

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Ciencias e Ingenierías

Análisis tecno-económico y de sostenibilidad en la producción de hidrógeno a partir de residuos agrícolas

José Francisco Torres Suárez

Lucía Isadora Ricaurte Manosalvas

Mónica Gabriela Apráez Romero

Ingeniería Ambiental

Trabajo de fin de carrera presentado como requisito

para la obtención del título de

Ingeniero Ambiental

Quito, 21 de diciembre de 2023

UNIVERSIDAD SAN FRANCISCO DE QUITO USFQ

Colegio de Ciencias e Ingenierías

HOJA DE CALIFICACIÓN DE TRABAJO DE FIN DE CARRERA

**Análisis tecno-económico y de sostenibilidad en la producción de
hidrógeno a partir de residuos agrícolas**

José Francisco Torres Suárez

Lucía Isadora Ricaurte Manosalvas

Mónica Gabriela Apráez Romero

Nombre del profesor, Título académico

Fernando Nicolás Vela, PhD

Quito, 21 de diciembre de 2023

© DERECHOS DE AUTOR

Por medio del presente documento certifico que he leído todas las Políticas y Manuales de la Universidad San Francisco de Quito USFQ, incluyendo la Política de Propiedad Intelectual USFQ, y estoy de acuerdo con su contenido, por lo que los derechos de propiedad intelectual del presente trabajo quedan sujetos a lo dispuesto en esas Políticas.

Asimismo, autorizo a la USFQ para que realice la digitalización y publicación de este trabajo en el repositorio virtual, de conformidad a lo dispuesto en la Ley Orgánica de Educación Superior del Ecuador.

Nombres y apellidos: José Francisco Torres Suárez
Lucía Isadora Ricaurte Manosalvas
Mónica Gabriela Apráez Romero

Código: 00209925
00202132
00207436

Cédula de identidad: 0923587398
1726364464
1804993531

Lugar y fecha: Quito, 21 de diciembre de 2023

ACLARACIÓN PARA PUBLICACIÓN

Nota: El presente trabajo, en su totalidad o cualquiera de sus partes, no debe ser considerado como una publicación, incluso a pesar de estar disponible sin restricciones a través de un repositorio institucional. Esta declaración se alinea con las prácticas y recomendaciones presentadas por el Committee on Publication Ethics COPE descritas por Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing, disponible en <http://bit.ly/COPETHeses>.

UNPUBLISHED DOCUMENT

Note: The following capstone project is available through Universidad San Francisco de Quito USFQ institutional repository. Nonetheless, this project – in whole or in part – should not be considered a publication. This statement follows the recommendations presented by the Committee on Publication Ethics COPE described by Barbour et al. (2017) Discussion document on best practice for issues around theses publishing available on <http://bit.ly/COPETHeses>.

RESUMEN

La creciente demanda mundial de energía y el impacto ambiental de las fuentes energéticas convencionales exponen la necesidad de alternativas renovables y sostenibles. En este contexto, los residuos agrícolas presentan un recurso con un potencial significativo. Este proyecto explora la viabilidad y sostenibilidad de la producción de hidrógeno (H_2) a partir de gas de síntesis obtenido del bagazo de la caña de azúcar, con un proceso de bucle químico y su almacenamiento como amoníaco (NH_3) a través del proceso Haber-Bosch. Este estudio emplea una metodología que incluye la modelización del proceso en Aspen Plus®, el análisis técnico-económico y la evaluación del ciclo de vida (ACV) con OpenLCA®, para evaluar la viabilidad técnica, económica y ambiental del proceso de producción de H_2 propuesto. El análisis técnico demuestra la eficiencia de la conversión de biomasa en gas de síntesis y la posterior producción de H_2 en forma de NH_3 con un rendimiento notable de 2063.40 kg/h y una recuperación de los portadores de oxígeno. La evaluación económica revela el potencial del proceso para ser competitivo en el mercado, con un precio mínimo de venta (PMV) calculado de 3.44\$ por kg de H_2 como NH_3 en caso de recuperarse un 98% de los transportadores de oxígeno y un coste nivelado del H_2 (LCoH) de 0,97\$ por kg, lo que indica una posición ventajosa en comparación con los precios actuales del mercado. El análisis medioambiental, muestra una emisión total de gases de efecto invernadero de 27,458 kg CO_2 -eq por kg de H_2 como NH_3 . El proyecto subraya el potencial de la utilización de residuos agrícolas para la producción y almacenamiento de H_2 renovable, contribuyendo a la reducción del impacto ambiental y fomentando un futuro energético sostenible.

Palabras clave: Hidrógeno, Residuos agrícolas, Bagazo de caña, Pirólisis, Gasificación, Bucle Químico, Amoníaco, Haber-Bosch, Energía, Análisis de ciclo de vida, Aspen Plus.

ABSTRACT

The growing global demand for energy and the environmental impact of conventional energy sources expose the need for renewable and sustainable alternatives. In this context, agricultural residues present a resource with significant potential. This project explores the feasibility and sustainability of hydrogen (H_2) production from synthesis gas obtained from sugarcane bagasse, with a chemical looping process and its storage as ammonia (NH_3) through the Haber-Bosch process. This study employs a methodology that includes process modeling in Aspen Plus®, techno-economic analysis and life cycle assessment (LCA) with OpenLCA®, to evaluate the technical, economic, and environmental feasibility of the proposed H_2 production process. The technical analysis demonstrates the efficiency of biomass conversion to syngas and subsequent H_2 production in the form of NH_3 with a remarkable yield of 2063.40 kg/h and a recovery of oxygen carriers. The economic evaluation reveals the potential of the process to be competitive in the market, with a calculated minimum selling price (MSP) of \$3.44 per kg H_2 as NH_3 , in the case of a 98% recover of the oxygen transporters, and a levelized cost of H_2 (LCoH) of \$0.97 per kg, indicating an advantageous position compared to current market prices. The environmental analysis shows a total greenhouse gas emission of 27.46 kg CO_2 -eq per kg H_2 as NH_3 . The project underlines the potential of using agricultural residues for the production and storage of renewable H_2 , contributing to the reduction of environmental impact and promoting a sustainable energy future.

Key words: Hydrogen, Agricultural residues, Cane bagasse, Pyrolysis, Gasification, Chemical looping, Ammonia, Haber-Bosch, Energy, Life cycle analysis, Aspen Plus.

TABLA DE CONTENIDO

1. INTRODUCCIÓN	11
1.1. Antecedentes	11
1.2. Justificación	13
1.3. Objetivos	15
2. METODOLOGÍA	16
2.1. Diseño y descripción técnica del proceso de modelamiento.	16
2.1.2. <i>Descripción del modelado en Aspen Plus</i>	16
2.1.3. <i>Caracterización del residuo utilizado.</i>	17
2.1.4. <i>Descripción por etapa del proceso.</i>	18
2.1.4.1. Formación del Gas de Síntesis (Gasificación).....	19
2.1.4.1.1. Etapa de descomposición pirolítica	19
2.1.4.1.2. Fase de reacción con vapor de agua.....	21
2.1.4.2. Proceso de Bucle Químico	21
2.1.4.2.1. Reducción	21
2.1.4.2.2. Oxidación.....	22
2.1.4.2.3. Combustión.....	22
2.1.4.3. Síntesis de amoníaco Haber-Bosch:	23
2.4.1.4. Combustión de H ₂ para obtener energía.	24
2.3.5 <i>Balance energético.</i>	25
2.2. Análisis económico	25
2.3. Análisis Ambiental.....	28
2.3.1. <i>OpenLCA®.</i>	28
2.3.2. <i>Alcance del análisis del ciclo de vida.</i>	29
2.3.3. <i>Análisis de ciclo de vida.</i>	30
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	31
3.1. Técnico.....	31
3.1.1. <i>Gasificación</i>	31
3.1.2. <i>Producción de H₂ y recuperación de componentes</i>	31
3.1.3. <i>Síntesis de Amoniaco y producción de energía eléctrica.</i>	32
3.1.4 <i>Balance energético.</i>	32
3.2. Económico.....	35
3.3. Ambiental.....	38
3.3.1. <i>Análisis de ciclo de vida de todo el proceso.</i>	38

3.3.2. <i>Análisis de ciclo de vida hasta la producción de H₂</i>	39
4. CONCLUSIONES	42
4.1. Técnico.....	42
4.2. Económico.....	42
4.3. Ambiental.....	42
5. REFERENCIAS	43

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Componentes introducidos a la simulación.....	17
Tabla 2. Composición del bagazo de caña.	18
Tabla 3. Descripción de los seis procesos ingresados en OpenLCA® y los flujos considerados.....	30
Tabla 4. Costos fijos: sueldos de los empleados.	35
Tabla 5. Costos variables de producción de H ₂ en forma de amoníaco.	36
Tabla 6. Costos variables de producción y licuefacción de H ₂	37
Tabla 7. ACV del proceso completo de obtención de H ₂ en forma de amoníaco.	38
Tabla 8. ACV del proceso de producción hasta la obtención de H ₂	39

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Diagrama de bloques del proceso.....	19
Figura 2. Proceso de síntesis de amoníaco.	24
Figura 3. Balance energético.....	32
Figura 4. Modelo de Aspen Plus completo.	34
Figura 5. Costos fijos de producción de H ₂ en forma de amoníaco por proceso.	36
Figura 6. Precios de Venta Mínimo - Escenarios de 90% vs 98% de recirculación.	37
Figura 7. Principales contribuyentes a la huella de carbono de la producción de H ₂	39
Figura 8. Diagrama de Sankey del proceso de producción de H ₂ en forma de NH ₃	40

1. INTRODUCCIÓN

1.1. Antecedentes

La demanda mundial de energía ha experimentado un aumento constante en la última década. De 2012 a 2022, la demanda global pasó de 12.62 Gigatoneladas de petróleo equivalente (Gtpe) (528.37 EJ) a 14.21 Gtpe (594.94 EJ), un incremento de casi 2 Gt en tan solo una década (Energy Institute, 2023; Yolcan, 2023). Esta demanda energética se suple principalmente con el uso de combustibles fósiles, lo que ha creado una dependencia en estos. Este patrón de consumo ha acarreado consecuencias ambientales adversas, siendo el cambio climático el resultado más significativo. La quema de combustibles fósiles se ha identificado como la principal fuente de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI), liberando anualmente más de 30,000 millones de toneladas (Mt) de dióxido de carbono (CO₂) (Herzog-Hawelka & Gupta, 2023).

