Naturaleza y TECNOLOGÍA
Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

DISEÑO CONCEPTUAL DE UN PROCESO PARA LA PRODUCCIÓN DE COMBUSTIBLE SOSTENIBLE DE AVIACIÓN A PARTIR DE ÁCIDO LEVULÍNICO DERIVADO DE BIOMASA LIGNOCELULÓSICA

María Guadalupe Morales-Ramírez, Emilio Alejandro Hernández-Figueroa, Melanie Coronel-Muñoz, Eduardo Sánchez-Ramírez*

[a] Universidad de Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato 36050. eduardo.sanchez@ugto.mx

Resumen

El presente trabajo propone una ruta integrada para la producción de combustible sostenible de aviación a partir de rastrojo de maíz. La motivación del estudio radica en la necesidad de desarrollar alternativas renovables para el sector aeronáutico, particularmente combustible sostenible de aviación. Este biocombustible se encuentra en desarrollo y presenta limitaciones importantes, en especial la obtención de propiedades adecuadas a las características de la turbosina, así como la disposición de materia prima y procesos de producción más viables. La aportación principal consiste en integrar las etapas de conversión de la biomasa hacia ácido levulínico y γ-valerolactona, seguidas de apertura del anillo, descarboxilación, oligomerización, hidrogenación y purificación, mediante una simulación conceptual en Aspen Plus V14. Los resultados muestran una fracción hidrocarbonada C_8–C_{16} con una densidad de 831.48 kg/m³ a 15 °C, dentro del intervalo reportado para Jet A-1. El análisis de sensibilidad permitió identificar condiciones de operación favorables para las cuatro columnas de separación. El poder calorífico neto calculado fue de 38.43 MJ/kg, por debajo del valor de referencia de 42.8 MJ/kg, por lo que se identifican la purificación y la composición de la corriente final como áreas de mejora. La integración propuesta constituye una base para estudios posteriores de optimización tecnoeconómica y ambiental.

Palabras clave: Combustible sostenible de aviación (SAF); ácido levulínico; biomasa lignocelulósica; biorrefinería; rastrojo de maíz.

Naturaleza y TECNOLOGÍA

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

CONCEPTUAL DESIGN OF A PROCESS FOR PRODUCING SUSTAINABLE AVIATION FUEL FROM LEVULINIC ACID DERIVED FROM LIGNOCELLULOSIC BIOMASS

Abstract

This study proposes an integrated process to produce sustainable aviation fuel from corn stover. The motivation for this study stems from the need to develop renewable alternatives for the aviation sector, where the development of sustainable aviation fuel alternatives is still in its early stages and faces significant limitations—particularly in achieving properties that match those of jet fuel and in securing the availability of raw materials and more viable processes for SAF production. The main contribution consists of integrating the stages of biomass conversion to levulinic acid and γ-valerolactone, followed by ring opening, decarboxylation, oligomerization, hydrogenation, and purification, using a conceptual simulation in Aspen Plus V14. The results show a C_8–C_{16} hydrocarbon fraction with a density of 831.48 kg/m³ at 15 °C, within the range reported for Jet A-1. Sensitivity analysis allowed for the identification of favorable operating conditions for the four separation columns. The calculated net calorific value was 38.43 MJ/kg, below the reference value of 42.8 MJ/kg; therefore, purification and the composition of the final stream were identified as areas for improvement. The proposed integration provides a basis for subsequent studies on technical, economic, and environmental optimization.

Keywords: Sustainable aviation fuel (SAF); levulinic acid; lignocellulosic biomass; biorefinery; corn stover.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

1. Introducción

La creciente demanda energética mundial y la dependencia histórica de los combustibles fósiles han intensificado los desafíos ambientales asociados con el incremento de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). Durante décadas, los sistemas energéticos globales se han desarrollado principalmente alrededor del carbón, petróleo y gas natural debido a su disponibilidad y capacidad para satisfacer la demanda energética. Sin embargo, este modelo ha contribuido significativamente al cambio climático y ha impulsado la necesidad de transformar los sistemas de producción, distribución y consumo de energía. En este contexto, la transición energética representa un proceso orientado hacia sistemas basados en fuentes renovables, eficiencia energética y tecnologías bajas en carbono (Child y Breyer, 2017; Pata y Balcilar, 2024).

El reemplazo progresivo de los combustibles fósiles por fuentes renovables constituye una estrategia fundamental para reducir las emisiones y avanzar hacia sistemas energéticos más sostenibles. Esta transición también ha impulsado el desarrollo de combustibles renovables para aquellos sectores donde la electrificación presenta importantes limitaciones, como la aviación (Detsios y col., 2023). En 2015, la Organización de las Naciones Unidas aprobó la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible, integrada por 17 Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS). Estos objetivos establecen un marco internacional para promover un desarrollo compatible con la protección ambiental y la reducción de desigualdades (Naciones Unidas, 2015).

Entre los sectores de difícil descarbonización, el transporte mantiene una elevada dependencia de combustibles derivados del petróleo. Particularmente, la aviación constituye un desafío debido a sus altas demandas energéticas y a las limitaciones de tecnologías alternativas, como la propulsión eléctrica, para vuelos de larga distancia. En este contexto, los combustibles conocidos internacionalmente como Sustainable Aviation Fuels (SAF), cuya traducción es combustible sostenible de aviación (SAF), se han identificado como una de las principales alternativas para disminuir la dependencia de la turbosina convencional de origen fósil (Grimme, 2023).

El desarrollo de combustibles sostenibles de aviación resulta relevante porque permite incorporar carbono renovable en un sector de

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

difícil electrificación. Dependiendo de la materia prima, la tecnología de conversión y el manejo de las emisiones, estas alternativas pueden reducir las emisiones de gases de efecto invernadero durante su ciclo de vida.

Actualmente, las principales rutas tecnológicas para producir combustibles sostenibles de aviación incluyen Ésteres y ácidos grasos hidroprocesados (Hydroprocessed Esters and Fatty Acids, HEFA), Fischer-Tropsch (FT), Alcohol-to-Jet (ATJ) e isoparafinas sintetizadas (Synthesized Iso-Paraffins, SIP). Sin embargo, estas tecnologías presentan desventajas relacionadas con la disponibilidad y sostenibilidad de las materias primas, la complejidad de los procesos de conversión y los costos asociados con las diferentes etapas de transformación (Peters y col., 2023; Ribeiro y Pereira, 2024).

En este contexto, el ácido levulínico ha despertado interés como molécula plataforma para la producción de combustibles debido a que puede obtenerse a partir de biomasa lignocelulósica; además, ésta puede, posteriormente, transformarse mediante diferentes rutas catalíticas hacia hidrocarburos líquidos (Braden y col., 2011; Alonso y col., 2013).

La principal oportunidad identificada consiste en que diversas investigaciones han demostrado individualmente la conversión de ácido levulínico hacia γ-valerolactona (GVL), la transformación de esta última hacia butenos y la posterior oligomerización de olefinas para obtener hidrocarburos dentro del intervalo de interés para combustible de aviación. Sin embargo, la integración de estas etapas dentro de un esquema de proceso único y su evaluación mediante simulación de procesos requiere todavía mayor desarrollo.

Por ello, el objetivo de este trabajo es desarrollar un diseño conceptual integrado para la producción de combustible sostenible de aviación a partir de rastrojo de maíz, utilizando ácido levulínico como molécula plataforma, y evaluar mediante Aspen Plus V14 las principales etapas de reacción, separación y purificación de la ruta.

