

UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL  
VALPARAISO – CHILE



**Modelación y simulación del proceso de producción  
de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético  
y estudio comparativo entre tecnologías.**

AUTOR: NICOLÁS EDUARDO LIZANA FOZ

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE

INGENIERO CIVIL AMBIENTAL

PROFESOR GUÍA: SANTIAGO GARCÍA GEN

PROFESOR CO-REFERENTE: DANIEL RAMÍREZ LIVINGSTONE

DICIEMBRE – 2025



## CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

### 1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción):  Memoria o trabajo de título  Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Nombre del candidato(a): Nicolás Eduardo Lizana Foz

Carrera / Grado: Ingeniería Civil Ambiental

Campus: Casa Central Valparaíso Departamento: Ingeniería Química y Ambiental

### 2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, SANTIAGO GARCÍA GEN, en mi calidad de profesor guía del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

### 3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

6 meses  12 meses  2 años  3 años  5 años  10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

---

---

---

### 4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 06-03-2026

Firma: 

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 04-03-2026

Firma: 

*Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.*

## **AGRADECIMIENTOS**

En primer lugar, agradezco profundamente a mis padres que lo son todo, Lia y Eduardo, por su amor, cuidado y apoyo incondicional durante toda mi vida, y en especial durante estos 6 años de vida universitaria. Ellos, quienes me han visto crecer, me han amado tal como soy y me han enseñado todo lo que sé, se merecen el más grande de los reconocimientos. Compartiré por siempre este logro con ellos. Agradezco a mi tata Guillermo, quien tuvo el honor de aprovechar durante varios años en la casa, y a mis abuelas y abuelo que me han cuidado desde el cielo desde que fui chiquitito. Agradecer también a mi tía Ibérica y mi tío Lincoyán, por ser mi segunda familia y por estar siempre para mí y mis padres.

A mi mejor amiga, a mi familia, Guadalupe, le quiero agradecer por quererme y cuidarme, por siempre estar, porque siempre pude ser yo mismo con ella, y por despertar en mi la vocación medio ambiental que me llevó a estudiar esta carrera que amo. También debo agradecer a mis bellos amigos del San Agustín: Alonso, Luis y Scarlet, gracias por su amistad, por compartir un vino o un jugo con una o más copuchas, los quiero mucho.

A mi grupo de la USM, mis querubines o girasolcitos: Victoria, Pablo, Leonardo, Martín y Dennis, con quienes he compartido tanta risa, cariños, llantos, estudios, presentaciones, certámenes, trabajos grupales, ventanas, almuerzos, salidas a cafés, carretes, juntas en el departamento de los chicos, etc. Son tantos momentos que vivimos durante 6 años (4 años presencialmente) y me encanta haber vivido la etapa universitaria con ellos. A mis ambientales y químicos 2020: Bernardita, Sofía, Tamara, Belén, Trinidad, Francisco, Pia, Antonieta, Daniela, Loren y muchos más, por compartir esta experiencia juntos y apañarnos tanto en nuestros altibajos.

Quiero agradecer al equipo de Promoción IQA, por ser tan buenos monitores de un jefe tan excéntrico, por motivarse en cada actividad y junta y formar una familia muy bonita, que espero siga unida. A mis compañeros del CEEAMB2023 y CEEAMB2025, por su apaño en realizar tantas actividades entretenidas y por su voluntad de hacer de la comunidad ambiental un espacio más unido y comprometido. A mis amistades de Admisión USM, gracias por compartir en un variopinto de actividades y por acompañarme en mis primeros pasos de promoción universitaria.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Quiero agradecer a los profesores del DIQA que confiaron en mi para ser su ayudante: Adolfo Cabrera, Santiago García, Luis Borzone, Yolanda Medina, Camila Mery y Daniel Ramírez. Gracias a ellos tuve el honor de hacer de todo: cátedra, corrección, laboratorio y administrativo, excepto de investigación que quedará pendiente. También agradecer a los funcionarios DIQA que me ayudaron con todo lo que necesitaba, tanto académicamente como en mi trabajo: Marcela Peña y Susana Rojas, además de Giovanna Guerrero, la señora Mirta y don Jorge, quienes con una sonrisa y unas palabras de aliento me saludaban cada día.