Ante esta problemática, el hidrógeno (H₂) ha surgido como una alternativa de combustible prometedor. El H₂ se destaca por su capacidad de combustión limpia, su potencial para producción doméstica y alta densidad energética por masa (Pareek et al., 2020). Sin embargo, actualmente, la producción de H₂ se hace a partir de combustibles fósiles, principalmente por medio de los procesos de reformado de gas natural, reformado de la nafta en refinerías (ambos H₂ gris) y gasificación del carbón (H₂ negro). Estas formas de producción representan el 62%, 16% y 21%, respectivamente (IEA, 2023; Zhang et al., 2021). Aunque la demanda de H₂ ha crecido anualmente un 3%, alcanzando 95 Mt H₂ en 2022, las tecnologías menos contaminantes, como el H₂ azul, amarillo, rosa y verde¹, han mantenido solo una participación del 0.7% en la producción total durante los últimos 3 años (IEA, 2021, 2022, 2023).

¹ Azul: producción a partir de combustibles fósiles, con captura de carbono. Amarillo: electrólisis con electricidad de la red eléctrica. Rosa: electrólisis con energía nuclear. Verde: electrólisis con energías renovables.

Estas formas alternativas de producción de H₂ enfrentan desafíos económicos, técnicos y de mercado. Estos incluyen la necesidad de grandes volúmenes de agua (especialmente agua salada) para la electrólisis eficiente del H₂ rosa y verde, limitando la ubicación de las plantas a zonas costeras o poniendo estrés sobre el recurso agua; los problemas asociados a la minería de uranio y metales, y los costos de los equipos para electrólisis (Ajanovic et al., 2022; Greve et al., 2018; Ishaq et al., 2022; Kuzma et al., 2023). Además, tanto en la producción convencional de H₂ como en la alternativa, se enfrenta el desafío de la baja densidad del H₂. Esta baja densidad implica altas presiones para su almacenamiento (~200 bar) y transporte (~344–690 bar) y un punto de licuefacción extremadamente bajo (-253°C) (Deka et al., 2023; Osman et al., 2022). En resumen, tanto la cantidad de energía necesaria para producir y almacenar H₂ como las materias primas para su producción generan preocupaciones en cuanto a la sostenibilidad del proceso.

Unas de las materias primas renovables que se ha estudiado los últimos años para la producción de hidrógeno, son los residuos agrícolas. Estos residuos pueden ser aprovechados al ser procesados en bioproductos y bioenergía, lo que contribuye a reducir la dependencia de los combustibles fósiles (Duque-Acevedo et al., 2020). Los residuos de la industria agrícola, considerada uno de los principales generadores residuos sólidos orgánicos, se estiman en 140 Gt anualmente (Tripathi et al., 2019) y son responsables de la generación de más de 18 Mt de residuos por año en Ecuador (Calderón et al., 2017). La gestión de estos residuos muchas veces no es adecuada, ya que buena parte de estos son quemados o dispuestos en botaderos a cielo abierto, barrancos secos o terrenos baldíos (Gavilanes-Terán et al., 2016; Novillo et al., 2022). En este contexto, se vislumbra una oportunidad de aprovechar los residuos agrícolas como una fuente de energía y mejorar su manejo, a través de su conversión a H₂.

1.2. Justificación

La producción convencional de H₂ contribuye al cambio climático, debido a las emisiones asociadas con el uso de combustibles fósiles durante su procesamiento. En detalle, alrededor del 6% del gas natural y el 2% del carbón extraído anualmente se destinan a la producción de H₂ gris (Ajanovic et al., 2022). Esta tendencia se ve confirmada por datos del 2022 que indican que la producción total global de H₂ fue de 95 Mt, con emisiones asociadas de más de 900 Mt CO₂ (IEA, 2022). De manera específica, se registra una emisión de 16 kg de CO₂ equivalente (CO₂-eq) por cada kg de H₂ gris producido (Ajanovic et al., 2022). Además, se observa que en su mayoría hubo un incremento entre 2020 y 2022 en la producción de H₂ utilizando combustibles fósiles sin captura de carbono (IEA, 2021, 2022, 2023). Esto repercute directamente en la viabilidad del H₂ como un combustible alternativo e independiente de combustibles fósiles.

Por otro lado, la producción alternativa del H₂ se ve limitada por su alto consumo de energía, lo cual aumenta su impacto ambiental y costos (Deka et al., 2023; Nayak-Luke et al., 2021). A pesar de que la energía consumida provenga de fuentes limpias, no se puede pasar por alto los impactos asociados a la generación de estas fuentes. Estos impactos incluyen los impactos ambientales de la minería metálica, de la minería de uranio y los impactos a los cuerpos de agua por cambiar su caudal (Ajanovic et al., 2022; Deka et al., 2023). Esta intensidad energética, así como el elevando costo de las tecnología para hacer electrólisis, significa que el coste para producir H₂ a partir de fuentes alternativas es actualmente más alto, resultando en que esta metodología represente solo el 0.1% de la producción total de H₂ (IEA, 2022). Sin embargo, más que para el proceso de producción, el consumo de energía es una de las grandes limitantes para el almacenamiento y transporte de H₂ (Deka et al., 2023; Nayak-Luke et al., 2021).

El almacenamiento del H₂ implica un alto consumo energético para mantener la presión y/o temperatura adecuadas, y esta energía no siempre proviene de fuentes renovables, generando emisiones de gases de efecto invernadero (Ishaq et al., 2022; Osman et al., 2022). Para superar estas limitaciones se ha investigado el almacenamiento en forma de otros compuestos, uno de ellos siendo el amoníaco (NH₃) (Olabi et al., 2021). Almacenar H₂ de esta forma es una alternativa que se ha estudiado, primero, por el alto contenido de H₂ por molécula que el NH₃ tiene, segundo porque el proceso para su síntesis es bien entendido y ampliamente usado (Haber-Bosch) y tercero porque se puede almacenar a una temperatura y presión menores (-33°C, 1 atm) (Olabi et al., 2021). El proceso Haber-Bosch para la síntesis de NH₃ requiere de N₂ y H₂, los cuales se obtienen generalmente del aire y del gas natural, respectivamente (Olabi et al., 2021), sin embargo, si se usara esta forma de producción la dependencia en los combustibles fósiles se mantendría. Producir H₂ a partir de materias primas renovables, con bajo consumo energético y a bajos costos, es ahora una necesidad para que su producción no contribuya al cambio climático y sea accesible para países en desarrollo.

La producción de H₂ a partir los residuos agrícolas es una oportunidad que se ha identificado para una producción sostenible y una mejora en el manejo de estos residuos. Debido a esto, es crucial considerar que el 21% de las emisiones de gases de efecto invernadero provienen directamente de los procesos relacionados a la industria agrícola, lo que subraya la importancia de una gestión adecuada de estos residuos (Calderón et al., 2017; Duque-Acevedo et al., 2020). Además, la presencia de materia orgánica, compuestos inorgánicos, agua, minerales y óxidos metálicos en los residuos agrícolas, generan problemas medioambientales si no se gestionan adecuadamente, como contaminación del suelo y agua (Abdullah et al., 2021; Gidebo et al., 2023). Asimismo, la incineración de estos residuos puede generar contaminantes y representar una amenaza para la salud humana (Oluseun Adejumo & Adebukola Adebisi, 2021). Debido a la oportunidad para reducir este impacto y para tener una materia prima

alternativa a los combustibles fósiles, que además es renovable, se decidió estudiar la potencialidad de los residuos de caña de azúcar para producir H₂.

1.3. Objetivos

En consideración a lo expuesto y ante la creciente inquietud por los retos medioambientales y energéticos actuales, resulta esencial explorar alternativas más sostenibles y eficientes para la producción de H₂. En este contexto, este proyecto se enfoca en abordar esta necesidad con el objetivo general de evaluar la viabilidad y sostenibilidad de un proceso de producción de H₂ a partir de fuentes renovables. Para alcanzar el objetivo general, se definen 3 objetivos específicos. Desde una perspectiva técnica, diseñar un proceso de producción de H₂ a partir de residuos agrícolas con herramientas de modelado. Del punto de vista económico, determinar la rentabilidad del proceso mediante un análisis tecno-económico. Finalmente, desde el aspecto ambiental, cuantificar el impacto ambiental del proceso a través de un análisis de ciclo de vida.

2. METODOLOGÍA

2.1. Diseño y descripción técnica del proceso de modelamiento.

2.1.1. Configuración del ambiente de simulación.

El proceso para la producción de hidrogeno en forma de amonio se simuló en el software de modelamiento de procesos químicos Aspen Plus® v.14, empleando el método termodinámico de Peng-Robinson que usa la ecuación cubica de estado estándar para el cálculo de las propiedades fisicoquímicas del sistema. El método fue seleccionado ya que es idóneo para simulaciones de materiales en fase gas, procesos de refinamiento y aplicaciones petroquímicas, especialmente para el tratamiento de hidrocarburos y gases ligeros, como dióxido de carbono e H₂. En este sentido, las ecuaciones cúbicas de estado, como la de Peng-Robinson, son modelos termodinámicos que buscan predecir el comportamiento de la presión de un gas en función de la temperatura y la densidad, y que pueden reescribirse como una función cúbica del volumen molar del gas; modelando el equilibrio vapor-liquido de las sustancias.

2.1.2. Descripción del modelado en Aspen Plus

La introducción de los componentes (elementos, compuestos químicos y materias primas) involucrados en el proceso fue el primer paso para el desarrollo efectivo de la simulación. Se comenzó con la definición de los componentes y sus propiedades físicas. En el caso de la biomasa y la ceniza, fueron definidos como sólidos no convencionales, debido a que no se caracterizan mediante una formula molecular definida. En la Tabla 1 se muestra los componentes introducidos en la simulación para el modelamiento con su respectivo tipo de material.

Tabla 1. Componentes introducidos a la simulación

Componente	Tipo	Nombre del Componente
Biomasa	No convencional	Biomasa
Ceniza	No convencional	Ceniza
C	Sólido	Carbón Grafito
H₂	Convencional	Hidrógeno
N₂	Convencional	Nitrógeno
Cl₂	Convencional	Cloro
S	Convencional	Azufre
O₂	Convencional	Oxígeno
H₂O	Convencional	Agua
CO	Convencional	Monóxido de Carbono
CO₂	Convencional	Dióxido de Carbono
CH₄	Convencional	Metano
HCl	Convencional	Ácido Clorhídrico
H₂S	Convencional	Ácido Sulfhídrico
SO₂	Convencional	Dióxido de Azufre
NH₃	Convencional	Amoniac
Al₂O₃	Sólido	Óxido de Aluminio
Fe₂O₃	Sólido	Hematita
FeO	Sólido	Óxido Ferroso
Fe	Sólido	Hierro
Fe₃O₄	Sólido	Magnetita
NO	Convencional	Óxido Nítrico

2.1.3. Caracterización del residuo utilizado.

El residuo agrícola seleccionado para simular la biomasa en este proceso fue el bagazo de la caña de azúcar, un material notablemente rico en componentes lignocelulósicos, como la celulosa, hemicelulosa y lignina, que le confieren un impresionante potencial energético. Además de ser catalogado como un cultivo permanente, destaca por su extraordinaria producción de peso en relación con su área cultivada, superando a otros productos agrícolas según datos del INEC (2023). Su estructura fibrosa y porosa lo convierte en una elección idónea para diversas aplicaciones en la producción de bioetanol y otros bioproductos, como se destaca en la investigación de Bhadha et al. (2020). La Tabla 2 presenta el análisis proximal y el análisis

final del bagazo de caña utilizado en la simulación. Ya que, en base a los datos disponibles, la cantidad de residuos generados en Ecuador de la producción de la caña de azúcar es de 793,283.40 t/año, y solamente el 74.78% (593,217.33 t/año) se concentra en la provincia de Guayas, se consideró utilizar un flujo másico de bagazo de 20 t/h, representando aproximadamente el 30% de los residuos generados en esta provincia al año.

