Estudio de la producción industrial de combustible de avión sustentable mediante simulación de procesos

Paula M. Middagh¹, Ana M. Cuezzo^{1,2}, Paula Z. Araujo¹ y Fernando D. Mele^{1,2}

¹ Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología, Universidad Nacional de Tucumán. Av. Independencia 1800, T4002 San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina.

² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, CCT CONICET NOA Sur, Crisóstomo Álvarez 722, T4000 San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina.

> paula.middagh2@gmail.com - acuezzo@herrera.unt.edu.ar paraujo@herrera.unt.edu.ar - fmele@herrera.unt.edu.ar

Resumen. Este trabajo estudia la producción de kerosén parafínico sintético, un combustible de avión sustentable, utilizando como materia prima bioetanol de la industria sucroalcoholera del noroeste argentino. El diseño conceptual del proceso se realiza con la asistencia de un simulador computacional de procesos. Se logra definir el diagrama de flujo del proceso, determinar las condiciones de operación de los equipos involucrados y verificar, a partir de un conjunto de indicadores técnicos, la factibilidad del esquema propuesto. El proyecto se fundamenta en la evidencia de que la huella de CO_2 de este combustible es al menos 50% menor a la de su homólogo de origen fósil. Esta alternativa innovadora busca maximizar el aprovechamiento de los recursos de la industria regional, ampliando la cartera de productos de la biorrefinería de caña de azúcar, a la vez que demuestra la utilidad de la simulación computacional de procesos en el diseño de procesos químicos más amigables con el ambiente.

Palabras clave: etanol-a-*jet-fuel*; diseño de procesos; simulación de procesos; reducción de emisiones de CO₂; biorrefinerías.

1 Introducción

La industria global de la aviación contribuye en un 2,1% al total de las emisiones antropogénicas de CO_2 [1]. Según la Asociación Internacional de Transporte Aéreo (IATA), se espera que en 2024 se trasladen 4.800 millones de pasajeros y se transporten 61 millones de toneladas métricas de mercancías valuadas en más de 110 mil millones de dólares [2]. Se proyecta que la industria de la aviación continuará expandiéndose en los próximos años debido a su papel fundamental en el transporte moderno, lo cual implica una mayor demanda de combustibles de aviación y, como consecuencia, un aumento de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI).

Para mitigar el impacto climático del sector, la industria de la aviación se ha comprometido a lograr una reducción del 50% en las emisiones de GEI para el año 2050, respecto de los registrados en 2005. Ante este desafío, una de las soluciones propuestas, para promover la descarbonización de los viajes aéreos y facilitar la transición hacia fuentes de energía renovables, consiste en reemplazar los combustibles tradicionales —de origen fósil—, por los denominados Combustibles de Aviación Sustentables (SAFs) [3]. En este contexto, la Unión Europea ha establecido un corte mínimo de SAF en todos los combustibles disponibles en sus aeropuertos, comenzando con un 2% en 2025 y proyectando alcanzar un 70% en 2050. En la Argentina, se está abordando la reducción de las emisiones de CO_2 en el sector de la aviación. Aerolíneas Argentinas ha establecido colaboraciones con organismos nacionales e internacionales para trazar una propuesta que defina el acceso futuro a los SAFs. En septiembre de 2023, esta aerolínea llevó adelante su primer vuelo con un 2% de SAF en la ruta Madrid-Buenos Aires.

El SAF con mayor participación de mercado a nivel mundial es el kerosén parafínico sintético, una mezcla de alcanos con longitudes de cadena de entre 10 y 16 carbonos (C10 a C16) principalmente. Este combustible se destaca por su capacidad de ser mezclado con el combustible de avión convencional y por ser utilizado sin necesidad de modificación en las estructuras y motores de las aeronaves [4]. Su principal destino es sustituir el combustible de aeronaves comerciales, denominado "Jet A1".

Además de replicar las características funcionales de los combustibles fósiles de aviación, actualmente los SAFs deben tener una huella de carbono reducida en al menos 10%. Según estudios publicados, la huella de carbono del kerosén parafínico sintético es al menos 50% menor a la de su homólogo fósil [1]. Estos resultados se derivan de un análisis de ciclo de vida que compara las emisiones de CO_2 entre el proceso de producción convencional y la alternativa sustentable.

