

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



**PRODUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MEZCLAS BIOTURBOSINA A
PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES PRESENTES EN LODOS RESIDUALES:
ANÁLISIS DE IMPACTO AMBIENTAL**

Por:

I.Q. ENRIQUE CONTRERAS VÁZQUEZ

A handwritten signature in blue ink, appearing to be "I.Q. Enrique Contreras Vázquez", is written over the printed name.

COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO EN:
**MAESTRO EN CIENCIAS CON ORIENTACIÓN EN PROCESOS
SUSTENTABLES**

ASESOR

DR. JOSÉ JULIÁN CANO GÓMEZ

CO-ASESORES

DR. GERARDO ANTONIO FLORES ESCAMILLA
DRA. LEIDY TATIANA VARGAS IBAÑEZ

Julio 2024, Monterrey, Nuevo León, México.

PRODUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MEZCLAS BIOTURBOSINA A
PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES PRESENTES EN LODOS RESIDUALES:
ANÁLISIS DE IMPACTO AMBIENTAL

Revisión de tesis:

DR. PASIANO RIVAS GARCÍA
Comité tutorial

DR. RICARDO GÓMEZ GÓNZALEZ
Comité tutorial

DRA. ASTRID IRIANA SÁNCHEZ VÁZQUEZ
Comité tutorial

DRA. MARÍA ELENA CANTÚ CARDENAS
Subdirectora de Posgrado

PRODUCCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE MEZCLAS BIOTURBOSINA A
PARTIR DE ÁCIDOS GRASOS LIBRES PRESENTES EN LODOS RESIDUALES:
ANÁLISIS DE IMPACTO AMBIENTAL

Asesores de tesis:

DR. JOSÉ JULIAN CANO GÓMEZ
Asesor

DR. GERARDO ANTONIO FLORES ESCAMILA
Co-asesor

DRA. LEIDY TATIANA VARGAS IBÁÑEZ
Co-asesora

I. Resumen

Enrique Contreras Vázquez
Universidad Autónoma de Nuevo León
Facultad de Ciencias Químicas

Título del estudio: Producción y caracterización de mezclas bioturbosina a partir de ácidos grasos libres presentes en lodos residuales: análisis de impacto ambiental.

Número de páginas: 151

Candidato al grado de Maestro en Ciencias con Orientación en Procesos Sustentables.

La industria de la aviación civil ha contribuido con el 2% de las emisiones de CO₂ a nivel mundial. Distintos organismos internacionales han promovido el uso de combustibles sustentables para la aviación (CSA), con el objetivo de disminuir las emisiones de CO₂ generadas por el sector. La bioturbosina (BJF) es un CSA que podría reducir hasta en un 80% las emisiones de CO₂ en todo su ciclo de vida comparado con la turbosina fósil. La BJF generalmente es sintetizada a partir de material vegetal lignocelulósico, grasa vegetales, grasas animales y alcoholes. Actualmente, la investigación de procesos de revalorización de residuos para la producción de biocombustibles se promueve internacionalmente. El lodo residual (LR) es un residuo generado en las plantas de tratamiento de aguas residuales. Este residuo puede contener hasta 60% m/m de ácidos grasos libres que podrían aprovecharse como materia prima para la producción de bioturbosina. No obstante, las propiedades de la bioturbosina podrían ser distintas a las de la turbosina fósil, por lo anterior, la implementación de aditivos de bioturbosina podría disminuir esta diferencia entre sus propiedades. El uso de residuos como materia prima para la producción de biocombustibles no asegura una disminución en el impacto ambiental del proceso, por lo anterior, existen herramientas como el análisis de ciclo de vida (ACV) que permiten estimar el impacto ambiental de un producto, proceso o servicio en todo su ciclo de vida y a distintas escalas de producción. El objetivo de este trabajo es sintetizar bioturbosina a partir de las grasas residuales presentes en el lodo residual mediante hidropesamiento (HEFA) utilizando catalizadores heterogéneos de metales (Ni y Cu)/SAPO-11, caracterizar los catalizadores y la

bioturbosina sintetizada, así como, elucidar el efecto de nuevos aditivos (éteres de glicol) de bioturbosina sobre sus propiedades fisicoquímicas y de transporte bajo un enfoque termodinámico. Además, este trabajo también tiene el propósito de evaluar el impacto ambiental del proceso de producción de bioturbosina a dos escalas diferentes (laboratorio e industrial) mediante ACV, con el fin de proponer alternativas de eco concepción. Se evaluaron dos métodos de extracción de las grasas del lodo residual. La síntesis de la zeolita se llevó a cabo mediante síntesis hidrotermal, mientras que para los catalizadores de Ni y Cu se siguió la metodología de impregnación húmeda incipiente. Mediante hidroprocesamiento y variando la carga de catalizador (20:1 y 30:1) en atmósferas distintas de reacción (35% H_2 /65% N_2 y 100% N_2) se produjo bioturbosina. Se evaluaron las propiedades de la bioturbosina y sus mezclas para ajustar los valores experimentales a modelos matemáticos que permitan la predicción de las propiedades de mezcla. Asimismo, se realizó un ACV a escala laboratorio e industrial desde la recolección de los lodos hasta la producción de bioturbosina (1 MJ) y se evaluaron estrategias de eco-concepción para el proceso. Se encontró que no existió una diferencia significativa entre los métodos evaluados de extracción de las grasas. Los catalizadores, mostraron similitudes entre sus características superficiales, así como que, la síntesis del catalizador modificaba la estructura del soporte. Los catalizadores de Cu mostraron el mayor rendimiento hacia la producción de bioturbosina bajo las dos atmósferas reactivas (35%-50% rendimiento). Las mezclas de bioturbosina + aditivo no cumplieron con el límite establecido por la norma ASTM D1655. Además, se observó que la mayor contribución a los indicadores de cambio climático proviene de las etapas de pretratamiento y síntesis de la zeolita, como consecuencia del uso de metanol y energía eléctrica mexicana. En este trabajo se propone una metodología para la producción de BJB a partir de un residuo industrial (lodos residuales), se elucida el efecto de nuevos aditivos para BJB y se evalúa el impacto ambiental del proceso de producción del biocombustible.

Palabras clave: bioturbosina, análisis de ciclo de vida, catálisis, biocombustibles.

II. Agradecimientos

A mis padres, Delia y Enrique, quienes me han dado siempre lo mejor de sí, por su apoyo y amor incondicional, por enseñarme que siempre hay más cosas allá de lo que uno ve, por ser las personas que son, a las que admiro y amo con todo mi corazón.

A mis hermanos, Diana y Ricardo, mis compañeros de vida y de juegos, por ser tan distintos a mí, por enseñarme a ver y entender las cosas de otra manera, por motivarme a convertirme en una persona de la que puedan estar orgullosos.

A mis asesores, el Dr. Julián y el Dr. Gerardo, quienes han dedicado tanto tiempo como yo a este trabajo, a quienes admiro por su don en la vocación de la docencia y la investigación, y que desde licenciatura, me han enseñado y guiado a través de las distintas ramas de la ingeniería química. Por su confianza, su paciencia y su disposición a todas mis dudas e inquietudes, por sus consejos, por las buenas pláticas y por compartir conmigo las tragedias del laboratorio.

A mi asesora, la Dra. Tatiana, quien fue la chispa que me motivó a emprender este camino llamado “hacer la maestría”. Por enseñarme y reír conmigo cuando los cosas no cuadraban desde servicio social. Por su confianza y paciencia. Por ser mi compañera y convertirse en mi amiga de laboratorio, a pesar de la distancia. Por permitirme conocer a la Greta y a Gaspar. Confíe en mí tía, no se afane que al final sale chévere.

A Jacqueline, que desde hace casi 10 años ha compartido conmigo mis días más tristes y mis victorias más grandes. Mi mejor amiga, mi compañera de películas y mi dupla en la paca de los mercaditos, por ser la catadora de jochos del centro que más quiero.

A Alan, mi amigo y compañero en las largas jornadas nocturnas de laboratorio, quien, a través de las pláticas profundas de regreso a casa, los chistes, la música, el béisbol y uno que otro video de internet con papitas y refresco, me impulsaba a seguir adelante. Brodi, detecto una condición insegura... ¡Ufffff!

A Evelin, Camila, Abigail y Gustavo, mis amigos de maestría, quienes me brindaron sus conocimientos en farmacia, su amistad y me han acompañado a lo largo de estos dos años.

A Beatrice, por su confianza y su amistad, por los viajes, por los buenos y malos recuerdos, por permitirme ser parte de su familia y ayudarme a descubrir un mundo completamente diferente al mío, al que hace algunos años, jamás me hubiese imaginado llegar.

A los estudiantes de servicio social y estancia: Mara Areli, Andrea Arredondo, Adriana Montoya, Víctor Lozano, Daniel Fregoso, Melissa Medellín, Jesús Robles, Naomi Rojas, Valeria Ibarra, Carlos Guzmán, Velia Martínez, Gabriela Vázquez, Jesús Rosales, Alejandro Udave, Jorge Bravo, Rafael Reyna, Kevin Rodríguez, Luis Enrique Muñiz, Andrea Tovar, Melanne Chapa, Juan Pablo Paniagua y Jennifer Valdez. Por hacer más divertidos los días en el laboratorio, por las buenas listas de música, por su amistad y su confianza en mí, por brindarme su apoyo en las actividades de laboratorio y hacer más amenos los días de estrés.

A Charlie y Karen, por su apoyo técnico y administrativo desde auxiliaría, por siempre arreglar lo que no funciona en el laboratorio.

Al Dr. Magín, por sus atenciones antes y durante el inicio de la estancia. Por brindarme su confianza y la oportunidad de trabajar en grupo del laboratorio de combustibles y motores de la UCLM.

A Mel, por ser mi compañera y amiga durante mi estancia en España, por ser mi guía turística en la vía verde, Ciudad Real y Madrid, por siempre estar pendiente de mí y cuidarme cuando estaba fuera de casa y tan lejos de mi familia, por brindarme su confianza y permitirme compartir con ella las noches de trabajo y la chimenea.

A la Facultad de Ciencias Químicas, donde estudié mi licenciatura y donde actualmente realizo el posgrado. Por brindarme el conocimiento y la capacidad de poder hacer cosas que cada día me parecen más fascinantes.

A CONACHYT por la beca otorgada.

Y finalmente, a todas y cada una de las personas que de manera directa o indirecta fueron parte de este proyecto.

Este trabajo está dedicado a las frustraciones, a las horas invertidas, a los esfuerzos diarios, a los días en que nada salió bien y a los pensamientos que alimentaban la idea de que no se iba a poder...

Este trabajo está dedicado a mi segunda madre, quien siempre vio el como si, a pesar de tenerlo todo en contra,

Para mi abuelita que me cuida y me acompaña desde arriba,

Te amo, mamá Angélica.



CONTENIDO

I. Resumen.....	4
II. Agradecimientos.....	6
1. Introducción.....	12
2. Antecedentes	20
2.1. Rutas de síntesis de bioturbosina y catalizadores utilizados para su producción.....	20
2.2. Aditivos para bioturbosina.....	22
2.3. Evaluación del impacto ambiental	25
3. Hipótesis, objetivos y aportación científica	29
3.1. Hipótesis.....	29
3.2. Objetivos.....	30
3.2.1. Objetivo general.....	30
3.2.2. Objetivos específicos	30
3.3. Aportación científica	31
4. Metodología.....	32
4.1. Extracción, pretratamiento y caracterización de ácidos grasos.	32
4.1.1. Extracción de ácidos grasos.	33
4.1.2. Pretratamiento de las grasas residuales para la producción de biodiésel.	33
4.2. Síntesis del soporte y los catalizadores de metal soportado.	34
4.2.1. Síntesis del soporte (zeolita SAPO-11).	34
4.2.2. Síntesis de los catalizadores de Ni y Cu.	35
4.3. Caracterización del soporte y los catalizadores del metal soportado.	36
4.4. Síntesis y caracterización de bioturbosina y mezclas.....	37
4.4.1. Síntesis y caracterización de bioturbosina	37
4.4.2. Síntesis y caracterización de mezclas bioturbosina - aditivos.....	40
4.5. Análisis de ciclo de vida (ACV)	45
4.5.1. Definición de objetivo y alcance	46
4.5.2. Evaluación del inventario ambiental de ciclo de vida: Escala laboratorio.	47
4.5.3. Evaluación del inventario ambiental de ciclo de vida: Escala industrial.	49
4.5.4. Evaluación de impacto ambiental.....	58
5. Resultados y discusión.....	59
5.1. Extracción de los ácidos grasos libres del lodo residual.	59
5.2. Pretratamiento de la grasa: producción de biodiésel.	60
5.3. Caracterización de zeolita y catalizadores.....	61
5.3.1. Caracterización de la zeolita SAPO-11	61
5.3.2. Caracterización de los catalizadores.....	67
5.3.3. Composición química de zeolita y catalizadores.....	73
5.4. Síntesis de bioturbosina mediante HEFA.	74
5.5. Caracterización de bioturbosina.	75
5.5.1. Composición de bioturbosina: atmósfera de mezcla.	75

5.5.2. Composición de bioturbosina: atmósfera de nitrógeno.	¡Error! Marcador no definido.
5.5.3. Corrección de rendimientos y evaluación de la selectividad	78
5.5.4. Propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina	79
5.6. Caracterización de la bioturbosina y sus mezclas con éteres de glicol.	80
5.6.1. Densidad de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.	80
5.6.2. Viscosidad de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.	82
5.6.3. Índice de refracción de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.	82
5.7. Evaluación de propiedades derivadas: Volumen molar en exceso, desviación de la viscosidad y desviación del índice de refracción.....	83
5.8. Modelos y ajustes para la predicción de las propiedades de mezcla bioturbosina + éteres de glicol.	87
5.8.1. Modelos de McAllister ^[45] y Nava-Ríos ^[46] para viscosidad cinemática.	¡Error! Marcador no definido.
5.8.2. Modelo de Cano-Gómez ^[47] para predecir la viscosidad cinemática.	91
5.8.3. Modelo de Redlich-Kister ^[49]	93
5.9. Análisis de ciclo de vida.	97
5.9.1. Inventario de ciclo de vida.	97
5.9.2. Selección de indicadores de impacto ambiental.	99
5.9.3. Evaluación del impacto ambiental.	102
6. Conclusiones.....	116
7. Bibliografía	120
8. Anexos	¡Error! Marcador no definido.
8.1. Anexo 1: Diagrama de flujo DWSIM.	¡Error! Marcador no definido.
8.2. Anexo 2: Absorción/desorción de los catalizadores.	¡Error! Marcador no definido.
8.3. Anexo 3: Semicuantificación por SEM y SEM-EDX.	¡Error! Marcador no definido.
8.4. Anexo 4. Cromatografía de gases.	¡Error! Marcador no definido.
8.5. Anexo 5: Propiedades de bioturbosina y mezclas con aditivos.	¡Error! Marcador no definido.
8.6. Anexo 6: Propiedades en exceso de mezclas de bioturbosina y aditivos	¡Error! Marcador no definido.
8.7. Anexo 7: Parámetros de Redlich-Kister para las propiedades derivadas VE, $\Delta\eta$ y $\Delta\eta D$	¡Error! Marcador no definido.
8.8. Anexo 8: Evaluación de impacto ambiental: resultados numéricos. ...	¡Error! Marcador no definido.

TABLAS

TABLA 1. RESUMEN DE ANTECEDENTES: PRODUCCIÓN DE BIOTURBOSINA SINTETIZADA POR OTROS AUTORES	21
TABLA 2. RESUMEN DE ANTECEDENTES: ADITIVOS PARA BIOTURBOSINA.....	25
TABLA 3. RESUMEN DE ANTECEDENTES: EVALUACIÓN DE IMPACTO AMBIENTAL.	29
TABLA 4. CLAVES DE EXPERIMENTOS.....	38
TABLA 5. LÍMITES Y MÉTODOS DE CARACTERIZACIÓN ESTABLECIDOS POR LA ASTM PARA LAS PROPIEDADES DE COMBUSTIBLES DESTINADOS A AVIACIÓN CIVIL.	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 6. RENDIMIENTO DEL PROCESO DE EXTRACCIÓN DE ÁCIDOS GRASOS POR EL MÉTODO DE JERINGA Y MÉTODO SÓLIDO.....	59
TABLA 7. FRACCIÓN PESO DE LOS ÁCIDOS GRASOS ESTERIFICADOS DEL BIODIÉSEL PRODUCIDO EN EL PRETRATAMIENTO DE LAS GRASAS.....	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 8. COMPARACIÓN DEL ÁREA SUPERFICIAL BET Y VOLUMEN DE PORO DE LOS CATALIZADORES Y LA ZEOLITA SAPO-11.	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 9. COMPARACIÓN ENTRE LA COMPOSICIÓN ELEMENTAL OBTENIDA MEDIANTE XRD Y SEM-EDX DE LOS CATALIZADORES DE NI/SAPO-11.	73
TABLA 10. COMPOSICIONES NORMALIZADAS PARA LA BIOTURBOSINA SINTETIZADA EN ATMÓSFERA DE MEZCLA.	76
TABLA 11. COMPOSICIONES NORMALIZADAS PARA LA BIOTURBOSINA SINTETIZADA EN ATMÓSFERA DE N ₂	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 12. SELECTIVIDAD Y RENDIMIENTOS PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDROCARBUROS DE BIOTURBOSINA.....	79
TABLA 13. COMPARACIÓN ENTRE LAS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS DE LA BIOTURBOSINA, LA TURBOSINA FÓSIL Y LOS LÍMITES ESTABLECIDOS POR LA ASTM D1655.	80
TABLA 14. PARÁMETROS DE LA CORRELACIÓN DE MCALLISTER ^[45] Y PARÁMETROS ESTADÍSTICOS. ¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.	
TABLA 15. PARÁMETROS DE LA CORRELACIÓN DE NAVA-RÍOS <i>ET AL.</i> ^[46] Y PARÁMETROS ESTADÍSTICOS.....	89
TABLA 16. PARÁMETROS PARA LA CORRELACIÓN DE CANO-GÓMEZ ^[47] Y PARÁMETROS ESTADÍSTICOS.....	91
TABLA 17. PARÁMETROS DE ÍNDICE DE REFRACCIÓN PARA LA CORRELACIÓN DE VARGAS-IBÁÑEZ <i>ET AL.</i> ^[48]	96
TABLA 18. PARÁMETROS DE DENSIDAD PARA LA CORRELACIÓN DE VARGAS-IBÁÑEZ <i>ET AL.</i> ^[48]	97
TABLA 19. INVENTARIO DE ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA PARA LA PRODUCCIÓN DE 1 MJ DE BIOTURBOSINA SINTETIZADA A PARTIR DE LODOS RESIDUALES DE LOS TRES ESCENARIOS EVALUADOS EN ESTE TRABAJO. ...	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 20. FACTORES DE NORMALIZACIÓN DE LOS INDICADORES DE IMPACTO AMBIENTAL DE LA METODOLOGÍA DE ENVIROMENTAL FOOTPRINT (EF) V.3.0.....	100
TABLA 21. PROPIEDADES DE LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOMETIL ÉTER (DME), □ (G/CM ³), VISCOSIDAD, η (MPA·S) E ÍNDICE DE REFRACCIÓN, η _D	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 22. PROPIEDADES DE LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOETIL ÉTER (DEE), □□ (G/CM ³), VISCOSIDAD, η (MPA·S) E ÍNDICE DE REFRACCIÓN, η _D	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 23. PROPIEDADES DE LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOBUTIL ÉTER (DBE), □□ (G/CM ³), VISCOSIDAD, η (MPA·S) E ÍNDICE DE REFRACCIÓN, η _D	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 24. VOLUMEN MOLAR EN EXCESO, V ^E (CM ³ /MOL), DESVIACIÓN DE LA VISCOSIDAD, Δη (MPA·S) Y DESVIACIÓN DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN, Δη _D PARA LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOMETIL ÉTER (DME).....	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 25. VOLUMEN MOLAR EN EXCESO, V ^E (CM ³ /MOL), DESVIACIÓN DE LA VISCOSIDAD, Δη (MPA·S) Y DESVIACIÓN DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN, Δη _D PARA LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOETIL ÉTER (DEE).	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 26. VOLUMEN MOLAR EN EXCESO, V ^E (CM ³ /MOL), DESVIACIÓN DE LA VISCOSIDAD, Δη (MPA·S) Y DESVIACIÓN DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN, Δη _D PARA LAS MEZCLAS DE BIOTURBOSINA (BJF) + DIETILENGLICOL MONOBUTIL ÉTER (DME).....	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 27. PARÁMETROS DE REDLICH-KISTER PARA ESTIMAR EL VOLUMEN MOLAR DE EXCESO V ^E (CM ³ ·MOL ⁻¹) Y SU DESVIACIÓN ESTÁNDAR (DE)	¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.

TABLA 28. PARÁMETROS DE REDLICH-KISTER PARA ESTIMAR LA DESVIACIÓN DE VISCOSIDAD $\Delta\eta$ (MPA·S) Y SU DESVIACIÓN ESTÁNDAR (DE).¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 29. PARÁMETROS DE REDLICH-KISTER PARA ESTIMAR LA DESVIACIÓN DEL ÍNDICE DE REFRACCIÓN, $\Delta\eta D$, Y SU DESVIACIÓN ESTÁNDAR (DE).¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.
TABLA 30. RESULTADOS NUMÉRICOS DE LA EVALUACIÓN DE IMPACTO AMBIENTAL.....¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.

1. Introducción

En 2021, aproximadamente 2.28 billones de personas se transportaron en aeronaves civiles ^[1]. Estimaciones de la Organización de Aviación Civil Internacional (OACI) y la Asociación Internacional de Transporte Aéreo, cuyo acrónimo en inglés es IATA, prevén que para el año 2050 la cantidad de pasajeros aumente hasta los 10 billones ^[2]. Este incremento en el tráfico aéreo traerá consigo un aumento en las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) liberadas al ambiente, como consecuencia del uso de turbosina fósil como combustible. De seguir la tendencia actual, podrían emitirse cerca de 21.2 Gt de CO₂ al ambiente en el periodo de 2021 a 2050 ^[2].

La OACI y la IATA tienen iniciativas como “Fly Net Zero” donde se plantean distintas alternativas que permitan cero emisiones netas de CO₂ para el año 2050 ^[2]. Algunas de las estrategias para lograr estos compromisos son: *i)* el uso de combustibles sustentables para la aviación (CSA), *ii)* captura de carbono y actividades de compensación, *iii)* uso de nuevas tecnologías enfocadas en sistemas de hidrógeno y eléctricos e *iv)* incrementar la eficiencia estructural y operativa ^[3]. De las diferentes estrategias, el uso de CSA se ha perfilado como una las principales alternativas para reducir la acumulación de emisiones de carbono generadas por la industria.

Los CSA, son biocombustibles que podrían reducir hasta un 80% las emisiones de CO₂ en todo su ciclo de vida ^[3]. La bioturbosina (BJF) es un CSA con composición

variable de hidrocarburos lineales, isómeros, compuestos cíclicos y aromáticos con cadenas de carbono entre C₈–C₁₆. Su composición depende tanto de la materia prima como del proceso productivo que se empleen para la síntesis del biocombustible [4]. En literatura se han reportado tres rutas principales de síntesis para la producción de bioturbosina: *i*) alcohol-turbosina (ATJ), *ii*) Fischer-Tropsch (FT) e *iii*) hidroprocesamiento (HEFA).

La producción de bioturbosina mediante ATJ se lleva a cabo utilizando alcoholes de cadena corta (C₂-C₅) como materia prima [5]. Esta bioturbosina presenta bajos puntos de congelación (< - 65° C) ideales para este tipo de combustible y bajos contenidos de azufre que previene la emisión de contaminantes azufrados durante su combustión. Sin embargo, su síntesis requiere de cuatro etapas (deshidratación, oligomerización, separación e hidrogenación) por lo que los costos de producción se incrementan debido a la demanda de energía e insumos [5,6].

Fischer-Tropsch permite la síntesis de biocombustibles a partir de biomasa y gas de síntesis (CO + H₂) [5]. Este proceso se lleva a cabo a altas presiones (2-5 MPa) y temperaturas (190° C–350° C) [7]. Esta bioturbosina presenta un número de cetano alto, favoreciendo la capacidad de ignición del combustible. Además, es considerado un combustible limpio dada la ausencia de emisiones NO_x. No obstante, su baja densidad energética, altos costos operativos y rendimientos de producción entre 25 y 50%, son algunas de las desventajas al emplear la síntesis de bioturbosina mediante FT [5].

HEFA permite el aprovechamiento de una amplia variedad de materias primas como aceites vegetales, grasas animales y residuos como el aceite de cocina [5]. La

bioturbosina sintetizada mediante HEFA presenta una elevada densidad energética, permitiendo la mezcla con su homólogo fósil. El HEFA busca sintetizar hidrocarburos lineales e isómeros a partir de los ácidos grasos libres (AGL) presentes en las materias primas mediante reacciones de desoxigenación bajo una atmósfera de hidrógeno y en presencia de catalizadores heterogéneos [8]. La hidrodesoxigenación (HDO), descarbonilación (DCO) y la descarboxilación (DCO_2) son reacciones de desoxigenación que se llevan a cabo durante la síntesis de los biocombustibles cuando se emplea HEFA [5].

El proceso de HDO remueve las moléculas de oxígeno presentes en los AGL en forma de moléculas de H_2O , bajo condiciones de temperatura de $280^\circ\text{C} - 340^\circ\text{C}$ y presión de 5 a 10 MPa [9]. Las condiciones de operación necesarias para llevar a cabo el HDO demandan una elevada cantidad de insumos y energía en comparación con los procesos de DCO y DCO_2 [9]. El DCO se lleva a cabo bajo condiciones de reacción moderadas. Generalmente, la temperatura y presión de reacción oscilan entre $300^\circ\text{C} - 350^\circ\text{C}$ y 2 – 4 MPa, respectivamente, bajo una atmósfera de H_2 que no está en exceso. La baja disponibilidad de H_2 provoca el consumo de moléculas de carbono de los AGL, lo que origina la formación de CO y H_2O como coproductos de la reacción [10]. Por su parte, la DCO_2 se caracteriza por llevarse a cabo en ausencia de H_2 a temperatura y presión similares a la DCO ($300^\circ\text{C} - 350^\circ\text{C}$ y 2 – 4 MPa). Dada la ausencia de H_2 , las moléculas de oxígeno se remueven en forma de CO_2 [10]. La DCO_2 emplea catalizadores heterogéneos para llevar a cabo la reacción. Generalmente, se utilizan catalizadores de distintos metales de transición como el Ni, Pt, Cu y Fe soportados sobre materiales del tipo

zeolita (SAPO-11, MESO- γ y HMCM) ^[11,12]. Este tipo de catalizadores presentan la característica de poseer sitios ácidos medios y fuertes de Brønsted, lo que favorece la producción y selectividad para la formación de *n*-parafinas e *iso*-parafinas dentro del rango de bioturbosina (C₈-C₁₆) ^[5].

Los aceites vegetales y grasas de animal son las materias primas más utilizadas en la producción de bioturbosina mediante HEFA. Tan solo en 2021, se produjeron 140 millones de litros de bioturbosina ^[5]. Por lo anterior, con el fin de satisfacer la demanda en la producción de nuevos biocombustibles, leyes internacionales como la RED II, promueven el uso de residuos como materia prima para la producción de biocombustibles como la bioturbosina ^[13].

El lodo residual (LR) es un residuo generado en plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR). Su disposición representa aproximadamente el 50% de los costos operativos de una PTAR convencional. Normalmente, la gestión de los lodos residuales se lleva a cabo por medio de dos métodos; *i*) confinamiento en rellenos sanitarios y *ii*) uso como fertilizante en campos agrícolas. No obstante, actualmente se han comenzado a explorar alternativas que permitan su gestión integral ^[13]. Los lodos residuales están compuestos por materia no biodegradable, microorganismos y materia orgánica, principalmente ^[14]. Donde los ácidos grasos libres pueden representar hasta 60% en peso, siendo susceptibles de ser revalorizados para la producción de biocombustibles ^[15].

La bioturbosina sintetizada por HEFA presenta un alto número de cetano, estabilidad térmica y baja composición en azufre. Sin embargo, algunas propiedades fisicoquímicas y de transporte como la densidad, viscosidad, punto de

ignición y propiedades en frío, entre otras, son distintas a las de la turbosina fósil convencional. Dicha desigualdad influye en el comportamiento del combustible dentro de los sistemas de inyección [5].

La turbosina es inyectada en una mezcla con aire comprimido dentro de las cámaras de combustión de la turbina [16]. La densidad es utilizada como un parámetro para el diseño de los tanques de almacenamiento de los aviones, así como también para determinar la carga de combustible para cada vuelo. En aviación, se prefiere el uso de turbosinas con densidades elevadas debido a que usualmente estos combustibles más densos presentan una mayor densidad energética. Por lo que el consumo de combustible se disminuye y los trayectos pueden ser más largos en comparación con un combustible con densidad baja [5,17,18]. La viscosidad se relaciona directamente a la dinámica de inyección de la turbosina; los combustibles con viscosidad cinemática elevada tienden a presentar una atomización deficiente debido a la formación de gotas de mayor dimensión. Esto provoca que la mezcla combustible-aire sea deficiente, ocasionando una disminución en el rendimiento de combustión [5].

Dadas las condiciones de operación de los aviones convencionales, es importante considerar las propiedades en frío de la bioturbosina. Un elevado punto de congelamiento ($> -40^{\circ} \text{C}$) podría provocar la solidificación del combustible, ocasionando daños en el sistema de inyección. Por otro lado, el punto de ignición se relaciona con el manejo y almacenaje seguro del combustible. Un punto de ignición cercano a las temperaturas ambientales representa un riesgo de combustión espontánea.

El valor de las propiedades fisicoquímicas y de transporte de la bioturbosina depende de la materia de prima y el método de producción utilizado. Estos valores tienen que cumplir con límites establecidos por las normas de aviación ASTM D1655 y la ASTM D7566 ^[19,20] para garantizar la calidad de este. Una alternativa para subsanar estas posibles diferencias entre las propiedades de la bioturbosina y la turbosina de origen fósil es la implementación de aditivos al biocombustible ^[21].

Para otros biocombustibles producidos a partir de biomasa, como el biodiésel, se han propuesto el uso de alcoholes de cadena larga y óxidos metálicos como aditivos, permitiendo modificar las propiedades del biocombustible asemejándose a las del diésel fósil ^[15,22]. No obstante, los estudios sobre el efecto de nuevos aditivos sobre las propiedades fisicoquímicas y de transporte de la bioturbosina son muy limitados. La mayor parte de los trabajos se han enfocado en el efecto de bioaditivos destinados a turbosina fósil ^[21,23].