Tabla 2. Composición del bagazo de caña.

Análisis final	Valor (%)	Análisis proximal	Valor (%)
Ceniza	1.94	Carbón fijo	74.98
Carbón	43.77	Material volátil	13.57
Hidrógeno	5.68	Ceniza	1.94
Nitrógeno	0.2	Humedad	9.51
Cloro	0.05		
Azufre	2.3		

Fuente: (Anukam et al., 2016)

2.1.4. Descripción por etapa del proceso.

El proceso de obtención de H₂ se dividió en tres etapas: gasificación con vapor de agua, bucle químico y síntesis de amoníaco. Se creó un diagrama de flujo que representaba reactores, separadores e intercambiadores de calor para simular la gasificación de biomasa, el bucle químico para producir H₂ y la síntesis de NH₃ por el método Haber-Bosch. Se establecieron condiciones operativas con temperaturas, presiones y composiciones específicas. Luego, se llevó a cabo la simulación para analizar y equilibrar masa y energía, optimizando la eficiencia mediante la recuperación de calor a través de intercambiadores y aprovechando los efluentes para generar vapor. En la síntesis de amoníaco, se ajustaron parámetros del reactor RGibbs y se utilizó un separador flash para separar NH₃ de los gases residuales. Los resultados de la simulación se compararon con parámetros de diseño y datos experimentales para validar el modelo. En la Figura 1 se presenta la configuración general de los procesos del modelo.

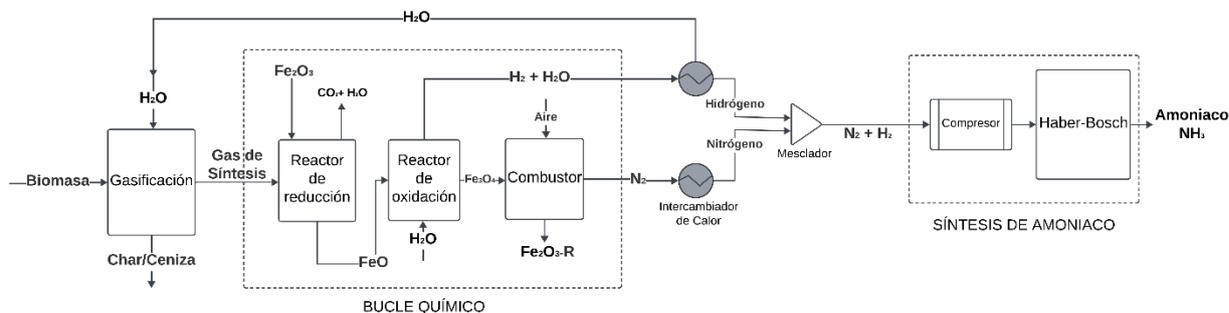


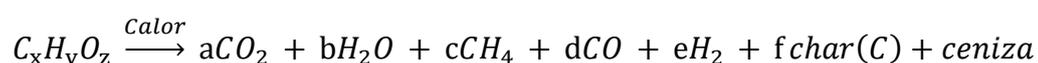
Figura 1. Diagrama de bloques del proceso.

2.1.4.1. Formación del Gas de Síntesis (Gasificación)

El proceso para la obtención del gas de síntesis (syngas) consistió en la simulación de dos etapas, la fase de descomposición pirolítica y la fase de reacción con vapor de agua. Para este modelamiento se utilizó un reactor RYield a 400°C para la primera fase y un RGibbs a 785°C para la segunda, ambos a condiciones de presión de 15 bar. El gas de síntesis producido consistió en su mayoría, en una composición de Monóxido de Carbono (CO), Hidrógeno (H₂), Dióxido de Carbono (CO₂), Metano (CH₄). A continuación, se detalla cada etapa del proceso.

2.1.4.1.1. Etapa de descomposición pirolítica

Durante la fase de descomposición pirolítica, para su simulación se llevó a cabo la descomposición química de la biomasa mediante la aplicación controlada de calor en un ambiente libre de oxígeno. Para simular este proceso, se empleó un reactor RYield, diseñado para modelar la separación de los componentes clave de la biomasa a partir del análisis proximal y final, incluyendo carbono (C), hidrógeno (H), nitrógeno (N), oxígeno (O), cloro (Cl) y azufre (S). En esta etapa la biomasa es convertida en compuestos volátiles, líquidos y sólidos dentro de los cuales fueron considerados como gaseosos: CO₂, H₂, CO, CH₄, H₂O, Cl₂, N₂, O₂ y como sólidos, char (C) y ceniza. A través de la siguiente ecuación se puede observar la reacción general durante la etapa de pirólisis.



Procedimiento:

Reactor RYield: El reactor RYield se utilizó como herramienta esencial para simular la descomposición pirolítica. Este dispositivo permite analizar los rendimientos individuales de cada componente de la biomasa durante el proceso, facilitando la generación de productos gaseosos, líquidos y sólidos resultantes.

Especificación de Rendimientos: Los valores de rendimiento de la reacción para cada componente se determinaron a partir de análisis final y proximal. Estos valores sirvieron como referencia para la caracterización de los productos resultantes, fundamentales para entender la evolución de la biomasa durante la descomposición. En base a la literatura disponible se utilizó la siguiente fórmula para simular el rendimiento de cada componente (Eden, 2013):

$$x_{componente} = (1 - x_{humedad}) * x_{componente}$$

Donde,

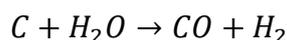
- $x_{componente}$ = *La fracción del componente*
- $x_{humedad}$ = *La fracción de la humedad*

Condiciones Operativas: La descomposición pirolítica se llevó a cabo bajo condiciones específicas, con temperaturas superiores a 400°C. A esta temperatura, la biomasa experimenta una conversión significativa, dando lugar a la generación de productos volátiles como monóxido de carbono (CO), metano y residuos de carbono en forma de char. (Detournay et al., 2011).

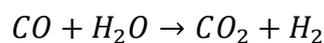
Consideraciones Adicionales: Se consideró que la biomasa introducida en el proceso se encontraba en base seca, proporcionando una base homogénea para la evaluación y comparación de resultados.

2.1.4.1.2. Fase de reacción con vapor de agua.

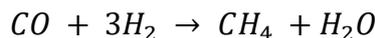
En esta etapa, ingresó el flujo proveniente de la etapa pirolítica para la gasificación del carbón mediante vapor de agua con un flujo de 124 kg/h, con una temperatura de 102°C. Como flujo de salida se obtuvo el gas de síntesis (syngas) y se separó la ceniza y el carbono residual del proceso. Para esta simulación se utilizó un reactor *RGibbs* con condiciones operativas de temperatura de 785°C y presión de 15 bar. En esta etapa parte del carbón producido reaccionó con el vapor de agua para producir CO e H₂ a través de la siguiente ecuación:



El CO producido a su vez reaccionó con el vapor de agua para la formación de CO₂ e H₂ a través de la siguiente ecuación:



En menor medida se dió una metanización a través de la siguiente ecuación:

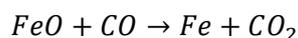
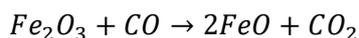


2.1.4.2. *Proceso de Bucle Químico*

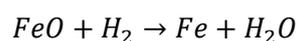
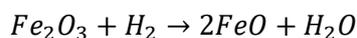
2.1.4.2.1. Reducción

Se empleó un reactor *RGibbs*, donde se inyectó inicialmente un flujo masico en proporción del portador de oxígeno de 0.7 de Fe₂O₃ (140 t/h) y 0.3 de Al₂O₃ (60 t/h) el cual reacciona el gas de síntesis para producir Fe/FeO y un flujo de CO₂/H₂O. Se estableció una proporción del portador de oxígeno de 0.7 Fe₂O₃ y 0.3 Al₂O₃ debido a que de esta manera se mantiene su estabilidad, mejora la capacidad de transporte de oxígeno, incrementa la tasa de reducción, reduce la sinterización y mejora reactividad en la partición de H₂O y CO₂ (Miyahira & Aziz, 2022). Este reactor opera a una temperatura de 850°C y a presión atmosférica de 15 bar. Se considera que ocurren las siguientes reacciones:

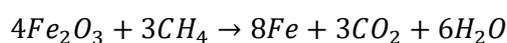
Reacción del CO con el Portador de Oxígeno (Fe_2O_3)



Reacción del H_2 con el Portador de Oxígeno (Fe_2O_3)



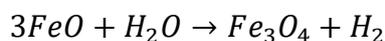
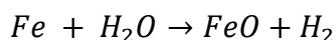
Reacción del CH_4 con el Portador de Oxígeno (Fe_2O_3)



La cantidad utilizada es dependiente del flujo molar de cada componente con el que reacciona.

2.1.4.2.2. Oxidación

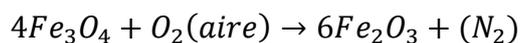
Se utilizó un reactor RGibbs en el cual el portador de oxígeno reducido (FeO) de la salida del reductor son transferidos para la producción de H_2 con la reacción con el vapor de agua (H_2O) a través de la siguiente ecuación:



En este reactor el FeO es oxidado a Fe_3O_4 mientras viaja hacia abajo del reactor, mientras que el H_2O se reduce a H_2 mientras viaja hacia arriba del reactor. Al condensar el vapor, un flujo de H_2 de gran pureza puede ser producido.

2.1.4.2.3. Combustión

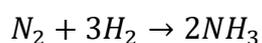
Se utilizó un reactor RGibbs de flujo donde el portador de oxígeno (Fe_3O_4) es reoxidado a (Fe_2O_3) al reaccionar con el O_2 del aire a través de la siguiente reacción:



De acuerdo con Monazam (2014), la cinética de conversión a Fe_2O_3 se da temperaturas de alrededor de 600-850°C. Este proceso libera una cantidad significativa de calor, puesto que, a condiciones adiabáticas, el reactor puede alcanzar más de 1100°C (Li et al., 2010). El calor de los efluentes de tanto, el reductor (CO_2+H_2O a 850°C), oxidador ($H_2 + H_2O$ a 529°C) y combustor (N_2 a 750°C) se lo utilizó a través de intercambiadores de calor para la formación del vapor que se separó para ir hacia el reductor y el proceso de gasificación.