La contribución del trabajo no consiste en proponer individualmente reacciones que sean completamente nuevas, sino en integrar en un mismo esquema de proceso etapas previamente estudiadas de manera independiente y evaluar su comportamiento global mediante simulación de procesos. Esta integración permite identificar requerimientos de separación, condiciones

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

operativas y oportunidades de optimización que no pueden observarse al estudiar cada etapa de forma aislada.

2. Antecedentes

Actualmente, la producción de combustibles sostenibles de aviación comprende diversas rutas tecnológicas que emplean diferentes materias primas y procesos de conversión para obtener hidrocarburos compatibles con el combustible de aviación convencional. Cada una de estas rutas presenta ventajas y desafíos que han motivado el desarrollo de nuevas alternativas con mayor potencial para el aprovechamiento de recursos renovables.

La ruta de ésteres y ácidos grasos hidroprocesados (Hydroprocessed Esters and Fatty Acids, HEFA) es una de las tecnologías con mayor grado de desarrollo comercial para la producción de combustibles sostenibles de aviación. Esta ruta emplea aceites vegetales, grasas animales y aceites de cocina usados para obtener hidrocarburos parafínicos con propiedades similares a las del combustible de aviación convencional. Su principal ventaja es su madurez tecnológica; sin embargo, su expansión está limitada por la disponibilidad de materias primas lipídicas y por la competencia con otros usos de estos recursos (Pearlson y col., 2013).

Otra alternativa ampliamente estudiada es la ruta Fischer–Tropsch (FT), que convierte biomasa lignocelulósica mediante gasificación para producir gas de síntesis, principalmente monóxido de carbono e hidrógeno. Posteriormente, este gas se transforma catalíticamente en hidrocarburos líquidos. Los productos requieren etapas posteriores de hidrotratamiento e isomerización para obtener combustibles con propiedades similares al queroseno de aviación. La principal ventaja de esta ruta es la diversidad de materias primas que puede utilizar; sin embargo, presenta elevados costos de inversión y una considerable complejidad operativa asociada con la gasificación y el acondicionamiento del gas de síntesis (Ail y Dasappa, 2016).

La ruta Alcohol-to-Jet (ATJ) produce combustibles de aviación a partir de alcoholes, principalmente etanol e isobutanol, mediante etapas de deshidratación, oligomerización e hidrogenación. Aunque permite utilizar materias primas renovables, generalmente depende de una etapa previa de fermentación para obtener los alcoholes y

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

requiere varias etapas de conversión catalítica (Geleynse y col., 2018).

Finalmente, la ruta Synthesized Iso-Paraffins (SIP) utiliza azúcares fermentables para producir farneseno mediante microorganismos modificados genéticamente. El farneseno se hidrogena posteriormente para obtener farnesano, que puede emplearse como componente de mezclas con combustible de aviación convencional. Esta tecnología presenta buenas propiedades de combustión; sin embargo, su capacidad de producción y las condiciones de mezcla limitan su aplicación (Peters y col., 2023).

Frente a estas alternativas, la biomasa lignocelulósica representa una materia prima de interés debido a su disponibilidad y a la posibilidad de utilizar residuos agrícolas. Dentro de sus componentes, la celulosa y la hemicelulosa pueden transformarse en azúcares y posteriormente en moléculas plataforma. Una de ellas es el ácido levulínico, cuya transformación catalítica hacia hidrocarburos ha sido ampliamente estudiada.

Braden y col. (2011) analizaron la producción de combustibles hidrocarbonados a partir de ácido levulínico y mostraron la posibilidad de utilizar esta molécula como intermediario para la producción de combustibles líquidos. Posteriormente, Bond y col. (2014) estudiaron esquemas integrados de conversión catalítica de biomasa para producir alcanos en el intervalo de combustible de aviación.

Una de las rutas de mayor interés consiste en convertir el ácido levulínico a GVL mediante hidrogenación, transformar posteriormente la GVL mediante apertura del anillo y descarboxilación para generar butenos, y finalmente oligomerizar las olefinas para aumentar su número de átomos de carbono. Esta estrategia permite pasar de una molécula oxigenada derivada de biomasa hacia hidrocarburos con una distribución de tamaños más cercana a la requerida para combustibles de aviación.

La GVL es considerada una molécula plataforma relevante debido a su estabilidad y a la diversidad de rutas químicas que pueden desarrollarse a partir de ella (Alonso y col., 2013). Bond y col. (2016) estudiaron mediante un análisis microcinético los mecanismos asociados con la apertura del anillo y la descarboxilación de la GVL sobre sílice-alúmina.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

La oligomerización constituye una etapa adicional necesaria para incrementar la longitud de las cadenas carbonadas. Alonso y col. (2010) estudiaron la producción de hidrocarburos líquidos mediante la oligomerización de olefinas derivadas de biomasa. Estos antecedentes respaldan la viabilidad individual de las etapas consideradas en la ruta propuesta.

En consecuencia, la oportunidad de investigación identificada en este trabajo se encuentra principalmente en la integración de estas etapas dentro de una configuración de proceso única y en la evaluación conjunta de sus operaciones de reacción, separación y purificación, más que en la novedad individual de cada reacción.

3. Metodología

3.1. Caso de estudio.

El caso de estudio considera una biorrefinería de biomasa lignocelulósica utilizando rastrojo de maíz como materia prima. La ruta aprovecha principalmente las fracciones de celulosa y hemicelulosa para obtener azúcares y transformarlos posteriormente en ácido levulínico, precursor de la GVL.

La composición del rastrojo de maíz puede variar considerablemente dependiendo de la variedad, condiciones de cultivo, región y método de caracterización. Como referencia, Yin y col. (2023) reportaron para rastrojo de maíz una composición de aproximadamente 45.2 % de celulosa, 18.3 % de hemicelulosa y 23.0 % de lignina en base seca. Por ello, la humedad debe reportarse de manera independiente de la composición en base seca.

En el presente diseño conceptual, la alimentación y las condiciones de operación se establecieron de acuerdo con el diseño global de la biorrefinería. La composición utilizada en la simulación debe considerarse como una base de cálculo del modelo y no como una composición universal del rastrojo de maíz.

3.2. Etapas generales del proceso.

La metodología general del proyecto se presenta en la Figura 1. El desarrollo inició con una revisión bibliográfica de las etapas de conversión involucradas en la ruta. Posteriormente, se establecieron las condiciones iniciales de alimentación y operación; se construyó el diagrama de proceso en Aspen Plus V14 y se realizaron análisis de sensibilidad para las principales

unidades de separación. La ruta general comprende las siguientes etapas:

1. acondicionamiento de la biomasa;
2. conversión de la fracción celulósica hacia ácido levulínico;
3. purificación del ácido levulínico;
4. conversión del ácido levulínico a GVL;
5. apertura del anillo y descarboxilación de la GVL;
6. separación de butenos;
7. oligomerización de butenos;
8. hidrogenación de las olefinas superiores;
9. separación y purificación de los hidrocarburos C_8–C_{16}.



Figura 1. Metodología del proyecto.

3.2.1. Obtención del ácido levulínico

La producción de ácido levulínico constituye la primera etapa de transformación química de la biomasa. Su finalidad es convertir la fracción celulósica de la biomasa lignocelulósica en una molécula plataforma que posteriormente pueda transformarse en GVL.

