

## Diseño y optimización de un proceso sostenible para la producción de e-fuels.

Design and Optimization of a Sustainable Process to Produce E-Fuels.

Avendaño-Guerrero Jorge Giovanni<sup>1</sup>, Galván-Gallaga José Eduardo<sup>1</sup>, Rojas-Aguascalientes Alfredo<sup>1</sup>, Segovia-Hernández Juan Gabriel<sup>2</sup>, Sánchez-Ramírez Eduardo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>estudiante de la Licenciatura de Ingeniería Química DCNE, Campus Guanajuato. <sup>2</sup>Profesor en el Departamento de Ingeniería Química DCNE, Campus Guanajuato.

[jg.avendañoguerrero@ugto.mx](mailto:jg.avendañoguerrero@ugto.mx)<sup>1</sup>, [je.galvagallaga@ugto.mx](mailto:je.galvagallaga@ugto.mx)<sup>1</sup>, [a.rojasaguascalientes@ugto.mx](mailto:a.rojasaguascalientes@ugto.mx)<sup>1</sup>

### RESUMEN

La transición energética global demanda tecnologías para producir combustibles y químicos renovables que aceleren la descarbonización del medio ambiente. Los e-fuels, sintetizados a partir de H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>, representan una solución prometedora al establecer un ciclo de reutilización de carbono. Esta investigación se centra en el diseño y simulación de procesos integrados para producir e-metanol, e-etanol e hidrocarburos ligeros. Mediante un marco computacional en Aspen Plus y Excel, se integraron las etapas de reacción y purificación en un modelo unificado para evaluar costos operativos, consumo energético y emisiones de CO<sub>2</sub> asociadas. Los resultados demuestran que la viabilidad del proceso es altamente dependiente del producto final: la producción de e-etanol resultó técnica y económicamente viable; la de e-metanol presentó una clara disyuntiva entre costo y productividad; y la de hidrocarburos ligeros fue inviable por desafíos críticos en la purificación, subrayando la importancia de la etapa de separación. Este trabajo establece una base preliminar para el entendimiento de las etapas de reacción y separación. Se enfatiza que, si bien estos resultados son un primer paso, se requiere una investigación más extensa para abordar la complejidad de estos procesos y asegurar la futura implementación de e-refinerías sostenibles.

**Palabras clave:** Reactores; Producción de e-fuels; Hidrógeno Verde; Captura de CO<sub>2</sub>.

### INTRODUCCIÓN

La transición hacia un sistema energético global sostenible representa uno de los desafíos más relevantes de este siglo, siendo la mitigación del cambio climático y la descarbonización objetivos centrales de tratados internacionales como el Acuerdo de París o la Agenda 2030 de la ONU (Segovia-Hernández, 2024). El sector del transporte, con una contribución significativa del 23% a las emisiones globales de CO<sub>2</sub>, requiere urgentemente alternativas sostenibles (Van Kranenburg-Bruinsma, et al., 2020). En este contexto, los e-fuels, o combustibles electro-sintéticos, han emergido como una solución prometedora para enfrentar el cambio climático, especialmente en sectores difíciles de electrificar directamente, como la aviación, el transporte marítimo y los vehículos de carga pesada, debido a sus altos requerimientos de densidad energética y autonomía (Genovese, Corigliano, Piraino, & Fragiocomo, 2025). La producción de estos combustibles se fundamenta en los principios de la economía circular ya que utiliza CO<sub>2</sub> (capturado) e H<sub>2</sub> (obtenido de fuentes renovables o bajas en carbono) como materias primas para crear un producto de alto valor, generando un ciclo de carbono cerrado y siendo compatibles con la infraestructura existente (Figura 1) (Shi, et al., 2024).

El diseño del proceso completo para la obtención de e-fuels no solo implica la producción de energéticos, sino también de una amplia gama de productos para la industria química, consolidando el concepto de una e-refinería. Una e-refinería implica un proceso integrado y flexible que utiliza exclusivamente insumos renovables como el H<sub>2</sub> y el CO<sub>2</sub> capturado para producir un portafolio diversificado de productos de alto valor agregado, desde combustibles hasta precursores químicos (Singh, Li, Cheng, Wang, & Liu, 2022). A pesar de sus beneficios, el principal reto para la viabilidad de los e-fuels es su elevado costo de producción en comparación con las alternativas fósiles. Este costo se deriva de la integración de múltiples y complejas etapas, que van desde la obtención de las materias primas hasta la síntesis y separación de los productos finales (Colelli, Segneri, Bassano, & Vilardi, 2023). Al ser una tecnología emergente, la literatura actual sobre esto muestra no ser amplia y la mayoría de los estudios se enfocan en etapas aisladas del proceso prestando poca atención a la integración tecnológica del núcleo de la e-refinería, es decir, el diseño conjunto de las etapas de reacción y separación (D'Adamo, Gastaldi, Giannini, & N., 2024) (Roberto, Ribeiro, & Durães, 2025) (Tiwari, Patrizio, Leduc, Stratton, & Kraxner, 2025) (Genovese, Corigliano, Piraino, & Fragiocomo, 2025). Para que la producción de e-fuels sea rentable y escalable, es fundamental primeramente establecer configuraciones de proceso eficientes para esta sección central (Tiwari, Patrizio, Leduc, Stratton, & Kraxner, 2025), (Löwgren, Hoffmann, Vijver, Steubing, & Cardellini, 2025). De manera puntual, esta investigación aborda dicha carencia al proponer el diseño y la simulación de un proceso enfocado exclusivamente en las etapas de reacción y separación para la producción de e-metanol, e-etanol e hidrocarburos ligeros a partir de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>. El objetivo es desarrollar un modelo de proceso integrado y funcional que sirva como base técnica para futuras evaluaciones y

optimizaciones.

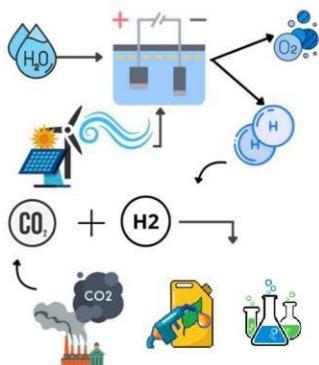


Figura 1. Representación simple de la obtención de los e-fuels.

## ANTECEDENTES

El diseño conlleva la integración completa desde la obtención de las materias primas de manera sostenible, en donde se puede utilizar aminas y líquidos eutécticos profundos para la captura de CO<sub>2</sub>, electrólisis y reformado húmedo para la obtención de H<sub>2</sub>, hasta el diseño de la etapa de reacción y separación de los productos. La viabilidad de este proyecto radica en el correcto diseño y evaluación de cada una de las etapas que conlleva la integración de operaciones de síntesis y purificación de los productos de alto valor añadido.