2.1.4.3. Síntesis de amoníaco Haber-Bosch:

La producción de amoníaco mediante el proceso Haber-Bosch es la forma de síntesis de NH_3 más usada en el mundo (Moore et al., 2021) a través de la siguiente reacción:



Esta reacción es exotérmica y a temperatura ambiente se ve favorecida hacia la formación de los productos; ya que tanto su entalpía como energía libre de Gibbs son menores a cero (-92 kJ/mol y -33 kJ/mol, respectivamente) (Moore et al., 2021). Sin embargo, la energía activación de esta reacción son altas, ya que se tienen que romper el triple enlace entre nitrógenos y tres enlaces H-H. Por lo tanto, para facilitar la ruptura de estos enlaces, esta reacción se da a alta temperatura y para compensar el desplazamiento que la temperatura causa hacia formación de reactivos, se aplica también presión. Los rangos de temperatura y presión están entre 400 – 500 °C y 150 – 250 bar (Moore et al., 2021). En el modelo del presente trabajo se modeló este proceso con un reactor RGibbs a condiciones de 450°C y 150 bar.

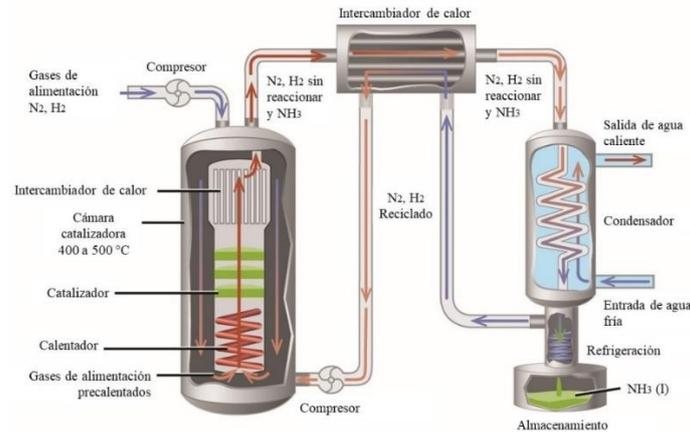


Figura 2. Proceso de síntesis de amoníaco.

Fuente: (Moore et al., 2021).

La reacción se da de manera incompleta, así que se separa el H_2 y N_2 del NH_3 . Esto se da mediante un separador de temperatura, aprovechando que el NH_3 tiene un punto de ebullición mucho mayor que el H_2 y N_2 (Moore et al., 2021), al bajar la temperatura el NH_3 se hace más denso que los otros dos gases, o hasta se puede volver líquido de una vez. En el presente modelo, se trabaja con un separador tipo Flash, a $20^\circ C$, pero que por la presión a la que sale, sale en forma líquida. En el proceso Haber-Bosch, la acumulación de gases inertes, como el Ar, hace que baje significativamente la eficiencia por lo que se recomienda purgar un poco del gas que se recicla al proceso (Cheema & Krewer, 2018). Por lo tanto, una fracción de la mezcla H_2-N_2 que sale del separador se recircula al proceso, la fracción que se purga va a un proceso de combustión.

2.4.1.4. Combustión de H_2 para obtener energía.

Para poder generar un coproducto que dé al proceso un valor agregado, se usó la purga del proceso Haber-Bosch a través de la generación de electricidad usando turbinas de gas y de agua. De la mezcla de H_2-N_2 el 40% se recircula al proceso mientras que el 60% entra al proceso de combustión. Esta proporción se determinó siguiendo las recomendaciones del proceso de Miyahira y Aziz (2022) y mediante iteración en nuestro modelo para que se produzca suficiente

energía para suplir la demanda interna de la planta y se produzca una buena cantidad de NH_3^2 . Primero, se despresurizó el gas de 150 bar a 30 bar con una turbina de gas, para luego entrar a un combustor, con el que se generó energía para calentar agua que irá a una turbina de agua. El gas de salida del combustor (principalmente N_2 y H_2O) pasa por dos turbinas (30 a 15 bar y de 15 a 1 bar) más antes de ser liberado a la atmosfera.

2.3.5 Balance energético.

Para este balance se obtuvieron las cargas térmicas calculadas por el programa Aspen Plus® para cada reactor RGibbs, RYield, separador, enfriador e intercambiador de calor del modelo. También se obtuvo del programa la potencia del equipo para el proceso de compresión y la bomba del proceso de combustión; la cantidad de energía se calculó para la unidad de una hora. Estas cargas térmicas positivas nos indicaban la energía que debíamos suministrar a los reactores para mantener su temperatura, y al sumarlas con la cantidad de energía que se deben suplir a compresores y bombas tenemos cuánta energía se consume. A este consumo se le restó la energía recuperada por generación de electricidad y la cantidad de energía que genera el H_2 dentro del NH_3 producido (Ecuación 1).

Ecuación 1. Energía contenida en H_2 en forma de NH_3 producido.

$$\begin{aligned} & \text{Energía contenida en } \text{H}_2 \text{ producido} \\ & = \text{kgNH}_3 \times \frac{1\text{kmol NH}_3}{\text{kg NH}_3} \times \frac{3\text{kmol H}_2}{2\text{kmol NH}_3} \times \frac{2\text{kg H}_2}{1\text{kmol H}_2} \times 141.9 \frac{\text{MJ}}{\text{kg H}_2} \times 0.278 \frac{\text{kWh}}{\text{MJ}} \end{aligned}$$

2.2. Análisis económico

Para evaluar la factibilidad de la aplicación del proyecto, se realizó un análisis de los costos para obtener el Precio de Venta Mínimo (PVM; VAN = 0), a través del cálculo del Valor Actual Neto (VAN) y la Tasa Interna de Retorno (TIR). Para esto, se identificaron los costos fijos, como los costos de los equipos y sueldos de los trabajadores, y los costos variables, como precios de la materia prima, agua y electricidad. Para saber el costo de los equipos, se realizó

² En el modelo, recircular mayor cantidad de $\text{H}_2\text{-N}_2$ no significaba necesariamente un incremento en la producción de NH_3 .

un dimensionamiento, según los flujos volumétricos que entran a cada reactor o, en el caso de compresores, bombas y turbinas, usando la cantidad de trabajo necesaria calculada por el programa de modelado Aspen Plus® v.14. Se consideraron todos los equipos, excepto los divisores y mezcladores. Con la dimensión mínima que cada equipo debería tener, se usaron los costos base y exponentes de dimensionamiento de Guthrie y Klumpar & Slavsky (1969; 1985), así como los valores CEPCI (Chemical Engineering Plant Cost Index) anuales para 1987, y el último CEPCI al que tuvimos acceso (del 2020), para calcular los costos tomando en cuenta la inflación. El cálculo se realizó utilizando la Ecuación 2 y al valor obtenido de este cálculo se le multiplicó un factor de Lang de 3.63, que es un factor toma en cuenta un aumento del precio debido a los costos asociados a la instalación y transporte de los equipos y tuberías, para operaciones con sólidos y fluidos.

Ecuación 2 Cálculos de los costos de los equipos para el 2020.

$$\text{Nuevo costo}(2020) = \text{Costo base} \times \text{Tamaño}^{\text{Exponente de dimensionamiento}} \times \frac{\text{CEPCI 202}}{\text{CEPCI 1987}}$$

Para finalizar los costos fijos se establecieron los suelos de 27 trabajadores, tal y como se describe en la Tabla 4 en la sección de resultados. Se sumaron los costos totales anuales y se descontaron los beneficios por ley y seguridad social, multiplicando la sumatoria por 0.9. Los costos fijos operativos totales se calcularon con la ecuación 3.

Ecuación 3. Costos fijos operativos.

Costos fijos operativos

$$= 1.9 \times \left(\sum \text{Costo total anual} \right) + 0.037 \times \text{Inversión en equipos (sin factor de Lang)}$$

Para los costos variables se consideraron todas las materias primas usadas, excepto por la biomasa, ya que al ser un residuo se asumió que los proveedores no van a cobrar por este. Se consideraron los transportadores de oxígeno (Fe_2O_3 y Al_2O_3), el agua, electricidad, gas natural para proveer de energía a los reactores, y costo de mantenimiento. También se

establecieron como coproductos de nuestro proceso el Fe_2O_3 , Al_2O_3 y agua que recuperamos para recirculación y la electricidad que se produce con la mezcla $\text{H}_2\text{-N}_2$ que se desvía en el proceso de recirculación al Haber-Bosch para producción de energía. Pese a que en el modelo desarrollado hay una recuperación del 100% de los transportadores de oxígeno, para tener un escenario más realista se establecieron dos escenarios para calcular el PVM, uno con 90% de recirculación y otro con 98%. Los detalles de los materiales y costos por unidad del escenario de 90% de recirculación se resumen en la Tabla 5 y la Tabla 6, en la sección resultados. Los costos variables se calculan usando la cantidad de NH_3 producida, obtenida del anterior objetivo.

Estableciendo inicialmente un precio de venta mínimo (PVM) cualquiera y teniendo la inversión total inicial (costos de los equipos), los costos fijos y la producción total anual tanto del producto final, como de los coproductos, se usó la herramienta de Excel “Datos > Análisis de hipótesis > Buscar objetivo” para encontrar un valor de PVM en el que el Valor Actual Neto sea cero.

Este procedimiento se realizó para nuestro modelo final, pero también para otro modelo que solo toma en cuenta la licuefacción del H_2 que sale del bucle químico. La diferencia de este último modelo con el modelo completo es que el proceso termina con el compresor, el cual tiene un consumo de energía mayor, debido a que la presión a la que tiene que llegar es mayor (350 bar), y la temperatura a la que tiene que bajar es menor (-253°C). Esto también quiere decir que no hay producción de energía en el sitio y posteriormente, como consideración, que se debe considerar el mantener esta temperatura tan baja durante el transporte. Los costos variables de este proceso se presentan en la Tabla 6, en la sección de resultados.

A parte del PVM, para comparar precios entre varios métodos de obtención de H_2 , se usa hacer una nivelación del precio del H_2 llamado “Levelized Cost of Hydrogen” (LCoH), que

es el costo total de construcción de la planta, más los costos fijos, sobre la cantidad de H₂ que se producirá en el tiempo de vida de la planta (Ecuación 4); el mismo cálculo se puede hacer para obtener el precio nivelado del NH₃. El H₂ producido por el proceso de bucle químico a partir de biomasa no tiene todavía una clasificación oficial, sin embargo, si se calcula su LCoH se puede comparar con los demás colores de H₂.

