H_{14} + H_2 \rightarrow C_7H_{16}$		n-Hepteno
$C_8H_{16} + H_2 \rightarrow C_8H_{18}$		n-Octeno
$C_9H_{18} + H_2 \rightarrow C_9H_{20}$		n-Noneno
$C_{10}H_{20} + H_2 \rightarrow C_{10}H_{22}$		n-Deceno
$C_{11}H_{22} + H_2 \rightarrow C_{11}H_{24}$		n-Undeceno
$C_{12}H_{24} + H_2 \rightarrow C_{12}H_{26}$		n-Dodeceno
$C_{14}H_{28} + H_2 \rightarrow C_{14}H_{30}$		n-Tetradeceno
$C_{15}H_{30} + H_2 \rightarrow C_{15}H_{32}$		n-Pentadeceno
$C_{16}H_{32} + H_2 \rightarrow C_{16}H_{34}$		n-Hexadeceno
$C_{17}H_{34} + H_2 \rightarrow C_{17}H_{36}$		n-Heptadeceno
$C_{18}H_{36} + H_2 \rightarrow C_{18}H_{38}$		n-Octadeceno
$C_{19}H_{38} + H_2 \rightarrow C_{19}H_{40}$		n-Nonadeceno
$C_{20}H_{40} + H_2 \rightarrow C_{20}H_{42}$	n-Eicoseno	

El diseño de las columnas fue realizado mediante los métodos cortos para alcanzar el 99 % de recuperación de los componentes clave en cada corte. Los modelos termodinámicos que se utilizaron para el modelado de las zonas reactivas y la zona de separación fueron los de Peng-Robinson y BK10, respectivamente [5,10]. En la Figura 2 se presenta el diagrama de flujo del ATJ simulado en Aspen Plus.

EVALUACIÓN ECONÓMICA Y AMBIENTAL

La evaluación económica se llevó a cabo mediante la estimación del costo total anual (TAC, por sus siglas en inglés), es decir, la suma del costo de operación anual (COP) y del costo de capital anualizado (CCA), tal como se muestra en la Ecuación 1.

$$TAC = C_{OP} + C_{CA} \quad (1)$$

El COP es la adición del costo de las utilidades (vapor, agua de enfriamiento, hidrógeno, electricidad) de la materia prima y de

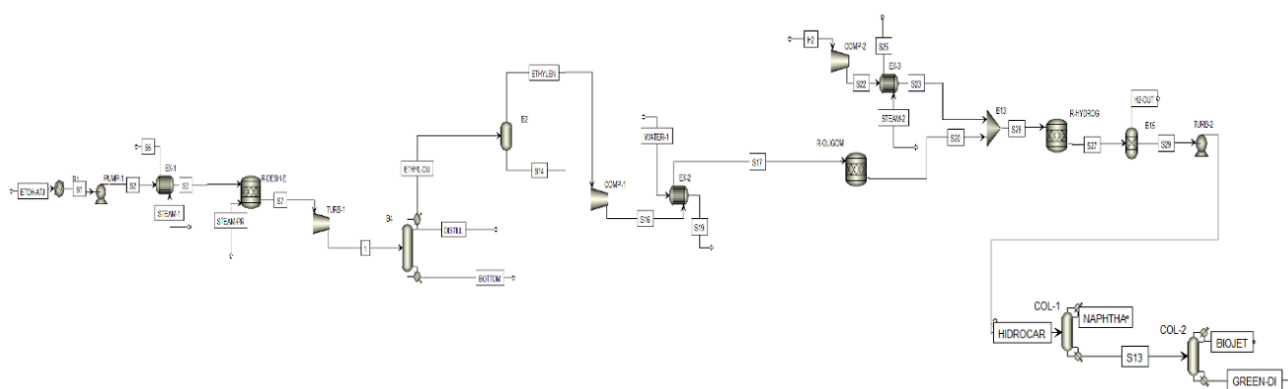


Figura 2. Diagrama de flujo del proceso ATJ.



otros insumos requeridos. En este caso, se consideró que el efluente de bioetanol empleado como materia prima es libre de costo ya que proviene de un proceso de fermentación dentro de un esquema de aprovechamiento integral. Asimismo, no se cuenta con otros insumos adicionales.