El portafolio de productos de una e-refinería es basto y se centra en la obtención de productos líquidos o gaseosos sintéticos con una huella de carbono prácticamente neutra (Van Kranenburg-Bruinsma, et al., 2020). En esta diversidad de productos, los que se tomaron como objetivo para este trabajo, el e-metanol, el e-etanol y los hidrocarburos ligeros (C1-C4), son especialmente relevantes por sus múltiples bondades y potencial de aplicación, además que son los compuestos con los que se cuenta más información en la literatura para su producción. El e-metanol destaca por su versatilidad como combustible para transporte marítimo y de camiones y como precursor químico para compuestos como el dimetil éter (DME). Su síntesis es rentable a gran escala, su tecnología de producción es relativamente madura y es compatible con los motores de combustión interna actuales. El e-etanol es otro producto clave para la reducción de emisiones que puede mezclarse con combustibles convencionales y usarse como químico industrial, aunque su proceso de obtención está menos detallado en la literatura. Por su parte, los hidrocarburos ligeros (C1-C4) poseen un gran valor energético y químico. Entre ellos, el e-metano (o e-SNG) se produce mediante la selectiva reacción de Sabatier y puede ser inyectado directamente en la red de gas natural existente. Otros hidrocarburos como el etano, propano y el propeno se generan como coproductos en la síntesis de Fischer-Tropsch (FT), que se utiliza para producir combustibles más pesados como el e-queroseno (Colelli, Segneri, Bassano, & Vilardi, 2023). La separación y purificación de estos gases, especialmente el propeno, que es un monómero clave para la industria del plástico, añade una fuente de ingresos adicional y mejora la economía general del proceso de la e-refinería.

El diseño del proceso para la producción de e-fuels, específicamente en sus etapas de reacción y separación, es crucial para la viabilidad de estas refinerías. La etapa de reacción implica el acondicionamiento de reactivos, la selección de cinéticas, catalizadores y el tipo de reactor (como el reactor tipo pistón, PFR), y la definición de las condiciones de operación óptimas. Por su parte, la etapa de separación y purificación requiere el diseño de secuencias de unidades de separación, como destilación, flash, PSA o separación líquido-líquido, con el objetivo de purificar los productos deseados, recuperar subproductos y reciclar reactivos no convertidos para aumentar la conversión global y reducir pérdidas (Colelli, Segneri, Bassano, & Vilardi, 2023). Finalmente, una vez obtenido el diseño estructural es indispensable determinar la factibilidad del proceso. A partir de la simulación del proceso obtenido, es necesario evaluar su rendimiento a través de indicadores de sostenibilidad claves, que involucren los tres pilares fundamentales: el económico, el ambiental y el social. Este análisis incluye la estimación de los costos operativos para medir la viabilidad económica, el cálculo del consumo energético para determinar la eficiencia de la planta, y la cuantificación de las emisiones de CO<sub>2</sub> asociadas para validar su beneficio ambiental y social (Jahan, Putra, Ayoub, & Abdullah, 2022).

## METODOLOGÍA

Se analizaron tres casos de estudio con base a los productos obtenidos, metanol, etanol e hidrocarburos ligeros y de manera general cada proceso siguió la siguiente metodología (Figura 2):

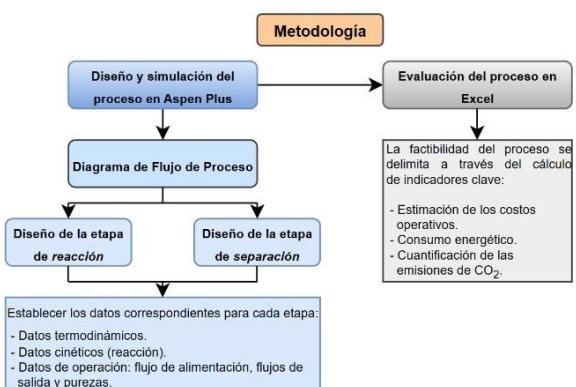


Figura 2. Metodología del diseño y evaluación del proceso.

### 1. Diseño y simulación del proceso en Aspen plus

Haciendo uso del software Aspen Plus, se diseñó la etapa de reacción y de separación para cada uno de los casos de estudio. De manera general en cada caso se utilizaron datos reportados en la literatura para todo el proceso, como los modelos termodinámicos y las condiciones de operación. Para la etapa de reacción se utilizaron reactores estequiométricos debido a la falta de datos cinéticos en la literatura y en cuanto a la etapa de separación se utilizaron separadores de tipo flash y columnas de destilación. Además, para cada etapa se realizaron análisis de sensibilidad para la determinación de las condiciones de operación óptimas.

### 2. Evaluación del proceso en Excel

**- Estimación de costos:** Se estimó el costo de los principales equipos del proceso: el reactor y los separadores. El costo de cada equipo se obtuvo por el método de Guthrie. Para cada una de las columnas se calculó el costo del condensador, el costo del reboiler, el costo de los platos, el costo del recipiente vertical y finalmente el costo total. La estimación del costo total anualizado (TAC) se llevó a cabo empleando la ecuación 1 a partir de los costos de equipos y servicios calculados con el método de Guthrie explicado por Turton (2012). Los costos de equipos se estimaron para cada uno de los módulos del proceso a partir de sus dimensiones, materiales y presiones de operación, con un tiempo de retorno (TR) de 10 años. Los costos de servicios para un año de operación se obtienen a partir de las cargas térmicas requeridas por los equipos para lograr las temperaturas necesarias del proceso, a partir de las cuales se estima la cantidad de agua de enfriamiento o vapor de calentamiento requeridos para suministrar o retirar esa energía según sea el caso.

La metodología del método de Guthrie para los equipos es:

- a) Obtención del costo base (basado en la geometría y dimensiones).

para los recipientes los equipos que diseñamos, la forma de calcular su costo base es aplicando la ec. 1

$$C_b = C_o \left( \frac{L}{L_o} \right)^\alpha \left( \frac{D}{D_o} \right)^\beta \quad (\text{ec. 1})$$

Donde  $C_o$ ,  $L_o$ ,  $D_o$ ,  $\alpha$  y  $\beta$  son parámetros que dependen de las dimensiones y orientación del equipo, que están reportados por Guthrie.

- b) Ajuste del costo base (basado en el tipo de material de los equipos, la presión a la que operan y un factor de modulo desnudo).

El ajuste del costo base se hace gracias a la ecuación 2

$$C_{fob} = C_b \left( \frac{\text{índice de año 1}}{\text{índice del año 1968}} \right)^{F_m} \quad (\text{ec. 2})$$

Donde:

$C_{fob}$ = costo del equipo

$F_m$ = factor dependiente del material del equipo (reportado en tablas en el trabajo de Guthrie)  
Índice de año 1= índice del año al que se desea ajustar el costo

$F_p$ = factor de presión, se calcula:

$$F_p = \frac{(P + 1)D}{2[850 - 0.6(P + 1)]} + 0.00315 \quad (ec. 3)$$

Siendo P y D, presión y diámetro respectivamente. Cálculo del costo del equipo.

Calculamos el costo del módulo desnudo  $C_{md}$  el cual se refiere al costo de equipos sin considerar los equipos auxiliares. Para calcularlo se utiliza la siguiente ecuación.

$$C_{md} = (\text{factor})C_b \quad (ec. 4)$$

Donde:

$C_{md}$ = costo de módulo desnudo

$C_b$ = Costo base

*factor* = Factor de ajuste de costo base en función del tipo de equipo necesario.

c) Costo de módulo desnudo ajustado  $C_{mda}$ , se ajusta mediante la ecuación:

$$C_{mda} = C_{md} + (C_{fob} - C_b) \quad (ec. 5)$$

d) Costo de módulo, se refiere al costo de equipos multiplicados por un factor del 15% que representa el costo de equipos auxiliares.

$$C_{módulo} = 1.15(C_{mda}) \quad (ec. 6)$$

Por último, Los costos de servicios para un año de operación se obtienen a partir de las cargas térmicas requeridas por los equipos para lograr las temperaturas necesarias del proceso, a partir de las cuales se estima la cantidad de agua de enfriamiento o vapor de calentamiento requeridos para suministrar o retirar esa energía según sea el caso. Una vez hecho esto, calculamos el TAC, que es el costo total anualizado.

$$TAC = \frac{\text{Costo de equipos}}{TR} + \text{Costo de servicios} \quad (ec. 7)$$

- **Consumo energético:** El consumo energético del proceso se logró obtener en base a los resultados de la simulación realizada en Aspen. De los resultados obtenidos se logró extraer el consumo energético de las columnas, bombas y del reactor.