Ecuación 4. Cálculo del costo nivelado del H₂ (LCoH)

$$LCoH = \frac{\text{Costos operativos fijos} + \text{Inversión inicial}}{\text{Producción total de H}_2 \text{ en toda la vida útil de la planta}}$$

2.3. Análisis Ambiental

2.3.1. OpenLCA®.

El análisis de ciclo de vida (ACV) es una herramienta útil para la cuantificación de la huella de carbono que genera un proceso y puede ser llevado a cabo de varias maneras. En base a los análisis previamente realizados y en conformidad con la norma ISO 14040, se procedió a elaborar el ACV con la finalidad de evaluar el impacto ambiental durante el proceso de obtención de H₂ (Ihobe S.A, 2009). En este caso, el software OpenLCA® es una plataforma de código abierto que permite realizar la evaluación gracias a la accesibilidad a distintas bases de datos.

Las bases de datos se descargaron a través de la plataforma OpenLCA® Nexus dentro de la cual se utilizaron las siguientes con los respectivos inputs para los procesos:

- Agribalyse v.3.0.1,
 - Sugarcane, Animal feed, at farm gate.
 - Ammonia (with 100% NH₃), production mix, at plant (WFLDB 3.5)
 - Electricity, high voltage, production PK, at grid (WFLDB 3.1)/PK U
- OzLCL2019

- Ship Calcined Alumina 7000km ex Tasmania, Queensland & West Australia
- Ship Crushed Hematite 7000km from Western Australia
- Make Nitrogen Gas on Site
- Make & Add Steam on Site
- Burn Natural Gas
- NEEDS complete,
 - hydrogen, compressed gas, at hydrogen fueling station.

Por otra parte, el método de impacto manejado en OpenLCA® es el “IPCC 2013 GWP 100 años” el cual se basa en los lineamientos establecidos por el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC) en el informe del 2013. El software utilizado considera el potencial de calentamiento global (GWP) de diferentes gases de efecto invernadero (GEI) en un horizonte temporal de 100 años. Este enfoque permite cuantificar y comparar las contribuciones de emisiones de GEI a lo largo de la cadena de valor, en ese caso, de la producción de H₂ y almacenamiento en forma de amoníaco. La aplicación de este método permite cuantificar la huella de carbono en kg de CO₂-eq.

2.3.2. Alcance del análisis del ciclo de vida.

En el análisis de ciclo de vida se considera el origen y transporte de los flujos como los transportadores de oxígeno Fe₂O₃ y Al₂O₃, biomasa (caña de azúcar), fuentes de electricidad y calor (gas natural). Esto permite realizar un enfoque “de la cuna a la puerta”, más conocido como “cradle to gate”. No se considera ni el origen de los materiales usados en la construcción de los equipos, reactores y componentes usados en la producción del H₂, ni el impacto causado por su construcción.

2.3.3. Análisis de ciclo de vida.

Para determinar la sostenibilidad del proceso se realizó el análisis de ciclo de vida. El modelo de producción de H₂ se dividió en seis etapas principales para introducirlos y analizarlos en OpenLCA®. De cada proceso se identificaron las entradas y salidas, las cuales, además de la descripción de lo que se considera en cada proceso. Se da una descripción detallada de cada proceso junto con sus respectivas entradas y salidas en la Tabla 3.

Tabla 3. Descripción de los seis procesos ingresados en OpenLCA® y los flujos considerados.

Proceso	Descripción	Entradas	Salidas
Gasificación	En el modelo es el proceso que realizan el descomponedor (DECOMP) y gasificador (GASIF).	Agua	Gas de síntesis (producto)
		Calor (gas natural)	Cenizas
		Aire	
Bucle químico	En el modelo es el proceso que realizan los reductores (RED 1-5) y oxidador (OXI), se consideró a parte la combustión del transportador de oxígeno reducido.	Gas de síntesis	Hidrógeno
		Agua	Agua
		Hematita	Dióxido de carbono
		Calor (gas natural)	Magnetita
		Alúmina	
Combustión para N ₂	En el modelo es el proceso que realiza el combustor 1 (COMB1)	Magnetita	Nitrógeno gaseoso
		Aire	
Compresión del H ₂ y N ₂	En el modelo es el proceso que realiza el compresor (COMPR)	Hidrógeno	Hidrógeno comprimido
		Nitrógeno	Nitrógeno
		Electricidad	
Haber-Bosch	En el modelo es el proceso que realiza el reactor Haber-Bosch (HAB-BOS).	Hidrógeno comprimido	Amoniaco
		Nitrógeno	Hidrógeno comprimido
			Nitrógeno
Combustión de H ₂	En el modelo es el proceso que realizan las turbinas (ST1 y 2, GT 1-3), el combustor 2 (COMB2) y la bomba (PUMP).	Hidrógeno comprimido	Electricidad
		Nitrógeno	Nitrógeno

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. Técnico

En la Figura 4, se presenta el modelo en Aspen Plus® completo, donde se observa el uso de intercambiadores de calor, mezcladores, separadores y demás equipos a parte de los reactores RGibbs y RYield ya descritos anteriormente.

3.1.1. Gasificación

Los resultados obtenidos a través gasificación de la biomasa se muestra la producción de un gas de síntesis con una composición de 33.37% de H₂, 22.32% de CO, 19.48% H₂O, 15.03% CO₂, 8.13% CH₄ y 1.67% de otros compuestos incluidos en menor medida incluidos N₂, H₂S. Además, la producción de biochar residual (carbón) de la etapa pirolítica del proceso fue de 3,104.91 kg/h y con generación de ceniza de 351.10 kg/h. Basándose en la circularidad del proceso, de las sugerencias hechas para esta etapa es aprovechar el calor generado por el mismo proceso para ser aprovechado en otros procesos y aumentar la eficiencia energética. También a partir de la producción de biochar, se debería tomar en cuenta su recuperación como fuente de energía para combustionar y aprovechar el calor generado para suplir la necesidad endotérmica de la gasificación y de otros procesos, asociándolo a un proceso de captura de carbono para reducir su impacto.

3.1.2. Producción de H₂ y recuperación de componentes

A través del proceso de bucle químico, y luego de la separación por condensación de la fracción de agua, se obtuvo una producción de H₂ de 1,057.36 kg/h. A su vez, en el modelo se obtuvo una recuperación completa del portador de oxígeno (Fe₂O₃) de 140 ton/h junto con 60 ton/h de Al₂O₃. Para la simulación presentada se muestra la recuperación de agua a través de los procesos de reducción en el bucle químico y en su condensación en la separación del H₂ antes de entrar al proceso de síntesis de NH₃. En cuanto a la recuperación del agua, en la etapa de reducción se obtuvo una recuperación de 10,934.66 kg/h y en la separación de H₂ con el

agua de 40,384 kg/h. La cantidad de agua recuperada es suficiente para sugerir su recirculación en el proceso y así evitar un consumo constante de fuentes externas.

3.1.3. Síntesis de Amoníaco y producción de energía eléctrica.

En la etapa final de la simulación, después del proceso Haber-Bosch para la síntesis de amoníaco, la cantidad producida de NH_3 en forma líquida fue de 2,063.40 kg/h. Mientras tanto, se aprovechó el efluente en estado gaseoso con un contenido de H_2 para la generación de electricidad en planta, que fue de 7,091.5 kWh (en una hora). Esta generación eléctrica suplende las necesidades de energía por hora de la planta (1,059.98 kWh) y nos da un surplus que se puede vender.

3.1.4 Balance energético.

En la Figura 3 se observa que el valor del balance energético es fuertemente negativo, lo que indica que por el momento el proceso no es eficiente y viable para producir la cantidad de energía usando H_2 que se produce.

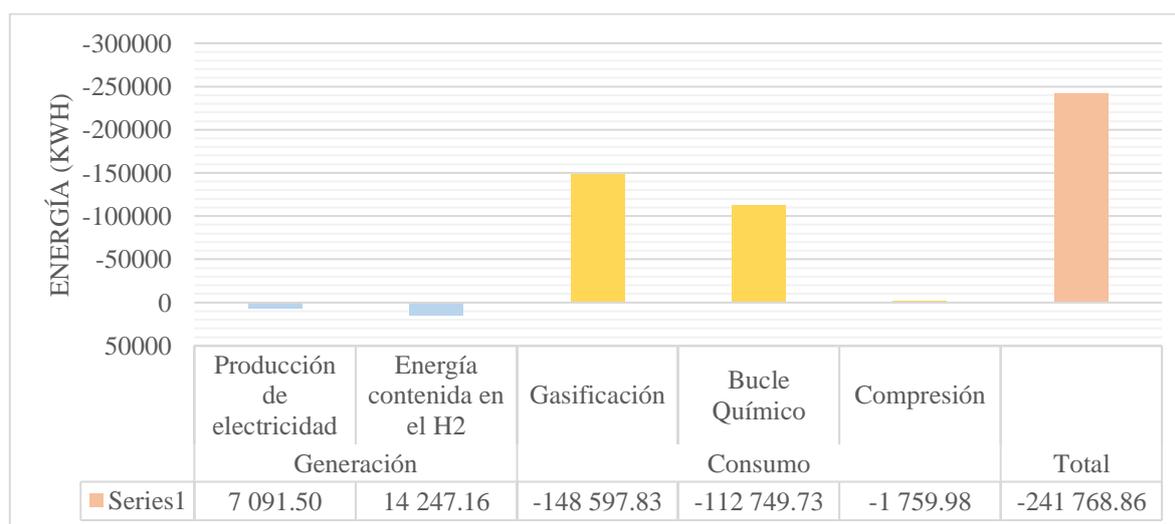


Figura 3. Balance energético.

Algunas estrategias para hacer más favorable este balance son:

- Instalar una red de intercambiadores de calor, para aprovechar el calor producido por otros reactores en la gasificación, que es el proceso que más consume energía;

- Usar catalizadores para mejorar la eficiencia de la quema del combustible usado para calentar los reactores.
- Destinar una parte del H₂ que se usa para generación de electricidad para calentar los reactores;
- Usar el biochar producido en sitio junto con tecnologías de captura de carbono para mitigar su impacto; y
- Reducir las dimensiones de la columna de gasificación para hacer varias columnas que puedan ser parcial o totalmente calentadas con electricidad.

Todas estas opciones se deberían evaluar tanto técnica como económicamente.