Los éteres de glicol son compuestos orgánicos fácilmente biodegradables que se caracterizan por tener grupos funcionales de alcohol y éter que podrían ser utilizados como aditivos de la bioturbosina ^[24]. Estos compuestos se emplean en distintos ámbitos como solventes (industria textil, reacciones químicas) e inhibidores del punto de congelamiento de la turbosina fósil tipo JP-8 ^[25]. Además, presentan un elevado punto de ignición (92° C – 138° C), lo que favorece el almacenamiento y manejo seguro del combustible. Igualmente, tienen bajos puntos de congelamiento (< -43.5° C), contribuyendo a la prevención de formación de cristales de hielo que pueden dañar el sistema de inyección ^[24,25].

A pesar de que la bioturbosina cumpla con los límites establecidos por las normas de la ASTM D1655 para las propiedades de un combustible destinado a la aviación civil, el uso de residuos industriales como materia prima para la producción de biocombustibles, no asegura un beneficio medioambiental. Por lo anterior, es necesario evaluar el impacto ambiental de los nuevos procesos de producción de biocombustibles ^[26]. El análisis de ciclo de vida (ACV) es una herramienta estandarizada mediante las normas ISO 14040 e ISO 14044 ^[27,28], reconocida internacionalmente para la evaluación del impacto ambiental de un producto, proceso y/o servicio a través de todo su ciclo de vida, desde la extracción de las materias primas hasta su disposición o confinamiento ^[29]. Esta metodología permite realizar la evaluación a distintas escalas de producción ^[26].

En literatura se han reportado análisis del impacto ambiental asociados a procesos a escala laboratorio, sin embargo, estos trabajos han limitado su uso para fines de investigación científica. En lo concerniente a la escala industrial, la evaluación del impacto ambiental de los procesos mediante la metodología de ACV se realiza en mayor medida a procesos con un alto nivel de madurez tecnológica (NMT). En estos procesos se dispone de información precisa sobre la demanda de masa y energía del proceso de producción, lo cual, determina la calidad del análisis ^[30]. Por el contrario, los procesos de producción de tecnologías emergentes presentan la desventaja de carecer de información completa y de calidad, lo que dificulta la evaluación de su impacto ambiental a escala industrial ^[30].

Los estudios de ACV *ex-ante*, se enfocan en el escalamiento hacia la escala industrial de las tecnologías y procesos en desarrollo a partir de resultados

obtenidos a escala laboratorio. Su implementación es importante, ya que se ha reportado que el impacto ambiental asociado a procesos industriales difiere de su equivalente a escala laboratorio ^[31].

La realización de este tipo estudios de ACV se ha implementado como una estrategia que permite estimar los requerimientos de masa y energía a una mayor escala, proporcionando la información necesaria para realizar el análisis de impacto ambiental de los nuevos procesos previo a su instalación en campo. Este tipo de análisis permite la proposición e implementación de alternativas de eco-concepción relacionadas con el diseño de la planta y diferentes mejoras del proceso ^[30,32]. Dos de los métodos más comunes para la estimación de la demanda de insumos y de energía de un proceso de producción son: *i)* cálculos de diseño de equipos industriales y *ii)* empleo de un software especializado para la simulación de todo el proceso de producción ^[30].

La intención de este trabajo es desarrollar una metodología para la producción de bioturbosina a partir de los lodos de agua residual provenientes de la planta noroeste de tratamiento de aguas residuales (Nuevo León, México), mediante hidroprocesamiento (HEFA) empleando catalizadores de (Ni y Cu)/SAPO-11. Además, se busca caracterizar la bioturbosina producida y sus mezclas con éteres de glicol con el fin de evaluar el cumplimiento con los límites establecidos por la norma ASTM D1655. Así como también, estimar el impacto ambiental del proceso a escala laboratorio y a escala industrial a través de un análisis de ciclo de vida *ex-ante*, para finalmente proponer alternativas de eco-concepción al proceso a escala industrial.

2. Antecedentes

2.1. Rutas de síntesis de bioturbosina y catalizadores utilizados para su producción.

Distintos autores han propuesto diferentes rutas de síntesis y materias primas para la producción de bioturbosina. Liu *et al.* (2014) produjeron BJF a partir de aceite de palma mediante HEFA en presencia de catalizadores heterogéneos de Ni/SAPO-11, sintetizados mediante el método de impregnación y variando la carga en peso del metal soportado de 2% a 9%. Los autores reportaron rendimientos de 70% en la producción de alcanos (C₅-C₁₈) a un tiempo de reacción de 5 h y condiciones de temperatura y presión de 200°C y 4 MPa de H₂, respectivamente. Ellos mencionan que, al incrementar el tiempo de reacción por encima de 6 horas, el rendimiento en la producción de alcanos e isómeros disminuye hasta un 60% y 46%, respectivamente [8]. Eller *et al.* (2016), propusieron el uso de catalizadores de NiMo/Al₂O₃ y Pt/SAPO-11 para llevar a cabo la producción de BJF utilizando aceite de coco como insumo en dos etapas distintas de reacción (HEFA e isomerización). Los autores observaron que variando la temperatura desde 260° C a 380° C a una presión constante de 4 MPa de H₂, se alcanza un 57% de rendimiento para la producción de BJF [33].

Por otro lado, Hanaoka *et al.* (2015) emplearon madera como materia prima para sintetizar BJF mediante FT, empleando catalizadores de Pt soportados sobre zeolitas de distintos tipos. En el trabajo, los autores sintetizaron catalizadores soportados sobre materiales tipo β-zeolita (BEA), modernita (MOR) y Y-zeolita (FAU), mediante el método de impregnación. La reacción HEFA se llevó a cabo en

un reactor tipo batch a 250° C y 1 MPa de presión de H₂. Ellos reportaron que los catalizadores de Pt soportados sobre las zeolitas tipo FAU y MOR obtuvieron los menores rendimientos para la producción de BJJF (2.4% y 4.1%), respectivamente. Por otro lado, los catalizadores soportados sobre zeolitas tipo BEA mostraron mayor rendimiento en la producción de BJJF (36.2%) [34]. Vedachalam *et al.* (2021) utilizaron el método HEFA para la síntesis de BJJF a partir de cera residual. Los autores llevaron a cabo la reacción a 330° C y 5 MPa de H₂ en presencia de catalizadores de Pt soportados sobre materiales a base de Si y Al. Se reportó que a relaciones de Si/Al ≥ 80, los procesos de hidrocraqueo e hidro isomerización de los hidrocarburos en la cera residual se ven desfavorecidos, mientras que a relaciones de Si/Al ≤ 40, ambos procesos se ven potencializados como consecuencia de la mayor cantidad de sitios ácidos en el soporte [35].

La tabla 1 muestra de manera resumida las condiciones de operación para la producción de bioturbosina reportadas por los trabajos discutidos anteriormente. Hasta la fecha, en literatura, no se han reportado trabajos acerca de la producción y caracterización de bioturbosina a partir de lodos residuales mediante HEFA.

Tabla 1. Resumen de antecedentes: Producción de bioturbosina sintetizada por otros autores

Autor	Método de síntesis	Materia prima	Catalizador	Condiciones de operación	Rendimiento
Liu <i>et al.</i> [8]	HEFA	Aceite de palma	2% Ni/SAPO-11	4 MPa de H ₂ 200° C	<i>n</i> -parafinas: 70%
Eller <i>et al.</i> [33]	HEFA	Aceite de coco	NiMo/Al ₂ O ₃ 0.5% Pt/SAPO-11	4 MPa de H ₂ 260° C - 380° C	<i>n</i> -parafinas: 50%
Hanaoka <i>et al.</i> [34]	FT	Madera	Pt/β-zeolitas	1 MPa de H ₂ 250° C	<i>n</i> -parafinas: 36%
Vedachalam <i>et al.</i> [35]	HEFA	Cera residual	Pt/ Al-TUD-1 (10)	5 MPa de H ₂ 330° C	<i>n</i> -parafinas: 96%

HEFA: Hidroprocesamiento
FT: Fischer-Tropsch

2.2. Aditivos para bioturbosina.

Varios autores han enfocado sus trabajos en la caracterización de bioturbosina en mezcla con turbosina fósil, no obstante, estas mezclas se consideran sustitutos parciales de turbosina fósil y no aditivos.

Duong *et al.* (2020) caracterizaron las propiedades fisicoquímicas y de transporte de las mezclas de bioturbosina sintetizada a partir de aceite de coco con turbosina fósil en todo el rango de concentraciones. Las mezclas cumplieron los límites de la norma para densidad, además, se observó que las mezclas con mayor composición en bioturbosina presentaron un mayor valor en el punto de humo, lo que se relaciona con una menor formación de partículas durante la combustión. Sin embargo, solamente la mezcla al 10% en volumen de bioturbosina cumplió con el límite establecido para la temperatura de congelamiento, mientras que, para la viscosidad, las mezclas hasta un 93% seguían por debajo del valor máximo permitido para la viscosidad ($8\text{mm}^2/\text{s}$ a -20°C). Los autores concluyeron que, si se busca aumentar la fracción de bioturbosina que pueda ser mezclada con la turbosina convencional, la reducción en las propiedades como el punto de congelamiento es primordial [36].

Why *et al.* (2021) produjeron bioturbosina a partir de aceite de palma mediante desoxigenación. La bioturbosina sintetizada se mezcló con turbosina Jet-A1 en relaciones del 20% v/v al 80% v/v. Se caracterizaron propiedades como la densidad, viscosidad cinemática, temperatura de congelamiento, entre otras. Los autores reportaron que ninguna de las mezclas cumplió con los límites máximos establecidos por la norma ASTM D4052 para la viscosidad. Para la densidad y la temperatura de congelamiento, se observó que todas las mezclas satisficieron el

límite impuesto por la norma para densidad (750 - 840 kg/m³), sin embargo, solamente la mezcla al 20%v/v cumplió con el límite impuesto para el punto de congelamiento mínimo (-47° C). Lo anterior, se relacionó a la baja composición de *iso*-parafinas que presenta la bioturbosina sintetizada ^[17].

Los estudios donde se analiza el efecto de aditivos para combustibles de aviación se han centrado en la aplicación de bio-aditivos a combustibles de origen fósil. Lown *et al.* (2014), elaboraron mezclas de turbosina con diferentes compuestos químicos. Los autores propusieron éteres, cetonas, ésteres, hexanos, entre otros, como aditivos de turbosina y otros combustibles fósiles con el fin de elucidar el efecto de los grupos funcionales sobre las propiedades en frío y punto de nube en todo el rango de concentraciones. Los autores reportaron que los aditivos con menor temperatura de fusión que la turbosina fósil, presentan un decremento en la temperatura de nube, siendo los hexanos los que disminuyeron en mayor proporción esta propiedad. Los autores concluyeron que los aditivos de tipo alcano y éter presentaron una mayor disminución en los valores de las propiedades caracterizadas ^[37].

Por su parte, Kumar & Karmakar (2023), analizaron mezclas de éter butílico y turbosina fósil Jet-A con el fin de evaluar el efecto del nuevo aditivo de turbosina durante la combustión y cuantificar su potencial en la reducción de emisiones de especies contaminantes (CO₂, CO y NO_x) generadas en la combustión. Evaluaron mezclas al 10%, 30% y 50% en volumen de aditivo con respecto a la turbosina fósil y estudiaron la combustión de las mezclas a tres distintas temperaturas (0°, 100° y 200° C). Los autores reportaron que la temperatura más alta fomenta la formación

de mezcla aire-combustible, mejorando la combustión. Sin embargo, esta condición aumenta la temperatura de flama, desencadenando a una mayor producción de compuestos NOx. Por otro lado, la mezcla al 50% presentó la formación de 75 ppm y 50 ppm de compuestos NOx a la temperatura de 0° C y 200° C, respectivamente, lo que representó una disminución en comparación con la combustión de la turbosina fósil (84 ppm y 70 ppm a 0° C y 200° C). Además, se reportó un aumento en las emisiones de CO a 100 °C, consecuencia de la combustión incompleta ^[38].

La implementación de éteres de glicol como aditivos de la bioturbosina representa un área de oportunidad para estudiar su efecto sobre las propiedades fisicoquímicas y de transporte de las mezclas bioturbosina + aditivo. El uso de éteres de glicol puede promover la reducción de las emisiones de gases contaminantes como CO₂ y NOx, así como incrementar la densidad, y el punto de ignición, y disminuir su viscosidad y propiedades en frío.

La tabla 2 muestra un resumen de las propiedades, aditivos y combustibles caracterizados en otros trabajos.

Tabla 2. Resumen de antecedentes: aditivos para bioturbosina.

Autor	Aditivo	Combustible	Mezclas	Propiedades caracterizadas
Why <i>et al.</i> (2021) ^[17]	N/A ^{1(A)}	Turbosina Jet-A1	20%v/v-80%v/v	<ul style="list-style-type: none"> • Densidad • Viscosidad • Punto de congelamiento • Poder calorífico • Punto de humo • Emisión de partículas y gases
Duong <i>et al.</i> (2020) ^[36]	N/A ^{1(B)}	Turbosina Jet-A1	10%v/v-90%v/v	<ul style="list-style-type: none"> • Propiedades de destilación • Punto de ignición • Densidad • Viscosidad • Punto de congelamiento • Punto de humo • Estabilidad de oxidación • Poder calorífico
Lown <i>et al.</i> (2014) ^[37]	Éteres Cetonas Ésteres Alcanos Diésteres	Diésel Turbosina JP-8	10%m/m-90%m/m	<ul style="list-style-type: none"> • Punto de nube • Punto de obstrucción del filtro frío
Kumar & Karmakar (2023) ^[38]	Éter butílico	Turbosina Jet-A1	10%v/v-50%v/v	<ul style="list-style-type: none"> • Cuantificación de las partículas y gases de combustión

N/A ^{1(A)}: Se utilizó bioturbosina sintetizada a partir de aceite de palma para las mezclas

N/A ^{1(B)}: Se utilizó bioturbosina sintetizada a partir de aceite de coco para las mezclas

2.3. Evaluación del impacto ambiental

Como se mencionó anteriormente, distintas materias primas han sido utilizadas como insumo para la producción de bioturbosina, sin embargo, su empleo como insumos no garantiza una disminución al impacto ambiental comparado con el proceso de producción del combustible fósil. Diferentes autores han empleado la metodología de ACV para evaluar el impacto ambiental de las distintas rutas de producción de bioturbosina.

Agusdinata *et al.* (2011), evaluaron el impacto ambiental de la producción de bioturbosina a escala industrial en Estados Unidos. Analizaron cinco materias primas: aceite de camelia, aceite de alga, pasto de escoba, rastrojo de maíz y cultivos leñosos (sauce, álamo o eucalipto), empleando HEFA y FT para la síntesis.

Determinaron como unidad funcional la producción 1 gal de bioturbosina, delimitando como fronteras de estudio desde el cultivo de las materias primas hasta el almacenaje del combustible. El inventario fue construido en base a estadísticas promedio en la zona de estudio (Estados Unidos) considerando rendimientos, demanda energética y producción de los insumos. Se utilizó la base de datos Ecoinvent V.2.0. y los factores de emisión del IPCC AR4 para la evaluación del indicador de cambio climático. Ellos destacaron que los escenarios donde se utilizó una materia prima con base oleica, aceite de camelia y aceite de alga, presentaron mayor impacto ambiental (78 g CO₂ eq/UF y 85 g CO₂ eq/UF, respectivamente), siendo la etapa de cultivo la que contribuye mayoritariamente (70% a 90%) a las emisiones totales de gases de efecto invernadero debido al uso de fertilizantes y el efecto del cambio de uso de suelo indirecto ^[39].

Klein *et al.* (2018), realizaron un análisis técnico-económico y de impacto ambiental de la producción de bioturbosina en una biorrefinería situada en Brasil a escala industrial. Evaluaron diferentes rutas de producción de bioturbosina (HEFA, FT y alcohol a turbosina (ATJ)). Se consideró como materia prima una mezcla de aceites (macuba, palma y soya) para los escenarios donde se empleó HEFA como ruta de síntesis, mientras que para los escenarios de FT y ATJ, se consideraron el bagazo y la paja de la caña de azúcar. Elaboraron el inventario de ciclo de vida a partir del balance de masa y energía de los ocho escenarios analizados mediante el simulador Aspen Plus V.8.6. Utilizaron la base de datos de Ecoinvent V.2.2 y el método ReCipe Midpoint para evaluar cinco indicadores de impacto ambiental (Tabla 3), considerando como unidad funcional la producción de 4 Mt/año de

producto. Dentro de las fronteras del sistema se incluyó desde el cultivo hasta la combustión del combustible. Los autores reportaron que los escenarios donde se empleó FT presentaron el menor impacto ambiental asociado con el indicador de cambio climático (9 g CO₂ eq/MJ) comparado con los escenarios de ATJ (20 g CO₂ eq/MJ) y HEFA (18 g CO₂ eq/MJ). Lo anterior, se le atribuyó principalmente al uso de los residuos lignocelulósicos como materia prima del proceso de FT ^[40].

De manera similar, Liu *et al.* (2021) llevaron a cabo el análisis técnico-económico del proceso de producción de bioturbosina a escala industrial utilizando aceite vegetal de semillas de jatrofa y ricino como materia prima en China. Los autores consideraron la producción de 1 MJ de energía como unidad funcional. Las fronteras del estudio fueron desde la recolección del fruto hasta la combustión de la bioturbosina. El inventario se construyó con base en datos recopilados de la población agrícola dedicada a siembra de los frutos. Se evaluaron cinco indicadores ambientales (Tabla 3) mediante la metodología de CML 2001 y la base de datos de Ecoinvent V.3.5. Los autores reportaron que el indicador de cambio climático y de acidificación terrestre se redujeron 36% y 85%, respectivamente, comparado con la turbosina fósil debido a que se previene la emisión de gases de efecto invernadero y compuestos ácidos durante la producción de bioturbosina, respectivamente ^[41].

Vela-García *et al.* (2021), evaluaron el análisis de ciclo de vida de la producción de bioturbosina a partir de residuos del cultivo de biomasa lignocelulósica y aceite de albaricoque a escala industrial. Mediante Aspen Plus V.11., simularon el proceso de producción de turbosina empleando HEFA con el fin de calcular los requerimientos másicos y energéticos, estableciendo como base de cálculo la entrada de 4.68 t/h

de aceite de albaricoque con un 90% de conversión para la formación de bioturbosina. Se consideró 1 MJ de bioturbosina como unidad funcional y se evaluaron dos indicadores ambientales (Tabla 3). Las fronteras del estudio se delimitaron desde el cultivo de la biomasa hasta la obtención del combustible. Utilizando la base de datos de Ecoinvent V.3.3. Los autores concluyeron que la contribución al indicador de cambio climático del proceso depende tanto de la fuente de obtención como del consumo de hidrógeno durante las reacciones de descarboxilación. Ellos reportaron como resultado de la evaluación de impacto ambiental 30 g CO₂ eq/UF y un consumo energético de 10 MJ/UF, lo cual, representa una disminución con respecto a la turbosina fósil (92 g CO₂ eq/UF y consumo energético de 50 MJ/UF) ^[42].

En la tabla 3 se muestra el compilado de consideraciones (unidad funcional, límites de estudio, base de datos, metodología de evaluación e indicadores ambientales evaluados) realizadas por los autores que se mencionaron anteriormente. A la fecha, no se han encontrado reportes que lleven a cabo el análisis de ciclo de vida del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala laboratorio y/o escala industrial mediante un análisis ex-ante.

Tabla 3. Resumen de antecedentes: evaluación de impacto ambiental.

Autor	Unidad funcional	Límites de estudio	Método de evaluación	Indicadores ambientales
Agusdinata <i>et al.</i> (2011) ^[39]	1 gal de BT	Cultivo a almacenaje	IPCC AR4 2007	• Indicador de cambio climático
Klein <i>et al.</i> (2018) ^[40]	4 M t / año	Cultivo a combustión	ReCiPe Midpoint 2008	• Indicador de cambio climático • Indicador Acidificación terrestre • Indicador Ocupación agrícola • Indicador Toxicidad humana • Indicador Degradación de combustibles fósiles
Liu <i>et al.</i> (2021) ^[41]	1 MJ BT	Cultivo a combustión	CML 2001	• Indicador de cambio climático • Indicador de toxicidad humana • Indicador de formación de oxidantes fotoquímicos • Indicador de acidificación terrestre • Indicador de eutroficación
Vela-García <i>et al.</i> (2021) ^[42]	1 MJ BT	Cultivo a Combustible	No especificado	• Indicador de cambio climático

3. Hipótesis, objetivos y aportación científica

A continuación, se describen la aportación científica, hipótesis y objetivos generales y específicos que se consideraron en el presente trabajo.

3.1. Hipótesis

- El uso de catalizadores heterogéneos de Ni y Cu soportados en SAPO-11 favorecerán la producción de bioturbosina mediante hidroprocesamiento (HEFA) a partir de ácidos grasos libres presentes en el lodo residual.
- El uso de los éteres de glicol (dietilenglicol monometil éter (DME), dietilenglicol monoetil éter (DEE) y el dietilenglicol monobutil éter (DBE)) como nuevos aditivos, mejorará las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina y favorecerá el cumplimiento con los límites establecidos por la ASTM D1655.

- El proceso de producción de bioturbosina tendrá un impacto ambiental menor o igual al establecido en las normas internacionales (RED II) para biocombustibles destinados a la aviación.

3.2. Objetivos

3.2.1. Objetivo general

Producir bioturbosina a partir de ácidos grasos libres provenientes de lodos de agua residual mediante HEFA empleando catalizadores de (Ni y Cu)/zeolita SAPO-11, evaluando su impacto ambiental asociado. Así como elucidar el efecto de nuevos aditivos de éteres de glicol sobre las propiedades fisicoquímicas de mezclas bioturbosina.

3.2.2. Objetivos específicos

1. Extraer y caracterizar los ácidos grasos libres de los lodos residuales.
2. Sintetizar y caracterizar la zeolita SAPO-11.
3. Sintetizar y caracterizar los catalizadores de Ni/SAPO-11 y Cu/SAPO-11.
4. Caracterizar y sintetizar bioturbosina mediante HEFA catalítico.
5. Elucidar el efecto del dietilenglicol monometil éter (DME), dietilenglicol monoetil éter (DEE) y el dietilenglicol monobutil éter (DBE) como aditivos sobre las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina bajo un enfoque termodinámico.
6. Evaluar el impacto ambiental del proceso de producción de bioturbosina mediante ACV ex-ante.

3.3. Aportación científica

- ~ Metodología para la producción de bioturbosina por HEFA utilizando catalizadores heterogéneos de Ni y Cu soportados sobre la zeolita modificada con fósforo, SAPO-11.
- ~ Entendimiento del efecto de nuevos aditivos de éteres de glicol sobre las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina producida a partir de lodo residual.
- ~ Propuesta de una alternativa de producción más limpia para la generación de combustibles renovables para la industria de la aviación civil. Propuestas enfocadas en la eco-concepción del combustible.

4. Metodología

El presente trabajo se constituye en cuatro etapas generales. La figura 1 muestra, las cuatro etapas del proyecto y su relación con los objetivos específicos.

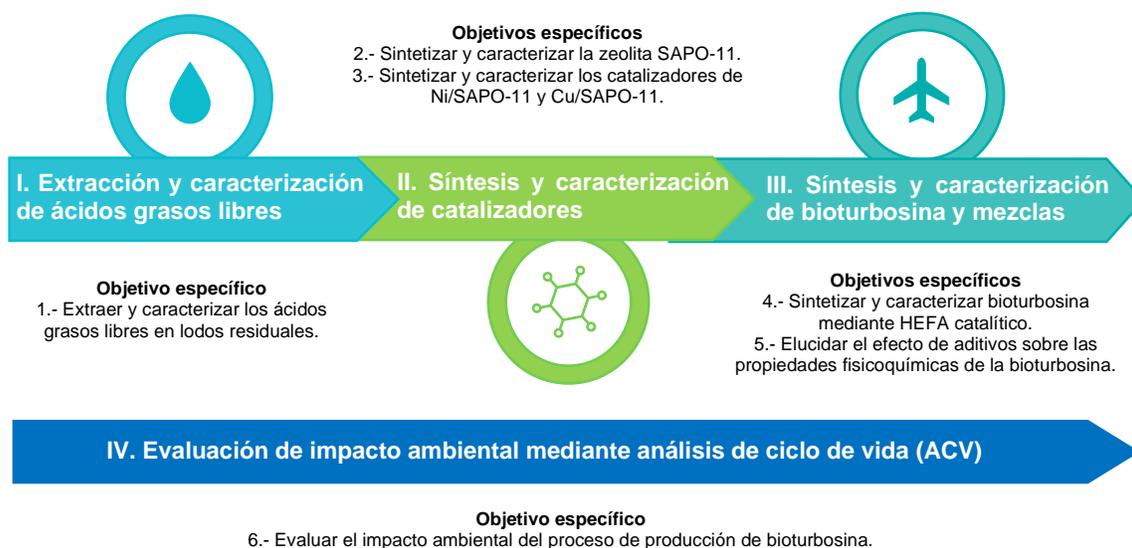


Figura 1. Resumen de la metodología y su relación con los objetivos específicos de este trabajo.

4.1. Extracción, pretratamiento y caracterización de ácidos grasos.

La extracción y pretratamiento de los ácidos grasos contenidos en los lodos residuales se llevó a cabo siguiendo la metodología propuesta por Moreno-Caballero (2023) ^[43]. La figura 2 muestra el diagrama de bloques de la metodología utilizada para la extracción y pretratamiento de ácidos grasos, misma que será descrita en secciones posteriores (4.1.1 y 4.1.2).

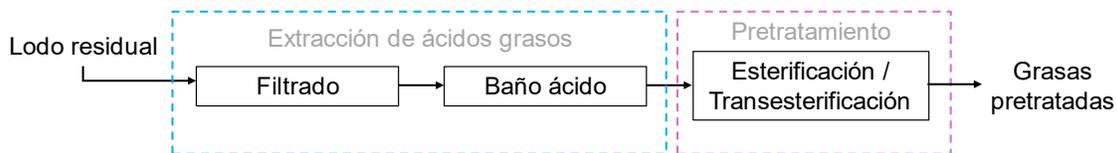


Figura 2. Proceso para la extracción y pretratamiento de los ácidos grasos presentes en el lodo residual. Líneas discontinuas azules (--) representan la etapa de extracción de los ácidos grasos; Líneas discontinuas rosas (-) representan la etapa de pretratamiento de los ácidos grasos.

4.1.1. Extracción de ácidos grasos.

La extracción de la fase de ácidos grasos libres y triglicéridos se llevó a cabo mediante 2 métodos: *i)* método de jeringa y *ii)* método sólido. El método de jeringa consiste en retirar la grasa de la fase superior con ayuda de una jeringa para su posterior almacenamiento. Este proceso se realiza a una temperatura de 80° C y toma alrededor de 20 minutos. Por otro lado, el método sólido consiste en retirar la grasa solidificada (8 horas después del baño ácido) de la parte superior de las fases usando espátulas metálicas. Este proceso se realiza a 25° C y toma alrededor de 1 hora.

4.1.2 Pretratamiento de las grasas residuales para la producción de biodiésel.

El biodiésel producido se caracterizó mediante cromatografía de gases (GC) empleando un detector de ionización de flama (FID) y una columna Stabilwax GC column (30 m x 0.32 mmID x 0.25 µm) para la identificación de los compuestos presentes en el sistema.

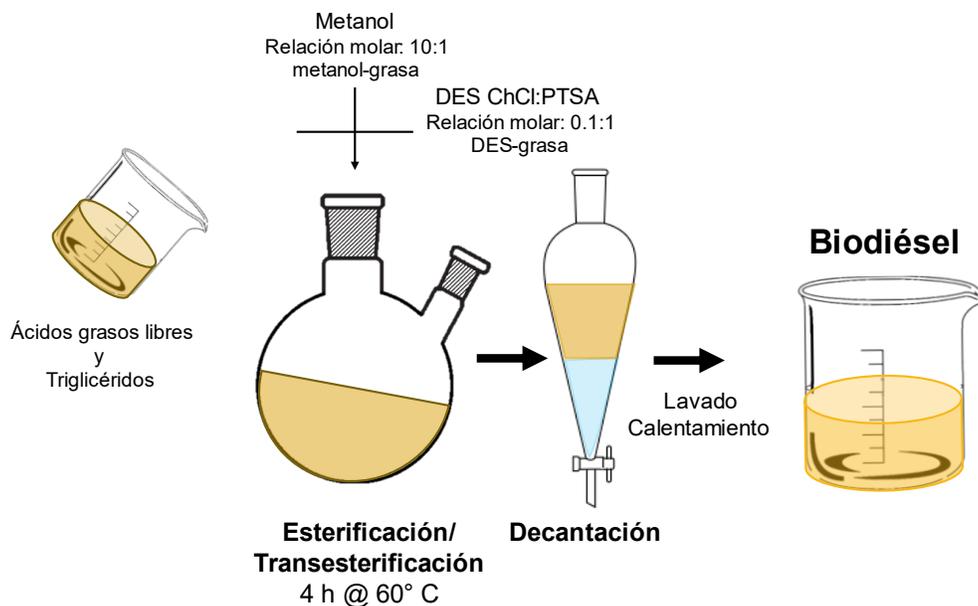


Figura 4. Proceso de pretratamiento de las grasas residuales.

4.2. Síntesis del soporte y los catalizadores de metal soportado.

4.2.1. Síntesis del soporte (zeolita SAPO-11).

La zeolita SAPO-11 se utilizó como soporte de los catalizadores. La síntesis de la zeolita se realizó siguiendo la metodología propuesta por Lok *et al.* (1987) ^[44] en la patente US4440871A. La figura 5 muestra la metodología que se siguió para la síntesis de la zeolita SAPO-11. Primero, se mezclaron 11.51 g de agua destilada con 4.61 g de ácido fosfórico (H_3PO_4) ($\geq 85\%$, J.T. Baker) durante 10 min a 650 rpm usando una plancha con agitador magnético. Después, se añadieron 6.47 g de isopropóxido de aluminio ($C_9H_{21}AlO_3$) ($\geq 98\%$, Sigma-Aldrich) a la mezcla preparada anteriormente y se agitó durante 1 hora a 650 rpm. Por último, a la mezcla resultante se añadieron 0.38 g de sílica coloidal (SiO_2) al 30% en peso (30% m/m, Sigma-Aldrich) y 1.56 g de di-n-propilamina (DPA) (≥ 98 , Sigma-Aldrich), utilizada como agente director de estructura. Se dejó la mezcla en agitación durante 10 min a 650

rpm. Los procesos de mezclado se realizaron a una temperatura de 25° C, aproximadamente. La masa utilizada de cada reactivo fue la suficiente para lograr una relación molar final de 0.032 Al: 0.042 P: 0.006 SiO₂.

La mezcla se trasvasó a una autoclave de acero inoxidable con un recubrimiento de teflón donde se realizó la síntesis hidrotermal de la zeolita. Se calentó la autoclave hasta 200° C y se agitó a 350 rpm durante 48 horas.