Por último, pero no menos importante, quiero agradecer nuevamente a mi profesor guía, Santiago García, por la confianza que depositó en mi para realizar este trabajo de tesis de pregrado, por las reuniones constantes, por sus retroalimentaciones que fueron muy útiles para seguir en el camino indicado para completar un trabajo del que hoy me siento satisfecho y orgulloso. Y también agradezco al profesor Daniel Ramírez por su asesoría, disponibilidad y confianza en mi trabajo.

## RESUMEN

En el escenario de la transición energética, el hidrógeno se ha posicionado como un vector energético estratégico, debido a su alta densidad energética y a la ausencia de emisiones de GEI en su combustión. Bajo esta premisa, este trabajo aborda la modelación y simulación, en Aspen Plus, de un proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa, a través de un acople de digestión anaerobia y reformado de biogás con vapor.

Se evaluaron tres configuraciones. La Simulación 1 corresponde al caso base, sin integración energética ni optimización, el cual presentó una producción de hidrógeno de 2352 [mol/h], una eficiencia energética de 75,1% y un consumo energético total de 465,9 [kW], del cual un 64,16% tiene potencial de ahorro. A partir de esto, surge la Simulación 2 para integrar energéticamente el sistema, reduciendo el consumo total de energía en un 50% y disminuyendo los costos de energía de 47120 a 27820 [\$USD/año].

A partir de los resultados favorables de los análisis de sensibilidad para la producción de hidrógeno según la temperatura, presión y razón S-C del reformado, se decidió realizar una Simulación 3, donde las nuevas variables  $T = 1040$  [K],  $P = 1$  [atm] y  $S/C = 2,6$  permitieron incrementar el caudal de producto en un 28,5%, llegando a un punto óptimo de 2991 [mol/h]. En consecuencia, aumentó significativamente la eficiencia energética a un 97,8% a costa de un incremento del consumo y costo energético de 21,3% y 34,7% respectivamente.

Por último, se comparó el sistema propuesto con otras tecnologías de producción de hidrógeno, tales como reformado de metano con vapor tradicional, pirólisis, gasificación y licuefacción hidrotermal, bajo criterios de operación, rendimiento, requerimiento de materias primas y emisiones de gases de efecto invernadero, determinando que el proceso simulado presentó la más eficiencia energética y un consumo de agua moderado. No obstante, también se observó que el proceso, falto de catalizadores, posee un rendimiento de producción de hidrógeno inferior al de pirólisis y gasificación, además de emisiones de  $\text{CO}_2$  similares a un reformado de metano con vapor sin captura, uso y almacenamiento de carbono (CCUS).

Se concluye que el sistema propuesto es un mecanismo de producción de hidrógeno energéticamente competitiva, pero que su proyección industrial requiere de CCUS, modelos cinéticos para el reformado de biogás y un análisis técnico-económico.

# Índice General

AGRADECIMIENTOS.....	I
RESUMEN.....	III
CAPÍTULO I.....	1
1. Introducción.....	1
1.1. Objetivo General.....	2
1.2. Objetivos Específicos .....	2
CAPÍTULO II.....	3
2. Antecedentes.....	3
2.1. Marco teórico.....	3
2.2. Estado del arte .....	9
CAPÍTULO III .....	16
3. Metodología.....	16
3.1. Descripción de la preparación de la simulación en Aspen Plus .....	16
3.2. Corrección del Modelo de Digestión Anaerobia en Aspen Plus.....	24
3.3. Integración energética del sistema.....	26
3.4. Análisis de Sensibilidad.....	28
3.5. Búsqueda del punto óptimo de producción de hidrógeno .....	28
3.6. Cálculo de la eficiencia energética de los sistemas simulados .....	29
3.7. Estudio comparativo entre tecnologías.....	30
CAPÍTULO IV .....	33
4. Análisis de Resultados .....	33
4.1. Integración energética.....	33
4.2. Impacto económico de la integración energética .....	37
4.3. Análisis de sensibilidad .....	38

