

DISEÑO, MODELADO Y EVALUACIÓN DE UN PROCESO INTEGRADO PARA LA PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE ETANOL A PARTIR DE CO₂ E HIDROGENO VERDE

Luis Ernesto Alderete Castro ^a, Carlos Emilio Valdivia Brambilia ^a, Hannia
Guadalupe García Vega ^a, Juan Gabriel Segovia-Hernández ^{a,*},

^a Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de
Guanajuato, Noria Alta s/n, Guanajuato 36050. g.segovia@ugto.mx

Resumen

La transición hacia sistemas energéticos sostenibles requiere procesos innovadores que reduzcan las emisiones de carbono y promuevan el uso de combustibles alternativos. Este estudio presenta el diseño, la simulación y la evaluación de un proceso integrado para la producción sostenible de etanol a partir de dióxido de carbono (CO₂) capturado e hidrógeno verde (H₂), utilizando Excel y Aspen Plus como principales herramientas de modelado. Ante la falta de datos cinéticos detallados, se modeló un reactor estequiométrico, logrando una conversión de hidrógeno del 44%. El proceso incluyó un sistema de recirculación para aumentar la conversión global y un tren de separación híbrido compuesto por tanques flash y una destilación extractiva con glicerol para superar la limitación azeotrópica en las mezclas etanol-agua. Se realizaron análisis de sensibilidad sobre variables clave como la composición de la alimentación, la relación H₂/CO₂, la concentración de inertes y la razón de recirculación, con el fin de optimizar las condiciones operativas. El diseño final logró una capacidad de producción de 8.47 toneladas/h de etanol con una pureza del 99%, demostrando la viabilidad técnica y económica del proceso, con un consumo total de energía de 24,816 kW y una eficiencia de utilización de CO₂ del 85.79%. Los resultados evidencian el potencial del e-etanol como un combustible sintético sostenible y escalable para contribuir a la descarbonización del sector transporte y a la transición hacia una economía circular baja en carbono.

Palabras clave: Producción de e-fuels; Hidrógeno Verde; Captura de CO₂; Producción de etanol.

PROCESS DESIGN, MODELING, AND EVALUATION OF AN INTEGRATED SYSTEM FOR THE SUSTAINABLE PRODUCTION OF ETHANOL FROM CO₂ AND GREEN HYDROGEN

Abstract

The transition toward sustainable energy systems requires innovative processes that reduce carbon emissions and promote the use of alternative fuels. This study presents the design, simulation, and evaluation of an integrated process for the sustainable production of ethanol from captured carbon dioxide (CO₂) and green hydrogen (H₂), using Excel and Aspen Plus as the primary modeling tools. Due to the lack of detailed kinetic data, a stoichiometric reactor was modeled, achieving a hydrogen conversion of 44%. The process integration included a recirculation system to increase overall conversion and a hybrid separation train composed of flash tanks and extractive distillation with glycerol to overcome the azeotropic limitation in ethanol-water mixtures. Sensitivity analyses were performed on key variables such as feed composition, H₂/CO₂ ratio, inerts concentration, and recycle ratio to optimize operating conditions. The final design achieved a production capacity of 8.47 tons/h of ethanol with a purity of 99%, demonstrating the technical and economic feasibility of the process, with a total energy consumption of 24,816 kW and a CO₂ utilization efficiency of 85.79%. These results highlight the potential of e-ethanol as a scalable and sustainable synthetic fuel, contributing to transport sector decarbonization and supporting the transition toward a low-carbon circular economy.

Keywords: Reactors; E-fuel production; Green hydrogen; CO₂ capture; Ethanol production.

1. 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, 2025). El sector del transporte, con una contribución significativa del 23% a las emisiones globales de CO₂, requiere urgentemente alternativas sostenibles (Segovia-Hernández, 2025). 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. La producción de estos combustibles se fundamenta en los principios de la economía circular ya que utiliza CO₂ (capturado) e H₂ (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.

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 H₂ y el CO₂ capturado para producir un portafolio diversificado de productos de alto valor agregado, desde combustibles hasta precursores químicos. 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. 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. Para que la producción de e-fuels sea rentable y escalable, es fundamental primeramente establecer configuraciones de proceso

eficientes para esta sección central. 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-etanol a partir de CO_2 e H_2 . El objetivo es desarrollar un modelo de proceso integrado y funcional que sirva como base técnica para futuras evaluaciones y optimizaciones.

