



Instituto Politécnico Nacional

Escuela Superior de Ingeniería Química
e Industrias Extractivas



ESTUDIO TÉCNICO Y ECONÓMICO DEL HIDROTRATAMIENTO
DE ÉSTERES Y ÁCIDOS GRASOS

Tesis

que para obtener el grado de

Maestro en Ciencias en Ingeniería Química

Presenta

I.Q. JORGE EDUARDO CASTILLO MONTIEL

Director

DR. ROGELIO SOTELO BOYÁS



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de siendo las horas del día del mes de del

se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de la Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Posgrado de:

para examinar la tesis titulada:

por el (la) alumno (a):

Apellido Paterno:	CASTILLO	Apellido Materno:	MONTIEL	Nombre (s):	JORGE EDUARDO
-------------------	----------	-------------------	---------	-------------	---------------

Número de registro:

Aspirante del Programa Académico de Posgrado:

Después de la lectura y revisión individual, así como el análisis e intercambio de opiniones, los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR** **NO APROBAR** la tesis, en virtud de los motivos siguientes:

Comisión Revisora de Tesis

Dr. Rogelio Sotelo Bayás
14044-EC-19 COLEGIADO TITULAR
DIRECTOR DE TESIS

Dr. Sergio Odin Flores Valle
13077-EC-18 COLEGIADO TITULAR

Dr. Roberto Limas Ballesteros
14491-EI-19/6 COLEGIADO TITULAR

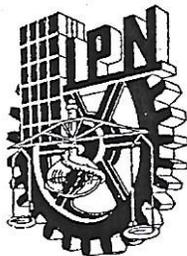
Dr. Juan Ramón Avendaño Gómez
14323-EF-19/6 COLEGIADO TITULAR

Dr. Roberto Vladimir Avalos Bravo
13075-EA-18 COLEGIADO TITULAR

Dr. Arturo Marzo Robledo
13079-EB-18 COLEGIADO TITULAR

Presidente del Colegio de Profesores

ESQUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA
INDUSTRIAS QUÍMICAS Y PETROLÍFERAS
SECCIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESION DE DERECHOS

En la Ciudad de México el día 8 del mes de octubre del año 2019, el que suscribe Jorge Eduardo Castillo Montiel alumno del Programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química con número de registro B170913, adscrito a la Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, manifiesta que es autor intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección del Dr. Rogelio Sotelo Boyás y cede los derechos del trabajo titulado Estudio Técnico y Económico del Hidrotramiento de Ésteres y Ácidos Grasos, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección ing.jcastillo@outlook.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Jorge Eduardo Castillo Montiel

Nombre y firma

Agradecimientos

Primeramente, doy gracias a Dios por permitirme tener salud, fuerza y valor para poder concluir esta etapa de mi vida.

A mi asesor el Dr. Rogelio Sotelo Boyás por toda la colaboración y consejos brindados para desarrollar todo este proyecto de investigación, además de los consejos personales de superación y nunca rendirme en este camino.

Agradecimientos al CONCACYT por el apoyo económico brindado para la realización de este trabajo de investigación.

A los sinodales quienes revisaron y me dieron sus comentarios pertinentes en este trabajo de investigación.

Agradecimiento a mis profesores de posgrado por brindarme los conocimientos necesarios para desarrollar este trabajo de tesis mediante sus clases.

Agradezco a mis padres por apoyarme incondicionalmente moral y económicamente en todas las etapas de mi vida que he logrado alcanzar.

Agradezco especialmente a mi novia Zenyacet Santana Paniagua por todo su apoyo y sus palabras de aliento que fueron importante para no abandonar el camino en momentos difíciles y poder seguir esforzándome y sobre todo su amor incondicional.

A mis hermanos, por ayudarme con sus consejos, su amistad y confianza para afrontar los problemas a lo largo de mi vida.

Agradecimiento incondicional a mis amigos de posgrado (Federico, Fernanda, Margarita, Karen y Citlali) por hacer el camino más fácil, a través de su amistad y los buenos momentos compartidos en estos dos años juntos. A los nuevos amigos adquiridos a lo largo de esta etapa como Hugo, Javier y Shurym.

A mis amigos Karina, Ozni e Iliana por brindarme su apoyo y amistad por las diferentes etapas de mi vida y en especial en esta.

*Y todo lo que hagan, de palabra u obra, háganlo en el nombre del Señor
Jesús, dando gracias a Dios el padre por medio de él.*

Colosenses 3:17

Dedicatorias

Esta tesis se la dedico primeramente a Dios quien me ha dado salud y fuerza para nunca rendirme en estos momentos.

A mis padres quienes me dieron, educación, apoyo y consejos. A mi madre la persona que me sigue animando a pesar de mi edad y brindando su apoyo con las palabras necesarias a mi vida y su apoyo económico incondicional en todo momento, a mi padre que siempre ha estado orgulloso de mi y sigue brindando su apoyo en todo tiempo.

A mi novia Zenyacet Santana Paniagua por brindarme su apoyo incondicional y alentarme a nunca rendirme en los momentos difíciles de esta etapa de mi vida. Gracias infinitas a ti mi amor por estar conmigo brindando todo tu amor y paciencia en todo tiempo, aunque quería rendirme.

A mis hermanos (Viviana y David) por brindarme su apoyo incondicional en este camino.

A mis familiares y amigos por ayudarme condicional o incondicionalmente con sus palabras y apoyos.

Dedicatoria a mi institución por brindarme todas las herramientas para desarrollarme profesionalmente.

Con el hombre esto es posible, con Dios todo es posible

Resumen

El hidrotreatmento de ésteres y ácidos grasos es una alternativa tecnológica para la producción de combustibles limpios. El objetivo de este estudio fue llevar a cabo un estudio técnico y económico para determinar las condiciones de operación, capacidad de la planta y precios de materia prima requeridos para alcanzar un proceso rentable. El aceite de *Jatropha Curcas L.* y el biodiesel fueron usados como materia prima. Este estudio fue aplicado para la construcción de un proceso basado en datos de la Ciudad de México. Se consideraron dos escenarios de proceso, el escenario A considera principalmente el proceso de hidrotreatmento de ésteres y ácidos grasos, mientras que el escenario B considera un proceso de transesterificación e hidrotreatmento de ésteres metílicos de ácidos grasos. Se seleccionó un catalizador de NiMo/Al₂O₃ para un reactor de hidrotreatmento donde el diesel verde es el producto principal, mientras que en el reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración con un catalizador de NiMo/SAPO-11 el producto principal es la bioturbosina. El modelado de procesos se llevó a cabo en Aspen Plus, mientras el estudio económico se realizó en Aspen Process Economic Analyzer. Se realizó el cálculo de capital de inversión, costos de operación, escalas y rentabilidad del proceso para la producción de bioturbosina y coproductos. Adicionalmente, se realizó la integración de calor mediante el método Pinch a través de Aspen Energy Analyzer para reducir los costos de operación. Finalmente, la metodología de superficies de respuesta fue utilizada para evaluar los efectos de la capacidad de la planta y el precio de compra del aceite, con el fin de alcanzar la rentabilidad y un precio mínimo de venta competitivo con la turbosina. El estudio económico reveló que el escenario A, es más rentable en comparación con el escenario B. Los costos del escenario seleccionado (A) fueron de \$614 millones y \$2,722 millones de pesos, de capital y operación, respectivamente. Los costos de operación fueron generados principalmente por el precio de la materia prima (aceite). A partir del análisis de optimización se observó que para una planta con capacidad de producción de 63 millones de litros de bioturbosina por año se alcanza la rentabilidad solo si se compra el litro de aceite como máximo en \$5 pesos. Bajo estas condiciones se generó un proyecto con un índice de rentabilidad de 1.3 y un precio de \$12 pesos por litro de bioturbosina. Es por lo tanto posible considerar en México la instalación de plantas para producir bioturbosina a un precio competitivo y un proceso amigable con el medio ambiente.

Abstract

Hydrotreatment of esters and fatty acids for the biojet fuel production is a technological alternative to obtain clean fuels. The objective of this study was to carry out a techno-economic studies to determine the optimal operating conditions, plant capacity and raw material competitive prices that lead to a profitable process. *Jatropha Curcas L.* oil and biodiesel were used as raw material. This study was applied for the construction of a process based on data from Mexico City. Two process scenarios were considered, scenario A considers mainly the process of hydrotreatment of esters and fatty acids, while scenario B considers a process of transesterification and hydrotreatment of fatty acid methyl esters. A NiMo/Al₂O₃ catalyst was selected for a hydrotreatment reactor where green diesel is the main product, while in the hydroisomerization and hydrodesintegration reactor with a NiMo/SAPO-11 catalyst the main product is biojet fuel. The process modeling was performed in Aspen Plus, while the economic study was performed in Aspen Process Economic Analyzer. The calculation of investment capital, operating costs, scales and profitability of the process for the production of biojet fuel and co-products was performed. Additionally, heat integration was performed using the Pinch method through Aspen Energy Analyzer to reduce operating costs. Finally, the response surface methodology was used to evaluate the effects of the plant's capacity and the purchase price of the oil, in order to achieve profitability and a minimum competitive selling price with the jet fuel. The economic study revealed that scenario A is more profitable compared to scenario B. The costs of the selected scenario (A) were \$614 million and \$2,722 million MXP, for capital and operating, respectively. The operating costs were generated mainly by the price of the raw material (oil). From the optimization analysis it was observed that for a plant with a production capacity of 64 million liters of biojet fuel per year, the plant profitability is achieved only with a maximum oil price of \$ 5 pesos per liter. Under these conditions, a project with a profitability index of 1.3 and a price of \$ 12 pesos per liter of biojet fuel was generated. Thus, the installation of plants to produce biojet fuel in Mexico could be considered to be economical viable and environmentally friendly.

Índice

Agradecimientos	I
Dedicatorias	II
Resumen	III
Abstract	IV
Índice de Figuras	VII
Índice de Tablas	IX
Nomenclatura	XI
Introducción	1
Capítulo I: Generalidades	3
1.1 Industria internacional de aviación	3
1.2 Industria de la aviación en México	5
1.3 Impacto y medidas ambientales a nivel internacional y en México	7
1.4 Biomasa	11
1.5 Biocombustibles	13
1.5.1 Bioturbosina	14
1.5.2 Biodiesel - Ésteres metílicos de ácidos grasos	15
1.6 Alternativas de proceso para la producción de bioturbosina	16
1.7 Hidroprocesamiento de ésteres y ácidos grasos (HEFA)	16
1.7.1 Hidrotreatmento	17
1.7.2 Hidroisomerización e hidrodésintegración de parafinas	19
1.7.2.1 Cinética de la hidroisomerización e hidrodésintegración	21
1.7.3 Separación de productos	22
1.7.3.1 Tren de separación	23
1.8 Estudios técnicos y económicos: Biorrefinerías	23
1.8.1 Estudios técnicos y económicos para la producción de bioturbosina	27
1.9 Integración de calor (Energía)	29
1.10 Optimización de procesos mediante superficies de respuesta	31
Capítulo II: Metodología	33
2.1 Bases de diseño	33
2.2 Escenarios de procesos propuestos	33

2.3 Recolección de datos e información sobre tecnologías disponibles	35
2.4 Generación de una superestructura	35
2.5 Simulación de procesos	37
2.5.1 Estudio de las propiedades del aceite de <i>Jatropha</i>	39
2.5.2 Simulación del diagrama de flujo de proceso	39
2.5.2.1 Reactores por escenario de proceso	40
2.5.2.2 Columnas de destilación para los escenarios propuestos	44
2.6 Descripción del diagrama de flujo de proceso	46
2.7 Calidad del combustible	52
2.8 Análisis económico	52
2.9 Integración energética (Análisis Pinch)	60
2.10 Análisis estadísticos y optimización	60
Capítulo III: Resultados y discusión	62
3.1 Bases de diseño	62
3.2 Datos recolectados de los diferentes estudios disponibles	63
3.3 Superestructura de procesos	63
3.4 Simulación de los escenarios	63
3.4.1 Propiedades del aceite de <i>Jatropha Curcas L.</i>	63
3.4.2 Productos obtenidos del escenario A	64
3.4.3 Productos obtenidos del escenario B	68
3.4.4 Separación de productos de los diferentes escenarios	72
3.5 Calidad de la bioturbosina	73
3.6 Análisis económico de los escenarios	75
3.7 Integración energética	79
3.8 Análisis estadístico y optimización	82
Capítulo IV: Conclusiones	91
Referencias	93

Índice de Figuras

Figura 1. Pasajeros por año en México	6
Figura 2. Aeropuertos más transitados en México	6
Figura 3. Producción y demanda de turbosina en México en miles de barriles diarios	7
Figura 4. Emisiones de CO ₂ en el mundo	8
Figura 5. Emisiones de CO ₂ en México	9
Figura 6. Metas y alternativas para reducir las emisiones de CO ₂ por la aviación	10
Figura 7. Semilla de <i>Jatropha Curcas L.</i>	12
Figura 8. Reacción de triglicéridos para la producción de biodiesel	15
Figura 9. Procesos para la producción de bioturbosina de acuerdo con la ASTM D7566	16
Figura 10. Ruta de conversión de triglicéridos a hidrocarburos	17
Figura 11. Isomerización de hexano a isohexano	20
Figura 12. Reacción de hidrodeseintegración con isomerización intermedia	21
Figura 13. Red de reacción de isomerización y desintegración	22
Figura 14. Partes de un estudio técnico	24
Figura 15. Clasificación de algunos costos de operación	25
Figura 16. Ejemplo de superficies de respuesta	31
Figura 17. Diagrama de proceso del escenario A	34
Figura 18. Diagrama de proceso del escenario B	35
Figura 19. Superestructura generada de la tecnología HEFA	36
Figura 20. Diagrama de flujo de la metodología de simulación en Aspen Plus	38
Figura 21. Diagrama de cebolla	39
Figura 22. Reacciones de hidrodeseintegración e hidrodeseintegración	41
Figura 23. Reacciones de transesterificación	42
Figura 24. Hidrot ratamiento de biodiesel y aceite de <i>Jatropha</i>	43
Figura 25. Esquema de reacción: a) metil oleato y b) metil palmitato	44
Figura 26. Configuración de columnas base para la simulación	45
Figura 27. Proceso HEFA mediante escenario A	48
Figura 28. Proceso HEFA mediante escenario B	51
Figura 29. Pasos que seguir en la evaluación económica en APEA	53
Figura 30. Bases de diseño del proceso para la producción de bioturbosina	62

Figura 31. Distribución de productos del hidrotreatmento de aceite de Jatropha	64
Figura 32. Efecto de la longitud del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina	65
Figura 33. Efecto del diámetro del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina	65
Figura 34. Efecto de la temperatura del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina	66
Figura 35. Efecto de la presión del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina	67
Figura 36. Producción del reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración	68
Figura 37. Productos principales de la transesterificación de aceite de Jatropha	69
Figura 38. Distribución de productos del hidrotreatmento de biodiesel	71
Figura 39. Producción del reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración	72
Figura 40. Distribución de costos de capital (escenario A)	75
Figura 41. Distribución de costos de capital (escenario B)	76
Figura 42. Costo de equipos instalados por sección de procesos	77
Figura 43. Red de intercambiadores de calor obtenida del Aspen Energy Analyzer	80
Figura 44 Hidrotreatmento de ésteres y ácidos grasos después de la integración energética	81
Figura 45. Comparación del escenario antes (AI) y después (DI) de la integración energética	82
Figura 46. Datos reales contra los predichos por el modelo	84
Figura 47. Superficie correspondiente al contorno del PI	85
Figura 48. Superficie correspondiente al contorno del PMV de la bioturbosina	86
Figura 49. Contornos de las condiciones de proceso maximización o minimización	87
Figura 50. Contorno de la sección de optimización	88

Índice de Tablas

Tabla 1. Especificaciones para Jet A-1 por la ASTM D1655-15d	4
Tabla 2. Especificaciones de la turbosina en México (NOM-016-CRE-2016)	4
Tabla 3. Especificaciones de la bioturbosina	4
Tabla 4. Materias primas, rendimiento por hectárea y costo	11
Tabla 5. Perfil de ácidos grasos del aceite de <i>Jatropha Curcas L.</i>	13
Tabla 6. Generación de biocombustibles, biomasa y tecnologías	14
Tabla 7. Especificaciones del biodiesel	16
Tabla 8. Estudios técnicos y económicos para la producción de bioturbosina	29
Tabla 9. Compuestos seleccionados al simulador de procesos	37
Tabla 10. Composición modelo del aceite de <i>Jatropha</i>	39
Tabla 11. Reacciones de simulación para parafinas lineales e isoparafinas	41
Tabla 12. Intervalos de las condiciones de operación de los análisis de sensibilidad	42
Tabla 13. Constantes de rapidez de las reacciones a diferentes temperaturas y energía de activación consideradas	43
Tabla 14. Clasificación de compuestos por productos separados	45
Tabla 15. Corrientes de proceso del escenario A	47
Tabla 16. Corrientes de proceso del escenario B	50
Tabla 17. Propiedades y sus procedimientos API	52
Tabla 18. Precios de materia prima en el proceso	53
Tabla 19. Especificaciones generales del proceso	54
Tabla 20. Especificaciones de la estimación de inversión de capital	55
Tabla 21. Especificaciones para la estimación de los costos de operación	55
Tabla 22. Precio de los combustibles producidos por PEMEX	56
Tabla 23. Capacidad de producción del proceso en porcentajes y litros de bioturbosina	61
Tabla 24. Producción de turbosina en México	62
Tabla 25. Materias primas, catalizadores, tipo de reacción, tipo de reactor y conversión	63
Tabla 26. Propiedades del aceite de <i>Jatropha</i> a 25°C y 1 atm	63
Tabla 27. Composición modelo del aceite de <i>Jatropha</i> en la transesterificación	69
Tabla 28. Resultados del diseño de la columna de separación de metanol	70
Tabla 29. Resultados del diseño de la columna de destilación de biodiesel	70

Tabla 30. Columnas de destilación DSTWU	72
Tabla 31. Columnas de destilación RADFRAC	73
Tabla 32. Características de la calidad de la bioturbosina obtenida	74
Tabla 33. Resumen económico de los escenarios	75
Tabla 34. Costos de operación en un año de operación	77
Tabla 35. Precio mínimo de venta de ambos escenarios	78
Tabla 36. Criterios de evaluación del proyecto	78
Tabla 37. Análisis de sensibilidad del costo \$ MXP/L de aceite	79
Tabla 38. Matriz completa de corridas del diseño de experimentos	83
Tabla 39. Análisis de varianza (ANOVA) para la superficie de respuesta de PI	84
Tabla 40. Análisis de varianza (ANOVA) para la superficie de respuesta de PMV	84
Tabla 41. Resumen de los criterios más importantes en el proceso	88
Tabla 42. Criterios de rentabilidad del proceso	89

Nomenclatura

HEFA	Hidrotreatmento de ésteres y ácidos grasos	Bomb	Bomba
FT	Síntesis de Fischer-Tropsch	Int-1,2,3-	Intercambiador de calor
ATJ	Alcohol a bioturbosina	Comp	Compresor
CDMX	Ciudad de México	Sep-AP	Separador de alta presión
CUN	Cancún	Sep-BP	Separador de baja presión
GDL	Guadalajara	Dec	Decantador
MTY	Monterrey	C-1,2,3...	Columna de destilación
TJ	Tijuana	Rhidro	Reactor de hidrotreatmento
PV	Puerto Vallarta	R-Iso-De	Reactor de hidroisomerización e hidrodésintegración
ppm	Parte por millón	R-Biodie	Reactor de transesterificación
L	Litros	Ea	Energía de activación
Ha	Hectáreas	PLC	Control lógico programable
MXP	Pesos mexicanos	G y A	Generales y administrativos
USD	Dólares americanos	VPN	Valor presente neto
C _n	Número de carbonos	TIR	Tasa interna de retorno
Ton	Toneladas	MTIR	Tasa interna de retorno modificada
BKPS	Bioquerosenos parafínicos sintéticos	PR	Periodo de recuperación
FAME	Ésteres metílicos de ácidos grasos	FE	Flujo de efectivo
HDO	Hidrodésoxigenación	PI	Índice de rentabilidad
DCX	Descarboxilación	CV	Costos variables
HDCN	Hidrodéscarbonilación	CF	Costos fijos
<i>k</i>	Constante de velocidad	PMV	Precio mínimo de venta
OPEX	Operating Expenditure (Costos de operación)	AEA	Aspen Energy Analyzer
CAPEX	Capital Expenditure (Costos de capital)	DCC	Diseño de experimentos central compuesto
APEA	Aspen Process Economic Analyzer		
MSR	Metodología de superficies de respuesta		
PEMEX	Petróleos Mexicanos		
BPD	Barriles por día		
DFB	Diagrama de Flujo de Bloque		
DFP	Diagrama de Flujo de Proceso		

Introducción

El aumento desmedido en la demanda de combustibles fósiles en los últimos años y el incremento de la contaminación ambiental, han generado que investigadores de procesos se den a la tarea de buscar alternativas de diseño y crear combustibles de origen vegetal que sean amigables con el medio ambiente.

El incremento en la población mundial ha traído consigo diversos problemas globales relacionados con el uso excesivo del transporte, lo cual conlleva a un incremento en la contaminación ambiental. Se sabe que el sector de transporte utiliza el 40% de la energía primaria consumida en el mundo.¹ La globalización y la necesidad de utilizar un transporte eficiente y cómodo, ha generado que cada vez más personas tengan la necesidad de utilizar un avión como medio de transporte.

De acuerdo con la Agencia Europea de Medio Ambiente (AEMEA)² los transportes terrestres generan el 72% del dióxido de carbono (CO₂), la aviación 13.3% y, el transporte marítimo 13.6%. Sin embargo, las emisiones de CO₂ generadas por los aviones representan 285 gramos de CO₂ * pasajero/km, contra 158 gramos del transporte terrestre y, 14 gramos de los trenes. En 2018 según el Grupo de Acción del Transporte Aéreo (ATAG)³ los vuelos a nivel mundial generaron 895 millones de toneladas de CO₂, alrededor del 2% de las emisiones totales CO₂ a nivel mundial. Las formas de reducir las emisiones están siendo investigadas por la ATAG con el objetivo de mitigar este problema.

Un vuelo tradicional de la Ciudad de México a Cancún quema alrededor de 6484.4 kg de combustible/viaje generando en promedio 148.8 kg de gas de CO₂/pasajero.⁴

Estudios recientes^{3,5-8} han demostrado que el uso de combustibles alternativos provenientes de fuentes renovables como algas, jatropha o residuos lignocelulósicos pueden alcanzar a reducir la huella de carbono de los aviones hasta un 80% en comparación con el combustible de origen fósil.

Al biocombustible para la industria de aviación proveniente de fuentes renovables se le conoce como bioturbosina, o queroseno parafínico sintético (SRK, por sus siglas en inglés, Synthetic Renewable Kerosene).

Para la producción de este combustible existen diferentes procesos de acuerdo con la ASTM D7566 como: a) Síntesis por Fischer-Tropsch (FT), b) Hidroprocesamiento de ésteres y ácidos grasos (HEFA), c) Hidrot ratamiento de las parafinas obtenidas por fermentación de

azúcares, d) Alquilación de aromáticos ligeros de fuentes no petroleras y e) Alcohol a turbosina (ATJ).⁹

Se han estudiado diversas fuentes de biomasa para la producción de biocombustibles, de las que destacan en México las siguientes: *Jatropha Curcas L.* (Piñón mexicano), *Higuerilla*, *Palma de aceite*, *Soya*, *Aceite de cocina usado*, *Algas*, *Caña de azúcar* y se han investigado sus propiedades por diversos autores.¹⁰⁻²²

Actualmente en México no se cuenta con alguna biorrefinería para la producción de bioturbosina. Por tal motivo es importante realizar estudios técnicos y económicos basados en las condiciones actuales que se presentan en el país, con la finalidad de tener una prospectiva de lo que ocurriría de acuerdo con los factores importantes en la construcción de este tipo de proyectos, brindando una visión general del proceso, sus ventajas y desventajas. Este estudio presenta cambios a las metodologías de investigación para estudios técnicos y económicos en la producción de biocombustibles,²³⁻²⁶ tales como la implementación de la integración energética (método Pinch) y la optimización del proceso a través de un diseño de experimentos. Por la importancia de los estudios técnicos y económicos, y la innovación de nuevas tecnologías para la producción de combustibles de aviación a través de biomasa, el objetivo de este trabajo fue simular un proceso para la producción de bioturbosina y obtener las condiciones de operación óptimas para generar bioturbosina de manera rentable y a precios competitivos en comparación con la turbosina fósil.

Lo anterior se logró simulando un proceso para la producción de bioturbosina, a través de dos escenarios de simulación haciendo la suposición que lo que ocurra en la simulación sucederá de forma industrial y los costos obtenidos son una prospectiva de los que puede pasar de forma industrial en una evaluación de proyecto. Cabe señalar que en este estudio de investigación no se consideró el escalamiento de equipos ni una ingeniería de detalle, solo se realizó la ingeniería básica de los escenarios propuestos con su optimización.

Obtener un diseño de proceso con las condiciones óptimas de operación, generará un proceso rentable y con precios accesibles de compra de bioturbosina en comparación con la turbosina de origen fósil.

Capítulo I: Generalidades

En este capítulo se presentan las generalidades, partiendo del crecimiento de la industria de la aviación en el mundo y en México; y sus consecuencias ambientales. Se presentan detalles del proceso de Hidrotreatmento de Ésteres y Ácidos Grasos (HEFA) y la biomasa disponible en México para la producción de biocombustibles. El desarrollo de nuevos procesos de producción de combustibles de aviación basados en biomasa disponibles en México representa una alternativa importante para reducir significativamente las emisiones de CO₂. Además, se reportan diferentes estudios técnicos y económicos, realizados para evaluar la factibilidad de biorrefinerías en la producción de combustibles limpios con diferentes materias primas.

1.1 Industria internacional de aviación

El número de vuelos de la industria de aviación ha incrementado, de acuerdo con las estadísticas mundiales de aviación se estima que en el año 2004 se realizaron 23.8 millones de vuelos y, en 2018 un aproximado de 38.1 millones de vuelos en el mundo. Esto indica que el uso de la aviación como medio de transporte a nivel mundial ha crecido y se espera continúe creciendo con el paso de los años.²⁷

El crecimiento anual en el número de vuelos previsto para el sector de la aviación es del 5% hasta el año 2030 y se espera un estimado de 16 billones de vuelos para el año 2050 según la proyección de la Asociación Internacional de Transporte Aéreo (IATA).²⁸

Los combustibles de origen fósil hasta hace algunos años habían sido el único combustible disponible para las turbinas de los aviones. A diferencia de cualquier otro sector, el transporte aéreo depende en gran medida de este combustible de alta densidad energética.²⁹

Existen dos tipos principales de combustibles de aviación. El combustible más empleado internacionalmente es el Jet A-1, seguido del Jet A. En México este tipo de combustible se le conoce comúnmente como turbosina y se clasifican por su punto de congelación para ser considerada Jet A-1 o Jet A. Esta especificación junto con algunos requerimientos necesarios para asegurar la calidad del combustible se especifican en el método estándar de prueba internacional ASTM D1655-15d.³⁰, como se muestra en las Tablas 1 y 2.

Tabla 1. Especificaciones para Jet A-1 por la ASTM D1655-15d³⁰

Propiedades requeridas	Valor	Método ASTM
Contenido máximo de aromáticos (% volumen)	26.5	D6379
Contenido total de azufre máximo (% peso)	0.3	D1266, D2622, D4294, D5453
Punto de inflamación mínimo (°C)	38	D56, D93, D3828
Densidad a 15°C (mínimo–máximo) (kg/ m ³)	775-840	D1298, D4052
Punto de congelación máximo (°C)	-47	D5972, D7153, D7154, D2386
Viscosidad máxima a -20°C (mm ² /s)	8.0	D445, D7042
Calor neto de combustión mínimo (MJ/kg)	42.8	D4529, D3338, D4809
Contenido máximo de naftaleno (% volumen)	3.0	D1840
Estabilidad térmica máxima caída de presión del filtro (mm Hg a 260°C)	25	D3421
Aditivo antioxidante máximo (mg/L)	24	
Aditivo inhibidor de hielo (% volumen)	0.07-0.15	

Por otro lado, las especificaciones necesarias para la turbosina en México se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Especificaciones de la turbosina en México (NOM-016-CRE-2016)³¹

Propiedades requeridas	Valor	Método ASTM
Contenido total de azufre máximo (% peso) (mg/kg)	300	D4294, D5453, D2622
Contenido máximo de aromáticos (% volumen)	25	D1319, D5186
Punto de congelación (°C)	Jet A1= -47.0 Jet A= -40.0	D2386, D5972, D7153, D7154
Punto de ebullición inicial (°C)	162.7	
Punto de ebullición final (°C)	300	D86, D2887, D7345
Punto de inflamación (°C)	38	D56
Viscosidad máxima a -20°C (mm ² /s)	8000	D445, D7042
Densidad a 20°C (kg/m ³)	772.2	D1298, D4052
Poder calorífico (MJ/kg)	42.8	D4529, D3338, D4809
Acidez total (mg KOH/g)	0.10	D3242
Contenido de FAME (g)	5	D7797

Para el caso de la bioturbosina se requieren las siguientes especificaciones según la norma internacional ASTM D7566.

Tabla 3. Especificaciones de la bioturbosina^{32,33}

Propiedades requeridas	Valor	Método ASTM
Punto de inflamación mínimo (°C)	38	D56, D3828
Densidad a 15°C (mínimo–máximo) (kg/m ³)	730-770	D1298, D4052
Punto de congelación máximo (°C)	-40	D5972, D7153, D7154, D2386
Contenido máximo de cicloparafinas (% peso)	15	D2425
Contenido máximo de aromáticos (% peso)	0.5	D2425

1.2 Industria de la aviación en México

Los orígenes de la industria de la aviación en México datan del año 1911, cuando la empresa *Moisant International Aviators* realizó una gira en México, con el objetivo de promocionar la comercialización de sus aviones. Se hicieron demostraciones enfocadas a exponer la eficacia de los aviones en campañas militares.³⁴

El 30 de noviembre de 1911 durante el gobierno de Francisco I. Madero, este fue invitado a participar en un vuelo de exhibición, a bordo de un avión *Deperdussin* de dos plazas, convirtiéndose así en el primer mandatario en volar en un aeroplano. Como consecuencia, el presidente Madero quedó impresionado y autorizó la compra de cinco aviones, para lo cual mandó a estudiar a cinco mexicanos a la escuela *Moisant Aviation School* en Nueva York, que después serían conocidos como los “primeros cinco”.³⁵

Los hermanos Juan Pablo y Eduardo Aldasoro en 1912, lograron construir el primer motor de explosión interna para un avión en México.³⁶

El 7 de abril de 1913, Victoriano Huerta consciente de la importancia del uso de esta nueva tecnología, mandó a conformar la primera Escuadrilla Aérea de la Milicia Auxiliar del Ejército Federal. Este hecho fue de vital importancia para desarrollo de los vuelos comerciales en México, estos pilotos crearon el camino hacia los vuelos comerciales. Estos hechos históricos en México fueron el inicio de muchos avances tecnológicos en materia de aviación.³⁵

La industria mexicana de aviación al igual que en otras partes del mundo ha crecido de forma significativa. En la Figura 1, se observa un aproximado de miles de pasajeros por año que hacen uso de este servicio y su crecimiento anual en México de 1991-2017. Según la Secretaría de Comunicaciones y Transporte (SCT)³⁷ en el año 1991 se registraron 17,667,000 pasajeros, esta cifra siguió en aumento a través del tiempo hasta alcanzar los 90,445,000 pasajeros en 2017. La industria de la aviación en México tiene una tasa de crecimiento media anual del 5.2%.

En la actualidad, México cuenta con aproximadamente 62 aeropuertos registrados a nivel nacional. Los principales aeropuertos en México se encuentran en la Ciudad de México, Cancún, Guadalajara, Monterrey, Tijuana y Puerto Vallarta.

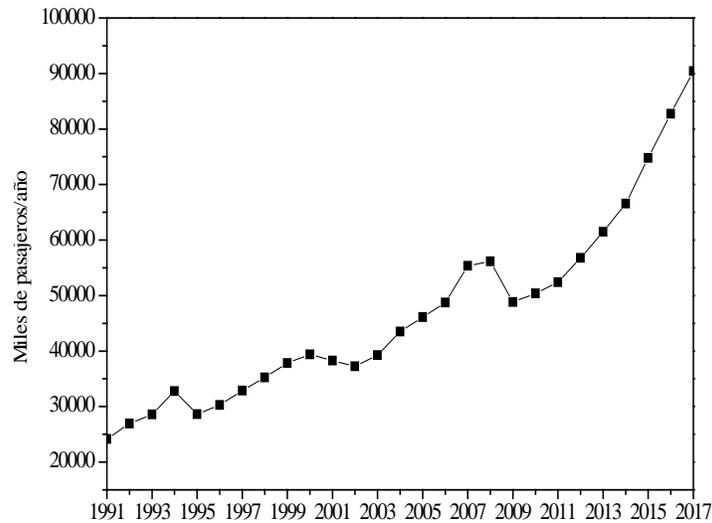


Figura 1. Pasajeros por año en México (Elaboración propia datos de referencia³⁷)

Según la Aeropuertos y Servicios Auxiliares (ASA),³⁸ el aeropuerto de la Ciudad de México recibió alrededor de 1,843,192 pasajeros en enero del año 2017 y en el mismo mes del año 2019 un total de 1,997,201, i.e. del 2017 al 2019 se presentó un aumento de 154,009 pasajeros, esta tendencia es evidente también en otros aeropuertos principales de México, véase Figura 2.

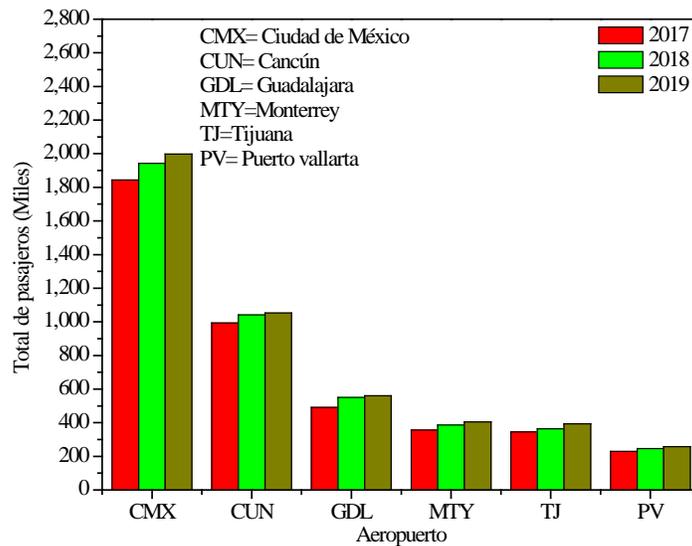


Figura 2. Aeropuertos más transitados en México (Elaboración propia datos de referencia³⁸)

De acuerdo a datos de la Secretaría de Energía (SENER),³⁹ el aumento en la industria de la aviación en México generó un problema en la producción de turbosina, a partir del año 2013 la demanda de dicho combustible superó la oferta. Derivado de lo anterior el gobierno de

México tomó la decisión de importar dicho combustible de otros países, tal como se muestra en la Figura 3.

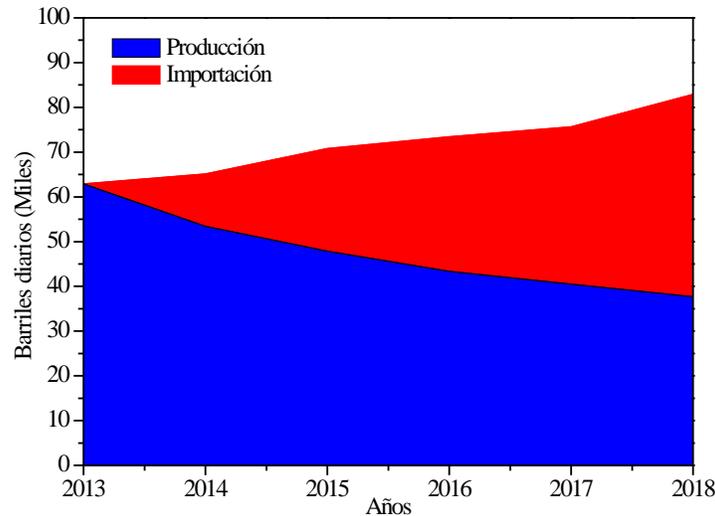


Figura 3. Producción y demanda de turbosina en México en miles de barriles diarios (Elaboración propia datos de referencia³⁹)

De acuerdo con Aeropuertos y Servicios Auxiliares (ASA),⁴⁰ se consumió 5,260,869.96 litros de turbosina en la Ciudad de México en el año 2018.