Por otro lado, el cca se define como el costo del equipo de proceso. Se calcula por medio de Aspen Economics V.10.0, al que se añadieron 18 % debido a contingencias e impuestos de instalación (A1), así como 61 % por gastos de mantenimiento de los equipos (A2) [11]. La anualización del costo de capital se realiza considerando que el tiempo de retorno de la inversión es de 5 años [6].

La evaluación ambiental se realizó a través del conteo de las emisiones de CO₂ generadas en la producción del vapor y la electricidad requeridos. En el caso del primero, es preciso conocer la temperatura, la presión, el nivel de saturación y la cantidad requeridos, aplicando la metodología reportada en [12] con la premisa de que una caldera de gas natural cuenta con un factor de emisión de 2.15 kg CO₂/Nm³. Respecto a las emisiones generadas por kW de electricidad, se considera un factor estimado de 0.166 kg CO₂/kWh de acuerdo con las actividades productivas de México [6].

RESULTADOS

En esta sección se presentan los resultados tras el modelado y simulación del proceso ATJ para la obtención de bioturbosina a partir de bioetanol extraído de residuos lignocelulósicos. Conforme a los datos de la simulación de la corriente de hidrocarburos

de la última zona reactiva, 56.16 % corresponden a naftas, 35.13 % a bioturbosina y 8.72 % a diésel verde; esto implica una conversión a bioturbosina respecto del bioetanol alimentado de 21.1 %. En la Tabla 4 se presenta la distribución de compuestos producidos.

Por otro lado, los requerimientos de energía eléctrica de bombas y compresores representan el 25.8 % de la electricidad generada por las turbinas acondicionadoras de las corrientes de proceso, por lo que

el 74.2 % restante se dispone para su venta, un valor negativo en la estimación del TAC. En la Tabla 5 se observa que el costo del hidrógeno y del agua de enfriamiento, los cuales representan el 83.16 % y el 17.79 % respectivamente, son los principales factores que alteran los valores de este indicador. Por su parte, el costo de los equipos solamente alcanza el 0.81 %. En lo referente a la evaluación ambiental, el conteo de emisiones causadas por los requerimientos de vapor y agua de enfriamiento se presenta en la Tabla 6.

Tabla 4. Distribución de productos obtenidos en el proceso ATJ.

COMPONENTE	PRODUCTO	FLUJO MÁSICO (KG/H)
C ₄	Naftas	87 026.77
C ₅		
C ₆		
C ₇		
C ₄ -alqueno		
C ₅ -alqueno		
C ₆ -alqueno		
C ₇ -alqueno	Bioturbosina	54 434.61
C ₈		
C ₉		
C ₁₀		
C ₁₁		
C ₁₂		
C ₁₄		
C ₁₅		
C ₁₆		
C ₈ -alqueno		
C ₉ -alqueno		
C ₁₀ -alqueno		
C ₁₁ -alqueno		
C ₁₂ -alqueno		
C ₁₄ -alqueno		
C ₁₅ -alqueno		
C ₁₆ -alqueno	Diésel verde	13 511.11
C ₁₇		
C ₁₈		
C ₁₉		
C ₂₀		
C ₁₇ -alqueno		
C ₁₈ -alqueno		
C ₁₉ -alqueno		
C ₂₀ -alqueno		

Tabla 5. Estimación del TAC del proceso ATJ.

TAC (\$USD/AÑO)	
COSTO DE CAPITAL	
Equipos (\$USD)	\$ 16 912 956.53
A1 (\$USD)	\$ 3 044 332.18
A2 (\$USD)	\$ 10 316 903.48
CCA	\$ 6 054 838.44
COSTO DE OPERACIÓN	
Hidrógeno	\$ 625 225 014.00
Vapor	\$ 16 483 304.80
Agua de enfriamiento	\$ 133 760 664.74
Electricidad	-\$ 29 702 277.58
TAC	\$ 751 821 544.40

Tabla 6. Estimación de emisiones de CO₂ del proceso ATJ.