2. Consideraciones Generales

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_2 , electrólisis y reformado húmedo para la obtención de H_2 , 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.

En esta diversidad de productos, se tomó como objetivo de este trabajo el e-etanol, el cual especialmente relevante por sus múltiples bondades y potencial de aplicación. El e-etanol es un 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.

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. 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.

3. Metodología

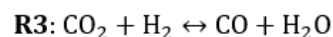
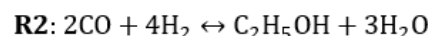
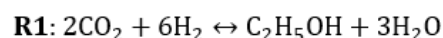
3.1 Diseño y simulación del proceso en Aspen Plus.

Se empleó un catalizador comercial K/Cu-Fe-Zn debido a su alta selectividad hacia etanol y estabilidad operativa en condiciones moderadas (He y col., 2023). El modelo termodinámico utilizado fue el "NTRL" 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.

El diagrama de flujo de proceso junto con las reacciones utilizadas se presenta en la Figura 1.

Sistema de reacciones:



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 de 802 kmol/h. Las principales variables analizadas fueron: relación de alimentación H_2/CO_2 , conversión, concentración de N_2 , razón de recirculación. Las variables se variaron con base a los puntos de la Tabla 1.

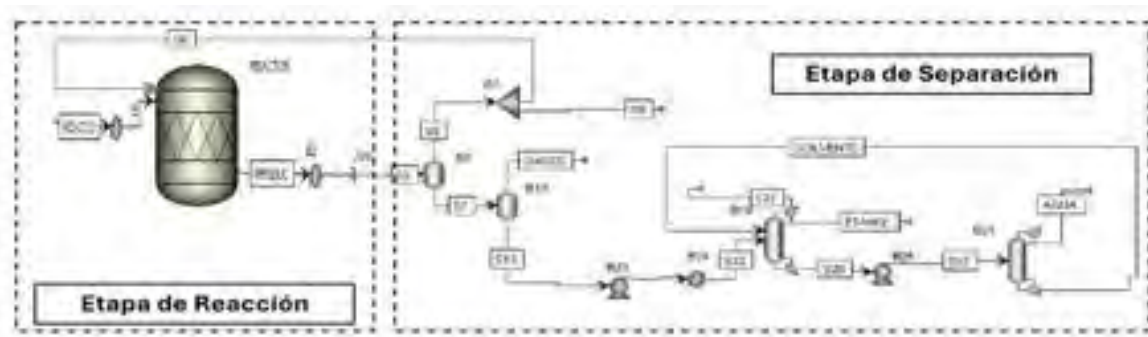


Figura 1. Diagrama del proceso

Tabla 1. Variables del proceso

Composició n CO ₂	Relación H ₂ /CO ₂	Conversión	Razón de recirculació n
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		

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.

3.2 Evaluación del proceso

3.2.1 Estimación de costos

Se estimó el costo de los principales equipos del proceso: el reactor y el proceso de separación. El costo de cada equipo se obtuvo por medio del método de Guthrie (Jiménez-Gutierrez, 2003). Para cada una de las columnas se calculó el costo del condensador, el costo del rehervidor, el costo de los platos, el costo del recipiente vertical y finalmente el costo total. La estimación del costo total anualizado (TAC) a partir de los costos de equipos y servicios calculados con el método de Guthrie. Los costos de equipos se estimaron para cada uno de los módulos del proceso a partir de sus dimensiones, materiales y presiones de operación, dividiendo el monto en un plazo de 10 años como tiempo de retorno (TR) con fines de comparación.

3.2.2 Consumo energético.

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

3.2.3 Cuantificación de las emisiones de CO₂

Para poder realizar la estimación de la emisión de dióxido de carbono, primero 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 24815.8 KW, una vez obtenido el dato se procedió a investigar la cantidad de CO₂ que se genera por kWh utilizando el gas natural como combustible, encontrando el valor aproximado de 0.404 kg CO₂ por kWh eléctrico generado (Engineering Toolbox, n.d.).

3.2.4 Energía disponible en el producto

Se determinó la cantidad de energía que se puede obtener de nuestro producto. Con base en Fuels - Higher and Lower Calorific Values. Engineering (CFE-LAPEM, 2016) 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.