La demanda de dicho combustible y los impactos ambientales han generado la búsqueda de nuevas alternativas tecnológicas y económicas que permitan tanto reducir los efectos ambientales generados por la quema de combustible fósil de aviación con un menor impacto ambiental como mejorar la seguridad energética.

1.3 Impacto y medidas ambientales a nivel internacional y en México

El impacto ambiental generado por las emisiones de CO₂ provenientes de la industria de la aviación ha generado un nuevo desafío a la sociedad. El uso de 1 kg de combustible de aviación genera aproximadamente 3.2 kg de CO₂. Desde los inicios de la llamada revolución industrial (1760-1840), la concentración atmosférica de CO₂ aumentó de 280 ppm en el año 1850 a 408 ppm en 2018.⁴¹ En la Figura 4 se observa el incremento de CO₂ generado por el hombre desde el año 1980 a 2018.⁴²

En respuesta a los problemas ocasionados por las emisiones de gases de efecto invernadero, en el año 2015 en colaboración de 197 países se creó el acuerdo de París dentro del marco de las naciones unidas sobre el cambio climático para mitigar el aumento de la temperatura

media mundial.⁴³ Para lograr este objetivo la concentración atmosférica de CO₂ se debe mantener menor a 450 ppm y, a partir del 2021 únicamente disminuir las emisiones de CO₂.

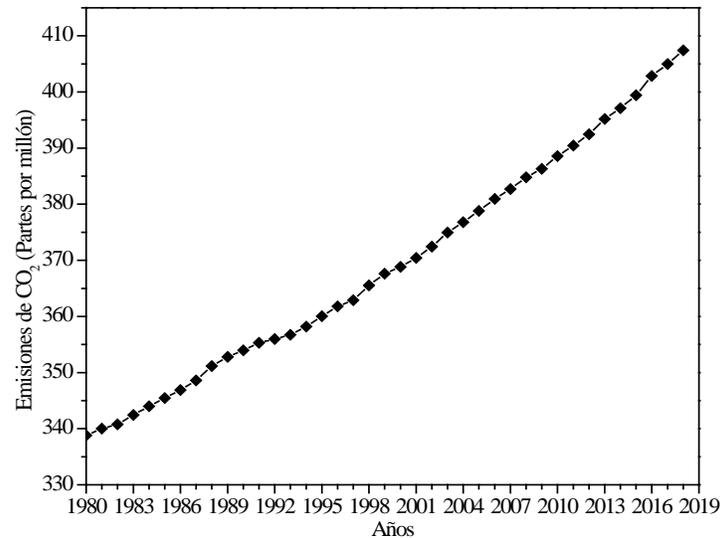


Figura 4. Emisiones de CO₂ en el mundo (ppm) (Elaboración propia datos de referencia⁴²)

Desde el inicio de la década de los 2000's los gobiernos y la industria han explorado, especificado e introducido políticas u objetivos para controlar las emisiones de CO₂ del transporte aéreo. Estos objetivos, directa o indirectamente, también afectan a la investigación, al desarrollo y uso de biocombustibles de aviación.

La Asociación de Transporte Aéreo Internacional (IATA)⁴⁴ anunció el objetivo de aumentar el número de vuelos sin emisiones de carbono a partir del año 2020, con una reducción posterior de las emisiones de CO₂ al 50% del nivel de 2005 a 2050.

La Unión Europea ha tomado las primeras medidas con el uso de energías renovables en la industria de la aviación a través de su programa denominado "Biofuels Flighpath" (Plan de vuelo hacia los combustibles);⁴⁵ en este plan se implementó el aumento al impuesto por emisiones de carbono a la industria de la aviación en el Esquema de Comercio de Emisiones de la Unión Europea (EUETS). Además, se establecieron metas en la reducción de la generación de gases de efecto invernadero en un 50% para el año 2050 en base a lo obtenido en 2005.

La ATAG planteó recientemente tres metas globales:⁴⁶ a corto, mediano y largo plazo. La meta a corto plazo es mejorar a 1.5% anual la eficiencia de combustibles del año 2009 hasta el 2020. La meta a mediano plazo es estabilizar las emisiones de CO₂ netas a los niveles del

año 2020 a través del crecimiento de neutralidad de carbono. La meta a largo plazo es reducir al 50% las emisiones de CO₂ para el año 2050 de acuerdo con las generadas por la industria de la aviación en el año 2005. Para cumplir con estas metas se establecieron cuatro pilares de acción climática: 1) innovación tecnológica y combustibles alternativos sustentables, 2) eficiencia en las operaciones, 3) infraestructura y, 4) medidas basadas en el mercado.

Según datos del Banco Mundial de Datos,⁴⁷ las emisiones de CO₂ han aumentado a nivel mundial y México ha contribuido en gran medida con dicho problema. Las emisiones de CO₂ producidas en México en el año 1960 fueron de 1.653 toneladas métricas per cápita y en 2014 la cifra aumentó 2.33 veces alcanzando una cifra de 3.866 toneladas métricas per cápita, esto se observa en la Figura 5.

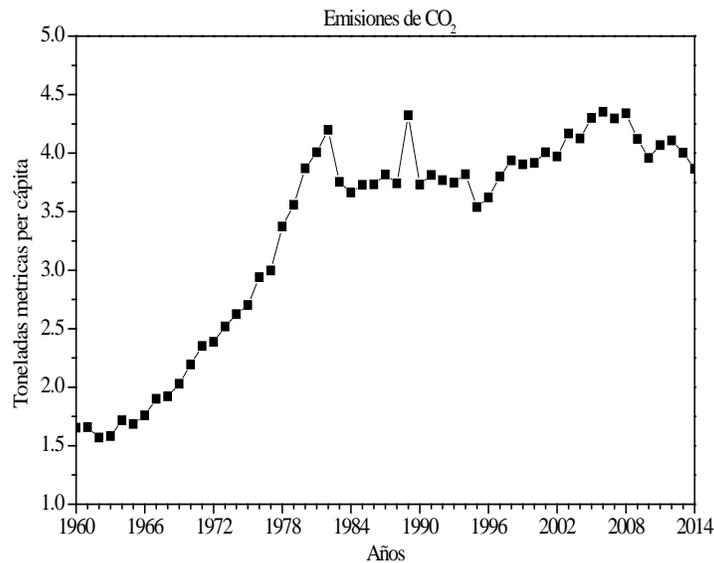


Figura 5. Emisiones de CO₂ en México (Elaboración propia datos de referencia⁴⁷)

De acuerdo con el Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC),⁴⁸ el CO₂ es el gas que más se emite en México alrededor del 71% de las emisiones a nivel nacional, seguido del metano con un 21%. Asimismo, de las emisiones producidas el 64% corresponde al consumo de combustibles fósiles; el 10% son generadas por los sistemas de producción pecuaria (ganadería); el 8% proviene de los procesos industriales; el 7% se emite por el manejo de residuos; 6% por las emisiones derivadas de la extracción de petróleo, gas y minerías; y, por último, el 5% por actividades agrícolas. En el ámbito mundial, México contribuye con alrededor del 1.6% de las emisiones de GEI (Gases de Efecto Invernadero), por lo tanto, se ubica en la posición número 13 de países contaminantes.

En el año 2016 en la 22^a Conferencia de las Partes (COP22),⁴⁹ el gobierno de México se comprometió voluntariamente a reducir en un 25% sus emisiones de gases efecto invernadero (GEI) para el año 2030. Para lograr este compromiso se dispuso el uso de diferentes alternativas industriales en colaboración con la Organización de Aviación Civil Internacional (ICAO).⁵⁰ Estas alternativas van desde la renovación de la flota de aviones en curso, mejoras operacionales y la que se ha planteado sea la de mayor contribución al cambio climático, el uso de combustibles renovables de aviación. De acuerdo con estudios realizados por la ICAO, el uso de combustibles renovables de aviación podría reducir de manera considerable las emisiones de CO₂, ya que, como se observa en la Figura 6, tiene el mayor impacto entre las alternativas propuestas para reducir tales emisiones.

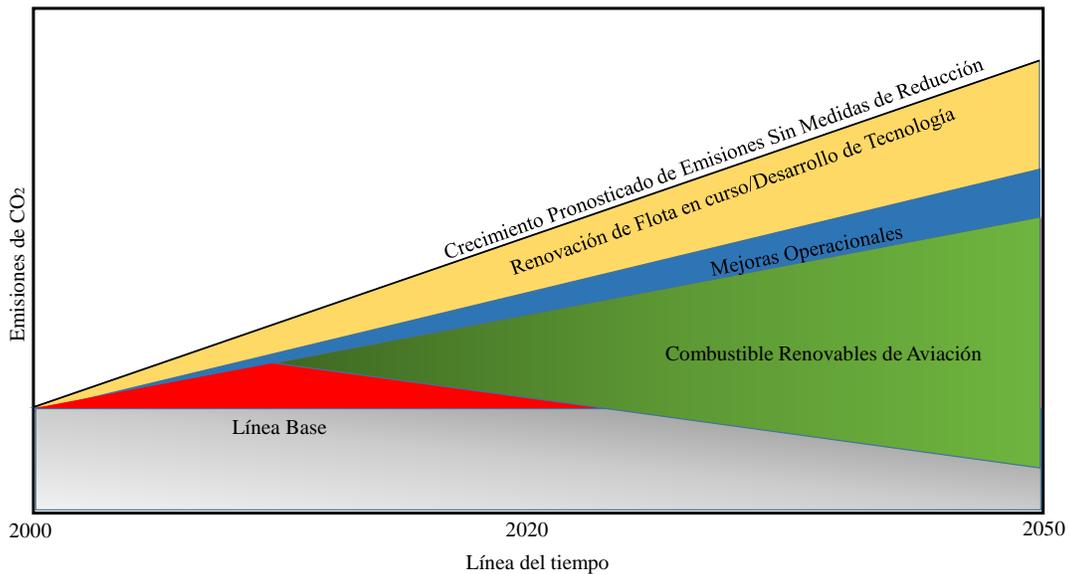


Figura 6. Metas y alternativas para reducir las emisiones de CO₂ por la aviación⁵⁰

Con el fin de encontrar alternativas tecnológicas sustentables, la Secretaria de Energía (SENER) en colaboración con el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) crearon el CEMIE-Bio (Centro Mexicano de Innovación de Energía-Biomasa). Este centro está conformado por cinco clústers, cada uno enfocado en un combustible distinto: biocombustibles sólidos, bioalcoholes, biogás, biodiesel y bioturbosina. El clúster bioturbosina presenta cuatro líneas de investigación: 1) Biomasa, 2) Transformación, 3) Análisis de ciclo de vida, y 4) Mercado. Enfocado en estudiar el procesamiento de biomasa mediante las tecnologías HEFA y ATJ.⁵¹

1.4 Biomasa

La biomasa es el material orgánico que más ha sido utilizado como combustible a lo largo de toda la historia de la humanidad. Las fuentes de biomasa pueden ser plantas, residuos, grasas animales, desechos de seres vivos, etc. La biomasa proporciona, según su origen y procesamiento, energía útil y factible de aprovechar como combustible desde el punto de vista económico en sus tres formas físicas.⁵²

México siendo un país que se encuentra en etapa de desarrollo para la producción de biocombustibles, concentra una gran cantidad de fuentes de biomasa que pueden transformarse mediante tecnologías disponibles. De las diferentes materias primas disponibles en México para tal propósito destacan por su rendimiento de aceite la jatropha, higuierilla, sorgo dulce, ricino, algas, palma de aceite, caña de azúcar, soya, maíz y residuos lignocelulósicos.

En la Tabla 4, se observan los rendimientos en litros de aceite por hectárea y el costo promedio por litro en México de las diferentes materias primas. Los precios pueden variar de acuerdo con la calidad y su método de obtención.

Tabla 4. Materias primas, rendimiento por hectárea y costo (\$MXP/L)⁵³⁻⁵⁵

Materia prima	Rendimiento de aceite (L/Ha)	Pesos (MXP)/L
Palma de aceite	5,000-5,500	40-70
Higuerilla	1320	30-80
Jatropha	730	50-100
Girasol	665	40-60
Soya	289	28-43
Grasa de animales	-	8-20
Aceite vegetal usado	-	2-8
Caña de azúcar	-	-
Bagazo de caña	-	0
Residuos lignocelulósicos	-	0

Las materias primas más representativas de acuerdo con su contenido de aceite por hectárea son la Palma de aceite, Higuerilla y Jatropha Curcas; con 5000, 1320 y 730 litros por hectárea, respectivamente.

Piñón mexicano (*Jatropha Curcas L.*)

El piñón mexicano, también conocido como *Jatropha Curcas L.*, es una planta originaria de Mesoamérica, por lo que en México existe una amplia variedad genética de ella y ha llegado a ser muy popular debido a sus capacidades y diferentes usos en distintas áreas tales como medicina, biopesticidas, fabricación de jabón y biocombustibles, como el caso del biodiesel. Los principales productores de esta planta son India y Mozambique. Se trata de una especie perenne (aquella que vive durante más de dos años), con alto rendimiento de aceite entre 26.4 y 56.9 % peso de acuerdo con su genotipo.^{13,14}

Las frutas son inicialmente verdes y con el paso del tiempo se tornan de color café oscuro o negro. Cada fruto produce tres almendras negras de 2 cm de longitud y 1 cm de diámetro, como se observa en la Figura 7. La planta solo necesita de 3 meses, desde la floración hasta la madurez de la semilla y presenta una vida productiva entre 45 y 50 años; es de rápido crecimiento y alcanza una altura aproximada de 2 a 3 metros y en condiciones especiales 5 a 8 metros. Se beneficia en climas tropicales o subtropicales con una temperatura media anual de 24°C. Se desarrolla en altitudes sobre el nivel del mar hasta 1,200 m preferentemente y con una precipitación pluvial de 300 a 1,200 mm. Crece casi en cualquier tipo de suelo, incluso en tierras cascajosas, arenosas y salinas, aunque prefiere condiciones de suelos francos, franco-areno-arcillosos y limo. El aceite obtenido del prensado de las semillas es de uso directo para más de un centenar de productos en la industria química, aunque principalmente está siendo usado en la producción de biodiesel. El aceite de *Jatropha* se considera ideal en la producción de biocombustibles en México.¹⁵



Figura 7. Semilla de *Jatropha Curcas L.*¹⁵

La Secretaría de Agricultura, Ganadería, Desarrollo Rural, Pesca y Alimentación (SAGARPA) en colaboración con el Instituto Nacional de Investigaciones Agrícolas y Pecuarias (INIFAP), desarrollaron tres variedades de *Jatropha* que producen rendimientos hasta de 3 toneladas por hectárea de grano. De acuerdo con reportes de la SAGARPA,¹⁵ se obtuvieron 85 y 109.38 toneladas de *Jatropha* en 2016 y 2018 respectivamente, y se esperan 182.57 y 255.75 toneladas para el año 2024 y 2030 respectivamente.

El aceite de *Jatropha Curcas L.* se encuentra compuesto principalmente de triglicéridos que a la vez están formados principalmente de cadenas saturadas, monoinsaturadas o polinsaturadas y largas de ácidos grasos. La composición de ácidos grasos presentes en el aceite de *Jatropha* se puede observar en la Tabla 5.

Tabla 5. Perfil de ácidos grasos del aceite de *Jatropha Curcas L.*⁵⁶

Componente	Estructura	% peso
Ácido mirístico	C ₁₄ :0	0.06
Ácido palmítico	C ₁₆ :0	15.85
Ácido palmitoleico	C ₁₆ :1	0.90
Ácido esteárico	C ₁₈ :0	6.90
Ácido oleico	C ₁₈ :1	41.7
Ácido linoleico	C ₁₈ :2	34.71
Ácido linolénico	C ₁₈ :3	0.33
Ácido cis-11-eicosenoico	C ₂₀ :1	0.18

C_n:m (n=número de carbonos; 0: saturados, 1: monoinsaturados, 2,3: polinsaturados)

De acuerdo con los reportes del Comité Nacional Sistema Producto Oleaginosas en el país se estimaron alrededor de 2.6 millones de hectáreas con potencial para el cultivo del piñón mexicano. Los estados de la República Mexicana que registraron la mayor superficie para este cultivo son: Sinaloa, Tamaulipas, Guerrero, Chiapas y Michoacán; solo estos estados cuentan con 1,585,050 hectáreas para el cultivo del piñón. La *jatropha* es una alternativa de cultivo importante para la producción de combustibles renovables porque no es considerada parte de la canasta básica de los alimentos.⁵⁷

1.5 Biocombustibles

Los biocombustibles son energéticos procesados a partir de materias primas renovables producidas por los seres humanos y la naturaleza, a las cuales se les conoce comúnmente como “biomasa”. Pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos, y su finalidad es liberar a través

de su combustión la energía contenida en sus componentes. Los biocombustibles se clasifican de acuerdo con su tipo de generación de combustible como se muestra en la Tabla 6.^{58,59}

Tabla 6. Generación de biocombustibles, biomasa y tecnologías

Generación	Fuente de biomasa	Descripción
Primera	Jugo de caña de azúcar, maíz y remolacha.	Producción de etanol o biodiesel mediante la fermentación.
	Aceites o grasas animales.	Transesterificación o alcalinidad.
Segunda	Residuos agrícolas y forestales.	Sacarificación-fermentación y Fischer-Tropsch.
Tercera	Biomasa no alimenticia, algas y aceites	Tecnologías de hidrot ratamiento, pirólisis, gasificación, reformación, acuosa, etc.
Cuarta	Bacterias genéticamente modificadas, por anhídrido carbónico	La bacteria es la que efectúa la totalidad del proceso de producción de los biocombustibles

Los combustibles de primera generación como su nombre lo indica son los primeros en procesarse, la desventaja se encuentra en las fuentes de biomasa utilizadas debido a que forman parte de la canasta básica de los alimentos, los de segunda generación se les conoce por el hecho de no formar parte de la canasta básica y son elaborados a partir de materias primas no destinadas a la alimentación y cultivables en terrenos no agrícolas o marginales, derivado de esto, no compiten con recursos hídricos que pueden destinarse para el alimento humano, además, en México se planteó producir combustibles de segunda generación, dichos combustibles pueden ser generados por la *Jatropha Curcas L.*, higuera, camelina, aceite vegetal usado, etc. El uso de estos combustibles provee de ciertos beneficios tanto, económicos, energéticos, sociales y ambientales;⁵⁸ los de tercera generación son conocidos por ser de alto rendimiento en la producción de biocombustibles, por último, la cuarta generación se refiere a los biocombustibles producidos a partir de bacterias genéticamente modificadas, las cuales emplean anhídrido carbónico o alguna otra fuente de carbono.^{58,59}

1.5.1 Bioturbosina

La *bioturbosina* o *combustible renovable de aviación*, que se denomina técnicamente como bioquerosenos parafínicos sintéticos o queroseno parafínico sintético (BKPS o KPS), es un biocombustible conformado por una mezcla de hidrocarburos lineales y ramificados; su densidad energética y sus propiedades físicas son similares a las de la turbosina de origen

fósil. La similitud de las propiedades es de gran importancia, debido a las condiciones extremas de temperatura y presión a la que es sometido el combustible durante el vuelo.

La principal diferencia de la bioturbosina con respecto a la turbosina radica en la ausencia de aromáticos. Esto provoca que su densidad esté por debajo del mínimo permisible. Dicha desventaja es superada cuando el combustible es mezclado con combustible de origen fósil. La ASTM D7566⁶⁰ establece el uso de mezclas de bioturbosina con turbosina fósil con un máximo permisible del 50% en mezclas.

1.5.2 Biodiesel - Ésteres metílicos de ácidos grasos (Fatty Acid Metyl Esters - FAME)

La mezcla de ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME), en un 95% peso es comúnmente conocido como biodiesel. El biodiesel es producido mediante una reacción de transesterificación de triglicéridos con metanol, véase Figura 8.

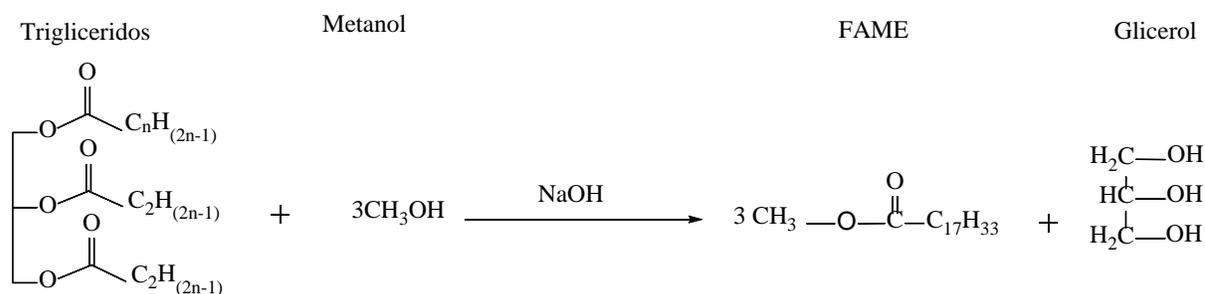


Figura 8. Reacción de triglicéridos para la producción de biodiesel

Los FAME presentan diferentes propiedades químicas al diesel derivado del petróleo, dando como resultado incompatibilidad en la infraestructura, menor contenido de energía y problemas de rendimiento en climas fríos. La diferencia química más importante entre el biodiesel y el diesel de petróleo es que el primero contiene compuestos que tienen en su estructura molecular átomos de oxígeno lo que provoca que las moléculas sean polares e hidrofílicas. Las moléculas de oxígeno también agregan masa extra, lo que disminuye el contenido de energía y aumenta el punto de congelación, en comparación con el diesel.⁶¹ Un resumen de las propiedades requeridas para el biodiesel se muestra en la Tabla 7 de acuerdo con la Norma ASTM D6751-09.⁶²

Tabla 7. Especificaciones del biodiesel^{62,63}

Propiedad	Valor	Método ASTM
Punto de inflamación mínimo (°C)	93	D93
Viscosidad cinemática máxima (mm ² /s)	6.0	D445
Glicerina libre por masa (%)	0.020	D6584
Oxígeno (%)	11	
Densidad (g/ml)	0.883	
Contenido de azufre (ppm)	<10	D5453
Valor calorífico (MJ/kg)	38	
Punto de congelamiento máximo (°C)	-5	
Intervalo de destilación (10-90) %	340-355	D1160
Contenido de éster (% peso)	96.5	
Número de cetano	47	D613

1.6 Alternativas de proceso para la producción de bioturbosina

De acuerdo con las especificaciones de producto establecidas por la ASTM D7566, se pueden considerar cinco procesos para la producción de bioturbosina, véase Figura 9.

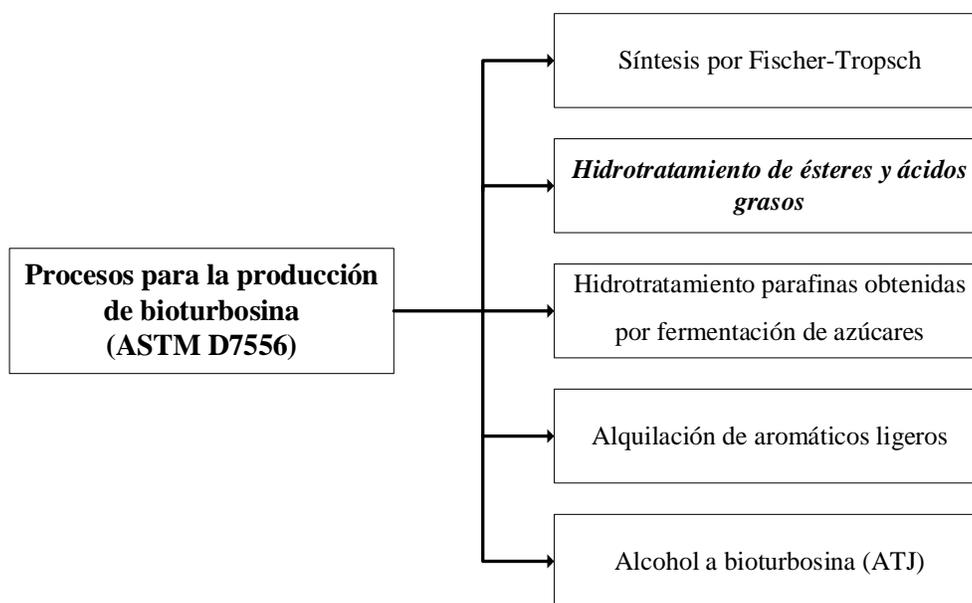


Figura 9. Procesos para la producción de bioturbosina de acuerdo con la ASTM D7566

1.7 Hidroprocesamiento de ésteres y ácidos grasos (HEFA)

El proceso de hidrot ratamiento de ésteres y ácidos grasos (HEFA, por sus siglas en inglés, Hydroprocessed Esters and Fatty Acids) o también conocido como turbosina renovable hidroprocesada (HRJ, Hydroprocessed Renewable Jet), es un proceso que ha adquirido un reciente interés en la producción de bioturbosina, las especificaciones de su producto son consideradas por la ASTM D7566 en 2011.⁹

Actualmente el proceso HEFA se considera en estado maduro y, existen procesos a escala comercial. Casi todos los procesos comerciales del mundo con tecnología HEFA producen principalmente diesel; pero a partir de 2016 “California’s Alternative Air Fuels” se convirtió en la primera instalación en además producir bioturbosina. Las dos principales tecnologías utilizadas en el mundo para producir bioturbosina por el proceso HEFA son los procesos de NESTE y ENI.⁶⁴ La tecnología HEFA considera el uso de aceites vegetales o animales, ésteres metálicos y/o grasas animales como materia prima y consta principalmente de tres etapas: 1) hidrot ratamiento, 2) hidroisomerización e hidrod esintegración y, 3) separación de productos.

1.7.1 Hidrot ratamiento

La primera etapa del hidrot ratamiento se lleva a cabo en un reactor donde ocurre la hidrogenación del doble enlace de las cadenas de ácidos grasos de los triglicéridos, ácidos grasos libres o ésteres junto con la remoción de oxígeno sobre los sitios metálicos del catalizador.^{65,66} En esta etapa se han estudiado tres posibles rutas de reacción de manera competitiva. Estas son: hidrod esoxigenación (HDO), d ecarboxilación (DCX) e hidrod ecarbonilación (HDCN), la selectividad de cada reacción dependerá de las condiciones de operación y el catalizador empleado. Las rutas de reacción se pueden observar en la Figura 10.

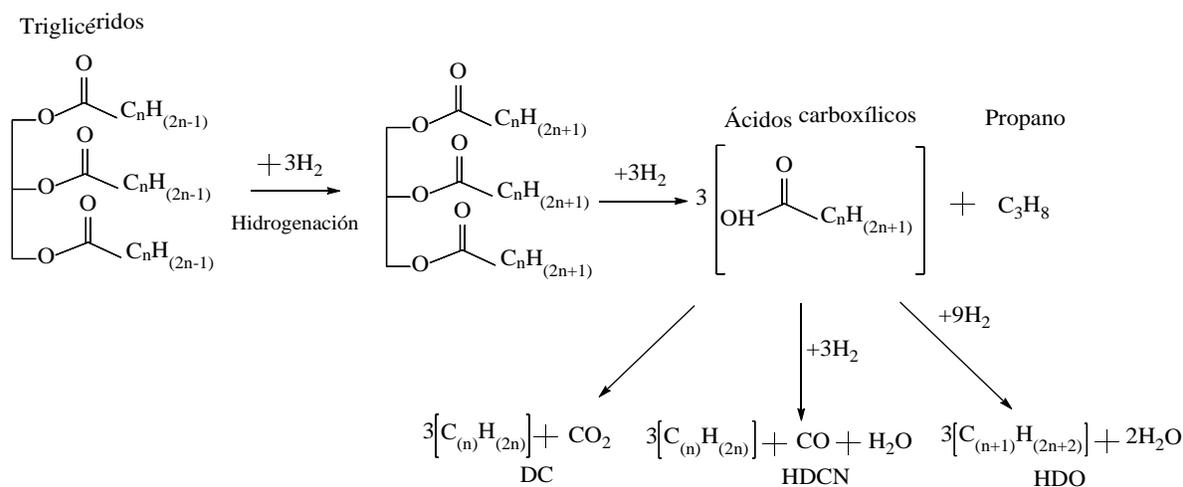


Figura 10. Ruta de conversión de triglicéridos a hidrocarburos⁶⁷

Remover el oxígeno de los triglicéridos puede ocurrir a través de diferentes reacciones como:

1. La *hidrodesoxigenación* (HDO) es la reducción completa de las especies oxigenadas, esta produce un alcano con el mismo número de átomos de carbono que el ácido graso original y dos moléculas de agua.
2. La *descarboxilación* (DC) puede ocurrir en ausencia de H_2 , esta produce una molécula de alcano y una de CO_2 .
3. La *hidrodescarbonilación* (HDCN) requiere la presencia de una molécula de H_2 y produce una molécula de alcano más una de H_2O y una de CO .⁶⁷

El hidrot ratamiento de aceites vegetales produce principalmente hidrocarburos de cadenas lineales saturadas C_{15} - C_{18} y propano. El hidrot ratamiento efectivo de aceite de *Jatropha Curcas L.* produce principalmente una mezcla de gas, agua y, líquido compuesta de hidrocarburos de cadenas lineales en el intervalo de $C_{15}H_{32}$ y $C_{21}H_{44}$, la cual se encuentra comprendida en el intervalo de punto de ebullición del diesel, y por provenir de fuentes renovables se le conoce como “*diesel verde*”.⁶⁸ Se tienen reportados diversos estudios para el hidrot ratamiento de aceites provenientes de distintas fuentes renovables y el tipo de catalizador empleado.

Guzman et al.⁶⁹ obtuvieron diesel verde con un alto número de cetano mediante el hidrot ratamiento de aceite de palma usando un catalizador convencional de $NiMo/\gamma-Al_2O_3$, con una presión de H_2 en el intervalo de 40-90 bares y una temperatura de 350 °C. De este experimento se obtuvieron como productos principalmente $C_{16}H_{34}$ y $C_{18}H_{38}$.

Liu et al.,⁵⁶ emplearon un catalizador de Ni-Mo soportado en $SiO_2-Al_2O_3$ para el hidrot ratamiento de aceite de *Jatropha*. Las condiciones fueron a 350 °C, una presión de H_2 de 4 MPa, una relación molar H_2 /aceite de 800 y un LHSV de 7.6 h^{-1} .

Robota et al.⁷⁰ utilizaron un catalizador de 3% peso Pd/Carbono para la desoxigenación en un reactor tubular con aceite de algas. La relación molar H_2 /aceite fue ligeramente superior de 30 y una temperatura de 350 °C. Como resultado, la conversión de triglicéridos a alcanos no se llevó a cabo de forma completa. Se observó la presencia de un remanente de triglicéridos en el fondo del reactor. Estos fueron separados de los alcanos por destilación y realimentados al reactor utilizando los mismos flujos de aceite e hidrógeno. Los alcanos principales de la reacción fueron $C_{17}H_{36}$ y $C_{18}H_{38}$.

Liu et al.¹⁶ realizaron estudios de hidrotreatmento con aceite de higuera empleando distintos catalizadores: Ni/SAPO-11, Ni/H-Beta, Ni/ZSM-5 y Ni/USY. Estos catalizadores fueron probados en un micro-reactor de lecho fijo con flujo continuo. La conclusión de dichos experimentos da como resultado que el catalizador con mejor actividad es el de Ni/SAPO-11 con una conversión del 99% y un rendimiento de 95.4 % en el intervalo de C₁₆-C₁₉ a una temperatura de 300 °C.

Chen et al.⁷¹ investigaron el hidrotreatmento de cadenas largas insaturadas de FAME para la producción de combustibles bajo un catalizador de Ni/HZSM-5. La temperatura y la presión juegan un papel importante en la conversión de FAME y en la selectividad de gasolinas o turbosina. El hidrotreatmento con un catalizador de 10% peso Ni/HZSM-5 a 280°C, una presión de H₂ de 0.8 MPa, LHSV de 4 h⁻¹ y una relación molar de H₂/aceite de 15, da como resultado una alta selectividad de 88.2% para compuestos de alcanos líquidos, aproximadamente 8% gasolinas, 32.5% turbosina y 47.7% diesel. La desactivación del catalizador fue causada por el carbono depositado en los sitios activos, el cual provoca problemas de taponamiento de poros.

Hachemi y Murzin⁷² estudiaron a través de experimentación y el modelado cinético la hidroxigenación (HDO) de FAME sobre catalizadores de 5% Ni/H-Y-80 y 5% Pd/C dentro del intervalo de hidrocarburos de diesel verde. Los experimentos fueron desarrollados en un reactor semi-batch con una temperatura de reacción de 300°C y una presión de 30 bar. Obteniendo un modelo cinético para la conversión mediante el hidrotreatmento de FAME y triglicéridos contenidos en dos grupos de moléculas de C₁₆ y C₁₈.

Cheng et al.⁷³ realizaron el estudio de hidrotreatmento de la micro-alga *Nannochloropsis oceanica* bajo un catalizador de Ni-Y. Se obtuvo una conversión de la micro-alga de 91.5% con una selectividad de hidrocarburos en el intervalo de bioturbosina de 56.2% con una inyección de alimentación de 0.02 mL/min a 275 °C en un reactor continuo de cama fija. Una relación de isomerización de 46.4% fue lograda y atribuida a las condiciones optimizadas de la reacción, así como la selectividad presentada por el catalizador.

1.7.2 Hidroisomerización e hidrosintegración de parafinas

La *hidroisomerización* es clave en la obtención de parafinas ramificadas (isomerizadas). Este tipo de reacciones se llevan a cabo principalmente con el uso de catalizadores selectivos,

como es el caso de las zeolitas u otros soportes ácidos. Las parafinas normales (lineales) en el intervalo de punto de ebullición del diesel tienen comúnmente un número de cetano mayor que el de sus isómeros ramificados. Sin embargo, las iso-parafinas presentan puntos de congelación más bajos que las n-parafinas. Estas reacciones son bastante rápidas con pequeños efectos de calor. La conversión por efecto de la temperatura aumenta y por lo tanto la producción de isómeros, sin embargo, las reacciones de isomerización por ser ligeramente exotérmica se favorece termodinámicamente a bajas temperaturas, menores de 200°C, bajo espacio-velocidad y baja presión de hidrógeno.⁷⁴⁻⁷⁶

Un ejemplo de la hidroisomerización es el caso del n-hexano a iso-hexano que se presenta en la Figura 11.⁷⁷

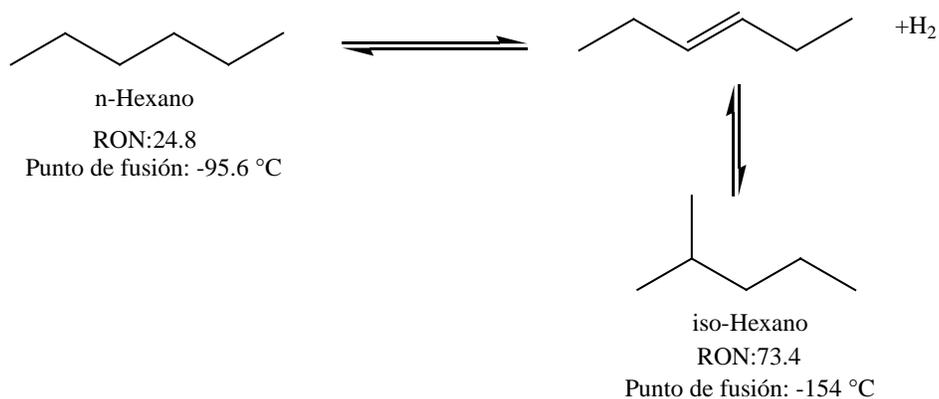


Figura 11. Isomerización de hexano a iso-hexano

La hidroisomerización es una reacción típica de la catálisis ácida y pueden ser empleados catalizadores de cloruro de alúmina como soporte conteniendo metales nobles. Estos catalizadores presentan una desventaja al ser muy sensibles a las impurezas de la alimentación, tales como el agua.⁷⁸

La *hidrodesintegración* implica el uso de hidrógeno en la conversión de los componentes de mayor peso molecular en una materia prima a productos más ligeros. La isomerización y el rompimiento del enlace C-C en moléculas grandes ocurre para producir hidrocarburos dentro del intervalo de la gasolina, turbosina y diesel. Son reacciones relativamente lentas y, por lo tanto, la mayor parte de la reacción ocurre en la última sección del reactor. Tal tratamiento requiere de temperaturas y presiones de hidrógeno altas para minimizar las reacciones de polimerización de la cadena de carbonos que conducen a la formación de coque. Las principales reacciones de hidrodesintegración son la desintegración de olefinas y la

saturación de las parafinas, un ejemplo de este tipo de reacciones se muestra en Figura 12.^{77,79,80} Los rendimientos de la hidrodeseintegración se incrementa en alta temperatura de reacción, alta presión de hidrógeno (cte.) y bajo espacio-velocidad.