La biomasa previamente acondicionada se alimenta a un reactor de hidrólisis ácida,

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

donde entra en contacto con una solución catalítica de ácido mineral. Durante la operación ocurren consecutivamente la hidrólisis de la celulosa, la deshidratación de los azúcares formados y la rehidratación del 5-hidroximetilfurfural (HMF), dando lugar a ácido levulínico y ácido fórmico como coproductos (Rackemann y Doherty, 2011).

Las reacciones globales pueden representarse de manera simplificada mediante:

Hidrólisis de la celulosa:

$$C_6H_{10}O_5 + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_6 \qquad \text{Ec. 1}$$

Deshidratación de glucosa:

$$C_6H_{12}O_6 \rightarrow C_6H_6O_3 + 3H_2O \qquad \text{Ec. 2}$$

Rehidratación de HMF:

$$C_6H_6O_3 + 2H_2O \rightarrow C_5H_8O_3 + CH_2O_2$$

Ec.3

Una vez finalizada la reacción, la corriente de salida contiene principalmente ácido levulínico, agua, ácido fórmico y subproductos de reacción, como huminas. Posteriormente, el ácido levulínico debe recuperarse mediante operaciones de separación y purificación antes de alimentar la etapa de conversión a GVL.

Un aspecto relevante de esta etapa corresponde al comportamiento del sistema agua–ácido fórmico. Este sistema presenta una elevada no idealidad y forma un azeótropo de ebullición máxima. Por esta razón, una destilación convencional no permite obtener simultáneamente agua y ácido fórmico con purezas elevadas (Trejbal y col., 2016).

En el presente diseño conceptual, el objetivo principal de la separación es recuperar el ácido levulínico para enviarlo a la etapa de conversión posterior. Por ello, la existencia del azeótropo agua–ácido fórmico no implica necesariamente que la recuperación del ácido levulínico no sea posible.

Si el objetivo del proceso fuera obtener corrientes de agua y ácido fórmico de alta pureza, sería necesario incorporar una estrategia específica de separación, como destilación extractiva, destilación azeotrópica o destilación por cambio de presión. Estudios recientes han mostrado que la destilación extractiva utilizando solventes adecuados puede ser una alternativa para superar la limitación termodinámica del sistema agua–ácido fórmico.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

3.2.2. Conversión de ácido levulínico a GVL.

La conversión de ácido levulínico a GVL se lleva a cabo mediante hidrogenación catalítica en presencia de hidrógeno molecular y un catalizador adecuado. Huerta-Rosas y col. (2025) estudiaron esta transformación mediante un proceso intensificado basado en destilación reactiva, en el que la reacción y la separación del producto se integran en una misma unidad de operación.

En términos simplificados, el ácido levulínico reacciona con hidrógeno para formar GVL y agua:

$$C_5H_8O_3 + H_2 \rightarrow C_5H_8O_2 + H_2O \qquad \text{Ec.4}$$

La transformación puede describirse mediante dos etapas consecutivas. Primero, el grupo carbonilo del ácido levulínico se hidrogena para formar ácido GVL. Posteriormente, este intermediario experimenta una lactonización intramolecular con pérdida de agua para formar GVL.

El proceso consiste en alimentar ácido levulínico e hidrógeno hacia un reactor catalítico bajo condiciones controladas de operación. Posteriormente, la corriente de productos se somete a una etapa de separación para recuperar la GVL y retirar componentes no reaccionados. La corriente rica en GVL obtenida en esta etapa se envía posteriormente a las etapas de transformación catalítica para la generación de hidrocarburos de mayor longitud de cadena.

3.2.3. Apertura del anillo y descarboxilación

La apertura del anillo y la descarboxilación constituyen una de las etapas fundamentales para transformar GVL en olefinas ligeras. Estas olefinas pueden utilizarse posteriormente como materia prima para la oligomerización.

De acuerdo con Bond y col. (2016), la transformación puede llevarse a cabo sobre catalizadores sólidos ácidos, particularmente sílice-alúmina amorfa. El proceso inicia con la adsorción de la GVL sobre los sitios ácidos del catalizador. La protonación del grupo carbonilo incrementa la susceptibilidad del enlace C–O del anillo lactónico, favoreciendo su ruptura y generando diferentes especies de ácido pentenoico.

La apertura del anillo puede producir diferentes isómeros, cuya distribución depende de las condiciones de operación y de las propiedades superficiales del catalizador. Posteriormente, las especies de ácido pentenoico pueden experimentar

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

descarboxilación, eliminando dióxido de carbono y generando butenos.

La reacción global simplificada puede representarse como:

$$C_5H_8O_2 \rightarrow C_4H_8 + CO_2 \qquad \text{Ec. 5}$$

Los principales productos considerados son 1-buteno, trans-2-buteno y cis-2-buteno.

Bond y col. (2016) demostraron mediante análisis microcinético que tanto la apertura del anillo como la descarboxilación dependen de las interacciones entre los intermediarios y los sitios ácidos del catalizador. Por ello, la temperatura y las propiedades del catalizador pueden modificar significativamente la distribución de productos.

La obtención de butenos constituye el objetivo principal de esta etapa, debido a que estas olefinas C_4 sirven como materia prima para la reacción de oligomerización.

3.2.4. Oligomerización

La corriente obtenida después de la descarboxilación catalítica contiene principalmente olefinas ligeras, entre las que destacan los butenos. Estas olefinas requieren una etapa posterior de oligomerización para incrementar su longitud de cadena y obtener hidrocarburos dentro del intervalo de interés para combustibles de aviación.

La oligomerización permite formar nuevos enlaces carbono–carbono y generar olefinas superiores. En esta etapa se considera un reactor catalítico de lecho fijo con un catalizador sólido ácido, de acuerdo con los antecedentes reportados en la literatura.

Las reacciones simplificadas consideradas son:

Dimerización de butenos:

$$2\,C_4H_8 \rightarrow C_8H_{16} \qquad \text{Ec. 6}$$

Trimerización de butenos:

$$3\,C_4H_8 \rightarrow C_{12}H_{24} \qquad \text{Ec. 7}$$

Tetramerización de butenos:

$$4\,C_4H_8 \rightarrow C_{16}H_{32} \qquad \text{Ec. 8}$$

Los productos corresponden a olefinas superiores que posteriormente ingresan a una etapa de hidrogenación, donde los enlaces dobles carbono–carbono son saturados mediante la incorporación de hidrógeno.

La distribución entre C_8, C_{12} y C_{16} constituye una variable importante debido a que modifica directamente las propiedades físicas y energéticas del combustible final.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

3.2.5. Hidrogenación

Las olefinas superiores obtenidas durante la oligomerización presentan enlaces dobles carbono–carbono. Estas insaturaciones pueden afectar la estabilidad frente a la oxidación y el almacenamiento. Por ello, se considera una etapa posterior de hidrogenación catalítica para saturar las olefinas y obtener hidrocarburos parafínicos más estables.

La hidrogenación de olefinas se realiza comúnmente en reactores catalíticos de lecho fijo, donde un catalizador metálico proporciona los sitios activos necesarios para la activación del hidrógeno y de los enlaces dobles carbono–carbono.

El mecanismo general consiste en la adsorción y disociación del hidrógeno sobre la superficie catalítica, seguida de la interacción de la olefina con los sitios metálicos y la posterior adición de hidrógeno al enlace doble.