Dicho consumo energético de los equipos se comparó con el aporte energético por kg de cada producto (KJ/Kg) (estos datos fueron obtenidos de Editor Engineeringtoolbox, 2025). Estos datos de aporte por Kg pudimos multiplicarlos por el efluente de cada producto, sumarlas y así obtener la energía aportada.

$$\text{Energía de } x = NHV_x * F_x \quad (ec. 8)$$

Donde x se refiere al producto del que se efectúe el cálculo, NHV es la energía por kilogramo de tal producto y F es el flujo de salida de la etapa de separación.

- **Cuantificación de las emisiones de CO<sub>2</sub>:** Para la estimación de la emisión de dióxido de carbono se puede emplear la metodología descrita por Gadalla et al (2005), con la que, a partir de la carga térmica requerida por el proceso ( $Q_{proc}$ ), mediante la ecuación 8 se estima la energía requerida de combustible para dar abasto al proceso ( $Q_{fuel}$ ).

$$Q_{fuel} = \frac{Q_{proc}}{\lambda} \frac{T_{FTB} - T_0}{\frac{T_{FTB}}{T_{sattack}} - \frac{T_0}{T}} \quad (ec. 8)$$

A partir del valor de  $Q_{fuel}$  empleando la ecuación 9 se estima la cantidad de CO<sub>2</sub> producido mediante relaciones másicas entre el combustible empleado y el CO<sub>2</sub> a partir de su contenido % en masa de carbono (C% para el combustible y  $\alpha$  en el caso del CO<sub>2</sub>). Se consideró gas butano para los cálculos debido a su valor de "Net heating value" (NHW=46464 kJ/kg, Editor Engineeringtoolbox. (2023)), el cual representa el calor neto disponible por kg de combustible que es liberado al quemarlo.

$$[CO_2]_{Emiss} = \frac{Q_{fuel} C\%}{NHW} \frac{100}{100} \alpha \quad (ec. 9)$$

Ahora de manera específica, con base en la metodología anterior y algunas consideraciones extras, se consideró lo siguiente para cada caso de estudio.

### Caso 1: Metanol

Para el caso del metanol se presenta el diseño y análisis de un reactor estequiométrico para la producción de metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) a partir de dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) e hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) en fase gas, utilizando un catalizador comercial de  $\text{Cu}/\text{Zn}/\text{Al}_2\text{O}_3$  (Van Dal, É. S., & Bouallou, C. , 2013). Se realizaron simulaciones en los programas Polymath y Aspen Plus, variando temperatura y presión, con el objetivo de determinar condiciones óptimas de operación. La capacidad de producción se tomó como referencia del proyecto "Mexinol", con una meta de 6,130 toneladas métricas diarias de metanol. El diagrama de flujo de proceso junto con la reacción utilizada se presenta en la Figura 3.

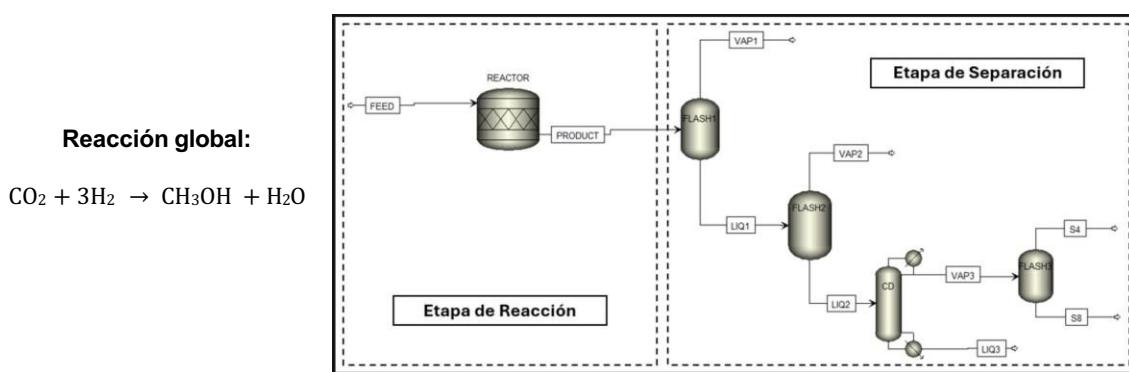


Figura 3. Reacción global y Diagrama de Flujo de Proceso para el metanol.

#### Diseño y simulación del proceso

Se empleó un catalizador comercial  $\text{Cu}/\text{Zn}/\text{Al}_2\text{O}_3$  debido a su alta selectividad hacia metanol y estabilidad operativa en condiciones moderadas. El modelo termodinámico utilizado fue el "NRTL" debido a la presencia de sustancias polares. Se diseñó un reactor estequiométrico para llevar a cabo la reacción. El análisis preliminar se realizó mediante el software Polymath, donde se resolvieron balances molares para evaluar conversiones a diferentes temperaturas y presiones. Después, los datos obtenidos se integraron en Aspen Plus, donde se simularon escenarios operativos para evaluar el comportamiento del sistema bajo distintas condiciones. A través de un análisis de sensibilidad se evaluaron los siguientes rangos de operación:

**Temperatura:** 206 °C y 210 °C. **Presión:** Para 206 °C: 65, 68, 70, 73 y 75 bar. Para 210 °C: 70, 73 y 75 bar.

Dado que, a la salida del reactor, la corriente contiene una mezcla de reactivos no convertidos ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$ ) y productos ( $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3\text{OH}$  y  $\text{H}_2\text{O}$ ), en su mayoría en fase gaseosa, no fue factible realizar una separación directa mediante destilación. Por esta razón, se implementó una etapa inicial de separación utilizando dos separadores tipo flash en serie, con el objetivo de remover la mayor cantidad posible de componentes gaseosos. Las condiciones de operación de estos equipos se definieron con base en parámetros reportados en la literatura. El primer separador flash opera a una temperatura de 35 °C y una presión de 73.4 bar, mientras que el segundo se encuentra a 22 °C y 1.2 bar. Una vez realizada esta etapa, y con la mayoría de los gases eliminados, la corriente líquida se dirige a una columna de destilación para separar metanol del agua. Para el diseño preliminar de esta columna, se empleó el modelo "RadFrac" en Aspen Plus, y los parámetros iniciales se estimaron utilizando métodos cortos. Se estableció como especificación una pureza de metanol del 97% y una recuperación del 99.9%, ajustando la relación de reflujo y la carga térmica. Además, se llevó a cabo un análisis de sensibilidad sobre el número total de etapas y la ubicación de la alimentación, con el fin de determinar las condiciones operativas óptimas que permitieran cumplir con las especificaciones de diseño, así como obtener las dimensiones adecuadas de la columna. Sin embargo, debido a la presencia residual de gases, principalmente  $\text{CO}_2$ , la pureza máxima alcanzable en la columna se limita al 97%. Para superar esta limitación, se incorporó un tercer separador flash posterior a la destilación. En este equipo se efectuó un análisis de sensibilidad, variando la temperatura entre 25 °C y 95 °C, y la presión entre 1 y 10 bar, con el fin de identificar las condiciones óptimas de operación dentro de un rango técnica y económicamente viable.