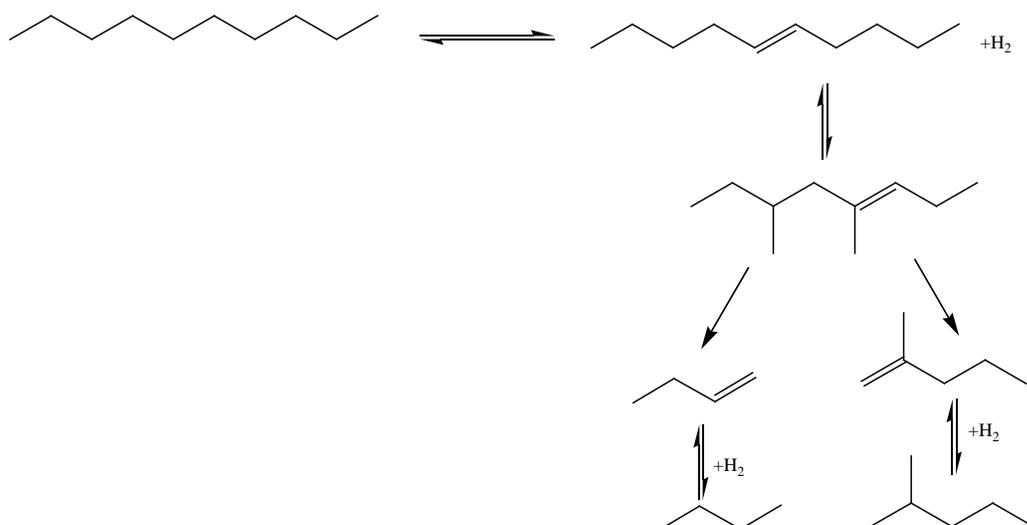


Figura 12. Reacción de hidrodeseintegración con isomerización

Por lo tanto, para obtener un alto rendimiento de producto, es necesario controlar cuidadosamente las reacciones de hidrodeseintegración. Las temperaturas del reactor se controlan cuidadosamente para observar el alcance de cada una de las reacciones.

Las reacciones de hidroisomerización e hidrodeseintegración se llevan a cabo de manera simultánea en un mismo reactor.

1.7.2.1 Cinética de la hidroisomerización e hidrodeseintegración

La producción de biocombustibles a través de la hidroisomerización e hidrodeseintegración es un área relativamente nueva de investigación y particularmente enfocada al desarrollo de modelos cinéticos y reactores. Los datos cinéticos reportados en la literatura son escasos para hidroisomerización e hidrodeseintegración de diesel verde, por esta razón es difícil encontrar y utilizar datos cinéticos en este tipo de estudios de investigación.

Calemma et al.⁸¹ investigaron la hidroisomerización e hidrodeseintegración de n-hexadecano, n-octacosano y n-hexatriacontano, sobre un catalizador de 0.3% platino/silica alúmina mesoporosa en una microautoclave a 345, 360 y 380 °C; a una presión de hidrógeno de 2 a

13.1 MPa. Ellos propusieron una red de reacciones para el modelo cinético propuesto, como se muestra en la Figura 13.

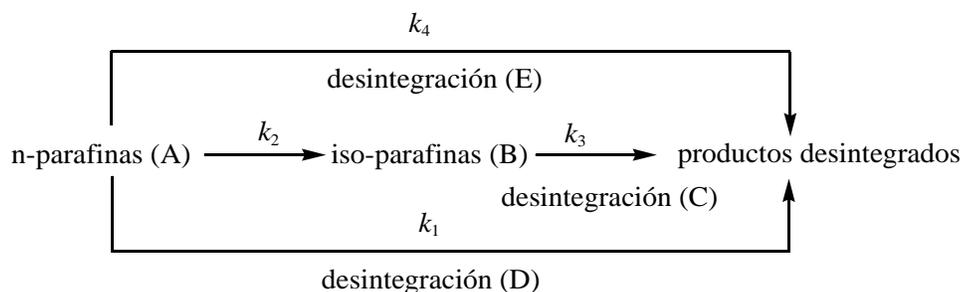


Figura 13. Red de reacción de isomerización/desintegración⁸¹

Donde, (A) es la concentración de n-parafinas (parafinas lineales), (B) la concentración de iso-parafinas (parafinas ramificadas), (C), (D) y (E) son la concentración de productos de la desintegración. De acuerdo con el esquema cinético, se pueden llevar a cabo cuatro rutas de reacción en la hidroisomerización e hidrodeseintegración, k_1 es la constante de velocidad de la hidrodeseintegración de n-parafinas a través de la catálisis ácida, k_2 es la constante de velocidad de la hidroisomerización de las n-parafinas, k_3 es la constante de velocidad de la hidrodeseintegración de isoparafinas y, k_4 es la constante de velocidad de la desintegración térmica de n-parafinas. Además, los valores de las constantes de velocidad se presentan de esta forma $k_2 > k_3 > k_4 > k_1$. La conversión de las n-parafinas sigue una cinética de primer orden con respecto al hidrocarburo.⁸¹

1.7.3 Separación de productos

La separación de productos en el proceso HEFA es de vital importancia, debido a que de ella depende el obtener los productos de valor agregado que van a ser comercializados y los residuos o productos no deseados del proceso.

Una de las operaciones unitarias más empleadas y estudiadas a través de los años para la separación de productos de interés es la destilación. El objetivo de la destilación es separar en dos o más productos una mezcla alimentada de dos o más componentes. Los productos del fondo son casi siempre líquidos, pero los destilados puede ser un líquido, un vapor o incluso ambos.⁸²

La mayoría de los componentes del petróleo de fracciones pesadas no logran ser específicamente identificados, por tal motivo es común agruparlos en un intervalo de

temperaturas de ebullición convenientemente seleccionado y denominados fracciones o pseudocomponentes del petróleo. Cada fracción se trata como si fuera una sola especie química la cual se denomina pseudocomponente. Los tipos de fracciones de separación comúnmente conocidas son gas seco, gas LP, gasolina, turbosina, querosina, diesel, y diversos gasóleos o aceites.^{83,84}

1.7.3.1 Tren de separación

La separación de productos mediante un tren de separación o tren de destilación tiene como objetivo separar mezclas multicomponentes mediante arreglos de columnas, que puedan generar los menores costos de operación y de capital. Las opciones de secuencias de separación aumentan a medida que el número de componentes aumenta. Para la separación de N componentes, con una pureza esencial son necesarios (N-1) columnas con el fin de separar completamente todos los componentes.⁸⁵

El orden en que son separados los componentes es determinante en los costos. El número de posibles secuencias puede ser muy grande de acuerdo con el número de compuestos a separar; por ejemplo, con cinco componentes el número de posibles secuencias de separación son 14, de este modo, con 10 componentes el número de posibilidades es cercano a 5000.⁸⁶

1.8 Estudios técnicos y económicos: Biorrefinerías

Una biorrefinería es una instalación industrial donde se transforma biomasa en múltiples productos de valor agregado incluyendo combustibles, energía, químicos y productos finales. Actualmente, las biorrefinerías han adquirido una gran atención ya que contribuyen a mejorar la sustentabilidad, desde la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero y dar valor agregado a los residuos orgánicos.⁸⁷ Una parte importante para la instalación de estas son los estudios técnicos y económicos, como su nombre los indica se dividen en dos secciones: *técnico y económico*.

Un *estudio técnico* consiste en proponer, diseñar y analizar las distintas opciones tecnológicas para producir los productos o servicios necesarios. Permite identificar los procesos, equipos, maquinaria, materia prima e instalaciones necesarias para llevar a cabo el proyecto.⁸⁸ Las partes que conforman un estudio técnico se pueden observar en la Figura 14.

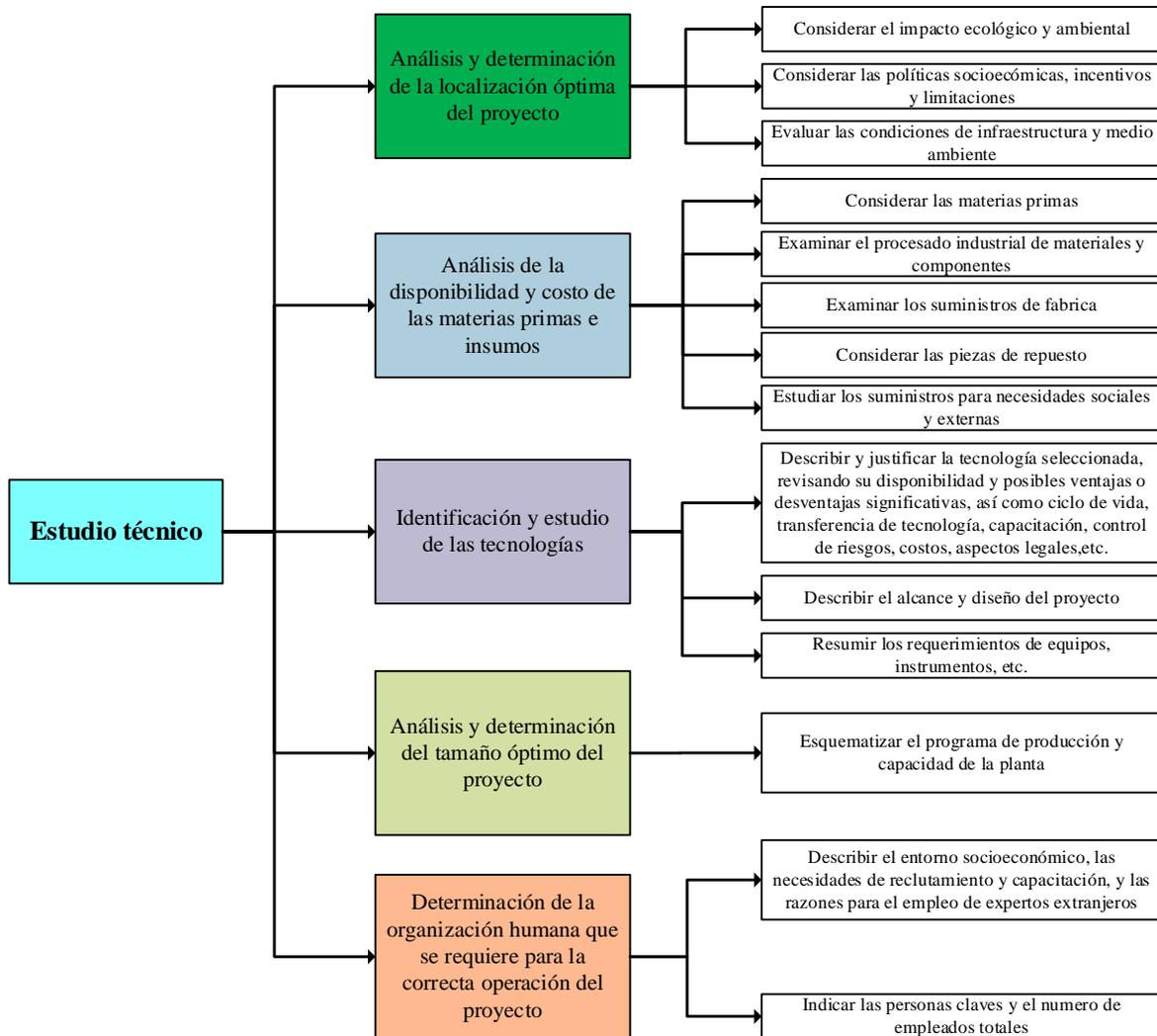


Figura 14. Partes de un estudio técnico⁸⁹

Un *estudio económico* tiene como objetivo determinar las cantidades de recursos económicos necesarios para llevar a cabo un proyecto, tales como costos de operación y costos de capital.⁸⁹

Los *costos de operación* o también conocidos como *Operating Expenditure (OPEX)*, son los costos de operación diarios que la empresa genera cada día para producir el servicio o producto deseado. Estos costos de operación pueden ser divididos en dos grandes grupos: costos fijos y costos variables. Como su nombre lo indica los costos fijos son los que permanecen estables a lo largo del periodo de operación del proceso tales como mano de obra, salarios, rentas, etc. Por otro lado, los costos variables son los que dependen de la capacidad o producción del proceso, como se muestra en la Figura 15.

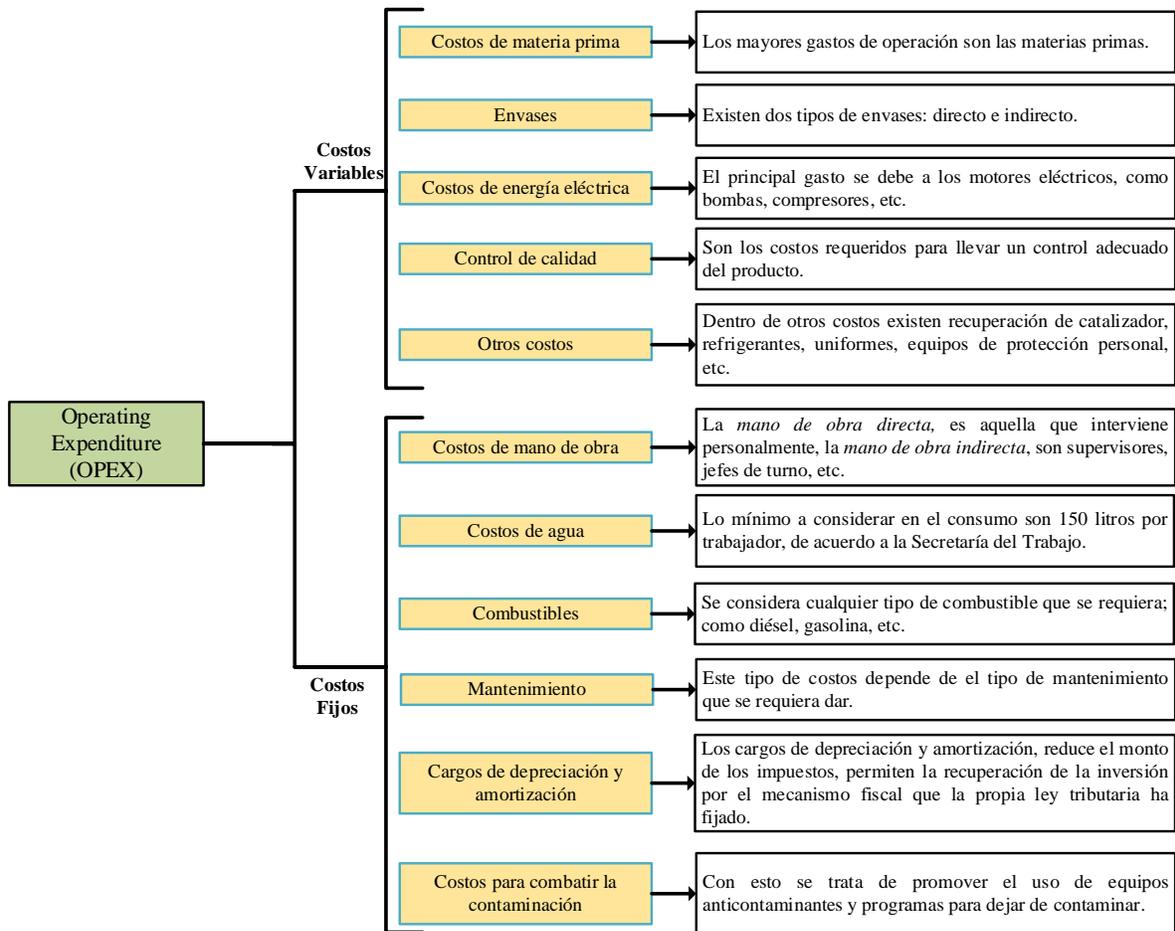


Figura 15. Clasificación de algunos costos de operación (OPEX)⁸⁹

Además de los costos de operación presentados en la Figura 15, existen costos de operación adicionales, tal es el caso de los costos de *administración y venta*. Los *costos de administración* son generados por parte de la administración de la empresa y no están directamente relacionados con la producción. Dentro de los gastos de administración pueden encontrarse los generados por departamentos de gerencia, dirección de planeación, investigación y desarrollo, recursos humanos, finanzas, ingeniería y relaciones públicas, pueden ser secretarías, papelería, salarios de gerentes, etc.⁸⁹ Los *costos de venta* son también llamados *mercadotecnia*, estos costos abarcan la investigación de nuevos mercados, investigación de nuevos productos, investigación de mercados, publicidad, etc. También se incluyen los costos generados por la generación de licencias de venta del producto y permisos gubernamentales.^{89,90}

Los *costos de capital* son conocidos como *Capital Expenditure* (CAPEX), estos son todos los costos generados por la adquisición de activos fijos con el fin de iniciar las operaciones de la empresa. Estos bienes que adquiere la empresa para llevar a cabo el proyecto pueden ser clasificados en dos campos: tangibles o intangibles. De los tangibles se pueden considerar terrenos, edificios, maquinaria, equipo, mobiliario, vehículos de transporte, herramientas y otros. Por otro lado, los intangibles pueden ser consideradas las patentes, marcas, diseños comerciales o industriales, nombres comerciales, asistencia técnica o transferencia de tecnología, puesta en marca, contratos de servicios, etc.⁸⁹

Por lo anterior, los estudios técnicos y económicos son de gran importancia en el diseño de procesos y a través de estos se obtienen las tecnológicas y condiciones óptimas de operación que permiten alcanzar los OPEX y CAPEX mínimos, que generarán un proceso viable.

Incentivos a las energías renovables en México

La Ley del Impuesto Sobre la Renta (LISR) en el Artículo 34: Fracción 13 se encuentra vigente hasta la fecha desde el día 30 de Noviembre de 2016,⁹¹ menciona que puede ser depreciado o amortizado el 100% de maquinaria y equipo para la generación de energía provenientes de fuentes renovables o de sistemas de cogeneración de electricidad eficiente. Para los efectos del párrafo anterior, son fuentes renovables aquellas que por naturaleza se consideran inagotables, tales como la energía solar, eólica, hidráulica, geotérmica, y la *proveniente de la biomasa* o de los residuos. Esto será aplicable siempre que la maquinaria se encuentre en operación durante un periodo mínimo de 5 años inmediatos siguientes al ejercicio en el que se efectuó la deducción.

El gobierno actual ha dejado de lado los incentivos gubernamentales para la industria de las energías renovables y ha apostado por la industria petrolera y eléctrica a través de empresas como PEMEX y CFE. Para fuentes renovables como la biomasa no se han presentado apoyos hasta el momento.⁹²

En agosto del 2019, se presentó el Programa Estratégico Nacional de Tecnología e Innovación Abierta (PENTA) como parte de una iniciativa de vinculación por parte del CONACYT para brindar apoyos a entidades públicas y privadas para desarrollar diversos estudios, entre ellos transición energética y sustentabilidad.⁹³

1.8.1 Estudios técnicos y económicos para la producción de bioturbosina

Los estudios técnicos y económicos enfocados a la producción de bioturbosina han recibido una considerable atención en la última década, estos a través de diferentes materias primas y procesos utilizados.

En el 2013 Klein-Machusamer et al.,⁹⁴ realizaron el modelado de tres procesos para la producción de combustible de aviación por microalgas, semillas de *Pongamia pinnata* y caña de azúcar; usando el software SuperPro Designer considerando una escala de producción de 61 millones de litros de bioturbosina por año. Los resultados del análisis de CAPEX para el escenario de microalgas fueron de \$3,451, para la semilla de *Pongamia* \$506 y el de fermentación fue \$259, millones de USD. Por otro lado, el OPEX para el modelo de microalgas fue de \$984 millones USD, el de *Pongamia* de \$303 millones USD, mientras que el de fermentación fue \$253 millones USD. Para el escenario de microalgas el precio de venta del combustible se establece en \$8.44 USD/L, para *Pongamia* fue de \$2.35 USD/L, mientras que el de fermentación fue de \$1.89 USD/L. El análisis de sensibilidad del precio de la materia prima y otros factores puede reducir los precios del producto significativamente. Para el escenario de microalgas el precio de producto fue de \$2.42 USD/L, para *Pongamia* fue de \$1.60 USD/L y para la caña de azúcar fue \$1.05 USD/L.

Natelson et al.,⁹⁵ estudiaron el proceso de producción de bioturbosina a través del aceite de camelina en Montana, EUA. Se consideró la tecnología de descarboxilación, la cual considera tres etapas hidrólisis, descarboxilación y reformación; el modelado se llevó en Aspen Plus® y el análisis económico se llevó a cabo en Aspen Icarus Process Evaluator®. La capacidad del proceso fue de 76,000 m³ de bioturbosina. El costo total de la refinería fue de \$283 millones USD en 2014. Considerando la venta de subproductos el precio de venta de la bioturbosina fue de \$0.80 USD/kg. Se puede considerar un proceso rentable y competitivo.

En el año 2016, Wang²³ llevó a cabo un análisis técnico-económico de la producción de bioturbosina a través de *Jatropha* cosechada en Taiwán. Se simularon dos escenarios: el primero considerando desde la fruta de la *Jatropha* y el segundo solo consideró el aceite de *Jatropha* como materia prima. El modelado de proceso se desarrolló en Aspen Plus®. La capacidad del proceso fue de 2400 Tm/año. De acuerdo con los resultados el CAPEX del escenario fruta fue de \$387 millones USD, mientras que el escenario de aceite fue de \$284 millones USD. El costo de operación por año del escenario fruta fue de \$116 millones USD

y del escenario aceite fue de \$134 millones USD. El precio de venta del combustible fue de \$1.431 USD/L para el escenario fruta, mientras que para el escenario de aceite fue de \$1.51 USD/L. De acuerdo con los resultados se puede decir que el escenario de aceite requiere los menores CAPEX, sin embargo, presenta los mayores OPEX, caso contrario con el escenario de fruta. Se puede considerar rentable el escenario de fruta debido a que los subproductos pueden ser comercializados y esto aumentaría la rentabilidad del proceso.

Li et al.,⁹⁶ llevaron a cabo un estudio técnico y económico de la producción de bioturbosina con aceite de camelina producido en Canadá. El modelado de procesos se realizó con el software SuperPro Designer V9.5. La capacidad del proceso fue de 225 millones de litros. El CAPEX requerido para esta biorrefinería fue de \$63,236 millones USD. Considerando un precio de aceite bajo de \$0.43 USD/L los OPEX fueron de \$165,463 millones de USD, considerando un precio de aceite de \$0.80 USD/L el OPEX fue de \$269,201 millones USD y, por último, si se considera un precio de aceite de \$1.22 USD/L el OPEX fue de \$386,958 millones USD. Una mayor capacidad de producción puede generar en un proceso rentable y un precio de venta competitivo contra el de origen fósil.

Por otro lado, Klein et al.,⁹⁷ realizaron un estudio técnico y económico de una biorrefinería para la producción de bioturbosina con el objetivo de suplir el 5% del consumo de turbosina en Brasil en 2014, correspondiente a 267 millones de litros de bioturbosina por año. Se realizaron estudios con diferentes tecnologías: HEFA, FT y ATJ y, materias primas como *Macauba*, soya y palma. La simulación de procesos se llevó a cabo en Aspen Plus®. Los precios de venta de los productos de la biorrefinería fueron de \$0.35 USD/L etanol hidratado, \$0.54 USD/L nafta verde, \$0.50 USD/L de bioturbosina y \$0.45 USD/L para diesel verde. El CAPEX con menor valor en el escenario HEFA es el que considera aceite de soya como materia prima con \$520 millones USD. En el caso del escenario FT la caña de azúcar presentó el menor CAPEX de los procesos evaluados. El escenario ATJ con el menor CAPEX fue el de etanol de primera generación con \$274 millones USD. El precio mínimo de venta del combustible con el escenario HEFA que usó aceite de palma fue de \$0.74 USD/L, para aceite de *Macauba* fue de \$0.59 USD/L y el aceite de soya fue de \$0.77 USD/L. Se puede considerar rentable y competitivo en comparación con el de origen fósil.

En la Tabla 8 se muestra un resumen de los diferentes estudios técnico y económicos para la producción de bioturbosina con diferentes materias primas.

Tabla 8. Estudios técnicos y económicos para la producción de bioturbosina

Materia Prima	Precio del producto	Costo de la biorrefinería (millones de dólares)	Capacidad del proceso	Ref.
Microalgas	\$2.42 USD/L	\$3451		
Pongamia pinnata	\$1.60 USD/L	\$506	61 millones L/año	94
Caña de azúcar	\$1.05 USD/L	\$259		
Aceite de ricino	\$0.61 USD/L	\$283	76 millones L/año	95
Fruta de <i>Jatropha</i>	\$1.43 USD/L	\$387		
Aceite de <i>Jatropha</i>	\$1.51 USD/L	\$284	2400 Tm/año	23
Aceite de ricino	\$0.80 USD/L	\$167	225 millones L/año	96
Aceite de Macauba	\$0.59 USD/L	\$347		
Aceite de palma	\$0.74 USD/L	\$553	267 millones L/año	97
Aceite de soya	\$0.77 USD/L	\$520		

1.9 Integración de calor (Energía)

El calor es una de las formas de energía en el proceso químico. El objetivo de la integración de calor es minimizar el consumo de insumos calientes y fríos, mientras se maximiza el intercambio de calor en las corrientes de proceso. En un proceso típico, es normal tener corrientes calientes que deben enfriarse y corrientes frías que deben calentarse. El uso de servicios auxiliares externos de calentamiento y enfriamiento (por ejemplo, agua de enfriamiento, refrigerantes, vapor, aceites de calefacción, etc.) para abordar todas las tareas de calefacción y refrigeración no es rentable. La integración de las corrientes calientes y frías del proceso puede conducir a una reducción significativa de los costos. El concepto clave es poder transferir calor de las corrientes calientes del proceso a las corrientes frías del proceso antes de que se utilicen los servicios auxiliares.⁹⁸

Una de los métodos más usuales para optimizar la integración de calor es el método Pinch. El método “Pinch” es una metodología simple para el análisis de los procesos químicos y de los servicios auxiliares con la ayuda de la Primera y Segunda Ley de la Termodinámica. Con la Primera Ley se calculan los cambios de entalpía en las corrientes que pasan por los intercambiadores de calor. La Segunda Ley determina la dirección del flujo de calor, i.e. el calor solo puede fluir en la dirección de caliente a frío (gradiente de temperatura). Esta técnica proporciona herramientas para diseñar una red de intercambio de calor que alcance los valores mínimos de consumo energético y equipos; herramientas para la simplificación de la red y, herramientas para el diseño de los servicios generales del proceso.⁹⁹

La metodología del análisis Pinch se presenta a continuación:¹⁰⁰

1. Obtener una copia del diagrama de flujo de la planta incluyendo temperatura, flujos y capacidad calorífica, y obtener los balances de masa y energía.
2. Extraer del diagrama de flujo los datos de las corrientes calientes del balance de masa.
3. Seleccionar el ΔT_{min} , calcular los objetivos energéticos y la temperatura del Pinch.
4. Examinar las posibilidades de cambio en el proceso, modificar los datos y cambiar el objetivo.
5. Considerar las posibilidades para la integración con otra planta en sitio, o restricciones de intercambio de calor de las corrientes; comparar nuevos objetivos con el original.
6. Analizar el potencial necesario e identificar oportunidades para combinar con el calor.
7. Habiendo decidido si implementar cambios en el proceso y qué niveles de insumos se utilizarán, diseñar una red de intercambiadores de calor para recuperar el calor.
8. Diseñar los sistemas de servicios auxiliares para satisfacer los requisitos restantes de calentamiento y enfriamiento, modificar la red de intercambio de calor según sea necesario.

Gutiérrez-Antonio et al.,⁶ realizaron una integración energética de un proceso de hidrot ratamiento para la producción sustentable de bioturbosina. Ellos consideraron la integración de calor de un proceso con el uso de *Jatropha Curcas L.* como materia prima. La simulación de proceso la realizaron en Aspen Plus. Obtuvieron como resultado un decremento en los servicios auxiliares de calor y enfriamiento cuando se integra la energía en un proceso; i.e. los CAPEX incrementaron debido a los equipos requeridos para desarrollar la integración, sin embargo, los OPEX fueron reducidos considerablemente. La integración de procesos puede lograr una reducción del 86% en los impactos ambientales del proceso, además puede reducir la huella de carbono generando con esto un proceso sustentable.

Gutiérrez-Antonio et al.,¹⁰¹ investigaron el modelado, simulación e intensificación del hidrot ratamiento de aceite de micro-alga para producir combustible renovable de aviación. El modelado del proceso y simulación fue desarrollado en Aspen Plus V9.1 y solo consideraron los componentes más importantes de las micro-algas. Usaron el método Guthrie descrito por Turton R.¹⁰² para la estimación de los CAPEX del proceso para ambos escenarios, el convencional y el integrado. El proceso integrado ayuda a conocer las condiciones a las

cuales es posible reducir emisiones de CO₂, reduciendo en 34% las emisiones de CO₂, y un precio competitivo de bioturbosina, 78% más barato que el precio de la turbosina fósil.

1.10 Optimización de procesos mediante superficies de respuesta

La optimización es una herramienta esencial en el diseño de procesos con el fin de lograr una operación eficiente del sistema producto, las unidades de proceso, mejoras en costo, tiempo, eficiencia productividad y/o calidad. La Metodología de Superficies de Respuesta (MSR) fue desarrollada en la década de 1950 y es una alternativa usada a menudo en la optimización en de la industria especialmente en procesos químicos donde el rendimiento de la reacción o costos de producción pueden ser optimizados como una función de factores de proceso controlables.^{103,104}

Esta metodología en los últimos años ha sido clave en el diseño de experimentos de distintos trabajos de investigación.¹⁰⁵⁻¹⁰⁷ La MSR es una técnica empleada para el análisis de regresión lineal múltiple mediante el uso de datos cuantitativos obtenidos de diseño de experimentos adecuados para resolver ecuaciones multivariable simultáneamente.¹⁰⁸ La representación gráfica de estas ecuaciones se le conoce como superficies de respuesta.¹⁰⁹

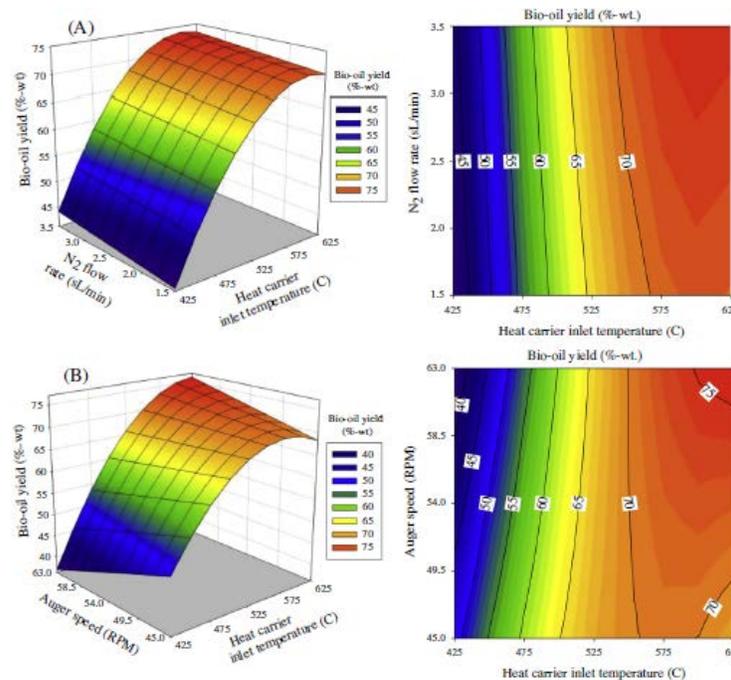


Figura 16. Ejemplo de superficies de respuesta¹⁰⁶

La MSR es un conjunto de técnicas que comprende: a) Establecer una serie de experimentos que genere mediciones adecuadas y confiables de la respuesta de interés, b) Determinar un modelo matemático que mejor se ajuste a los datos recopilados del diseño elegido en (a) y, c) Determinar la configuración óptima de los factores experimentales que produce el valor máximo (o mínimo) de la respuesta.¹⁰⁸

Dharma et al.,¹¹⁰ desarrollaron una optimización del proceso de producción de biodiesel para el mezclado de *Jatropha Curcas-Ceiba pentrada* usando la metodología de superficies de respuesta. Las variables utilizadas en este proceso fueron la relación metanol/aceite, velocidad de agitación y concentración del catalizador de hidróxido de potasio, esto se realizó mediante el diseño de experimentos de Box-Behnken. Los parámetros de operación optimizados para la transesterificación de la mezcla de aceite de *Jatropha/Ceiba* a 60°C bajo un periodo de 2 h; una relación metanol/aceite de 30%, una velocidad de agitación de 1300 rpm y una concentración de catalizador de 0.5 % peso. Estos parámetros óptimos de operación dieron como resultado un alto rendimiento de biodiesel con un valor *ca.* 93.33%.

Solarte-Toro et al.,¹¹¹ evaluaron la viabilidad económica de la producción de bioetanol usando como biomasa los residuos del árbol de olivo con la optimización del pretratamiento de ácido diluido. Se simuló el proceso de bioetanol teniendo en cuenta la influencia de las condiciones operativas de la etapa de pretratamiento. Los resultados técnicos y económicos se analizaron mediante la metodología de superficie de respuesta (MSR). Los resultados obtenidos con las condiciones óptimas de operación muestran que el precio más bajo de bioetanol fue de 1.94 USD/L con un rendimiento de 174.12 L/Ton.

Sulaiman et al.,¹¹² investigaron la influencia de los parámetros del proceso de extracción de oleorresina de partícula de *gaharu* secas. Los parámetros seleccionados incluyen tamaño de partícula, relación solvente/materia prima y duración de extracción. Con la ayuda de la metodología de superficie de respuesta (RSM), los resultados sugieren que el conjunto óptimo de condiciones de extracción debe consistir en un tamaño de partícula de 0.5-1.0 mm, una relación de materia prima/etanol de 1:29.9 g/ml y un tiempo de extracción de 4.97 h. Bajo estas condiciones, se obtuvo el mayor rendimiento de oleorresina de *gaharu*, i.e. 7.63% (p/p) con un contenido total de resina del 6.90% (p/p).

Capítulo II: Metodología

En el presente capítulo se detalla la metodología del trabajo de investigación realizado, está se basó en el modelado de proceso de dos escenarios propuestos. Las estrategias para llevar a cabo este trabajo están basadas en programas comerciales para la resolución de problemas de balances de masa y energía, análisis de sensibilidad, estimación económica de procesos y optimización. El modelado y simulación de proceso se realizó con el objetivo de producir un proceso que sea técnica y económicamente viable para la producción de bioturbosina a partir de aceite de *Jatropha Curcas L.* mediante el proceso de hidrot ratamiento de ésteres y ácidos grasos (HEFA) en México.

2.1 Bases de diseño

La materia prima seleccionada para llevar a cabo este estudio fue el aceite de *Jatropha Curcas L.* La capacidad del proceso se estableció de acuerdo con la producción real de barriles/día de turbosina en las refinerías de PEMEX en México en el año 2018. La Secretaria de Energía reportó que PEMEX en el año 2018 procesó 37,655 barriles/día de turbosina (34,300 barriles/día – Julio 2019).³⁹ Con base en la producción diaria de turbosina se calculó la cantidad de L/día de bioturbosina necesarios para suplir el 1% de la producción de turbosina en México, i.e. 376.55 BPD.