Las reacciones correspondientes son:

Hidrogenación de octeno:

$$C_8H_{16} + H_2 \rightarrow C_8H_{18} \qquad \text{Ec. 9}$$

Hidrogenación de dodeceno:

$$C_{12}H_{24} + H_2 \rightarrow C_{12}H_{26} \qquad \text{Ec. 10}$$

Hidrogenación de hexadeceno:

$$C_{16}H_{32} + H_2 \rightarrow C_{16}H_{34} \qquad \text{Ec. 11}$$

Los hidrocarburos saturados obtenidos presentan mayor estabilidad química y constituyen la alimentación de la etapa final de separación y purificación.

3.2.6. Purificación y especificaciones del combustible sostenible de aviación obtenido

Después de la hidrogenación, la corriente contiene una mezcla de hidrocarburos saturados con diferentes longitudes de cadena. Por ello, se realiza una etapa de purificación mediante destilación fraccionada para separar la fracción correspondiente al intervalo de interés para combustible de aviación.

La operación permite obtener una corriente enriquecida en parafinas dentro del intervalo C_8-C_{16}. El objetivo es obtener una corriente con propiedades físicas y energéticas cercanas a las del combustible de aviación convencional.

La densidad, distribución de número de carbonos y poder calorífico constituyen propiedades relevantes para evaluar preliminarmente la calidad de la corriente

obtenida. Para Jet A-1 se reporta un intervalo de densidad aproximadamente entre 775 y 840 kg/m³, mientras que el poder calorífico neto se encuentra alrededor de 42.8 MJ/kg (Blakey y col., 2010).

3.3. Diseño y simulación del proceso en Aspen Plus

El diagrama general del proceso desarrollado en Aspen Plus V14 se presenta en la Figura 2.

La ruta integra la conversión de la biomasa hacia ácido levulínico, la conversión a GVL, la apertura del anillo y descarboxilación para producir butenos, la oligomerización para formar olefinas C_8–C_{16}, la hidrogenación para obtener parafinas y las operaciones de separación y purificación.

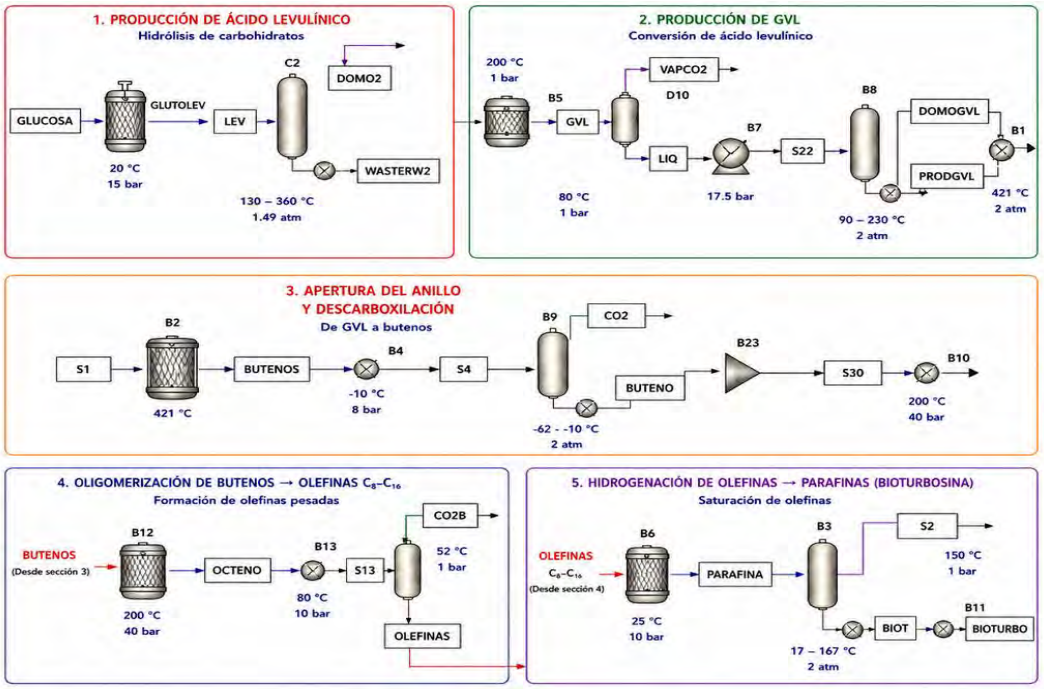


Figura 2. Proceso general de la producción de SAF en Aspen Plus.

La simulación fue desarrollada con base en bloques de reacción y separación. Se empleó Aspen Plus V14 ya que es el software líder en simulación de procesos y presenta mejoras para responder a demandas actuales de los bioprocesos, a diferencia de versiones anteriores como el V10 o V11 que estaban fuertemente orientadas a la industria petroquímica convencional. Para las etapas reactivas, la conversión se establece directamente por lo que se emplea el módulo RStoic en Aspen Plus. Mientras que los

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

procesos de separación se empleó un diseño de métodos cortos con el módulo DSTWU, mismas columnas que posteriormente se diseñaron con el modelo riguroso RADFRAC. Se consideró el modelo termodinámico NRTL-HOC, el cual es útil para predecir el equilibrio de mezclas de compuestos polares y la dimerización en fase vapor de mezclas que contienen ácidos carboxílicos

4. Resultados y discusión

La destilación constituye una de las operaciones de separación más utilizadas en la industria química. Sin embargo, puede presentar un consumo energético elevado, por lo que el diseño de las columnas requiere evaluar simultáneamente el desempeño de separación y el requerimiento energético.

4.1 Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad permite cuantificar la fluctuación de una variable de respuesta ante cambios en una variable de operación. En este estudio se utilizó para evaluar el efecto de variables como el número de etapas, la relación de reflujo y las condiciones de operación sobre el flujo de destilado y la carga térmica de las columnas.

En una columna de destilación, por ejemplo, un aumento de la relación de reflujo puede favorecer la separación y modificar la composición del producto; sin embargo, también incrementa generalmente el requerimiento energético. Por ello, la selección de una condición de operación no debe realizarse considerando únicamente una variable.

Se realizaron análisis de sensibilidad para las cuatro columnas principales del proceso. Los resultados se presentan en las Figuras 3–6.

4.1.1 Análisis de la columna 1

Para la columna 1, se realizaron 1,332 iteraciones mediante el análisis de sensibilidad en Aspen Plus. Debido al elevado número de escenarios obtenidos, se efectuó un filtrado de los resultados en Excel, seleccionando las condiciones que presentaron el mejor desempeño en las corrientes de producto, particularmente en los flujos de ácido levulínico y ácido fórmico. A partir de los casos seleccionados, se observa que el número de etapas aumenta progresivamente de aproximadamente 40 a 55, mientras que la carga térmica disminuye de alrededor de 116,202 a 116,175 cal/s. Por su parte, la relación de reflujo y el flujo de destilado permanecen prácticamente

constantes, con valores cercanos a 0.26 kmol/h para el flujo de destilado y una relación de reflujo prácticamente estable. Por lo tanto, considerando exclusivamente las tendencias mostradas en la Figura 3, el mejor resultado se encuentra hacia el último escenario evaluado, correspondiente aproximadamente a 55 etapas, debido a que presenta la menor carga térmica, manteniendo prácticamente constantes el flujo de destilado y la relación de reflujo. No obstante, la selección definitiva debe considerar que el incremento del número de etapas implica un mayor costo de inversión, por lo que este escenario debe contrastarse con la recuperación y pureza obtenidas para el ácido levulínico y fórmico.