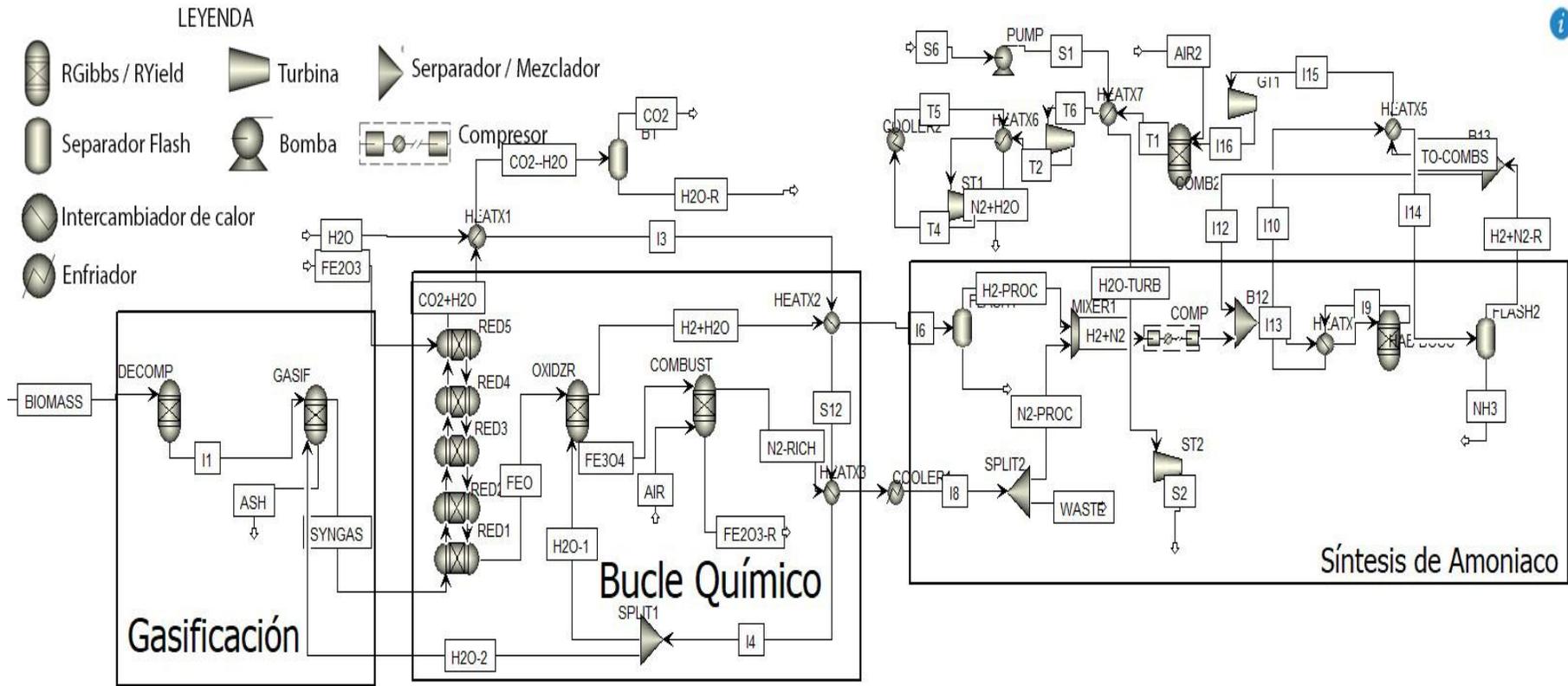


Figura 4. Modelo de Aspen Plus completo.

3.2. Económico

Para el modelo completo, los resultados de los costos de los equipos agrupados por proceso de observan en la Figura 5; siendo la inversión total (considerando el factor de Lang) de \$70'975,852.27. En esta se evidencia el gasto más representativo es para el proceso de bucle químico. Los costos fijos operativos totales, calculados con el costo anual totales y los costos de equipos sin el factor de Lang la fueron de \$2'066,365.33. Los costos variables se presentan en la Tabla 5. Para el modelo solo con licuefacción, se redujo los operadores de la planta de 15 a 8, y se tomaron en cuenta solo los procesos de gasificación, bucle químico y la compresión previa al Haber-Bosch; el proceso que requiere de más inversión sigue siendo el del bucle químico. Los costos variables para este escenario se presentan en la Tabla 6. El TIR fue de 9% y la inversión inicial se recupera en 9 años para todos los casos. Los resultados de los PVM, calculados para los escenarios con 90% y 98% de recirculación se presentan en la Figura 6.

Tabla 4. Costos fijos: sueldos de los empleados.

Empleado	Cantidad	Costo neto anual (por empleado)	Costo total anual
Gerente de planta	1	\$48 000.00	\$48 000.00
Supervisor de mantenimiento	3	\$36 000.00	\$108 000.00
Técnico de mantenimiento	3	\$33 600.00	\$100 800.00
Operadores	15	\$18 000.00	\$270 000.00
Supervisores de área	5	\$36 000.00	\$180 000.00
Carga laboral			\$636 120.00

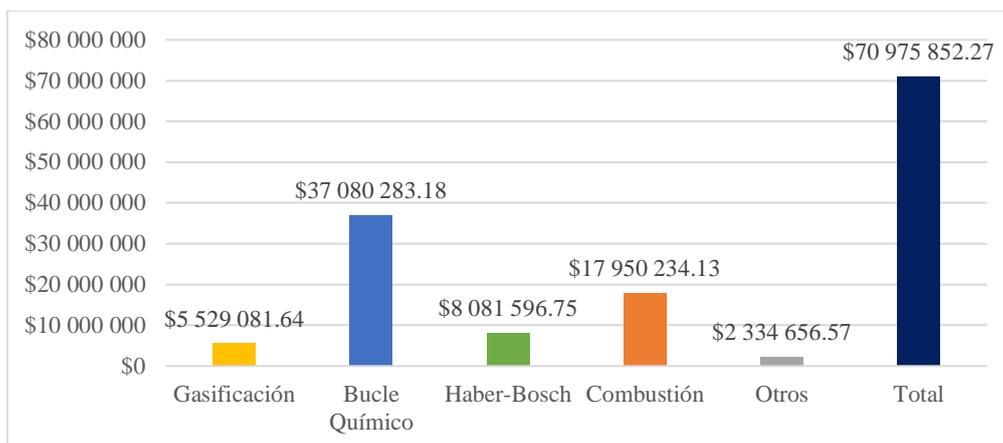


Figura 5. Costos fijos de producción de H₂ en forma de amoníaco por proceso.

Tabla 5. Costos variables de producción de H₂ en forma de amoníaco.

Costos variables NH ₃ (90% recirculación Fe ₂ O ₃ /Al ₂ O ₃)					
Materias primas	\$/kg producto	Flujo que ingresa	Unidad	\$/t	\$/MJ o \$/kWh
Fe ₂ O ₃	33.25	140000	kg/hr	490	-
Al ₂ O ₃	13.00	60000	kg/hr	447	-
Agua	0.02	50000	kg/hr	0.00063	-
Gas Natural	0.64	332335	MJ/hr	-	0.004
Electricidad	0.08	42239.448	kWh/hr	-	0.092
Mantenimiento	1.79				
Total	48.77				
Co-productos	\$/kg producto	Flujo que ingresa	Unidad	\$/t	\$/kWh
Electricidad	0.3323	170195.96	kWh/hr	-	0.0967
Fe ₂ O ₃	29.92	126000	kg/hr	490	-
Al ₂ O ₃	11.7	54000	kg/hr	447	-
Agua	0.015	49058	kg/hr	0.00063	-
Biochar	0.2261	3.11	ton/hr	150	-
Total	42.19				

Tabla 6. Costos variables de producción y licuefacción de H₂.

Costos variables H ₂ (liq) (90% recirculación Fe ₂ O ₃ /Al ₂ O ₃)					
Materias primas	\$/kg producto	Flujo que ingresa	Unidad	\$/t	\$/MJ o \$/kWh
Fe ₂ O ₃	62.47	140000	kg/hr	490	-
Al ₂ O ₃	24.43	60000	kg/hr	447	-
Agua	0.03	50000	kg/hr	0.00063	-
Gas Natural	1.21	332335	MJ/hr	-	0.013105704
Electricidad	0.34	187898.316	KWh/hr	-	0.092
Mantenimiento	2.32	-			
Total	90.80	-			
Co-productos					
Co-productos	\$/kg producto	Flujo que ingresa	Unidad	\$/t	\$/kWh
Fe ₂ O ₃	56.23	126000	kg/hr	490	-
Al ₂ O ₃	21.98	54000	kg/hr	447	-
Agua	0.03	49058	kg/hr	0.00063	-
Biochar	0.42	3.11	ton/hr	150	-
Total	78.66	-			

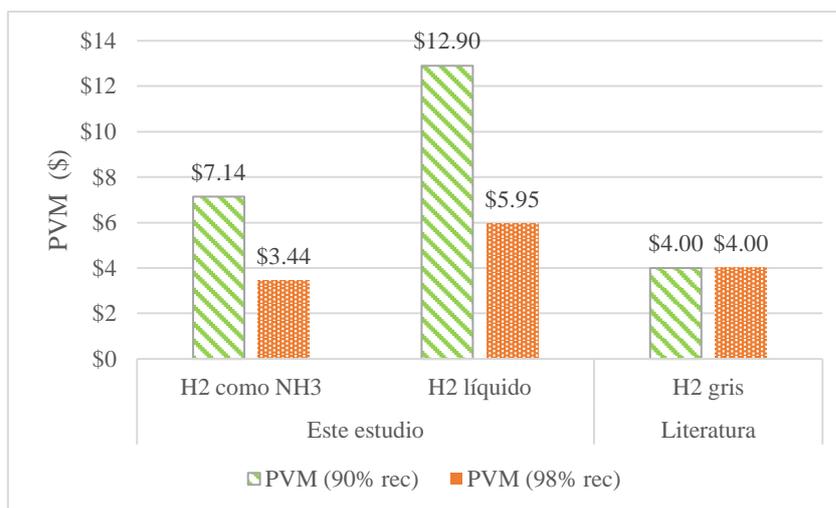


Figura 6. Precios de Venta Mínimo - Escenarios de 90% vs 98% de recirculación.

De acuerdo con estos resultados de la Figura 6, el PVM para comercializar el H₂ en forma de NH₃ es mucho más accesible que el del H₂ líquido, en los dos escenarios planteados. En comparación con el precio de mercado del H₂ gris, que se vende en un rango de 2 – 6 \$/kg H₂ (SGH2 Energy Global Corp., n.d.), el precio del H₂ en forma de NH₃ que se ha producido

con este proceso es menor y por lo tanto competitivo, solo en el caso de tener una recirculación del 98%.

En nuestro cálculo obtuvimos que nuestro LCoH es de 0.97 \$/kg H₂ (en forma de NH₃). Comparando estos valores con el LCoH del H₂ gris y el azul, que son 2 – 7 \$/kg H₂ y 1.70 – 5.70 \$/kg H₂ (IEA, 2023), respectivamente, se observa que el H₂ producido con residuos es más económico. Asimismo, si se compara con un LCoH calculado para producción de H₂ con gasificación de biomasa el cual está en un rango de 2.30 – 5.20 \$/kg H₂ (Shahabuddin et al., 2020) el proceso para producción y almacenamiento resulta más económico.