Se consideró a la Ciudad de México como localización del proceso para los cálculos económicos, de acuerdo con las limitaciones que presentó el software de simulación económica APEA.

2.2 Escenarios de procesos propuestos

Se consideraron dos escenarios de estudio para llevar a cabo este proyecto de investigación, un **escenario A** y un **escenario B**, con diferentes características de diseño cada uno.

Escenario A. Este escenario se dividió en tres secciones: 1) hidrot ratamiento, 2) hidroisomerización e hidrod esintegración y, 3) separación de productos, como se muestra en el Diagrama de Flujo de Bloques (DFB) de la Figura 17. Se consideró una corriente de alimentación con aceite de *Jatropha* como materia prima. Esta corriente se alimentó

directamente a la sección de hidrot ratamiento. Los productos del hidrot ratamiento principalmente parafinas en el intervalo de diesel verde fueron enviadas a la sección de hidroisomerización e hidrodeseintegración y, finalmente los hidrocarburos obtenidos fueron separados en productos de valor agregado en un tren de destilación.

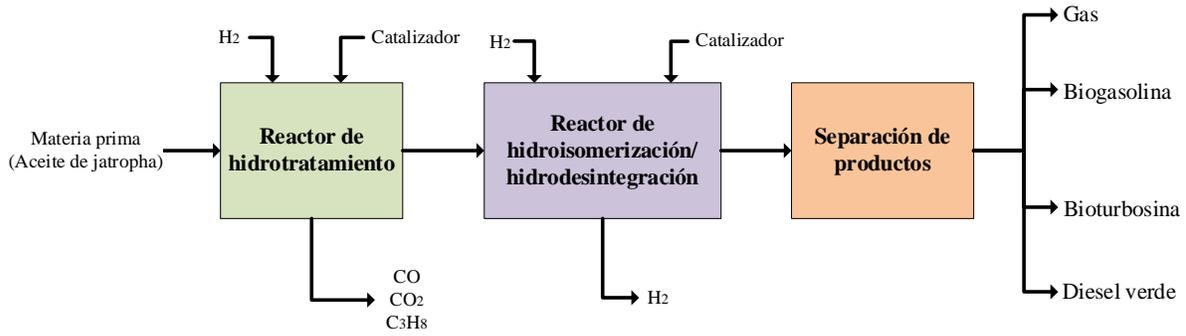


Figura 17. Diagrama de proceso del escenario A

Escenario B. Este escenario se dividió en siete secciones de proceso: 1) transesterificación, 2) separación de productos 1, 3) hidrot ratamiento de FAME, 4) hidrot ratamiento de triglicéridos, 5) mezclado de parafinas lineales, 6) hidroisomerización e hidrodeseintegración y, 7) separación de productos 2. Se consideró una corriente de alimentación de aceite de Jatropha la cual se dividió en dos corrientes adicionales, una de las corrientes adicionales se alimentó a la sección de transesterificación, mientras que la otra corriente se alimentó la sección de hidrot ratamiento. Los productos de la sección de transesterificación fueron alimentados a la sección de separación de productos 1, con la finalidad de separar el metanol, glicerol y los FAME. Los FAME fueron enviados a la sección de hidrot ratamiento para producir parafinas. Los productos de la sección de hidrot ratamiento de aceite fueron mezclados con los productos del hidrot ratamiento de FAME. La mezcla de productos de hidrot ratamiento se alimentó a la sección de hidroisomerización e hidrodeseintegración y, por último, los productos de interés fueron separados a la sección de separación de productos 2. Se consideró la implementación de la sección de producción de biodiesel para conocer los efectos económicos que podría tener el producir y vender glicerol como subproducto. Lo mencionado anteriormente se muestra en la Figura 18.

2.3 Recolección de datos e información sobre tecnologías disponibles

La recolección de datos fue tomada de literatura abierta y datos experimentales para la producción de bioturbosina a través del proceso HEFA. La información fue analizada y sintetizada para obtener un panorama global de las alternativas tecnológicas disponibles de procesamiento. Los datos recolectados fueron características de catalizadores (conversión, rendimiento, selectividad, relación hidrógeno/aceite y condiciones de operación), usados en reactores presentes, condiciones de operación de los equipos, tecnologías y materias primas.

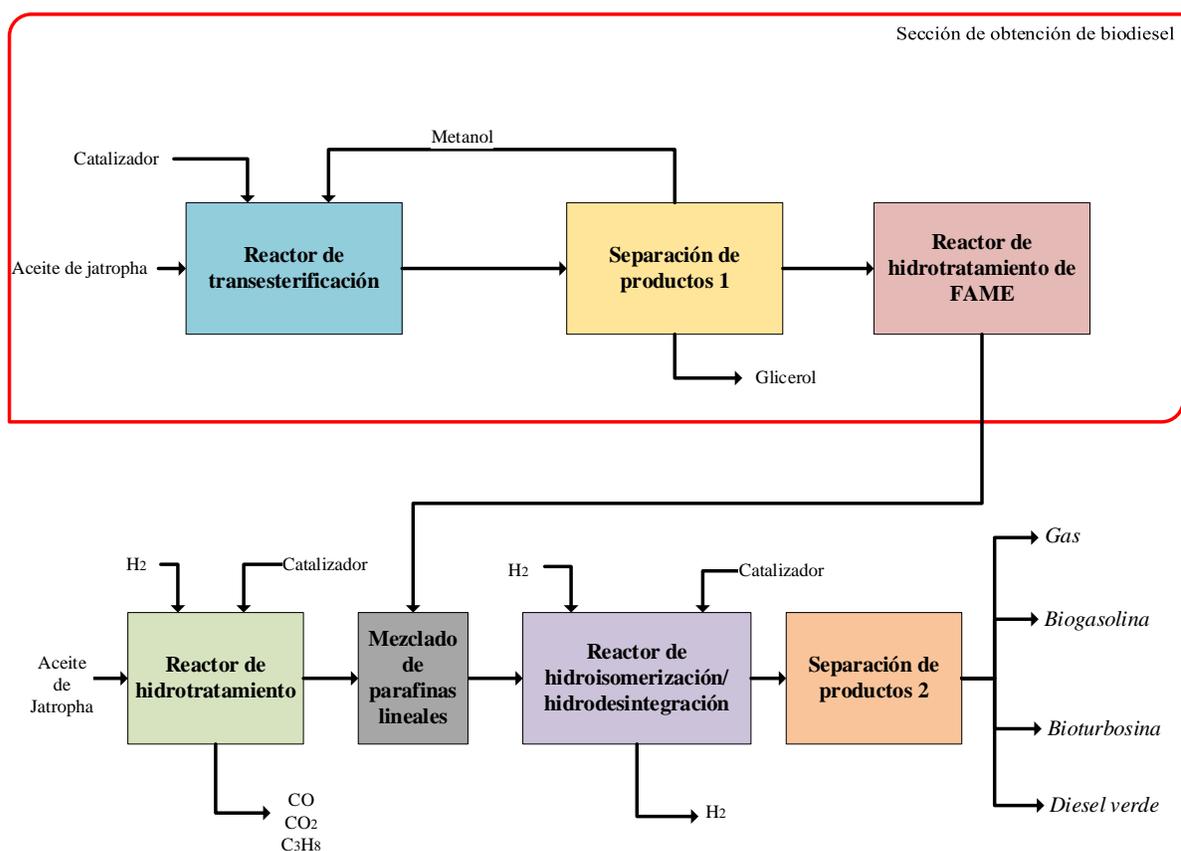


Figura 18. Diagrama de proceso del escenario B

2.4 Generación de una superestructura

Una superestructura es una forma de visualizar un panorama general en la síntesis de procesos químicos. En esta se realiza una representación y generación de una diagrama de alternativas de proceso la cual se encuentra compuesta de todas las operaciones unitarias potencialmente útiles (reactores, columna, intercambiadores, etc.) y todas las interconexiones relevantes.^{113,114} Con la creación de esta superestructura se buscó tener un panorama

completo del proceso y las posibles rutas para la producción de bioturbosina. Con los datos de la sección 2.2, se generó una superestructura considerando los catalizadores como parte fundamental y la aplicación de la tecnología HEFA.

La superestructura se dividió en tres líneas principales de procesamiento simbolizadas por tres diferentes colores; azul, verde y rojo, como se muestra en la Figura 19.

La ruta de procesamiento de color rojo representa el escenario A, en la cual se utilizó un catalizador de NiMo/Al₂O₃ en el reactor de hidrot ratamiento y un catalizador de Pt/Al₂O₃ en el reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración.

La ruta de procesamiento con color azul representa el escenario A con un catalizador de NiMo/SAPO-11 en la sección de hidroisomerización e hidrodeseintegración.

La ruta color verde representa el escenario B con una alimentación de biodiesel en la sección de hidrot ratamiento con un catalizador de 5% Ni/H-Y-80.

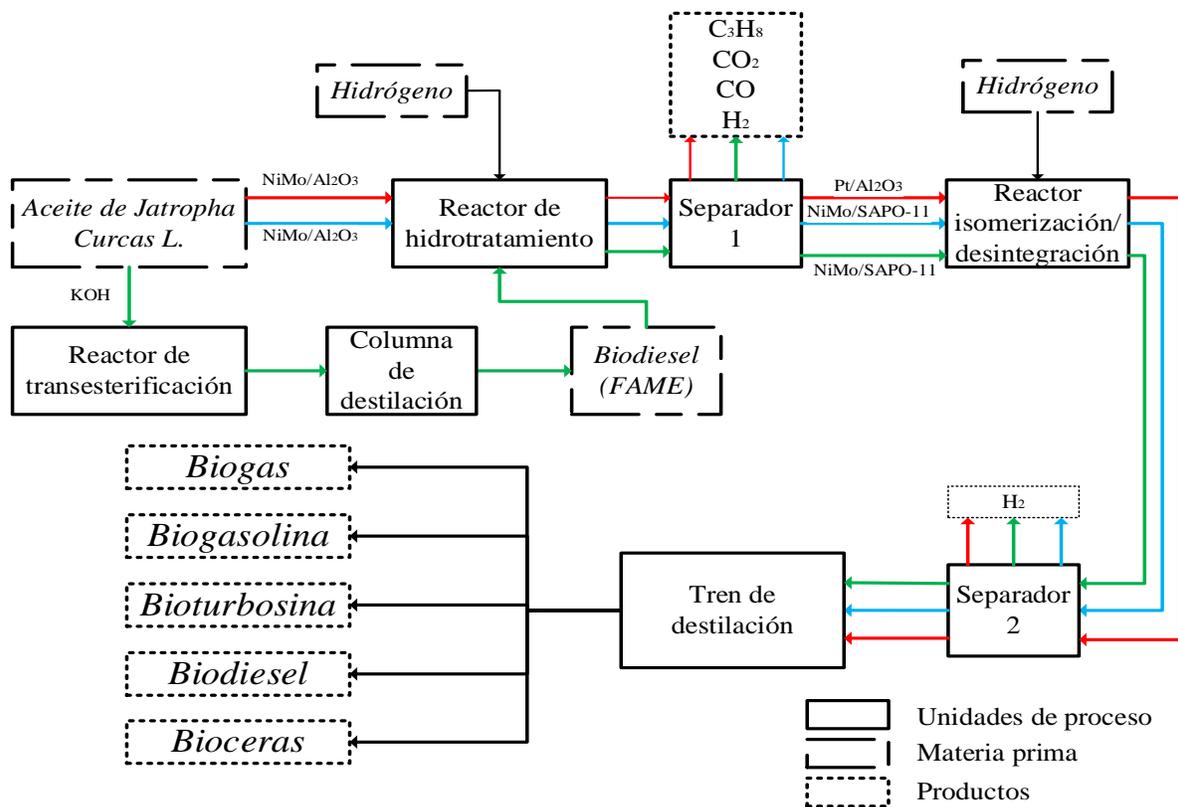


Figura 19. Superestructura generada de la tecnología HEFA

2.5 Simulación de procesos

La simulación de procesos se llevó a cabo a través del simulador comercial de procesos Aspen Plus® V10. Se seleccionó el modelo termodinámico NRTL (Non-Random-Two-Liquid) y la ecuación de estado Peng-Robinson para el cálculo de los equilibrios de fase. Se seleccionaron este modelo y la ecuación de estado debido a que puede predecir correctamente los datos termodinámicos de acuerdo con la guía presentada por Carlson E.¹¹⁵

Se simularon ambos escenarios descritos anteriormente con las especificaciones correspondientes. La metodología que se siguió en Aspen Plus se observa en el diagrama de flujo de la Figura 20.

En la Tabla 9 se observan los compuestos seleccionados de la base de datos de Aspen Plus para la simulación.

Tabla 9. Compuestos seleccionados al simulador de procesos

Compuesto	Fórmula	Compuesto	Fórmula
Ácido linoleico	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	Tridecano	C ₁₃ H ₂₈
Ácido oleico	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	Tetradecano	C ₁₄ H ₃₀
Ácido esteárico	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	Pentadecano	C ₁₅ H ₃₂
Ácido palmítico	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	Hexadecano	C ₁₆ H ₃₄
Dióxido de carbono	CO ₂	Heptadecano	C ₁₇ H ₃₆
Monóxido de carbono	CO	Octadecano	C ₁₈ H ₃₈
Agua	H ₂ O	Nonadecano	C ₁₉ H ₄₀
Hidrógeno	H ₂	Eicosano	C ₂₀ H ₄₂
Metano	CH ₄	Heneicosano	C ₂₁ H ₄₄
Etano	C ₂ H ₆	Docosano	C ₂₂ H ₄₆
Propano	C ₃ H ₈	Tricosano	C ₂₃ H ₄₈
n-Butano	C ₄ H ₁₀	Tetracosano	C ₂₄ H ₅₀
n-Pentano	C ₅ H ₁₂	Dipalmitina	C ₃₅ H ₆₈ O ₅
n-Hexano	C ₆ H ₁₄	Dioleina	C ₃₉ H ₇₂ O ₅
n-Heptano	C ₇ H ₁₆	Monopalmitina	C ₁₉ H ₃₈ O ₄
n-Octano	C ₈ H ₁₈	Monoleina	C ₂₁ H ₄₀ O ₄
n-Nonano	C ₉ H ₂₀	Metil Palmitato	C ₁₇ H ₃₄ O ₂
n-Decano	C ₁₀ H ₂₂	Metil Oleato	C ₁₉ H ₃₆ O ₂
Undecano	C ₁₁ H ₂₄	Glicerol	C ₃ H ₈ O ₃
Dodecano	C ₁₂ H ₂₆	Metanol	CH ₃ OH

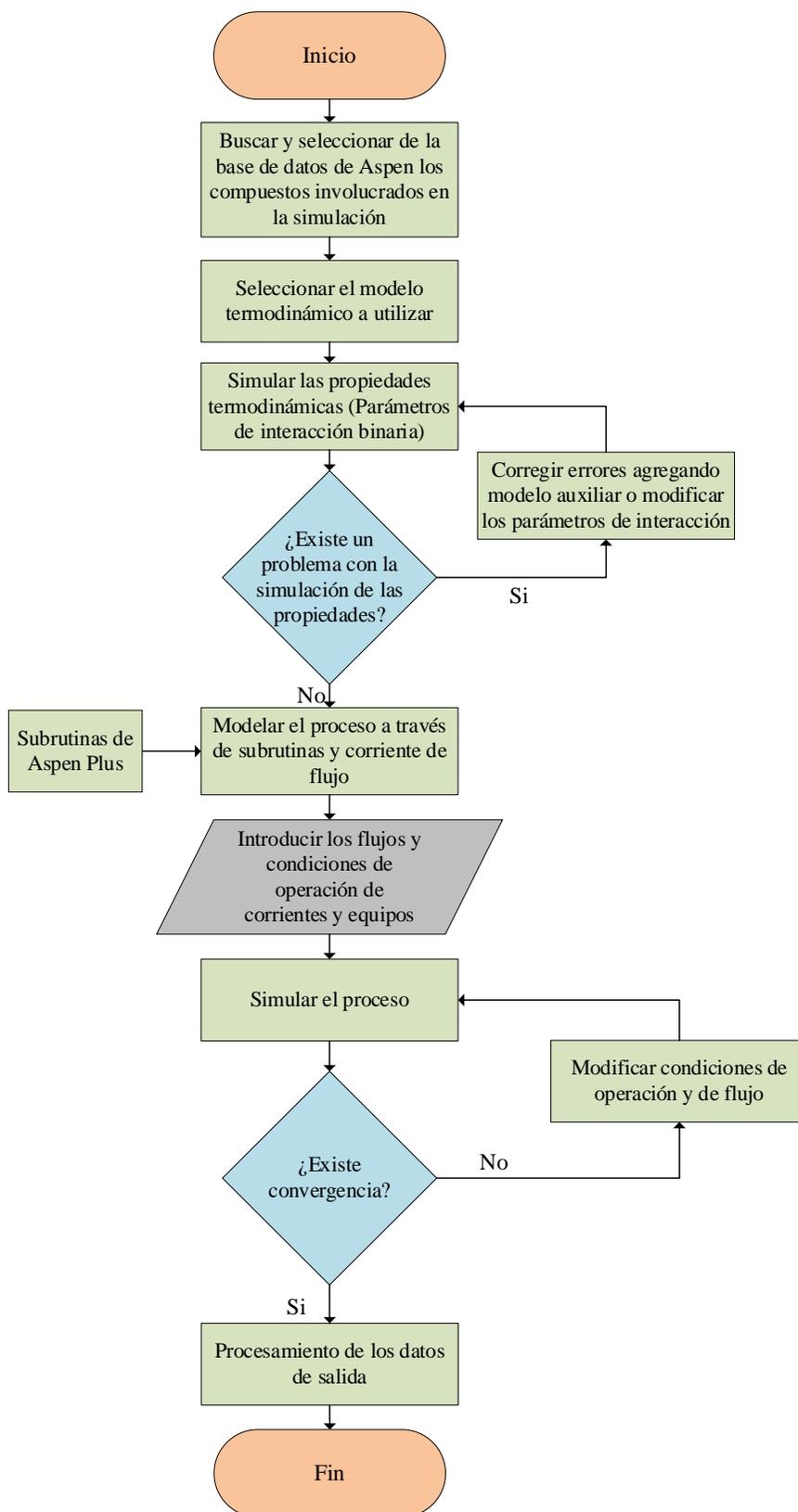


Figura 20. Diagrama de flujo de la metodología de simulación en Aspen Plus

2.5.1 Estudio de las propiedades del aceite de *Jatropha*

El aceite de *Jatropha Curcas L.* es la principal materia prima que se utilizó en la simulación de procesos de ambos escenarios por sus propiedades características y ventajas, como se describió en la sección 1.4 del Capítulo 1. El cálculo de las propiedades del aceite se realizó mediante una corriente de flujo de alimentación de aceite a 25°C y 1 atm. Los compuestos seleccionados para representar el aceite de *Jatropha* se basaron en los % peso de los principales compuestos del aceite, como se muestra en la Tabla 10. Además, se considera un contenido de ácidos grasos libres (por sus siglas en inglés, FFA) igual a cero, por esta razón se utilizó una composición modelo de triglicéridos para el aceite de *Jatropha*.

Tabla 10. Composición modelo del aceite de *Jatropha* (% peso)

Compuesto	Formula	Aceite de <i>Jatropha</i> (% peso)	Peso molecular (kg/kmol)
Tripalmitina	C ₅₁ H ₉₈ O ₆	16.8%	807.33
Triestearina	C ₅₇ H ₁₁₀ O ₆	6.9%	891.50
Trioleina	C ₅₇ H ₁₀₄ O ₆	41.1%	885.43
Trilinoleína	C ₅₇ H ₉₈ O ₆	35.2%	879.40

2.5.2 Simulación del diagrama de flujo de proceso

La simulación del diagrama de flujo de procesos se llevó a cabo considerando el diagrama de síntesis de procesos conocido como “diagrama de cebolla”. Véase Figura 21.

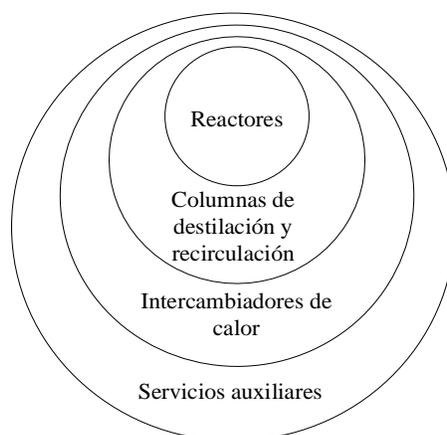


Figura 21. Diagrama de cebolla¹¹⁶

La simulación del diagrama de flujo de proceso inició con reactores, seguido de columnas de destilación y recirculación, después intercambiadores de calor requeridos en cada corriente y, por último, servicios auxiliares.

2.5.2.1 Reactores por escenario de proceso

Escenario A.

Reactor de hidrot ratamiento. La simulación del reactor de hidrot ratamiento se llevó a cabo seleccionando un reactor RYield. Este reactor requirió de datos experimentales de rendimiento de los productos de las reacciones. Estos rendimientos fueron obtenidos de datos experimentales realizados en un reactor batch agregando aceite de *Jatropha Curcas L.* variedad de Yautepec, México. Las condiciones de operación de este reactor fueron estudiadas previamente en experiencia experimental. Se utilizó un catalizador de NiMo/Al₂O₃ activado en azufre *in-situ*, con un rendimiento máximo de diesel verde *ca.* 77%; en condiciones de operación de 80 bar, 350 °C y tres horas como tiempo de residencia.⁵⁶ El cálculo del porcentaje de rendimiento se realizó de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\text{Rendimiento}(\% \text{ peso}) = \frac{\text{kg de producto}}{\text{kg de alimentación}} * 100 \quad (1)$$

Se utilizaron datos experimentales debido a las limitaciones que existen en las cinéticas reportadas para el hidrot ratamiento de aceite de *Jatropha*.

Reactor de hidroisomerización e hidrod esintegración. La simulación de este reactor se llevó a cabo en dos casos de estudios con distintos catalizadores.

Caso de estudio 1: Este caso de estudio se llevó a cabo usando un reactor RPLUG con datos del modelo cinético reportado por Calemma et al.,⁸¹ Para utilizar este modelo cinético fue necesario obtener las energías de activación (Ea) y el factor preexponencial (A) mediante la ecuación de Arrhenius. Las constantes de rapidez, los factores preexponenciales y las Ea se ingresaron al reactor de acuerdo con el mecanismo de reacción que se muestra en la Figura 13. Con el fin de saber si el catalizador empleado sería eficiente en la producción de bioturbosina, se realizaron diferentes análisis de sensibilidad para conocer las condiciones de operación óptimas del reactor para obtener el mayor rendimiento de bioturbosina.

Caso de estudio 2: En este caso de estudio se utilizó un catalizador tubular hueco de Ni-Mo/SAPO-11, el cual presentó una alta selectividad en la producción de bioturbosina, de acuerdo con lo reportado por Xing et al.¹¹⁷ Este estudio no presenta un modelo cinético, no obstante, reporta resultados de conversión y selectividad para producir parafinas lineales a isoparafinas y parafinas de cadenas cortas. Para llevar a cabo este estudio se consideraron las reacciones de la Figura 22.

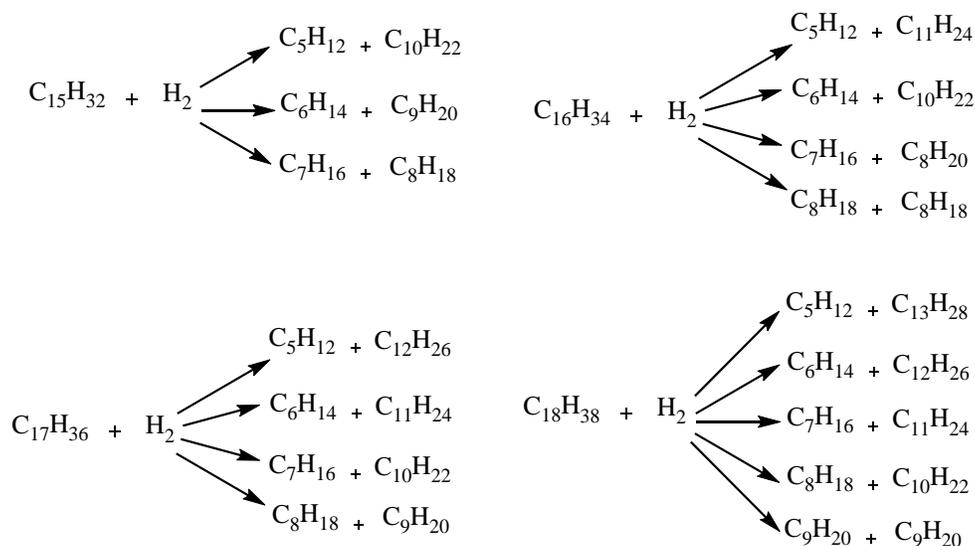


Figura 22. Reacciones de hidroisomerización e hidrodeseintegración

De acuerdo con la selectividad reportada, las reacciones estequiométricas de este reactor se muestran en la Tabla 11.

Tabla 11. Reacciones de simulación para parafinas lineales e isoparafinas

C₁₅	C₁₆
$\text{C}_{15} + \text{H}_2 \rightarrow 0.08\text{C}_5 + 0.20\text{C}_{10} + 0.79\text{isoC}_5 + 0.91\text{isoC}_{10}$	$\text{C}_{16} + \text{H}_2 \rightarrow 0.11\text{C}_5 + 0.16\text{C}_{11} + 0.88\text{isoC}_5 + 0.83\text{isoC}_{11}$
$\text{C}_{15} + \text{H}_2 \rightarrow 0.08\text{C}_6 + 0.29\text{C}_9 + 0.70\text{isoC}_6 + 0.91\text{isoC}_9$	$\text{C}_{16} + \text{H}_2 \rightarrow 0.11\text{C}_6 + 0.79\text{C}_{10} + 0.88\text{isoC}_6 + 0.21\text{isoC}_{10}$
$\text{C}_{15} + \text{H}_2 \rightarrow 0.08\text{C}_7 + 0.35\text{C}_8 + 0.91\text{isoC}_7 + 0.64\text{isoC}_8$	$\text{C}_{16} + \text{H}_2 \rightarrow 0.11\text{C}_7 + 0.31\text{C}_9 + 0.88\text{isoC}_7 + 0.68\text{isoC}_9$
	$\text{C}_{16} + \text{H}_2 \rightarrow 0.51\text{C}_8 + 0.49\text{IsoC}_8$
C₁₇	C₁₈
$\text{C}_{17} + \text{H}_2 \rightarrow 0.13\text{C}_5 + 0.13\text{C}_{12} + 0.86\text{isoC}_5 + 0.87\text{isoC}_{12}$	$\text{C}_{18} + \text{H}_2 \rightarrow 0.14\text{C}_5 + 0.11\text{C}_{13} + 0.85\text{isoC}_5 + 0.88\text{isoC}_{13}$
$\text{C}_{17} + \text{H}_2 \rightarrow 0.13\text{C}_6 + 0.18\text{C}_{11} + 0.86\text{isoC}_6 + 0.81\text{isoC}_{11}$	$\text{C}_{18} + \text{H}_2 \rightarrow 0.15\text{C}_6 + 0.12\text{C}_{12} + 0.84\text{isoC}_6 + 0.87\text{isoC}_{12}$
$\text{C}_{17} + \text{H}_2 \rightarrow 0.13\text{C}_7 + 0.22\text{C}_{10} + 0.86\text{isoC}_7 + 0.77\text{isoC}_{10}$	$\text{C}_{18} + \text{H}_2 \rightarrow 0.14\text{C}_7 + 0.18\text{C}_{11} + 0.85\text{isoC}_7 + 0.81\text{isoC}_{11}$
$\text{C}_{17} + \text{H}_2 \rightarrow 0.13\text{C}_8 + 0.30\text{C}_9 + 0.86\text{isoC}_8 + 0.69\text{isoC}_9$	$\text{C}_{18} + \text{H}_2 \rightarrow 0.14\text{C}_8 + 0.22\text{C}_{10} + 0.85\text{isoC}_8 + 0.77\text{isoC}_{10}$
	$\text{C}_{18} + \text{H}_2 \rightarrow 0.44\text{C}_9 + 0.55\text{isoC}_9$

Análisis de sensibilidad del reactor de hidroisomerización/hidrodesintegración

Los análisis de sensibilidad se realizaron en función de diferentes variables como la presión, temperatura, diámetro y longitud del reactor. Los intervalos utilizados en los análisis de sensibilidad se muestran en la Tabla 12.

Tabla 12. Intervalos de las condiciones de operación de los análisis de sensibilidad

Condición de operación	Intervalo
Temperatura (°C)	300-400
Presión (bar)	10-80
Diámetro (metros)	1-5
Longitud (metros)	1-6

El análisis de sensibilidad inicial se realizó a la longitud del reactor, manteniendo el diámetro en 1 metro. El siguiente análisis se llevó a cabo variando el diámetro del reactor y manteniendo la longitud. Después se realizó un análisis con la variación de la temperatura considerando un intervalo de 300-400°C, se limitó la temperatura a 400 °C, ya que arriba de este valor se produciría una mayor cantidad de coque, el cual desactiva el catalizador al bloquear sus poros y por lo tanto sus centros activos, por último, se realizó un análisis de la presión.

Escenario B.

Reactor de transesterificación. En este reactor se llevó a cabo la transesterificación del aceite de *Jatropha Curcas L.* a través de un catalizador de KOH. La simulación se realizó seleccionando un reactor RPlug (reactor de flujo pistón) cinético. Las rutas de reacción que se consideraron en este reactor se muestran en la Figura 23.

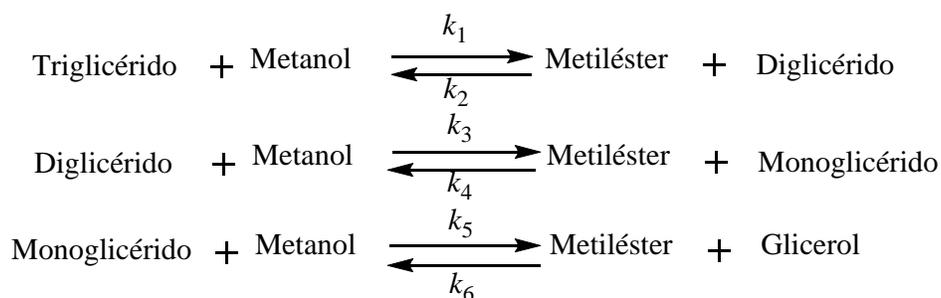


Figura 23. Reacciones de transesterificación

Los datos cinéticos utilizados en las reacciones a diferentes temperaturas y las energías de activación (E_a) se pueden observar en la Tabla 13.

Tabla 13. Constantes de rapidez de las reacciones a diferentes temperaturas y energía de activación consideradas¹¹⁸

	k , L/mol*min			E_a , cal/mol
	25°C	40°C	60°C	
k_1	0.00740	0.02183	0.0907	14151.04
k_2	0.00152	0.00290	0.0284	16725.86
k_3	0.02001	0.06497	0.3309	15853.96
k_4	0.00234	0.00732	0.0125	9353.79
k_5	0.16852	0.24162	0.5027	6211.90
k_6	0.00792	0.01555	0.0453	9882.54

Reactor de hidrot ratamiento. En esta parte se consideraron dos reactores de hidrot ratamiento como se muestra en Figura 24.

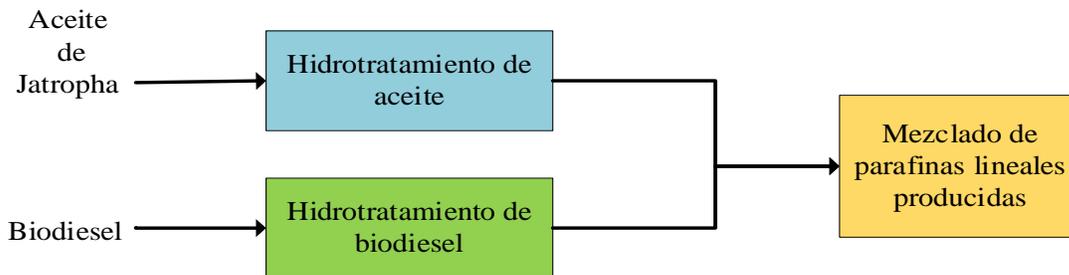


Figura 24. Hidrot ratamiento de biodiesel y aceite de Jatropha

El primer reactor se llevó a cabo considerando el hidrot ratamiento de aceite de Jatropha en condiciones similares del escenario A.

El segundo reactor se simuló en un RPlug consideraron el esquema de reacción que se muestra en la Figura 25 y los datos cinéticos reportados por Hachemi y Murzin,⁷² para el hidrot ratamiento de FAME.

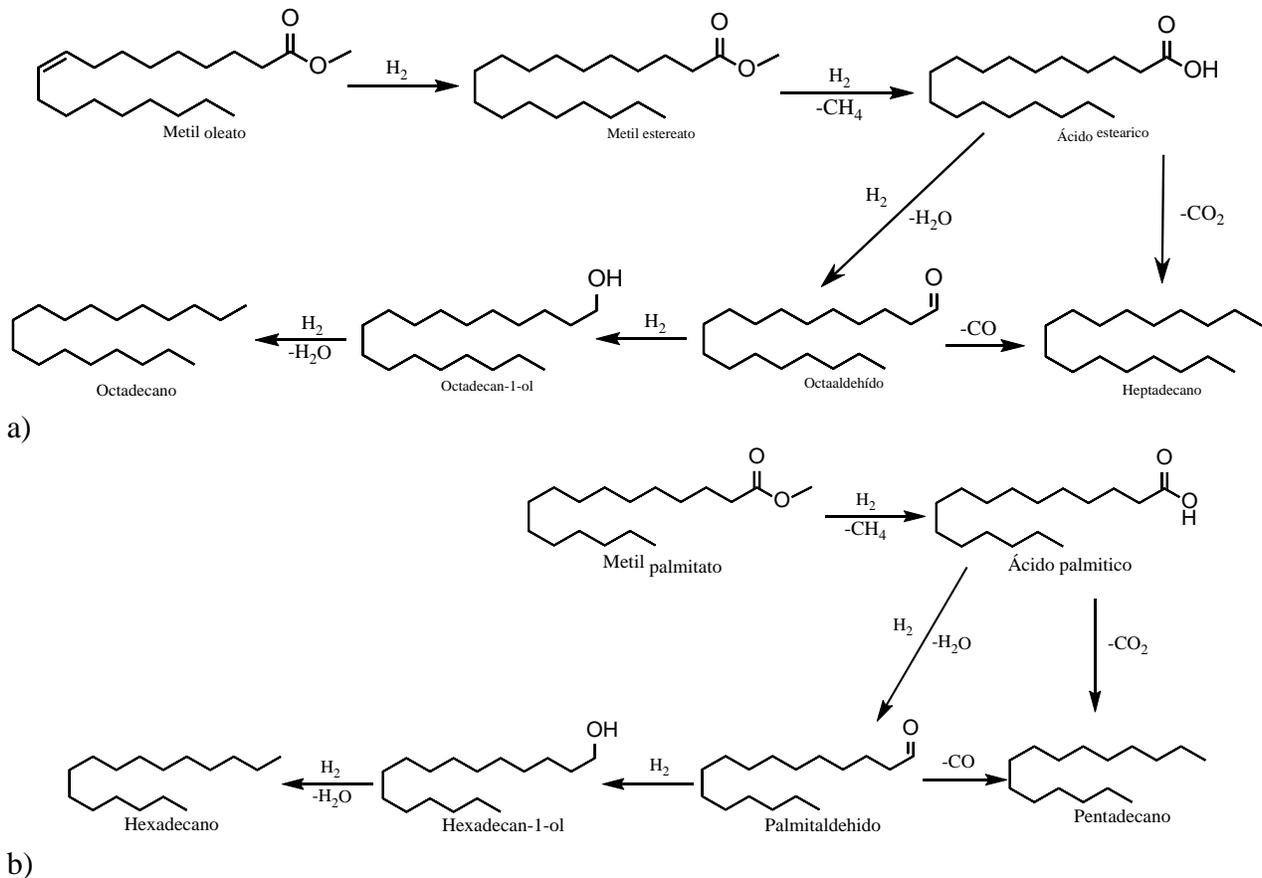
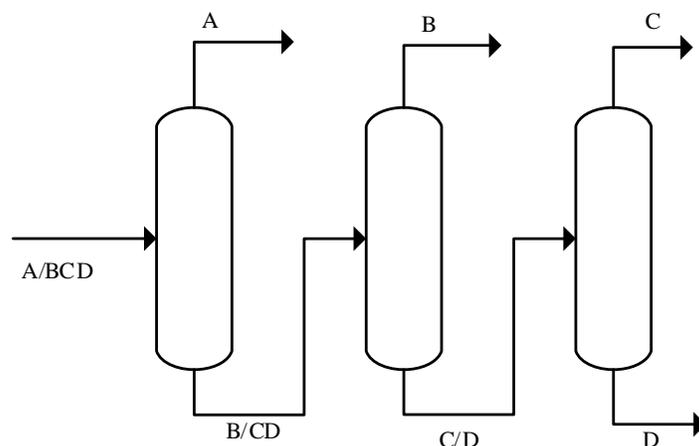


Figura 25. Esquema de reacción: a) metil oleato y b) metil palmitato⁷²

Reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración. La simulación de procesos de este reactor se llevó a cabo considerando los datos reportados por Xing et al.,¹¹⁷ de forma similar que en el escenario A.