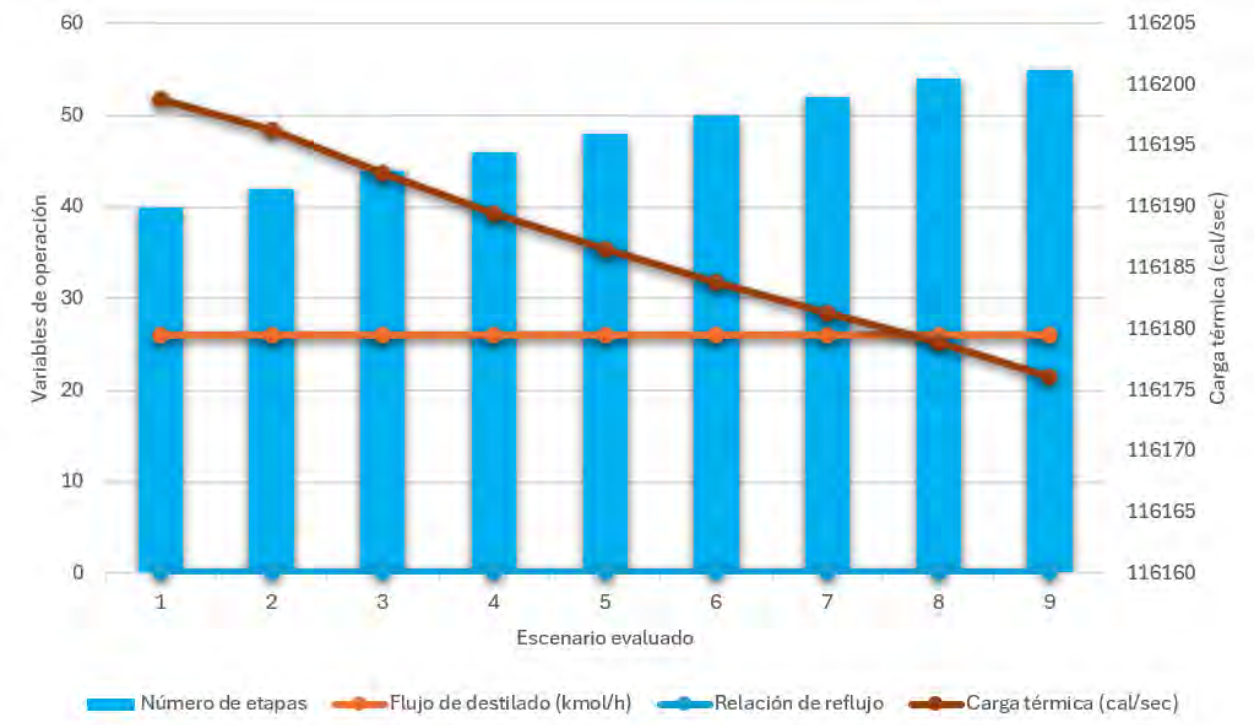


Figura 3. Gráfico combinado de los resultados del análisis de sensibilidad de la columna 1.

4.1.2 Análisis de la columna 2

Para la columna 2, se evaluaron 3465 iteraciones, realizando posteriormente un filtrado en Excel con base en los mejores resultados de recuperación de GVL y la obtención del menor flujo de agua. Después de este primer filtrado, el análisis se estableció para una condición fija de 20 etapas, permitiendo evaluar el comportamiento de las demás variables de operación. La Figura 4 muestra una

disminución progresiva de la relación de reflujo, aproximadamente de 0.062 a 0.055, acompañada de una reducción del flujo de destilado desde aproximadamente 14 hasta 13.5 kmol/h, así como una disminución de la carga térmica de alrededor de 61,500 a 55,000 cal/s. Debido a que el objetivo del filtrado fue priorizar la recuperación de GVL y minimizar el flujo de agua, el mejor resultado de acuerdo con las tendencias operativas de la Figura 4 se ubica en el último escenario, donde se alcanza la menor relación de reflujo, el menor flujo de destilado y la menor carga térmica. Sin embargo, este caso sólo puede considerarse como el óptimo definitivo si conserva los mejores valores de recuperación y pureza de GVL obtenidos durante el filtrado. En términos energéticos, el escenario final resulta atractivo, ya que permite operar la columna con 20 etapas y una menor demanda térmica, lo que potencialmente favorece la reducción del consumo energético del proceso.

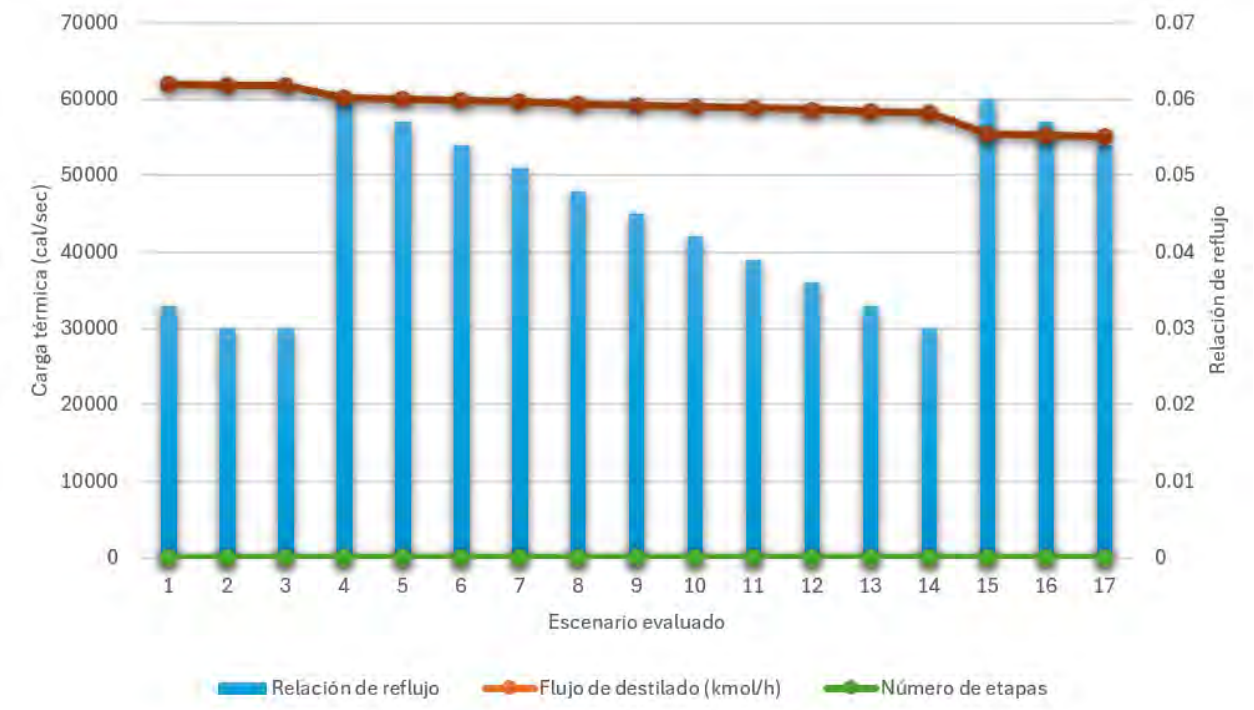


Figura 4. Gráfico combinado de los resultados del análisis de sensibilidad de la columna 2.