Pasadas las 48 horas, la zeolita se lavó y se filtró al vacío utilizando agua desionizada mediante papel filtro Whatman número 5 para posteriormente secarla en un horno eléctrico a 65° C. Una vez seca, la zeolita se transfirió a un crisol para su posterior calcinación. La zeolita se calcinó a 600° C en una mufla durante 24 horas. El sólido resultante a la calcinación es la zeolita SAPO-11.



Figura 5. Síntesis de la zeolita SAPO-11.

4.2.2. Síntesis de los catalizadores de Ni y Cu.

4.3. Caracterización del soporte y los catalizadores del metal soportado.

La caracterización de la zeolita SAPO-11 y los catalizadores de Ni y Cu se realizó mediante difracción de rayos X (XRD) para identificar sus fases cristalinas. Se utilizó el equipo X Philips X'PERT MPD y radiación de Cu- $k\alpha$, con una longitud de onda de 1.54056 Å. El voltaje y la intensidad de la corriente fueron de 40 kV y 40 mA, respectivamente. Se consideró una tasa de adquisición de datos de $0.05^\circ 2\theta$ durante 0.5 segundos, considerando el rango de 0° a $80^\circ 2\theta$.

Se realizó un análisis de fisisorción de N_2 utilizando un porosímetro Micrometrics Gemini V a temperatura de 77 K. Las muestras se desgasificaron previamente mediante un flujo de nitrógeno a una temperatura de $375^\circ C$ durante 2 horas. Mediante el método de Brunauer-Emmett-Teller (BET) y Barrett-Joyner-Halenda (BJH) se determinó el área superficial, diámetro y volumen de poro del soporte. Además, las muestras fueron observadas y fotografiadas empleando un microscopio electrónico de barrido (SEM). Se utilizó el equipo Zeiss GeminiSEM500 operando al alto vacío con una aceleración de voltaje de 2 kV a diferentes magnitudes (113 X- 20 kX). Las muestras fueron colocadas y soportadas en un porta muestras de aluminio con pegatina de carbono para su análisis y mapeo elemental de compuestos presentes en el soporte. La composición elemental de las muestras se determinó mediante un espectroscopio de energía dispersiva (EDS o EDX por sus siglas en inglés) con un detector de 80 mm^2 y un voltaje de aceleración de 10 kV (Oxford Instruments).

Para los catalizadores, la temperatura de reducción se evaluó mediante reducción de temperatura programada (TPR) para los dos metales. Se utilizó un reactor de cuarzo con una velocidad de calentamiento de 5° C/min con un flujo de 10% H₂ – 90% N₂ utilizando 1 mg de muestra para el análisis. Se detectó el consumo de hidrógeno con un detector de conductividad térmica (TCD).

4.4. Síntesis y caracterización de bioturbosina y mezclas

4.4.1. Síntesis y caracterización de bioturbosina

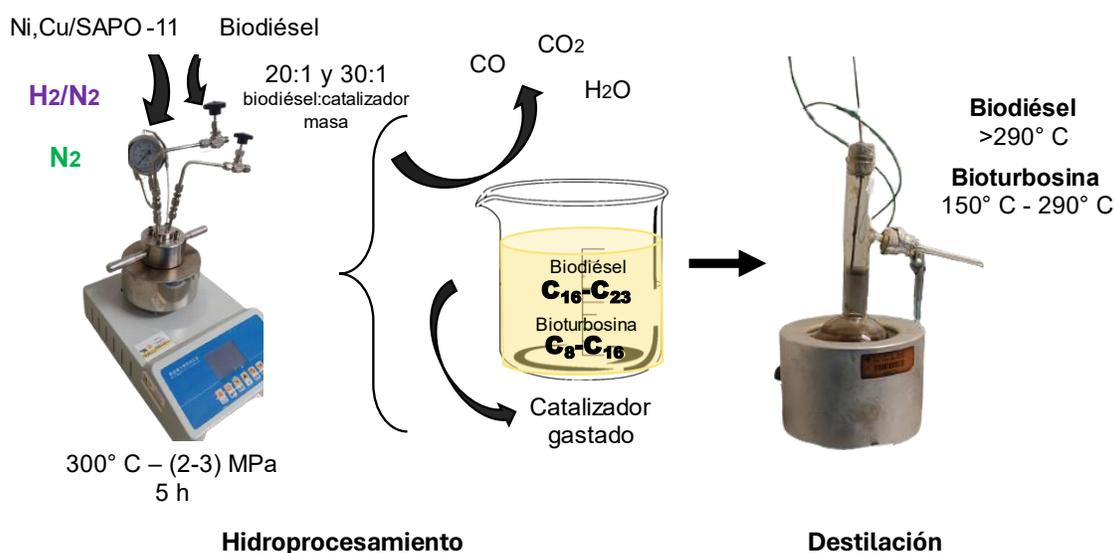


Figura 7. Condiciones de reacción para la producción de bioturbosina.

En una autoclave de acero inoxidable de 50 mL, se alimentaron 35 mL del biodiésel producido en la etapa de pretratamiento de los AGL y triglicéridos (Sección 4.1.2). Posteriormente, se añadió catalizador (Ni/SAPO-11 y Cu/SAPO-11) a diferentes relaciones masa de biodiésel-catalizador (20:1 y 30:1). Para los cuatro catalizadores sintetizados estas relaciones de alimentación fueron definidas de acuerdo con experimentos similares reportados en la literatura. La autoclave se presurizó a 2

MPa de presión, empleando 2 atmósferas de reacción: i) 35% H_2 /65% N_2 y ii) 100 % N_2 .

Tabla 4. Claves de experimentos.

Clave	Catalizador	Relación biodiésel:catalizador
<i>Atmósfera de reacción 35% H_2/ 65% N_2</i>		
BJF 1	4% Ni/SAPO-11	20:1
BJF 2		30:1
BJF 3	6% Ni/SAPO-11	20:1
BJF 4		30:1
BJF 5	4% Cu/SAPO-11	20:1
BJF 6		30:1
BJF 7	6% Cu/SAPO-11	20:1
BJF 8		30:1
<i>Atmósfera de reacción 100 % N_2</i>		
BJF N_2 1	4% Ni/SAPO-11	20:1
BJF N_2 2		30:1
BJF N_2 3	6% Ni/SAPO-11	20:1
BJF N_2 4		30:1
BJF N_2 5	4% Cu/SAPO-11	20:1
BJF N_2 6		30:1
BJF N_2 7	6% Cu/SAPO-11	20:1
BJF N_2 8		30:1

Pasadas las 5 h de reacción, se dejó enfriar el reactor por convección natural. El catalizador fue retirado por filtración. Mediante destilación simple y temperaturas de corte reportadas en literatura se separaron los productos sintetizados durante la reacción HEFA. A continuación, se muestran los intervalos de temperatura que se emplearon para la obtención de los distintos productos:

- Biogasolina: 80° C - 150° C
- Bioturbosina: 150° C – 290° C
- Biodiésel: >290° C

La composición de la bioturbosina sintetizada se determinó mediante cromatografía de gases (GC) empleando un detector de ionización de flama (FID) y una columna

Agilent J&W GC column (30 m x 0.25 mmID x 0.25 mm). El cromatógrafo se programó fijando una temperatura inicial de la columna de 40° C, una rampa de calentamiento de 5° C/min hasta los 300° C, temperaturas del inyector y detector de 340° C y utilizando H₂ como gas de arrastre a una presión de 10 psi.

Se caracterizaron las propiedades termodinámicas y de transporte de la bioturbosina pura. La norma ASTM D1655, establece los límites mínimos y máximos permisibles para las distintas propiedades de los combustibles destinados a la aviación civil. La tabla 5 muestra los límites establecidos por la norma junto con los métodos experimentales para la determinación de las propiedades fisicoquímicas de la turbosina. La densidad, viscosidad, e índice de refracción se evaluaron en un rango de temperaturas 288.15 a 338.15 K con el propósito de elucidar el efecto de la temperatura sobre la propiedad.

La viscosidad fue evaluada mediante viscosímetros Ace Glass tamaño 75 (modelo 7988). Los viscosímetros residen dentro de baños de recirculación (Isotemp 3016D) que permiten el control de la temperatura. La viscosidad se determina multiplicando el tiempo que tarda en descender el fluido entre dos marcas por una constante de calibración.

El índice de refracción (IR) se midió mediante un refractómetro Abbermat 300. La muestra colocada en el prisma de vidrio es irradiada de diferentes ángulos mediante una luz LED. El equipo mide el ángulo crítico de refracción total y a partir de éste se obtiene el IR de la muestra.

4.4.2. Síntesis y caracterización de mezclas bioturbosina - aditivos

Se prepararon mezclas de bioturbosina y éteres de glicol en todo el rango de concentraciones de 0.1 hasta 0.9 con incrementos de 0.1 en fracción peso del aditivo. Como aditivos para la bioturbosina, se propusieron dietilenglicol monometil éter (DME), dietilenglicol monoetil éter (DEE) y el dietilenglicol monobutil éter (DBE). La caracterización de las propiedades fisicoquímicas de las mezclas de bioturbosina-aditivos se llevó a cabo de manera similar a la caracterización de la bioturbosina pura para las propiedades de densidad, viscosidad e índice de refracción. La determinación de estas propiedades se realizó de 15° a 65° C para evaluar el efecto de la temperatura sobre estas propiedades. Los valores obtenidos fueron comparados con los límites establecidos por la norma ASTM D1655.

4.4.2.1. Ajuste de las propiedades fisicoquímicas a modelos y correlaciones empíricas.

En esta sección se presenta el ajuste de la densidad, viscosidad e índice de refracción de las mezclas bioturbosina a diferentes modelos y correlaciones empíricas con el propósito de evaluar la calidad de los datos experimentales medidos. La implementación de correlaciones a estas propiedades permite que puedan ser estimadas a diferentes condiciones de temperatura y composición. Esto es esencial para el diseño de los componentes de los sistemas de turbo inyección, donde las propiedades de los combustibles varían respecto a la temperatura.

Las viscosidades de las mezclas de bioturbosina-aditivo fueron correlacionadas mediante la ecuación propuesta por McAllister ^[45] (Ecuación 1).

$$\begin{aligned} \ln v_m = & x_1^3 \ln v_1 + 3x_1^2 x_2 \ln v_{12} + 3x_1 x_2^2 \ln v_{21} + x_2^3 \ln v_2 - \ln [x_1 + x_2 M_2/M_1] \quad (1) \\ & + 3x_1^2 x_1 \ln [(2 + M_2/M_1)/3] + 3x_1 x_2^2 \ln [(1 + 2M_2/M_1)/3] \\ & + x_2^3 \ln (M_2/M_1) \end{aligned}$$

Donde v_m es la viscosidad cinemática de la mezcla; x_i , v_i y M_i son la fracción molar, la viscosidad cinemática y la masa molar del compuesto puro i , respectivamente; v_{12} y v_{21} son parámetros de ajuste. El bias, la desviación porcentual absoluta máxima (DPAM), la desviación promedio porcentual absoluta (DPPA) y la desviación estándar (DE) fueron estimadas a partir de los datos experimentales y calculados mediante las correlaciones. Los parámetros fueron deducidos mediante las ecuaciones: 2, 3, 4 y 5, como se muestra a continuación,

$$\text{bias} = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \frac{J_i^{exp} - J_i^{calc}}{J_i^{exp}} \quad (2)$$

$$\text{DPAM} = \text{Max} \left[\frac{|J_i^{exp} - J_i^{calc}|}{J_i^{exp}} \cdot 100 \right] \quad (3)$$

$$\text{DPPA} = \frac{100}{N} \left[\sum_{i=1}^N \frac{|J_i^{exp} - J_i^{calc}|}{J_i^{exp}} \cdot 100 \right] \quad (4)$$

$$\text{DE} = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (J_i^{exp} - J_i^{calc})^2}{N - n} \right]^{1/2} \quad (5)$$

Donde J_i^{exp} y J_i^{calc} son los valores experimentales y calculados mediante la ecuación 1, respectivamente; N son el número de valores experimentales; n es el número de parámetros.

También, la viscosidad cinemática (v_m) de las mezclas se correlacionó de acuerdo con la ecuación 6 propuesta por Nava-Ríos *et al* [46].

$$\ln v_m = -\ln(M_{mix}) + x_1 \ln v_1 + x_1 \ln M_1 + x_2 \ln v_2 + x_2 \ln M_2 + x_1 x_2 [\ln \delta v_{12} + x_1^3 \ln \delta v_{12}^* + x_2^3 \ln \delta v_{21}^* + x_1 \ln \left(\frac{M_{112}^3}{M_1^2 M_2} \right) + x_2 \ln \left(\frac{M_{122}^3}{M_1 M_2^2} \right)] \quad (6)$$

Donde (x_1, x_2) , (v_1, v_2) y (M_1, M_2) son las fracciones molares, viscosidades cinemáticas y la masa molar de la bioturbosina (1) y el aditivo (2). M_{112} y M_{122} son la masa molar promedio de las especies; δv_{12} , δv_{12}^* y δv_{21}^* son los coeficientes dependientes de la temperatura estimados mediante el método de mínimos cuadrados a partir de los valores experimentales de viscosidad.

Además, con el fin de determinar la viscosidad cinemática de los compuestos puros y las mezclas a diferentes temperaturas a las utilizadas en este trabajo, se empleó la ecuación 7 propuesta por Cano-Gómez [47].

$$\ln v_m = \left(k_1 + \frac{k_2}{T} \right) + \left(k_3 + \frac{k_4}{T} \right) x_2 + \left(k_5 + \frac{k_6}{T} \right) x_2^2 \quad (7)$$

Donde k_i corresponde a los parámetros de ajuste del modelo, T es la temperatura a la que se quiere predecir la viscosidad (K) y x_2 es la fracción mol del aditivo en la mezcla.

Por último, la densidad y el índice de refracción se correlacionaron a las ecuaciones propuestas por Vargas-Ibáñez *et al* [48]. La ecuación 8, muestra el modelo utilizado para la correlación del índice de refracción.

$$n_D = k'_1 + k'_2 \cdot x_2 + (k'_3 + k'_4 \cdot x_2) \cdot T \quad (8)$$

Donde x_2 y k'_i son la fracción mol del aditivo y el parámetro de ajuste independiente de la temperatura, respectivamente; y T es la temperatura en K.

La ecuación 9 muestra la ecuación utilizada para la correlación de las medidas experimentales de densidad:

$$\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^3) = \frac{n_D^2 - 1}{n_D + 0.4} \cdot \frac{1}{a + b \cdot x_2 + c \cdot x_2^2} \quad (9)$$

Donde ρ y n_D son la densidad e índice de refracción de la mezcla, x_2 es la fracción mol del aditivo; a , b y c son parámetros de ajuste.

4.4.2.2. Elucidación de las interacciones moleculares presentes en las mezclas bioturbosina-aditivos.

La interpretación de las interacciones intermoleculares presentes en las mezclas bioturbosina es esencial para elucidar el efecto de los éteres de glicol como nuevos aditivos de la bioturbosina. La estimación de propiedades termodinámicas como el volumen molar en exceso (V^E), desviación de la viscosidad ($\Delta\eta$) y desviación del índice de refracción (Δn_D) nos permiten comprender el tipo de interacciones presentes en la solución.

El V^E se calculó a partir de los valores experimentales mediante la ecuación 10.

$$V^E = x_1 M_1 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_1} \right) + x_2 M_2 \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_2} \right) \quad (10)$$

Donde ρ es la densidad de la mezcla (g/cm^3), ρ_1 y ρ_2 son las densidades de los compuestos puros (bioturbosina (1) y aditivo (2)); M_1 y M_2 son los pesos moleculares de los compuestos 1 y 2; x_1 y x_2 son las fracciones mol de bioturbosina y aditivo, respectivamente.

La $\Delta\eta$ se determinó a partir de la ecuación 11.

$$\Delta\eta = \eta - \sum_{i=1}^2 x_i \eta_i \quad (11)$$

Donde η y η_i son las viscosidades dinámicas de las mezclas y los compuestos puros ($\text{mPa}\cdot\text{s}$), respectivamente, x_i es la fracción molar del compuesto i .

Por otro lado, la Δn_D fue calculada mediante la ecuación 12.

$$\Delta n_D = n_D - \sum_{i=1}^2 x_i n_{D_i} \quad (12)$$

Donde n_D y n_{D_i} son los índices de refracción de las mezclas y los compuestos puros, respectivamente.

Para las propiedades derivadas, se realizó el ajuste con el modelo de Redlich-Kister ^[49] (RK) con el fin de obtener los parámetros del modelo para la predicción de las propiedades de las mezclas binarias de bioturbosina-aditivos a distintas concentraciones. La ecuación 13 muestra el modelo de RK que se empleó para el ajuste.

$$J^E = x_1 x_2 \sum_{i=0}^n a_i (x_1 - x_2)^i \quad (13)$$

Donde J^E es el V^E , $\Delta\eta$, Δn_D ; x_1 y x_2 es la fracción molar de bioturbosina (1) y de aditivo (2); a_i son los coeficientes ajustables del modelo.

4.5. Análisis de ciclo de vida (ACV)

La evaluación de impacto ambiental se llevó a cabo siguiendo la metodología estandarizada establecida en las normas ISO 14040-14044 [27,28]. Existen dos enfoques distintos para realizar el ACV: *i*) atribucional y *ii*) consecuencial. Los ACV atribucionales estiman las emisiones de contaminantes y la demanda de insumos para satisfacer una unidad funcional. Por otro lado, los ACV consecuenciales analizan la variación de las emisiones de contaminantes y la demanda de insumos del sistema en función de un cambio en la unidad funcional [50,51]. Para este trabajo, se realizó un análisis de ciclo de vida atribucional.

El ACV consta de cuatro etapas que se retroalimentan iterativamente (Figura 8):

- i) **Definición de objetivo y alcance:** Se determinan los límites del estudio, la unidad funcional y el objetivo del análisis.
- ii) **Inventario de ciclo de vida:** Análisis y recolección de los datos derivados de la estimación de masa y energía de las etapas o procesos que se encuentran dentro de los límites de estudio.
- iii) **Evaluación de impacto ambiental:** Mediante indicadores ambientales, se determina el impacto ambiental del proceso de estudio.

- iv) **Interpretación:** A partir de la etapa anterior, se analizan los resultados de las distintas etapas con el fin de identificar áreas en pro de proponer alternativas que permitan reducir la contribución al impacto ambiental del proceso, producto o servicio que se evalúa.

A continuación, se describe la metodología de cada una de las etapas del ACV aplicadas al proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales.



Figura 8. Etapas del análisis de ciclo de vida (ACV).

4.5.1. Definición de objetivo y alcance

El objetivo de este análisis es evaluar el impacto ambiental del proceso de producción de bioturbosina a partir de las grasas extraídas de los lodos residuales a dos escalas: *i*) escala laboratorio y *ii*) escala industrial. Se delimitaron como fronteras del estudio desde la recolección de los lodos residuales hasta la producción de bioturbosina, como se muestra en la figura 9. Se consideró como unidad funcional (UF) para las dos escalas de estudio (escala laboratorio e

industrial), la producción de 1 MJ de bioturbosina sintetizada mediante HEFA a partir de lodos residuales de la planta de tratamiento noroeste de la empresa de servicios de Agua y Drenaje de Monterrey. Se consideró fuera de las fronteras de estudio el impacto ambiental asociado a la construcción, infraestructura, mantenimiento y ensamble de equipos, considerando que el impacto ambiental asociado a estos no será significativo comparado con el proceso productivo a lo largo de la vida útil de la biorrefinería.

4.5.2. Evaluación del inventario ambiental de ciclo de vida: Escala laboratorio.

El inventario de ACV para la escala laboratorio se construyó con base en los balances de materia calculados teóricamente conforme a los resultados obtenidos experimentalmente. Para las etapas de extracción y pretratamiento de las grasas residuales, el inventario fue tomado del trabajo reportado por Moreno-Caballero [43].

La demanda energética de las etapas extracción de ácidos grasos, pretratamiento, síntesis de zeolita, síntesis de catalizadores, hidroprocesamiento y separación de productos se estimó mediante modelos matemáticos en los que se consideraron el calor sensible, de mantenimiento y energía de mezclado. El calor sensible ($Q_{sensible}$) se estimó mediante las ecuaciones propuestas por Smith *et al.* (Ecuación 14) [52], por su parte, el calor de mantenimiento (Q_{mto}), ecuación 15, se evaluó a partir de los modelos propuestos por Nusselt y Rayleigh para operaciones con y sin agitación, respectivamente (Ecuación 16 y Ecuación 17) [53].

$$Q_{sensible} = \dot{m}Cp_{mix}\Delta T_i \quad (14)$$

$$Q_{mtto} = A U \Delta T_o \quad (15)$$

$$Nu = 0.36 Re^{0.67} Pr^{0.33} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (16)$$

$$Nu = 1 + 1.44 \left[1 - \frac{1708}{Ra_L} \right] + \left[\frac{Ra_L^{1/3}}{18} - 1 \right] \quad (17)$$

Donde \dot{m} es el flujo másico de la corriente que entra al proceso (kg/d) , Cp_{mix} es la capacidad calorífica de la mezcla en el proceso (kJ/kg K), ΔT_i es la diferencia de temperatura entre la temperatura final e inicial (K), A es el área de transferencia de calor (m^2), U es el coeficiente global de transferencia de calor ($W/m^2 \text{ } ^\circ C$), ΔT_o es la diferencia de temperatura entre la temperatura del sistema y la temperatura ambiente (K), Re es el número de Reynolds, Pr es el número de Prandtl y Ra_L es el número de Rayleigh.

Para estimar el requerimiento energético por el mezclado (E_{mix}) y la separación de los productos (Q_{dest}) se utilizaron los modelos propuestos por Piccinno *et al.*^[31] para etapas de agitación y destilación, respectivamente. La ecuación 18 y ecuación 19 muestran los modelos utilizados para estimar el requerimiento energético de las etapas mencionadas anteriormente.

$$E_{mix} = \frac{N_p \rho_{mix} N^3 d^5 t}{n_{stir}} \quad (18)$$

$$Q_{dest} = \frac{\sum_{i=0}^1 \dot{m}_i Cp_{i,(298.15 K)} (T_{boil} - T_1) + \Delta H_{vap} m_{dest} (1.2 R_{min} + 1)}{n_{heat} - 0.1} \quad (19)$$

Donde N_p , N , d son parámetros asociados a la potencia de la aleta, la velocidad de agitación y el diámetro del impeler, respectivamente. Estos parámetros establecidos por Piccinno *et al.* ^[31] se encuentran en función de la capacidad volumétrica del

mezclador. ρ_{mix} es la densidad de la mezcla (kg/m^3), t es el tiempo de mezclado (s), n_{stir} es la eficiencia de mezclado fijada a 90%. Por otro lado, \dot{m}_i y Cp_i son el flujo másico y capacidad calorífica de la especie i que se destila, T_{boil} es la temperatura de ebullición de la especie más volátil (K), T_1 es la temperatura inicial a la que se encuentra la corriente (K), ΔH_{vap} es la entalpía de vaporización del compuesto más volátil (kJ/kg), m_{dest} es la masa del compuesto más volátil que se destila (kg/d), R_{min} es el reflujo mínimo en la sección de enriquecimiento de la torre de destilación y n_{heat} es la eficiencia de calentamiento fijado en 80%.

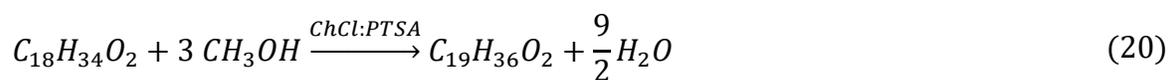
4.5.3. Evaluación del inventario ambiental de ciclo de vida: Escala industrial.

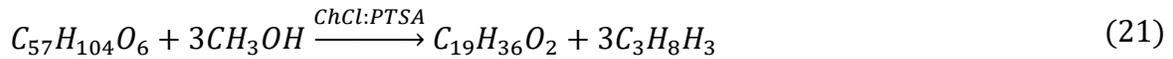
A escala industrial se evaluaron y compararon tres escenarios diferentes: *i*) simulación de DWSIM y *ii*) Piccinno *et al.* (2016) ^[31] y *iii*) simulación de ASPEN. La estimación de la demanda energética para los escenarios *i*) y *iii*) se obtuvo a partir de los resultados obtenidos de los balances de energía proporcionados por los softwares DWSIM V8.6.1 y ASPEN V.12, para la simulación del proceso de producción, mientras que para el escenario *ii*) se utilizaron los modelos propuestos por Piccinno *et al.* (2016) ^[31]. Mediante esta comparación podremos evaluar la similitud o desigualdad, entre la estimación del software y del modelo simplificado, con el fin de establecer un antecedente que sirva como herramienta de decisión entre utilizar una u otra metodología en los análisis de ACV *ex-ante*. Para los procesos en segundo plano como la producción de energía eléctrica e insumos utilizados durante el proceso se utilizó la base de datos de Ecoinvent V.3.7.1.

4.5.3.1. Estimación de la demanda energética mediante la simulación.

Se emplearon dos softwares para simular el proceso de producción de bioturbosina a escala industrial, DWSIM V.8.6.1 y ASPEN V.12. La figura 10 muestra el diagrama de flujo del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala industria (ASPEN V.12). En el anexo 1 se puede consultar el diagrama de flujo realizado en DWSIM V.8.6.1. Se estableció como base de cálculo la producción anual de 170 m³/año de bioturbosina [54]. A partir de los resultados experimentales, se programaron las corrientes de entradas, salidas, residuos y corrientes de servicio en la simulación. Se emplearon los modelos termodinámicos de *non-random two liquids* (NRTL) y Peng-Robinson (PR) para la estimación de las propiedades de los componentes puros y de mezcla, así como, las fases de las corrientes de masa en la simulación en la escala industrial. La demanda energética de las operaciones de separación, calentamiento y enfriamiento se obtuvieron a partir de los modelos propuestos por el software. Análogo a la escala laboratorio, el modelo de Piccinno *et al.* (2016) [31] fue utilizado para determinar el requerimiento energético de las operaciones de mezclado en función del flujo volumétrico. La destilación de los productos se simuló mediante el software de ChemSep/CAPE-OPEN V.2.0.0.10.

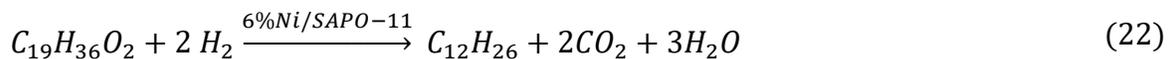
Con base en los resultados experimentales, se estableció un rendimiento de 55% en la extracción de grasas posterior al proceso del baño ácido. Las ecuaciones 20 y 21, muestra las reacciones de esterificación y transesterificación propuestas para este trabajo.





Para el modelamiento de la grasa se consideraron el ácido oleico ($C_{18}H_{34}O_2$) y la trioleína ($C_{57}H_{104}O_6$) como especies representativas de los ácidos grasos libres y triglicéridos, respectivamente, presentes en el lodo residual. Con base en los resultados experimentales, se consideró un 97% de rendimiento para la reacción de esterificación/transesterificación correspondiente al pretratamiento de las grasas residuales [43].

Tomando en cuenta la producción anual de distintas plantas industriales dedicadas a la producción de catalizadores [55–57] se estableció que la producción anual del catalizador 6%Ni/SAPO-11 fue de 34.77 Mt anuales. La reacción de desoxigenación (DCO) mediante hidropesamiento se estableció de acuerdo con la ecuación 22, análogo a la escala laboratorio, se supuso un porcentaje de conversión del biodiésel de 35% basado en los resultados experimentales.



4.5.3.2. Estimación de la demanda energética mediante los modelos de Piccinno et al. (2016)^[31].

En el escenario *ii*) se evaluaron los mismos procesos de operación que en los escenarios industriales *i* y *iii*). La diferencia entre los escenarios estudiados reside en que los requerimientos energéticos del escenario *ii*) fueron evaluados mediante los modelos propuestos por Piccinno et al. (2016) [31]. La ecuación 23 muestra el

modelo utilizado para estimar el requerimiento energético (Q_{react}) de las etapas donde se somete a calentamiento el flujo de proceso.

$$Q_{react} = \frac{C_p m_{mix} (T_r - T_0) + A \frac{k_a}{s} (T_r - T_{out}) t}{\eta_{heat}} \quad (23)$$

Donde C_p es la capacidad calorífica de la corriente de flujo (J/kg K); m_{mix} es el flujo másico de la corriente de proceso (kg/h); T_r , T_0 y T_{out} son la temperatura final del calentamiento, la temperatura inicial y la temperatura de los alrededores (K), respectivamente; A es el área de transferencia de calor (m²); k_a es la conductividad térmica del aislante (W/m K); s es el espesor del aislante; t es el tiempo de operación (s); η_{heat} es la eficiencia de calentamiento (%). La demanda energética para operaciones de secado (Q_{dry}) se evaluó conforme a la ecuación 24.

$$Q_{dry} = \frac{C_{p,liq} m_{liq} (T_{boil} - T_0) + \Delta H_{vap} m_{vap}}{\eta_{dry}} \quad (24)$$

Donde $C_{p,liq}$ es la capacidad calorífica del agua que se evapora (J/kg K); m_{liq} es el flujo másico de agua que se va a evaporar (kg/h); T_{boil} y T_0 son la temperatura de ebullición del agua y la temperatura inicial (K), respectivamente; ΔH_{vap} es la entalpía de vaporización del agua (kJ/kg); m_{vap} es la masa de agua evaporada (kg/h); y η_{heat} es la eficiencia del secado (%). Para las operaciones de mezclado y destilación se estimó el consumo energético mediante las ecuaciones 18 y 19. Para este escenario, se consideró la misma capacidad de producción de bioturbosina y catalizadores, así como, los mismos rendimientos para la extracción de grasas

(55%), reacciones de esterificación-transesterificación (97%) y de hidroprocesamiento (35%) descritos en la sección anterior (4.5.3.1).