Entre las diversas rutas de obtención de kerosén parafínico sintético, se destaca la que usa etanol como materia prima, con proyectos en construcción y certificados [5]. Esta vía, denominada *Alcohol to Jet Fuel* (ATJ), fue aprobada por la Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales (ASTM) en 2018 con un límite máximo de mezcla con el combustible convencional del 50%. La ASTM no especifica la fuente de etanol, lo que implica que las opciones pueden variar desde las fuentes convencionales de azúcar o almidón, como la caña de azúcar y la remolacha, hasta la biomasa lignocelulósica o residuos orgánicos.

La caña de azúcar es una materia prima prometedora para la producción de kerosén por la vía ATJ, principalmente por su capacidad para reducir de la huella de carbono en mayor medida que otras materias primas [1]. Además, existe una gran infraestructura industrial a nivel mundial basada en la explotación de esta biomasa. La industria sucroalcoholera del noroeste argentino produce bioetanol en grandes cantidades a partir de la fermentación de jugo y melaza de caña de azúcar, en destilerías anexas a las fábricas de azúcar (ingenios). La Fig. 1 presenta un diagrama de flujo de una planta sucroalcoholera modelo (ingenio/destilería).



Fig. 1. Esquema de una planta sucroalcoholera con sistema de cogeneración.

Este trabajo propone la integración de un complejo de azúcar y etanol en la producción de un combustible de avión de alto valor agregado. El objetivo principal del estudio es modelar y simular un proceso de producción de kerosén parafínico sintético a partir de etanol de la industria sucroalcoholera del noroeste argentino, con el enfoque de reducir las emisiones de CO_2 y mejorar su eficiencia energética. El proyecto busca mejorar la sustentabilidad ambiental y potenciar el aprovechamiento de los recursos de la industria regional, aspirando a su vez, a ampliar la cartera de productos de una biorrefinería de caña de azúcar.

2 Metodología

Este estudio presenta el modelado y simulación de la producción de kerosén parafínico sintético a partir de etanol de la industria sucroalcoholera. El proceso propuesto produce 82 t/día de kerosén parafínico sintético, equivalente a 21.600 m³/año en 210 días de zafra azucarera, y se divide en cuatro secciones principales:

- (1) deshidratación de etanol para producir etileno;
- (2) oligomerización de etileno para producir una mezcla de olefinas;
- (3) hidrogenación de olefinas a alcanos;
- (4) recuperación de alcanos mediante destilación.



El diagrama de bloques del proceso se muestra en la Fig. 2.

Fig. 2. Diagrama de bloques del proceso alcohol a combustible de avión propuesto.

La simulación del proceso se realiza en el *software* comercial UniSim[®] Design v490 [6]. Los supuestos realizados durante el diseño del proceso y las simulaciones son los siguientes:

- No hay pérdidas de calor al entorno.
- Las caídas de presión en intercambiadores de calor son de 0,1 bar.
- La eficiencia isoentrópica de los compresores y bombas se fija en un 75%.
- En los intercambiadores de calor se considera como temperatura mínima del fluido a enfriar 50 °C para aprovechar el agua de las torres de enfriamiento como servicio auxiliar de refrigeración.

La selección de los modelos termodinámicos es un aspecto clave en la simulación de procesos. Se selecciona el modelo termodinámico *Non-Random-Two-Liquid* (NRTL) para la fase líquida junto con ecuaciones de estado de Redlich-Kwong para la fase gaseosa, ya que proporciona un buen ajuste de parámetros experimentales para el sistema etanol-agua en la unidad de deshidratación.

El diseño de las diferentes secciones del proceso se ha validado con publicaciones previas [3] [5] [7]. A partir de los balances de materia y energía resultantes de la simulación, se analiza la configuración propuesta mediante indicadores técnicos y se identifican posibles áreas de mejora. Los indicadores técnicos representan diferentes aspectos del proceso, relevantes para la evaluación de la ruta ATJ propuesta.