2.5.2.2 Columnas de destilación para los escenarios propuestos

La separación de productos de valor agregado se realizó a través un tren de destilación. Se seleccionó una configuración base de columnas de destilación para la separación de productos, como se muestra en la Figura 26. En ambos escenarios de simulación se consideró la misma configuración de columnas de destilación.


 Figura 26. Configuración de columnas base para la simulación⁸⁶

El tren de destilación inició con una columna de destilación para separar el gas y biogasolina (A) por el domo. Los productos del fondo fueron alimentados a otra columna para separar la bioturbosina (B) por el domo, mientras que los productos del fondo fueron enviados a otra columna. El diesel verde (C) y las bioceras (D) fueron separados por el domo y el fondo, respectivamente en la última columna.

Los hidrocarburos fueron agrupados en grupos de productos de interés como se muestra en la Tabla 14.

Tabla 14. Clasificación de compuestos por productos separados

Producto	Compuestos	Grupo
Biogás seco	Metano-Etano	(C ₁ -C ₂)
Biogás LP	Propano-Butano	(C ₃ -C ₄)
Biogasolina	Pentano-Heptano	(C ₅ -C ₇)
Bioturbosina	Octano-Hexadecano	(C ₈ -C ₁₆)
Diesel verde	Heptadecano-Heneicosano	(C ₁₇ -C ₂₁)
Bioceras	Heptadecano-Tetracosano	(C ₂₂ -C ₂₄)

La simulación del tren de destilación se modeló por columnas DSTWU, un módulo de Aspen Plus que permite simular columnas de destilación mediante métodos cortos de Winn Underwood Gilliland. La ecuación de Winn es usada para el cálculo del número mínimo de etapas, Underwood funciona para calcular la relación de reflujo mínimo y, Gilliland fue usada para calcular la relación de reflujo proporcionando el número de etapas o el número de etapas ingresando la relación de reflujo. Además, calcula el plato de alimentación óptimo y, los calores del rehervidor y condensador.¹¹⁹

Los resultados obtenidos en las columnas DSTWU son fundamental en el desarrollo de columnas de destilación mediante métodos rigurosos, como en el módulo de columnas RADFRAC. Las columnas RADFRAC se resuelven mediante métodos rigurosos y pueden ser utilizadas para sistemas de destilación multicomponentes, destilación reactiva, absorción, etc. Se simuló usando datos como número platos, plato de alimentación, relación de reflujo, flujo de destilado.

2.6 Descripción del diagrama de flujo de proceso

Los diagramas de flujo de proceso (DFP) de los escenarios propuestos para el *escenario A* se muestran en la Figura 27 y para el *escenario B* en la Figura 28.

Escenario A. Este escenario se llevó a cabo alimentando una corriente de aceite de Jatropha (ACEITE) de 3630 L/h (3309 kg/h) a 25°C y 1.01325 bar impulsada por una bomba (BOMB-1) y alimentada a un intercambiador de calor (INT-1) para elevar su temperatura hasta 350°C. La corriente de aceite caliente fue enviada a un reactor de hidrotreatmento con una presión de hidrógeno (HIDRO-1) de 80 bar generada por un compresor (COMP-1). Los productos del reactor fueron enviados a unos separadores de alta (SEP1-AP) y baja (SEP2-BP) presión. Los productos en fase líquida principalmente hidrocarburos de cadenas largas fueron enviados a un intercambiador de calor (INT-2) para aumentar la temperatura a 350 °C. La corriente caliente se alimentó a un reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración (R-ISO-DE) con una presión de hidrógeno (HIDRO-2) de 30 bar generada por un compresor (COM-2). Los productos del reactor fueron enviados a un intercambiador de calor (INT-3) para reducir la temperatura, seguido de unos separadores de alta (SEP3-AP) y baja presión (SEP4-BP). Los hidrocarburos en fase líquida del separador de baja presión fueron alimentados a un intercambiador (INT-5) para disminuir la temperatura y enviarlos a un tren de destilación para separar los productos de interés. La separación de productos inició con una columna de destilación (C-1) para separar el biogás (BIOGAS) y las gasolinas (BIOGASOL) por el domo; los productos del fondo fueron alimentados a otra columna de destilación (C-2), donde se separó la bioturbosina (BIOTURBO) por el domo y los fondos fueron alimentados a una columna (C-3) para separar el diesel verde (DIESELV) y las bioceras (BIOCERAS).

Tabla 15. Corrientes de proceso del escenario A (Flujo, Temperatura y Presión)

Corriente	Aceite	1	Hidro-1	2	3	4	5
Temperatura (°C)	25	25	25	787	350	350	350
Presión (bar)	1.013	2.026	2.026	80	1.013	80	80
Flujo (kg/h)	3309	3309	54	54	3309	3363	287
Entalpía (kJ/kg)	-2257.93	-2257.55	1.84*10 ⁻¹²	11153.5	-1507.64	-1767.77	-5867.96
Corriente	6	7	8	9	10	Hidro-2	11
Temperatura (°C)	350	348	345	345	350	25	506
Presión (bar)	80	30	30	30	30	2.0265	30
Flujo (kg/h)	3075	3075	82	2993	2995	50	50
Entalpía (kJ/kg)	-1384.58	-1384.58	-4498.94	-1295.84	-1277.82	1.84*10 ⁻¹²	6978.81
Corriente	12	13	14	15	16	17	18
Temperatura (°C)	350	200	200	200	192	100	100
Presión (bar)	30	30	30	30	5	5	4
Flujo (kg/h)	3043	3043	317	2726	2726	2726	9
Entalpía (kJ/kg)	-1229.17	-1880.55	-2871.15	-1765.37	-1765.37	-2069.07	-1926.31
Corriente	H ₂ -rec	Pro-CO ₂	19	20	21	Biogas	Biogasol
Temperatura (°C)	197	197	100	50	50	30	30
Presión (bar)	4	4	4	4	3	2	2
Flujo (kg/h)	253	72	2718	2718	2718	57	262
Entalpía (kJ/kg)	-1271.75	-8362.62	-2068.65	-2200.84	-2200.84	-1742.97	-2296.67
Corriente	22	23	24	Bioturbo	Diesel V	Bioceras	
Temperatura (°C)	187	326	150	25	314	391	
Presión (bar)	2	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	
Flujo (kg/h)	2399	589	1810	1810	402	187	
Entalpía (kJ/kg)	-1694.72	-1161.67	-1836.86	-2133.27	-1205.68	-915.812	

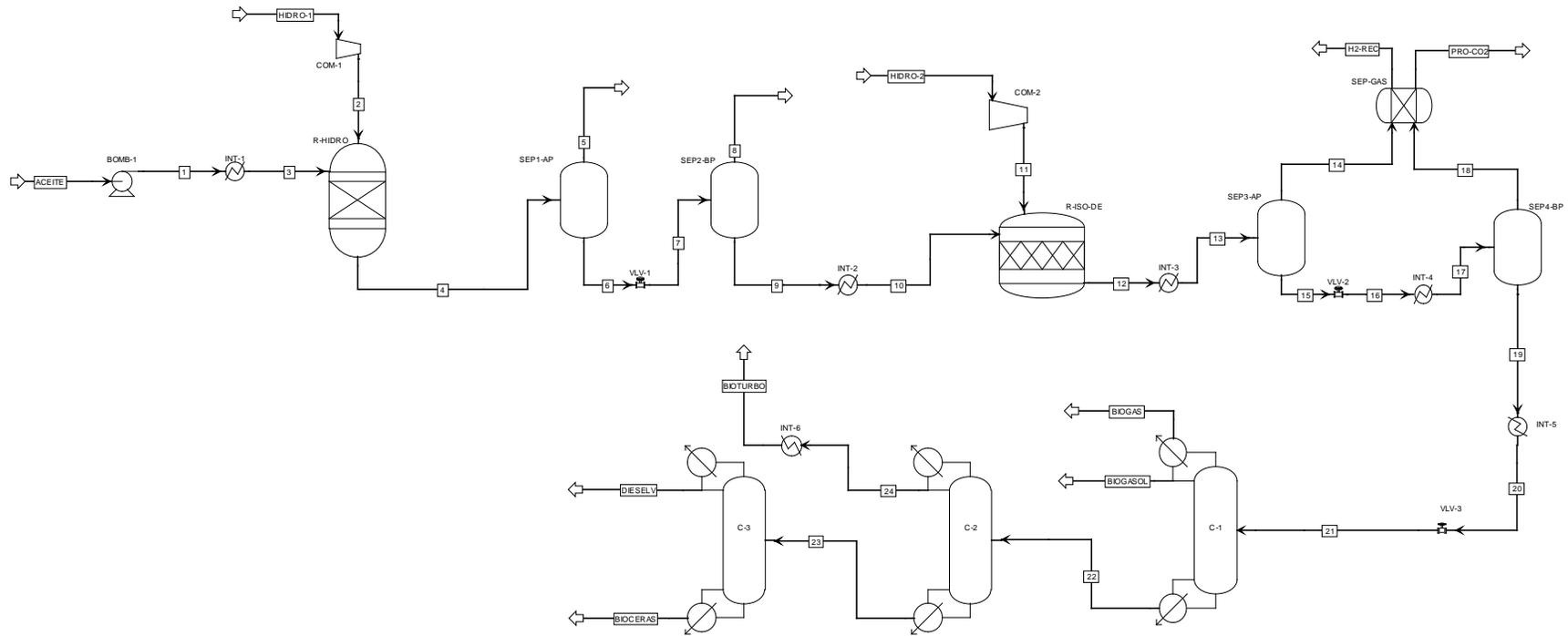


Figura 27. Proceso HEFA mediante *escenario A*

Escenario B. En este escenario se alimentaron dos corrientes de 1815 L/h (1902 mol/h) de aceite de Jatropha (ACEITE 1 y ACEITE 2) a 25°C y 1.01325 bar y una corriente 5600 mol/h de metanol (METANOL). La corriente ACEITE 1 y METANOL fueron alimentados a un mezclador (M1) y la mezcla precalentada a través de un intercambiador de calor hasta 60°C. La corriente caliente se envió a un reactor de transesterificación (R-BIODIE) para producir los FAME y glicerol. Los productos del reactor de transesterificación fueron enviados a una columna de destilación (C-1) para recuperar el metanol en exceso y recircularlo al proceso. Los productos del fondo de la columna C-1 fueron enviados a un decantador (DEC-1) para separar el glicerol de los FAME. Los FAME y triglicéridos residuales fueron separados a través de una columna de destilación (C-2). Los FAME fueron enviados a un reactor de hidrotreatmento de biodiesel (R-HIDRO2) a 330°C y 30 bar, mientras que los triglicéridos residuales (TRIGLICE) fueron mezclados con una corriente de alimentación de aceite de Jatropha (ACEITE-2). La mezcla de la corriente de ACEITE-2 y TRIGLICERI se envió a un reactor de hidrotreatmento a una temperatura de 350°C y una presión de hidrógeno de 80 bar. Ambas corrientes de producto de los diferentes reactores de hidrotreatmento fueron mezcladas y alimentadas a separadores de alta (SEP1-AP) y baja presión (SEP1-BP). Las parafinas de cadena larga fueron enviadas a un reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración (R-ISO-DE) a 350 °C y 30 bar, con el fin de producir productos de cadena corta principalmente en el intervalo de bioturbosina. Los hidrocarburos de cadena corta fueron enviados a separadores de alta (SEP2-AP) y baja presión (SEP2-BP). Finalmente, los productos de valor agregado fueron enviados a un tren de destilación como el escenario anterior.

Tabla 16. Corrientes de proceso del escenario B (Flujo, Temperatura y Presión)

Corriente	Aceite-1	Metanol	1	2	3	4	5
Temperatura (°C)	25	25	25	25	46	31	60
Presión (bar)	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013	1.013
Flujo (kg/h)	1655	179	179	1655	367	2023	2023
Entalpía (kJ/kg)	-2380.41	-7440.19	-7740.19	-2380.41	-7376.66	-3287.73	-3227.03
Corriente	6	MeOH	Fondo-1	FAME	Glicerol	Biodiese	Triglice
Temperatura (°C)	60	65	227	25	25	208	453
Presión (bar)	1.013	1.013	1.013	10	10	1.013	2.026
Flujo (kg/h)	2023	188	1835	1671	164	1617	53
Entalpía (kJ/kg)	-3315.47	-7316	-2508.57	-2567.08	-7184.29	-2129.11	-2016.67
Corriente	H ₂ -1	Hidro-1	Aceite-2	7	8	9	10
Temperatura (°C)	25	693	25	338	44	300	44
Presión (bar)	1.013	30	1.013	35	1.013	30	2.026
Flujo (kg/h)	78	78	1654	1696	1708	1696	1708
Entalpía (kJ/kg)	$1.84 \cdot 10^{-12}$	9748.27	-2257.93	-1580.29	-2250.39	-2275.88	-2249.99
Corriente	11	H ₂ -2	Hidro-2	12	13	14	15
Temperatura (°C)	350	25	1024	350	350	318	150
Presión (bar)	1.013	1.013	80	80	78	30	30
Flujo (kg/h)	1708	27	27	1735	1735	3430	2928
Entalpía (kJ/kg)	-1533.17	$1.84 \cdot 10^{-12}$	14799.27	-1809.01	-1809.01	-2039.8	-1877.43
Corriente	Gases-1	16	17	18	Gases-2	19	H ₂ -3
Temperatura (°C)	150	150	150	150	150	350	25
Presión (bar)	30	30	30	10	10	10	1.013
Flujo (kg/h)	503	502	1	2884	44	2884	50
Entalpía (kJ/kg)	-6615.81	-1877.43	1825.45	-2010.33	-6634.41	-1280.12	$1.84 \cdot 10^{-12}$
Corriente	Hidro-3	Paraf-L	20	21	Gases-3	22	Gases-4
Temperatura (°C)	693	350	150	150	150	120	120
Presión (bar)	30	30	29	28	28	27	12
Flujo (kg/h)	50	2934	2934	2816	118	2816	7
Entalpía (kJ/kg)	9748.27	-1175.91	-1898.84	-2044.77	-1843.79	-2134.87	-2037.73
Corriente	23	24	Biogas	Biogazol	Fondo-2	Fondo-3	25
Temperatura (°C)	120	117	5	5	219	331	147
Presión (bar)	12	5	4	4	4	1.013	1.013
Flujo (kg/h)	2809	2809	23	447	2339	449	1890
Entalpía (kJ/kg)	-2132.42	-2132.42	-1906.39	-2616.29	-1657.7	-1384.98	-1841.14
Corriente	Bioturbo	Dies-Ver	Bioceras				
Temperatura (°C)	25	282	332				
Presión (bar)	1.013	1.013	1.013				
Flujo (kg/h)	1890	209	240				
Entalpía (kJ/kg)	-2138.91	-1362.78	-1547.1				

2.7 Calidad del combustible

La calidad de los combustibles es importante para el buen funcionamiento de los motores de vehículos de transporte. Las turbinas para propulsión de los aviones requieren de un combustible que permita el despegue a nivel de suelo y posteriormente la navegación a las altitudes requeridas sin congelarse, la temperatura requerida es de $-47\text{ }^{\circ}\text{C}$. La calidad de estos combustibles se rige por estándares desarrollados por los fabricantes de turbinas de aviación.¹²⁰

Las especificaciones más importantes de los combustibles, como es el caso de la bioturbosina puede ser obtenidas mediante los métodos computacionales del API Data Technical Book.¹²¹ En la Tabla 17, se observan las diferentes propiedades para alcanzar la especificaciones requeridas del combustible y los procedimientos API para su cálculo.

Tabla 17. Propiedades y sus procedimientos API

Propiedades	Procedimiento
Punto de escurrimiento	2C2.1
Punto de anilina	2C3.1
Punto de humo	2C4.1
Punto de congelamiento	2C5.1

2.8 Análisis económico

El estudio económico se llevó a cabo a través del software Aspen Process Economic Analyzer (APEA)[®]. El APEA es un software de AspenTech[®] que permite estimar los CAPEX, OPEX y el flujo de efectivo para evaluar el impacto del ciclo de vida económico de un proceso durante el diseño conceptual y, de esta manera evaluar la rentabilidad del proyecto.¹¹⁹ Los costos fueron evaluados en pesos mexicanos (\$MXP) de acuerdo con la tasa de cambio monetaria, se consideró \$19.08 MXP/USD según el Banco de México (BANXICO) el día 5 de Febrero del 2019. La secuencia de pasos realizados para el estudio económico en APEA se presenta en la Figura 29. Estos se describen a continuación.

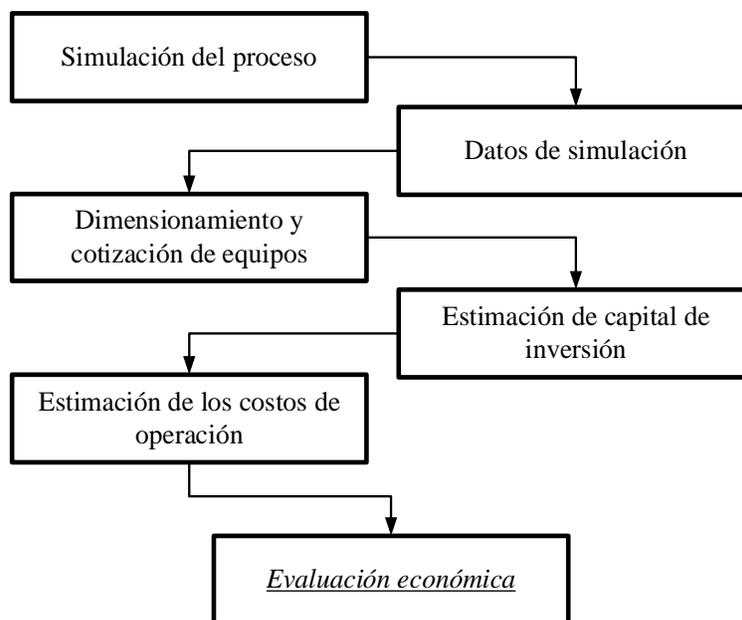


Figura 29. Pasos que seguir en la evaluación económica en APEA

Simulación de procesos. En esta etapa se lleva a cabo el modelado y simulación del proceso que se va a analizar económicamente. Se consideran todos los equipos, corrientes de proceso y servicios auxiliares necesarios en el proceso.

Datos de simulación. A partir de la simulación de procesos obtenida, se realizó la recolección de información de los flujos y condiciones de las corrientes, condiciones de operación de los equipos, servicios auxiliares, diseño de los equipos, etc. Además de los datos de simulación es importante especificar los precios de las materias primas utilizada debido a que son una parte fundamental los costos de operación. Los costos por el uso del catalizador no se consideraron en este estudio. El costo de las materias primas utilizadas en este trabajo se muestra en la Tabla 18.

Tabla 18. Precios de materia prima en el proceso

Materia prima	Unidad	Precio (\$MXP)	Referencia
Aceite de <i>Jatropha</i>	\$ MXP/L	80	122
Hidrógeno	\$ MXP/kg	55.33	23,123
Metanol	\$ MXP/L	34	Dato comercial

Dimensionamiento y cotización de equipos. El dimensionamiento de los equipos se realizó en base a los datos obtenidos de la simulación y la base de datos de costo de material y

especificaciones de los equipos presente en el APEA. El software proporcionó algunas especificaciones de los equipos y se ingresaron algunas otras para realizar un estudio más riguroso. Dentro de las especificaciones que fueron modificadas se encuentran el tipo de material de fabricación de los equipos, tamaño, tipo de equipo, etc. Para los reactores se utilizó acero al carbón (CS) como material de fabricación.

Estimación de capital de inversión. La estimación del capital de inversión se llevó a cabo seleccionando especificaciones del proceso como se muestra en Tabla 19.

Tabla 19. Especificaciones generales del proceso

Especificación	Selección
Descripción del proceso	Nuevo proceso
Complejidad del proceso	Altamente complejo
Control del proceso	PLC
Localización del proyecto	Ciudad de México
Tipo de proyecto	Ras de pasto/Terreno libre
Porcentaje de contingencia	20

La “descripción del proceso” reguló la tolerancia en el diseño del proceso, se seleccionó “nuevo proceso”, esto permitió tener una mayor tolerancia comparado con un proceso ya probado. En la “complejidad del proceso” se seleccionó “altamente complejo” debido a las altas presiones y temperaturas que se presentan en el proceso, esto indica que se requiere un mayor número de instrumentos y controles. El tipo de instrumentación que se seleccionó fue “distribuida”, Programable Logic Control (PLC). El tipo de proyecto se optó por elegir “ras de pasto/terreno libre”, esto quiere decir que requiere de un sistema de operaciones en la distribución de la energía eléctrica y los sistemas de control. El porcentaje de contingencia que se utilizó fue del 20% y se encuentra referenciado al capital de inversión directo más el subtotal del indirecto.

Las especificaciones de inversión de capital se observan en la Tabla 20. El periodo de evaluación del proyecto se consideró en años y cada año se representó por 52 semanas. Se seleccionó 30 años de vida económica del proceso de acuerdo con lo reportado por otros autores.^{23,124,24} El impuesto sobre los beneficios seleccionado fue de 30% y una tasa de interés del 20%. El valor de rescate del proceso fue del 10%,¹²⁵ este es una fracción del costo de capital inicial. El método de depreciación seleccionado fue de “línea-recta”, que realiza la

diferencia entre el valor de rescate y el capital inicial, y se divide por la vida económica del proyecto, con lo cual el proyecto se deprecia de forma uniforme a lo largo de toda su vida económica. El capital de trabajo se asumió en 15%, este es un valor usado tradicionalmente en procesos químicos.¹²⁵ El tipo de proceso elegido fue “proceso químico” y su modo de operación “continuo”. La duración de arranque del proceso se consideró en “60 semanas” y el factor de flujo se estableció en 96% (8400 horas de operación por año).

Tabla 20. Especificaciones de la estimación de inversión de capital

Parámetro	Unidad	Valor
Descripción del periodo	Años	-
Número de semanas por periodo	Semanas	52
Impuesto sobre los beneficios	%	30
Tasa de interés	%	20
Vida económica del proyecto	años	30
Valor de rescate del proceso	%	10
Método de depreciación	Línea recta	-
Escalado de capital del proyecto	%	0
Escalado de productos	%	0
Escalado de materia prima	%	0
Escalado de trabajo de mantenimiento y operación	%	3
Escalado de insumos	%	3
Capital de trabajo	%	15
Costos G y A	%	8
Tipo de proceso	Proceso químico	-
Modo de operación	Proceso continuo	-
Duración del periodo de arranque	Semanas	20
Horas de operación por año	Horas	8400

Estimación de los costos de operación. Los costos de operación y servicios auxiliares se muestran Tabla 21. Los salarios de operadores y supervisores se consideraron de un promedio de empleados en México. Los costos de servicios tales como, electricidad, agua potable, combustible y aire fueron basados en los precios actuales en México.

Tabla 21. Especificaciones para la estimación de los costos de operación

Especificación	Unidad	\$ MXP	Referencia
Operador	Costo/Operador/Hora	100	Salario promedio
Supervisor	Costo/Supervisor/Hora	130	Salario promedio
Electricidad	Costo/KWH	1.8603	¹²⁶
Agua potable	Costo/M ³	35.332	¹²⁷
Combustible	Costo/MMBTU	19.5561	Base de datos APEA

Evaluación económica. El objetivo de la evaluación económica es el cálculo de los CAPEX y OPEX generados en el proceso en relación con la base de datos del software APEA. Finalmente, la evaluación económica se realizó de acuerdo con los criterios seleccionados en función de la simulación de procesos y la capacidad del proceso. Se consideran el costo de los equipos, instrumentos, instalaciones eléctricas entre otros para el cálculo del CAPEX. Por otro lado, los OPEX se calcula evaluando los costos fijos y costos variables en un año.

Evaluación de proyecto. La evaluación del proyecto de inversión se realizó considerando los precios de venta de los combustibles producidos por PEMEX, esto se muestra en la Tabla 22.

Tabla 22. Precio de los combustibles producidos por PEMEX

Combustible	Unidad	Precio (\$ MXP)	Referencia
Gas	\$/kg	17.38	128
Gasolina	\$/L	19.60	129
Turbosina	\$/L	14.10	128
Diesel verde	\$/L	19.00	129
Ceras	\$/kg	17.29	129
Glicerol	\$/L	34	Precio de mercado

Los criterios de evaluación de inversión se muestran a continuación:

Flujo de efectivo: Los flujos de efectivos representan una parte importante en la ingeniería económica debido a que ellos forman las bases de la evaluación de proyecto. El flujo de efectivo o de caja también es conocido como “Cash-flow”, y es la diferencia entre el total de efectivo que ingresa y el total de efectivo que egresa para un periodo de tiempo determinado. Los impuestos y el efecto de la depreciación generalmente no se consideran en los diagramas de flujo de caja.^{130,131,85}

$$\text{Flujo de efectivo} = \text{Ingresos} - \text{Gastos} \quad (2)$$

A través del flujo de efectivo es posible obtener indicadores más complejos para el cálculo de rentabilidad y evaluación de proyectos de inversión. Existen diferentes indicadores de los que destacan el *Valor Presente Neto* (VPN) o *Valor Actual Neto* (VAN), la Tasa Interna de

Retorno (TIR), el Periodo de Recuperación (PR) o conocido como Payout Period o Payback, el valor presente de los flujos de inversión, la relación beneficio/costo, etc.

Valor Presente Neto (VPN): El VAN o VPN de un proyecto es la suma de los valores actuales de los flujos de caja futuros;⁸⁵ también se define como la diferencia entre el costo de capital de una inversión y el valor presente del flujo de efectivo futuro a que dará origen la inversión.¹³¹ Se puede calcular de la siguiente forma:

$$VPN = \sum_{k=1}^n \frac{FE}{(1+i)^k} - FSI \quad (3)$$

Donde:

VPN: Valor Presente Neto

FE: Flujo de efectivo de acuerdo con el periodo de evaluación (años)

i: Tasa de interés (también llamada Tasa de retorno deseada o Retorno de la Inversión, ROI)

n: La vida útil del proyecto o la vida económica del proyecto (tiempo)

FSI: Flujo de salida inicial del proyecto

El proyecto se rechaza cuando el $VPN < 0$, cuando el $VPN \geq 0$, la alternativa no debe rechazarse. Otra manera de decir que se aceptará un proyecto es si el valor presente de los flujos de efectivo de entrada excede el valor presente de los flujos de efectivo de salida.^{132,133} De otra manera, el VPN es un indicador usado en el presupuesto de capital con el fin de analizar la rentabilidad de una inversión o proyecto.

Tasa de Interna de Retorno o de rendimiento (TIR): Supone que el dinero que se gana cada año se reinvierte en su totalidad, es decir, es la tasa de descuento que iguala el valor presente de los flujos de efectivo (FE) esperados con el flujo de salida inicial (FSI). Si el flujo de salida inicial ocurre en el tiempo 0, se representa por la TIR. Con esto se tiene:

$$FSI = \sum_{k=1}^n \frac{FE}{(1+TIR)^k} \quad (4)$$

De esta manera la TIR es la tasa de interés que descuenta la serie de flujos de efectivo netos futuros para igualar en valor presente el flujo de salida inicial (FSI) en el tiempo 0. El criterio de aceptación es comparar la tasa interna de retorno (TIR) con la tasa de rendimiento requerida (ROI). Si la tasa interna de rendimiento excede la tasa requerida, el proyecto se acepta; de lo contrario, se rechaza.^{89,130,132}

Periodo de recuperación (PR): es el tiempo requerido para recuperar la inversión de efectivo inicial en base a los flujos de efectivo esperados, sin considerar el valor del dinero en el tiempo. Cuando se invierte se pretende en primer lugar obtener utilidades; mientras que en segundo lugar es saber en cuanto tiempo llegará la inversión inicial al inversionista lo antes posible.¹³⁰ Este periodo de recuperación se puede estimar de la siguiente manera:

$$|FE_0| = \sum_{j=1}^{PR} FE_j \quad (5)$$

Donde:

FE_0 : Flujo de efectivo inicial

FE_j : Flujo de efectivo neto de entrada para el año j

Si las entradas de efectivo anuales son iguales, se usa un valor promedio de flujo de efectivo anual (YFE), entonces la ecuación 5, se simplifica a:

$$PR = \frac{|FE_0|}{YFE} \quad (6)$$

El costo de capital total (C_T) se obtuvo mediante el simulador APEA, utilizando como base la librería de costos del año 2016 y los datos de la Tabla 20. El costo de capital se llevó a cabo mediante la siguiente ecuación:²⁴

$$C_{AT} = C_T \left(1 + t_D \times \left(\frac{e}{100} \right) \right) \quad (7)$$

Donde:

C_{AT} : Costo de capital total ajustado

C_T : Costo de capital total

t_D : tiempo de diferencia entre los datos

e : escalamiento de capital del proyecto

El escalamiento de capital del proyecto se eligió considerando los índices de costo de procesos en ingeniería química durante los últimos años.^{23,24,134} Los costos generales y administración (G&A), costos de operación de trabajo, mantenimiento, insumos, etc., fueron considerados en las especificaciones descritas en la Tabla 20. Los resultados obtenidos fueron analizados y comparados con la literatura presentada en el Capítulo 1.

Índice de rentabilidad: Otro método usado para la evaluación de proyectos es el índice de rentabilidad (PI). Es la relación del valor presente de los flujos de efectivos futuros esperados después de la inversión inicial y el monto de la inversión inicial. El proyecto se acepta siempre y cuando el valor de $PI > 1$, y se rechaza si $PI < 1$. El PI se representa como:¹¹⁹

$$PI = \frac{\text{Valor presente de dinero después de la inversión inicial}}{\text{Inversión inicial}} \quad (8)$$

Precio Mínimo de Venta: Para calcular el precio mínimo de venta es necesario obtener los costos variables (CV) y fijos (CF), costos de capital (CAPEX) y producción global (L/año). Para calcular el costo total de producción (\$MXP/año) se sigue la ecuación (8), seguido de la ecuación (9) para el cálculo del precio mínimo de venta (\$MXP/L).¹³³

$$\text{Costo Total de Producción} = CV + CF + CAPEX \quad (9)$$

$$\text{Precio mínimo de venta} = \frac{\text{Costo Total de Producción}}{\text{Producción global}} \quad (10)$$

2.9 Integración energética (Análisis Pinch)

Con el objetivo de reducir los costos de operación generados por el uso de insumos en el proceso, se llevó a cabo la integración energética a través de la metodología del análisis Pinch y el apartado de análisis de energía de Aspen Plus[®]. Una vez seleccionado el escenario económicamente viable se realizó la integración energética, considerando diferentes criterios como reubicación y anexo de intercambiadores de calor. Esta sección de energía permitió realizar diferentes diseños en la red de intercambiadores de calor mediante la metodología de análisis Pinch al ingresar nuevos intercambiadores de calor. Una vez obtenidos los múltiples diseños se exportó la información al software Aspen Energy Analyzer[®] (AEA) con el fin de observar a detalle los diseños realizados por el análisis Pinch. Es decir, a través de este software se permitió observar las clasificaciones de corrientes frías y calientes, el diseño de la red de intercambiadores de calor, la diferencia de temperatura entre corrientes y la temperatura de salida de las corrientes a través de la transferencia de calor. Con los resultados obtenidos se seleccionó el diseño que generó los costos mínimos de inversión de capital derivado de la compra de equipos y el periodo mínimo de recuperación de capital. Con la integración de calor se realizaron los cambios a la simulación de procesos seleccionada con el fin de reducir los costos de operación derivados del uso de servicios auxiliares en el proceso, lo cual según diferentes autores puede reducir los costos de operación en los procesos generados por el consumo energético.^{6,101}

2.10 Análisis estadísticos y optimización

Los resultados del escenario integrado energéticamente fueron analizados a través del software estadístico para el diseño de experimentos conocido como Design-Expert V8 (Stat-Ease Inc., Minneapolis, MN, USA). Con el objetivo de hallar las condiciones óptimas del proceso para la producción de bioturbosina de una manera técnica y económicamente viable. Los factores o variables de optimización fueron la capacidad del proceso y el precio de compra del aceite de *Jatropha Curcas L.*, la capacidad del proceso se consideró en base a la producción de litros de bioturbosina, por otro lado, el precio de compra de aceite se consideró con la finalidad de saber cuál es el precio de compra mínimo necesario para alcanzar la rentabilidad en el proceso. Las respuestas evaluadas fueron el Índice de Rentabilidad y el Precio Mínimo de Venta de bioturbosina sin considerar la venta de subproductos. Se empleó

un diseño de experimentos compuesto central (DCC) descritos por primera vez por Box y Wilson, 1951, y actualmente son los diseños de segundo orden más populares de la metodología de superficies de respuesta (MSR). Este diseño se eligió debido a que es el único que no presenta evaluación de experimentos similares. Cada diseño consiste en un diseño estándar de primer orden con n_f puntos factoriales ortogonales y n_0 puntos centrales, aumentado por n_a “puntos axiales”.¹³⁵ En el presente trabajo de investigación se usaron 6 puntos factoriales ortogonales, dos puntos axiales y un punto central; i.e. un conjunto total se evaluaron 9 puntos en el diseño. Los puntos axiales de los factores a evaluar fueron para el precio de aceite de 5 a 90 \$MXP y para la capacidad del proceso de 100-300%. Las capacidades usadas en el proceso se muestran en la Tabla 23.

Tabla 23. Capacidad de producción del proceso en porcentajes y litros de bioturbosina

Capacidad del proceso	Litros de bioturbosina (L/año)
100%	21,000,000
150%	31,500,000
200%	42,000,000
250%	52,500,000
300%	63,000,000

El valor p seleccionado para determinar si la diferencia entre la varianza de la población y el valor hipotético es estadísticamente significativa fue de 0.05. El valor p es el nivel de significancia más bajo al que puede rechazarse la hipótesis nula. Un nivel de significancia del 0.05 indica un riesgo de 5% de concluir que existe una diferencia cuando no hay una diferencia real. Si el valor $p <$ que el nivel de significancia (5%) la hipótesis nula de rechaza. Una vez evaluado el diseño de experimentos se procedió a la optimización mediante las superficies de respuestas obtenidas. Se consideró *maximizar* el índice de rentabilidad y *minimizar* el precio mínimo de venta de la bioturbosina.

Capítulo III: Resultados y discusión

En este capítulo se exponen y discuten los resultados de los escenarios planteados. Además, se presentan los resultados del establecimiento de las fronteras del proyecto, simulación de procesos, análisis económico, evaluación de proyecto, análisis energético y la optimización del escenario seleccionado como óptimo.

3.1 Bases de diseño

La capacidad del proceso se estableció de acuerdo con la turbosina de origen fósil producida en México en el año 2018. De acuerdo con los reportes¹²⁹, PEMEX generó alrededor de 37,655 barriles/día de turbosina, esto es 13,555,800 barriles/en un año comercial. Para obtener los litros por día y año fue necesario convertir los barriles a litros con una conversión de 159 L/barril.

Tabla 24. Producción de turbosina en México

	barriles/día	barriles/año	litros/día	litros/año	1% de producción (L/día)
Producción en México	37,655	13,555,800	5,987,145	2,155,372,200	59,872

La producción de bioturbosina en México es de aproximadamente 5,987,145 L/día. De acuerdo con la capacidad del proceso establecida fue de suplir el 1% de bioturbosina, la meta es producir 59,872 L/día de bioturbosina.