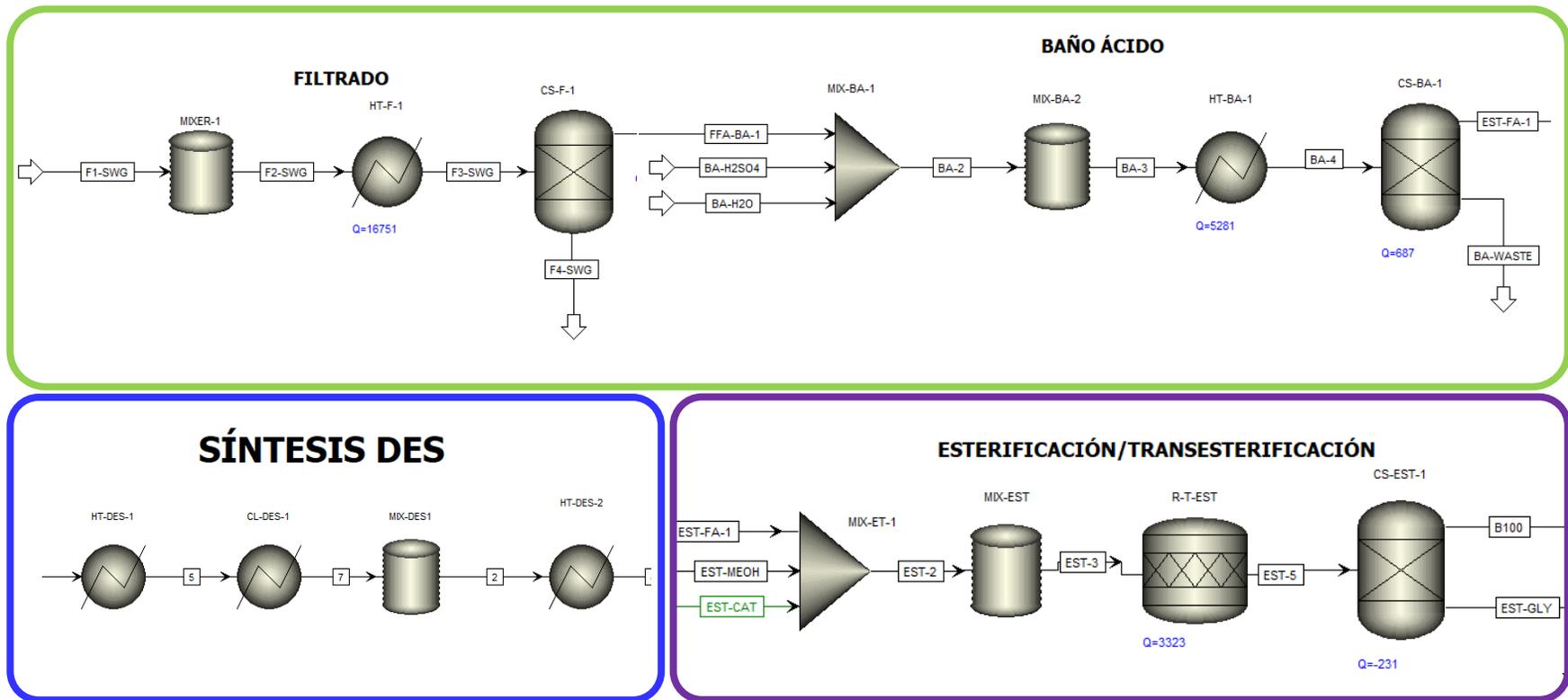


Figura 10. Diagrama de proceso de flujo del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala industrial. ■, Extracción de ácidos grasos; ■, Síntesis DES; ■, Pretratamiento de ácidos grasos; ■, Síntesis de zeolita; ■, Síntesis de catalizador; ■, Hidroprocesamiento (HEFA); ■, Separación de productos.

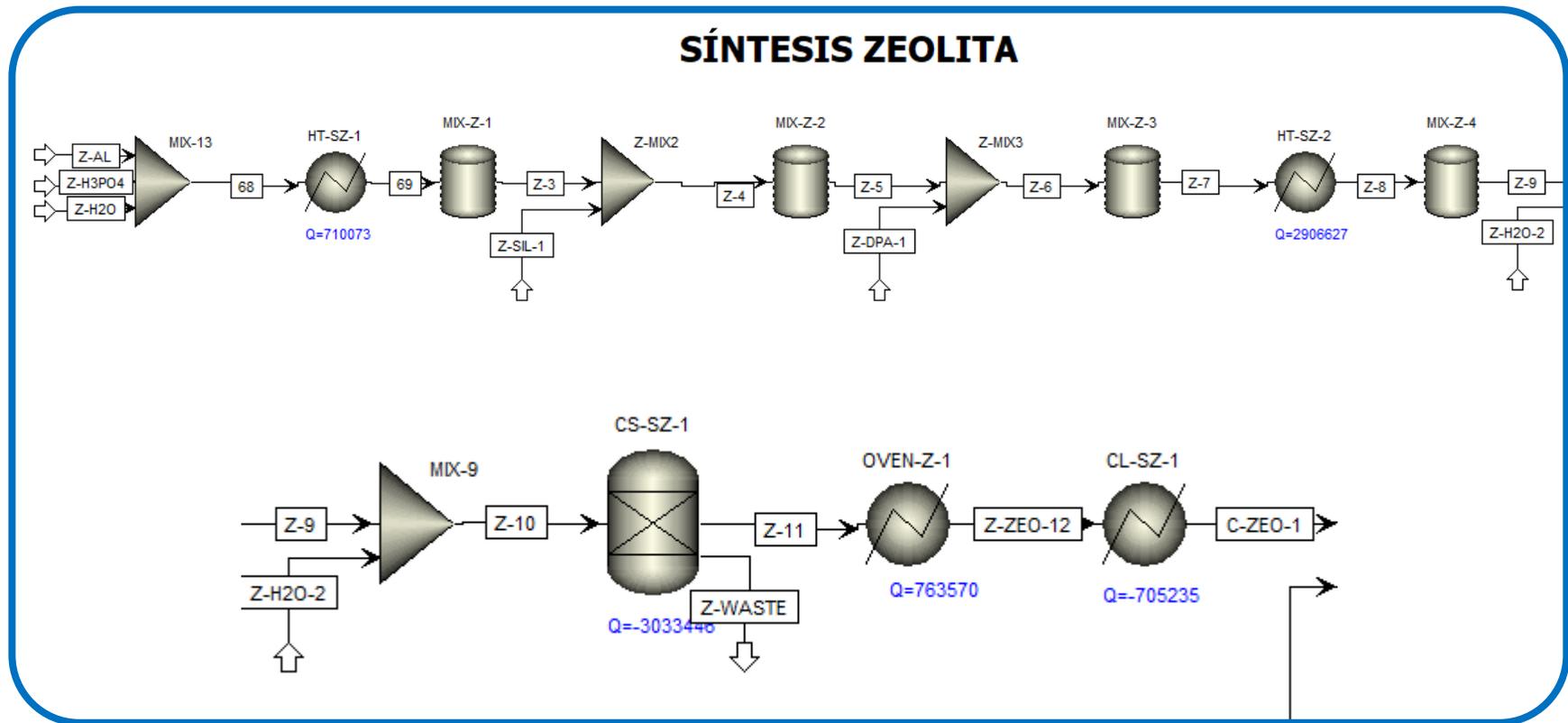


Figura 10. Diagrama de proceso de flujo del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala industrial. ■, Extracción de ácidos grasos; ■, Síntesis DES; ■, Pretratamiento de ácidos grasos; ■, Síntesis de zeolita; ■, Síntesis de catalizador; ■, Hidroprocesamiento (HEFA); ■, Separación de productos. (continuación).

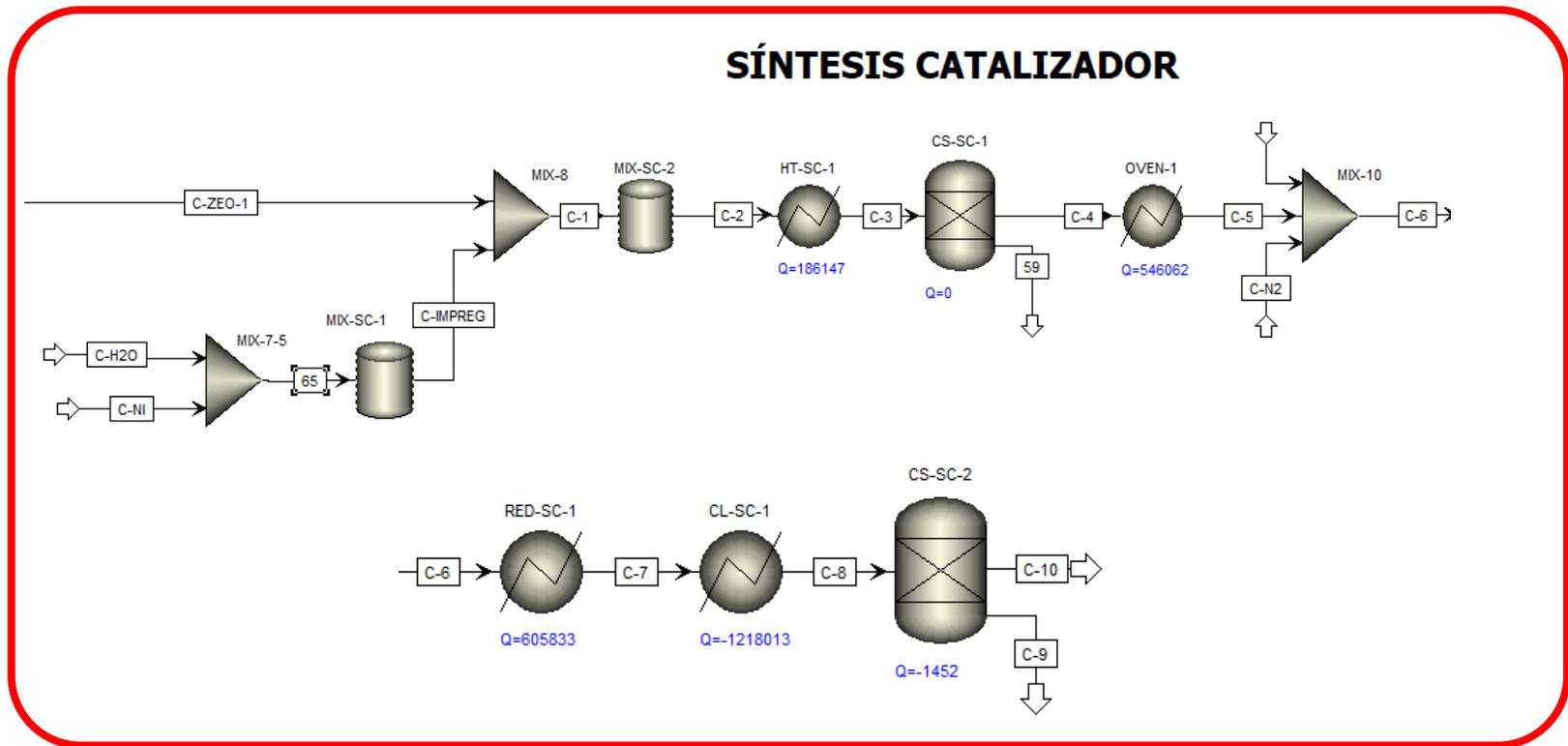


Figura 10. Diagrama de proceso de flujo del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala industrial. ■, Extracción de ácidos grasos; ■, Síntesis DES; ■, Pretratamiento de ácidos grasos; ■, Síntesis de zeolita; ■, Síntesis de catalizador; ■, Hidroprocesamiento (HEFA); ■, Separación de productos. (continuación).

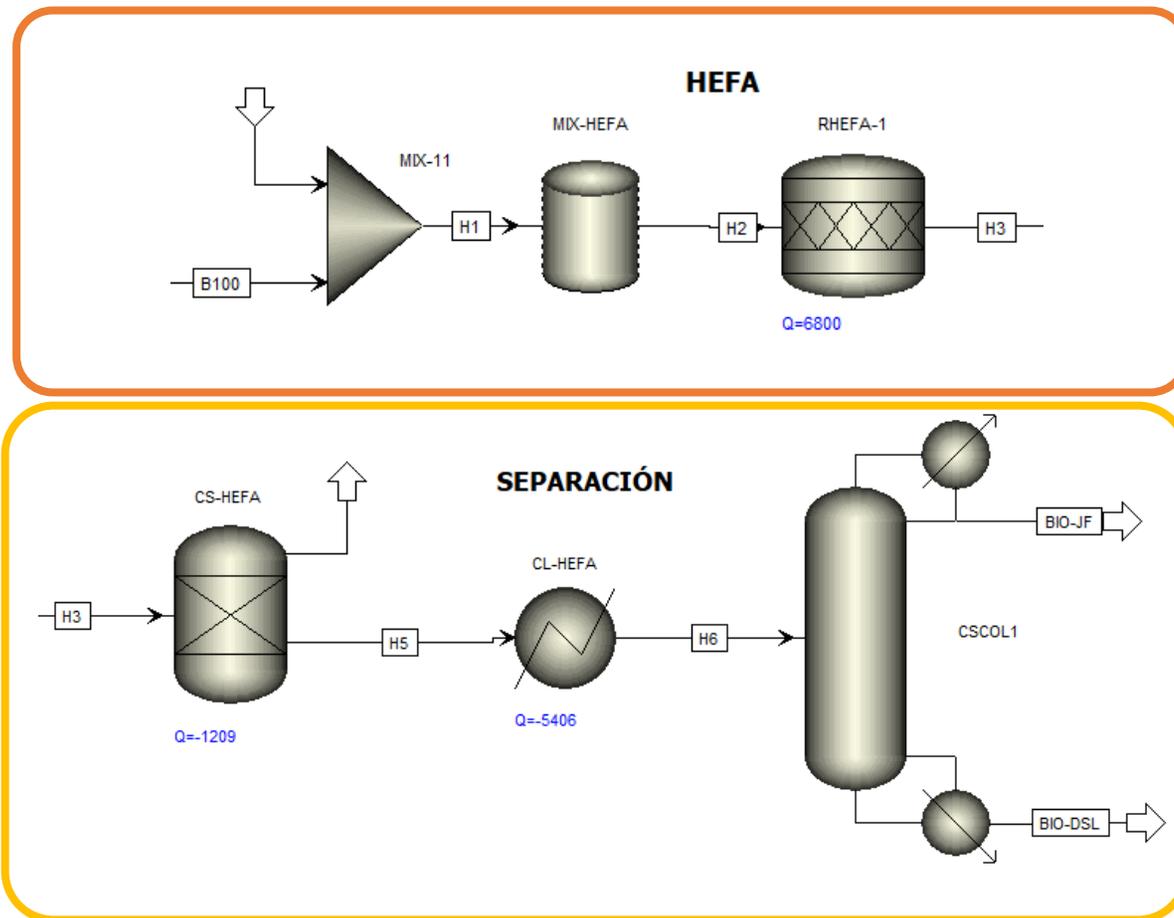


Figura 10. Diagrama de proceso de flujo del proceso de producción de bioturbosina a partir de lodos residuales a escala industrial. ■, Extracción de ácidos grasos; ■, Síntesis DES; ■, Pretratamiento de ácidos grasos; ■, Síntesis de zeolita; ■, Síntesis de catalizador; ■, Hidroprocesamiento (HEFA); ■, Separación de productos. (continuación).

4.5.4. Evaluación de impacto ambiental.

La evaluación del impacto ambiental de las dos escalas se llevó a cabo mediante el método de Environmental Footprint (EF) V.3.1. Se utilizó el software de OpenLCA V.1.9. La selección de los indicadores de impacto ambiental se llevó a cabo considerando dos metodologías: *i)* revisión de la literatura y *ii)* normalización de los indicadores de cambio climático.

5. Resultados y discusión

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para cada una de las etapas descritas en la metodología (sección 4).

5.1. Extracción de los ácidos grasos libres del lodo residual.

Los ácidos grasos fueron extraídos del lodo residual posterior a la etapa de filtración y baño ácido. Se evaluaron 2 métodos de extracción de grasas: *i*) método de jeringa y *ii*) método sólido. La tabla 6 muestra los rendimientos obtenidos para la extracción de ácidos grasos libres y triglicéridos mediante estos dos métodos de extracción. Anteriormente, Moreno-Caballero ^[58] reportó que el lodo residual empleado en este trabajo contiene aproximadamente 44.5 %p/p de grasas.

Tabla 5. Rendimiento del proceso de extracción de ácidos grasos por el método de jeringa y método sólido.

Método jeringa					
Prueba	LR (g)	LF (g)	Grasa teórica (g)	Grasa extraída (g)	Rendimiento (%)
1	104	53	46	15	32
2	141	64	63	30	48
3	146	100	65	18	27
Método sólido					
Prueba	LR (g)	LF (g)	Grasa teórica (g)	Grasa extraída (g)	Rendimiento (%)
1	152	108	68	34	50
2	100	67	45	22	49
3	90	26	40	8	20

LR: Lodo residual (peso inicial del lodo antes de filtrar)

LF: Lodo filtrado (peso del lodo después de pasar el proceso de filtración)

Cerca del 45% de la masa inicial del lodo residual se desecha como residuo al finalizar la etapa de filtrado. La variación en la cantidad de masa que se desecha en

la etapa de filtrado se debe a la cantidad de especies sólidas (residuos sólidos urbanos y residuos orgánicos como madera, hojas, entre otros) presentes en los distintos lotes de lodo. En promedio, se obtuvo un rendimiento en la extracción de grasas del 36% y 40% mediante el método de jeringa y el método sólido, respectivamente. El método sólido presenta un mejor rendimiento de extracción, no obstante, requiere más tiempo de extracción debido al proceso de solidificación de la grasa. Por otro lado, en el método de jeringa, el proceso de extracción se puede realizar inmediatamente después de haber concluido el baño ácido. No existe una diferencia significativa entre el método de jeringa y método sólido para la extracción de las grasas del lodo residual, por lo que la selección entre una metodología u otra reside en los tiempos de espera para la obtención de la grasa.

5.2. Pretratamiento de la grasa: producción de biodiésel.

La grasa residual extraída de los baños ácidos se utilizó como materia prima para las reacciones de esterificación y transesterificación. Se obtuvo un rendimiento del 97% para la producción de biodiésel, lo cual, concuerda con lo reportado anteriormente por Moreno-Caballero ^[43]. El biodiésel sintetizado se caracterizó mediante GC-FID con el fin de determinar la composición de ésteres metílicos que conforman el biocombustible. La tabla 7 muestra la composición del biodiésel sintetizado estimada a partir de los resultados de GC-FID.

La caracterización del biodiésel producido sirve como base para predecir el tipo de cadenas de hidrocarburos que pudieran estar presentes en la bioturbosina producida. Por otro lado, la producción de biodiésel como tratamiento previo a la producción de bioturbosina es esencial para promover la desoxigenación de los grupos carboxilo de los ácidos grasos libres presentes en los lodos.

5.3. Caracterización de zeolita y catalizadores.

5.3.1. Caracterización de la zeolita SAPO-11

La figura 11, muestra el difractograma de XRD obtenido para la zeolita SAPO-11.

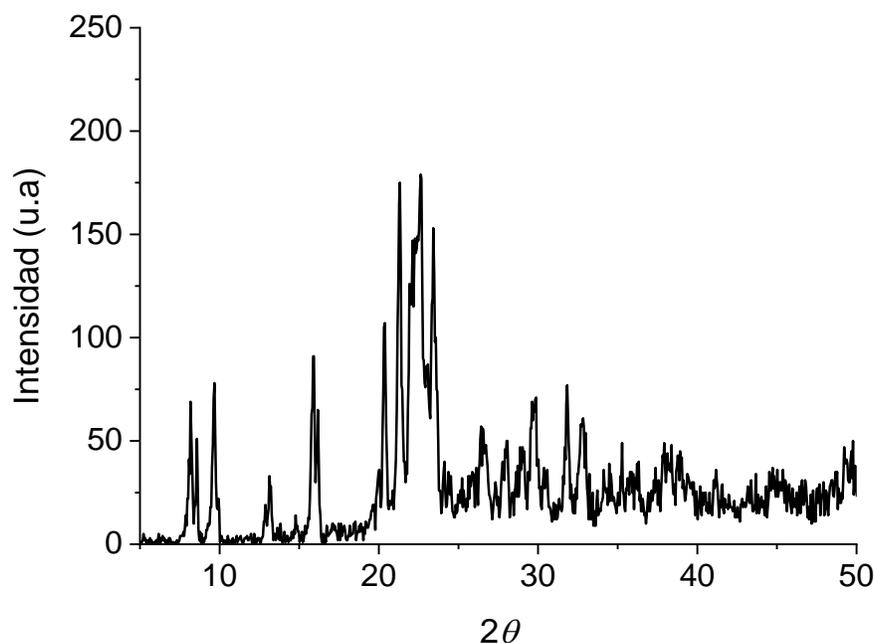


Figura 11. Difractograma de rayos-X (XRD) de la zeolita SAPO-11 sintetizada en este trabajo.

Se observan picos de difracción a 8.20° , 9.64° , 15.87° , 21.28° , 22.04° y 22.64° (y otros de menor intensidad), los cuales corresponden a los ángulos de difracción de los materiales de aluminio fosfato (V) y aluminio fosfato con planos (8.370 \AA , 18.485 \AA , 13.533 \AA y 20.870 \AA , 20.870 \AA , 5.003 \AA) de acuerdo con las cartas ICSD-63668

e ICSD-72374 respectivamente. Estas señales son características de zeolitas tipo SAPO-11.

Mediante la ecuación de Scherrer ^[60] (Ecuación 25) se determinó el tamaño promedio del cristalito de la SAPO-11.

$$t = \frac{0.9 \lambda}{B \cos(\theta)} \quad (25)$$

Donde t es el tamaño promedio del cristalito (nm), λ es el valor de longitud de onda emitido por electrodo de Cu igual a 1.5416 Å, θ es el ángulo donde se presenta el pico de mayor intensidad (°) y B que representa el ancho a media altura del pico de mayor intensidad (rad). Para la zeolita se encontró que el tamaño promedio de cristalito fue de aproximadamente 147.13 nm, el cual es mayor a lo reportado por Dai *et al.* ^[61] (2022) (81.3 nm). Esta diferencia en el tamaño promedio de los cristalitos radica en la temperatura utilizada durante la calcinación de la zeolita, donde ha temperaturas más elevadas, el tamaño de cristalito tiende a aumentar ^[62].

La zeolita se sometió a un análisis de fisisorción de nitrógeno para evaluar sus propiedades texturales. Mediante isothermas de adsorción-desorción y los métodos BET y BJH se calcularon el área superficial específica y la porosidad (distribución de tamaños de poro y volumen total de poro) de la zeolita, respectivamente. La figura 12, muestra la isoterma de absorción/desorción de N₂ de la zeolita SAPO-11.

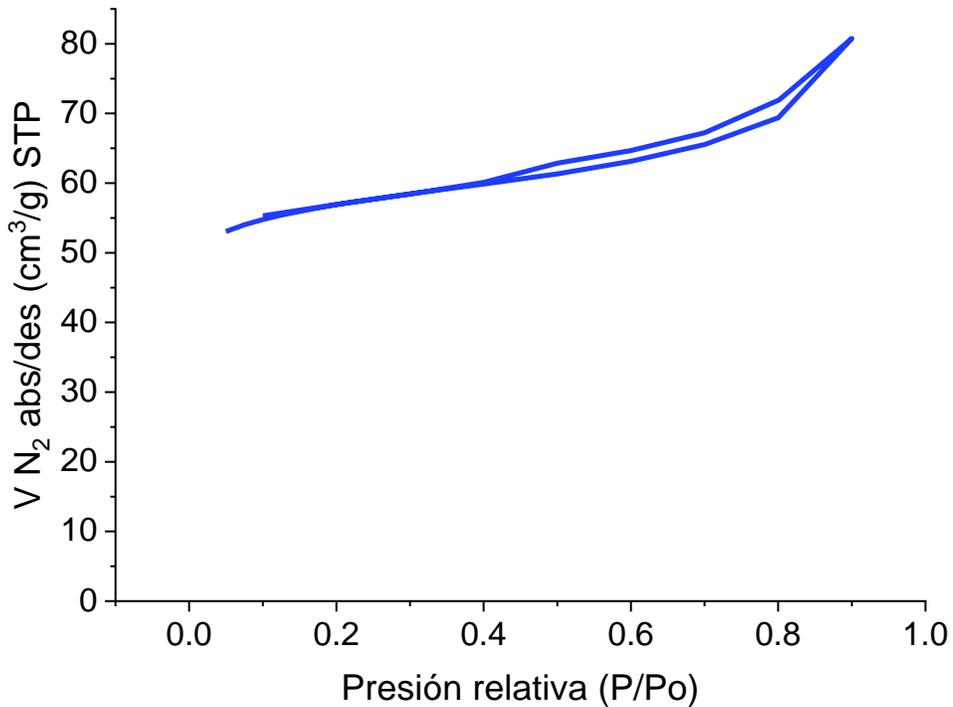


Figura 12. Isoterma de absorción/desorción de la zeolita SAPO-11.

La isoterma muestra un comportamiento similar a las isotermas de categoría tipo IV, este tipo de isotermas son características de materiales meso y microporos [63]. Se observa un ciclo de histéresis, el cual indica la presencia de meso poros. A partir del análisis de fisisorción de N₂ se obtuvieron el área superficial BET de la zeolita SAPO-11 (185.181 ± 3.969 m²/g) y el volumen total de poro (0.125 cm³/g). Estos resultados son similares a lo reportado por Zhang *et al.* (2007) [64], quienes reportaron áreas superficiales BET entre (176 y 210) m²/g y volumen de poro totales de (0.185 hasta 260) cm³/g para la zeolita SAPO-11. Además, mediante el método de *t*-plot se encontró que el área superficial de los microporos de la zeolita sintetizada fue de 140.45 m²/g.

La zeolita SAPO-11 fue caracterizada mediante SEM-EDX. La figura 13, muestra las imágenes SEM-EDX obtenidas para la zeolita SAPO-11. Los cristalitas fotografiados no presentan una morfología homogénea. Se observa la presencia de estructuras cubicas bien definidas de tamaño mayor a los 200 nm, así como bastones y cúmulos esféricos.

La figura 14, muestra el mapeo elemental de la zeolita. El mapeo elemental se realizó por triplicado con el objetivo de determinar la composición atómica promedio de la zeolita. Se encontró que para la zeolita SAPO-11, la composición atómica promedio fue de 61.01% O, 21.18% Al, 0.32% Si, 17.50% P. Por lo anterior, podemos decir que la síntesis de la zeolita se realizó correctamente ya que sus propiedades concuerdan con lo reportado en literatura.

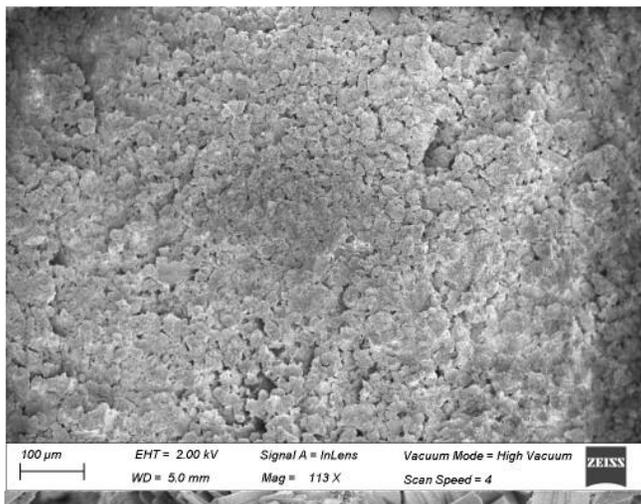


Figura 13. Imágenes SEM-EDX de la zeolita SAPO-11.

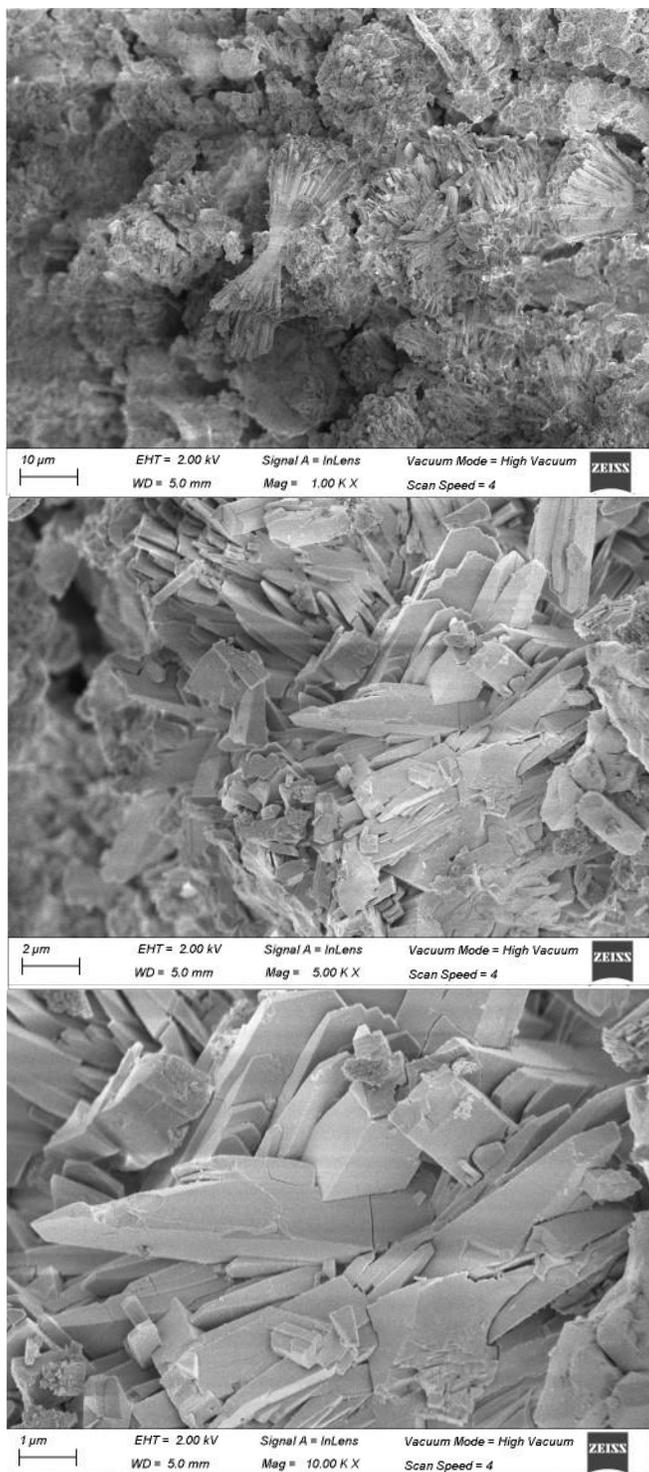


Figura 13. Imágenes de SEM-EDX de la zeolita SAPO-11. (continuación).