#### Evaluación del proceso

Se calculó el TAC del proceso y para estimar la energía disponible del proceso, se realizaron algunos balances de energía en cada uno de los equipos donde se estimó el gasto de energía del proceso que incluye la carga térmica del reactor, de los tres flashes, del condensador y reboiler de la columna de destilación. También se calculó la producción de energía posible de nuestro producto principal, el metanol, usando el dato el dato de valor calorífico neto (NHV) reportado por Editor Engineeringtoolbox (2025) y el flujo máscico de metanol que sale

al final del proceso. Se realiza una diferencia de ambos casos para obtener el balance de energía. Finalmente, se empleó la metodología descrita por Gadalla et al (2005) para la estimación de la emisión de dióxido de carbono, así que para el análisis se consideró aquellos equipos que ocuparan calentamiento por medio de la quema de combustible, que incluyen uno de los flashes y el reboiler de la columna de destilación. Se tomaron los valores de la carga térmica de estos equipos desde la simulación en Aspen Plus para estimar la cantidad de CO<sub>2</sub> producido en toneladas por año.

#### Resultados:

Con base en el análisis de sensibilidad realizado en la etapa de reacción, se encontró que los puntos óptimos de las variables evaluadas (Tabla ). Los mejores puntos se seleccionaron aquellos que obtuvieran la mayor conversión de dióxido de carbono y se produjera la mayor cantidad de metanol. Para la columna de destilación, se planteó escoger los mejores puntos usando el costo total del proceso que involucra el costo de la columna, del condensador, del reboiler, de los platos y los servicios, para ello se eligió la columna de más bajo costo para cada uno de los casos (Tabla ).

*Tabla 1. Puntos óptimos para la producción de metanol.*

T(°C)	P(bar)	X1	X2	Metanol (kg/h)
206	65	0.3485647	0.1011388	16051.5259
206	68	0.3570529	0.101212	16442.4104
206	70	0.3625309	0.1012579	16694.6742
206	73	0.3704918	0.1013226	17061.2764
206	75	0.3756364	0.1013633	17298.1871
210	70	0.3510201	0.1118265	16164.5979
210	73	0.358926	0.1118768	16528.6673
210	75	0.3640391	0.1119083	16764.1274

*Tabla 2. Puntos óptimos para la etapa de separación del metanol.*

Etapas	Etapa Alimentación	Carga Térmica (kW)	Diámetro (m)	Altura (m)	Costos Columna (\$/año)
15	10	17763.3	2.11	9.144	919,882.00
15	10	18024.9	2.13	9.144	930,292.59
15	10	18349.1	2.18	9.144	952,057.74
15	10	18680.6	2.09	9.144	917,138.40
15	10	18579.8	2.18	9.144	953,094.46
15	10	17965.1	2.12	9.144	925,828.31
15	10	18200.5	2.14	9.144	935,261.65
15	10	18351.8	2.15	9.144	941,360.84

Por otro lado, para los costos (Tabla ), se encontró que el caso de TAC y económico más bajo corresponde a una temperatura de 206°C y 65 bar con valor de \$1,705,159.37, sin embargo, este diseño es el de menor flujo de metanol con 15030.2554 kg/h producido por lo que en términos de producción es de las opciones menos viables. También se encontró un diseño en el que se obtiene el segundo flujo más grande de 16001.1233 kg/h, pero tiene un costo más elevado (\$1,750,753.30) que el anterior, es conveniente analizar si la diferencia monetaria de aproximadamente \$45,000 es inferior a la ganancia obtenida si se vende esa cantidad extra producida del segundo diseño.

En cuanto a la energía, la energía disponible para el metanol es de 19,900 kJ/kg (Fuels - Higher and Lower Calorific Values. The Engineering Toolbox. (n.d.)), multiplicándolo por el flujo final de metanol del proceso, obteniendo el valor de 94,310.94454 kW que comparando con la energía que se consume a lo largo del proceso de producción considerando los equipos principales (65,021.93499kW) tenemos una diferencia de 29,289.00956 kW, que es de las diferencias más altas de todos los casos, por lo que el caso 4 tiene un punto a favor en este aspecto.

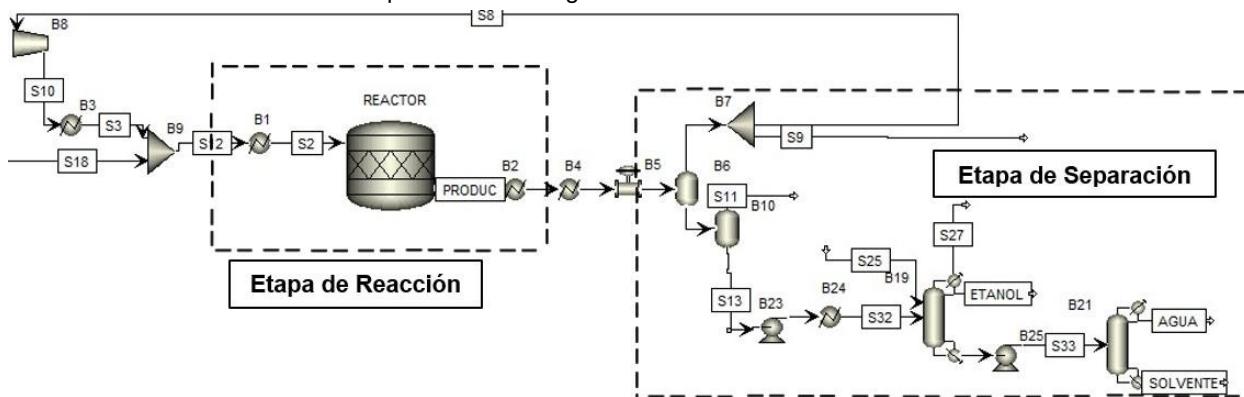
Para la cantidad de CO<sub>2</sub> producido, se encontró que el caso más baja emisión de CO<sub>2</sub> corresponde al caso 1 con 43,477.41 ton/año, sin embargo, se presenta el mismo caso anterior porque este diseño es el de menor flujo de metanol. Entonces, también se encontró un diseño (Caso 4) en el que se obtiene el segundo flujo más grande que produce 45,724.70 ton/año de CO<sub>2</sub>. La cantidad de CO<sub>2</sub> utilizada como reactivo es de 189,750 toneladas de CO<sub>2</sub>/año por lo que se obtiene un porcentaje de aprovechamiento del CO<sub>2</sub> capturado del 77.08% para el caso 1 y 75.90% para el caso 2, convirtiendo ambos diseños en una buena alternativa.

Tabla 3. Costos del proceso para el metanol.