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.	
4.4. Búsqueda del punto óptimo de producción de hidrógeno. ....	43
4.5. Cálculo de la eficiencia energética de los sistemas simulados. ....	45
4.6. Comparación de los sistemas simulados .....	46
4.7. Estudio comparativo entre tecnologías.....	48
CAPÍTULO V.....	52
5. Conclusiones.....	52
5.1. Conclusiones.....	52
5.2. Recomendaciones .....	53
REFERENCIAS .....	54
APÉNDICE .....	59

## Índice de Figuras

Figura 2.2.1. Diagrama de bloques del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014). .....	12
Figura 2.2.2. Acoplamiento del modelo de simulación de procesos de la digestión anaerobia a los diferentes procesos de conversión de metano a hidrógeno. Obtenido de (Gollakota et al., 2018). .....	13
Figura 3.1.1. Set de reacciones (a) del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014). .....	16
Figura 3.1.2. Set de reacciones (b) del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014). .....	17
Figura 3.1.3. Flowsheet del proceso simulado en Aspen Plus (Simulación 1). .....	19
Figura 4.1.1. Análisis energético de la Simulación 1. ....	34
Figura 4.1.2. Flowsheet del proceso con integración energética simulado en Aspen Plus (Simulación 2). .....	35
Figura 4.1.3. Análisis energético de la Simulación 2. ....	36
Figura 4.3.1. Resultados del análisis de sensibilidad del volumen del digestor. ....	38
Figura 4.3.2. Resultados del análisis de sensibilidad de la presión de reformado. ....	41
Figura 4.3.3. Resultados del análisis de sensibilidad de la temperatura de reformado. ....	42
Figura 4.3.4. Resultados del análisis de sensibilidad de la razón S-C en el reformado. ....	43
Figura 4.4.1. Flowsheet del proceso de máxima producción simulado en Aspen Plus (Simulación 3). .....	44

## Índice de Tablas

Tabla 2.2.1. Criterios de comparación de tecnologías de producción de hidrógeno considerados por (Obiora et al., 2024). .....	15
Tabla 3.1.1. Composición másica de la alimentación del sistema de DA + reformado con vapor. ....	18
Tabla 3.1.2. Especificaciones del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa sin integración energética (Simulación 1). ....	23
Tabla 3.2.1. Compuestos con sus fórmulas químicas corregidas. ....	24
Tabla 3.2.2. Propiedades de los pseudocomponentes. ....	24
Tabla 3.2.3. Estequiometrías corregidas del bloque “HYDROL” del modelo de DA. ....	25
Tabla 3.2.4. Estequiometrías corregidas del bloque “AC-MET” del modelo de DA. ....	26
Tabla 4.1.1. Características de las principales corrientes de la Simulación 1. ....	33
Tabla 4.1.2. Resultados del análisis energético de la Simulación 1. ....	34
Tabla 4.1.3. Características de las principales corrientes de la Simulación 2. ....	35
Tabla 4.1.4. Resultados del análisis energético de la Simulación 2. ....	36
Tabla 4.2.1. Utilidades entregadas por Aspen Plus al Caso 1. ....	37
Tabla 4.2.2. Resultados del análisis económico de energía de las Simulaciones 1 y 2. ....	37
Tabla 4.4.1. Parámetros optimizados para la Simulación 3. ....	44
Tabla 4.4.2. Características de las principales corrientes de la Simulación 3. ....	45
Tabla 4.5.1. Resultados de la eficiencia energética de las simulaciones realizadas. ....	46
Tabla 4.6.1. Comparación de resultados de los sistemas simulados. ....	47
Tabla 4.7.1. Comparación de tecnologías en base a criterios de operación y rendimiento. ....	49
Tabla 4.7.2. Comparación de tecnologías en base a criterios de materias primas. ....	50
Tabla 4.7.3. Comparación de tecnologías en base a criterios ambientales. ....	51

# CAPÍTULO I

---

## 1. Introducción

La necesidad de reducir la dependencia a los combustibles fósiles junto con las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) ha posicionado a la transición energética como uno de los principales desafíos a nivel global en el marco del cambio climático. Debido a esto, el cambio a fuentes de energía renovables no convencionales (ERNC) ha sido considerado como el plan de acción de las naciones del planeta para conseguir una matriz energética más sustentable.