3 Resultados y discusión

Unidad de deshidratación

La unidad de deshidratación es responsable de la producción de etileno. La reacción principal de formación de etileno (C_2H_4) a partir de etanol (C_2H_5OH) es:

$$C_2H_5OH \leftrightarrow C_2H_4 + H_2O \qquad \qquad \Delta H_{298}^o = +46 \, kJ/mol \quad (1)$$

catalizada por un catalizador sólido de γ -sílice-alúmina, según lo reportado por Kagyrmanova *et al.* (2011) [8]. Además, se identifican las reacciones secundarias más importantes sobre este catalizador en el rango de temperatura de 350 °C y 450 °C:

$2 C_2 H_5 OH \leftrightarrow (C_2 H_5)_2 O + H_2 O$	$\Delta H_{298}^o = -12 \ kJ/mol \ (2)$
$(C_2H_5)_2 0 \to 2 C_2H_4 + H_2 0$	$\Delta H^o_{298} = +115 \; kJ/mol \; (3)$
$C_2H_5OH \leftrightarrow C_2H_4O + H_2$	$\Delta H_{298}^o = +71 \ kJ/mol$ (4)
$2 C_2 H_4 \rightarrow C_4 H_8$	$\Delta H_{298}^o = -52 \ kJ/mol$ (5)

donde: $(C_2H_5)_2O$ = dietiléter, H_2O = agua, H_2 = hidrógeno, C_2H_4O = acetaldehído y C_4H_8 = buteno.

Dado que este conjunto de reacciones es fuertemente endotérmico, uno de los desafíos en el diseño de proceso de esta unidad es limitar la caída de temperatura en los reactores. La temperatura de reacción se establece entre 350 °C y 450 °C. Para modelar la cinética de las reacciones de esta unidad se utilizaron las expresiones propuestas por Frosi *et al.* (2021) [9], obtenidas a partir de los datos experimentales reportados por Kagyrmanova *et al.* (2011) [8].

La alimentación del proceso es una mezcla de etanol y agua. Aunque la formación de etileno se favorece con una baja concentración de agua, según las reacciones (1) y (3), se establece una concentración másica del 53% de etanol y 47% de agua en la corriente de entrada. Esto se debe a que el agua puede funcionar como un "portador de calor", generando una menor caída de temperatura en el reactor, lo que beneficia la selectividad del proceso hacia la formación de etileno. Por otro lado, la corriente de alimentación tiene una composición muy similar a la corriente intermedia de destilación del mosto fermentado en las plantas de producción de etanol de caña de azúcar. Así, se selecciona esta corriente como materia prima de la unidad de producción de etileno.

Otra estrategia para mantener alta conversión y selectividad de etileno en esta etapa consiste en establecer un esquema de reactores en serie con calentamientos intermedios. Los reactores que se utilizan son adiabáticos del tipo tubular con lecho fijo.

Con el fin de alcanzar las mejores condiciones de operación, se estudian diferentes escenarios con la asistencia del simulador de procesos. Se ajusta la cantidad y los volúmenes de los reactores tubulares de lecho fijo adiabáticos, monitoreando su impacto en los indicadores técnicos, conversión global de etanol y selectividad de etileno. En la Tabla 1 se presentan los principales resultados.

En vista de los resultados obtenidos de los estudios de casos, se selecciona el esquema correspondiente al caso de estudio III. El diseño consiste en tres reactores en serie con calentamientos intermedios. Para este caso se alcanza una conversión global de etanol de 99,6% y una selectividad de etileno de 97,1% a 450 °C y 3 bar, resultados similares a los reportados para el catalizador comercial Syndol [10].

La Fig. 3 muestra el diagrama de flujo en UniSim[®] para el proceso seleccionado de conversión de etanol a etileno. Los principales equipos de la sección de deshidratación incluyen intercambiadores de calor y reactores.

	Casos de estudio			
Resultados	Ι	II	III	IV
Temperatura de entrada en cada paso [°C]	450	450	450	450
Nº de reactores	1	2	3	1
Volumen reactor/es [m ³]	0,075	0,075	0,075	0,150
Temperatura de salida del reactor 1 [°C]	333	333	333	334
Temperatura de salida del reactor 2 [°C]	-	374	374	-
Temperatura de salida del reactor 3 [°C]	-	-	408	-
Conversión global de etanol	0,633	0,876	0,996	0,734
Selectividad de etileno	0,773	0,905	0,971	0,846

 Tabla 1. Principales resultados para algunos de los casos de estudio simulados para una composición de etanol a la entrada de 53% (p/p).