Estos resultados indican que el H₂ producido por en el proceso de bucle químico, almacenado en forma de amoníaco, tiene un precio competitivo con el mercado actual solo en el caso en el que se recircule un 98% de los transportadores de oxígeno y si se comercializa el H₂ en forma de NH₃.

3.3. Ambiental

3.3.1. *Análisis de ciclo de vida de todo el proceso.*

Después de realizar el proceso en OpenLCA®, se obtuvieron los siguientes resultados para el proceso que incluye todas las etapas de producción de H₂ hasta su almacenamiento en forma de amoníaco. En la Tabla 7, el resultado es de 27.46 kg CO₂-eq por kg de H₂ producido en forma de amoníaco.

Tabla 7. ACV del proceso completo de obtención de H₂ en forma de amoníaco.

Proceso	kg CO ₂ -eq
Burn Natural Gas	22.31
Ship Calcined Alumina 7000km ex Tasmania, Queensland & West Australia	3.79
Ship Crushed Hematite 7000km from Western Australia	1.36
Total	27.46

3.3.2. Análisis de ciclo de vida hasta la producción de H₂.

De igual forma, se realizó el análisis de ciclo de vida del proceso hasta la producción de H₂, para tener una comparación de las diferentes etapas. En este caso, el resultado presentado en la Tabla 8, es de 30.103 kg CO₂-eq por kg de H₂ producido.

Tabla 8. ACV del proceso de producción hasta la obtención de H₂

Proceso	kg CO ₂ -eq
Burn Natural Gas	24.46
Ship Calcined Alumina 7000km ex Tasmania, Queensland & West Australia	4.15
Ship Crushed Hematite 7000km from Western Australia	1.49
Total	30.10

Para resumir los valores dados en las Tablas 7 y 8, se realizó un diagrama con los principales contribuyentes a la huella de carbono en cada caso. Donde en la Figura 7, se puede observar que el principal contribuyente es el gas natural, el cual se requiere para dar energía en las etapas de gasificación y bucle químico. Adicionalmente, se presenta en la Figura 8, el diagrama de Sankey que el programa de OpenLCA® provee tras el análisis.

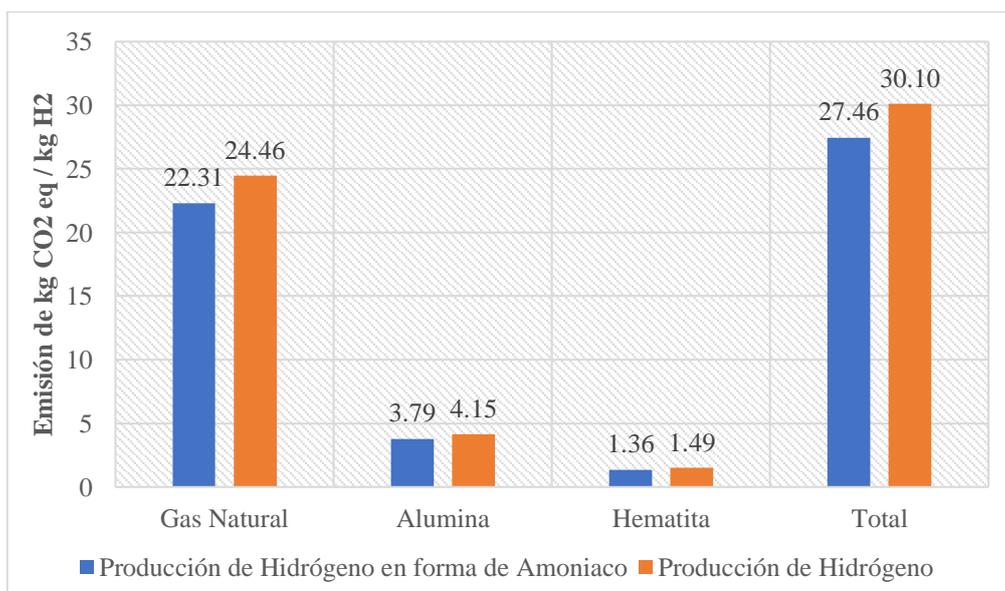


Figura 7. Principales contribuyentes a la huella de carbono de la producción de H₂.

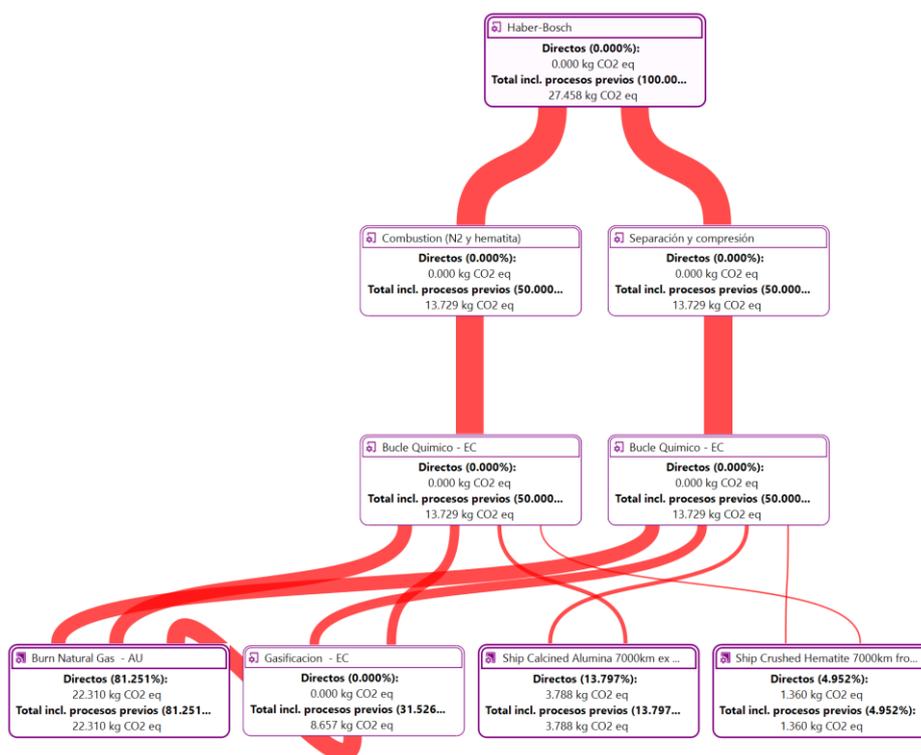


Figura 8. Diagrama de Sankey del proceso de producción de H₂ en forma de NH₃

El análisis en OpenLCA® considera los procesos mencionados anteriormente y el ACV del proceso revela que la contribución varía en cada etapa como se puede apreciar en la Figura 8. Con respecto a la producción de H₂ en forma de amoníaco, el total de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) asociadas con el proceso se sitúa en 27.46 kg CO₂-eq por kg de H₂ en forma de NH₃. Mientras que, el total de emisiones de GEI asociados al proceso de producción de H₂ en gas es de 30.10 kg CO₂-eq por kg de H₂. Esto demuestra una variación de 2.65 kg CO₂-eq entre ambos casos. Es decir que, de acuerdo con el análisis realizado se puede evidenciar que el almacenamiento en forma de NH₃ representa una disminución en la huella de carbono del proceso debido a que se produce más NH₃ que H₂.

Por otro lado, la emisión de GEI de la producción de H₂ a partir de la gasificación de carbón sin captura de carbono está entre 22 y 26 kg CO₂-eq/kg H₂ donde más del 80% de las emisiones proviene de las emisiones directas en la planta de producción (IEA, 2023). Este valor refleja ser menor al obtenido en los análisis realizados a pesar de que nuestro proceso utiliza

como materia prima los residuos agrícolas de la caña de azúcar. Esto se debe a que el software utilizado considera procesos adicionales, como por ejemplo el transporte de la materia prima.

Usando el valor del poder calorífico del H_2 , se obtiene que las emisiones del proceso de producción de H_2 en forma de NH_3 es de 228.80 kg CO_2 -eq/GJ. Mientras que, las emisiones de CO_2 -eq de la producción de H_2 por gasificación carbón se encuentra entre 60 y 200 kg CO_2 -eq/GJ (Longden et al., 2022). Sin embargo, hay que considerar que cuando hablamos de combustibles sintéticos, asumimos que el CO_2 emitido durante su combustión es fijado por el cultivo empleado como materia prima durante su crecimiento, es decir que estos resultados no son precisos ya que no se toma en cuenta esta compensación.

En el proceso presentado, resulta crucial abordar estrategias para mitigar las emisiones de gases de efecto invernadero, para esto es importante considerar mejoras como la integración de fuentes de energía renovable en el proceso, con esto se lograría reducir las emisiones del principal contribuyente en la huella de carbono de este caso que es el gas natural. Otra alternativa es mejorar el aislamiento de los reactores para perder menos calor en la producción, y aprovechar mejor el calor generado por los demás procesos. Además, la búsqueda de fuentes locales de materias primas y la adopción de métodos de transporte más eficientes, contribuyendo así a la reducción del impacto ambiental (Hydrogen Council, 2021).

4. CONCLUSIONES

4.1. Técnico

En el análisis técnico realizado con Aspen Plus[®], la simulación muestra una conversión eficaz de la biomasa en gas de síntesis y la posterior producción de H₂ a partir del bagazo, con un rendimiento significativo de H₂ de 1,057.36 kg de H₂/h. La capacidad del sistema para recuperar portadores de oxígeno completos (Fe₂O₃ y Al₂O₃) y el uso eficaz del proceso de bucle químico para la producción de H₂ ponen de visible su solidez técnica. Además, la producción de NH₃ como medio de almacenamiento de H₂ a una tasa de 2,063.40 kg/h. La viabilidad del proceso debe seguirse analizando, implementando estrategias para reducir el consumo energético, ya que, por el momento, el balance energético es fuertemente negativo.

4.2. Económico

El análisis, realizado utilizando Aspen Plus[®] v.14 para la modelización del proceso e incorporando factores como los costes de los equipos, los salarios y los costes variables como las materias primas y los servicios públicos, revela un panorama económico viable para el almacenamiento del H₂ como NH₃. Cuando la recuperación de la mezcla Fe₂O₃/Al₂O₃ es de 98%, el precio de venta mínimo (PVM) de \$3.44 es competitivo con el mercado. Además, el LCoH del H₂ en forma de NH₃ para este proceso (0.97 \$/kg de H₂), está por debajo de los LCoH mundiales del H₂ gris y azul, lo que lo convierte en una opción atractiva en el mercado.