Las bases de diseño que se establecieron se muestran en la Figura 30.

Bases de diseño	
1.	<i>Generalidades</i> La función del proceso es producir bioturbosina a través de aceite de Jatropha
2.	<i>Capacidad</i> La capacidad del proceso será de 59,872 L/día de bioturbosina
3.	<i>Materia prima por escenario</i>
	○ Aceite de Jatropha
	○ Hidrógeno
	○ Metanol

Figura 30. Bases de diseño del proceso para la producción de bioturbosina

3.2 Datos recolectados de los diferentes estudios disponibles

La recolección de datos se resume en la Tabla 25. Se muestran las materias primas, tipo de catalizador, conversión y tipos de reacción empleados. La reacción de hidrot ratamiento se representó con la abreviación hidrotra., mientras que la reacción de hidroisomerización e hidrod esintegración por isome./desin.

Tabla 25. Materias primas, catalizadores, tipo de reacción, tipo de reactor y conversión

Materia prima	Catalizador	Conversión %	Tipo de reacción	Tipo de reactor	Ref.
A. Jatropha	Ni-Mo/SiO ₂ -Al ₂ O ₃	100%	Hidrotra.	Tubular de cama fija	56
A. Jatropha	NiMo/Al ₂ O ₃	77%	Hidrotra.	Batch	Experimental
FAME	Ni/H-Y-80	96%	Hidrotra.	Semi-batch	72
n-Parafinas	Pt/SiO ₂ -Al ₂ O ₃	90%	Isome./desin.	Batch	81
n-Parafinas	Ni-Mo/SAPO-11	99%	Isome./desin.	Continuo	117

3.3 Superestructura de procesos

La superestructura permitió observar la síntesis de procesos de las diferentes rutas de producción de bioturbosina, a través de alternativas catalíticas. Las diferentes rutas catalíticas fueron consideradas en escenarios de simulación.

3.4 Simulación de los escenarios

3.4.1 Propiedades del aceite de *Jatropha Curcas L.*

Las propiedades del aceite de *Jatropha Curcas L.* como una mezcla de moléculas modelo de triglicéridos, se muestran en la Tabla 26.

Tabla 26. Propiedades del aceite de *Jatropha* a 25°C y 1 atm

Propiedad	Valor
Entalpía molar (kJ/mol)	-1962.19
Entalpía másica (kJ/kg)	-2256.20
Entropía molar (kJ/mol-K)	-5.34
Entropía másica (kJ/kg-K)	-6.14
Densidad molar (mol/L)	1.048
Densidad másica (kg/m ³)	911.641
Flujo de entalpía (kJ/h)	-779886
Peso molecular promedio	869.69

3.4.2 Productos obtenidos del escenario A

Los rendimientos de los productos en el reactor de hidrotreatmento del *escenario A* se muestran en la Figura 31.

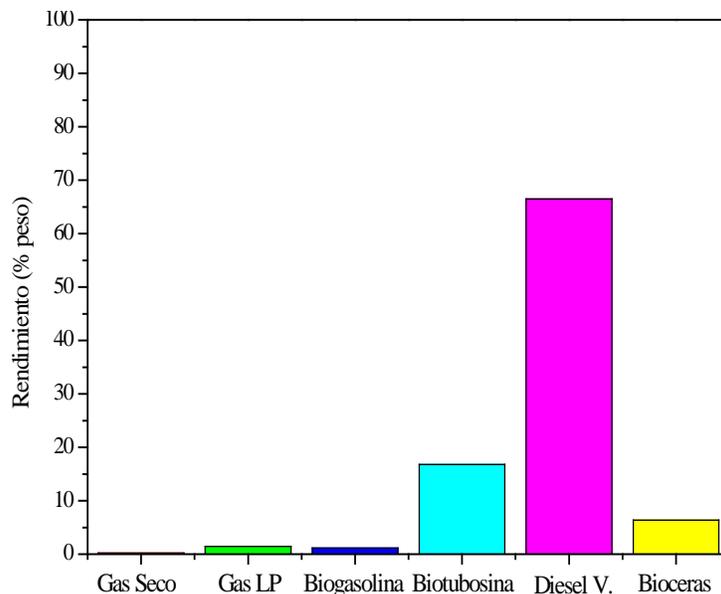


Figura 31. Distribución de productos del hidrotreatmento de aceite de Jatropha

El producto principal en el reactor de hidrotreatmento es el diesel verde ($C_{17}-C_{21}$), este presenta el mayor porcentaje de rendimiento con un valor *ca.* 67%; el resto se encuentra comprendido por la bioturbosina (C_9-C_{16}), bioceras ($C_{22}-C_{24}$), biogasolina (C_5-C_8), gas LP (C_3-C_4) y gas seco (C_1-C_2), con un porcentaje de 17%, 6.5%, 1.6%, 1.5% y 0.21%, respectivamente. De acuerdo con el mecanismo de reacción el producto principal es el diesel verde debido a la naturaleza química de los triglicéridos presentes en el aceite, como es el caso de la trioleína que se encuentra en mayor composición; obteniendo como producto ácido oleico. Seguido de la descarboxilación, descarboxilación e hidrodscarbonilación que forman principalmente heptadecano y octadecano.

Como se mencionó anteriormente en la metodología el estudio del reactor de hidroisomerización e hidrodintegración se dividió en dos casos estudios de distintos catalizadores.

Los resultados del análisis de sensibilidad para el **Caso de estudio 1** son los siguientes:

Efecto de la longitud del reactor sobre el rendimiento de biotur bosina. La Figura 32 muestra el efecto de la longitud del reactor catalítico en un intervalo de 1 a 6 metros.

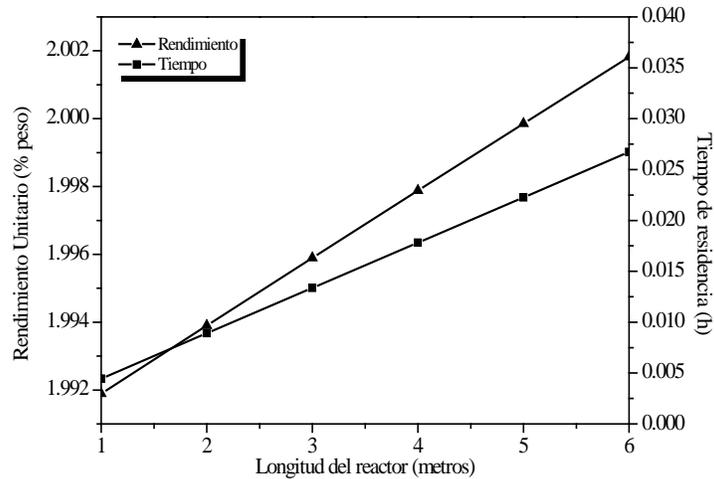


Figura 32. Efecto de la longitud del reactor sobre el rendimiento de biotur bosina

El rendimiento de biotur bosina aumento en función de la longitud del reactor. Sin embargo, el aumento en el rendimiento es poco significativo. El insignificante aumento en el rendimiento de biotur bosina se puede considerar debido al poco tiempo de contacto con el catalizador empleado.

Efecto del diámetro del reactor sobre el rendimiento de biotur bosina. Los resultados de este estudio se muestran en la Figura 33. El intervalo estudiado del diámetro del reactor fue de 1 a 5 metros.

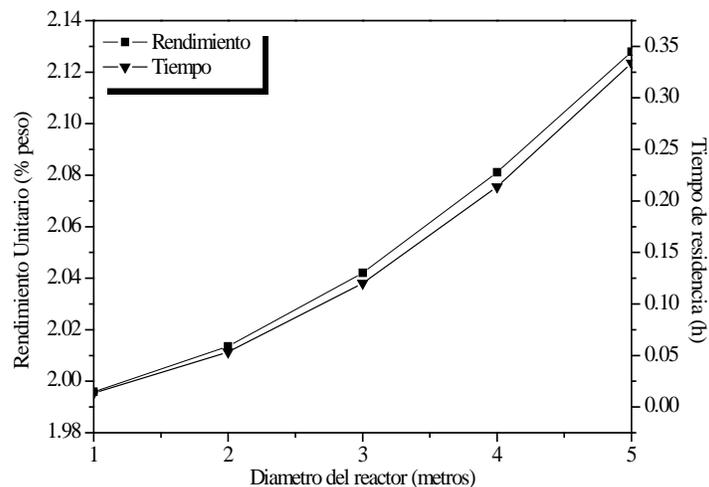


Figura 33. Efecto del diámetro del reactor sobre el rendimiento de biotur bosina

Los resultados de este estudio no mostraron un aumento significativo en el rendimiento de bioturbosina en función de cambios en el diámetro del reactor.

De acuerdo con los resultados anteriores se realizó un análisis de sensibilidad modificando las variables anteriores en un solo análisis. Los resultados indicaron que el rendimiento máximo de bioturbosina fue *ca.* 2.24%, esto es posible mediante un reactor de 6 y 5 metros, de longitud y diámetro, respectivamente. El tiempo de residencia fue *ca.* 0.667 h derivado del tamaño del reactor.

Los resultados de este estudio indican que no existe cambio significativo en el rendimiento de bioturbosina en función de las dimensiones del reactor. Estos resultados sugieren que aumentar el rendimiento de bioturbosina implicaría tener dimensiones del reactor considerablemente grandes. Esto implicaría un mayor costo de fabricación, instalación y mantenimiento del reactor.

Efecto de la temperatura del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina. El siguiente análisis se llevó a cabo modificando la temperatura del reactor en un intervalo de 300 a 400 °C, manteniendo las dimensiones del reactor en 4 y 5 metros de largo y diámetro, respectivamente. Los resultados de este estudio se muestran en la Figura 34.

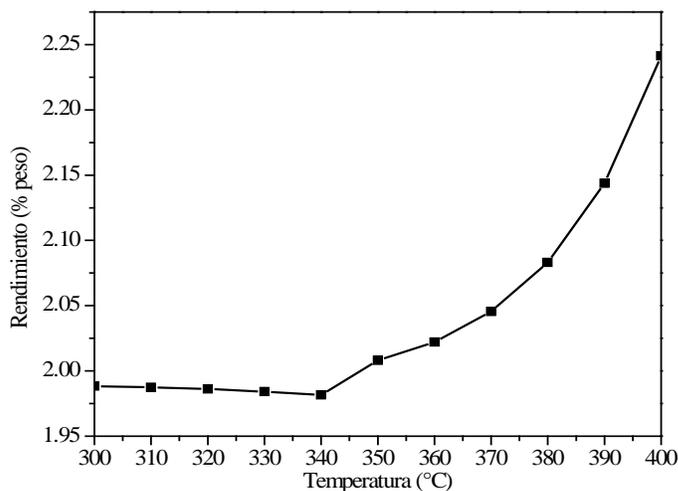


Figura 34. Efecto de la temperatura del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina

El rendimiento en función de la temperatura no presentó algún cambio significativo. Una posible explicación para esto es la baja actividad del catalizador en función del tiempo de residencia y las consideraciones de productos indeseados derivado de la temperatura.

Efecto de la presión del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina. Este análisis se realizó en un intervalo de presiones de 10 a 130 bar y los resultados se observan en la Figura 35.

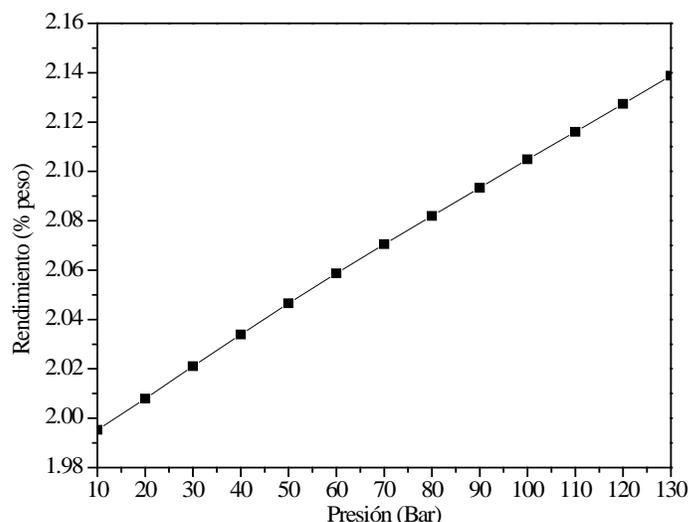


Figura 35. Efecto de la presión del reactor sobre el rendimiento de bioturbosina

Los resultados muestran un aumento en el rendimiento de bioturbosina en función del aumento de la presión, sin embargo, se puede considerar poco significativo. Esto se le puede atribuir a la actividad del catalizador y el tiempo de contacto en el reactor.

En función con los resultados obtenidos, se realizó un análisis de sensibilidad modificando las cuatro variables anteriores en un mismo análisis. De este análisis se obtuvieron 4291 iteraciones computacionales y un rendimiento máximo de bioturbosina *ca.* 2.38%. Esto se alcanzó considerando un reactor con un diámetro de 5 metros, una longitud de 6 metros, a 400 °C y a 130 bar. Los resultados obtenidos muestran que no existe un cambio significativo en el rendimiento de bioturbosina al realizar modificaciones en el diseño y condiciones de operación del reactor. Los resultados obtenidos reafirman que el catalizador empleado tiene poca actividad en tiempos de contacto cortos, sin embargo, para alcanzar un incremento considerado significativo es necesario un mayor tiempo de contacto *ca.* 30 horas, de acuerdo a lo obtenido por Calemma et al.⁸¹

Por el poco efecto significativo del catalizador anterior en función del rendimiento de bioturbosina, se realizó un segundo caso de estudio considerando un catalizador de NiMo/SAPO-11.

Los resultados del rendimiento considerando el escenario A se muestran en la Figura 36.

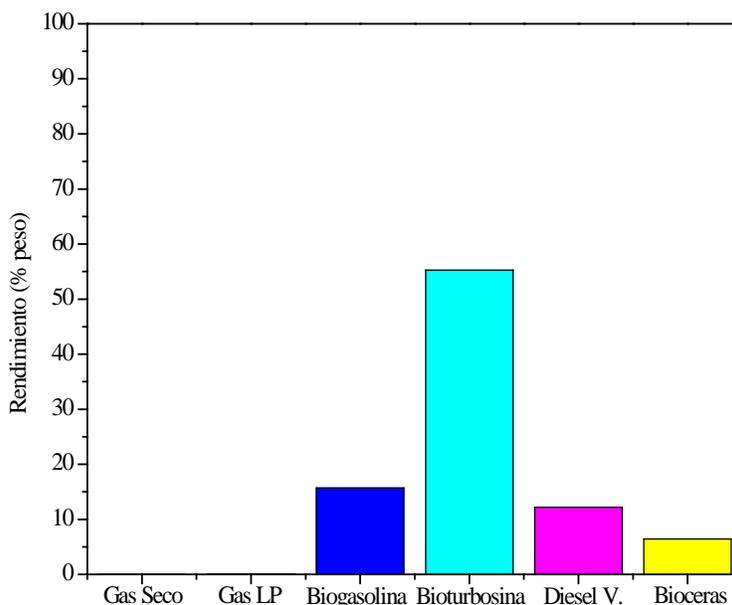


Figura 36. Producción del reactor de hidroisomerización e hidrodeseintegración

El rendimiento de bioturbosina respecto al diesel verde alimentado en este reactor presentó un valor *ca.* 55%, esto se debe al catalizador empleado y su estructura característica tubular hueca la cual permite un mayor contacto en los sitios activos del catalizador. Por otro lado, los rendimientos de biogasolina, diesel verde, bioceras, gas seco y gas LP, fueron 15.66%, 12.16%, 6.42%, 0.054% y 0.022%, respectivamente.

Estos resultados pueden explicarse por el hecho de que el diesel verde, principalmente compuestos de cadenas largas, se desintegró parcialmente en productos en el intervalo de bioturbosina. El aumento observado en el rendimiento de bioturbosina podría atribuirse a la actividad del catalizador, esto se generó por su característica tubular hueca y la acidez del soporte empleado (SAPO-11).

3.4.3 Productos obtenidos del escenario B

Los productos de la transesterificación del aceite de *Jatropha* se observan en la Figura 37, con un tiempo de residencia en el reactor de 0.5195 h.

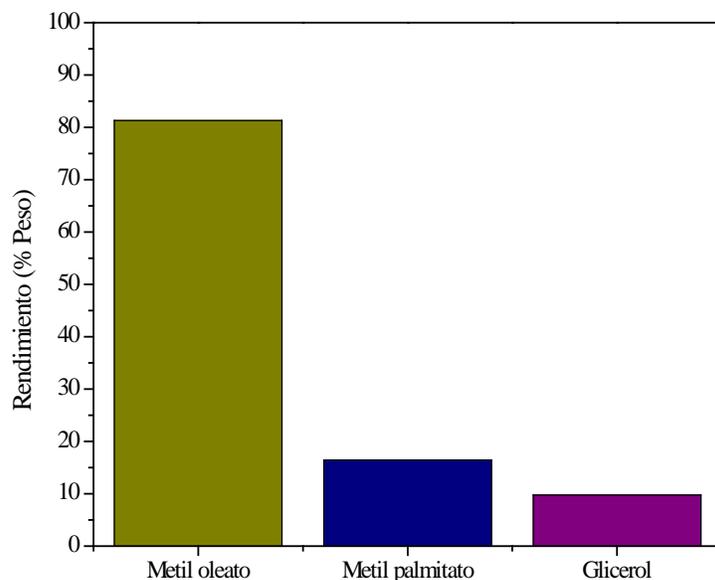


Figura 37. Productos principales de la transesterificación de aceite de *Jatropha*

El producto principal de la transesterificación fue el metiloleato. Estos resultados pueden explicarse debido a que se asumió a la trioleína como una mezcla de trioleína, trilinoleína y triesterina. Esto se realizó debido a que existen limitaciones en los compuestos presentes en el simulador, esto se debe a la falta del dioleína, monooleína, diesterina, monoesterina, dilinoleína y monolinoleína. Además, la cinética empleada presenta limitaciones a los compuestos por ello solo se considera a la trioleína y tripalmitina como compuestos en la alimentación. Las composiciones de los compuestos utilizados se muestran en la Tabla 27.

Tabla 27. Composición modelo del aceite de *Jatropha* en la transesterificación

Compuesto	Formula	Aceite de <i>Jatropha</i> (% peso)	Peso molecular (kg/kmol)
Tripalmitina	$C_{51}H_{98}O_6$	16.8%	807.33
Trioleína	$C_{57}H_{104}O_6$	83.2%	885.43

En el escenario de proceso B se utilizaron dos mezclas de aceite de *Jatropha*, el peso molecular de la *Jatropha* para la producción de biodiesel a través de una mezcla de tripalmitina y trioleína fue de 871.21 kg/kmol, mientras que la usada para el hidrot ratamiento a través de una mezcla de mezcla de tripalmitina, trioleína, trilinoleína y triesterina, fue de 869.61 kg/kmol. Para el escenario A solo se usó la mezcla de tripalmitina, trioleína, trilinoleína y triesterina.

En este escenario se asume que producir y vender glicerol como subproducto podría generar un aumento en las ventas y con esto alcanzar una rentabilidad.

Los resultados del diseño de la columna de destilación para separar el metanol de los productos del reactor de transesterificación se muestran en la Tabla 28.

Tabla 28. Resultados del diseño de la columna de separación de metanol

Especificaciones	Valor
Tipo de condensador	Total
Número de platos	6
Plato de alimentación	5
Relación de reflujo (molar)	1
Presión del condensador (bar)	1.01325
Temperatura del condensador (°C)	64.53
Temperatura del rehervidor (°C)	73.95
Carga térmica del rehervidor (kcal/h)	173060

Se requiere una columna de 6 platos para obtener una fracción de separación de metanol de 0.9904 y de esta manera reducir el costo de metanol alimentado al proceso. La temperatura del condensador fue de 64.53 °C considerando la temperatura de ebullición del metanol.

Los FAME fueron separados de los triglicéridos, diglicéridos y monoglicéridos no convertidos por medio de una columna de destilación, para alcanzar la calidad del combustible. Los resultados del diseño de la columna se observan en la Tabla 29.

Tabla 29. Resultados del diseño de la columna de destilación de biodiesel

Especificaciones	Valor
Tipo de condensador	Total
Número de platos	10
Plato de alimentación	4
Relación de reflujo (molar)	4
Presión del condensador (bar)	1.01325
Temperatura del condensador (°C)	227.98
Temperatura del rehervidor (°C)	384.19
Carga térmica del rehervidor (kcal/h)	110264

Los resultados del diseño de la columna fueron atribuidos principalmente a la calidad requerida del biodiesel. Fue necesario considerar 10 platos para alcanzar el 99.90% de contenido de FAME y ser considerado biodiesel de acuerdo con la ASTM 6751-09 que especifica un contenido del 96.5% de éster.

La Figura 38 muestra los resultados del hidrotreatmento de biodiesel del escenario B.

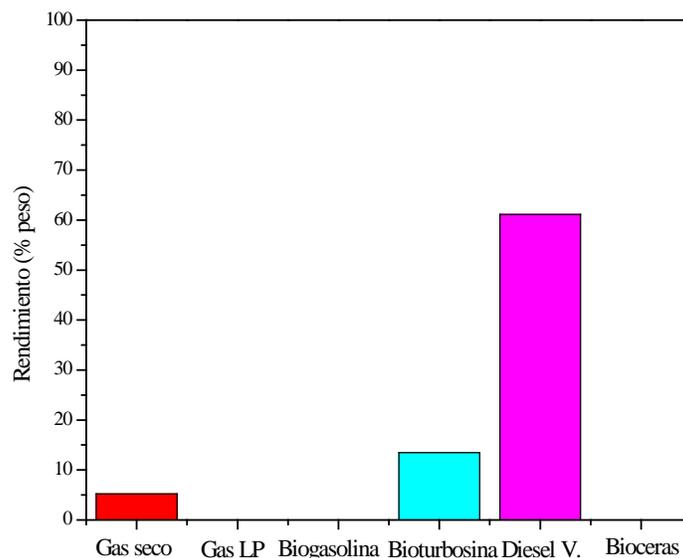


Figura 38. Distribución de productos del hidrotreatmento de biodiesel

El producto principal en esta etapa fue diesel verde ($C_{17}-C_{21}$) con un porcentaje de rendimiento *ca.* 61.13%, por otro lado, para la bioturbosina y el gas seco el rendimiento fue de 13.46% y 5.19%, respectivamente. No se consideró la producción de biogasolina y gas LP debido a los efectos de la temperatura considerada de 330°C. De acuerdo con la experiencia industrial se puede considerar que no existe desintegración de hidrocarburos de cadenas largas, debido a que la temperatura empleada es menor de 350 °C. Se sabe que a temperaturas superiores a los 350 °C se promueve la desintegración de hidrocarburos, por esta razón en este caso de estudio no se consideró la producción de biogasolina y gas LP.

Los resultados del reactor de hidroisomerización e hidrodésintegración para el *escenario B* se observan en la Figura 39.

El producto principal en el reactor de hidroisomerización e hidrodésintegración es la bioturbosina, con un porcentaje de rendimiento (% peso) *ca.* 57%, seguido de la biogasolina, diesel verde y bioceras, con 16.62%, 6.31% y 3.28%, respectivamente.

A altas temperaturas, un fuerte efecto de hidrodésintegración conduce a productos de cadena menos larga y una tendencia más débil a la hidroisomerización. Una baja temperatura debilita el grado de desintegración y los productos de cadena larga de carbonos se vuelven dominantes.¹¹⁷

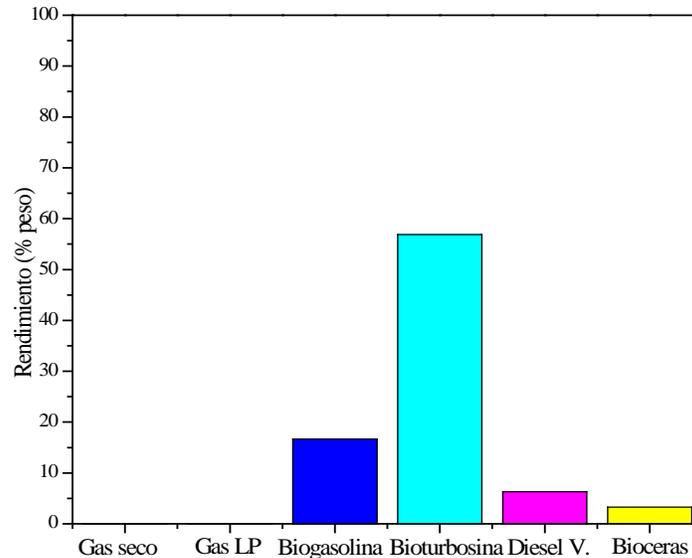


Figura 39. Producción del reactor de hidroisomerización e hidrodesintegración

3.4.4 Separación de productos de los diferentes escenarios

La separación de productos mediante un tren de destilación es clave para la economía del proceso debido al diseño de las columnas, i.e. derivado del número de platos será el tamaño de la columna. Los CAPEX son generados principalmente por el diseño de la columna y los OPEX por los insumos requeridos en la operación de esta.

Para evaluar columnas de destilación por módulos RadFrac, se utilizaron los resultados de las columnas DSTWU que se muestran en la Tabla 30.

Tabla 30. Columnas de destilación DSTWU

Especificaciones	Escenario A			Escenario B		
	Col-1	Col-2	Col-3	Col-1	Col-2	Col-3
Relación de reflujo mínima	0.9453	0.1114	0.7645	1.47	0.0459	2.45
Relación de reflujo real	6	6	7	7	7	15
Número de etapas de mínimas	15.63	53.62	56.43	19.18	71.49	60.89
Número de etapas reales	17.76	56.26	61.20	22.25	74.37	65.82
Etapas de alimentación	8.81	28.24	31.19	10.82	36.98	32.47
Carga térmica del rehervidor (kcal/h)	522,790	861,310	185,021	362,865	995,149	295,920
Carga térmica del condensador (kcal/h)	-148,593	-922,086	-187,618	-160069	-103613	-280,518
Temperatura de destilado (°C)	120.45	125.93	281.33	51.49	124.20	301.64
Temperatura fondos (°C)	207.41	323.54	389.497	183.12	330.03	384.32
Fracción destilado	0.2548	0.8523	0.7210	0.2893	0.8893	0.7891
Presión condensador (bar)	3.0397	0.5066	0.5066	4.053	0.8916	0.5066
Presión rehervidor (bar)	3.0397	1.0132	1.0132	2.0265	0.5066	1.0132

Un aumento en la relación de reflujo real generó una disminución en el número de platos de la columna, lo cual reduce el costo de la columna. Sin embargo, aumenta los costos de operación de la columna.

La cantidad en el número de platos fue menor para el *escenario A*, lo cual generó los menores costos de capital derivados por el tamaño de la columna. Estos factores podrían explicar los efectos de los CAPEX de los escenarios de A y B.

Los resultados de las columnas de destilación RADFRAC se muestran en la Tabla 31.

Tabla 31. Columnas de destilación RADFRAC

Especificaciones	Escenario A			Escenario B		
	Col-1	Col-2	Col-3	Col-1	Col-2	Col-3
Temperatura condensador (°C)	70	149.65	313.74	5	147.06	281.17
Temperatura rehervidor (°C)	187.004	325.90	391.28	219.11	330.39	331.82
Calor del condensador (kcal/h)	-395158	-1132400	-189623	-902425	-1292140	-203573
Calor del rehervidor (kcal/h)	707593	1145880	196351	1117460	1238670	195351
Flujo de destilado (kmol/día)	171.195	311.977	36.931	249.48	330.56	331.82
Relación de reflujo	6	6	7	7	7	15
Flujo de fondo (kmol/día)	362.12	50.14	13.21	368.865	38.3	18.73
Relación de rehervidor	4.58	33.57	12.83	7.77	47.15	14.99
Numero de etapas	18	57	62	24	74	66
Etapas de alimentación	9	36	32	11	37	32
Tipo de condensador	Parcial	Total	Total	Parcial	Total	Total

De acuerdo con experiencia de simulación se sabe que el número de etapas reales aumenta dos o tres etapas de las etapas mínimas para que exista convergencia en la simulación del proceso. Los condensadores de la primera columna fueron del tipo parcial debido a que se separan dos productos por el domo, i.e. la biogasolina y gas.

3.5 Calidad de la bioturbosina

La calidad de la bioturbosina presentó las características que se muestran en la Tabla 32, calculadas como se describió en la sección 2.7.

El requisito que podría considerarse más indispensable en la bioturbosina es el calor neto de combustión mínimo. De acuerdo con los resultados obtenidos el calor neto de combustión obtenido fue de 43.0276 MJ/kg, lo cual alcanza las especificaciones mínimas necesarias. La ASTM D1655 establece que se mayor a 42.8 MJ/kg.³²

Tabla 32. Características de la calidad de la bioturbosina obtenida

Propiedades	Valor
Calor neto de combustión mínimo (MJ/kg)	43.0276
Densidad a 15°C (kg/m ³)	731.30
Punto de congelamiento (°C)	-56.91
Contenido de aromáticos (% peso)	0
Contenido de azufre (mg/kg)	0
Punto de humo (mm)	142.20
Punto de nube (°C)	13.83

De acuerdo con la ASTM D7566 el requisito mínimo para la densidad de la bioturbosina es de 730-770 kg/m³, en este estudio el resultado fue de 731.30 kg/m³ lo que indica que cumple con la especificación requerida. Podría decirse que el requisito de la densidad máxima no es tan estricto como el de la densidad mínima porque los tanques de combustible de los aviones no tienen que estar completamente llenos.³²

Por otra parte, el requisito del punto de congelamiento del combustible es importante debido a que actualmente casi todos los vuelos de aviones de pasajeros de larga duración se producen en la estratosfera inferior. El enfriamiento del tanque de la aeronave se produce progresivamente a lo largo de dichos vuelos durante el ascenso y el ascenso en crucero porque la temperatura del aire cae con la altitud. La bioturbosina proveniente del proceso HEFA solo debe de tener un punto de congelamiento mínimo de -40 °C, esto quiere decir que el combustible obtenido con un valor de -56.41 °C es apto para ser empleado.³²

Para el contenido azufre se considera que no existe, debido a que la materia prima proviene de fuentes de biomasa, las cuales están consideradas como libre de este tipo de compuestos en este estudio. Por otro lado, para el contenido de aromáticos no se consideran presentes debido a que en los resultados experimentales en los que se basó la simulación no se observó la producción de los mismos, posiblemente debido a la alta presión de hidrógeno que suprimió la ciclización.

El punto de humo es la altura en milímetros de una flama que es producida por la quema del combustible, este trabajo presentó 142.20 mm.

Para el caso del punto de nube es la temperatura a la cual los sólidos disueltos en un combustible ya no son completamente solubles, precipitando como una segunda fase que le da al combustible un aspecto turbio.

3.6 Análisis económico de los escenarios

Los escenarios fueron analizados económicamente de acuerdo con los costos de operación y capital requeridos para llevar a cabo el proceso. La Tabla 33 proporciona los resultados económicos en millones de pesos mexicanos (\$ Millones, MXP) de los escenarios propuestos. Los CAPEX estimados están basados en diferentes categorías; tales como compra y ajuste de equipos, ingeniería civil, pintura, acero, contingencias, instrumentación, entre otros. Los OPEX relacionan los factores económicos claves en la operación del proceso (materia prima, mano de obra, mantenimiento, insumos, cambios operacionales, costos globales del proceso, generales y administrativos).

Tabla 33. Resumen económico de los escenarios

	Escenario A	Escenario B
CAPEX, \$ Millones, MXP	\$614	\$768
OPEX, \$ Millones, MXP	\$2,722	\$2,824

El escenario B presentó el mayor CAPEX comparado con el escenario A. Este resultado se puede explicar por el hecho de que en el escenario B se agregan nuevos equipos para llevar a cabo la sección de obtención de biodiesel. El escenario B presentó un aumento *ca.* \$248 millones en comparación con el escenario A.

En la Figura 40, se observan la distribución de los CAPEX generados por el escenario A.

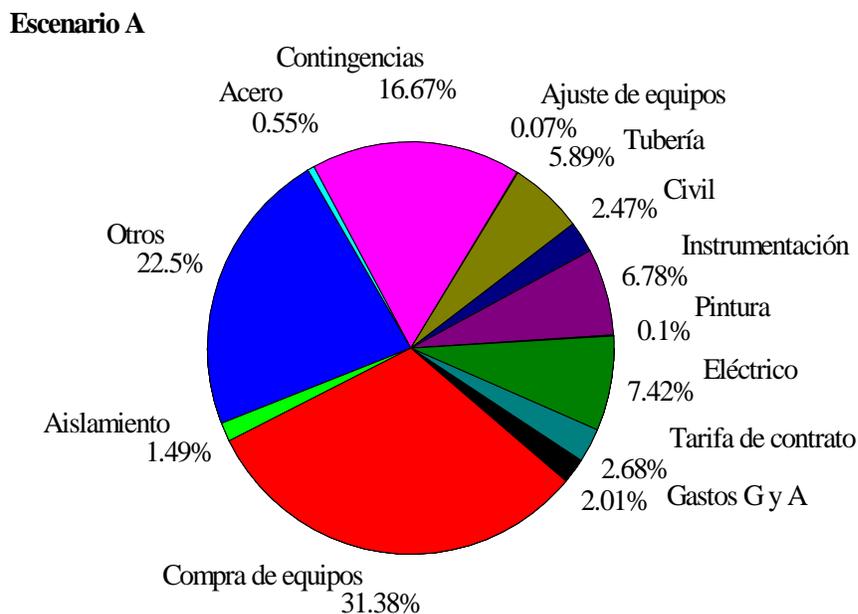


Figura 40. Distribución de costos de capital (escenario A)

Los principales CAPEX son generados por la compra de equipos, contingencias y otros costos, con 31.38%, 16.67% y 22.5%, respectivamente. Los costos de capital de los equipos pueden atribuirse a la compra de material de fabricación y la construcción de los mismos. Los costos de contingencias se atribuyen a los efectos generados por cuestiones adversas a la empresa, tales como fenómenos naturales, problemas de la empresa, etc.

La Figura 41 muestra una distribución de los CAPEX generados por distintas categorías, de las que destacan la compra de equipos con 33.58%, contingencias 16.67% y, otros con 22.23%.

Escenario Jatropha-Biodiesel

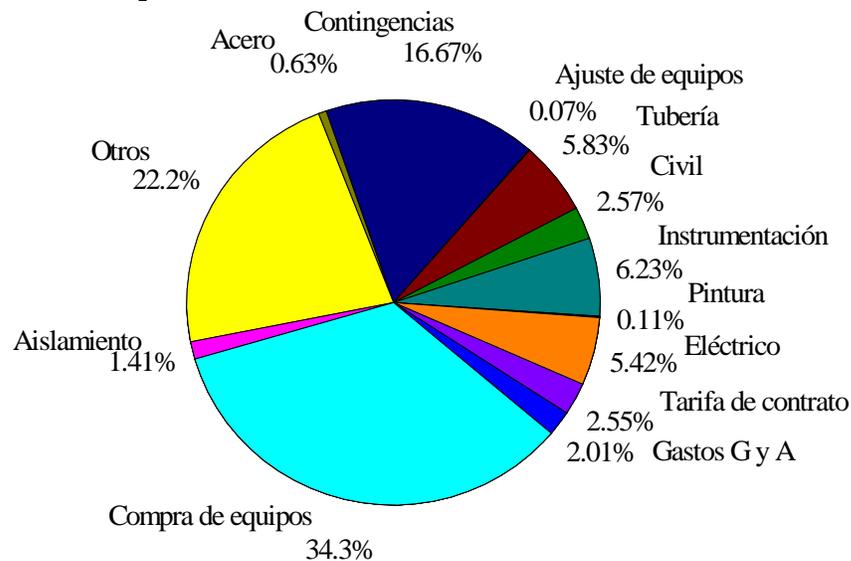


Figura 41. Distribución de costos de capital (escenario B)

Los resultados pueden atribuirse a la compra de materia prima como el acero para la fabricación de los equipos, tal como reactores de alta presión, columnas, entre otros. La proporción por compra de equipos del escenario B fue mayor que el escenario A. Esto se les atribuye principalmente a los equipos necesarios para la obtención de biodiesel.