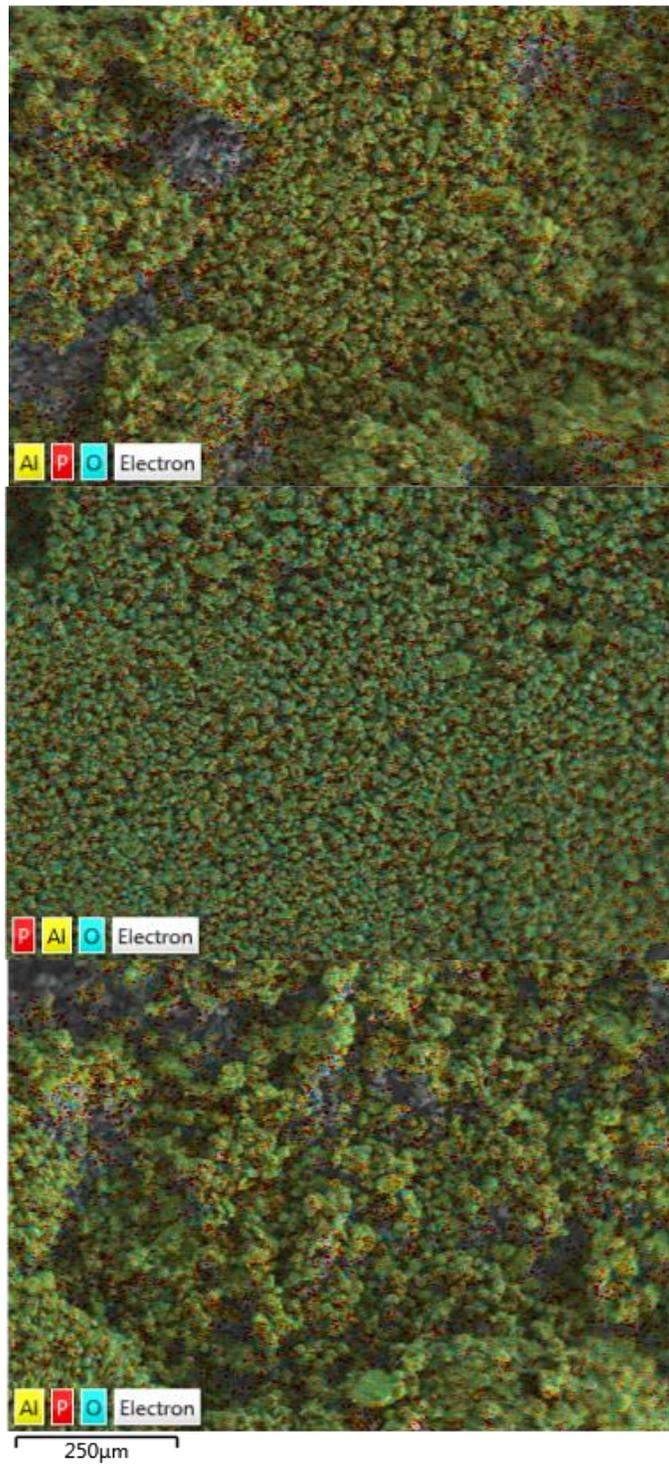


Figura 14. Mapeo elemental de la zeolita SAPO-11.

5.3.2. Caracterización de los catalizadores

Los catalizadores de Ni y Cu se caracterizaron mediante XRD para identificar las fases cristalinas sobre el soporte. Los resultados se muestran en la figura 16, donde se observan picos de difracción característicos de la zeolita, con las más altas intensidades presentes en el intervalo 20° a 25° en 2θ .

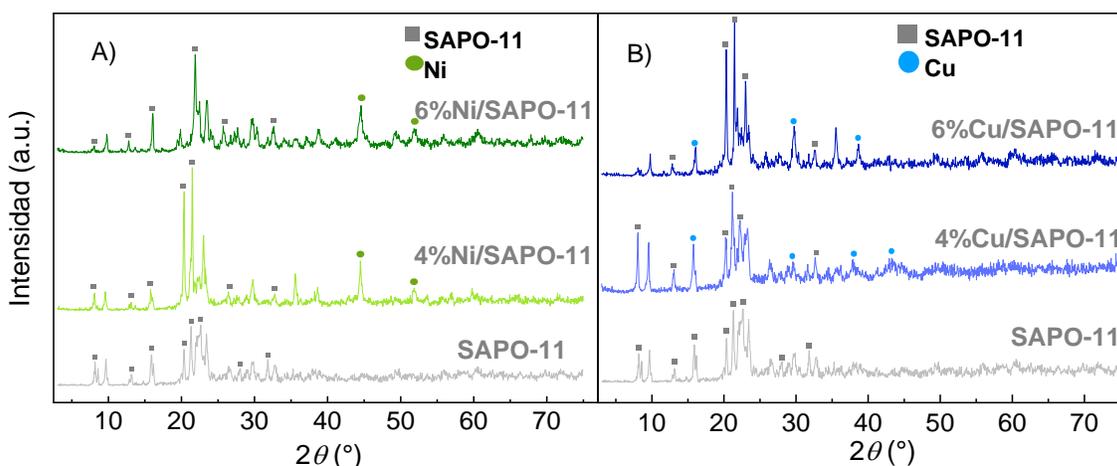


Figura 16. Difractograma de rayos-X (XRD) de los catalizadores utilizados en este trabajo: A) Ni y B) Cu. ■, picos asociados a la zeolita SAPO-11; ●, señales asociadas al Ni; ●, señales asociadas al Cu.

Para los catalizadores de 4%Ni/SAPO-11 y 6%Ni/SAPO-11, se observó que el pico de mayor intensidad se localizó en los ángulos 21.5° y 21.9° 2θ , respectivamente. Por su parte, los catalizadores de 4%Cu/SAPO-11 y 6%Cu/SAPO-11 mostraron el pico de mayor intensidad en los ángulos 21.2° y 21.5° 2θ . La variación en la intensidad y anchura de los picos de la zeolita podría relacionarse a la incorporación de Ni y Cu en el soporte, aunado a los tratamientos de calcinación y reducción, los cuales pudieron provocar un cambio en la cristalinidad de la zeolita. En comparación con el ángulo de mayor intensidad mostrado por la zeolita pura (22.7° 2θ), para los

cuatro catalizadores se observó un desplazamiento hacia la izquierda para el pico de mayor intensidad, lo cual se podría asociar a cambios en la distancia interplanar de la estructura cristalina por la presencia de los metales, Ni y Cu, sobre la zeolita. Mediante la ecuación de Bragg ^[65] (Ecuación 26) se estimó la distancia interplanar de los catalizadores y la zeolita pura.

$$n\lambda = 2d \text{ seno}(\theta) \quad (26)$$

Donde n corresponde al orden de difracción; λ es la longitud de onda de rayos-X (Å); d es la distancia interplanar (Å) y θ es el valor medio del ángulo 2θ del pico en radianes.

Se encontró que la distancia interplanar de la zeolita SAPO-11 pura fue de 0.152 Å. Los catalizadores al 4% y 6% Ni presentaron una distancia interplanar menor a la de la zeolita (0.144 Å y 0.146 Å, respectivamente). Por su parte, los catalizadores de 4% y 6% Cu también presentaron una distancia interplanar menor a la estimada para la zeolita (0.142 Å y 0.144 Å). Con lo anterior podemos concluir que el proceso de la síntesis de los catalizadores modifica la estructura interplanar de la zeolita.

Es posible observar la presencia de las especies de Ni y Cu en los difractogramas respectivos de cada catalizador. Los picos a 45° y $53^\circ 2\theta$ de la figura 16.A, muestran la presencia del metal de Ni (carta ICSD:76667), mientras que los picos de 38° y $42^\circ 2\theta$ de la figura 16.B corresponden al metal de Cu (carta ICSD:67850).

Análogo a la zeolita SAPO-11, los catalizadores de Ni/SAPO-11 y Cu/SAPO-11 se caracterizaron mediante fisisorción de nitrógeno. La tabla 8 muestra los resultados obtenidos para los cuatro catalizadores analizados y su comparación con la zeolita.

El catalizador de 4%Ni mostró una reducción tanto en el área superficial (110.728 m²/g) como en el volumen total de poro (0.095 cm³/g), con respecto a la zeolita (185.181 m²/g y 0.125 cm³/g, valores de área superficial y volumen total de poro, respectivamente). Por su parte el catalizador al 6% de Ni también mostró valores inferiores tanto para el área superficial (97.393 m²/g) como para el volumen de poro y (0.092 cm³/g) a comparación de la zeolita. En literatura, se ha reportado que tanto el área superficial como el volumen de poro de un catalizador disminuye en función de la carga de metal que se soporta.

Para los catalizadores de Cu se puede observar que tanto el área superficial BET como el volumen de poro disminuyen en función de la carga de metal que se soporta en el catalizador. El anexo 2 muestra las isotermas de absorción/desorción de los catalizadores al 4% y 6% de Ni y Cu.

Para complementar los resultados de fisisorción de N₂, los catalizadores se sometieron a un análisis de SEM-EDX con el fin de obtener micrografías y el mapeo elemental de los catalizadores. La figura 17 y 18 muestran las micrografías obtenidas para los catalizadores de Ni y Cu, respectivamente.

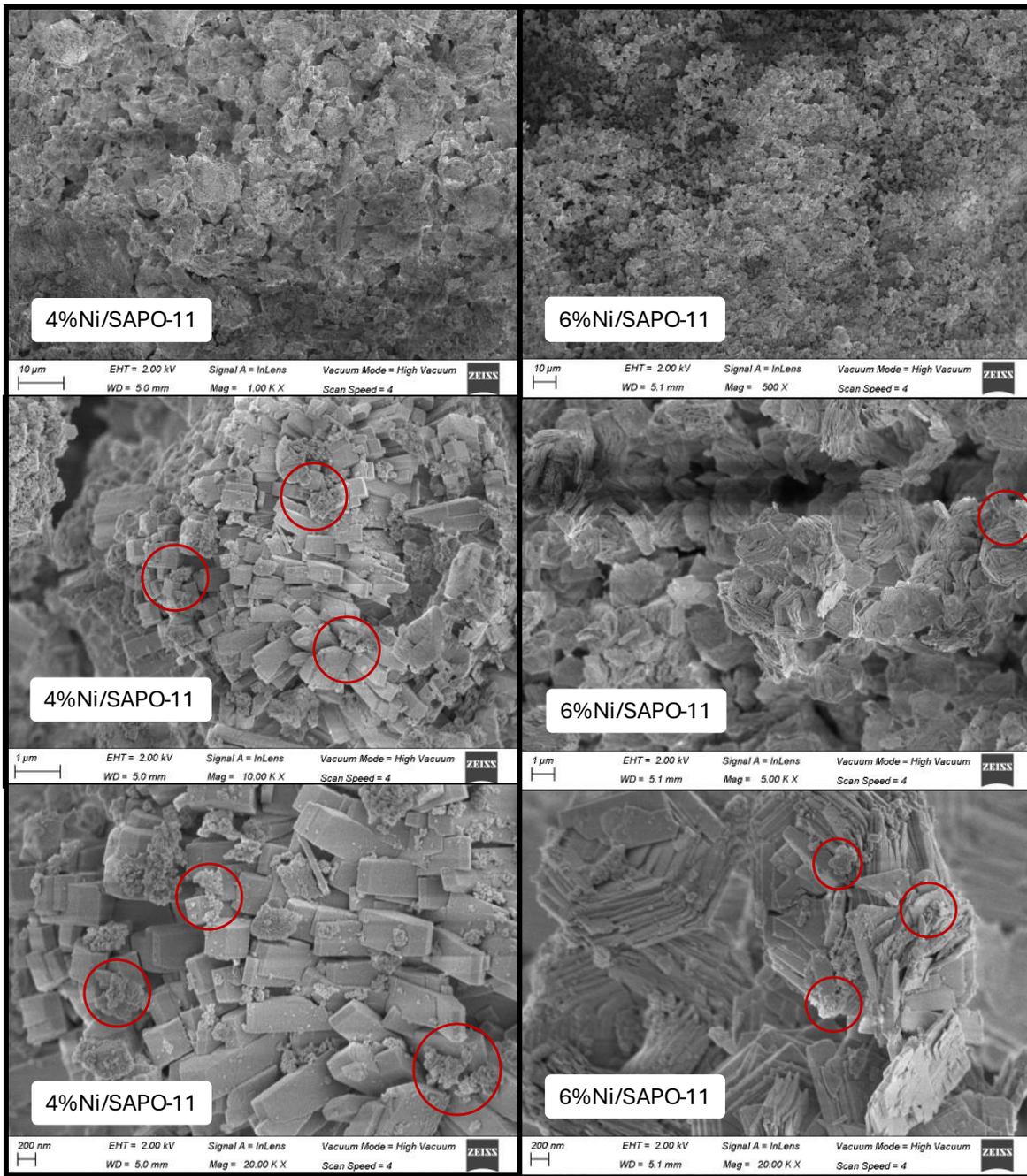


Figura 17. Imágenes de SEM-EDX obtenidas para los catalizadores de Ni/SAPO-11. **○**, cúmulos de Ni soportados sobre la zeolita.

El catalizador de 4%Ni/SAPO-11 presenta cúmulos de metal de Ni entre los 200 nm y 1 μm de diámetro. Para este catalizador, las estructuras cúbicas de la zeolita SAPO-11 observadas antes de su uso como soporte de los catalizadores se

mantuvieron, lo cual nos da indicio de que la morfología del soporte no se vio alterada significativamente, posterior a la síntesis del catalizador. Por otro lado, el catalizador de 6%Ni/SAPO-11 mostró una morfología de tipo hojuela y no se presentaron las estructuras cúbicas iniciales, además, se aprecia que la estructura del soporte se comprende por esferas con diámetros entre 1 y 2 μm . Los cúmulos de metal de Ni en el catalizador del 6%Ni fueron mucho más pequeños (diámetro entre 200 nm y 400 nm), que los observados en el catalizador al 4%Ni, lo que puede asociarse a que el metal en este catalizador se encuentra mejor distribuido sobre toda la superficie del metal.

El catalizador al 4%Cu/SAPO-11 presentó ligeras variaciones en la morfología con respecto de la zeolita, es posible visualizar las estructuras cúbicas y de tipo hojuela. Este catalizador mostró cúmulos de metal con diámetro entre los 200 nm-400 nm. El catalizador de 6%Cu/SAPO-11 no mostró una morfología definida, se observan estructuras cúbicas y de tipo hojuela que sobresalen de manera irregular. Estas estructuras no siguen un patrón ordenado en comparación de los catalizadores analizados anteriormente.

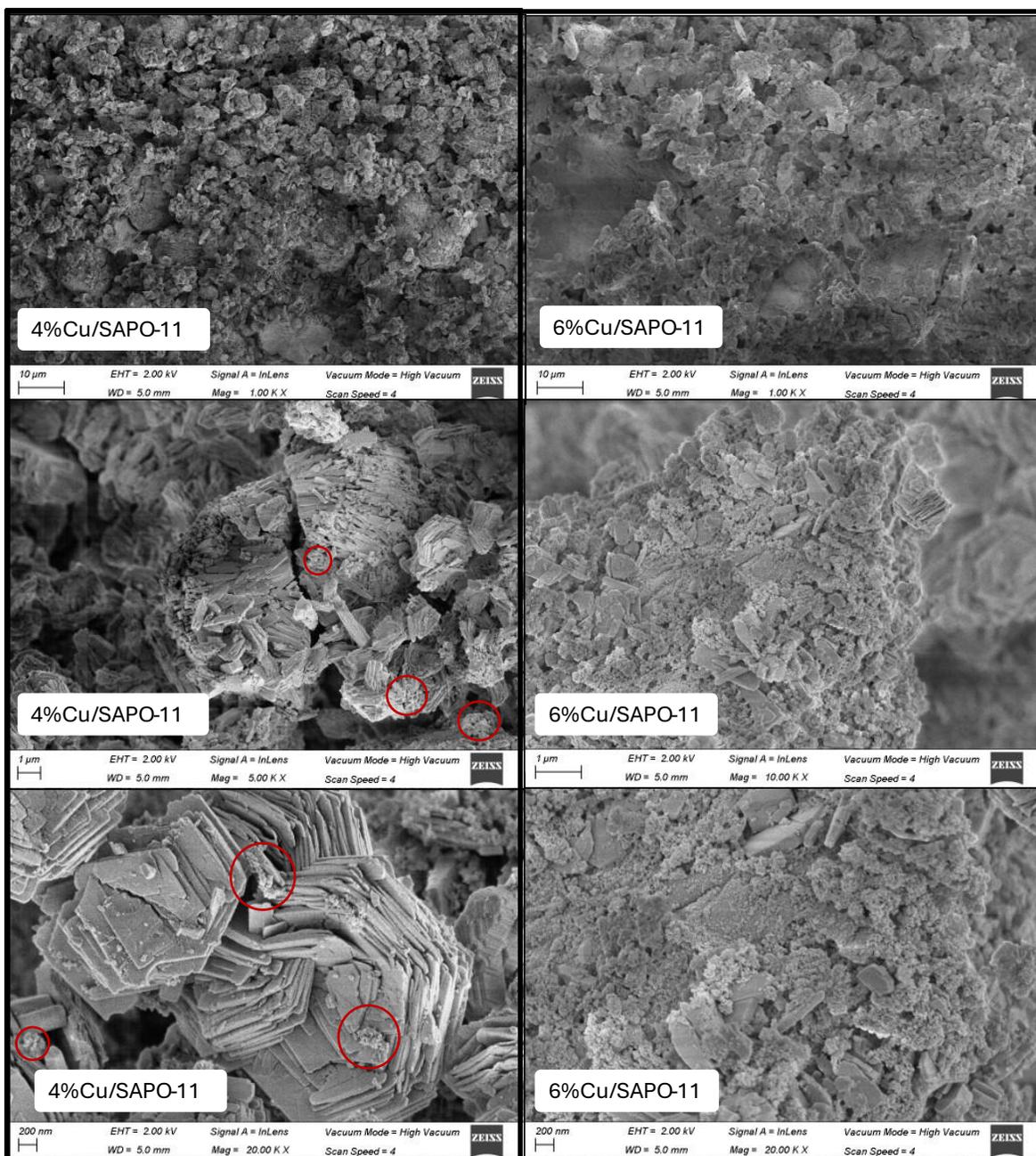


Figura 18. Imágenes de SEM-EDX obtenidas para los catalizadores de Cu/SAPO-11. ○, cúmulos de Cu soportados sobre la zeolita.

Esta diferencia en la estructura morfológica del catalizador dificulta la identificación entre cúmulos de Cu y los cristalitas de la zeolita. Lo anterior, se puede atribuir a un desgaste mecánico-térmico en la estructura del soporte durante la síntesis del catalizador.

5.3.3. Composición química de zeolita y catalizadores.

A partir de los resultados obtenidos mediante XRD y SEM-EDX, se realizó la semicuantificación de la composición química de la zeolita SAPO-11 y los catalizadores de Ni/SAPO-11 y Cu/SAPO-11. La semicuantificación por XRD se obtuvo a partir de relacionar el área de los picos de mayor intensidad con su poder reflectante (RIR), el cual es específico de cada especie cristalina. La tabla 9, muestra la comparación entre la composición estimada de los distintos elementos a partir de los resultados de XRD y el mapeo elemental por SEM-EDX.

Tabla 6. Comparación entre la composición elemental obtenida mediante XRD y SEM-EDX de los catalizadores de Ni/SAPO-11.

XRD						SEM-EDX				
Catalizadores de Níquel										
%Ni	Al(%)	P(%)	O(%)	Si(%)	Ni(%)	Al(%)	P(%)	O(%)	S(%)	Ni(%)
SAPO-11	22.12	25.40	52.48	0.00	0.00	27.23	25.83	46.52	0.42	0.00
4%	21.24	24.38	50.38	0.00	3.99	24.30	26.54	41.72	0.35	7.22
6%	19.96	22.91	47.33	0.00	9.80	23.12	26.38	41.92	0.57	8.03
Catalizadores de Cobre										
%Cu	Al(%)	P(%)	O(%)	Si(%)	Cu(%)	Al(%)	P(%)	O(%)	Si(%)	Cu(%)
SAPO-11	22.12	25.40	52.48	0.00	0.00	27.23	25.83	46.52	0.42	0.00
4%	20.97	24.07	50.85	0.00	4.43	23.95	26.55	44.26	0.45	4.79
6%	20.02	22.98	49.51	0.00	8.08	25.88	28.33	44.35	0.26	1.18

Se puede notar que no existe una diferencia significativa entre la semicuantificación obtenida mediante XRD y SEM-EDX. Los elementos que presentan la mayor composición en los catalizadores son el oxígeno, el fósforo y el aluminio. La alta composición del oxígeno se debe tanto a enlaces del tipo aluminio fosforo (V) como a la formación de óxidos en los metales soportados.

Los resultados de SEM-EDX muestran una reducción en la fracción del Cu para el catalizador al 6%Cu comparado con su homólogo al 4%. Lo anterior, puede

atribuirse a la poca disposición del Cu en las zonas donde se realizó el mapeo elemental, lo cual, se asocia a una distribución no homogénea del metal sobre el soporte, consecuencia del método de síntesis. El anexo 3 muestra la comparación gráfica de la semicuantificación de la composición de los catalizadores sintetizados.

5.4. Síntesis de bioturbosina mediante HEFA.

Esta similitud en los rendimientos obtenidos puede atribuirse a la semejanza en el área superficial, volumen de poro (Tabla 8) y composición atómica de Ni en los catalizadores (2.74% y 3.05% para cargas de catalizador del 4% y 6% de Ni, respectivamente). Estos resultados muestran que la carga de catalizador analizada no afecta significativamente el rendimiento de producción de bioturbosina.

Los catalizadores de Cu mostraron el mayor rendimiento para la producción de bioturbosina bajo la atmósfera reactiva de mezcla (35% H_2 /65% N_2) y 100% N_2 . El catalizador de 4%Cu/SAPO-11 con relación 20:1 y 30:1, presentó rendimientos para la producción de bioturbosina de 49.88% y 42.39%, respectivamente, mientras que el catalizador de 6%Cu/SAPO-11 mostró rendimientos de 47.03% y 57.41%. Este incremento en el rendimiento para la producción de bioturbosina se podría asociar a una mejor distribución del metal de Cu en el catalizador de 6%Cu y, por ende, a una mayor cantidad de sitios activos disponibles en la superficie y los poros del catalizador. Se ha reportado en literatura, que catalizadores de Cu utilizados en reacciones de desoxigenación presentan una mayor selectividad para la remoción de moléculas de oxígeno del grupo C=O. Ayandiran *et al.* (2019) ^[66] reportaron rendimientos entre el 50% y 60% para catalizadores de 5% hasta 15% en Cu soportado sobre $SiO_2-Al_2O_3$. Los autores reportaron que los catalizadores con

mayor volumen de poro y mayor carga de metal incrementaban el rendimiento para la producción de bioturbosina. Comparando los resultados reportados por estos autores, los rendimientos obtenidos en este trabajo son menores. Esta condición se puede atribuir a que nuestros catalizadores de Cu presentaron un menor volumen de poro (Tabla 8) que los utilizados por Ayandiran *et al.* [66]

Esta disminución se asocia a una menor difusión interna de las macromoléculas de ácidos grasos en los catalizadores utilizados en este trabajo. Por otro lado, los catalizadores de Cu mostraron un incremento en el rendimiento en la producción de bioturbosina al incrementar el porcentaje del metal soportado [66], esto concuerda con lo reportado por Ayandiran *et al.* [66]

5.5. Caracterización de bioturbosina.

La composición de hidrocarburos presentes en la bioturbosina se determinó mediante cromatografía de gases (GC). Se utilizó el estándar Supelco 04070 “Alkane standard solution C₈-C₂₀” para construir las curvas de calibración que nos permitieran determinar la composición de la bioturbosina producida en este trabajo (Anexo 4)

5.5.1. Composición de bioturbosina: atmósfera de mezcla.

La figura 20, muestra los perfiles de concentración de hidrocarburos de la bioturbosina sintetizada en atmósfera de mezcla de 35%H₂/65%N₂. La variación en la carga del catalizador (20:1 y 30:1) tuvo un efecto en la variación de los perfiles de concentración de los hidrocarburos de la bioturbosina (Figura 20).

La bioturbosina sintetizada con catalizadores al 4% y 6% de Cu presentó una mayor distribución en la producción de hidrocarburos con cadenas más cortas (C₈-C₁₄).

Esto se asocia a la selectividad de los catalizadores de Cu para la desoxigenación del grupo C=O de los ácidos grasos esterificados, lo cual, favorece la producción de hidrocarburos, mismos que posteriormente se descomponen en compuestos más ligeros por reacciones secundarias de hidrocrqueo y craqueo térmico.

En la figura 20 se pueden identificar cadenas de hidrocarburos entre C₁₇-C₂₀, no características de la turbosina convencional [5]. Por lo anterior, se normalizó la composición de la bioturbosina considerando únicamente los hidrocarburos dentro del rango de una turbosina convencional (C₈-C₁₆). La tabla 10 muestra la composición molar normalizada por cadena de hidrocarburo de la bioturbosina producida en atmósfera de mezcla.

Tabla 7. Composiciones normalizadas para la bioturbosina sintetizada en atmósfera de mezcla.

Composición molar normalizada de la bioturbosina sintetizada										
Catalizador	Clave	x_{C_8}	x_{C_9}	$x_{C_{10}}$	$x_{C_{11}}$	$x_{C_{12}}$	$x_{C_{13}}$	$x_{C_{14}}$	$x_{C_{15}}$	$x_{C_{16}}$
4%Ni/SAPO-11	BJF-1	0.036	0.023	0.027	0.044	0.022	0.080	0.040	0.720	0.008
	BJF-2	0.026	0.025	0.014	0.036	0.031	0.070	0.033	0.747	0.018
6%Ni/SAPO-11	BJF-3	0.052	0.043	0.038	0.051	0.029	0.106	0.041	0.639	0.002
	BJF-4	0.033	0.034	0.018	0.039	0.021	0.071	0.024	0.749	0.010
4%Cu/SAPO-11	BJF-5	0.065	0.117	0.076	0.028	0.034	0.075	0.207	0.254	0.144
	BJF-6	0.081	0.061	0.038	0.030	0.039	0.093	0.058	0.561	0.040
6%Cu/SAPO-11	BJF-7	0.128	0.142	0.091	0.103	0.105	0.093	0.110	0.195	0.033
	BJF-8	0.179	0.219	0.140	0.089	0.050	0.069	0.085	0.098	0.070

La composición molar normalizada de la bioturbosina sintetizada a partir de los catalizadores de Ni se constituye por aproximadamente el 70% de hidrocarburos con cadenas C₁₅. Por otro lado, la bioturbosina sintetizada en presencia del catalizador de 4%Cu/SAPO-11, presenta una composición molar normalizada entre el 40% y 50% para hidrocarburos de cadena C₁₄-C₁₅, mientras que el catalizador al 6%Cu/SAPO-11, muestra una composición molar normalizada entre el 20% y 40%

para hidrocarburos con cadenas C₈-C₉. Por lo que podemos intuir que a medida que aumenta el % de metal en los catalizadores de Cu, se favorece la desoxigenación de los ácidos grasos esterificados y posteriormente su craqueo a parafinas más ligeras (C₈-C₉).

Para los catalizadores de Cu, no se observó una cadena de hidrocarburo que presentara la mayor composición dentro de la mezcla del bioturbosina, al contrario, se observa una mejor distribución en la producción de cadenas de hidrocarburos desde los más ligeros (C₈) hasta los más pesados (C₁₆). Lo anterior, se atribuye a reacciones de craqueo térmico y una mayor remoción de las moléculas de oxígeno presentes en los ésteres de la materia prima cuando se utiliza el catalizador de 4% o 6% Cu/SAPO-11 en las reacciones de descarboxilación.

De igual manera, dada la presencia de compuestos más pesados fuera del rango de hidrocarburos de bioturbosina, se normalizaron las composiciones de los compuestos C₈ a C₁₆ de la bioturbosina sintetizada en atmósfera de N₂. La tabla 11 muestra la composición molar normalizada por cadena de hidrocarburo de la bioturbosina producida en atmósfera de nitrógeno.

de Ni en atmósfera de nitrógeno se constituye entre un 50% - 65% de hidrocarburos C₁₅. La bioturbosina sintetizada con los catalizadores al 4%Cu/SAPO-11 y 6%Cu/SAPO-11 mostraron una composición molar normalizada promedio entre 14%-12% y 24%-15%, respectivamente, para hidrocarburos C₈-C₉. Por lo que, al igual que en la sección 5.5.1 podemos observar que, en los catalizadores de Cu, se favorece la desoxigenación de los ácidos grasos esterificados y posteriormente su

craqueo a parafinas más ligeras (C_8-C_9), a medida que aumentamos la carga del metal soportado en el catalizador.

5.5.3. Corrección de rendimientos y evaluación de la selectividad.

En términos de los resultados de la sección 5.4, se realizó un ajuste de los rendimientos de producción de bioturbosina considerando únicamente cadenas de hidrocarburos de (C_8-C_{16}), correspondiente a las cadenas presentes en la turbosina fósil. La tabla 12 muestra las selectividades obtenidas para ambas atmósferas reactivas utilizadas. Así como, los rendimientos en la producción de bioturbosina considerando cadenas de hidrocarburos de (C_8-C_{16}) y (C_8-C_{20}) para ambos catalizadores de Ni y Cu.

Los catalizadores de Ni con relación 20:1 y en atmósfera de mezcla mostraron selectividades entre 40% y 50% para la formación de hidrocarburos $C_{14}-C_{16}$, mientras que, en atmósfera de nitrógeno, la selectividad de los catalizadores disminuyó entre un 30% y 40%. Por otro lado, la carga de catalizador 30:1, presentó selectividades entre el 50% y 70% hacia cadenas $C_{14}-C_{16}$ en atmósfera de mezcla, mientras que en atmósfera de nitrógeno puro disminuyeron las selectividades al 40%. Esta disminución se debe a un incremento en la formación de hidrocarburos C_8-C_{10} (con selectividad entre 20% y 30%) con respecto a las observadas en atmósfera de mezcla (selectividad $\approx 10\%$), lo cual se asocia al uso del nitrógeno como atmósfera reactiva que favorece las reacciones de craqueo y no las reacciones de hidrogenación. La alteración en la selectividad al variar la carga de catalizador en 20:1 y 30:1, es consecuencia de la interacción entre la materia prima y las partículas del catalizador.

Similar a lo observado para los catalizadores de Ni, se encontró que la selectividad para la formación de hidrocarburos ligeros (C₈-C₁₀) al utilizar catalizadores de Cu en cargas de 20:1 incrementaron en atmósfera de nitrógeno en valores de 30% a 50%, con respecto a las encontradas en atmósfera de mezcla de 15% a 30%. Lo anterior refuerza la teoría de que en atmósfera de nitrógeno se favorece la producción de cadenas más cortas debido a las reacciones de craqueo. Para los catalizadores de Cu en cargas de 30:1 se encontró la misma variación que en los catalizadores de Ni, por lo que la carga del catalizador, aunque no afecta en el rendimiento en general de la producción de bioturbosina, si tiene un efecto en la selectividad para la formación de compuestos más ligeros, como consecuencia de la interacción entre el catalizador y las moléculas de ácidos grasos esterificados durante la reacción HEFA, debido a la cantidad de catalizador utilizado.

Tabla 8. Selectividad y rendimientos para la producción de hidrocarburos de bioturbosina.