4.1.3 Análisis de la columna 3

Para la columna 3, se realizaron 2080 iteraciones en Aspen Plus y, posteriormente, se efectuó un primer filtrado de los resultados

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

para identificar las condiciones que permitieran obtener los mejores flujos molares de buteno y una separación favorable de CO_2. A diferencia de las columnas anteriores, la relación de reflujo presenta una variación relativamente pequeña, manteniéndose aproximadamente entre 0.15 y 0.19, por lo que esta variable presenta una influencia limitada dentro del conjunto de soluciones seleccionadas. El número de etapas, en cambio, varía entre aproximadamente 7 y 10 etapas, mientras que el flujo de destilado se mantiene en un intervalo cercano a 7–8 kmol/h. La carga térmica presenta una variación más pronunciada, con valores aproximados entre 500 y 4,100 cal/s, destacando incrementos importantes en los escenarios 2, 7 y 10. Considerando el comportamiento conjunto de las variables, el mejor resultado de la Figura 5 corresponde al escenario 15, que presenta aproximadamente 10 etapas, un flujo de destilado cercano a 7.5 kmol/h, una relación de reflujo cercana a 0.17 y una carga térmica aproximada de 1,800 cal/s. Este escenario resulta particularmente interesante porque combina un número elevado de etapas con una carga térmica significativamente menor que la observada en los escenarios 2, 7 y 10. No obstante, si el criterio prioritario es exclusivamente minimizar la carga térmica, el escenario 14 presenta una demanda energética aún menor, aunque con sólo 8 etapas. Por ello, el escenario 15 puede considerarse una alternativa equilibrada entre eficiencia de separación y requerimiento energético, siempre que el flujo de buteno y la separación de CO_2 obtenidos durante el filtrado sean satisfactorios.

4.1.4 Análisis de la columna 4.

Para la columna 4, se realizaron 1386 iteraciones, seguidas de un primer filtrado enfocado en identificar las condiciones que proporcionaran los mejores flujos de octano, dodecano y hexadecano, correspondientes a las fracciones de hidrocarburos de interés para la etapa posterior del proceso. En este análisis, el flujo de destilado presenta una variación prácticamente nula, manteniéndose alrededor de 0.5 kmol/h, por lo que esta variable tiene poca influencia dentro de los escenarios seleccionados. En contraste, la relación de reflujo presenta una tendencia general creciente, pasando aproximadamente de 1.0 a 2.0, aunque posteriormente muestra algunas fluctuaciones. Esto puede observarse en la Figura 6.

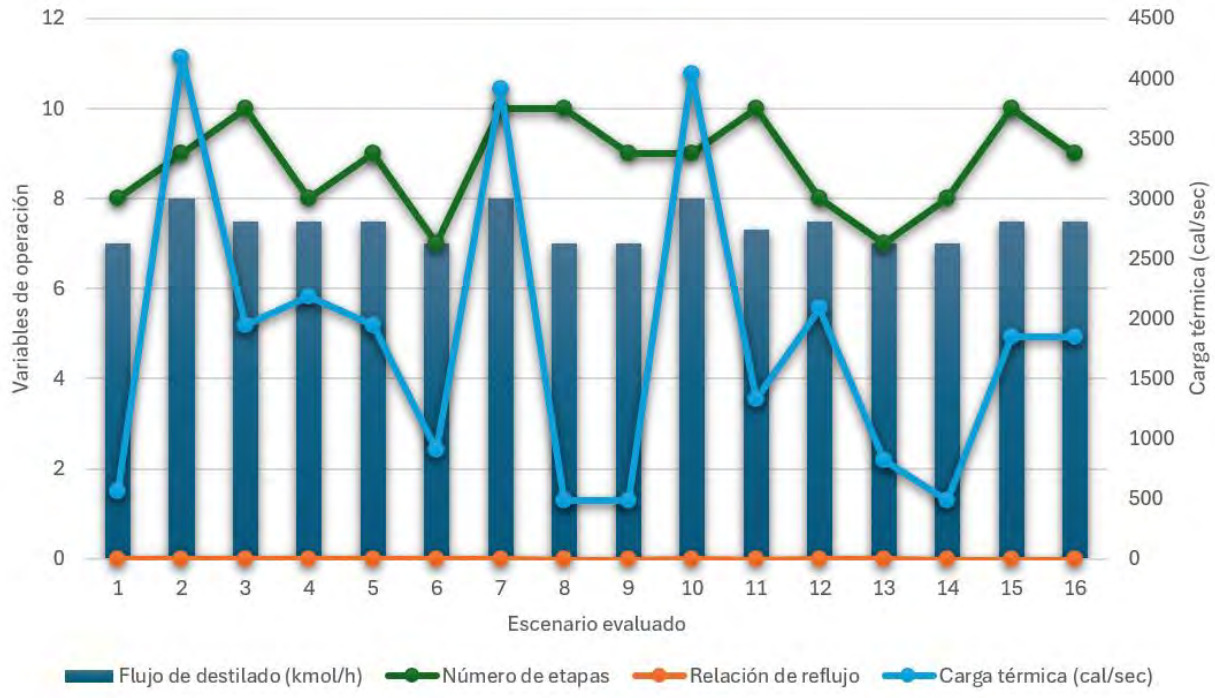


Figura 5. Gráfico combinado de los resultados del análisis de sensibilidad de la columna 3.

El número de etapas varía entre 5 y 7, mientras que la carga térmica presenta una tendencia inicial creciente desde aproximadamente 15,800 hasta 17,500 cal/s, alcanzando posteriormente valores máximos cercanos a 17,700 cal/s. Considerando únicamente las variables de operación y buscando minimizar el consumo energético, el mejor resultado se encuentra aproximadamente en el escenario 1, con alrededor de 5 etapas, una relación de reflujo cercana a 1.0, un flujo de destilado de aproximadamente 0.5 kmol/h y una carga térmica cercana a 15,800 cal/s. Sin embargo, dado que el objetivo principal del filtrado fue maximizar o favorecer los flujos de octano, dodecano y hexadecano, el escenario con menor carga térmica no necesariamente representa el mejor caso global. Por tanto, el escenario óptimo deberá ser aquel que, dentro de los casos con flujos favorables de estos tres productos, presente el menor requerimiento energético. En este sentido, el escenario 1 constituye el mejor caso desde el punto de vista energético, mientras que la selección final deberá corroborarse con los flujos molares de los tres hidrocarburos objetivo.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