Caso	Costos Reactor (\$/año)	Costos Flash1 (\$/año)	Costos Flash2 (\$/año)	Costos Columna (\$/año)	Costos Flash3 (\$/año)	Costo total (\$/año)
1	655,431.19	99,161.70	24,732.51	919,882.00	5,951.97	1,705,159.37
2	672,385.58	99,921.68	25,072.52	930,292.59	6,118.88	1,733,791.24
3	683,701.77	100,408.61	25,290.90	952,057.74	6,110.38	1,767,569.41
4	700,698.45	101,111.35	25,606.85	917,138.40	6,198.24	1,750,753.30
5	712,045.83	101,561.64	25,809.52	953,094.46	6,487.96	1,798,999.42
6	679,810.94	99,571.53	25,010.18	925,828.31	6,237.45	1,736,458.41
7	696,804.26	100,275.00	25,326.08	935,261.65	6,127.36	1,763,794.35
8	708,150.04	100,726.89	25,529.54	941,360.84	5,280.28	1,781,047.60

### Caso 2: Etanol

En este caso de estudio se diseñó y simuló en Aspen Plus un proceso para la producción de etanol a partir de hidrógeno (H<sub>2</sub>) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), con el objetivo de cubrir la demanda del sector salud en México, equivalente a 9 ton/h. El proceso considera como etapa principal un reactor tubular empacado de lecho fijo, operando con un catalizador específico que permite una conversión del 44 % respecto al H<sub>2</sub>. Las reacciones involucradas son reversibles y conducen a la formación de etanol a partir de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> bajo condiciones controladas de temperatura y presión. Debido a la falta de datos cinéticos, el reactor se modeló como un reactor estequiométrico, y se llevó a cabo un análisis de sensibilidad para optimizar variables importantes, tales como la relación de alimentación CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>, la concentración de N<sub>2</sub> en el flujo de CO<sub>2</sub>, y la recirculación de corrientes de gases no convertidos. Posteriormente, se diseñó un sistema de separación compuesto por una serie de tanques flash y una columna de destilación extractiva, ajustando parámetros para obtener etanol con una pureza de 99 % mientras se minimiza el consumo energético. El diseño final alcanzó una producción de 8.47 ton/h, equivalente al 94 % de la demanda, siendo las principales pérdidas atribuibles a la conversión limitada y a problemas con la separación debido a la presencia de gases remanentes. El diagrama de flujo de proceso junto con las reacciones utilizadas se presenta en la Figura 4.



### Diseño y simulación del proceso

Se empleó un catalizador comercial k/Cu-Fe-Zn debido a su alta selectividad hacia etanol y estabilidad operativa en condiciones moderadas (He, Y., Liu, S., Fu, W., Chen, J., Zhai, Y., Bi, X., Ren, J., Sun, R., Tang, Z., Mebrahtu, C., & Zeng, F., 2023). El modelo termodinámico utilizado fue el NRTL debido a la presencia de sustancias polares. Se diseñó un reactor estequiométrico para llevar a cabo la reacción. El sistema de reacción opera a una temperatura 250 °C y una presión de 50 bar. Debido a una baja conversión por un solo paso se integró un sistema de recirculación para devolver los gases sin reaccionar e incrementar la conversión [10]. Una vez montado el sistema en aspen plus, se realizó un análisis de sensibilidad con las principales variables para poder definir el mejor escenario. Para el análisis de sensibilidad se fijó el flujo de alimentación de  $CO_2/N_2$  de 802 kmol/h. Las principales variables analizadas fueron: relación de alimentación H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>, conversión, concentración de N<sub>2</sub>, razón de recirculación. Las variables se variaron con base a los puntos de la Tabla .

Para el proceso de separación empleado se utilizó una secuencia de dos tanques flash, con el fin de remover los gases que han quedado sin reaccionar y que serán recirculados al reactor, seguido de un sistema de destilación extractiva donde se ha utilizado glicerol como solvente extractante. Debido a la presencia del azeótropo en la mezcla etanol-agua, se ha recurrido al proceso de destilación extractiva para lograr obtener el etanol a una pureza del 99%. Posteriormente se realizó un proceso de optimización en el proceso de destilación extractiva donde se analizaron variables como la relación de reflujo, número de etapas, etapas de alimentación, y flujo de solvente, para encontrar la configuración que permita la mayor recuperación de etanol con una pureza del 99% y tenga el menor consumo energético.

Tabla 4. Valores evaluados para cada variable.

Composición CO <sub>2</sub>	Relación H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub>	Conversión	Razón de recirculación
0.95	1.1	14%	0.5
0.97	1.3	22%	0.6
0.99	1.5	32%	0.7
	1.6	44%	0.8
	1.8		0.9
	2		
	2.5		

### Evaluación del proceso

Para la estimación económica de los equipos principales como se mencionó en la metodología, se aplicó el método de Guthrie, el cual permite calcular el costo de capital instalado de equipos de proceso a partir de sus dimensiones, materiales de construcción y factores de corrección, finalizando con el cálculo del TAC. Por otro lado para poder realizar la estimación de la emisión de dióxido de carbono, en este caso no se tomó la metodología descrita por Gadalla, primeramente se calculó la energía necesaria para llevar a cabo el proceso de producción con ayuda de la simulación realizada en Aspen Plus obteniendo como resultado 24815.8051 KW, una vez obtenido el dato se procedió a investigar la cantidad de CO<sub>2</sub> que se genera por kWh utilizando el gas natural como combustible, encontrando el valor aproximado de 0.404 kg CO<sub>2</sub> por kWh eléctrico generado (Comisión Federal de Electricidad (CFE). (2016)).

Finalmente, Se determinó la cantidad de energía que se puede obtener de nuestro producto. Con base en (*Fuels - Higher and Lower Calorific Values*. Engineering Toolbox. (n.d)) cada kilogramo de etanol libera un total de 26,800 kJ/kg de energía. Con ello se calculó la energía del producto al multiplicar este valor por la cantidad de etanol producido.

$$\text{Energía del producto} = \text{Etanol producido} * \text{Energía por cada kg de producto}$$

### Resultados:

Con base en el análisis de sensibilidad realizado en la etapa de reacción, la Tabla muestra los puntos óptimos de las variables evaluadas. En cuanto a la composición de CO<sub>2</sub> se encontró que no representaba un impacto significativo, por lo que se optó por considerar una pureza de 0.99 respecto al CO<sub>2</sub> y 0.01 de N<sub>2</sub>, esto se debió

a que en la práctica una de las tecnologías más maduras y utilizadas en la captura de CO<sub>2</sub> permite alcanzar estas composiciones. Se seleccionó la menor relación de H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> que permitiera alcanzar nuestro objetivo de producción, siendo esta de 1.8. Esto debido a que se consideró un escenario realista, en el cual no se dispone de una cantidad de H<sub>2</sub> elevada. Tanto la conversión y razón de recirculación seleccionadas correspondieron a aquellas donde se logró la mayor producción de etanol, permitiendo acercarnos a la producción objetivo. Estos valores fueron 44% y 0.9 respectivamente. En cuanto al proceso de separación después de realizar el análisis de sensibilidad la 6 y Tabla 7 muestran los mejores diseños para ambas columnas. El diseño de las columnas se seleccionó al considerar el diseño con la menor carga térmica. Para el caso de la columna uno el requerimiento energético fue de 13141.3, mientras que para el caso dos fue de 13141.3 kW.

*Tabla 5. Puntos óptimos de las variables evaluadas para el etanol.*

Composición CO <sub>2</sub>	Relación H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub>	Conversión	Razón de recirculación
0.99	1.8	44%	0.9

*Tabla 6. Columna uno. Proceso de etanol.*

Columna 1	
Columna extractiva	
No. Etapas	15
Etapa solvente	3
Etapa alimentación	12
relación de reflujo	0.5
Presión	2 bar
Temperatura	65 °C
flujo solvente	500 kmol/h
relación solvente alimentación	0.5

*Tabla 7. Columna dos. Proceso de etanol.*

Columna 2	
Columna convencional	
No. Etapas	10
Etapa solvente	3
Etapa alimentación	5
relación de reflujo	0.5
Presión	2 bar
Temperatura	65 °C

Para la estimación económica de los equipos principales como se mencionó en la metodología, se aplicó el método de Guthrie, obteniendo los siguientes resultados:

*Tabla 8. Costo de capital instalado*

Costo de equipos	
Costo columna 1	\$528,652.27
Costo columna 2	\$607,247.40
Costo del reactor	\$199,919.85
Costo total de equipos	\$1,335,819.53

A partir de estos cálculos, los costos se expresaron como costo anualizado (TAC) para cada componente.