Catalizador	Relación	Selectividad (%)				Rendimiento (%)	
		C ₈ -C ₁₀	C ₁₁ -C ₁₃	C ₁₄ -C ₁₆	C ₁₇ -C ₂₀	C ₈ a C ₂₀	C ₈ a C ₁₆
<i>Reacciones con atmósfera de 35%H₂/65%N₂</i>							
4%Ni/SAPO-11	20 : 1	10.5	12.9	55.3	21.3	28.3	22.3
	30 : 1	10.2	15.5	73.8	0.6	29.6	29.4
6%Ni/SAPO-11	20 : 1	12.6	12.8	38.5	36.0	31.1	19.9
	30 : 1	9.1	10.0	48.9	31.9	28.1	19.2
4%Cu/SAPO-11	20 : 1	15.0	5.9	21.4	57.7	49.9	21.1
	30 : 1	15.9	10.1	34.1	39.9	42.4	25.5
6%Cu/SAPO-11	20 : 1	31.7	19.6	17.8	30.9	47.0	32.5
	30 : 1	48.8	14.2	13.7	23.2	57.4	44.1

5.5.4. Propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina.

La tabla 13 muestra los resultados obtenidos para la densidad, la viscosidad cinemática y el índice de refracción de la bioturbosina sintetizada, así como la

comparación con la turbosina fósil Jet A y los límites establecidos por la norma ASTM D1655.

Tabla 9. Comparación entre las propiedades fisicoquímicas de la bioturbosina, la turbosina fósil y los límites establecidos por la ASTM D1655.

Propiedades fisicoquímicas	Bioturbosina	Turbosina, JET A ^[5]	ASTM D1655
Densidad (ρ), kg/m ³	868.70	803.00	775-840
Viscosidad (μ), mm ² /s	7.52*	5.20	Max: 8.00**
Índice de refracción, (25° C)	1.44	N/A	N/A

Densidad a 15° C; viscosidad a 15° C; *, viscosidad a -20° C, **.

La bioturbosina presentó un valor de densidad mayor al límite establecido por la norma. Por otro lado, la viscosidad cinemática se midió a 15°C debido a limitaciones en las condiciones de operación del equipo disponible, sin embargo, el valor numérico (7.52 mm²/s) está muy cerca del límite superior establecido por la norma de 8 mm²/s a -20°C. Por lo que, se puede predecir que no se cumplirá con la norma.

Para las dos propiedades, este resultado está relacionado con la alta presencia de hidrocarburos C₁₄-C₁₆, así como, hidrocarburos más pesados de cadena C₁₇-C₂₀. Esta desventaja se podría subsanar con la incorporación de nuevos aditivos a la bioturbosina.

5.6. Caracterización de la bioturbosina y sus mezclas con éteres de glicol.

5.6.1. Densidad de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.

Como se observa en la figura 22, todos los aditivos propuestos en este trabajo (dietilenglicol monometil éter, dietilenglicol monoetil éter y dietilenglicol monobutil éter) presentan una mayor densidad que la bioturbosina producida. Además,

también se muestra una comparativa entre las densidades de las mezclas pseudobinarias de bioturbosina (BJF) con: *i*) dietilenglicol monometil éter (DME), *ii*) dietilenglicol monoetil éter (DEE) y *iii*) dietilenglicol monobutil éter (DBE) a tres diferentes temperaturas (288.15, 313.15 y 338.15) K.

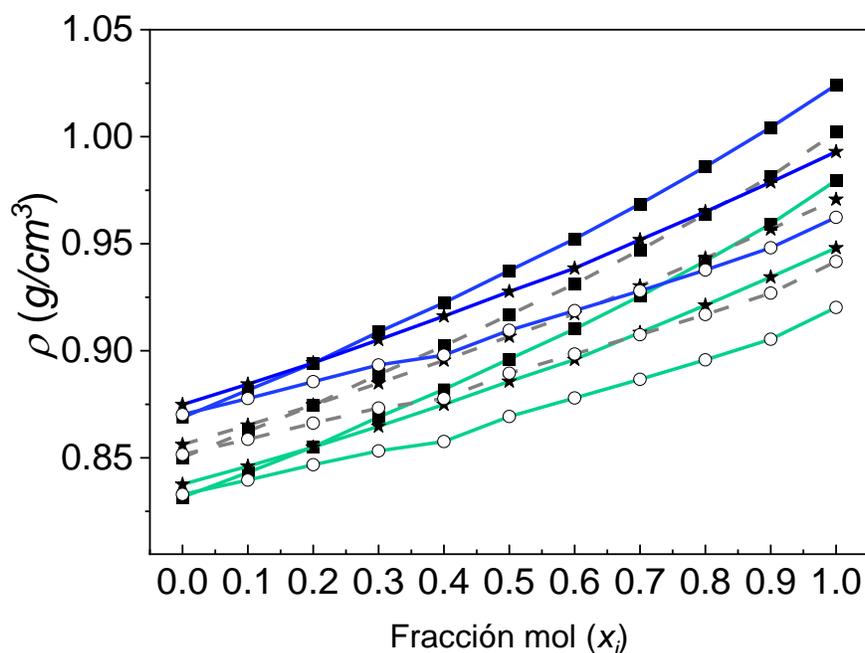


Figura 22. Densidades (ρ) de mezclas pseudobinarias de bioturbosina y aditivos: DME (■), DEE (★) y DBE (○) a distintas temperaturas. —, 288.15 K; --, 313.15 K, —, 338.15 K.

Se puede apreciar que las mezclas de BJF+DME presentaron mayor densidad que las mezclas de BJF+DBE, por lo que se puede decir que la densidad disminuye conforme aumenta la cadena de carbonos del aditivo. Por otro lado, la densidad disminuye en función de la temperatura debido al incremento en la energía cinética de las moléculas, aumentando el volumen de la solución y por tanto disminuyendo la densidad de la mezcla.

Ninguna de las muestras evaluadas cumple con el límite establecido por la ASTM D1655 para densidad, lo anterior, es consecuencia tanto de la composición de la bioturbosina sintetizada como la densidad de los aditivos. La destilación de las cadenas de hidrocarburos de C_{17} - C_{20} , podría ser una alternativa que permita disminuir la densidad del biocombustible y cumplir con los límites establecidos por la norma de aviación. Los valores numéricos experimentales y los gráficos de densidad de las mezclas de bioturbosina y aditivos para todas las isothermas evaluadas en este trabajo, se pueden consultar en el anexo 5.

5.6.2. Viscosidad de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.

En el caso de la viscosidad, los aditivos como compuestos puros mostraron una viscosidad cinemática inferior a la viscosidad de la bioturbosina. La figura 24, muestra la comparación entre las viscosidades cinemáticas de las mezclas de bioturbosina + aditivos a diferentes temperaturas (288.15, 313.15 y 338.15 K).

5.6.3. Índice de refracción de las mezclas de bioturbosina y éteres de glicol.

La importancia de esta propiedad reside al ser un parámetro de calidad en la producción de bioturbosina, ya que es una manera fácil y económica para determinar experimentalmente la calidad del biocombustible. La figura 25, muestra la variación en el índice de refracción de las mezclas de bioturbosina y aditivos en función de la temperatura y la composición.

Análogo a lo observado para la viscosidad, el IR disminuye al aumentar la cantidad de aditivo en la mezcla, siendo nuevamente las mezclas de bioturbosina + dietilenglicol monobutil éter (DBE) las que presentaron un índice de refracción más alto, seguido por el aditivo de DEE y por último DME. Aunque no existe un límite mínimo o máximo para el índice de refracción del combustible, estos datos permiten identificar la calidad de las mezclas de bioturbosina + aditivos. El efecto de la temperatura sobre esta propiedad es similar a lo observado para densidad y viscosidad. A mayor temperatura disminuye el índice de refracción debido a que las moléculas se encuentran más separadas entre sí, permitiendo una mayor incidencia de luz en el medio. Los resultados numéricos del índice de refracción a todas las temperaturas evaluadas en este trabajo se presentan en el anexo 5.

5.7. Evaluación de propiedades derivadas: Volumen molar en exceso, desviación de la viscosidad y desviación del índice de refracción.

Las propiedades derivadas de volumen molar en exceso (V^E), desviación de la viscosidad ($\Delta\eta$) y desviación del índice de refracción (Δn_D) se calcularon para todas las mezclas de bioturbosina + aditivos en todo el rango de concentraciones en un intervalo de temperaturas de 288.15 K a 338.15 K. La importancia de estas propiedades reside en que nos permiten elucidar el tipo de interacciones moleculares presentes entre las moléculas en solución.

La figura 26 muestra los resultados obtenidos para los cálculos de volumen molar en exceso (V^E) a dos distintas temperaturas (288.15 y 338.15) K en función de la composición molar del aditivo.

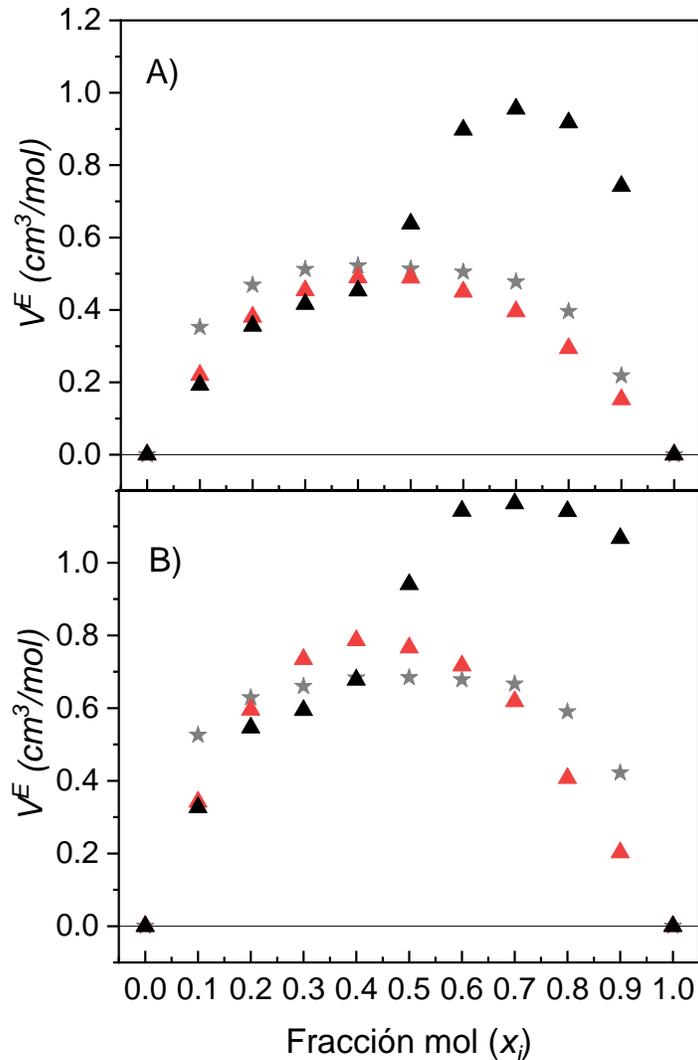


Figura 26. Volumen molar en exceso (V^E) de las mezclas de bioturbosina + aditivos: DME (★), DEE (▲) y DBE (▲) a distintas temperaturas: A) 288.15 K; B) 338.15 K.

Los valores positivos para el V^E indican una expansión del volumen de la mezcla. Esta condición se atribuye a que la intensidad de las interacciones moleculares entre moléculas del mismo tipo es mayor que entre moléculas diferentes, lo cual, se ve reflejado en una expansión de la mezcla [67]. Este comportamiento se presenta cuando las fuerzas de repulsión entre las moléculas gobiernan sobre las fuerzas de atracción entre ellas. El volumen molar en exceso aumenta conforme aumenta la

temperatura consecuencia del incremento en la energía cinética de las moléculas en mezcla. Los valores numéricos obtenidos para el volumen molar de exceso (V^E) y sus gráficos a todas las temperaturas se pueden consultar en el anexo 6.

La desviación de la viscosidad ($\Delta\eta$) fue evaluada a partir de los valores experimentales de viscosidad. La figura 27 muestra los resultados obtenidos para $\Delta\eta$ de las mezclas de bioturbosina + aditivo a dos distintas temperaturas (288.15 y 338.15) K en función de la composición molar del aditivo.

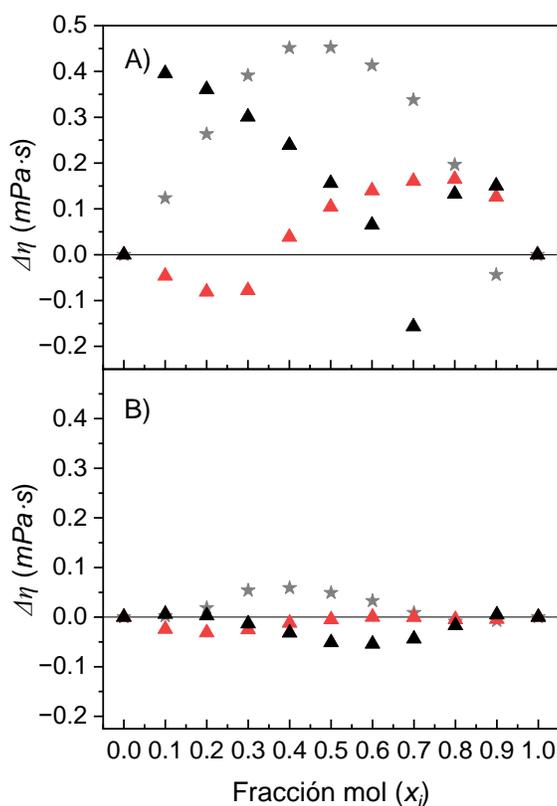


Figura 27. Desviación de la viscosidad ($\Delta\eta$) de las mezclas de bioturbosina + aditivos: DME (★), DEE (▲) y DBE (▲) a distintas temperaturas: A) 288.15 K; B) 338.15 K.

Se puede observar que la desviación de la viscosidad de las mezclas de bioturbosina + éteres de glicol disminuye en función de la temperatura debido a la

separación entre las moléculas como consecuencia del incremento de la energía del sistema. Las mezclas muestran desviaciones de viscosidad positivas y negativas en función de la fracción molar del aditivo. Los valores negativos para la $\Delta\eta$ denotan que las interacciones de dispersión predominan sobre la mezcla, lo cual, evidencia la presencia de moléculas de diferentes tipos y tamaños. Por otro lado, los valores positivos en $\Delta\eta$ se relacionan con las interacciones dipolares entre moléculas de diferente tipo (bioturbosina + éteres de glicol). Estas interacciones moleculares se presentan cuando la diferencia entre las partes hidrofílicas y lipofílicas de las moléculas en mezcla son muy distintas entre sí [67,68]. Esta condición se presenta en nuestros sistemas de bioturbosina y éteres de glicol. Los valores numéricos de $\Delta\eta$ y sus gráficos a todas las temperaturas se pueden consultar en el anexo 6.

Por último, la figura 28, muestra los resultados obtenidos para la desviación del índice de refracción ($\Delta\eta_D$) de las mezclas bioturbosina + aditivo a dos distintas temperaturas (288.15 y 338.15) K en función de la composición molar del aditivo.

La desviación del índice de refracción de todas las mezclas se aproxima a cero ($\Delta\eta_D \rightarrow 0$). No obstante, se puede observar que la tendencia es similar al presentado por él V^E y $\Delta\eta$, a mayor temperatura la desviación tiende a ser más pequeña. Por lo anterior, podemos concluir que el índice de refracción de las mezclas se puede estimar como una ponderación lineal de las fracciones molares e índices de refracción de los componentes puros. Los valores numéricos de $\Delta\eta_D$ y sus gráficos a todas las temperaturas se pueden consultar en el anexo 6.

5.8. Modelos y ajustes para la predicción de las propiedades de mezcla bioturbosina + éteres de glicol.

Los valores experimentales de densidad, viscosidad e índice de refracción se ajustaron a modelos matemáticos que permitan la predicción de las propiedades de mezcla de bioturbosina + éteres de glicol a condiciones de temperatura y composición molar del aditivo que no fueron determinadas experimentalmente.

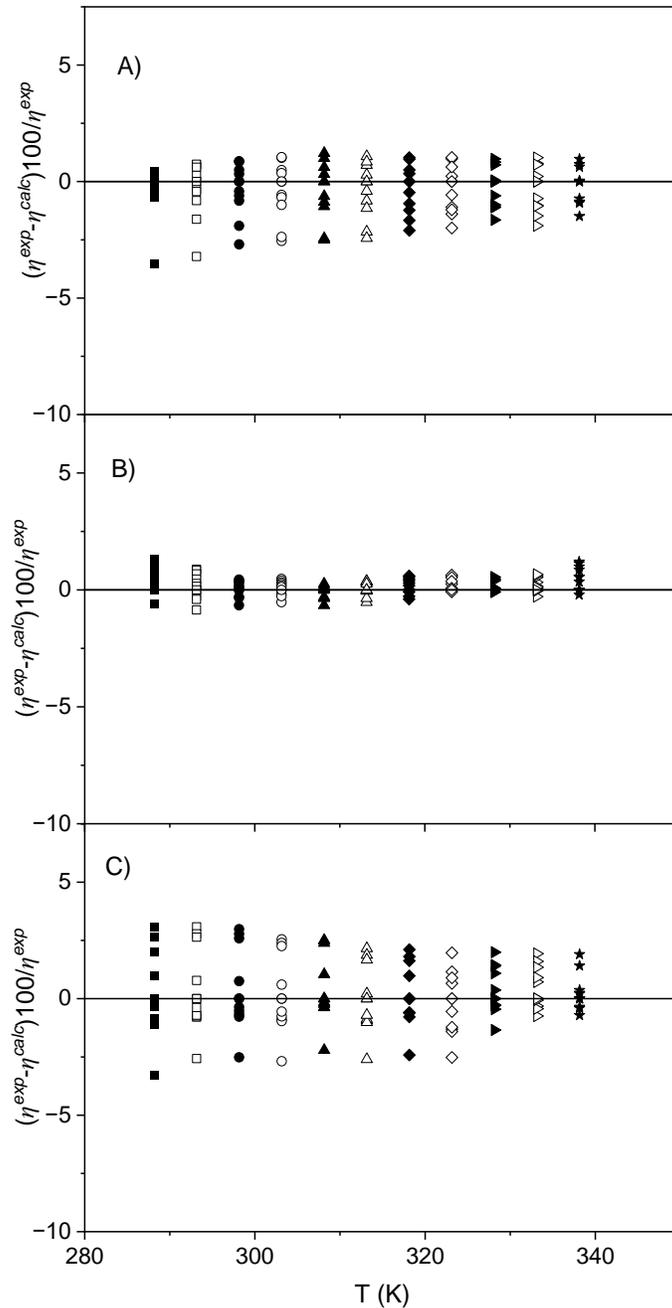


Figura 29. Residuales de la predicción de viscosidad de las mezclas de A) bioturbosina + DME, B) bioturbosina + DEE y C) bioturbosina + DBE mediante el modelo de McAllister ^[45]. ■; 288.15 K; □, 293.15 K; ●, 298.15 K; □, 303.15 K; ▲, 308.15 K; △, 313.15 K; ◆, 318.15 K; ◇, 323.15 K; ►, 328.15 K; ▷, 333.15 K; ★, 338.15 K.

Se puede observar que, para los tres sistemas, la tendencia en los residuales sigue comportamiento aleatorio. Este comportamiento se atribuye a la buena capacidad

predictiva del modelo de McAllister ^[45] y a la calidad de los datos experimentales obtenidos.

Por otro lado, la tabla 15 muestra los parámetros obtenidos para el ajuste de la viscosidad cinemática utilizando el modelo de Nava-Ríos *et al.* ^[46] (Ecuación 4).

Tabla 10. Parámetros de la correlación de Nava-Ríos *et al.* ^[46] y parámetros estadísticos.

T/K	δv_{12}	δg_{12}^*	δg_{21}^*	DPPA	bias	DE	DPAM
				%	%	mm ² ·s ⁻¹	%
Bioturbosina + dietilenglicol monometil éter							
288.15	1.4572±0.05	0.9480±0.01	0.9370±0.01	1.492	0.400	0.111	2.357
293.15	1.4603±0.04	0.9419±0.01	0.9378±0.01	1.254	0.163	0.083	2.358
298.15	1.3711±0.04	0.9412±0.01	0.9384±0.01	1.302	0.395	0.071	2.024
303.15	1.3663±0.04	0.9383±0.01	0.9385±0.01	1.249	0.014	0.060	1.961
308.15	1.3557±0.04	0.9384±0.01	0.9381±0.01	1.259	-0.001	0.055	1.997
313.15	1.3244±0.04	0.9396±0.01	0.9384±0.01	1.213	-0.077	0.047	1.793
318.15	1.2884±0.03	0.9392±0.01	0.9395±0.01	1.042	0.057	0.037	1.720
323.15	1.2741±0.03	0.9392±0.01	0.9400±0.01	1.031	0.066	0.032	1.626
328.15	1.2366±0.03	0.9399±0.01	0.9413±0.01	0.911	0.118	0.026	1.449
333.15	1.2161±0.03	0.9367±0.01	0.9417±0.01	1.000	-0.012	0.025	1.680
338.15	1.1887±0.02	0.9400±0.01	0.9428±0.01	0.831	0.146	0.020	1.430

El modelo de Nava-Ríos *et al.* ^[46] mostró una buena capacidad predictiva para los sistemas de bioturbosina + DME y + DEE con una DPPA y DE de (1.14, 1.76) % y (0.05 y 0.09) mm²/s, respectivamente.

Por su parte, el ajuste de la viscosidad cinemática para la mezcla de bioturbosina + DBE presentó valores de DPPA y DE de 2.04% y 0.13 mm²/s, respectivamente. El ajuste para este sistema presenta una mayor desviación con respecto a los valores experimentales, lo cual se asocia a la similitud que existe entre la viscosidad de los compuestos puros, dificultando el ajuste del modelo.

La figura 30 muestra el comportamiento de los residuales para los sistemas bioturbosina + DME, + DEE y + DBE . Se puede observar que, para los tres sistemas, la tendencia en los residuales sigue comportamiento aleatorio. Este comportamiento se atribuye a la buena capacidad predictiva del modelo de Navarros [45] y a la calidad de los datos experimentales obtenidos.

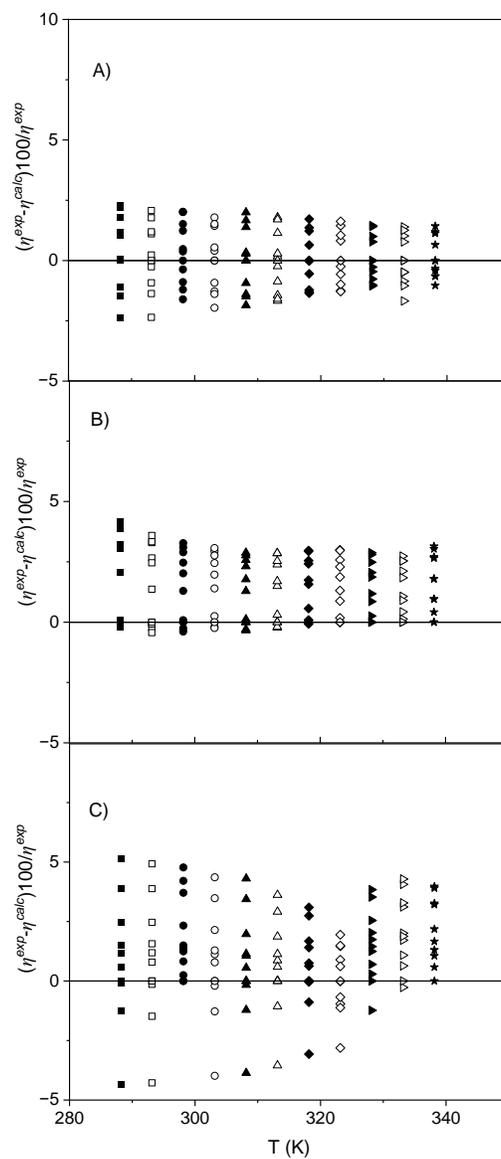


Figura 30. Residuales de la predicción de viscosidad de las mezclas de A) bioturbosina + DME, B) bioturbosina + DEE y C) bioturbosina + DBE mediante el modelo de Nava-Ríos *et al.* [46] ■; 288.15 K; □, 293.15 K; ●, 298.15 K; ◻, 303.15 K; ▲, 308.15 K; △, 313.15 K; ◆, 318.15 K; ◇, 323.15 K; ►, 328.15 K; ▷, 333.15 K; ★, 338.15 K.

5.8.2. Modelo de Cano-Gómez [47] para predecir la viscosidad cinemática.

El modelo de Cano-Gómez [47] permite predecir la viscosidad cinemática en función de la composición del aditivo y la temperatura. Este modelo fue desarrollado para mezclas de biocombustibles con oxigenantes. La intención de emplear esta ecuación es predecir la viscosidad cinemática de la bioturbosina a -20° C y poder comparar el resultado con lo establecido con la norma de aviación, debido a que experimentalmente no fue posible realizarlo por limitaciones técnicas en los equipos. La tabla 16, muestra los parámetros para la estimación de la viscosidad de acuerdo con el modelo propuesto por Cano-Gómez [47].

Tabla 11. Parámetros para la correlación de Cano-Gómez [47] y parámetros estadísticos.

Sistema	Parámetros						DPPA (%)	Bias (%)	DE (mPa·s)	DPAM (%)
	k_1	k_2	k_3	k_4	k_5	k_6				
1	-5.6±0.1	2183.2 ±24.5	-1.3±0.4	-358.9 ±118.7	-0.8±0.4	-382.5 ±120.0	4.8	0.2	0.1	9.1

1: bioturbosina + dietilenglicol monometil éter; 3: bioturbosina + dietilenglicol monoetil éter; 3: Bioturbosina + dietilenglicol monobutil éter.

La figura 31 muestra los resultados para la predicción de la viscosidad cinemática a -20° C en función de la fracción molar del aditivo y su comparación su comparación con el límite establecido para viscosidad por la ASTM D1655 para la viscosidad cinemática.

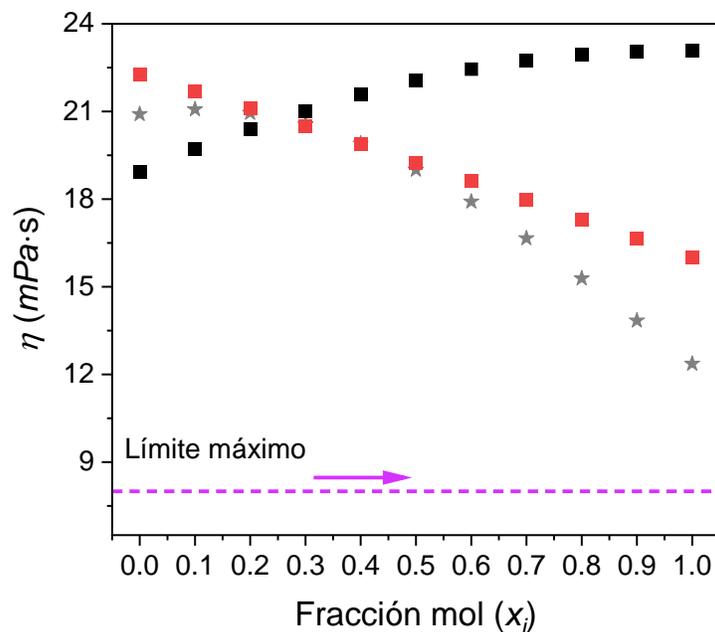


Figura 31. Predicción de la viscosidad a -20°C a partir de la correlación de Cano-Gómez ^[47]: DME (★), DEE (■) y DBE (■).

Con base en los resultados mostrados en la predicción a -20°C , ninguna de las mezclas de bioturbosina + aditivos cumpliría con el límite máximo establecido por la ASTM D1655 para viscosidad cinemática de 8 cSt. Lo anterior concuerda con los resultados para densidad de las mezclas de bioturbosina, indicando la necesidad de estudiar nuevos aditivos que logren reducir los valores de densidad y viscosidad de la bioturbosina producida en este trabajo. Otra alternativa, sería destilar las cadenas de hidrocarburos $\text{C}_8\text{-C}_{16}$, pertenecientes en mayor medida a la turbosina de origen fósil, o bien, evaluar mezclas ternarias con turbosina fósil y elucidar el efecto de las mezclas de bioturbosina + aditivos sobre sus propiedades fisicoquímicas.

5.8.3. Modelo de Redlich-Kister ^[49].

Las figuras 32, 33 y 34 muestran el comportamiento del V^E , $\Delta\eta$ y $\Delta\eta_D$ para los tres sistemas estudiados junto con el modelo Redlich-Kister ^[49] (Ecuación 13) en función de la temperatura. Los parámetros se pueden consultar en el anexo 6.

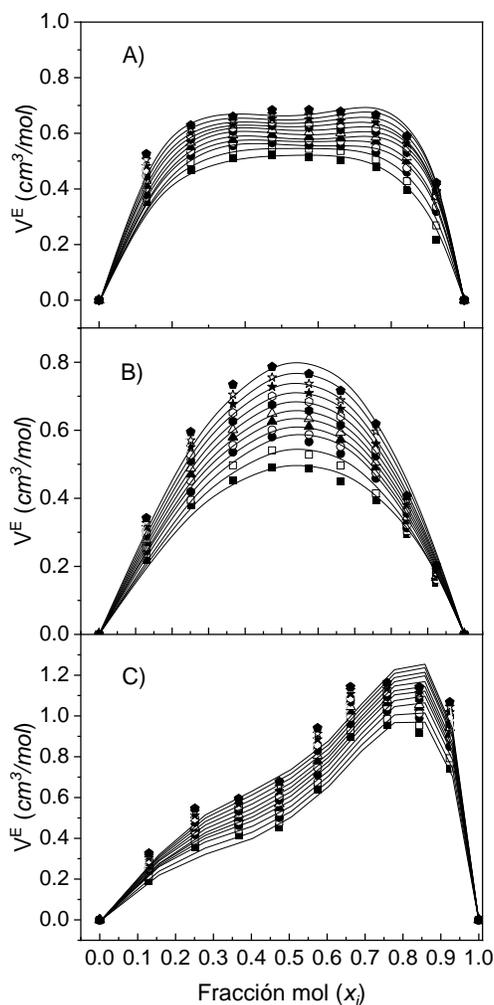


Figura 32. Comparación entre los valores experimentales de volumen en exceso molar (V^E) y los calculados por el modelo de Redlich-Kister ^[49]. A) bioturbosina + DME; B) bioturbosina + DEE; C) bioturbosina + DBE. ■, 288.15 K; □, 293.15 K; ●, 298.15 K; ○, 303.15 K; ▲, 308.15 K; △, 313.15 K; ●, 318.15 K; ○, 323.15 K; ★, 328.15 K; ☆, 333.15 K; ◆, 338.15 K; --, valores calculados por el modelo de Redlich-Kister ^[49].

Se puede observar que para la mezcla de bioturbosina + DEE a altas temperaturas, el modelo de RK subestima el V^E con DE entre (0.06 y 0.07) mol·cm⁻³, mientras que, para los otros sistemas, el modelo de RK presenta una buena capacidad predictiva.