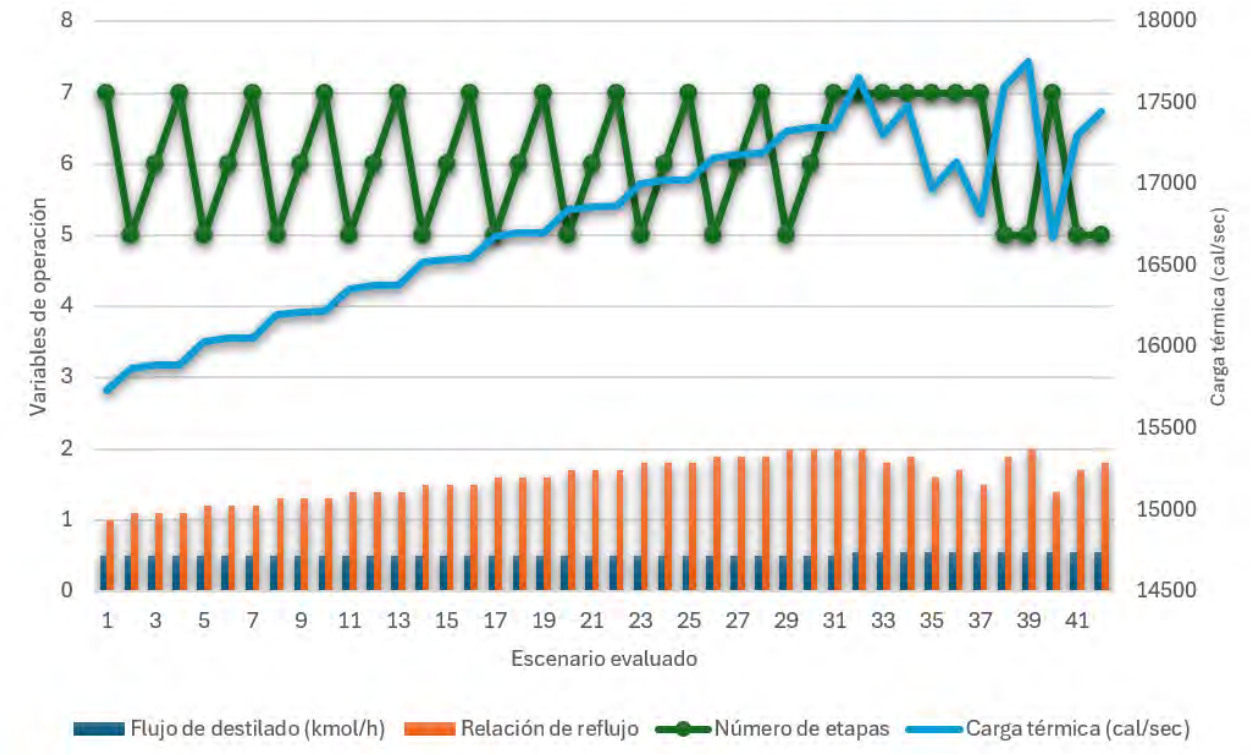


Figura 6. Gráfico combinado de los resultados del análisis de sensibilidad de la columna 4.

4.2 Diseño resultante

En conjunto, los cuatro análisis de sensibilidad permitieron reducir progresivamente un amplio número de simulaciones a condiciones de operación con características más favorables para cada etapa de separación. Finalmente integrando estas condiciones al diseño en general se obtienen las siguientes condiciones óptimas del proceso con las especificaciones para cada equipo como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Variables del diseño resultante.

	Columnas de destilación			
	Número de etapas	**Flujo de destilado (kmol/h)**	**Relación de reflujo**	**Tipo de columna en Aspen Plus**
Columna 1	55	26	0.26	RadFrac
Columna 2	20	13.5	0.055	RadFrac

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Columna 3	10	7.5	0.17	RadFrac
Columna 4	5	0.5	1.0	RadFrac
Equipos de transformación de materia				
	Temperatura (°C)	**Presión (bar)**	**Conversión (%)**	**Tipo de reactor en Aspen Plus**
Reactor 1	200	15.8599	75 %	RStoic
Reactor 2	200	1	99 %	RStoic
Reactor 3	421	1	99 %	RStoic
Reactor 4	200	40	70 %	RStoic
Reactor 5	25	10	99 %	RStoic

4.2 4.3 Comparación de propiedades y rendimiento

Para poder realizar una comparación de la corriente de bioturbosina obtenida al final de la simulación del proceso en Aspen Plus, es necesario compararla con las propiedades y especificaciones reportadas para Jet A-1; para ello se muestran tales variables en la Tabla 2. En términos generales se obtiene una buena aproximación inicial a una fracción de bioturbosina desde el punto de vista de la densidad y del intervalo de número de carbonos. La densidad de 831.48 kg/m³ cumple con el rango de Jet A-1, mientras que la presencia predominante de hidrocarburos C12 y C16, junto con C8, ubica la composición en una región cercana a la de los combustibles de aviación. Respecto al poder calorífico se tiene una aproximación muy cercana, pero la diferencia se debe a la presencia de compuestos oxigenados en la corriente final. Aunque es un porcentaje muy bajo, aproximadamente un 5% en fracción mol, la presencia de estos compuestos reduce significativamente el poder calorífico; por lo que una alternativa para mejorar la corriente final es implementar un segundo equipo de purificación a la corriente de producto.

A partir de las condiciones de operación seleccionadas para cada etapa, se realizó el balance global de masa del proceso con el propósito de cuantificar el rendimiento de SAF respecto a la cantidad de biomasa alimentada.

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

Tabla 2. Análisis comparativo de propiedades fisicoquímicas del producto de interés.

Propiedad	Turbosina Jet A-1 / referencia	Producto obtenido en Aspen Plus
Estado físico a 15 °C	Líquido	Líquido
Temperatura de referencia	15 °C	15 °C
Presión de referencia	—	1 bar
Densidad a 15 °C	775–840 kg/m³	831.480 kg/m³
Densidad	0.775–0.840 g/cm³	0.831 g/cm³
Rango de carbonos	Principalmente C9–C16	C8–C16
Poder calorífico neto	≥42.800 MJ/kg	38.430 MJ/kg
Poder calorífico neto	≈10,230 cal/g	9,184.320 cal/g

El rendimiento global se calculó mediante la relación entre el flujo másico de SAF obtenido y el flujo másico de biomasa alimentada, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$Y_{SAF,humeda}^{'} = \frac{m_{SAF}}{m_{biomasa,humeda}^{'}} \times 1000$$

Ec.12

Se consideró una alimentación de 1,000 kg/h de biomasa húmeda y se obtuvo una corriente de SAF de 130 kg/h; por lo que el rendimiento global es del 13 %. Así, el proceso produciría 130 kg de SAF por cada tonelada de biomasa húmeda alimentada.

5. Conclusiones

Se desarrolló el diseño conceptual de una ruta integrada para la producción de bioturbosina a partir de biomasa lignocelulósica mediante ácido levulínico como molécula plataforma, incorporando las etapas de obtención de ácido levulínico, conversión a GVL, apertura del anillo y descarboxilación, oligomerización, hidrogenación y purificación. La simulación del proceso permitió establecer condiciones de operación para las principales unidades de separación y reacción, obteniéndose una corriente final de hidrocarburos en el intervalo C_8–C_{16}, característico de los combustibles sostenibles de aviación.

Los resultados muestran que la ruta propuesta representa una alternativa técnicamente viable para la valorización de biomasa lignocelulósica y la producción de bioturbosina. La corriente obtenida presentó una densidad y una distribución del número de carbonos compatibles con las especificaciones del combustible Jet A-1, aunque el poder calorífico aún requiere optimización. Asimismo, este trabajo aporta una propuesta de proceso integrado basada en ácido levulínico, una ruta que, si bien ha sido estudiada a nivel de etapas individuales, aún presenta un desarrollo limitado como esquema completo para la producción de combustibles sostenibles de aviación.

En este sentido, los resultados obtenidos constituyen un punto de partida para futuras investigaciones orientadas a la optimización del proceso, su evaluación tecnoeconómica y ambiental, así como al escalamiento de esta tecnología.