4.3. Ambiental

El ACV se llevó a cabo utilizando el software OpenLCA[®] y el método del IPCC 2013 GWP 100 años. Este análisis reveló que las emisiones totales de gases de efecto invernadero son de 27.46 kg de CO₂-eq/kg de H₂ producido en forma de amoníaco. A pesar de utilizar residuos agrícolas renovables, se requiere de un análisis más detallado tomando en cuenta la fijación del CO₂ de la materia prima y reducir el consumo energético y de gas natural para hacer sostenible a este proceso.

5. REFERENCIAS

- Abdullah, A., Ahmed, A., Akhter, P., Razzaq, A., Hussain, M., Hossain, N., Abu Bakar, M. S., Khurram, S., Majeed, K., & Park, Y. K. (2021). Potential for sustainable utilisation of agricultural residues for bioenergy production in Pakistan: An overview. *Journal of Cleaner Production*, 287(xxxx), 125047. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.125047>
- Ajanovic, A., Sayer, M., & Haas, R. (2022). The economics and the environmental benignity of different colors of hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(57), 24136–24154. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.02.094>
- Anukam, A., Mamphweli, S., Reddy, P., Meyer, E., & Okoh, O. (2016). Pre-processing of sugarcane bagasse for gasification in a downdraft biomass gasifier system: A comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 66, 775–801. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.08.046>
- Bhadha, J. H., Xu, N., Khatiwada, R., Swanson, S., & LaBorde, C. (2020). Bagasse: A Potential Organic Soil Amendment Used in Sugarcane Production. *Edis*, 2020(5), 5. <https://doi.org/10.32473/edis-ss690-2020>
- Calderón, M., Andrade, F., Lizarzaburu, L., & Masache, M. (2017). Valoración económica de los cobeneficios del aprovechamiento energético de los residuos agrícolas en el Ecuador. In *Estudios del cambio climático en América Latina* (1st ed., Vol. 52). Naciones Unidas. https://repositorio.cepal.org/bitstream/handle/11362/41830/S1700556_es.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Cheema, I. I., & Krewer, U. (2018). Operating envelope of Haber-Bosch process design for power-to-ammonia. *RSC Advances*, 8(61), 34926–34936. <https://doi.org/10.1039/c8ra06821f>
- Cremonese, L., Mbungu, G. K., & Quitzow, R. (2023). The sustainability of green hydrogen:

- An uncertain proposition. *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(51), 19422–19436. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.01.350>
- Deka, T. J., Osman, A. I., Baruah, D. C., & Rooney, D. W. (2023). Assessment of bioenergy and syngas generation in India based on estimation of agricultural residues. *Energy Reports*, 9, 3771–3786. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2023.02.054>
- Detournay, M., Hemati, M., & Andreux, R. (2011). Biomass steam gasification in fluidized bed of inert or catalytic particles: Comparison between experimental results and thermodynamic equilibrium predictions. *Powder Technology*, 208(2), 558–567. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.powtec.2010.08.059>
- Duque-Acevedo, M., Belmonte-Ureña, L. J., Cortés-García, F. J., & Camacho-Ferre, F. (2020). Agricultural waste: Review of the evolution, approaches and perspectives on alternative uses. *Global Ecology and Conservation*, 22. <https://doi.org/10.1016/j.gecco.2020.e00902>
- Eden, M. R. (2013). *Lecture No. 3 – Modeling Gasification Systems in Aspen Plus*. https://www.researchgate.net/profile/Junior_Lorenzo_Llanes/post/Aspen_Plus_Simulaiton_of_Biomass_Yield_Value/attachment/5f1da2e0dac5800001f48770/AS%3A917572585263115%401595777760812/download/4470-Lecture-3-2013.ppt
- Energy Institute. (2023). *Statistical Review of World Energy*.
- Gavilanes-Terán, I., Jara-Samaniego, J., Idrovo-Novillo, J., Bustamante, M. A., Moral, R., & Paredes, C. (2016). Windrow composting as horticultural waste management strategy – A case study in Ecuador. *Waste Management*, 48, 127–134. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.wasman.2015.11.026>
- Gidebo, F. A., Yasuhara, H., & Kinoshita, N. (2023). Stabilization of expansive soil with agricultural waste additives: a review. *International Journal of Geo-Engineering*, 14(1).

<https://doi.org/10.1186/s40703-023-00194-x>

Greve, P., Kahil, T., Mochizuki, J., Schinko, T., Satoh, Y., Burek, P., Fischer, G., Tramberend, S., Burtscher, R., Langan, S., & Wada, Y. (2018). Global assessment of water challenges under uncertainty in water scarcity projections. *Nature Sustainability*, *1*(9), 486–494. <https://doi.org/10.1038/s41893-018-0134-9>

Guthrie, K. (1969). Capital cost estimating. *Chemical Engineering*, 114.

Herzog-Hawelka, J., & Gupta, J. (2023). The role of (multi)national oil and gas companies in leaving fossil fuels underground: A systematic literature review. *Energy Research and Social Science*, *103*(June), 103194. <https://doi.org/10.1016/j.erss.2023.103194>

Hydrogen Council. (2021). *Hydrogen decarbonization pathways*. January, 14. https://hydrogencouncil.com/wp-content/uploads/2021/01/Hydrogen-Council-Report_Decarbonization-Pathways_Executive-Summary.pdf

IEA. (2021). Global Hydrogen Review 2021. *Global Hydrogen Review 2021*.

IEA. (2022). Global Hydrogen Review 2022. *Global Hydrogen Review 2022*. <https://doi.org/10.1787/a15b8442-en>

IEA. (2023). Global Hydrogen Review 2023. In *Global Hydrogen Review 2023*. <https://doi.org/10.1787/a15b8442-en>

Ihobe S.A. (2009). Análisis de ciclo de vida y huella de carbono. *Gobierno Vasco*, 1–53. http://www.comunidadism.es/wp-content/uploads/downloads/2012/10/PUB-2009-033-f-C-001_analisis-ACV-y-huella-de-carbonoV2CAST.pdf

INEC. (2023). Encuesta de superficie y producción agropecuaria continua. *Instituto Nacional de Estadísticas y Censos*, 23.

- Ishaq, H., Dincer, I., & Crawford, C. (2022). A review on hydrogen production and utilization: Challenges and opportunities. *International Journal of Hydrogen Energy*, 47(62), 26238–26264. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.11.149>
- Klumpar, I. V., & Slavsky, S. T. (1985). Updated Cost Factors: Process Equipment. In *Chemical Engineering (New York)* (Vol. 92, Issue 15, pp. 73–75).
- Kuzma, S., Saccoccia, L., & Chertock, M. (2023). 25 countries, housing one-quarter of the population, face extremely high water stress. <https://www.wri.org/insights/highest-water-stressed-countries>
- Li, F., Zeng, L., & Fan, L. S. (2010). Biomass direct chemical looping process: Process simulation. *Fuel*, 89(12), 3773–3784. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.07.018>
- Longden, T., Beck, F. J., Jotzo, F., Andrews, R., & Prasad, M. (2022). ‘Clean’ hydrogen? – Comparing the emissions and costs of fossil fuel versus renewable electricity based hydrogen. *Applied Energy*, 306(PB), 118145. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.118145>
- Miyahira, K., & Aziz, M. (2022). Hydrogen and ammonia production from low-grade agricultural waste adopting chemical looping process. *Journal of Cleaner Production*, 372(August), 133827. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.133827>
- Monazam, E. R., Breault, R. W., & Siriwardane, R. (2014). Kinetics of magnetite (Fe₃O₄) oxidation to hematite (Fe₂O₃) in air for chemical looping combustion. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53(34), 13320–13328. <https://doi.org/10.1021/ie501536s>
- Moore, J., Zhou, J., & Garand, E. (2021). D37. 5 haber-bosch process. In *Chemistry 109 Fall 2021*. <https://wisc.pb.unizin.org/chem109fall2021ver02/chapter/haber-bosch-process/>

- Nayak-Luke, R. M., Forbes, C., Cesaro, Z., Bañares-Alcántara, R., & Rouwenhorst, K. H. R. (2021). Techno-economic aspects of production, storage and distribution of ammonia. In *Techno-Economic Challenges of Green Ammonia as an Energy Vector* (pp. 191–207). Elsevier. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128205600000084>
- Novillo, S. A., Estrella, M. E., & Cabadiana, H. U. (2022). *Residuos agroindustriales : su impacto , manejo y aprovechamiento*. 5–10.
- Olabi, A. G., bahri, A. saleh, Abdelghafar, A. A., Baroutaji, A., Sayed, E. T., Alami, A. H., Rezk, H., & Abdelkareem, M. A. (2021). Large-vs scale hydrogen production and storage technologies: Current status and future directions. *International Journal of Hydrogen Energy*, *46*(45), 23498–23528. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.10.110>
- Oluseun Adejumo, I., & Adebukola Adebisi, O. (2021). Agricultural Solid Wastes: Causes, Effects, and Effective Management. *Strategies of Sustainable Solid Waste Management*. <https://doi.org/10.5772/intechopen.93601>
- Osman, A. I., Mehta, N., Elgarahy, A. M., Hefny, M., Al-Hinai, A., Al-Muhtaseb, A. H., & Rooney, D. W. (2022). Hydrogen production, storage, utilisation and environmental impacts: a review. In *Environmental Chemistry Letters* (Vol. 20, Issue 1, pp. 153–188). Springer Science and Business Media Deutschland GmbH. <https://doi.org/10.1007/s10311-021-01322-8>
- Pareek, A., Dom, R., Gupta, J., Chandran, J., Adepu, V., & Borse, P. H. (2020). Insights into renewable hydrogen energy: Recent advances and prospects. *Materials Science for Energy Technologies*, *3*, 319–327. <https://doi.org/10.1016/j.mset.2019.12.002>
- SGH2 Energy Global Corp. (n.d.). *Economics: Cost Comparison*. SG H2 Energy. <https://www.sgh2energy.com/economics>

- Shahabuddin, M., Krishna, B. B., Bhaskar, T., & Perkins, G. (2020). Advances in the thermo-chemical production of hydrogen from biomass and residual wastes: Summary of recent techno-economic analyses. *Bioresource Technology*, 299, 122557. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2019.122557>
- Tripathi, N., Hills, C. D., Singh, R. S., & Atkinson, C. J. (2019). Biomass waste utilisation in low-carbon products: harnessing a major potential resource. *Npj Climate and Atmospheric Science*, 2(1), 35. <https://doi.org/10.1038/s41612-019-0093-5>
- Yolcan, O. O. (2023). World energy outlook and state of renewable energy: 10-Year evaluation. *Innovation and Green Development*, 2(4), 100070. <https://doi.org/10.1016/j.igd.2023.100070>
- Zhang, B., Zhang, S., Yao, R., Wu, Y., & Qiu, J. (2021). Journal of Electronic Science and Technology Progress and prospects of hydrogen production: Opportunities and challenges. *Journal of Electronic Science and Technology*, 19(2), 100080. <https://doi.org/10.1016/j.jnlest.2021.100080>