Resultados similares se encontraron para el ajuste de la desviación de viscosidad ($\Delta\eta$) para el sistema bioturbosina + DBE (Figura 33), donde el modelo de RK presenta una mayor desviación a composiciones de aditivo cercanas 0.1. No obstante, la desviación estándar se encuentra alrededor de 0.06 mm²·s⁻¹. Este ajuste pudiera ser mejorado usando mayor número de parámetros en el modelo, sin embargo, la desviación estándar se encuentra dentro del error experimental.

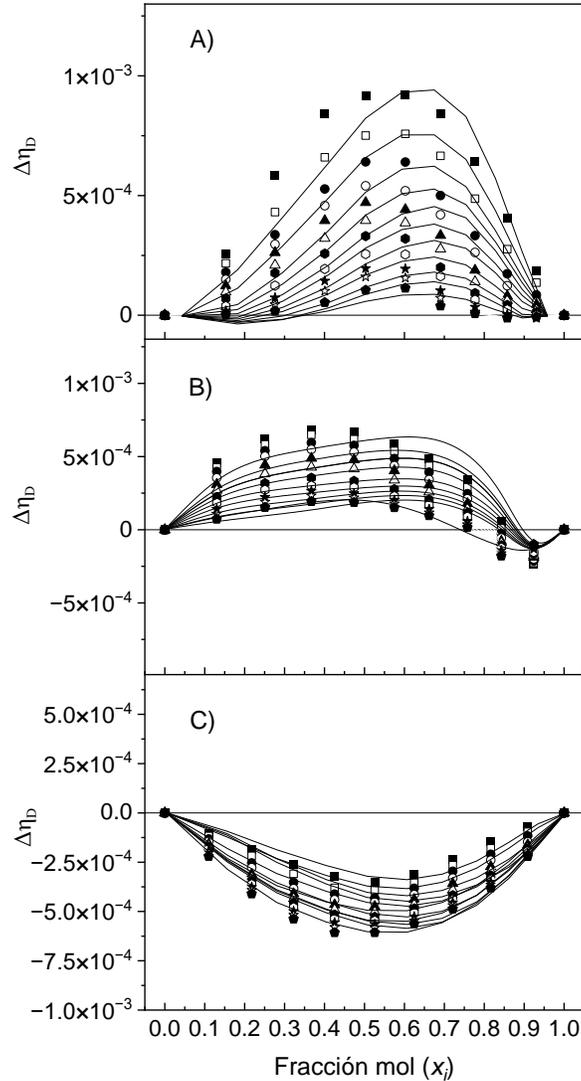


Figura 34. Comparación entre los valores experimentales de desviación de viscosidad ($\Delta\eta_D$) y los calculados por el modelo de Redlich-Kister ^[49]. A) Bioturbosina + DME; B) Bioturbosina + DEE, C) Bioturbosina + DBE. ■, 288.15 K; □, 293.15 K; ●, 298.15 K; ○, 303.15 K; ▲, 308.15 K; △, 313.15; ●, 318.15 K; ○, 323.15 K; ★, 328.15 K; ☆, 333.15 K; ◆, 338.15 K; --, valores calculados por el modelo de Redlich-Kister ^[49].

Finalmente, el modelo de RK ajusta correctamente la desviación del índice de refracción para las tres mezclas de bioturbosina + éteres de glicol. El anexo 7 muestra los parámetros para el modelo de RK de todas las propiedades evaluadas en este trabajo.

5.5.5.4. Modelo de Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48] para la predicción del índice de refracción y densidad.

La tabla 17 muestra el valor los parámetros calculados para la ecuación del índice de refracción reportada por Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48].

Tabla 12. Parámetros de índice de refracción para la correlación de Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48]

Parámetros								
Sistema	k_1	k_2	k_3	k_4	DPPA (%)	Bias (%)	DE (%)	PAMD (%)
1	$1.56 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.02 \pm 3 \times 10^{-3}$	-4×10^{-4} $\pm 7 \times 10^{-6}$	-9×10^{-4} $\pm 1 \times 10^{-5}$	0.10	-0.01	0.00	0.16

1: bioturbosina + dietilenglicol monometil éter; 2: bioturbosina + dietilenglicol monoetil éter; 3: bioturbosina + dietilenglicol monobutil éter.

El modelo de Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48] mostró un buen ajuste para la predicción del índice de refracción para las tres mezclas de bioturbosina + éteres de glicol. Se obtuvo una DPPA de 0.10%, 0.20%, y 0.13%, para las mezclas de bioturbosina + DME, + DEE y + DBE, respectivamente. Por lo anterior, la ecuación de Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48] puede ser utilizada para la predicción del índice de refracción de las mezclas a distintas concentraciones y temperaturas.

Por otro lado, la tabla 18 muestra los parámetros obtenidos para la correlación de la densidad reportada por Vargas-Ibáñez *et al.* ^[48]. El modelo presentó una DPPA de 0.09%, 0.18%, y 0.11% para los tres sistemas de bioturbosina + DME, + DEE y + DBE, respectivamente. Estos valores están dentro del error experimental y permite utilizar la ecuación para la predicción de la densidad de las mezclas a diferentes condiciones de temperatura y composición.

Tabla 13. Parámetros de densidad para la correlación de Vargas-Ibáñez *et al.* [48].

Parámetros							
Sistema	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	DPPA (%)	Bias (%)	DE (g/cm ³)	PAMD (%)
1	0.68 $\pm 2 \times 10^{-4}$	-0.08 $\pm 8 \times 10^{-4}$	$-0.05 \pm 7 \times 10^{-4}$	0.09	0.01	0.00	0.26
2	0.68 $\pm 2 \times 10^{-4}$	-0.08 $\pm 7 \times 10^{-4}$	$-0.04 \pm 6 \times 10^{-4}$	0.18	0.04	0.00	0.92
3	0.68 $\pm 2 \times 10^{-4}$	-0.06 $\pm 9 \times 10^{-4}$	$-0.02 \pm 9 \times 10^{-4}$	0.11	-0.01	0.00	0.29

1: bioturbosina + dietilenglicol monometil éter; 2: bioturbosina + dietilenglicol monoetil éter; 3: bioturbosina + dietilenglicol monobutil éter.

5.9. Análisis de ciclo de vida.

5.9.1. Inventario de ciclo de vida.

A escala laboratorio para la etapa de “1.0 Pretratamiento”, el consumo de energía eléctrica es mayor (0.15 kWh/MJ_{BJF}) que su contraparte a escala industrial (0.08 kWh/MJ_{BJF} para el escenario de Piccinno *et al.* [31] y 0.04 kWh/MJ_{BJF} para el escenario de ASPEN), con excepción del escenario a escala industrial evaluado mediante DWSIM (0.30 kWh/MJ_{BJF}). La diferencia entre los consumos energéticos de los tres escenarios a escala industrial (simulación de DWSIM, modelos de Piccinno *et al.* [31] y ASPEN), se debe a las diferentes ecuaciones empleadas para estimar el requerimiento energético. Por un lado, el modelo de Piccinno *et al.* [31] (Ecuación 14) considera el calor sensible y el calor de pérdida en función del área de transferencia de calor, mientras que la simulación de DWSIM, estima la demanda energética del calentamiento a través de la diferencia entre la entalpía de la corriente de entrada y la de salida multiplicada por el flujo másico (Ecuación 18). El cálculo de la entalpía de salida o de entrada se genera automáticamente en el software en términos de las entalpías.

$$Q_{heater} = \frac{H_2 - H_1}{\eta} \dot{m} \quad (18)$$

Donde Q_{heater} es el consumo energético por el calentamiento (kJ/h); H_2 y H_1 son las entalpías de mezcla de entrada y de salida del proceso, respectivamente (kJ/kg); \dot{m} es el flujo masico de la corriente (kg/h) y η es la eficiencia de calentamiento.

Similar a lo discutido para la demanda energética de los calentadores, los reactores de conversión utilizados en la simulación emplean ecuaciones basadas en la entalpia de reacción y reactivos. La ecuación 19 es utilizada por el software de DWSIM para la estimación energética de las reacciones de conversión.

$$Q_{reactor} = \Delta H_{rxn} - Hr \quad (19)$$

Donde $Q_{reactor}$ es el calor que se pierde/añade (kW); ΔH_{rxn} es el calor de reacción (kW) y Hr es la entalpia de entrada de los reactivos (kW).

Para el escenario evaluado con los modelos de Piccinno *et al.* [31], la demanda energética se consideró con base en el calor sensible y el calor por perdidas a los alrededores (Ecuación 18).

Lo anterior se puede observar en la etapa “1.4 Esterificación/Transesterificación” (Tabla 13), donde el consumo energético para el escenario de la simulación mediante DWSIM y ASPEN es de 0.01 kWh/MJ_{BJF} y 4x10⁻³ kWh/MJ_{BJF}, respectivamente, mientras que para el escenario de Piccinno *et al.* [31] la demanda energética es de 0.02 kWh/MJ_{BJF}. La diferencia entre los modelos se potencializa en la etapa “4.0 HEFA” debido a la diferencia de temperaturas entre la temperatura de operación del reactor y la temperatura ambiente (25° C). En HEFA la temperatura

de operación son 300° C, mientras que en las reacciones de esterificación/transesterificación, la temperatura de operación de 60° C.

5.9.2. Selección de indicadores de impacto ambiental.

Para la selección de los indicadores que se evaluaron en este trabajo, se siguieron dos metodologías: *i)* comparación con trabajos reportados en literatura para procesos de producción de bioturbosina y *ii)* normalización de los indicadores de impacto ambiental. En las siguientes secciones, se detalla cada una de estas metodologías

5.9.2.1. Selección de indicadores de impacto ambiental: revisión de literatura.

En la sección 2.3 se presentan trabajos reportados por otros autores que realizaron el análisis de impacto ambiental para la producción de bioturbosina. En cada uno de estos trabajos, se escogieron y analizaron distintos indicadores de impacto ambiental. Los indicadores de cambio climático, acidificación y eutroficación del agua, son algunos de los indicadores de impacto ambiental que más han sido analizados en este tipo de procesos.

5.9.2.2. Selección de indicadores de impacto ambiental: normalización.

Para complementar la revisión bibliográfica, se realizó la normalización de los indicadores de impacto ambiental con el objetivo de determinar los impactos relativos de los diferentes indicadores. Se utilizaron factores de normalización (FN) del método de Environmental Footprint (EF) V.3.1. ^[69] que se presentan en la tabla 20. En este trabajo, los resultados de la normalización fueron considerados únicamente para realizar una selección de los indicadores de impacto ambiental a utilizar en esta investigación. La normalización se llevó a cabo dividiendo el

resultado calculado mediante el método de Environmental Footprint (EF) V.3.1 [69] para cada indicador de impacto ambiental entre su factor de normalización. Mediante la normalización, podemos identificar los indicadores de impacto ambiental más relevantes para nuestro proceso.

Tabla 14. Factores de normalización de los indicadores de impacto ambiental de la metodología de Environmental Footprint (EF) V.3.0.

Indicador de impacto ambiental	Factor de normalización	Unidades	Indicador de impacto ambiental	Factor de normalización	Unidades
Cambio climático	5.79×10^{13}	kg CO _{2eq}	Acidificación	3.83×10^{11}	mol H ⁺ _{eq}
Agotamiento del ozono	1.61×10^8	kg CFC-11 _{eq}	Eutroficación: terrestre	1.22×10^{12}	mol N _{eq}
Toxicidad humana ¹	2.66×10^5	CTU _h	Eutroficación: agua dulce	5.06×10^9	kg P _{eq}
Toxicidad humana ²	3.27×10^5	CTU _h	Eutroficación: marina	1.95×10^{11}	kg N _{eq}
Material particulado	4.95×10^6	Incidencia de enfermedades	Uso de tierra	9.64×10^{15}	pt
Radiación ionizante	2.91×10^{13}	kBq U-235 _{eq}	Ecotoxicidad: agua dulce	8.15×10^{13}	CTU _e
Formación de oxidantes fotoquímicos	2.80×10^{11}	kg NMVOC _{eq}	Uso de agua	7.91×10^{13}	m ³ H ₂ O _{eq}
Uso de combustibles fósiles	4.50×10^{14}	MJ	Uso de recursos minerales y metales	4.39×10^8	kg Sb _{eq}

¹ Toxicidad humana cancerígena.

² Toxicidad humana no cancerígena.

La figura 35, muestra los resultados normalizados de los indicadores de impacto ambiental para la producción de bioturbosina. Los indicadores de uso de combustibles fósiles, eutroficación del agua dulce, acidificación y uso de recursos minerales y metales fueron los indicadores que presentaron una mayor influencia en el impacto ambiental del proceso de producción, mientras que, los indicadores de consumo de agua y toxicidad humana no cancerígena (orgánica) presentan un valor cercano a cero. Por lo tanto, la influencia de estos indicadores en el impacto

ambiental del proceso de producción de bioturbosina es mínimo. A partir de la normalización y la identificación de los indicadores de impacto ambiental con mayor contribución relativa en el proceso de producción de bioturbosina y considerando el análisis de la literatura, se seleccionaron los indicadores de impacto ambiental que se analizaron en este trabajo.

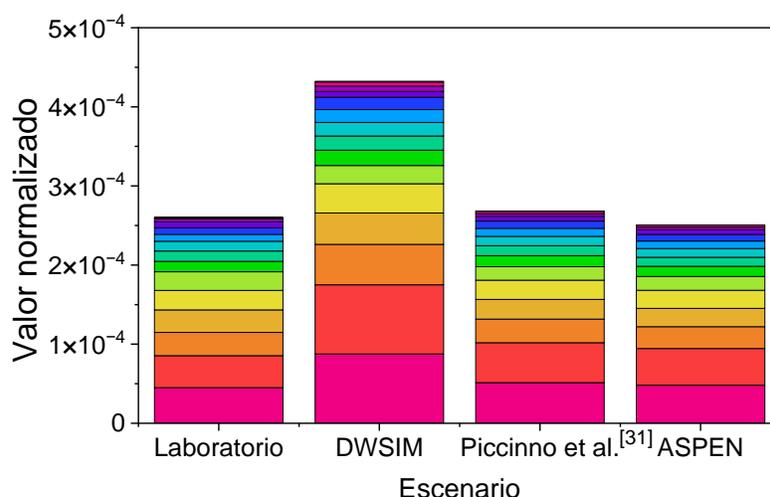


Figura 35. Valores normalizados de los indicadores de impacto ambiental. ■, Uso de combustibles fósiles; ■, Eutroficación: agua; ■, Acidificación; ■, Uso de recursos minerales y metales; ■, Ecotoxicidad: agua dulce; ■, Cambio climático; ■, Formación de material particulado; ■, Formación de óxidos fotoquímicos: salud humana; ■, Eutroficación terrestre; ■, Uso de agua; ■, Eutroficación: marina; ■, Toxicidad humana: cancerígena; ■, Radiación ionizante: salud humana; ■, Uso de agua; ■, Toxicidad humana: no cancerígena, orgánicos.

Con base en los resultados normalizados (sección 5.9.2.2) y la revisión de los indicadores evaluados en literatura (sección 5.9.2.1) se decidió que para este trabajo se evaluarían 5 indicadores de impacto ambiental: *i*) indicador de cambio climático (ICC), *ii*) indicador de acidificación (IA), *iii*) indicador de uso de combustibles fósiles (IUCF), *iv*) indicador de eutroficación del agua (IEA), *v*) indicador de uso de recursos minerales y metales (IRM).

5.9.3. Evaluación del impacto ambiental.

5.9.3.1. Indicadores de impacto ambiental.

En todos los indicadores medioambientales evaluados (cambio climático, acidificación, eutroficación de agua dulce, uso de combustibles fósiles y uso de recursos minerales y metales) se puede apreciar que, para los cuatro escenarios, se obtienen créditos medioambientales debido a la producción de biodiésel como coproducto del proceso de producción de bioturbosina.

El escenario a escala industrial de DWSIM mostró un mayor impacto ambiental en los indicadores de cambio climático y acidificación, $0.40 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $2.29 \times 10^{-3} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$, respectivamente, comparado con los escenarios a escala laboratorio ($0.24 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.96 \times 10^{-3} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$), industrial de Piccinno *et al.*^[31] ($0.21 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.33 \times 10^{-3} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$) y con el simulador ASPEN ($0.21 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.26 \times 10^{-3} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$). Lo anterior, es consecuencia de un mayor consumo de energía eléctrica (2.48 MJ/UF escenario DWSIM) comparado con los escenarios de Piccinno *et al.*^[31] (1.30 MJ/UF), ASPEN (1.20 MJ/UF) y escala laboratorio (1.52 MJ/UF).

Las etapas de “1.0 Pretratamiento” y “2.0 Síntesis de zeolita” presentan una mayor contribución a los indicadores de cambio climático y acidificación, en lo que respecta a escala laboratorio y escala industrial (DWSIM y ASPEN), debido a la cantidad de metanol requerida en la reacción de esterificación/transesterificación. La etapa “0.0 Transporte” no presentó una contribución significativa para ninguno de los cuatro escenarios cuando se consideró que la distancia desde la planta de tratamiento donde se generan los lodos residuales y la planta de producción de bioturbosina, es

de 30 km. Para el escenario a escala industrial evaluado mediante las ecuaciones de Piccinno *et al.* ^[31], las etapas de “1.0 Pretratamiento” y “4.0 HEFA” son las etapas con mayor contribución a los indicadores de impacto ambiental debido al uso del metanol en la reacción de esterificación/transesterificación y la demanda energética, respectivamente.

El impacto medioambiental global de la producción de bioturbosina a escala laboratorio y a escala industrial (evaluada a partir de los modelos de Piccinno *et al.* ^[31]), es similar en los indicadores de cambio climático y acidificación. Esto se debe a la similitud entre los modelos utilizados para evaluar cada uno de estos escenarios (sección 4.5.2 y sección 4.5.3.2).

Considerando la diferencia entre los modelos utilizados en uno u otro escenario a escala industrial (Ecuación 18 y Ecuación 19), donde el escenario de Piccinno *et al.* ^[31] considera pérdidas de calor a los alrededores, se puede explicar porque para la etapa “4.0 HEFA”, el modelo de Piccinno *et al.* ^[31] presentó un mayor consumo energético. Esta condición se asocia a una mayor contribución a los indicadores de cambio climático y acidificación ($0.06 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.4 \times 10^{-4} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$), comparado con el escenario de la simulación de DWSIM ($0.02 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.3 \times 10^{-4} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$) y ASPEN ($0.01 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $7.3 \times 10^{-5} \text{ mol H}^+_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$).

Los indicadores de uso de combustibles fósiles y eutroficación de agua dulce fueron evaluados para los cuatro escenarios estudiados en este trabajo. La figura 37, muestra estos resultados. El escenario de DWSIM es el que presenta un mayor impacto ambiental asociado a los indicadores de uso de combustibles fósiles y eutroficación de agua dulce ($5.93 \text{ MJ}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $1.47 \times 10^{-4} \text{ kg P}_{\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$,

respectivamente) comparado con los escenarios a escala laboratorio (3.89 MJ/MJ_{BJF} y 8.98×10^{-5} kg P_{eq}/MJ_{BJF}), e industriales de Piccinno *et al.* [31] (3.17 MJ/MJ_{BJF} y 7.69×10^{-5} kg P_{eq}/MJ_{BJF}) y ASPEN (3.12 MJ/MJ_{BJF} y 7.47×10^{-5} kg P_{eq}/MJ_{BJF}).

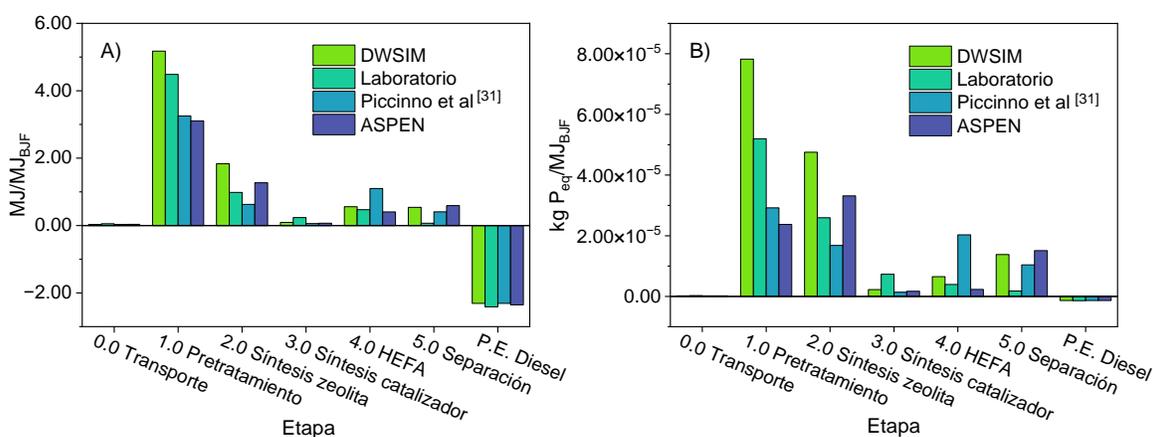


Figura 37. Evaluación de impacto ambiental del proceso de producción de bioturbosina evaluado mediante tres metodologías diferentes: A) Indicador de uso de combustibles fósiles (IUCF) e B) indicador eutrofización de agua dulce (IEA). P.E; producto evitado.

Estos indicadores mostraron una tendencia similar a la observada para los indicadores de ICC e IA debido a las diferencias de los modelos para la estimación energética discutidas anteriormente.

Por su parte, la figura 38 muestra la contribución por etapas de los cuatro escenarios evaluados al indicador de uso de recursos minerales y metales. Contrario a los otros resultados anteriores, el escenario a escala laboratorio mostró la mayor contribución al indicador de uso de recursos minerales y metales (1.83×10^{-6} kgSb_{eq}/MJ_{BJF}), comparado con los escenarios a escala industrial mediante DWSIM (1.14×10^{-6} kgSb_{eq}/MJ_{BJF}), los modelos de Piccinno *et al.* [31] (1.09×10^{-6} kgSb_{eq}/MJ_{BJF}) y ASPEN (1.09×10^{-6} kgSb_{eq}/MJ_{BJF}). Lo anterior, se debe al uso de ácido sulfúrico (H₂SO₄) en

la etapa de baño ácido, el precursor de $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ en la síntesis del catalizador, y el (PTSA y ChCl) que se utilizan como reactivos para la síntesis del DES.

El aumento en el consumo de H_2SO_4 y nitrato de níquel ($\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$) a escala laboratorio se debe, a que bajo este escenario, la cantidad de lodos que se procesan es mayor que a escala industrial, 0.84 kg lodo residual a escala laboratorio/ MJ_{BJF} y 0.56 kg lodo residual a escala industrial / MJ_{BJF} . Esta diferencia en la demanda del lodo residual entre las dos escalas está ligada a la demanda de solución ácida que se utiliza en la etapa “1.2 Baño ácido” (relación volumétrica 1:1 lodo residual-solución ácida). Al aumentar la cantidad de lodo residual que se requiere procesar, aumenta a su vez la demanda de solución ácida y por ende la demanda de H_2SO_4 .

De la misma manera, los reactivos de $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$, PTSA y ChCl se ven afectados por este incremento en el lodo, pero en diferentes etapas del proceso. El incremento en el consumo de $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ a escala laboratorio se refleja en la etapa “4.0 HEFA” como consecuencia de la demanda de catalizador de Ni, mientras que para el PTSA y ChCl se debe a un mayor consumo de estos reactivos en forma de DES en la etapa “1.3 esterificación/transesterificación”.

A partir de los resultados discutidos anteriormente, podemos deducir que, para la escala industrial evaluada mediante DWSIM, se pueden presentar sobreestimaciones energéticas con respecto a los otros escenarios. Los escenarios a escala industrial evaluados con ASPEN y mediante las ecuaciones de Piccinno *et al.* ^[31] presentaron desempeños medioambientales similares de 0.21 kgCO_2 eq/UF.

Los modelos de Piccinno *et al.* ^[31] pueden ser utilizados como una herramienta para realizar una primera aproximación a una escala superior a la escala laboratorio de una forma sencilla y sin la necesidad de utilizar un software especializado, el cual tiende a demandar más tiempo y ser más complejo en algunas ocasiones.

Adicionalmente, la figura 39 muestra la comparación entre los resultados obtenidos para el indicador de cambio climático de los cuatro escenarios evaluados y su comparación con lo estipulado por el Reglamento Delegado (UE) 2023/1185 de la Directiva (UE) 2018/2001 (RED II) al fomento del uso de energía procedente de fuentes renovables para combustibles elegibles como CSA. Se puede observar que ninguno de los escenarios evaluados presentó un valor menor a lo estipulado por la RED II, por lo que, el proceso de producción bioturbosina a partir de lodos residuales bajo las consideraciones de esta evaluación de impacto ambiental para los cuatro escenarios, no podría ser considerada como combustible sustentable para la aviación (CSA). Sin embargo, este tipo de análisis de ciclo de vida *ex-ante*, es necesario y permite la identificación de puntos críticos del proceso y propuestas de eco-concepción para su viabilidad. El anexo 8, muestra la comparación y los resultados de los escenarios evaluados en este trabajo

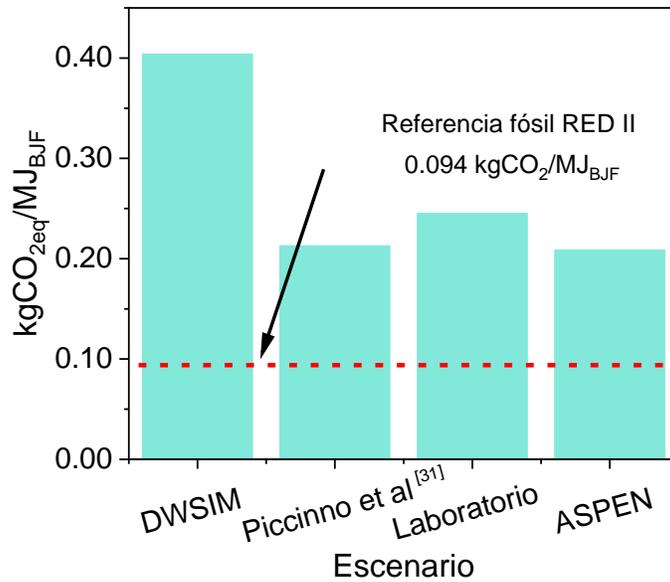


Figura 39. Comparación entre el resultado obtenido para el ICC de los cuatro escenarios evaluados y su comparación con el límite estipulado por el reglamento de la RED II para combustibles sustentables para aviación. --, referencia fósil de la RED II.

Una evaluación del impacto ambiental de la producción y uso del combustible tanto para turbosina fósil como para los cuatro escenarios evaluados fue realizada con el fin de comparar la contribución al indicador de cambio climático. La figura 40 muestra los resultados obtenidos. Las emisiones asociadas a la combustión de la turbosina fósil se evaluaron a partir del método del GREET 2023. La turbosina fósil contribuye al indicador de cambio climático por las emisiones generadas durante la combustión, mientras que, para los escenarios evaluados en este trabajo, las emisiones por combustión para el ICC se consideran biogénicas dado la naturaleza de la materia prima (grasas residuales), por lo que su uso no genera impactos ambientales asociados con este indicador. Esta suposición se hace con base en la aproximación 0/0 para la cuantificación del CO₂ biogénico del Product Environmental Footprint ^[69].

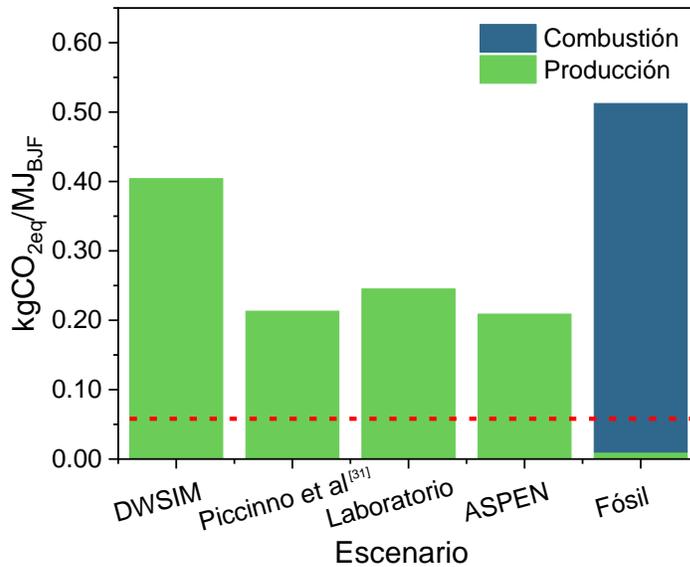


Figura 40. Evaluación del ICC para los escenarios estudiados en este trabajo y la turbosina fósil. --, referencia fósil de la RED II.

Contrario a lo observado para los escenarios evaluados en este trabajo, el proceso de producción de turbosina fósil tiene una contribución mínima de 0.012 kgCO₂/MJ_{BJF} al indicador de cambio climático. Esta gran diferencia entre los escenarios evaluados en este trabajo y la turbosina fósil se debe al nivel de madurez tecnológica entre los procesos. Por un lado, la producción de turbosina fósil ha sido objeto de estudio de distintos trabajos enfocados en la optimización de los procesos de energía y masa que le otorgan un nivel alto de madurez tecnológica en comparación con los escenarios estudiados, ya que estos últimos se encuentran en etapa de estudio a nivel de laboratorio.

Se realizó un análisis de sensibilidad con el objetivo de evaluar las variables del proceso de producción de bioturbosina que permitan satisfacer el límite de la RED II para el ICC. Además, se propusieron alternativas de eco-concepción que permitan disminuir el impacto ambiental asociado al proceso de producción de bioturbosina.

5.9.3.2. Identificación de hot-spots, análisis de sensibilidad y propuestas de eco-concepción.

En la sección anterior (sección 5.9.3.1) se observó que el uso de electricidad a partir de la red eléctrica mexicana y el uso de metanol fueron los parámetros que tuvieron una mayor contribución a los indicadores de impacto ambiental evaluados en este trabajo. Estos se identificaron como puntos críticos del proceso y potenciales áreas de propuestas de eco-concepción. Se realizó el análisis de sensibilidad basado en el mix energético y metanol.

El análisis de sensibilidad se realizó a escala industrial a partir de los modelos propuestos por Piccinno *et al.* ^[31], para estimar el requerimiento energético de todas las etapas del proceso de producción y utilizando el indicador de cambio climático (ICC) como punto de comparación. Lo anterior, debido a que este indicador permite comparar el desempeño medioambiental de los biocombustibles con respecto a la referencia de combustible fósil de la RED II.