A partir de la naturaleza intermitente de la mayoría de las fuentes de ERNC, como solar y eólica que dependen de las condiciones climáticas de su lugar de emplazamiento, se ha vuelto necesario el almacenamiento de energía para permitir el constante suministro eléctrico de futuras matrices energéticas limpias. Tecnologías como el almacenamiento electroquímico en baterías de litio y el almacenamiento mecánico en aire comprimido han alcanzado el uso industrial en diversos rubros.

En este escenario, el hidrógeno se ha posicionado como un vector energético estratégico, debido a su alta densidad energética y a la ausencia de emisiones de GEI en su combustión. De hecho, la demanda global de hidrógeno aumentó en casi 100 millones de toneladas en el año 2024, lo que significa un aumento de 2% del año 2023 que va en línea con el crecimiento de la demanda energética, además de proyectarse un incremento en la producción de hidrógeno de bajas emisiones para el año 2030 (IEA, 2025). No obstante, una producción “verde” de hidrógeno no ha podido concretarse, ya que los métodos convencionales, más convenientes económicamente y basados en combustibles fósiles, resultan intensivos en emisiones contaminantes y poco sostenibles a largo plazo.

Respecto a las materias primas de la producción de hidrógeno, la biomasa surge como una alternativa renovable tanto para la valorización de residuos orgánicos como para la generación de un portador energético limpio. Tecnologías como la digestión anaerobia con reformado de metano con vapor, la pirólisis, la gasificación y la licuefacción hidrotermal permiten la conversión de biomasa en hidrógeno. Por lo tanto, el estudio de estos procesos requiere de herramientas como la modelación y simulación para poder analizar y comparar el desempeño

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

de los distintos métodos, sin recurrir, en una primera instancia, a estudios experimentales que pueden resultar complejos y costosos.

Es por esto que el objetivo de este trabajo de título es la modelación y simulación del proceso de digestión anaerobia con reformado de metano con vapor para la producción de hidrógeno a partir de biomasa a través del software “Aspen Plus”, junto con un estudio comparativo entre tecnologías dando énfasis en el análisis energético, aportando en el estado del arte del proceso a tal punto que permita comprender sus ventajas, limitaciones y oportunidades en pos del avance a soluciones energéticas más limpias y alineadas a los desafíos climáticos globales.

### 1.1. Objetivo General

El objetivo principal de esta investigación es la modelización y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa, utilizando el software de simulación de procesos “Aspen Plus”. El uso de distintos modelos obtenidos de la literatura será útil para simular rendimientos operacionales y determinar factores de operación como la eficiencia energética, además de realizar un estudio comparativo de cada sistema propuesto en este estudio.

### 1.2. Objetivos Específicos

Los objetivos específicos por plantear son los siguientes:

- Construir y simular en Aspen Plus el proceso de producción de hidrógeno a partir de la digestión anaerobia y del reformado de metano con vapor.
- Integrar energéticamente el proceso simulado.
- Realizar análisis de sensibilidad de temperaturas y presiones de operación, además de los flujos de entrada para encontrar los puntos óptimos de producción de hidrógeno del sistema.
- Determinar el rendimiento energético del sistema simulado en su punto óptimo y realizar una comparación con otras tecnologías de producción de hidrógeno.

## CAPÍTULO II

---

### 2. Antecedentes

#### 2.1. Marco teórico

##### *2.1.1. Hidrógeno*

El hidrógeno es el elemento químico más ligero y la molécula más abundante en el universo. Es un vector energético, no una fuente de energía (Torres et al., 2020), por lo que puede ser almacenado y liberar energía utilizable. Típicamente, no existe en la naturaleza de forma autónoma, por ello debe ser producido a partir de compuestos, como el agua, los combustibles fósiles y la biomasa.

Actualmente, el hidrógeno es usado principalmente en refinerías e industrias químicas y es producido utilizando combustibles fósiles como carbón y gas natural. Por esto, se le atribuyen emisiones de CO<sub>2</sub> anuales significativas, acumulando 920 millones de toneladas de dióxido de carbono al año para producir 97 millones de toneladas de hidrógeno (IEA, 2025)

No obstante, no todo el hidrógeno es creado de la misma forma. Existe una amplia gama de procesos de producción de hidrógeno, incluyendo (Gençer, 2025):

- Procesos termoquímicos como el reformado de gas natural o carbón, o la gasificación de biomasa.
- Procesos electrolíticos que separan el agua en hidrógeno y oxígeno utilizando electricidad (electrólisis del agua).
- Procesos fotolíticos que dividen el agua en hidrógeno y oxígeno utilizando luz solar.
- Procesos biológicos utilizando algas o bacterias.