Referencias bibliográficas

Ail, S. S., & Dasappa, S. (2016). Biomass to liquid transportation fuel via Fischer–Tropsch synthesis: Technology review and current scenario. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 58*, 267–286. https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.12.143

Alonso, D. M., Bond, J. Q., Serrano-Ruiz, J. C., & Dumesic, J. A. (2010). Production of liquid hydrocarbon transportation fuels by oligomerization of biomass-derived C9 alkenes. *Green Chemistry, 12*(6), 992–999. https://doi.org/10.1039/C001899F

Alonso, D. M., Wettstein, S. G., & Dumesic, J. A. (2013). Gamma-valerolactone, a sustainable platform molecule derived from lignocellulosic biomass. *Green Chemistry, 15*(3), 584–595. https://doi.org/10.1039/C3GC37065H

Blakey, S., Rye, L., & Wilson, C. W. (2010). Aviation gas turbine alternative fuels: A review. *Proceedings of the Combustion Institute, 33*(2), 2863–2885. https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.09.011

Bond, J. Q., Jungong, C. S., & Chatzidimitriou, A. (2016). Microkinetic analysis of ring opening and decarboxylation of γ-valerolactone over silica alumina. *Journal of Catalysis, 344*, 640–656. https://doi.org/10.1016/j.jcat.2016.10.021

Bond, J. Q., Upadhye, A. A., Olcay, H., Tompsett, G. A., Jae, J., Xing, R., Alonso, D. M., Wang, D., Zhang, T., Kumar, R., Foster,

A., Sen, S. M., Maravelias, C. T., Malina, R., Barrett, S. R. H., Lobo, R., Wyman, C. E., Dumesic, J. A., & Huber, G. W. (2014). Production of renewable jet fuel range alkanes and commodity chemicals from integrated catalytic processing of biomass. *Energy & Environmental Science*, *7*(4), 1500–1523. https://doi.org/10.1039/C3EE43846E

Braden, D. J., Henao, C. A., Heltzel, J., Maravelias, C. C., & Dumesic, J. A. (2011). Production of liquid hydrocarbon fuels by catalytic conversion of biomass-derived levulinic acid. *Green Chemistry*, *13*(7), 1755–1765. https://doi.org/10.1039/C1GC15047B

Child, M., & Breyer, C. (2017). Transition and transformation: A review of the concept of change in the progress towards future sustainable energy systems. *Energy Policy*, *107*, 11–26. https://doi.org/10.1016/j.enpol.2017.04.022

Cong, F., Yu, Z., Wang, A., Cong, Y., Zhang, T., & Li, N. (2024). Synthesis of jet fuel range paraffins from cellulose. *Sustainable Energy & Fuels*, *8*(18), 4221–4229. https://doi.org/10.1039/D4SE00712C

Conti, J., Holtberg, P., Diefenderfer, J., LaRose, A., Turnure, J. T., & Westfall, L. (2016). *International Energy Outlook 2016 with projections to 2040*. U.S. Energy Information Administration. https://doi.org/10.2172/1296780

Detsios, N., Theodoraki, S., Maragoudaki, L., Atsonios, K., Grammelis, P., & Orfanoudakis, N. G. (2023). Recent advances on alternative aviation fuels/pathways: A critical review. *Energies*, *16*(4), 1904. https://doi.org/10.3390/en16041904

Díaz-Pérez, M. A., & Serrano-Ruiz, J. C. (2020). Catalytic production of jet fuels from biomass. *Molecules*, *25*(4), 802. https://doi.org/10.3390/molecules25040802

Geleynse, S., Brandt, K., Garcia-Perez, M., Wolcott, M., & Zhang, X. (2018). The Alcohol-to-Jet conversion pathway for drop-in biofuels: Techno-economic evaluation. *ChemSusChem*, *11*(21), 3728–3741. https://doi.org/10.1002/cssc.201801690

Grimme, W. (2023). The introduction of sustainable aviation fuels—A discussion of challenges, options and alternatives. *Aerospace*, *10*(3), 218. https://doi.org/10.3390/aerospace10030218

Huerta-Rosas, B., Coronel-Muñoz, M., Quiroz-Ramírez, J. J., Cáceres-Barrera, C. R., Contreras-Zarazúa, G., Segovia-Hernández, J. G., & Sánchez-Ramírez, E. (2025). Intensified alternative for sustainable gamma-valerolactone production from levulinic acid. *Process Safety and Environmental Protection, 217*, 38–48. https://doi.org/10.1016/j.cherd.2025.03.023

International Civil Aviation Organization. (2017). *Sustainable aviation fuels guide*. ICAO.

Kurniawan, T. A. (2025). Uncovering the potential of biomass from agricultural waste as sustainable biofuel in aviation industry to promote net zero emissions: A critical review. *BioResources, 20*(2). https://doi.org/10.15376/biores.20.2.kurniawan

Li, Y., Chen, L., Zhang, X., Zhang, Q., Wang, T., Qiu, S., Tan, J., Li, K., & Ma, L. (2017). Process and techno-economic analysis of bio-jet fuel-range hydrocarbon production from lignocellulosic biomass via aqueous phase deconstruction and catalytic conversion. *Energy Procedia, 105*, 675–680. https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.374

Naciones Unidas. (2015). *Transformar nuestro mundo: la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible*.

Pata, S. K., & Balcilar, M. (2024). Decarbonizing energy: Evaluating fossil fuel displacement by renewables in OECD countries. *Environmental Science and Pollution Research, 31*(21), 31304–31313. https://doi.org/10.1007/s11356-024-33324-8

Pearlson, M., Wollersheim, C., & Hileman, J. (2013). A techno-economic review of hydroprocessed renewable esters and fatty acids for jet fuel production. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining, 7*(1), 89–96. https://doi.org/10.1002/bbb.1378

Peters, M. A., Alves, C. T., & Onwudili, J. A. (2023). A review of current and emerging production technologies for biomass-derived sustainable aviation fuels. *Energies, 16*(16), 6100. https://doi.org/10.3390/en16166100

Rackemann, D. W., & Doherty, W. O. S. (2011). The conversion of lignocellulosics to levulinic acid. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining, 5*(2), 198–214. https://doi.org/10.1002/bbb.267

Ribeiro, L. S., & Pereira, M. F. R. (2024). Sustainable aviation fuel production through catalytic processing of lignocellulosic

Número Especial "Verano de la Investigación DCNE 2026"
ISSN 2007-672X
Universidad de Guanajuato

biomass residues: A perspective. *Sustainability*, *16*(7), 3038. https://doi.org/10.3390/su16073038

Trejbal, J., et al. (2016). Isobaric and isothermal vapor–liquid equilibria for the binary system of water + formic acid at 99.41 kPa, 388.15 K, and 398.15 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, *61*(10), 3398–3405. https://doi.org/10.1021/acs.jced.6b0013

Yin, W.-Z., Xiao, L.-P., Zou, S.-L., Li, W.-X., Wang, H., & Sun, R.-C. (2023). Valorization of lignin through reductive catalytic fractionation of fermented corn stover residues. *Bioresource Technology*, *373*, 128752. https://doi.org/10.1016/j.biortech.2023.128752

Zhang, X., Lei, H., Zhu, L., Wei, Y., Liu, Y., Yadavalli, G., Yan, D., Wu, J., & Chen, S. (2015). Production of renewable jet fuel range alkanes and aromatics via integrated catalytic processes of intact biomass. *Fuel*, *160*, 375–385. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.08.006