5.9.3.2.1. Efecto de la mezcla energética.

En la evaluación de impacto ambiental para el indicador de cambio climático se encontró que el mix energético mexicano fue uno de los principales factores que contribuyó en mayor medida al desempeño medioambiental de la producción de bioturbosina. Por lo anterior, para este análisis se varió el proveedor de electricidad con la que se satisface la demanda energética del proceso de producción de bioturbosina. Se seleccionaron los mix energéticos de diferentes países para evaluar la viabilidad del proceso de producción de bioturbosina en función de su

desempeño ambiental. Para este análisis se escogieron los siguientes mix energéticos:

- Estados Unidos (US-NPCC):
- Francia (FR)
- Brasil (BR mid-western grid)
- China (CN-SGCC)

La selección de los distintos países se realizó en función de su locación y su sistema de producción energética (mix energético). El mix energético de Estados Unidos y China se produce principalmente de fuentes fósiles (Figura 41) similar al mix energético mexicano. Por su parte, países como Francia y Brasil, producen su energía eléctrica a partir de sistemas nucleares e hidroeléctricos, respectivamente. Esta diferencia en la generación de energía a partir de distintas fuentes renovables y no renovables juega un papel importante en la viabilidad ambiental en la producción de la bioturbosina

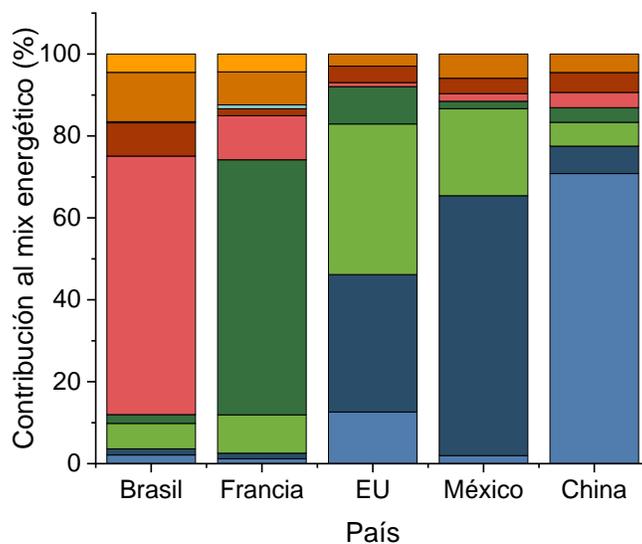


Figura 41. Contribución al mix energético de distintos países. ■, carbón; ■, petróleo; ■, gas natural; ■, energía nuclear; ■, energía hidroeléctrica; ■, biocombustibles; ■, residuos; ■, energía eólica; ■, energía solar. EU: Estados Unidos.

La figura 42, muestra los resultados obtenidos para la contribución al indicador de ICC del proceso de producción de bioturbosina utilizando mix energéticos de diferentes países.

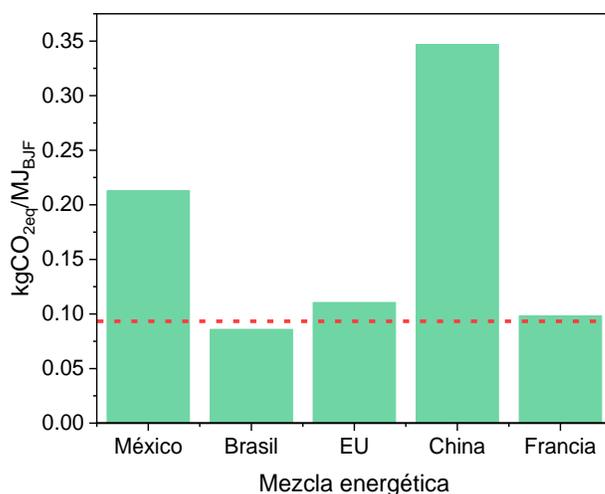


Figura 42. Contribución al indicador de cambio climático del proceso de producción de bioturbosina utilizando la mezcla energética de diferentes países. EU: Estados Unidos. --, referencia fósil RED II.

Se puede observar que la producción de bioturbosina utilizando los mix energéticos de Francia y Brasil, muestra el menor impacto ambiental ($0.10 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $0.09 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$, respectivamente) para el indicador de cambio climático, donde la mezcla energética de Brasil permitiría satisfacer el límite impuesto por la RED II. Por su parte, México y China fueron los países que mostraron el mayor impacto medioambiental en cuanto al indicador evaluado, mostrando valores de $0.21 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$ y $0.35 \text{ kgCO}_{2\text{eq}}/\text{MJ}_{\text{BJF}}$, respectivamente.

Lo anterior, se debe a que el 74% del mix energético de Brasil se genera a partir de plantas hidroeléctricas (64%) y plantas de energía eólica (8%), tan solo el 22% de la energía total generada se produce a partir de gas natural, carbón mineral y/o combustibles no renovables (fósiles) ^[71]. En México, aproximadamente el 65% de la energía total producida en el país proviene de fuentes fósiles como el gas natural y/o los combustibles, tan solo el 2.7% de la energía total que se produce en el país proviene de fuentes renovables; La energía hidroeléctrica (9.7%) y eólica (6.6%) son las fuentes de producción de energía limpia que más se utilizan ^[72]. Por lo anterior, si no se realizaran propuestas de ecodiseño en el proceso, la producción de bioturbosina a partir de lodos residuales no sería viable (en función de la referencia fósil de la RED II para considerarla como un CSA) en México. Sin embargo, países con mezclas energéticas con mayor producción de energía verde y/o renovable como Brasil y Francia, podrían implementar esta tecnología.

5.9.3.2.2. Efecto del metanol.

El metanol es utilizado como reactivo en la reacción de esterificación/transesterificación de la etapa “1.0 Pretratamiento”. La alta relación de metanol-grasa (10 mol metanol/mol de grasa) ocasiona que haya un consumo elevado de este reactivo. Además, el metanol es un reactivo tóxico y con base al inventario de Ecoinvent V.3.7.1, este se sintetiza a partir de procesos de refinado del petróleo. Para este análisis de sensibilidad se ha considerado el uso de:

- Bio-metanol producido a partir de biomasa
- Etanol
- Bio-etanol producido a partir de fermentación

Aunque es cierto que el etanol es un compuesto distinto al metanol, no existe una diferencia significativa en el rendimiento de la reacción cuando se utiliza un alcohol u otro en procesos de esterificación/transesterificación. Anteriormente, ya se ha reportado el uso de etanol en las reacciones de esterificación y transesterificación. La figura 43, muestra los resultados obtenidos para la evaluación del indicador de cambio climático para la etapa de “1.0 Pretratamiento” utilizando alcoholes provenientes de distintas fuentes renovables y no renovables. Se puede observar que los escenarios donde se utilizó metanol fósil y metanol producido a partir de biomasa (bio-metanol) como reactivos, mostraron un menor impacto asociado al indicador de cambio climático comparados con los escenarios del etanol. Lo anterior, se puede explicar revisando los procesos de producción de los 4 alcoholes. Para la comparación de los 4 escenarios, se utilizó como fuente de energía el carbón. La producción de 1 kg de metanol fósil demanda 0.05 kg de carbón/kg de

alcohol, mientras que para el bio-metanol, la demanda aumenta hasta los 0.22 kg de carbón/kg de alcohol. Por otro lado, para el bio-etanol y el etanol, la demanda de carbón es de 0.12 kg de carbón/ kg de alcohol y 0.65 kg de carbón/kg de alcohol fósil, respectivamente.

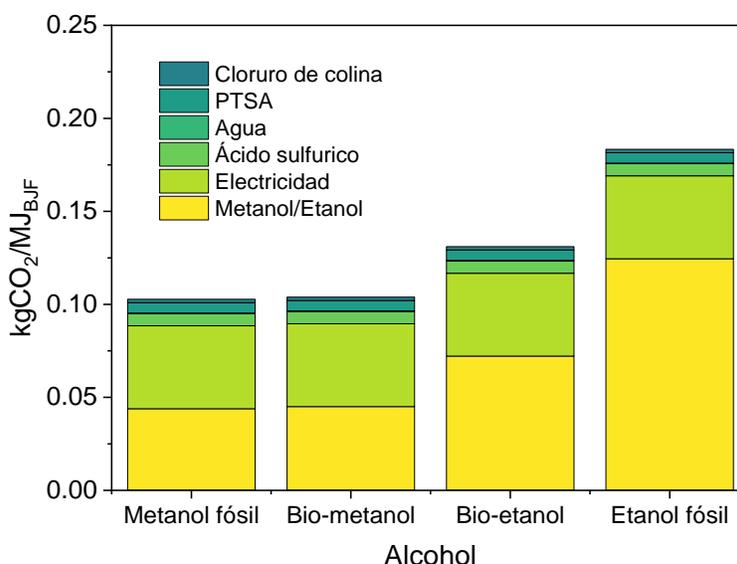


Figura 43. Análisis de sensibilidad de la etapa de pretratamiento de lodos residuales.

El bio-etanol presenta un menor consumo de carbón (0.12 kg de carbón/ kg de alcohol) comparado con el bio-metanol (0.22 kg de carbón/kg de alcohol). No obstante, la ocupación agrícola del bio-etanol es mayor (0.18 m²·a/kg de alcohol) a la del bio-metanol (6.10x10⁻⁴ m²·a/kg de alcohol), esta condición incrementa las emisiones en la producción de bio-etanol como consecuencia de la omisión en la captura de carbono. Por lo anterior, la sustitución de metanol por bio-metanol, etanol o bioetanol, no son alternativas viables que permitan reducir el impacto ambiental del proceso de producción de bioturbosina.

5.9.3.2.3. Alternativas de eco-concepción.

A continuación, se enlistan algunas alternativas de eco-concepción que permitirían reducir el impacto medioambiental del proceso de producción de bioturbosina:

- **Redes de intercambio de calor:** El aprovechamiento de las corrientes calientes provenientes de los procesos de baño ácido, síntesis hidrotermal de la zeolita, calcinación de zeolita y catalizador, así como, el flujo de salida de la reacción de hidropocesamiento (HEFA) pueden utilizarse para disminuir el consumo energético para las etapas de calentamiento e intercambio de calor.
- **Calcinación del lodo residual:** El aprovechamiento del lodo residual de salida en el proceso de filtrado podría emplearse como una fuente energética alterna mediante su calcinación.
- **Catalizador y su rendimiento:** Proponer el uso de un catalizador alternativo que pueda mejorar el rendimiento obtenido comparado con el catalizador de Ni/SAPO-11. Así como, evaluar los ciclos de uso antes de la desactivación del catalizador. Esto último, permitiría la reducción parcial de las emisiones de la zeolita y el catalizador.

6. Conclusiones

A continuación, se exponen las conclusiones más relevantes a partir de los resultados discutidos en las secciones anteriores:

- La selección del método de extracción de las grasas, método de jeringa y método sólido, no representó una diferencia significativa en los rendimientos obtenidos para la extracción de la grasa (< 4%).
- El uso de catalizadores de Cu promueve la desoxigenación de los grupos C=O de los ácidos grasos presentes en el lodo residual con rendimientos de alrededor del 50%. Por su parte, los catalizadores de Ni mostraron un menor efecto en la desoxigenación del C=O, presentando rendimientos de 35%. Estas condiciones se presentaron en ambas atmósferas (100%N₂ y 35%H₂/65%N₂)
- Los catalizadores de Ni presentaron mayor selectividad a la formación de hidrocarburos más pesados (C₁₄-C₁₆), mientras que los catalizadores de Cu mostraron una distribución de cadenas de hidrocarburos más homogénea, debido a la presencia de reacciones secundarias como el craqueo térmico y una mayor tasa en la remoción de moléculas de O₂.

- La densidad y viscosidad (predicción) se compararon con la norma ASTM D1655. Ninguna de las mezclas de bioturbosina + éteres de glicol cumplió con el límite establecido por la norma ASTM D1655 para densidad y viscosidad. Por lo que habría que explorar el uso de otros aditivos para turbosina.
- La presencia de hidrocarburos pesados (C_{14} - C_{16}) en la bioturbosina producida incrementa la densidad y viscosidad del combustible, evitando el cumplimiento de los límites establecidos por la norma ASTM D1655.
- Las propiedades fisicoquímicas determinadas experimentalmente se ajustaron adecuadamente (V^E , $\Delta\eta$, $\Delta\eta_D$) a los modelos propuestos en este trabajo, con desviación estándar cercana a 0.00 para densidad, viscosidad y índice de refracción, respectivamente, permitiendo la predicción de estas propiedades a diferentes condiciones.
- Mediante la estimación del volumen molar en exceso (V^E) y la desviación de viscosidad ($\Delta\eta$) se elucidaron el tipo de interacciones entre los componentes de la mezcla bioturbosina + éteres de glicol, permitiendo comprender el efecto de los aditivos sobre las propiedades.
- La incorporación de éteres de glicol en la bioturbosina ocasiona una expansión en el volumen molar de la mezcla debido a que la intensidad de

las interacciones moleculares entre las moléculas de bioturbosina + aditivo son menores a las interacciones entre moléculas del mismo tipo (bioturbosina + bioturbosina, aditivo + aditivo). Esta condición se atribuye a comportamientos positivos en el volumen molar de exceso (V^E).

- Las etapas que presentan una mayor contribución al impacto ambiental del proceso son las etapas “1.0 Pretratamiento”, “2.0 Síntesis de zeolita” y “4.0 HEFA” dado su mayor consumo energético y de metanol. El escenario con menor impacto ambiental asociado al indicador de cambio climático fue el escenario a escala industrial de ASPEN (0.21 kg CO_{2eq}/MJ_{BJF}), mientras que el escenario industrial mediante DWSIM fue el que presentó una mayor contribución a este indicador (0.40 kg CO_{2eq}/MJ_{BJF}) consecuencia de la sobreestimación energética.
- El modelo de Piccinno *et al.* ^[31] se puede utilizar como una herramienta para realizar aproximaciones iniciales a escala superior, de una manera fácil y rápida en comparación con el uso de un software especializado (ASPEN).
- El uso del mix energético mexicano presenta un mayor impacto ambiental al indicador de cambio climático (0.21 kg CO_{2eq}/MJ_{BJF}) comparado con países como Brasil (0.09 kgCO_{2eq}/MJ_{BJF}) y Francia (0.10 kgCO_{2eq}/MJ_{BJF}), como consecuencia del uso de fuentes fósiles para su producción.

- El uso de bio-metanol, etanol fósil y bio-etanol no disminuye la contribución al indicador de cambio climático de la etapa “1.0 Pretratamiento” debido a un mayor consumo de carbón fósil (0.22 kg de carbon/kg de bio-metanol, 0.12 kg de carbon/kg de etanol y 0.65 kg de carbón/kg de bio-etanol) comparado con la implementación del metanol como reactivo en el pretratamiento de las grasas (0.05 kg de carbon/kg de alcohol).

7. Bibliografía

1. The World Bank Data. (n.d.). *Air transport, passengers carried*. Retrieved June 27, 2023, from <https://data.worldbank.org/indicator/IS.AIR.PSGR?end=2021&start=1970&view=chart>
2. IATA. (2021). *Our Commitment to Fly Net Zero by 2050*. <https://shorturl.at/vGK05>
3. International Air Transport Association (IATA). (n.d.). *Developing Sustainable Aviation Fuel (SAF)*. Retrieved June 27, 2023, from <https://www.iata.org/en/programs/environment/sustainable-aviation-fuels/>
4. Shafer, L. M., Striebich, R. C., Gomach, J., & Edwards, T. (2006). *Chemical Class Composition of Commercial Jet Fuels and Other Specialty Kerosene Fuels*.
5. Yang, J., Xin, Z., He, Q. S., Corcadden, K., & Niu, H. (2019). An overview on performance characteristics of bio-jet fuels. *Fuel*, 237, 916–936. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.079>
6. Wang, W. C., & Tao, L. (2016). Bio-jet fuel conversion technologies. In *Renewable and Sustainable Energy Reviews* (Vol. 53, pp. 801–822). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.09.016>
7. G. Evans, & C. Smith. (2012). 5.11 - Biomass to Liquids Technology. In *Earth Systems and Environmental Sciences* (Vol. 5, pp. 155–204). Elsevier. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-08-087872-0.00515-1>

8. Liu, Q., Zuo, H., Zhang, Q., Wang, T., & Ma, L. (2014). Hydrodeoxygenation of palm oil to hydrocarbon fuels over Ni/SAPO-11 catalysts. *Cuihua Xuebao/Chinese Journal of Catalysis*, 35(5), 748–756. [https://doi.org/10.1016/s1872-2067\(12\)60710-4](https://doi.org/10.1016/s1872-2067(12)60710-4)
9. Neuling, U., & Kaltschmitt, M. (2014). Conversion routes for production of biokerosene—status and assessment. *Biomass Conversion and Biorefinery*, 5, 367–385.
10. Santillan-Jimenez, E., & Crocker, M. (2012). Catalytic deoxygenation of fatty acids and their derivatives to hydrocarbon fuels via decarboxylation/decarbonylation. *Chemical Technology and Biotechnology*, 87(8), 1041–1050.
11. Zhao, X., Wei, L., Julson, J., Qiao, Q., Dubey, A., & Anderson, G. (2015). Catalytic cracking of non-edible sunflower oil over ZSM-5 for hydrocarbon bio-jet fuel. *New Biotechnology*, 32(2), 300–312. <https://doi.org/10.1016/j.nbt.2015.01.004>
12. Dujjanutat, P., & Kaewkannetra, P. (2020). Production of bio-hydrogenated kerosene by catalytic hydrocracking from refined bleached deodorised palm/palm kernel oils. *Renewable Energy*, 147, 464–472. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.09.015>
13. Parlamento Europeo y Consejo de la Unión Europea. (2022, June 7). *Directive (EU) 2018/2001 of the European Parliament and of the Council of 11 December 2018 on the promotion of the use of energy from renewable sources (recast)*.

14. Ortiz-Hernández, Ma. L., Gutiérrez-Ruis, M. E., & Sánchez-Salinas, E. (1995). Propuesta de manejo de los lodos residuales de la planta de tratamiento de la ciudad industrial del valle de Cuernavaca, Estado de Morelos, México. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 2(11), 105–115.
15. Moreno Caballero, B. (2020). *Effect of metallic oxides over physicochemical properties of biodiesel produced from waste water* [Maestría en ciencias]. Universidad Autónoma de Nuevo León.
16. Cutler, C. (2022, July 28). *How does a turbofan engine work?* Boldmethod. <https://www.boldmethod.com/learn-to-fly/aircraft-systems/how-does-a-jet-engine-turbofan-system-work-the-basic-steps/>
17. Why, E. S. K., Ong, H. C., Lee, H. V., Chen, W. H., Asikin-Mijan, N., & Varman, M. (2021). Conversion of bio-jet fuel from palm kernel oil and its blending effect with jet A-1 fuel. *Energy Conversion and Management*, 243(May), 114311. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114311>
18. Chevron. (2006). *Global aviation fuels: technical review*. www.chevronglobalaviation.com/ga/ga_operational.asp
19. American Society for Testing and Materials. (2022). *Designation: D 1655-00a Standard Specification for Aviation Turbine Fuels 1*. <https://doi.org/10.1520/D1655-21C>
20. American society of testing and materials. (2016). *Standar specification for aviation turbine fuel containing synthesized hydrocarbons- ASTM D7566*.

21. Manigandan, S., Atabani, A. E., Ponnusamy, V. K., & Gunasekar, P. (2020). Impact of additives in Jet-A fuel blends on combustion, emission and exergetic analysis using a micro-gas turbine engine. *Fuel*, 276, 118104. <https://doi.org/10.1016/J.FUEL.2020.118104>
22. Cano-Gómez, J. J., Iglesias-Silva, G. A., Rivas, P., Díaz-Ovalle, C. O., & de Jesús Cerino-Córdova, F. (2017). Densities and Viscosities for Binary Liquid Mixtures of Biodiesel + 1-Butanol, + Isobutyl Alcohol, or + 2-Butanol from 293.15 to 333.15 K at 0.1 MPa. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 62(10), 3391–3400. <https://doi.org/10.1021/ACS.JCED.7B00440>
23. Iakovlieva, A., Boichenko, S., Lejda, K., Kuszewski, H., & Vovk, O. (2019). Development of alternative jet fuels modified with camelina oil bio-additives. In *Selected aspects of providing the chemmotological reliability of the engineering* (pp. 112–125). National Aviation University. <https://doi.org/10.18372/38220>
24. Sigma-Aldrich. (n.d.). *Glycol ethers properties & examples, organic solvents*. Retrieved February 15, 2024, from <https://shorturl.at/jkq46>
25. West, Z. J., Shafer, L. M., Striebich, R. C., Zabarnick, S., Delaney, C., Phelps, D., & Dewitt, M. J. (2014). Equilibrium partitioning of di-ethylene glycol monomethyl ether (diegme) between fuel and aqueous phases at sub-ambient temperatures. *Energy and Fuels*, 28(7), 4501–4510. <https://doi.org/10.1021/ef500900p>
26. Zemanek, D., Champagne, P., & Mabee, W. (2020). Review of life-cycle greenhouse-gas emissions assessments of hydroprocessed renewable fuel

- (HEFA) from oilseeds. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 14(5), 935–949.
<https://doi.org/10.1002/bbb.2125>
27. International Organization for Standardization (ISO). (2006). ISO 14040:2006: Gestión ambiental-Evaluación de ciclo de vida- Principios y marco de referencia. In *ISO 14040:2015*.
28. International Organization for Standardization (ISO). (2006). ISO 14044:2006: Gestión ambiental- Evaluación de ciclo de vida- Requisitos y directrices. In *ISO 14044:2006*.
29. Hauschild, M. Z., Rosenbaum, R. K., & Olsen, S. I. (2017). *Life Cycle Assessment*.
30. Tecchio, P., Freni, P., De Benedetti, B., & Fenouillot, F. (2016). Ex-ante Life Cycle Assessment approach developed for a case study on bio-based polybutylene succinate. *Journal of Cleaner Production*, 112, 316–325.
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2015.07.090>
31. Piccinno, F., Hischer, R., Seeger, S., & Som, C. (2016). From laboratory to industrial scale: a scale-up framework for chemical processes in life cycle assessment studies. *Journal of Cleaner Production*, 135, 1085–1097.
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.06.164>
32. Elginöz, N., Owusu-Agyeman, I., Finnveden, G., Hischer, R., Rydberg, T., & Cetecioglu, Z. (2022). Application and adaptation of a scale-up framework for life cycle assessment to resource recovery from waste systems. *Journal of Cleaner Production*, 355. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.131720>

33. Eller, Z., Varga, Z., & Hancsók, J. (2016). Advanced production process of jet fuel components from technical grade coconut oil with special hydrocracking. *Fuel*, 182, 713–720. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2016.06.055>
34. Hanaoka, T., Miyazawa, T., Shimura, K., & Hirata, S. (2015). Jet fuel synthesis in hydrocracking of Fischer-Tropsch product over Pt-Loaded zeolite catalysts prepared using microemulsions. *Fuel Processing Technology*, 129, 139–146. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2014.09.011>
35. Vedachalam, S., Boahene, P., & Dalai, A. K. (2021). Production of jet fuel by hydrorefining of Fischer-Tropsch wax over Pt/Al-TUD-1 bifunctional catalyst. *Fuel*, 300. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.121008>
36. Duong, L. H., Reksowardojo, I. K., Soerawidjaja, T. H., Fujita, O., Neonufa, G. F., Nguyen, T. T. G., & Prakoso, T. (2020). Soap-derived biokerosene as an aviation alternative fuel: Production, composition, and properties of various blends with jet fuel. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 153. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.107980>
37. Lown, A. L., Peereboom, L., Mueller, S. A., Anderson, J. E., Miller, D. J., & Lira, C. T. (2014). Cold flow properties for blends of biofuels with diesel and jet fuels. *Fuel*, 117(PART A), 544–551. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.09.067>
38. Kumar, M., & Karmakar, S. (2023). Butyl butyrate, Jet A-1 and their blends: Combustion performance in the swirl stabilized burner at different inlet air temperature. *Biomass and Bioenergy*, 168. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2022.106651>

39. Agusdinata, D. B., Zhao, F., Ileleji, K., & Delaurentis, D. (2011). Life cycle assessment of potential biojet fuel production in the United States. *Environmental Science and Technology*, 45(21), 9133–9143. <https://doi.org/10.1021/es202148g>
40. Klein, B. C., Chagas, M. F., Junqueira, T. L., Rezende, M. C. A. F., Cardoso, T. de F., Cavalett, O., & Bonomi, A. (2018). Techno-economic and environmental assessment of renewable jet fuel production in integrated Brazilian sugarcane biorefineries. *Applied Energy*, 209, 290–305. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.10.079>
41. Liu, H., Zhang, C., Tian, H., Li, L., Wang, X., & Qiu, T. (2021). Environmental and techno-economic analyses of bio-jet fuel produced from jatropha and castor oilseeds in China. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 26, 1071–1084. <https://doi.org/10.1007/s11367-021-01914-0>
42. Vela-García, N., Bolonio, D., García-Martínez, M. J., Ortega, M. F., Almeida Streitwieser, D., & Canoira, L. (2021). Biojet fuel production from oleaginous crop residues: thermoeconomic, life cycle and flight performance analysis. *Energy Conversion and Management*, 244. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2021.114534>
43. Moreno-Caballero, B. S. (2023). *Effect of ethyl ester-MgO mixtures on emissions of gases and properties of biodiesel produced with incorporation of deep eutectic solvents: analysis of enviromental impact.*

44. Lok, B. M., Messina, C. A., Patton, R. L., Gajek, R. T., Cannan, T. R., & Flanigen, E. M. (1987). *Crystalline silicoaluminophosphates* (Patent 4440871).
45. McAllister, R. A. (1960). The viscosity of liquid mixtures. *AIChE J.*, 6, 427–431.
46. Nava-Ríos, G. E., Iglesias-Silva, G. A., Estrada-Baltazar, A., Hall, K. R., & Atilhan, M. (2012). A new equation to correlate liquid kinematic viscosities of multicomponent mixtures. *Fluid Phase Equilib.*, 329, 8–21.
47. Cano-Gómez, J. J., & Iglesias-Silva, G. A. (2019). A new correlation for the prediction of kinematic viscosities of biodiesel + higher alcohols blends at atmospheric pressure. *Fuel*, 237, 1254–1261. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.038>
48. Vargas-Ibáñez, L. T., Cano-Gómez, J. J., Iglesias-Silva, G. A., Santos-López, I. A., Benavides-Moran, O. E., & Zwolinski, P. (2020). Physical properties of biodiesel blended with hexanol isomers at different temperatures: surface tension, density, viscosity and refractive index. *J. Chem. Eng. Data*, 65, 3706–3727.
49. Redlich, O., & Kister, A. T. (1948). Algebraic Representation of Thermodynamic Properties and the Classification of Solutions. *Industrial & Engineering Chemistry*, 40(2), 345–348.
50. Thomassen, M. A., Dalgaard, R., Heijungs, R., & De Boer, I. (2008). Attributional and consequential LCA of milk production. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 13(4), 339–349. <https://doi.org/10.1007/s11367-008-0007-y>

51. Tomas ekvall. (2019). Attributional and consequential life cycle assesment. In M. J. Bastante-Ceca, J. L. Fuentes-Bargues, L. Hufnagel, F.-C. Mihai, & C. Iatu (Eds.), *Sustainability assesment at the 21st century* (1st ed., pp. 41–61). IntechOpen.
52. Smith, J. M., Van Ness, H. C., & Abbott, M. M. (2007). *Introducción a la termodinámica en ingeniería química* (1st ed.). McGraw-Hill.
53. Cengel, Y. A., & Ghajar, A. J. (2011). *Transferencia de calor y masa* (Cuarta edición, Vol. 1). McGraw-Hill.
54. Riegelhaupt, E., Odenthal Jorge, & Janeiro Luis. (2016). *Diagnóstico de la situación actual del biodiésel en México y escenarios para su aprovechamiento*.
55. Agrositio. (2013, October 22). *Evonik inaugura en Argentina una nueva planta de catalizadores para la producción de biodiesel*.
56. BASF. (2019, April 17). *BASF expandirá su capacidad de producción de metilato de sodio en Brasil*.
57. JECI BIOCHEM. (2020, September 23). *Nueva planta de catalizador de 4,800 toneladas aterrizada en Jiaxing Clariant*.
58. Moreno-Caballero, B. S. (2020). *Efecto de los óxidos metálicos sobre las propiedades fisicoquímicas del biodiésel producido a partir de aguas residuales*. Universidad Autónoma de Nuevo León.

59. Hoekman, S. K., Broch, A., Robbins, C., Cenicerros, E., & Natarajan, M. (2012). Review of biodiesel composition, properties, and specifications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 16(1), 143–169. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2011.07.143>
60. Farrauto, R. J., & Hobson, M. C. (2004). Catalyst Characterization. In R. A. Meyers (Ed.), *Encyclopedia of physical science and technology* (Third, pp. 501–526). Elsevier.
61. Dai, X., Cheng, Y., Wei, Q., Si, M., & Zhou, Y. (2022). Small-crystal and hierarchical SAPO-11 molecular sieve synthesized via three-stage crystallization method and hydroisomerization performance of corresponding NiWS supported catalyst. *Fuel*, 324. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.124610>
62. Zhang, S., Sheng-Li, C., Peng, D., Zhiyong, J. I., Junying, Z., & Keqi, X. (2007). Synthesis and catalytic hydroisomerization performance of SAPO-11 molecular sieve with small crystals. *Chinese Journal of Catalysis*, 28, 28.
63. Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J., & Sing, K. S. W. (2015). *Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report)*.
64. Zhang, S., Chen, S. L., Dong, P., Yuan, G., & Xu, K. (2007). Characterization and hydroisomerization performance of SAPO-11 molecular sieves synthesized in different media. *Applied Catalysis A: General*, 332(1), 46–55. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2007.07.047>

65. Pope, C. G. (1997). X-ray diffraction and the Bragg equation. *J. Chem. Educ.*, 74(1), 129–131.
66. Ayandiran, A. A., Boahene, P. E., Dalai, A. K., & Hu, Y. (2019). Hydroprocessing of oleic acid for production of jet-fuel range hydrocarbons over Cu and FeCu catalysts. *Catalysts*, 9(12). <https://doi.org/10.3390/catal9121051>
67. Iglesias-Silva, G. A., Guzmán-López, A., Pérez-Durán, G., & Ramos-Estrada, M. (2016). Densities and viscosities for binary liquid mixtures of n-Undecane + 1-Propanol, + 1-Butanol, + 1-Pentanol, and + 1-Hexanol from 283.15 to 363.15 K at 0.1 MPa. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 61(8), 2682–2699. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.6b00121>
68. Dubey, G. P. (2011). Densities, Viscosities, and Speeds of Sound of Binary Liquid Mixtures of Ethylenediamine with Alcohols at T = (293.15 to 313.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 56, 2995–3003.
69. European Commission. (2021). *Understanding Product Environmental Footprint and Organisation Environmental Footprint methods*.
70. *Life Cycle Assessment - ecoinvent*. (n.d.). Retrieved June 12, 2024.
71. Metron. (n.d.). *Panorama del mercado energético en Brasil*.
72. Statista Research Department. (2023, October 15). *Distribución de la generación eléctrica en México en 2021, por fuente*.