Fig. 3. Diagrama de flujo de la unidad de deshidratación.

Para separar el etileno del agua y otros subproductos formados en el tándem de reacciones se aprovecha la gran diferencia en puntos de ebullición entre el gas de interés y el agua, y se refrigera la corriente de entrada al separador a 50 °C. Se envía el etileno (corriente 10) a la unidad de oligomerización. La Tabla 2 muestra las propiedades físicas y composición química de las corrientes de entrada y salida de la unidad de deshidratación.

	Corriente			
	Entrada (1)	Producto Etileno (10)	Salida de Agua (11)	
Temperatura [°C]	25	50	50	
Presión [bar]	1,0	2,6	2,6	
Flujo molar [kmol/h]	929,3	303,9	909,0	
Composición molar [mol/mol]				
Etanol	0,306	-	-	
Agua	0,694	0,049	0,996	
Etileno	-	0,906	-	
Acetaldehído	-	0,018	0,003	
Hidrógeno	-	0,027	-	

 Tabla 2. Propiedades y composición de las corrientes de entrada y salida de la unidad de deshidratación.

Unidad de oligomerización

En esta unidad se produce la oligomerización del etileno, dando lugar a olefinas de cadena larga. La Fig. 4 muestra las reacciones principales de la etapa de oligomerización de etileno. También ocurre el craqueo de las moléculas formadas que originan olefinas de número de carbono impares.



Fig. 4. Mecanismo de reacciones de oligomerización de etileno que da lugar a olefinas de entre 4 y 12 carbonos. Adaptada de [11].

Las olefinas necesarias para producir kerosén parafínico sintético deben tener principalmente longitudes de cadena entre 10 y 16 carbonos, asegurando así que el producto final cumpla con las especificaciones de temperatura de ebullición necesarias para el combustible de avión. En esta reacción, los catalizadores comúnmente utilizados son solventes orgánicos y catalizadores sólidos de níquel soportados en materiales como sílice-alúmina y zeolita [12].

Para esta unidad, se adoptan las condiciones reactivas descritas por Heveling et al. (1998) [13]. En la Fig. 5 se muestra la distribución de olefinas obtenida por estos autores utilizando un catalizador de 0,73% de níquel sobre sílice-alúmina (NiSA-IB), a 35 bar, 120 °C y una velocidad espacial másica de 2 horas. Para simular estos

resultados, se ha simplificado el mecanismo de reacción para replicar los resultados obtenidos. En la Tabla 3 se detallan las reacciones consideradas en un reactor isotérmico de conversión.



Fig. 5. Distribución de las olefinas obtenidas sobre un catalizador de Ni soportado en sílicealúmina a 35 bar, 120 °C y velocidad espacial másica de 2 horas [13].

-		-	
Reacción	Conversión	Reacción	Conversión
$2 C_2 H_4 \rightarrow C_4 H_8$	0,195	$6,5 C_2 H_4 \rightarrow C_{13} H_{26}$	0,003
$2,5\ C_2H_4\rightarrow\ C_5H_{10}$	0,003	$7 C_2 H_4 \rightarrow C_{14} H_{28}$	0,053
$3 \ C_2 H_4 \rightarrow \ C_6 H_{12}$	0,145	$7,5 C_2 H_4 \rightarrow C_{15} H_{30}$	0,003
$3,5\ C_2H_4\rightarrow\ C_7H_{14}$	0,003	$8 C_2 H_4 \rightarrow C_{16} H_{32}$	0,030
$4 \ C_2 H_4 \rightarrow \ C_8 H_{16}$	0,230	$8,5 C_2 H_4 \rightarrow C_{17} H_{34}$	0,003
$4,5\ C_2H_4\rightarrow\ C_9H_{18}$	0,003	$9 C_2 H_4 \rightarrow C_{18} H_{36}$	0,015
$5 C_2 H_4 \rightarrow C_{10} H_{20}$	0,186	$9,5 C_2 H_4 \rightarrow C_{19} H_{38}$	0,000
$5,5\ C_2H_4\rightarrow\ C_{11}H_{22}$	0,003	$10 C_2 H_4 \rightarrow C_{20} H_{40}$	0,010
$6 C_2 H_4 \rightarrow C_{12} H_{24}$	0.105		

 Tabla 3. Reacciones de conversión consideradas en la simulación de la unidad de oligomerización. Reactivo de referencia: etileno.