La Figura 42 muestra la distribución de los costos de equipos instalados para los escenarios investigados. La sección de hidrotreatmento e hidroisomerización e hidrodésintegración representan más del 50% del costo de equipos en ambos escenarios. Resultados similares fueron obtenidos por Klein-Marcuschamer et al.⁹⁴ y Diederichs et al.¹³⁶

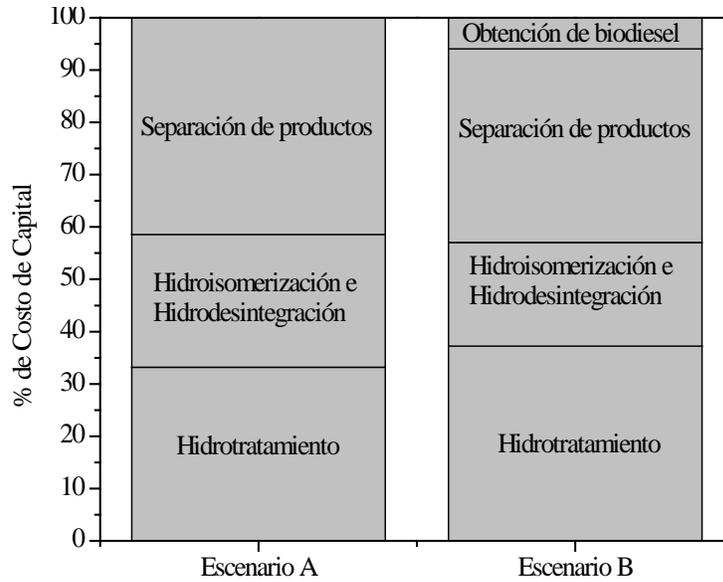


Figura 42. Costo de equipos instalados por sección de procesos

Por otro lado, los OPEX están definidos por distintos criterios. En la Tabla 34 se desglosan los OPEX calculados para ambos escenarios

Tabla 34. Costos de operación en un año de operación

	Escenario A (\$ MXP)	Escenario B (\$ MXP)
Materia prima	\$2,487,960,056.40	\$2,559,129,372.38
Costo de operación laboral	\$5,614,282.80	\$7,618,492.64
Costo de mantenimiento	\$8,131,798.50	\$12,735,733.19
Insumos	\$10,931,644.45	\$23,434,831.02
Cambios operacionales	\$1,403,570.70	\$1,904,623.16
Costos globales del proceso	\$6,873,040.65	\$10,177,112.91
Costos generales y administrativos (G y A)	\$201,673,151.48	\$209,200,013.22
OPEX	\$2,722,587,544.98	\$2,824,200,178.53

El costo de la materia prima tiene el mayor impacto en los OPEX y están asociados principalmente al precio del aceite de *Jatropha Curcas L.*, representando el 89-91% para ambos escenarios. Por lo tanto, reducir el costo de la materia prima es de vital importancia para disminuir los costos de producción y mejorar la rentabilidad del proceso, un criterio que otros investigadores han considerado.^{136,124,97,96}

En general los OPEX de ambos escenarios fue casi similar, sin embargo, en el escenario B se presentaron los mayores OPEX, asociado al consumo de hidrógeno en los reactores de hidrot ratamiento. También, se le puede atribuir al uso de metanol alimentado en la sección de obtención de biodiesel, lo cual no se encuentra presente en el escenario A.

Precio Mínimo de Venta (PMV)

El PMV de bioturbosina de ambos escenarios se muestra en la Tabla 35, considerando un precio de compra de aceite de *Jatropha* de \$80 MXP/L.¹²²

Tabla 35. Precio mínimo de venta de ambos escenarios

Escenario	PMV, \$MXP/L	Precio PEMEX (\$MXP/L)
A	\$158.93	\$14.1
B	\$162.55	

En ambos escenarios no se consideró la venta de subproductos para esta primera etapa, estos fueron considerados más adelante. El precio mínimo de venta es elevado en comparación con el combustible de origen fósil. La causa principal en el precio radica en el costo elevado del aceite de *Jatropha Curcas L.*, lo cual genera un proceso poco competitivo y no rentable. La primera alternativa para reducir el PMV fue considerar disminuir el precio de compra de la principal materia prima (aceite) para alcanzar la rentabilidad.¹³⁴

Rentabilidad del proceso

La rentabilidad del proceso depende de ciertos criterios de evaluación como se muestra en la Tabla 36.

Tabla 36. Criterios de evaluación del proyecto

Criterio	Escenario A	Escenario B
VPN (Valor Presente Neto)	(-)	(-)
TIR (Tasa interna de retorno)	0	0
MTIR (Tasa Interna de Retorno Modificada)	12.99	13.28
PO (Periodo de recuperación)	-	-
PI (Índice de Rentabilidad)	0.16	0.17

De acuerdo con los resultados obtenidos se puede decir que ningún escenario es factible para alcanzar la rentabilidad, debido a los valores de VPN negativos y el índice de rentabilidad. En búsqueda de una alternativa económicamente viable y rentable los escenarios propuestos se realizó un análisis de sensibilidad del precio del aceite en relación con la rentabilidad del proceso.

Tabla 37. Análisis de sensibilidad del costo \$ MXP/L de aceite

Criterio de evaluación	Escenario A				Escenario B				
	Costo de la compra de aceite (MXP/L)				Costos de la compra de aceite (MXP/L)				
	\$40	\$20	\$10	\$4.5	\$40	\$20	\$10	\$4.5	\$2.5
VPN	(-)	(-)	(-)	(+)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)
TIR	0	0	0	25.21	0	0	0	0	21.32
MTIR	15.28	17.33	18.97	20.08	15.41	17.27	18.74	19.68	20.09
PO	-	-	-	7.27	-	-	-	-	15.90
PI	0.30	0.51	0.77	1.02	0.30	0.49	0.72	0.92	1.02

La Tabla 37 resume los resultados de los diferentes criterios de evaluación de los escenarios de proceso propuestos para diferentes costos de aceite de *Jatropha* de \$4.5-\$40 MXP/L. Los resultados obtenidos afirman la observación previa de que el precio de la materia prima (costo del aceite) es un factor clave para alcanzar la rentabilidad. Si el costo de la materia prima se encuentra en el intervalo de \$10-\$80 MXP/L, todos los escenarios generan un VPN negativo, cuando el costo de la materia prima es tan bajo como \$7 MXP/L el escenario A genera un VPN positivo, un periodo de recuperación del capital de 16.13 años y un PI de 1.02, por lo cual lo hace significativamente rentable en comparación con el escenario B. Generar un VPN significa una pérdida neta de inversión y altos riesgos para los inversionistas.⁹⁶ Debido a los resultados obtenidos se seleccionó el escenario A para realizar una integración energética y una optimización del proceso.

3.7 Integración energética

La integración energética del mejor escenario se realizó primero categorizando las corrientes frías y calientes, y luego haciendo un análisis Pinch para diseñar la red de intercambiadores de calor. La red de intercambiadores de calor seleccionada se observa en la Figura 43.

Las corrientes frías son representadas por líneas azules y las corrientes calientes por líneas rojas. Los puntos azules y rojos representan los diferentes intercambiadores de calor usados en el escenario base; los puntos verdes son intercambiadores agregados al escenario. El calor del reactor de hidrotreatmento se utilizó para calentar el intercambiador nuevo (E-100) de esta forma elevar su temperatura y ahorra en servicios auxiliares. La corriente de salida caliente del reactor de hidroisomerización/hidrodésintegración es alimentada a un nuevo intercambiador (E-101) con el objetivo de integrar la corriente de alimentación y así reducir los costos de operación en función de los insumos suministrados.

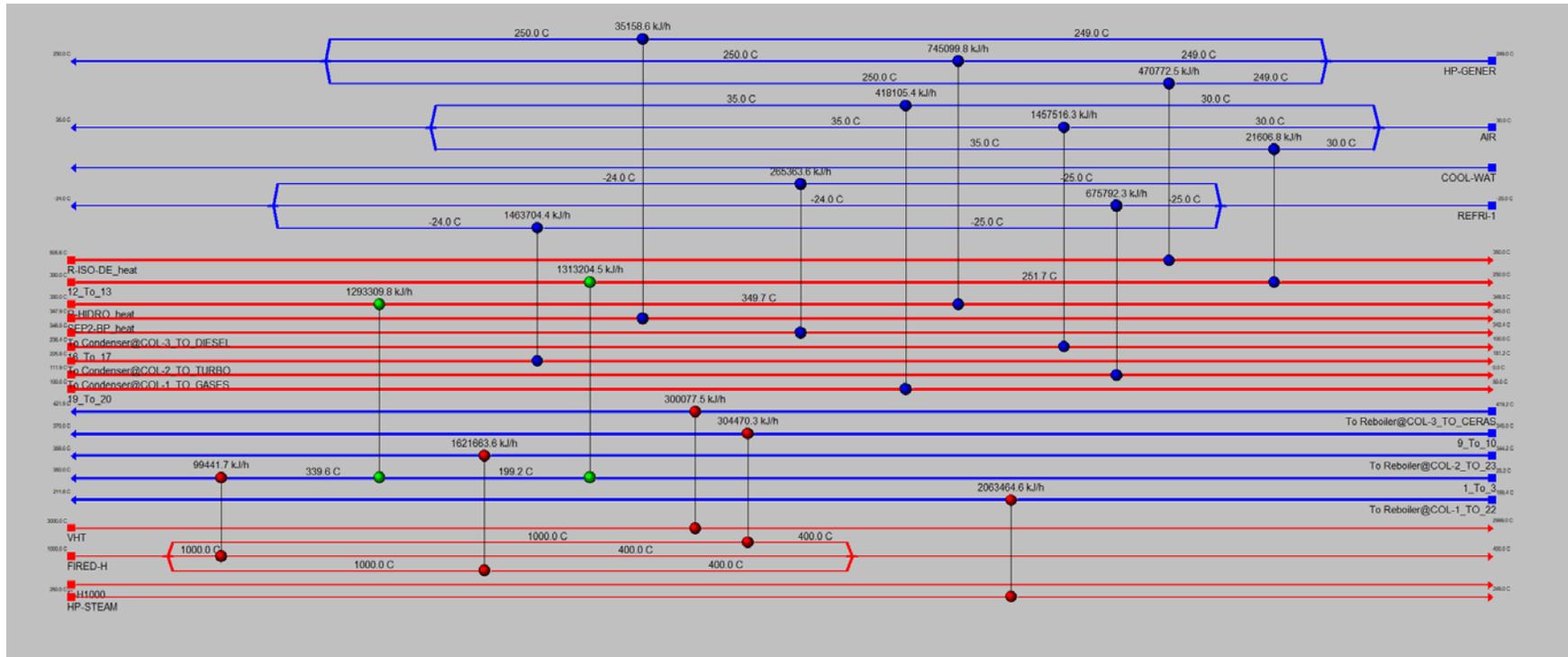


Figura 43. Red de intercambiadores de calor obtenida del Aspen Energy Analyzer

Después de la integración de calor como se observa en la Figura 44, se obtuvieron los resultados de CAPEX y OPEX. Los CAPEX aumentaron con la integración de calor, debido a los equipos adicionales en el proceso. Sin embargo, el OPEX disminuyó en el caso integrado, debido a la disminución en el consumo de servicios auxiliares externos.⁶ El ahorro económico en los OPEX es de aproximadamente \$876,325.21, esto se observa en Figura 45.

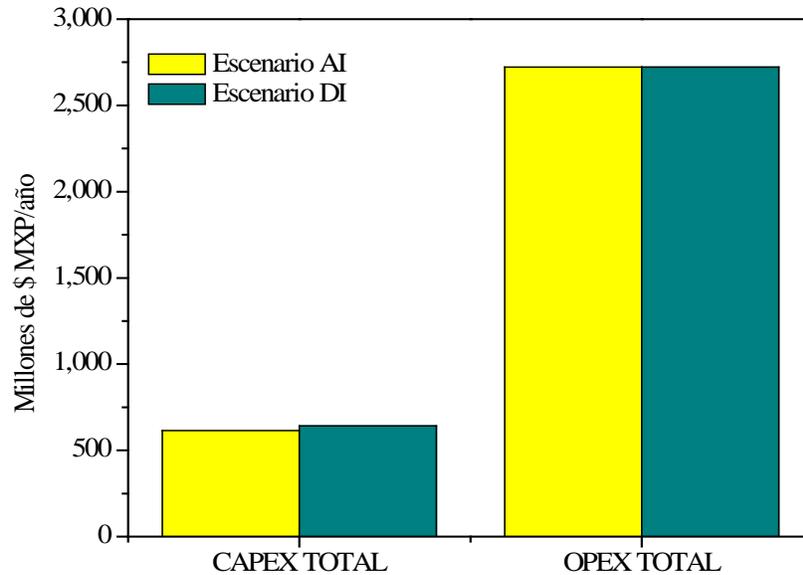


Figura 45. Comparación del escenario antes (AI) y después (DI) de la integración energética

3.8 Análisis estadístico y optimización

Para determinar los valores óptimos de los factores establecidos como el precio del aceite y la capacidad del proceso, se estableció la metodología de superficies de respuesta (RSM) con las variables de entrada y salidas establecidas a niveles máximos. La matriz completa que contiene las 9 filas de corridas de datos de acuerdo con el diseño central compuesto para el estudio de optimización estadística se muestra en la Tabla 38.

Tabla 38. Matriz completa de corridas del diseño de experimentos

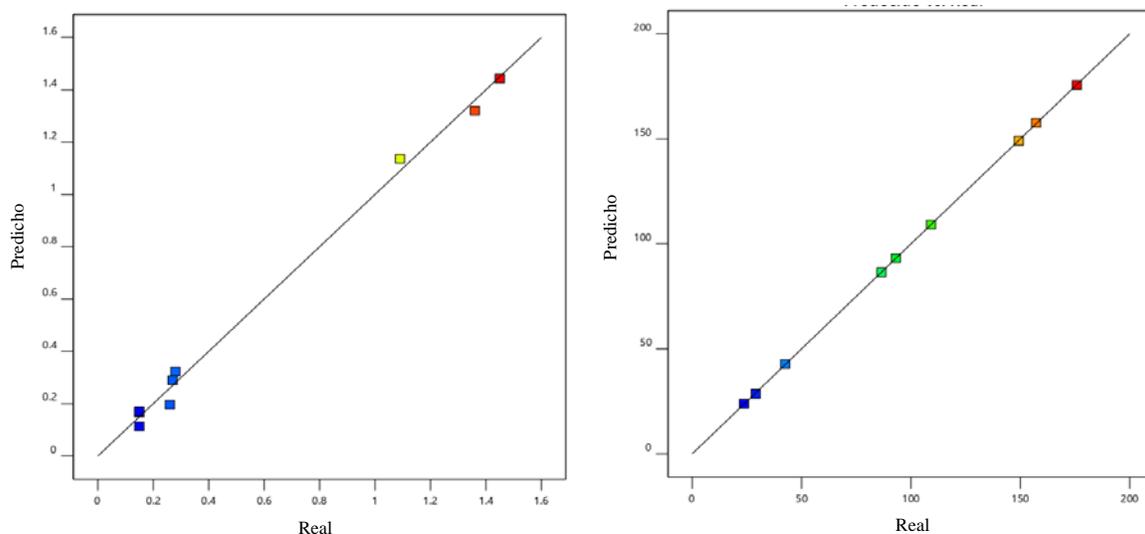
Corrida	Factor 1	Factor 2	Respuestas	
	Precio de aceite (\$ MXP/L)	Capacidad de producción del proceso (100-300%)	PI	PMV bioturbosina (\$ MXP/L)
1	\$5	100	1.09	\$42.54
2	\$47.5	300	0.28	\$86.50
3	\$90	100	0.15	\$175.85
4	\$5	300	1.45	\$23.69
5	\$47.5	100	0.26	\$109.19
6	\$90	200	0.15	\$157.23
7	\$5	200	1.36	\$29.04
8	\$47.5	200	0.27	\$93.13
9	\$90	300	0.15	\$149.32

De acuerdo con el análisis de las respuestas para el índice de rentabilidad y el precio mínimo de venta (PMV) el modelo cuadrático es el sugerido por el ANOVA. Los valores de R^2 , R^2 ajustada y R^2 predicha, para el índice de rentabilidad fueron 0.9951, 0.9869 y 0.9418, respectivamente. Para el precio mínimo de venta (PMV) los valores de R^2 , R^2 ajustada y R^2 predicha fue de 1, 0.9999 y 0.9997, respectivamente. Debido a que la diferencia entre los dos valores era inferior a 0.02, indica que los modelos podrán proporcionar una estimación razonablemente buena.¹³⁷⁻¹³⁹ Esto también concuerda con las gráficas de la Figura 46 de los valores pronosticados o predichos contra los reales. Para el PI se observan valores un poco desplazados de la línea es por ello por lo que la R^2 no predicha y ajustada no presentan un valor de 1. Por otro lado, el PMV de la bioturbosina presentó un R^2 ajustado y predicho muy cercano a 1, es por esto por lo que se ajustan mejor a la línea recta. La desviación estándar del índice de rentabilidad fue de 0.0636 y del PVM de la bioturbosina fue de 0.4267. De esta manera podemos decir que estas expresan una alta correlación entre los valores pronosticados con el modelo contra los reales, por lo tanto, podemos decir que el modelo presenta una buena predicción.

El modelo cuadrático para la respuesta del índice de rentabilidad se muestra en la ecuación (11) y para el PMV de la bioturbosina en la ecuación (12).

$$\text{Índice de rentabilidad (PI)} \quad 0.4550A^2 - 0.0900AB - 0.0300B^2 \quad (11)$$

$$\text{Precio mínimo de venta (PMV)} \quad 0.0050A^2 - 1.92AB + 4.71B^2 \quad (12)$$



a) PI del proceso

b) PMV de la bioturbosina

Figura 46. Datos reales contra los predichos por el modelo

Los resultados del análisis de varianza (ANOVA) para identificar el índice de rentabilidad se muestran en la Tabla 39 y para el PMV de la bioturbosina en la Tabla 40.

Tabla 39. Análisis de varianza (ANOVA) para la superficie de respuesta de PI

Fuente	Suma de cuadrados	DF	Cuadrado medio	Valor F	Valor p	
Modelo	2.46	5	0.4912	121.45	0.0012	Significativo
A-Precio de aceite	1.98	1	1.98	490.49	0.0002	
B-Capacidad del proceso	0.0241	1	0.0241	5.95	0.0926	
AB	0.0324	1	0.0324	8.01	0.0662	
A ²	0.4141	1	0.4141	102.38	0.0021	
B ²	0.0018	1	0.0018	0.4451	0.5524	
Residual (Error total)	0.0121	3	0.0040			
Correlación total	2.47	8				

Tabla 40. Análisis de varianza (ANOVA) para la superficie de respuesta de PMV

Fuente	Suma de cuadrados	DF	Cuadrado medio	Valor F	Valor p	
Modelo	25809.74	5	5161.95	28355.42	< 0.0001	Significativo
A-Precio de aceite	24978.27	1	24978.27	137200	< 0.0001	
B-Capacidad del proceso	772.25	1	772.25	4242.12	< 0.0001	
AB	14.75	1	14.75	81.00	0.0379	
A ²	0.0000	1	0	0.0003	0.4574	
B ²	44.46	1	44.46	244.25	0.0011	
Residual (Error total)	0.5461	3	0.1820			
Correlación total	25810.28	8				

En cuanto al índice de rentabilidad del proceso, se mostró un modelo altamente significativo con baja probabilidad de valor p de 0.0012 y un valor F alto de 121.45. Valores de $p = 0.0012$ indican que la probabilidad de obtener un valor de F elevado derivado del ruido es de 0.12%. Por otra parte, el PMV de la bioturbosina presentó un valor F de 28355.42 y un valor p menor que 0.0001, esto indica que el modelo es significativo. Un valor de $p \leq 0.0001$ indica que la probabilidad de obtener un valor F grande debido al ruido es solo del 0.01%.¹⁴⁰

El efecto de la capacidad del proceso y el precio del aceite sobre el índice de rentabilidad se observa en la Figura 47, a medida que aumenta la capacidad del proceso y se mantiene un precio de compra de aceite alto, el PI será considerablemente bajo, en consecuencia se considera un proceso no rentable. Sin embargo, con un precio de compra de aceite bajo el PI aumenta en relación con la capacidad de producción del proceso, alcanzando valores de PI *ca.* 1.4 y, por lo tanto, se considera un proceso rentable.

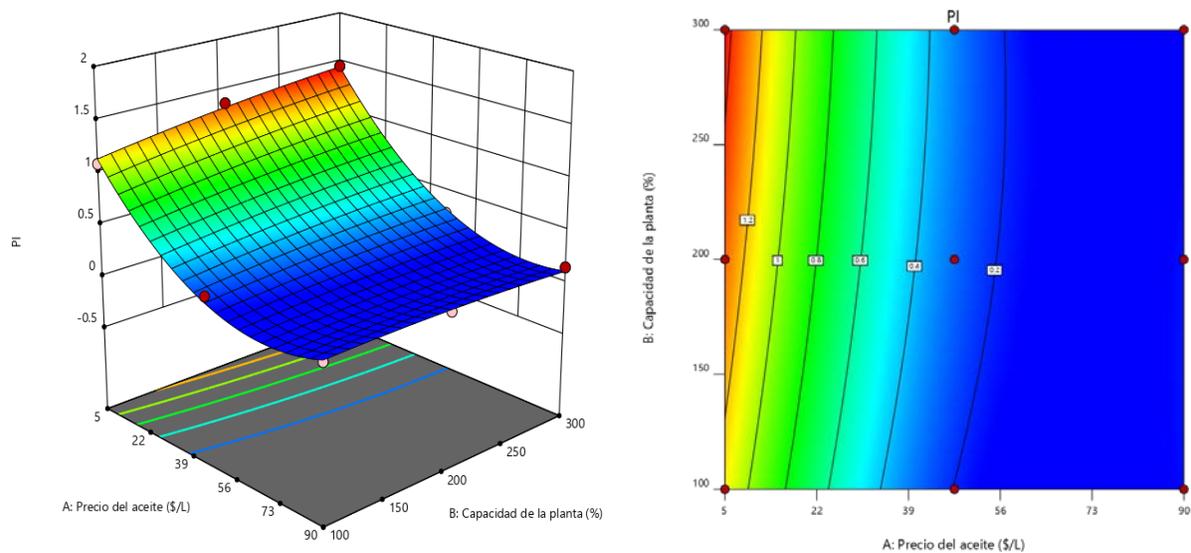


Figura 47. Superficie correspondiente al contorno del PI

El PMV de la bioturbosina considerada como único producto en función del precio del aceite y la capacidad del proceso se ve afectado considerablemente por el precio de la materia prima (aceite). Un precio elevado de aceite conlleva a un PMV mayor, aún cuando la capacidad del proceso sea mayor. Sin embargo, si se considera un precio de compra de aceite bajo, se pueden alcanzar un PMV reducido y reducir aún más si se considera una capacidad de producción mayor al 100%, esto se puede observar en la Figura 48.

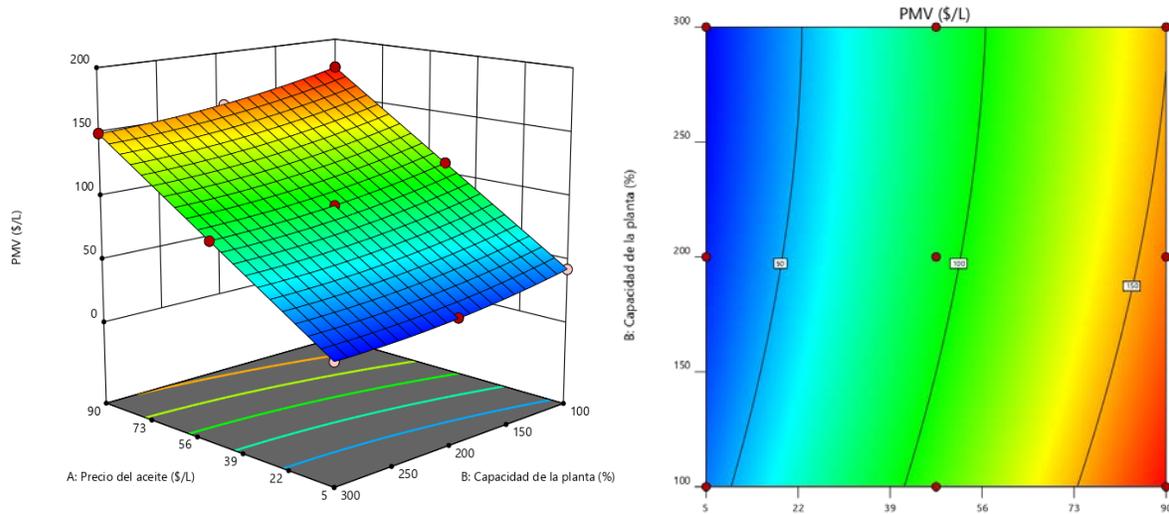


Figura 48. Superficie correspondiente al contorno del PMV de la bioturbosina

Optimización de proceso

Las condiciones óptimas para maximizar el índice de rentabilidad y minimizar el precio mínimo de venta de la bioturbosina se logra con un precio del litro de aceite de \$5 y una capacidad de producción del proceso de 300%. Las condiciones óptimas alcanzadas para el PI y el PMV fueron de 1.4433 y \$23.9033, respectivamente. Esto se puede observar en la Figura 49.

En la Figura 49a se observa el contorno de la sección de optimización de acuerdo con la maximización y minimización. Esto se puede observar mejor en el contorno de la Figura 50, la sección resaltada demuestra que el índice de rentabilidad y el precio mínimo de venta óptimos pueden ser alcanzados con precios de compra de aceite bajos *ca.* \$8 MXP y con capacidades a partir de 100% (21,000,000 L de bioturbosina). De esta forma se podría alcanzar una rentabilidad significativa sin afectar el precio mínimo de venta de manera viable.

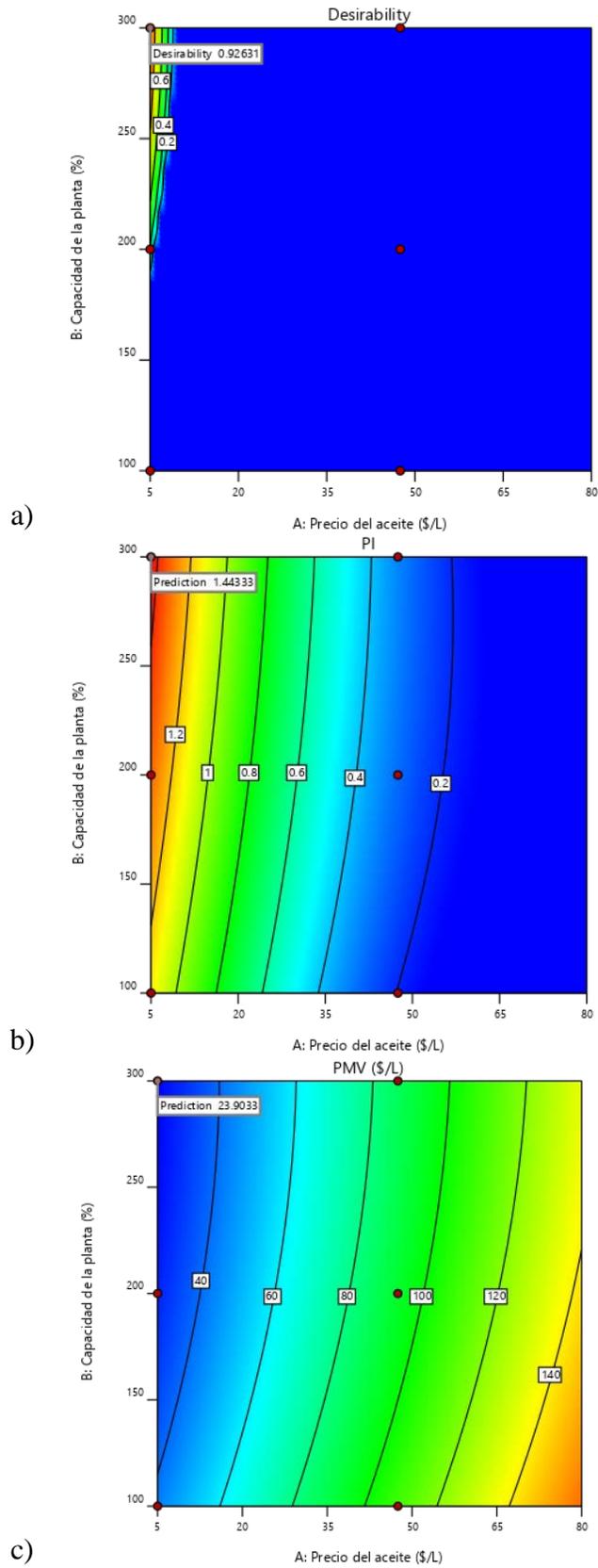


Figura 49. Contornos de las condiciones de proceso maximización o minimización

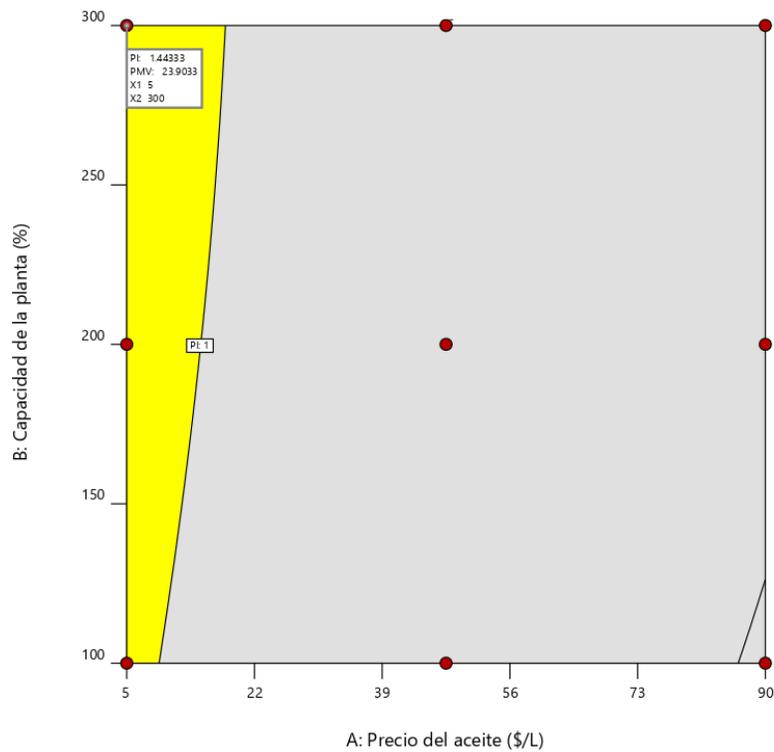


Figura 50. Contorno de la sección de optimización

Las condiciones óptimas del proceso fueron verificadas en el APEA con el objetivo de conocer los criterios de evaluación del proceso. Los resultados resumidos del proceso con las condiciones óptimas considerando la venta de subproductos a los precios establecidos en la metodología se muestran en la Tabla 41.

Tabla 41. Resumen de los criterios más importantes en el proceso

Resultados	Valor
Precio del aceite (\$/L)	\$5.00 MXP
Producción 300%	63,000,000 L de bioturbosina
Costo de capital (CAPEX)	\$ 848,923,166.73
Costo de operación (OPEX)	\$ 643,632,684.05
Valor presente neto (VPN)	243,866,982.37
Tasa interna de retorno (TIR)	70.55
Periodo de recuperación (PO)	3.21 años
Índice de rentabilidad (PI)	1.45

En la Tabla 42 se muestra el resumen de los criterios de rentabilidad del proceso considerando la venta de subproductos y a diferentes precios de la bioturbosina.

Tabla 42. Criterios de rentabilidad del proceso

Precio de venta de la bioturbosina (\$ MXP/L)	VPN	IRR	PO	PI
14.1*	(+)	70.55	3.21	1.45
12	(+)	58.62	3.68	1.35
10	(+)	47.20	4.42	1.26
8	(+)	35.91	5.84	1.15
6	(+)	24.72	10.37	1.05

*Precio de venta de la turbosina (PEMEX)

Las condiciones óptimas de operación generan una alternativa en la disminución del precio de venta de la bioturbosina, logrando con esto obtener un producto competitivo con la turbosina de origen fósil. De acuerdo con los resultados si se considera un precio de venta de \$12 MXP puede competir con la turbosina fósil sin dejar de ser un proceso rentable, en relación con los resultados del valor presente neto fue positivo, la tasa interna de retorno fue alta, un periodo de recuperación de capital de 3.68 años y un índice de rentabilidad de 1.35. De esta manera se puede generar un proceso amigable con el medio ambiente que sea rentable y pueda tener precios viables con la industria del petróleo.

De acuerdo con los resultados obtenidos por Klein-Machusamer et al.,⁹⁴ un proceso con una capacidad de 61 millones L/año de bioturbosina con una alimentación de microalgas el precio de bioturbosina fue de \$2.42 USD/L (\$46.17 MXP/L), para la *Pongamia pinnata* el precio fue de \$1.60 USD/L (\$30.58 MXP/L) y para caña de azúcar el precio fue de \$1.05 USD (\$20.034 MXP/L); Natelson et al.,⁹⁵ realizó el estudio de un proceso con una capacidad de 76 millones L/año de bioturbosina con aceite de higuierilla (camelina) como materia prima el precio de la bioturbosina fue de \$0.61 USD/L (\$11.63 MXP/L); Wang²³ obtuvo un precio de bioturbosina de \$1.43 USD/L (\$27.28 MXP/L) considerando un escenario desde la fruta de *Jatropha* y un precio de bioturbosina de \$1.51 USD/L (\$28.81 MXP/L) con un escenario de aceite de *Jatropha*. Comparando los resultados obtenidos en este trabajo de investigación con los obtenidos por otros autores se puede decir que el proceso diseñado en este trabajo es rentable y el precio de venta de bioturbosina es competitivo en comparación con otras materias primas y procesos utilizados por otros autores.

El precio de bioturbosina en comparación con la turbosina tendría un precio más elevado, sin embargo, la bioturbosina no se usa como un combustible solo, más bien es mezclado con turbosina para alcanzar los requerimientos de calidad. Por lo tanto, esto implicaría tener dos

precios de turbosina, una sin la mezcla de bioturbosina y otra con bioturbosina. La mezcla de turbosina con bioturbosina presentaría los precios más elevados. La bioturbosina no compete con la turbosina fósil, más bien sería un aditivo para reducir las emisiones de CO₂.

Capítulo IV: Conclusiones

De acuerdo con los escenarios propuestos, el hidrotreatmento de aceite de *Jatropha* genera principalmente diesel verde (61-67 %peso) en ambos escenarios, mientras que en la hidroisomerización e hidrodesintegración se produce principalmente bioturbosina (55-57 %peso).

Los CAPEX del escenario A y B, fueron atribuidos especialmente a la compra de equipos, tales como columnas de destilación, compresores, reactores, separadores, etc. Los CAPEX más significativos de los escenarios propuestos son atribuidos a la sección de hidrotreatmento y separación de productos. El aceite de *Jatropha Curcas L.* generó el mayor OPEX en ambos escenarios y el precio de éste es el factor clave para alcanzar la rentabilidad de la planta y la competitividad del precio de la bioturbosina.

De ambos escenarios simulados, el escenario A que corresponde al hidrotreatmento de aceite de *Jatropha*, sin alimentar biodiesel, resultó como el más rentable de acuerdo con los valores del índice de rentabilidad (IR), periodo de recuperación (PO), tasa interna de retorno (IRR). La integración de calor a través del análisis Pinch genera un aumento en los CAPEX debido al incremento en el número de intercambiadores de calor requeridos, sin embargo, existe una disminución en los OPEX generados por la disminución de insumos de los servicios auxiliares del proceso. El ahorro económico de los OPEX fue de \$876,325.21 MXP/año.

A partir del estudio estadístico y optimización del índice de rentabilidad (PI) y el precio mínimo de venta (PMV) de la bioturbosina en función del precio de compra del aceite y la capacidad de la planta se concluye que si se considera un precio de compra de aceite de \$5.00 MXP/L y una capacidad de 63,000,000 L de bioturbosina/año se genera un proceso rentable, considerando solo la venta de bioturbosina con un PMV de \$23.90 MXP/L.