MTON CO ₂ /AÑO	
Requerimientos de vapor	966.05

Solo se muestran las emisiones causadas por el vapor, ya que, gracias a la generación de energía eléctrica por las turbinas acondicionadoras de las corrientes de proceso, se tiene un ahorro anual estimado de 65 741.04 t de CO₂.

CONCLUSIONES

En este trabajo se han presentado el modelado, la simulación y la evaluación del proceso ATJ para la producción de bioturbosina considerando como materia prima bioetanol producido a partir de residuos lignocelulósicos. Según los resultados de simulación, se obtuvo 21.1 % de conversión a bioturbosina respecto al bioetanol sometido al proceso; esta cifra representa a su vez el 35.13 % de los productos obtenidos. Por otro lado, los requerimientos de electricidad de bombas y compresores conforman el 25.8 % de la electricidad generada por las turbinas acondicionadoras de las corrientes, lo que genera un ahorro de hasta 65 741.04 t de CO₂ por año. En lo que refiere al

TAC, el costo del hidrógeno es el principal factor que lo afecta, pues constituye el 83.16 % de su valor. De acuerdo con el análisis presentado tras la simulación del proceso ATJ, la obtención de bioturbosina a partir de este procedimiento es una opción promisoriosa si se utiliza bioetanol como producto intermediario de la conversión de la biomasa lignocelulósica.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece al Conacyt por el apoyo brindado mediante la estancia postdoctoral de Araceli Guadalupe Romero Izquierdo, así como al proyecto 292862. De igual manera se agradece el apoyo brindado por la Universidad Autónoma de Querétaro y la Universidad de Guanajuato.

REFERENCIAS

- [1] IEA, "COVID-19-Topics-IEA", *International Energy Agency*, 2021.
- [2] K. Dube, G. Nhamo, y D. Chikodzi, "COVID-19 pandemic and

prospects for recovery of the global aviation industry", *J. Air Transp. Manag.*, vol. 92, 102022, 2021.

- [3] C. Gutiérrez Antonio, A. G. Romero Izquierdo, F. I. Gómez Castro, y S. Hernández, *Production Processes of Renewable Aviation Fuel*, Elsevier, 2021.
- [4] D. Chiaramonti, "Sustainable Aviation Fuels: the challenge of decarbonization", *Energy Procedia*, vol. 158, pp. 1202-1207, 2019.
- [5] A. G. Romero Izquierdo, F. I. Gómez Castro, C. Gutiérrez Antonio, S. Hernández, y M. Errico, "Intensification of the alcohol-to-jet process to produce renewable aviation fuel", *Chem. Eng. Process. Process Intensif.*, vol. 160, 108270, 2021.
- [6] A. G. Romero Izquierdo, "Diseño, modelado y simulación de un esquema de biorefinería para el aprovechamiento integral de mezclas de materias primas renovables", Universidad de Guanajuato, Tesis Doctoral, 2020.
- [7] M. Arvidsson, y B. Lundin, "Process integration study of a biorefinery producing ethylene from lignocellulosic", Universidad Tecnológica Chalmers, Tesis de maestría, 2011.
- [8] J. Heveling, C. P. Nicolaidis, y M. S. Scurrill, "Catalysts and conditions for the highly efficient, selective and stable heterogeneous oligomerisation of ethylene", *Appl. Catal. A Gen.*, vol. 173(1), pp. 1-9, 1998.
- [9] S. Moussa, M. A. Arribas, P. Concepción y A. Martínez, "Heterogeneous oligomerization of ethylene to liquids on bifunctional Ni-based catalysts: The influence of support properties on nickel speciation and catalytic performance", *Catal. Today*, vol. 277, pp. 78-88, 2016.
- [10] E. Carlson, "Don't Gamble with Physical Properties for Simula-



tions", *Chem. Eng. Progress*, October, pp. 35-46, 1996.

- [11] R. Turton, R. C. Bailie, W. B. Whiting, J. A. Shaeiwitz y D. Bhattacharyya, *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, Fourth Edition, Prentice Hall, 2012.
- [12] C. Gutiérrez Antonio, A. G. Romero Izquierdo, F. Israel Gómez Castro y S. Hernández, "Energy Integration of a Hydrotreatment Process for Sustainable Biojet Fuel Production", *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 55(29), pp. 8165-8175, 2016.