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

4. Resultados:

Con base en el análisis de sensibilidad realizado en la etapa de reacción, la Tabla 2 muestra los puntos óptimos de las variables evaluadas.

Tabla 2. Puntos óptimos de las variables

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

En cuanto a la composición de CO₂ se encontró que no representaba un impacto significativo, por lo que se optó por considerar una pureza de 0.99 respecto al CO₂ y 0.01 de N₂, esto debió a que en la práctica una de las tecnologías más maduras y utilizadas en la captura de CO₂ permite alcanzar estas composiciones. Se seleccionó la menor relación de H₂/ CO₂ 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 H₂ elevada.

El flujo de alimentación al reactor que permite alcanzar el objetivo quedó establecido de la siguiente manera.

Tabla 3. Flujo alimentado al reactor

Flujo total	802	Kmol/h
CO ₂	793.9	Kmol/h
N ₂	8.02	Kmol/h
H ₂	1443.6	Kmol/h

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 Tabla 4 y 5 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 6738.66, mientras que para el caso dos fue de 13141.3 kw.

Tabla 4. Resultados del análisis de sensibilidad para columna 1.

Columna 1 (Columna extractiva)	
No Etapas	15
Etapas Solvente	3
Etapas de alimentación	12
Relación de reflujo	0.5
Presión	2 (bar)

Tabla 5. Resultados del análisis de sensibilidad para columna 2.

Columna 2 (Columna convencional)	
No Etapas	10
Etapas Solvente	3
Etapas de alimentación	5
Relación de reflujo	0.5
Presión	65 (bar)
Temperatura	65 (°C)

Por otro lado, para la estimación de los costos de los equipos principales, como se mencionó, se aplicó el método de Guthrie, obteniendo los siguientes resultados:

Tabla 6. Costo de capital instalado

Costo de equipos	
Costo columna 1	\$528652.27
Costo columna 2	\$607247.40
Costo del reactor	\$199919.85
Costo total de equipos	\$1335819.53

Tabla 7. Costo anualizado para cada componente

TAC (USD/año)	
Costo columna 1	\$86011.73
Costo columna 2	\$98799.15
Costo del reactor	\$32526.96
Costo total de equipos	\$217337.84

4.1 Emisión de CO₂

La cantidad de CO₂ producido con las condiciones de operación utilizadas fue de 43,912.06 toneladas de CO₂/año y la cantidad de CO₂ utilizada como reactivo es de 309,216.69 toneladas de CO₂/año, obteniendo una diferencia de 265,304.63 toneladas al año por lo que se obtiene un porcentaje de aprovechamiento del CO₂ 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.

4.2 Energía disponible

La energía que se encuentra disponible en el etanol producido es de 26800 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 63054.44 kW que comparando con la energía que se consume a lo largo del proceso de producción (24815.8 kW) tenemos una diferencia de 38238.64 kW, por lo que se concluye que el proceso si tiene viabilidad.

5. Conclusiones

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 H₂/CO₂ de 1.8 y una conversión del 44%, logrando un notable aprovechamiento del CO₂ 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.

6. Referencias bibliográficas

Comisión Federal de Electricidad (CFE) – LAPEM. (2016). SPA00-63: Guía para determinar el factor de emisión de bióxido de carbono equivalente para el Sistema Eléctrico Nacional.

<https://lapem.cfe.gob.mx/normas/pdfs/t/SPA00-63>

Engineering Toolbox. (n.d.). *Fuels - Higher and Lower Calorific Values*. Retrieved July 22, 2025, from:
https://www.engineeringtoolbox.com/fuels-higher-calorific-values-d_169.html

He, Y., Liu, S., Fu, W., Chen, J., Ren, J., Bi, X., Zhai, Y., Sun, R., Tang, Z., Mebrahtu, C., y Zeng, F. (2023). Assessing the efficiency of CO₂ 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.2023.05.043>

Jiménez Gutiérrez, A. (2003). *Diseño de procesos en ingeniería química*. Barcelona: Editorial Reverté.

Segovia-Hernández, J. G. (2025). Advancing E-fuels production through process intensification: overcoming challenges and seizing opportunities for a sustainable energy future. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 208, 110107.
<https://doi.org/10.1016/j.cep.2024.110107>