*Tabla 9. Costo anualizado.*

TAC (USD/año)	
Costo columna 1	\$86,011.73
Costo columna 2	\$98,799.15
Costo del reactor	\$32,526.96

**Costo total de equipos** \$217,337.84

Los valores reflejan que las columnas de destilación representan la mayor proporción del costo total, principalmente por el rehervidor y el condensador, que son los elementos más costosos debido a los requerimientos de transferencia de calor y a las dimensiones asociadas a la alta capacidad de producción.

En cuanto a la cantidad de CO<sub>2</sub> producido con las condiciones de operación utilizadas fue de 43,912.06 toneladas de CO<sub>2</sub>/año y la cantidad de CO<sub>2</sub> utilizada como reactivo es de 309,216.69 toneladas de CO<sub>2</sub>/año, obteniendo una diferencia de 265,304.63 toneladas al año por lo que se obtiene un porcentaje de aprovechamiento del CO<sub>2</sub> capturado del 85.79%, convirtiéndolo en una buena alternativa debido a la viabilidad de su proceso y al constante incremento en la demanda de energías menos contaminantes, todo esto sin dejar de lado la rentabilidad.

La energía que se encuentra disponible en el etanol producido es de 26,800 kJ/kg (*Fuels - Higher and Lower Calorific Values. The Engineering Toolbox.* (n.d.)), multiplicándolo por la producción de etanol del proceso (8.47 ton/h), obteniendo así, un valor de 63,054.44 kW que comparando con la energía que se consume a lo largo del proceso de producción (24,815.8 kW) tenemos una diferencia de 38,238.64 kW, por lo que se concluye que el proceso si tiene viabilidad.

### Caso 3: Hidrocarburos Ligeros (C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub>)

Se realizó el diseño y análisis de sensibilidad de un reactor que transforma H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> mediante el uso del catalizador Fe - K/γ - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> en hidrocarburos ligeros que varían desde 1 carbono hasta 4 incluyendo metano, etano, etileno, propano, propileno, butano y buteno que ocurre en fase gaseosa a 20 bar y 300°C (Najari, S., Gróf, G., Saeidi, S., & Gallucci, F., 2019). La producción estimada para los hidrocarburos ligeros tomó como referencia la producción nacional en México de productos que emplean el propileno como materia prima, para ello se ajustó el objetivo de producción de este hidrocarburo ligero para abastecer el 0.25% de demanda de la industria de polipropileno Indelpol instalada en Tamaulipas, que corresponde a una producción de 200 kg/h de propileno, (Bolsa Mexicana de Valores, 2012). Este dato es meramente una referencia de orden de magnitud de producción, puesto que al variar las condiciones de operación y las relaciones de alimentación de CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>, varía el flujo de salida del reactor, sin embargo, se mantuvo siempre cercano al orden de magnitud proyectado. El diagrama de flujo de proceso junto con las reacciones utilizadas se presenta en la Figura 5.

#### Diseño y simulación del proceso

Para el diseño del proceso de producción de hidrocarburos ligeros, se empleó el modelo termodinámico de Peng-Robinson, debido a la naturaleza no polar de los compuestos. El sistema de ocho reacciones se modeló utilizando dos reactores estequiométricos en serie, una configuración adoptada para resolver problemas de simulación que impedían modelar todas las reacciones en una sola unidad. En el primer reactor se simula la reacción inicial, mientras que las siete restantes ocurren en el segundo. Las condiciones de operación para la alimentación y ambos reactores se fijaron en 300 °C y 20 bar, de acuerdo con los valores reportados en la literatura por Najari et al. (2019) y un análisis de sensibilidad. Con esta base, el análisis de sensibilidad se realizó variando el tiempo de residencia desde 0.25 h hasta 24 h y la relación de alimentación H<sub>2</sub>:CO<sub>2</sub> en un rango de 0.5:1 a 2:1, utilizando conversiones variables dependientes del tiempo de residencia según la misma fuente. A partir de estas simulaciones, se extrajeron datos de cargas térmicas y densidades para calcular el volumen teórico de los reactores y se seleccionaron las condiciones óptimas con el objetivo de maximizar la producción de los hidrocarburos de interés y minimizar la cantidad de agua generada como subproducto.

Para la etapa de separación y purificación de los hidrocarburos, se diseñó una secuencia de dos unidades flash consecutivas alimentadas por la corriente de salida de la zona de reacción. El primer flash opera con el objetivo de retirar la mayor cantidad de agua posible, mientras que el segundo flash divide la corriente para que los hidrocarburos más pesados, el CO<sub>2</sub> residual y el agua restante salgan por el fondo. Esta estrategia es importante, ya que permite aislar los azeótropos que forma el CO<sub>2</sub> con el propano y el propeno, simplificando su posterior purificación. El diseño de ambas unidades se realizó mediante análisis de sensibilidad, variando la temperatura (20 a 300°C) y la presión (10 a 30 bar) en el primer flash, y explorando condiciones de -180 a 5°C y de 0.01 a 1 bar en el segundo, aun sabiendo que las temperaturas criogénicas implicarían un alto costo operativo. A pesar de esta configuración, no se alcanzó la pureza deseada en los productos finales. Se determinó que la estrategia más viable para lograrlo es una etapa de absorción con un solvente como la monoetanolamina (MEA); sin embargo, debido a la complejidad de su diseño y a las limitaciones de tiempo del proyecto, esta solución solo se ha dejado planteada como una continuación necesaria para futuros trabajos.

**Sistema de reacciones:**

R1:  $\text{CO}_2 + \text{H}_2 \leftrightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$   
 R2:  $\text{CO} + \text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O}$   
 R3:  $2\text{CO} + 4\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$   
 R4:  $2\text{CO} + 5\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + 2\text{H}_2\text{O}$   
 R5:  $3\text{CO} + 6\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + 3\text{H}_2\text{O}$   
 R6:  $3\text{CO} + 7\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_8 + 3\text{H}_2\text{O}$   
 R7:  $4\text{CO} + 8\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_8 + 4\text{H}_2\text{O}$   
 R8:  $4\text{CO} + 9\text{H}_2 \rightarrow \text{C}_4\text{H}_{10} + 4\text{H}_2\text{O}$

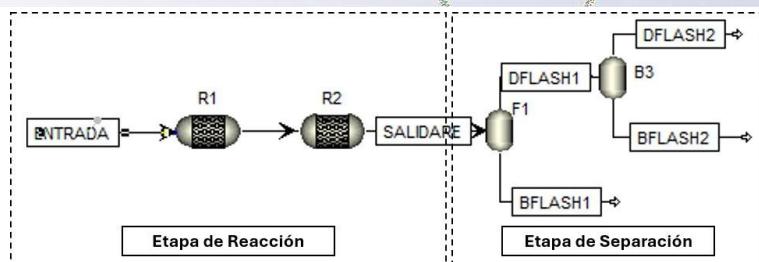


Figura 5. Sistema de reacciones y Diagrama de Flujo de Proceso de los hidrocarburos ligeros.