Considerando la venta de subproductos se puede alcanzar más rápido la rentabilidad con un VPN positivo, una IRR de 58.62, un periodo de recuperación del capital de 3.68 años y un índice de rentabilidad de 1.35, el PMV de bioturbosina es de \$12 MXP/L.

La instalación de una biorrefinería con la tecnología HEFA en México, considerando el aceite de *Jatropha* como materia prima, es significativamente rentable, siempre y cuando se tengan precios de compra de aceite bajos.

Si se tienen precios de compra de aceite de *Jatropha* elevados el proceso no es rentable, sin embargo, es importante que en México se pueda considerar este tipo de procesos ya que reducen las emisiones de CO₂ y permitiría alcanzar una independencia energética de otros países, para la seguridad energética de México.

Considerar instalar más plantas para la producción de bioturbosina en México podría ser una alternativa energética para alcanzar a producir el 50% de bioturbosina, lo máximo permisible en mezclas con turbosina. Este proceso solo contempla producir el 1% de bioturbosina de la producción a la fecha mencionada anteriormente, sin embargo, aumentar la producción implicaría producir una cantidad considerable de aceite vegetal y/o grasa animal, lo cual considero México no tiene la capacidad para producir a grandes escalas actualmente.

En este trabajo solo se analizó el uso de aceite de *Jatropha Curcas L.* como materia prima, procesada con base en ciertos catalizadores y tecnologías, por lo que en trabajos futuros sería conveniente e interesante realizar un estudio técnico y económico de las diferentes alternativas de fuentes de biomasa y procesos para la producción de bioturbosina.

Referencias

- (1) Mohan, D.; Pittman, Charles U.; Steele, P. H. Pyrolysis of Wood/Biomass for Bio-Oil: A Critical Review. *Energy Fuels* **2006**, *20* (3), 848–889. <https://doi.org/10.1021/ef0502397>.
- (2) AEMA, Agencia. Europea del Medio Ambiente. European Environment Agency. <https://www.eea.europa.eu> (acceso agosto 21, 2019).
- (3) ATAG, Grupo de Acción de Transporte Aéreo. Facts & figures. <https://www.atag.org/facts-figures.html> (acceso agosto 21, 2019).
- (4) ICAO, Organización de Aviación Civil Internacional. Carbon Emissions Calculator. <https://www.icao.int/environmental-protection/CarbonOffset/Pages/default.aspx> (acceso agosto 21, 2019).
- (5) Gutiérrez-Antonio, C.; Gómez-Castro, F. I.; de Lira-Flores, J. A.; Hernández, S. A. Review on the Production Processes of Renewable Jet Fuel. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2017**, *79*, 709–729. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.108>.
- (6) Gutiérrez-Antonio, C.; Romero-Izquierdo, A. G.; Gómez-Castro, F. I.; Hernández, S. Energy Integration of Hydrotreatment Process for Sustainable Biojet Fuel Production. *Industrial & Engineering Chemistry Research* **2016**, *55*, 8165–8175. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.6b01439>.
- (7) Gutiérrez-Antonio, C.; Romero-Izquierdo, A. G.; Gómez-Castro, F. I.; Hernández, S.; Briones-Ramírez, A. Simultaneous Energy Integration and Intensification of the Hydrotreating Process to Produce Biojet Fuel from *Jatropha Curcas*. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification* **2016**, *110*, 134–145. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2016.10.007>.
- (8) ATAG, Grupo de Acción de Transporte Aéreo. Climate action takes flight: Aviation: Benefits Beyond Borders. <https://aviationbenefits.org/environmental-efficiency/our-climate-plan/> (acceso octubre 1, 2018).
- (9) ASTM International. Specification for Aviation Turbine Fuel Containing Synthesized Hydrocarbons. D7566-18a; ASTM International, D7566. <https://doi.org/10.1520/D7566-18A>.

- (10) Khan, M. A.; Yusup, S.; Ahmad, M. M. Acid Esterification of a High Free Fatty Acid Crude Palm Oil and Crude Rubber Seed Oil Blend: Optimization and Parametric Analysis. *Biomass and Bioenergy* **2010**, *34* (12), 1751–1756. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2010.07.006>.
- (11) Anguebes-Franseschi, F.; Córdova-Quiroz, A.; Cerón-Bretón, J.; Aguilar-Ucan, C.; Castillo-Martínez, G.; Cerón-Bretón, R.; Ruíz-Marín, A.; Montalvo-Romero, C. Optimization of Biodiesel Production from African Crude Palm Oil with High Concentration of Free Fatty Acids by a Two-Step Transesterification Process. *Open Journal of Ecology* **2016**, *06* (01), 13–21. <https://doi.org/10.4236/oje.2016.61002>.
- (12) Plazas-González, M.; Guerrero-Fajardo, C. A.; Sodr , J. R. Modelling and Simulation of Hydrotreating of Palm Oil Components to Obtain Green Diesel. *Journal of Cleaner Production* **2018**, *184*, 301–308. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.02.275>.
- (13) IFAD-FAO. *Jatropha: A Smallholder Bioenergy Crop. The Potential for Pro-Poor Development.*; **2010**; Vol. 8.
- (14) Sep lveda Gonz lez, I. Bioturbosina: Producci n de Cultivos Energ ticos para la Aviaci n Comercial. *Revista mexicana de ciencias agr colas* **2012**, *3* (3), 579–594.
- (15) SAGARPA, Secretar a de Agricultura, Ganader a, Desarrollo Rural, Pesca y Alimentaci n. *Planeaci n Agr cola Nacional 2017 - 2030. Bioenerg ticos: Higuierilla, Jatropha curcas, Sorgo dulce mexicanos*; Ciudad de M xico, 2017.
- (16) Liu, S.; Zhu, Q.; Guan, Q.; He, L.; Li, W. Bio-Aviation Fuel Production from Hydroprocessing Castor Oil Promoted by the Nickel-Based Bifunctional Catalysts. *Bioresource Technology* **2015**, *183*, 93–100. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.02.056>.
- (17) Ndiaye, P. M.; Franceschi, E.; Oliveira, D.; Dariva, C.; Tavares, F. W.; Oliveira, J. V. Phase Behaviour of Soybean Oil, Castor Oil and Their Fatty Acid Ethyl Esters in Carbon Dioxide at High Pressures. *The Journal of Supercritical Fluids* **2006**, *37* (1), 29–37. <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2005.08.002>.
- (18) Rabaev, M.; Landau, M. V.; Vidruk-Nehemya, R.; Koukouliev, V.; Zarchin, R.; Herskowitz, M. Conversion of Vegetable Oils on Pt/Al₂O₃/SAPO-11 to Diesel and Jet Fuels Containing Aromatics. *Fuel* **2015**, *161*, 287–294. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.08.063>.

- (19) Wang, W.-C.; Thapaliya, N.; Campos, A.; Stikeleather, L. F.; Roberts, W. L. Hydrocarbon Fuels from Vegetable Oils via Hydrolysis and Thermo-Catalytic Decarboxylation. *Fuel* **2012**, *95*, 622–629. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2011.12.041>.
- (20) Chiaramonti, D.; Buffi, M.; Rizzo, A. M.; Lotti, G.; Prussi, M. Bio-Hydrocarbons through Catalytic Pyrolysis of Used Cooking Oils and Fatty Acids for Sustainable Jet and Road Fuel Production. *Biomass and Bioenergy* **2016**, *95*, 424–435. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2016.05.035>.
- (21) Abishek, M. P.; Patel, J.; Rajan, A. P. Algae Oil: A Sustainable Renewable Fuel of Future. *Biotechnology Research International; New York* **2014**. <http://dx.doi.org/10.1155/2014/272814>.
- (22) Atsonios, K.; Kougioumtzis, M.-A.; D. Panopoulos, K.; Kakaras, E. Alternative Thermochemical Routes for Aviation Biofuels via Alcohols Synthesis: Process Modeling, Techno-Economic Assessment and Comparison. *Applied Energy* **2015**, *138*, 346–366. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.10.056>.
- (23) Wang, W.-C. Techno-Economic Analysis of a Bio-Refinery Process for Producing Hydro-Processed Renewable Jet Fuel from Jatropha. *Renewable Energy* **2016**, *95*, 63–73. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2016.03.107>.
- (24) Compagnoni, M.; Mostafavi, E.; Tripodi, A.; Mahinpey, N.; Rossetti, I. Techno-Economic Analysis of a Bioethanol to Hydrogen Centralized Plant. *Energy Fuels* **2017**, *31* (11), 12988–12996. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.7b02434>.
- (25) Ranganathan, P.; Savithri, S. Techno-Economic Analysis of Microalgae-Based Liquid Fuels Production from Wastewater via Hydrothermal Liquefaction and Hydroprocessing. *Bioresource Technology* **2019**, *284*, 256–265. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.03.087>.
- (26) Varga, Z.; Eller, Z.; Hancsók, J. Techno-Economic Evaluation of Quality Improvement of Heavy Gas Oil with Different Processes. *Journal of Cleaner Production* **2016**, *111*, 108–116. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2015.09.134>.
- (27) Statista. Airline industry worldwide - number of flights 2018-Statistic. <https://www.statista.com/statistics/564769/airline-industry-number-of-flights/> (acceso octubre 1, 2018).

- (28) IATA, Asociación Internacional de Transporte Aéreo. <https://www.iata.org/Pages/default.aspx> (acceso febrero 28, 2019).
- (29) Dagaut, P.; Cathonnet, M. The Ignition, Oxidation, and Combustion of Kerosene: A Review of Experimental and Kinetic Modeling. *Progress in Energy and Combustion Science* **2006**, 32 (1), 48–92. <https://doi.org/10.1016/j.peccs.2005.10.003>.
- (30) ASTM International. *Specification for Aviation Turbine Fuels. D1655-15d*; ASTM International, D1655. <https://doi.org/10.1520/D1655-18B>.
- (31) SEGOB, Secretaría de Gobernación. DOF - Diario Oficial de la Federación. http://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5450011&fecha=29/08/2016 (acceso septiembre 12, 2019).
- (32) Dorrington, G. E. Certification and Performance: ¿What Is Needed from an Aviation Fuel? In *Biofuels for Aviation: Feedstocks, Technology and Implementation*; Academic Press, 2016.
- (33) SEGOB, Secretaría de Gobernación. DOF - Diario Oficial de la Federación. https://www.dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5541659&fecha=22/10/2018 (acceso octubre 10, 2019).
- (34) SEDENA, Secretaría de la Defensa Nacional. Fuerza Aérea Mexicana. La Aviación Militar. Un Siglo de Historia (1915-2015). *Origen de la aviación militar en México*. 2015.
- (35) Nava Amezcua, R. Los Altos Vuelos de La Aviación Militar, La Fuerza Aérea Mexicana: Más de Cien Años de Historia. *Relatos e Historia en México* **2008**, No. 91, 1–17.
- (36) SEDENA, Secretaría de la Defensa Nacional; SEMAR, Secretaría de Marina. El Desarrollo de La Aviación Durante Las Operaciones Militares de La Revolución Mexicana, En Perea, J.R. *Las fuerzas armadas en la Revolución Mexicana*. 2013.
- (37) SCT, Secretaría de Comunicaciones y Transporte. *Secretaria de Comunicaciones y Transportes: 5.1 Aviación Mexicana En Cifras 1991-2017*.; 2018.
- (38) ASA, Aeropuertos y Servicios Auxiliares. *Actividades Aeroportuarias*; Secretaría de Comunicaciones y Transportes: México, 2019.
- (39) SENER, Secretaría de Energía. Sistema de Información Energética. <http://sie.energia.gob.mx/bdiController.do> (acceso abril 4, 2019).

- (40) Gob, Gobierno de México. Datos Abiertos de México - datos.gob.mx. <https://datos.gob.mx/busca/dataset> (acceso octubre 6, 2019).
- (41) Schäfer, A. W.; Evans, A. D.; Reynolds, T. G.; Dray, L. Costs of Mitigating CO Emissions from Passenger Aircraft. *Nature Climate Change* **2016**, 6 (4), 412–417. <https://doi.org/10.1038/nclimate2865>.
- (42) Tans, P.; Keeling, R. *NOAA/ESRL*; Institution of Oceanography, 2018.
- (43) Naciones Unidas. *Framework Convention on Climate Change, Conference of Parties, Twenty, First Session, Adoption of the Paris Agreement.*; 2015.
- (44) IATA, Asociación Internacional de Transporte Aéreo. *Reducing Emissions from Aviation through Carbon-Neutral Growth from 2020*; 2013.
- (45) UE, Unión Europea. Biofuels Flightpath. <https://www.biofuelsflightpath.eu/#targetText=The%20European%20Advanced%20Biofuels%20Flightpath, regional%20development%20and%20create%20Jobs>. (acceso agosto 21, 2019).
- (46) ATAG, Grupo de Acción de Transporte Aéreo. *Aviation Climate Solutions*; 2015.
- (47) Banco Mundial de Datos. Emisiones de CO₂ (toneladas métricas per cápita). <https://datos.bancomundial.org/indicador/EN.ATM.CO2E.PC?locations=MX> (acceso marzo 7, 2019).
- (48) INECC, Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. Inventario Nacional de Emisiones de Gases y Compuestos de Efecto Invernadero. <http://www.gob.mx/inecc/acciones-y-programas/inventario-nacional-de-emisiones-de-gases-y-compuestos-de-efecto-invernadero> (acceso marzo 7, 2019).
- (49) INECC, Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. México presentó en la COP 22 su estrategia de cambio climático al 2050. <http://www.gob.mx/inecc/prensa/mexico-presento-en-la-cop-22-su-estrategia-de-cambio-climatico-al-2050> (acceso septiembre 12, 2019).
- (50) ICAO, Organización de Aviación Civil Internacional. Aviation Climate Solutions report: Aviation: Benefits Beyond Borders. <https://aviationbenefits.org/environmental-efficiency/our-climate-plan/aviation-climate-solutions-report> (acceso octubre 1, 2018).
- (51) IPICYT. Clúster-bioturbosina. <https://www.clusterbioturbosina.org> (acceso marzo 7, 2019).

- (52) Islas-Sampeiro, J.; Martínez-Jiménez, A. Bioenergía. *CIENCIA* **2010**.
- (53) Masera Cerutti, O.; México; Secretaría de Energía; Inter-American Development Bank; Deutsche Gesellschaft für Technische Zusammenarbeit; Comité consultivo sobre Biocombustibles en México. *Potenciales y viabilidad del uso de bioetanol y biodiesel para el transporte en México*; SENER; BID; GTZ: México, D.F., 2006.
- (54) Rios, M.; Kaltschmitt, M. Bioenergy Potential in Mexico—Status and Perspectives on a High Spatial Distribution. *Biomass Conv. Bioref.* **2013**, 3 (3), 239–254. <https://doi.org/10.1007/s13399-013-0085-3>.
- (55) García, C. A.; Riegelhaupt, E.; Ghilardi, A.; Skutsch, M.; Islas, J.; Manzini, F.; Masera, O. Sustainable Bioenergy Options for Mexico: GHG Mitigation and Costs. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **2015**, 43, 545–552. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.11.062>.
- (56) Liu, Y.; Sotelo-Boyás, R.; Murata, K.; Minowa, T.; Sakanishi, K. Hydrotreatment of Vegetable Oils to Produce Bio-Hydrogenated Diesel and Liquefied Petroleum Gas Fuel over Catalysts Containing Sulfided Ni–Mo and Solid Acids. *Energy Fuels* **2011**, 25 (10), 4675–4685. <https://doi.org/10.1021/ef200889e>.
- (57) Martínez-Jiménez, A.; Díaz-Padilla, G. *Áreas de Potencial Productivo de Piñón *Jatropha Curcas L*, Como Especie de Interés Bioenergético en México.*; INIFAP, 2008.
- (58) Buenrostro Domínguez, T. *Biocombustibles Sustentables de Aviación en México.* https://www.icao.int/Meetings/EnvironmentalWorkshops/Documents/Env-Seminars-Lima-Mexico/Mexico/15_Mexico_SustainableBiofuels.pdf
- (59) Álvarez Maciel, C. Biocombustibles: Desarrollo Histórico-Tecnológico, Mercados Actuales y Comercio Internacional. *UNAM* **2009**.
- (60) Romero-Izquierdo, A.; Gómez-De la Cruz, A.; Gutiérrez-Antonio, C. Bioturbosina: Retos y Oportunidades. *Academia Mexicana de Ciencias* **2016**, 67 (3).
- (61) Pearlson, M. N. A Techno-Economic and Environmental Assessment of Hydroprocessed Renewable Distillate Fuels, Massachusetts Institute of Technology, 2011.
- (62) ASTM International. *Specification for Biodiesel. D6751-09*; 2009.
- (63) UOP, Universal Oil Products *Renewable Diesel Process Technical Paper*; Honeywell, 2008.

- (64) IRENA. *Biofuels for Aviation: Technology Brief*; International Renewable Energy Agency: Abu Dhabi, 2017.
- (65) Gong, S.; Shinozaki, A.; Shi, M.; Qian, E. W. Hydrotreating of Jatropha Oil over Alumina Based Catalysts. *Energy Fuels* **2012**, *26* (4), 2394–2399. <https://doi.org/10.1021/ef300047a>.
- (66) Shi, H.; Chen, J.; Yang, Y.; Tian, S. Catalytic Deoxygenation of Methyl Laurate as a Model Compound to Hydrocarbons on Nickel Phosphide Catalysts: Remarkable Support Effect. *Fuel Processing Technology* **2014**, *118*, 161–170. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2013.08.010>.
- (67) Sotelo-Boyás, R.; Trejo-Zárraga, F.; Hernández-Loyo, F. de J. Hydroconversion of Triglycerides into Green Liquid Fuels. *Hydrogenation* **2012**. <https://doi.org/10.5772/48710>.
- (68) Choudhary, T. V.; Phillips, C. B. Renewable Fuels via Catalytic Hydrodeoxygenation. *Applied Catalysis A: General* **2011**, *397* (1), 1–12. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2011.02.025>.
- (69) Guzman, A.; Torres, J. E.; Prada, L. P.; Nuñez, M. L. Hydroprocessing of Crude Palm Oil at Pilot Plant Scale. *Catalysis Today* **2010**, *156* (1), 38–43. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2009.11.015>.
- (70) Robota, H. J.; Alger, J. C.; Shafer, L. Converting Algal Triglycerides to Diesel and HEFA Jet Fuel Fractions. *Energy Fuels* **2013**, *27* (2), 985–996. <https://doi.org/10.1021/ef301977b>.
- (71) Chen, L.; Li, H.; Fu, J.; Miao, C.; Lv, P.; Yuan, Z. Catalytic Hydroprocessing of Fatty Acid Methyl Esters to Renewable Alkane Fuels over Ni/HZSM-5 Catalyst. *Catalysis Today* **2016**, *259*, 266–276. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2015.08.023>.
- (72) Hachemi, I.; Murzin, D. Yu. Kinetic Modeling of Fatty Acid Methyl Esters and Triglycerides Hydrodeoxygenation over Nickel and Palladium Catalysts. *Chemical Engineering Journal* **2018**, *334*, 2201–2207. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2017.11.153>.
- (73) Cheng, J.; Zhang, Z.; Zhang, X.; Fan, Z.; Liu, J.; Zhou, J. Continuous Hydroprocessing of Microalgae Biodiesel to Jet Fuel Range Hydrocarbons Promoted by Ni/Hierarchical Mesoporous Y Zeolite Catalyst. *International Journal of Hydrogen Energy* **2019**, *44* (23), 11765–11773. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.03.073>.

- (74) Batalha, N.; Pinard, L.; Bouchy, C.; Guillon, E.; Guisnet, M. N-Hexadecane Hydroisomerization over Pt-HBEA Catalysts. Quantification and Effect of the Intimacy between Metal and Protonic Sites. *Journal of Catalysis* **2013**, *307*, 122–131. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2013.07.014>.
- (75) Lee, S.-W.; Ihm, S.-K. Characteristics of Magnesium-Promoted Pt/ZSM-23 Catalyst for the Hydroisomerization of n-Hexadecane. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2013**, *52* (44), 15359–15365. <https://doi.org/10.1021/ie400628q>.
- (76) Du, Y.; Feng, B.; Jiang, Y.; Yuan, L.; Huang, K.; Li, J. Solvent-Free Synthesis and n-Hexadecane Hydroisomerization Performance of SAPO-11 Catalyst. *European Journal of Inorganic Chemistry* **2018**, *2018* (22), 2599–2606. <https://doi.org/10.1002/ejic.201800134>.
- (77) Gary, J. H.; Handwerk, G. E. *Petroleum Refining*; Marcel Dekker, Inc.: New York, 2001.
- (78) Campelo, J. M.; Lafont, F.; Marinas, J. M. Hydroisomerization and Hydrocracking of N-Heptane on Pt/SAPO-5 and Pt/SAPO-11 Catalysts. *Journal of Catalysis* **1995**, *156* (1), 11–18. <https://doi.org/10.1006/jcat.1995.1226>.
- (79) Ali, M. F.; El Ali, B. M.; Speight, J. G. *Handbook of Industrial Chemistry: Organic Chemicals*; Mc Graw Hill, 2005.
- (80) Ling, H.; Wang, Q.; Shen, B. Hydroisomerization and Hydrocracking of Hydrocracker Bottom for Producing Lube Base Oil. *Fuel Processing Technology* **2009**, *90* (4), 531–535. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2009.01.006>.
- (81) Calemma, V.; Peratello, S.; Perego, C. Hydroisomerization and Hydrocracking of Long Chain N-Alkanes on Pt/Amorphous SiO₂–Al₂O₃ Catalyst. *Applied Catalysis A: General* **2000**, *190* (1), 207–218. [https://doi.org/10.1016/S0926-860X\(99\)00292-6](https://doi.org/10.1016/S0926-860X(99)00292-6).
- (82) Seader, J. D.; Henley, E. J.; Roper, D. K. *Separation process principles: chemical a biochemical operation.*; John Wiley & Sons, Inc.: United States of America, 2010.
- (83) T.C.I. *Información Tecnológica*; Centro de Información Tecnológica, 2000.
- (84) Wauquier, J.-P. *El refino del petróleo: Petróleo crudo, Productos petrolíferos y Esquemas de fabricación*; Díaz de Santos. 2004.
- (85) Sinnott, R.; Towler, G. *Diseño en ingeniería química*; Ingeniería Química Coulson y Richardson; Reverté: Barcelona, España, 2012; Vol. 22.

- (86) Arce Medina, E. *Introducción al Diseño Básico de Los Procesos Químicos*; Instituto Politécnico Nacional; 2011.
- (87) Sacramento-Rivero, J. C.; Romero, G.; Cortés-Rodríguez, E.; Pech, E.; Blanco-Rosete, S. Diagnóstico Del Desarrollo de Biorrefinerías En México. *Revista mexicana de ingeniería química* **2010**, 9 (3), 261–283.
- (88) Rosales-Posas, R. *Formulación y evaluación de proyectos*, 1st ed.; Instituto Centroamericano de Administración Pública (ICAP): San José, 1999.
- (89) Baca-Urbina, G. *Evaluación de proyectos*; Mc Graw Hill: México, D.F., 2013.
- (90) Operating and Capital Expenditures Models. In *Pro Excel Financial Modeling: Building Models for Technology Startups*; Apress: Berkeley, CA, **2009**; pp 169–191. https://doi.org/10.1007/978-1-4302-1899-9_9.
- (91) Cámara de Diputados. *Ley Del Impuesto Sobre La Renta. DOF 30-11-2016*; Ciudad de México, 2016.
- (92) González Vargas, M. El avance de México en energías renovables está en las manos de empresas ante la pasividad del gobierno. <https://www.infobae.com/america/mexico/2019/07/20/el-avance-de-mexico-en-energias-renovables-esta-en-las-manos-de-empresas-ante-la-pasividad-del-gobierno/> (acceso octubre 10, 2019).
- (93) CONACYT, Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología. Programa Estratégico Nacional de Tecnología e Innovación Abierta (PENTA) – CONACYT. <https://www.conacyt.gob.mx/index.php/el-conacyt/penta> (acceso octubre 10, 2019).
- (94) Klein-Marcuschamer, D.; Turner, C.; Allen, M.; Gray, P.; Dietzgen, R. G.; Gresshoff, P. M.; Hankamer, B.; Heimann, K.; Scott, P. T.; Stephens, E.; et al. Technoeconomic Analysis of Renewable Aviation Fuel from Microalgae, *Pongamia Pinnata*, and Sugarcane. *Biofuels, Bioprod. Bioref.* **2013**, 7 (4), 416–428. <https://doi.org/10.1002/bbb.1404>.
- (95) Natelson, R. H.; Wang, W.-C.; Roberts, W. L.; Zering, K. D. Technoeconomic Analysis of Jet Fuel Production from Hydrolysis, Decarboxylation, and Reforming of Camelina Oil. *Biomass and Bioenergy* **2015**, 75, 23–34. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2015.02.001>.

- (96) Li, X.; Mupondwa, E.; Tabil, L. Technoeconomic Analysis of Biojet Fuel Production from Camelina at Commercial Scale: Case of Canadian Prairies. *Bioresource Technology* **2018**, *249*, 196–205. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2017.09.183>.
- (97) Klein, B. C.; Chagas, M. F.; Junqueira, T. L.; Rezende, M. C. A. F.; Cardoso, T. de F.; Cavalett, O.; Bonomi, A. Techno-Economic and Environmental Assessment of Renewable Jet Fuel Production in Integrated Brazilian Sugarcane Biorefineries. *Applied Energy* **2018**, *209*, 290–305. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.10.079>.
- (98) El-Halwagi, M. M. *Process Integration; Process Systems Engineering*; Academic Press: Texas, USA, 2016; Vol. 7.
- (99) Herraiz Taberero, I. Optimización del consumo energético de procesos industriales. Tecnología de Pinch. Combinación con el Análisis de Exergía., Universidad de Cádiz, Cádiz, España, 2004.
- (100) Kemp, I. C. *Pinch Analysis and Process Integration*; Butterworth-Heinemann: USA, 2007.
- (101) Gutiérrez-Antonio, C.; Cruz, A. G.-D. la; Romero-Izquierdo, A. G.; Gómez-Castro, F. I.; Hernández, S. Modeling, Simulation and Intensification of Hydroprocessing of Micro-Algae Oil to Produce Renewable Aviation Fuel. *Clean Techn Environ Policy* **2018**, 1–10. <https://doi.org/10.1007/s10098-018-1561-z>.
- (102) Turton, R.; Bailie, R. C.; Whiting, W. B.; Shaeiwitz, J. A.; Bhattacharyya, D. *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes*; Prentice Hall, 2004.
- (103) Hill, W. J.; Hunter, W. G. A Review of Response Surface Methodology: A Literature Survey. *Technometrics* **1966**, *8* (4), 571–590. <https://doi.org/10.1080/00401706.1966.10490404>.
- (104) Madamba, P. The Response Surface Methodology: An Application to Optimize Dehydration Operations of Selected Agricultural Crops. *Lebensmittel-Wissenschaft und-Technologie* **2002**, *35* (7), 584–592. [https://doi.org/10.1016/S0023-6438\(02\)90914-X](https://doi.org/10.1016/S0023-6438(02)90914-X).
- (105) Ghadge, S. V.; Raheman, H. Process Optimization for Biodiesel Production from Mahua (*Madhuca Indica*) Oil Using Response Surface Methodology. *Bioresource Technology* **2006**, *97* (3), 379–384. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.03.014>.

- (106) Brown, J. N.; Brown, R. C. Process Optimization of an Auger Pyrolyzer with Heat Carrier Using Response Surface Methodology. *Bioresource Technology* **2012**, *103* (1), 405–414. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2011.09.117>.
- (107) Singh, S.; Ghatak, H. R. Process optimization of lignin conversion into value added chemicals by thermochemical pretreatment and electrooxidation on a stainless-steel anode. *Holzforschung* **2017**, *72* (3), 2–13. <https://doi.org/10.1515/hf-2017-0108>.
- (108) Khuri, A. I.; Cornell, J. A. *Response Surfaces: Designs and Analyses*; Routledge, 2018.
- (109) Sen, R.; Swaminathan, T. Response Surface Modeling and Optimization to Elucidate and Analyze the Effects of Inoculum Age and Size on Surfactin Production. *Biochemical Engineering Journal* **2004**, *21* (2), 141–148. <https://doi.org/10.1016/j.bej.2004.06.006>.
- (110) Dharma, S.; Masjuki, H. H.; Ong, H. C.; Sebayang, A. H.; Silitonga, A. S.; Kusumo, F.; Mahlia, T. M. I. Optimization of Biodiesel Production Process for Mixed *Jatropha Curcas*–*Ceiba Pentandra* Biodiesel Using Response Surface Methodology. *Energy Conversion and Management* **2016**, *115*, 178–190. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2016.02.034>.
- (111) Solarte-Toro, J. C.; Romero-García, J. M.; Susmozas, A.; Ruiz, E.; Castro, E.; Cardona-Alzate, C. A. Techno-Economic Feasibility of Bioethanol Production via Biorefinery of Olive Tree Prunings (OTP): Optimization of the Pretreatment Stage. *Holzforschung* **2019**, *73* (1), 3–13. <https://doi.org/10.1515/hf-2018-0096>.
- (112) Sulaiman, N.; Ida Idayu, M.; Ramlan, A.; Nor Farahiyah, A. N.; Taher, Z. M.; Nor Rashidah, A.; Mohamad, M. F. Enhancement of Gaharu Oleoresin Quality by Process Optimization Using Response Surface Methodology. *Biocatalysis and Agricultural Biotechnology* **2019**, *18*, 101066. <https://doi.org/10.1016/j.bcab.2019.101066>.
- (113) Madenoor Ramapriya, G.; Won, W.; Maravelias, C. T. A Superstructure Optimization Approach for Process Synthesis under Complex Reaction Networks. *Chemical Engineering Research and Design* **2018**, *137*, 589–608. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2018.07.015>.
- (114) Wu, W.; Henao, C. A.; Maravelias, C. T. A Superstructure Representation, Generation, and Modeling Framework for Chemical Process Synthesis. *AIChE Journal* **2016**, *62* (9), 3199–3214. <https://doi.org/10.1002/aic.15300>.

- (115) Carlson, E. C. Don't Gamble with Physical Properties for Simulations. *CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS* **1996**, 92 (10), 35–46.
- (116) Smith, R. *Chemical Process Design an Integration*; John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- (117) Xing, G.; Liu, S.; Guan, Q.; Li, W. Investigation on Hydroisomerization and Hydrocracking of C15–C18 n-Alkanes Utilizing a Hollow Tubular Ni-Mo/SAPO-11 Catalyst with High Selectivity of Jet Fuel. *Catalysis Today* **2018**. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2018.04.028>.
- (118) Díaz-Martínez, B. H. Optimización de la producción de biodiesel a partir de aceite vegetal usado a nivel laboratorio y a nivel planta piloto, Instituto Politécnico Nacional, México, D.F., 2013.
- (119) AspenTech. Aspen Technology. <https://www.aspentech.com/en/products/pages/aspen-process-economic-analyzer> (acceso abril 29, 2019).
- (120) INECC, Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático; SEMARNAT, Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. *Estudio de la Calidad de los Combustibles Fósiles y su Impacto en el Medio Ambiente*; Ciudad de México, 2017; p 155.
- (121) API, Instituto Americano del Petróleo. Characterization of Hydrocarbons. In *API Technical Data Book*; 2016.
- (122) Treviño, J. Jatropha México. <http://jatropha.com.mx/blog/> (acceso agosto 8, 2019).
- (123) Simbeck, D. R.; Chang, E. *Hydrogen Supply: Cost Estimate for Hydrogen Pathways - Scoring Analysis*; National Renewable Energy Laboratory, 2002.
- (124) Tao, L.; Milbrandt, A.; Zhang, Y.; Wang, W.-C. Techno-Economic and Resource Analysis of Hydroprocessed Renewable Jet Fuel. *Biotechnology for Biofuels* **2017**, 10 (1), 261. <https://doi.org/10.1186/s13068-017-0945-3>.
- (125) Peters, M. S.; Klaus, T. *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*; Chemical and Petroleum Engineering Series; McGraw Hill: New York, 1991.
- (126) CFE, Comisión Federal de Electricidad. Tarifas – CFE. https://app.cfe.mx/aplicaciones/ccfe/tarifas/tarifas/Tarifas_casa.asp?Tarifa=DACTAR1&anio=2018 (acceso agosto 30, 2019).
- (127) IMTA, Instituto Mexicano de Tecnología del Agua. Sistema de Información de Tarifas de Agua Potable. <http://www.gob.mx/imta/articulos/sistema-de-informacion-de-tarifas-de-agua-potable?idiom=es> (acceso agosto 30, 2019).

- (128) PEMEX, Petróleos Mexicanos. Estadísticas petroleras junio de 2019. <https://www.pemex.com/ri/Publicaciones/Paginas/IndicadoresPetroleros.aspx> (acceso agosto 20, 2019).
- (129) PEMEX, Petróleos Mexicanos. Portal Comercial de PEMEX TRANSFORMACIÓN INDUSTRIAL. https://www.comercialrefinacion.pemex.com/portal/menu/controlador?Destino=menu_gral.jsp (acceso agosto 20, 2019).
- (130) Sepulveda, J. A.; Souder, W. E.; Gottfried, B. S. *Schaum's Outline of Theory and Problems of Engineering Economics*; Schaum's Outline; McGraw Hill Professional, 1984.
- (131) Graham, B.; Baxter, R. E.; Ress, R. *Diccionario de economía*; Trillas: México, 2007.
- (132) Horne, J. C. V.; Wachowicz, J. M. *Fundamentos de administración financiera*; Pearson Educación: México, 2010.
- (133) Watanabe, M. D. B.; Pereira, L. G.; Chagas, M. F.; da Cunha, M. P.; Jesus, C. D. F.; Souza, A.; Rivera, E. C.; Maciel Filho, R.; Cavalett, O.; Bonomi, A. Sustainability Assessment Methodologies. In *Virtual Biorefinery: An Optimization Strategy for Renewable Carbon Valorization*; Bonomi, A., Cavalett, O., Pereira da Cunha, M., Lima, M. A. P., Eds.; Green Energy and Technology; Springer International Publishing: Cham, 2016; pp 155–188. https://doi.org/10.1007/978-3-319-26045-7_6.
- (134) Klein-Marcuschamer, D.; Simmons, B. A.; Blanch, H. W. Techno-Economic Analysis of a Lignocellulosic Ethanol Biorefinery with Ionic Liquid Pre-Treatment. *Biofuels, Bioprod. Bioref.* **2011**, 5 (5), 562–569. <https://doi.org/10.1002/bbb.303>.
- (135) Dean, A.; Voss, D.; Draguljic, D. *Design and Analysis of Experiments*; Springer Texts in Statistics; Springer: USA, 2017.
- (136) Diederichs, G. W.; Ali Mandegari, M.; Farzad, S.; Görgens, J. F. Techno-Economic Comparison of Biojet Fuel Production from Lignocellulose, Vegetable Oil and Sugar Cane Juice. *Bioresource Technology* **2016**, 216, 331–339. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2016.05.090>.
- (137) Makareviciene, V.; Skorupskaite, V.; Levisauskas, D.; Andruleviciute, V.; Kazancev, K. The Optimization of Biodiesel Fuel Production from Microalgae Oil Using

- Response Surface Methodology. *International Journal of Green Energy* **2014**, *11* (5), 527–541. <https://doi.org/10.1080/15435075.2013.777911>.
- (138) Maran, J. P.; Priya, B. Ultrasound-Assisted Extraction of Polysaccharide from *Nephelium Lappaceum* L. Fruit Peel. *International Journal of Biological Macromolecules* **2014**, *70*, 530–536. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2014.07.032>.
- (139) Foust, T. D.; Aden, A.; Dutta, A.; Phillips, S. An Economic and Environmental Comparison of a Biochemical and a Thermochemical Lignocellulosic Ethanol Conversion Processes. *Cellulose; Dordrecht* **2009**, *16* (4), 547–565. <http://dx.doi.org/10.1007/s10570-009-9317-x>.
- (140) Badday, A. S.; Abdullah, A. Z.; Lee, K.-T. Optimization of Biodiesel Production Process from *Jatropha* Oil Using Supported Heteropolyacid Catalyst and Assisted by Ultrasonic Energy. *Renewable Energy* **2013**, *50*, 427–432. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2012.07.013>.