La Fig. 6 muestra el diagrama de flujo de UniSim[®] para esta etapa. La oligomerización da lugar a una distribución de isómeros de cada olefina. Dado que los datos sobre la proporción de isómeros lineales y ramificados son escasos en la literatura, en este estudio no se consideró la formación de cadenas lineales.



Fig. 6. Diagrama de flujo de la unidad de oligomerización.

Para alcanzar la presión de 35 bar requerida en el reactor, se utiliza un sistema de tres compresores en cascada con enfriamiento intermedio procurando que la relación entre las presiones de salida y de entrada del fluido a cada compresor sea menor a 3.

Durante la reacción de oligomerización, las olefinas de mayor peso molecular tienden a condensar (corriente 17). La corriente gaseosa residual, compuesta por las olefinas más ligeras, puede destinarse a la síntesis sustentable de nafta liviana. En la Tabla 4 se resumen las propiedades principales de las corrientes de la unidad de oligomerización y los consumos energéticos en compresores e intercambiadores de calor. La corriente rica en olefinas pesadas se envía a la etapa de hidrogenación.

Corriente	10	11	12	13	14	15
Temperatura [°C]	50	139	50	140	81	120
Presión [bar]	2,5	7,5	7,4	22,2	22,1	35
Equipo	Comp 1	ICQ-5	Comp 2	ICQ-6	Comp 3	QR-Oligo
Equipo Potencia eléctrica [kW]	Comp 1 362,2	ICQ-5	Comp 2 353,3	ICQ-6	Comp 3 146,4	QR-Oligo -

 Tabla 4. Propiedades de las corrientes y consumos energéticos de la unidad de oligomerización.

Unidad de hidrogenación

La hidrogenación se utiliza con frecuencia en la industria petroquímica para saturar los enlaces carbono-carbono dobles remanentes en las olefinas después de completar la oligomerización. La saturación de las olefinas es necesaria para garantizar una baja reactividad del combustible. Con este fin, se introduce un exceso de hidrógeno en la reacción para garantizar una conversión casi total de las olefinas a parafinas. Además, se utilizan catalizadores sólidos, como los empleados en las unidades previas, para facilitar la reacción [5]. La reacción general para esta etapa es:

 $C_n H_{2n} + H_2 \leftrightarrow C_{2n} H_{2n+2}$ $2 \le n \le 20$ $\Delta H_{298}^o = -130 \, kJ/mol \, (11)$

Para la simulación de estas reacciones, se han considerado las condiciones descritas en la patente de Gruber et al. (2012) [14], utilizando un catalizador comercial de 0,5% de Pd soportado en alúmina (150 °C, 1 bar, velocidad espacial másica de 3 horas y 10% de exceso de H₂), para lograr una conversión del 99% de olefinas a parafinas.

Para el suministro de H₂ requerido en la hidrogenación, existen opciones que pueden mejorar la sustentabilidad del proceso. Dependiendo de la naturaleza de la planta en su conjunto, se puede optar por comprar H₂ o producirlo en el lugar. Una alternativa más sustentable es utilizar H₂ con baja huella de carbono, como el H₂ verde obtenido a través de la electrólisis del agua a partir de energía renovable como se describe en el trabajo de Cuezzo et al. (2023) [15].

Unidad de destilación

La unidad de destilación permite separar los componentes de la mezcla, particularmente el kerosén de los componentes más ligeros, que comprenden las naftas sintéticas liviana y pesada, esta última puede ser utilizada como nafta sustentable. Esta separación se logra mediante una columna de destilación a presión atmosférica.

El diseño de la columna se realiza con la asistencia de la herramienta *short-cut distillation* de UniSim[®], considerando al *n*-octano y al *n*-decano como los componentes clave liviano y clave pesado, respectivamente. La columna incluye un condensador y un hervidor parcial (ver Fig. 7).