### Evaluación del proceso

A partir de la metodología descrita se calculó el TAC y las emisiones de  $\text{CO}_2$  con la metodología de Gadalla et al (2005). Para la estimación de la energía, a partir de lo reportado en (Editor Engineeringtoolbox, 2025) cada kg de metano produce 49853 kJ/kg, 1 kg de Etano produce 47206 kJ/kg, 1 kg de etileno produce 47741 kJ/kg, 1 kg de propano produce 46134 kJ/kg, 1 kg de propileno produce 45783 kJ/kg, 1 kg de butano produce 46464 kJ/kg y 1 kg de buteno produce 45171 kJ/kg. Por lo que la energía total que se podría obtener de cada producto se calculó multiplicando los efluentes de los productos obtenidos en la simulación de este proceso por el dato reportado de energía disponible por kg del mismo, finalmente se realizó la suma de energía obtenida de cada producto y se comparó con la energía consumida en el proceso de síntesis y separación, la cual corresponde a la suma de las cargas térmicas del rehervidor y condensador de la columna de destilación, así como las cargas térmicas del flash 1, flash 2 y el reactor dando como resultado 363,665,435,817.39 kJ/año para la energía obtenida de cada producto y -6,369,151,685,218.10 kJ/año para la energía consumida en el proceso de síntesis y separación.

### Resultados

El reactor con mejores resultados fue operado a 300°C y 20 bar con 0.5 horas de tiempo de residencia, se alimentó con una relación de 1:1.325 CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>, un volumen de 219.2913 m<sup>3</sup>, la carga térmica del reactor fue de -1,052.4236 kW. Se logró una conversión de CO<sub>2</sub> del 61.64%, se alimentaron 9000 kg/h y a la salida obtuvimos 3452.4 kg/h, como efluentes se obtuvieron: 0 kg/h de H<sub>2</sub>, 96.308 kg/h de CH<sub>4</sub>, 188.0434 kg/h de C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, 36.3612 kg/h de C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, 325.632 kg/h de C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>, 42.2253 kg/h de C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, 235.7431 kg/h de C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>, 33.7153 kg/h de C<sub>4</sub>H<sub>10</sub> y 3478.6733 kg/h de H<sub>2</sub>O. La secuencia de separación con mejor desempeño fue operando el primer flash a una temperatura de 25°C y presión de 20 bar con carga térmica de -3042.73 kJ/s y volumen de 9.088 m<sup>3</sup>. El segundo flash se operó a una temperatura de -125.4897 °C y con una presión de 0.001 bar, la carga térmica fue de -212451.1512 kJ/s y su volumen fue de 2.61 m<sup>3</sup>. Para el primer flash el mejor resultado obtenido es a las condiciones de 25°C y 20 bar con un volumen de 9.08m<sup>3</sup>, en estas condiciones se logró separar el 99.81% del agua, con trazas de los demás compuestos. Para el segundo flash no se logró una separación tan marcada como en el primero, consiguiendo separar el 99.76% del metano de los demás hidrocarburos junto con el CO, las mejores condiciones de operación que se consiguieron fueron de -159.53°C y 0.021 bar con un volumen de 2.37m<sup>3</sup>, condiciones demasiado extremas y que sería demasiado costoso alcanzar.

Del mismo modo en cuanto a la evaluación del proceso se encontró que para las mejores condiciones de operación el reactor y el proceso de separación planteado tendría un costo de: 14,555,807.99 USD/año (Tabla ), este resultado muestra que el menor TAC se obtuvo bajo condiciones específicas que redujeron el tamaño de los equipos y de los requerimientos de servicios auxiliares, al comparar los casos de menor costo con los demás, es notable que operar con condiciones que reduzcan los flujos dentro del proceso ayuda a disminuir significativamente los gastos del proceso, lo que lo hace más viable económicoamente.

Tabla 10. Valores más bajos de TAC para cada equipo del proceso de hidrocarburos.

Equipos	TAC (USD/año)
Reactor	4494954.751
Flash 1	47508.17971
Flash 2	10013345.06
Total	<u>14,555,807.99</u>

La energía disponible para cada producto obtenido, según (The Engineering Toolbox. (n.d.). Heating values of fuel gases), se muestra en la Tabla. Por lo que la energía total, tomando en cuenta los valores del flujo máscio de salida del flash 2, respectivos de cada producto, que podría obtenerse a partir de estos últimos sería de: 11,113.41 kW. Que comparado con el valor de la energía consumida en el proceso de síntesis y separación (según cálculos: 10,059,800.81 kW), notamos que es notablemente inferior. Deduciendo entonces que, en

términos energéticos, este proceso no es viable para la obtención de hidrocarburos ligeros, al menos no en la manera que se plantea.

*Tabla 11. Carga térmica para cada producto obtenido del proceso de hidrocarburos.*

Producto	Carga térmica (kJ/kg)
CH4	49853
C2H4	47741
C2H6	47206
C3H6	45659
C3H8	46134
C4H8	45171
C4H10	46464

Por último, se encontró que la cantidad de CO<sub>2</sub> obtenida considerando las mejores condiciones de operación es de 2,540.65 ton/año que comparado con la cantidad de CO<sub>2</sub> empleada como reactivo es 76,500.00 ton/año. Esta diferencia de más de 73,900 toneladas anuales representa un aprovechamiento superior al 96% del CO<sub>2</sub> capturado. Esto no solo indica que el proceso es viable, sino que además presenta un alto potencial como alternativa limpia y sostenible frente a los procesos basados en combustibles fósiles, ya que no solo evita emisiones adicionales, sino que reutiliza un gas de efecto invernadero.

#### Análisis comparativo de los casos de estudio:

De los tres casos estudiados, el e-etanol se puede considerar como la opción más viable y equilibrada, al combinar viabilidad técnica, rentabilidad económica y sostenibilidad ambiental. A diferencia del e-metanol — que presenta una disyuntiva entre costos y productividad, y los hidrocarburos ligeros ,inviables por sus altos costos y desafíos de purificación, el proceso de e-etanol logra una alta eficiencia y mejor rentabilidad.

A continuación, se presenta una tabla comparativa de los casos estudiados.

*Tabla 12. Tabla comparativa de los casos de estudio.*

	e- Metanol	e-Etanol	Hidrocarburos ligeros
<b>Vialidad Técnica</b>	Alta, pero escenarios opuestos entre costo y productividad.	Alta, alcanza el 94% de la demanda objetivo.	Baja, debido a desafíos críticos en la purificación.
<b>Vialidad económica</b>	Diseño económico (\$1.7 M/año). Diseño productivo (\$1.75 M/año).	Rentable (\$217,337.84 USD/año en TAC).	No viable (TAC de \$14.5 M/año)
<b>Consumo energético</b>	Balance positivo (29,268 kW de excedente).	Balance positivo (38,238 kW de excedente).	Balance negativo (energía consumida >> energía producida).
<b>Emisiones de CO<sub>2</sub></b>	43,477-45,724 ton/año	43,912 ton/año,	2,540 ton/año.
<b>Pureza del producto</b>	97% (requiere separadores flash adicionales).	99% (uso de destilación extractiva con glicerol).	Baja pureza (requiere absorción con solventes no implementada).
<b>Condiciones optimas</b>	206°C y 65 bar (económico) vs. 210°C y 75 bar (productivo).	250°C y 50 bar, relación H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> =1.8, conversión del 44%.	300°C y 20 bar, tiempo de residencia=0.5 h.
<b>Retos principales</b>	Equilibrio entre costos, productividad y emisiones.	Optimización de la recirculación de gases no convertidos.	Separación criogénica costosa y compleja.
<b>Potencial aplicación</b>	Precursor químico (DME).	Sector salud.	Industria química (ej. polipropileno).

## CONCLUSIONES

A partir del diseño y la simulación de los tres procesos para la producción de e-fuels, se concluye lo siguiente para cada caso de estudio:

**1. Proceso de Producción de e-Metanol:** Los resultados de este caso presentan una clara disyuntiva entre la viabilidad económica/ambiental y la productividad. Se identificó un diseño de proceso con un bajo costo de inversión y una mínima emisión de CO<sub>2</sub>, posicionándolo como la opción más sostenible. Sin embargo, esta

ventaja se obtiene a costa de una menor producción de metanol y, en consecuencia, un menor rendimiento energético. En contraste, se encontró una configuración alternativa que maximiza la producción de metanol y la

rentabilidad energética, pero requiere una inversión significativamente mayor y genera una huella de carbono más elevada. La elección entre ambos diseños dependerá de los objetivos estratégicos del proyecto: si se prioriza la sostenibilidad y una inversión controlada, el primer diseño es superior; si el objetivo es maximizar la producción, el segundo es preferible, aunque exige un análisis más profundo para justificar su costo e impacto ambiental.

**2. Proceso de Producción de e-Etanol:** El proceso diseñado para la producción de etanol demostró ser técnica y económicamente viable. Se alcanzó una producción de 8.47 ton/h, satisfaciendo el 94% de la demanda objetivo del estudio. El análisis de sensibilidad permitió identificar condiciones de operación óptimas, incluyendo una relación H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> de 1.8 y una conversión del 44%, logrando un notable aprovechamiento del CO<sub>2</sub> capturado (85.79%). El diseño del tren de separación, en particular el uso de una columna de destilación extractiva, fue crucial para obtener un producto con una pureza del 99% de manera eficiente. Los resultados validan este proceso como una alternativa rentable y sostenible.

**3. Proceso de Producción de Hidrocarburos Ligeros:** Este proceso, si bien cumplió el objetivo de valorizar el CO<sub>2</sub>, no demostró ser viable bajo las condiciones evaluadas debido a su alto requerimiento energético y costos operativos no competitivos frente a metodologías convencionales. El principal obstáculo técnico se identificó en la etapa de purificación, donde la formación de múltiples azeótropos impidió una separación efectiva mediante la secuencia de flashes y destilación propuesta. Se concluye que el desarrollo futuro de este proceso debe centrarse en la implementación de una tecnología de separación más robusta, como la absorción con solventes, para poder superar esta limitación técnica y aspirar a la viabilidad.

### Conclusión General del Trabajo

En conjunto, esta investigación demuestra que la producción de e-fuels a partir de CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub> es técnicamente factible, pero su viabilidad económica y ambiental depende críticamente del producto objetivo y del diseño específico del proceso. Se ha evidenciado un caso de alta viabilidad con el etanol, donde un diseño optimizado condujo a resultados prometedores. En contraste, el estudio del metanol expuso la disyuntiva fundamental entre costo y productividad, mientras que el caso de los hidrocarburos ligeros subrayó que los desafíos en la purificación pueden ser un factor determinante para la viabilidad de un proceso. Por lo tanto, se confirma el potencial de las e-refinerías como un pilar en la transición energética, pero se enfatiza la necesidad de realizar análisis de simulación detallados y específicos para cada ruta de producción, poniendo especial atención en la optimización de las etapas de reacción y separación para asegurar una implementación exitosa y sostenible.

## BIBLIOGRAFÍA/REFERENCIAS

- [1] Bolsa Mexicana de Valores. (2012). Prospecto de colocación de certificados bursátiles fiduciarios. <https://www.bmv.com.mx/docs-pub/prospect/00120120427143244.pdf>
- [2] Editor Engineeringtoolbox. (2023, 5 septiembre). Fuel gases - Heating values. [https://www.engineeringtoolbox.com/heating-values-fuel-gases-d\\_823.html](https://www.engineeringtoolbox.com/heating-values-fuel-gases-d_823.html)
- [3] Gadalla, M. A., Olujic, Z., Jansens, P. J., Jobson, M., & Smith, R. (2005). Reducing CO<sub>2</sub> Emissions and Energy Consumption of Heat-Integrated Distillation Systems. *Environmental Science & Technology*, 39(17), 6860-6870. <https://doi.org/10.1021/es049795q>
- [4] He, Y., Liu, S., Fu, W., Chen, J., Zhai, Y., Bi, X., Ren, J., Sun, R., Tang, Z., Mebrahtu, C., & Zeng, F. (2023). Assessing the efficiency of CO<sub>2</sub> hydrogenation for emission reduction: Simulating ethanol synthesis process as a case study. *Chemical Engineering Research and Design*, 195, 106–115. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2023.05.024>
- [5] Mexico Propylene glycol (propane-1,2-diol) imports by country | 2023 | Data. (n.d.-b). <https://wits.worldbank.org/trade/comtrade/en/country/MEX/year/2023/tradeflow/imports/partner/ALL/product/290532>
- [6] MilliporeSigma | Life Science Products & Service Solutions. (n.d.). <https://www.sigmaldrich.com/MX/es>
- [7] Najari, S., Gróf, G., Saeidi, S., & Gallucci, F. (2019). Modeling and optimization of hydrogenation of CO<sub>2</sub>: estimation of kinetic parameters via artificial bee colony (ABC) and differential evolution (DE) algorithms. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(10), 4630-4649. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.020>
- [8] Pacífico Mexinol. (2025). Responsible methanol production [Página web]. Recuperado de <https://pacificomexinol.com/es/>
- [9] Polímeros de Propileno o de otras Olefinas, en Formas Primarias: Intercambio comercial, compras y ventas internacionales, mercado y especialización | Data México Data México. (n.d.). Polímeros de Propileno o de otras Olefinas, en Formas Primarias: Intercambio comercial, compras y ventas internacionales, mercado y especialización. Recuperado de <https://datamexico.org/es/profile/trade/polimeros-de-propileno-o-de-otras-olefinas-en-formas-primarias>
- [10] Propilenglicol "Propano-1,2-Diol": Intercambio comercial, compras y ventas internacionales, mercado y

especialización | Data México Data México. (n.d.). Propilenglicol "Propano-1,2-Diol": Intercambio comercial, compras y ventas internacionales, mercado y especialización. Recuperado de <https://datamexico.org/es/profile/trade/propilenglicol-propano-1,2-diol>

[11] Propilenglicol "Propano-1,2-Diol" [Gobierno de México]. México, 2023. Disponible en: [https://www.economia.gob.mx/datamexico/es/profile/product/propylene-glycol\\_propane-12-diol](https://www.economia.gob.mx/datamexico/es/profile/product/propylene-glycol_propane-12-diol)

[12] Propylene Oxide Market Size, Share | Global Industry Report, 2025 Grand View Research. (n.d.). Propylene Oxide Market Size, Share & Trends Analysis Report, 2019 - 2025. Recuperado de <https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/propylene-oxide-market>

[13] Turton, Richard. (2012). Analysis, synthesis, and design of chemical processes (4). New York: Pearson.

[14] Van Dal, É. S., & Bouallou, C. (2013). Design and simulation of a methanol production plant from CO<sub>2</sub> hydrogenation. Journal of Cleaner Production, 57, 38–48. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.06.008>