Fig. 7. Diagrama de flujo de las unidades de hidrogenación y destilación.

Las variables de diseño incluyen la relación de reflujo, el caudal de purga en el condensador parcial (nafta liviana) y el caudal de destilado (nafta pesada). Las características de la columna modelada se detallan en la Tabla 5.

Tabla 5. Propiedades de las corrientes y consumos energéticos de la unidad de destilación.

Configuración de la columna de destilación				
Nº de platos	18			
Plato de alimentación	10			
Relación de reflujo	0,32			
Calor sustraido en el condensador [kJ/h]	1,64 106			
Calor suministrado en hervidor [kJ/h]	1,82 106			
Presión en condensador [bar]	1,4			
Temperatura de gases en la cabeza [°C]	67			
Caída de presión en la columna [bar]	0,6			
Caudal de entrada [kmol/h]	56,8			
Caudal de purga de gases [kmol/h]	10			
Caudal de fase liviana [kmol/h]	26			
Caudal de fase pesada (jet fuel) [kmol/h]	20,8			

Uno de los parámetros más importantes para cumplir con las especificaciones de los combustibles de aviación, tanto convencionales como sustentables, es la prueba de destilación según el método ASTM-086. Este método se emplea para evaluar la composición de los combustibles y otros productos petroleros en términos de su rango de ebullición a presión atmosférica. La especificación del Jet A1 de YPF establece que la temperatura a la que se obtiene la primera gota de destilado con este método es de 181 °C y el punto final es de 265 °C.

Utilizando el simulador de procesos, se simula esta prueba de destilación analizando la temperatura de burbuja y de rocío del producto a 1 bar, obteniendo que la temperatura a la que se obtiene la primera gota de destilado es 185 °C y el punto final es 240 °C. Este resultado indica que se ha obtenido, a partir de una fuente renovable, kerosén parafínico sintético que puede ser utilizado como combustible de aviación.

4 Conclusiones

La descarbonización de la industria de la aviación es una prioridad dada su contribución significativa al cambio climático. Con el aumento proyectado en el transporte aéreo, es fundamental encontrar soluciones sustentables para reducir las emisiones de GEI. En este contexto, los SAFs emergen como una alternativa prometedora para mitigar el impacto ambiental de los vuelos.

Este estudio se enfocó en la simulación computacional del proceso de producción de kerosén parafínico sintético, un tipo de SAF integrado a la industria sucroalcoholera del noroeste argentino. La metodología abordó el proceso desde la deshidratación del etanol hasta la destilación del producto final.

Se observó una alta conversión de etanol y selectividad de etileno en condiciones específicas de reactores en serie. La unidad de oligomerización demostró la producción eficiente de olefinas con longitudes de cadena adecuadas para la síntesis de kerosén parafínico sintético, que, complementada con una etapa de hidrogenación, garantizó la obtención de un producto de interés. Se destacó la posibilidad de utilizar hidrógeno verde para mejorar la sustentabilidad del proceso. Se prevé completar el estudio con un análisis de ciclo de vida que permita evaluar el impacto ambiental de la propuesta.

El estudio constituye una aproximación a la factibilidad técnica de esta vía de producción, demostrando que los simuladores computacionales de procesos son una herramienta insoslayable a la hora de diseñar y analizar procesos químicos complejos.

Este estudio ofrece una hoja de ruta prometedora para la producción de SAF a partir de recursos regionales, aprovechando la infraestructura existente de la industria sucroalcoholera. La implementación exitosa de este enfoque no solo podría reducir las emisiones de carbono en la aviación, sino también impulsar la economía regional y promover prácticas más sustentables en el sector del transporte aéreo.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Nacional de Tucumán, a la Agencia I+D+i por el proyecto PICT-2021-00826 y, a CONICET por el proyecto PIP-1007 y por la concesión de beca a A.M.C.

Referencias

- Prussi, M., Lee, U., Wang, M., Malina, R., Valin, H., Taheripour, F., Hileman, J. I.: CORSIA: The first internationally adopted approach to calculate life-cycle GHG emissions for aviation fuels. Renewable and Sustainable Energy Reviews 150, 111398, (2021). <u>https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111398</u>.
- International aviation transport association: Global Outlook for Air Transport A local sweet spot. (2023). <u>https://www.iata.org/en/iata-</u> repository/publications/economic-reports/global-outlook-for-air-transport--december-2023---report.
- Wang, X., Guo, L., Lv, J., Li, M., Huang, S., Wang, Y., Ma, X.: Process design, modeling and life cycle analysis of energy consumption and GHG emission for jet fuel production from bioethanol in China. Journal of Cleaner Production 389, 136027, (2023). <u>https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.136027</u>.

- Holladay, J., Abdullah, Z., Heyne, J.: Sustainable Aviation Fuel: Review of Technical Pathways. U.S. Department of Energy, (2020). <u>https://doi.org/10.2172/1660415</u>.
- Geleynse, S., Brandt, K., Garcia-Perez, M., Wolcott, M., Zhang, X.: The alcohol-to-jet conversion pathway for drop-in biofuels: techno-economic evaluation. ChemSusChem 11(21), 3728-3741, (2018). <u>https://doi.org/0.1002/cssc.201802487</u>.
- 6. Honeywell International Inc.: Unisim Design Suite®. https://www.honeywellprocess.com.
- Romero-Izquierdo, A., Gómez-Castro, F. I., Gutiérrez-Antonio, C., Hernández, S., Errico, M.: Intensification of the alcohol-to-jet process to produce renewable aviation fuel. Chemical Engineering and Processing -Process Intensification 160, (2021). <u>https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108270</u>.
- Kagyrmanova, A. P., Chumachenko, V. A., Korotkikh, V. N., Kashkin, V. N., Noskov, A. S.: Catalytic dehydration of bioethanol to ethylene: Pilot-scale studies and process simulation. Chemical Engineering Journal 176, 188-194, (2011). <u>https://doi.org/10.1016/j.cej.2011.06.049</u>.
- Frosi, M., Tripodi, A., Conte, F., Ramis, G., Mahinpey, N., Rossetti, I.: Ethylene from renewable ethanol: Process optimization and economic feasibility assessment. Journal of Industrial and Engineering Chemistry 104, 272-285, (2021). https://doi.org/10.1016/j.jiec.2021.08.026.
- Fan, D., Dai, D. J., Wu, H. S.: Ethylene Formation by Catalytic Dehydration of Ethanol with Industrial Considerations. Materials 6, 101-115, (2013). <u>https://doi.org/10.3390/ma6010101</u>.
- Woo, Y., Shin, M., Suh, Y. W., Park, M. J.: Kinetic Modeling of Ethylene Oligomerization to High-Chain-Length Olefins Over Al-SBA-15-Supported Ni Catalyst with LiAlH 4 Co-catalyst. Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis 132, 499-511, (2021). <u>https://doi.org/10.1007/s11144-021-01939-</u> 4.
- Finiels, A., Fajula, F., Hulea, V.: Nickel-based solid catalysts for ethylene oligomerization – a review. Catal. Sci. Technol. 4, (2014). <u>https://doi.org/10.1039/C4CY00305E</u>.
- Heveling, J., Nicolaides, C. P., Scurrell, M. S.: Catalysts and conditions for the highly efficient, selective and stable heterogeneous oligomerisation of ethylene. Applied Catalysis A: General 173(1), 1-9, (1998). https://doi.org/10.1016/S0926-860X(98)00147-1.
- Gruber, P. R., Peters, M. W., Griffith, J. M., Obaidi, Y., Manzer, L. E., Taylor, J. D., Henton, D. E.: US Patent N° 8193402 B2: Renewable Compositions. Gevo Inc., (2012). <u>https://patentimages.storage.googleapis.com/3a/af/cc/4feac84821c020/US81</u> <u>93402.pdf</u>.
- Cuezzo, A. M., Araujo, P. Z., Wheeler, J., Mele, F. D.: Modeling and environmental implications of methanol production from biogenic CO2 in the sugarcane industry. Journal of CO2 Utilization 67, 102301, (2023). <u>https://doi.org/10.1016/j.jcou.2022.102301</u>.