Atendiendo a los diferentes métodos de producción de hidrógeno y su impacto ambiental asociado, se categorizan diferentes colores para el hidrógeno:

- Hidrógeno gris: actualmente, es la forma más común de producción de hidrógeno. El hidrógeno gris se crea a partir de una fuente metano (CH<sub>4</sub>), sea gas natural o metano puro, a través de un proceso llamado “reformado de metano con vapor” que separa hidrógeno del metano del carbono. En el reformado, el gas natural se hace reaccionar

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

con vapor de agua a alta presión, creando el gas de síntesis, compuesto de hidrógeno, monóxido de carbono (CO) y dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>). El monóxido de carbono puede volver a reaccionar con agua para producir aún más hidrógeno y dióxido de carbono. La electrólisis que descompone el metano es endotérmica, por lo que es necesario introducir calor al sistema para que se produzca.

- Hidrógeno azul: este método también utiliza el reformado de vapor del metano, pero añade un paso de captura y almacenamiento de carbono (CAC), el cual captura el dióxido de carbono y lo comprime para almacenarlo bajo tierra en formaciones geológicas profundas, evitando que llegue a la atmósfera y que contribuya al calentamiento global.
- Hidrógeno turquesa: se eleva la temperatura del metano hasta solidificar la fracción de carbono en un proceso llamado pirólisis, controlando las emisiones de CO<sub>2</sub>.
- Hidrógeno verde: como se dijo anteriormente, el hidrógeno también se obtiene a partir de la electrólisis del agua. Si la electricidad necesaria para el proceso se obtiene de una fuente de energía renovable, como eólica, solar o hidráulica, el hidrógeno se le conoce como verde.

### *2.1.2. Biomasa*

La biomasa es materia energética renovable que proviene de plantas y animales. Puede quemarse directamente para generar calor o convertirse en combustibles líquidos y gaseosos mediante diversos procesos (EIA, 2024).

Las fuentes de biomasa incluyen:

- Residuos del procesamiento de madera: leña, pellets de madera, aserrín, desechos de fábricas de madera y muebles, y licor negro de fábricas de pulpa y papel.
- Cultivos agrícolas y materiales de desecho: maíz, soja, caña de azúcar, plantas leñosas, algas y residuos de procesamiento de cultivos y alimentos.
- Materiales biogénicos en residuos sólidos urbanos: productos de papel, algodón y lana, además de desechos de alimentos, jardín y madera.
- Estiércol animal y aguas residuales urbanas (ARU).

Por otro lado, la composición química de la biomasa es muy variable. Según la fuente, las características en base seca y base seca sin cenizas varían altamente debido a las diferencias de

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

humedad, producción de cenizas y diferentes tipos de materia inorgánica en la biomasa (Vassilev et al., 2010). Sus componentes principales son la celulosa, la hemicelulosa y la lignina.

### *2.1.3. Digestión anaerobia*

La digestión anaerobia (DA) es un proceso de descomposición de la materia orgánica, en este caso de la biomasa, mediante enzimas, bacterias y otros microorganismos en la ausencia de oxígeno, obteniendo como producto un biogás rico en dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) y metano (CH<sub>4</sub>), así como un digestato húmedo con alto contenido de carbono.

Este proceso biológico se gesta dentro de un equipo denominado digestor, y transcurre en cuatro fases principales (CNE, 2007):

- Hidrólisis: un gran número de microorganismos anaeróbicos excretan enzimas hidrolíticas que fraccionan los enlaces de los polisacáridos que forman la biomasa, en unidades simples de azúcares, grasas y aminoácidos.
- Acidogénesis: los compuestos son asimilados por algunos microorganismos y/o fermentados, produciendo una gran cantidad de ácidos orgánicos. Se producen también gases como dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), hidrógeno (H<sub>2</sub>) y pequeñas cantidades de amoníaco (NH<sub>3</sub>), ácido sulfúrico (H<sub>2</sub>S) y alcoholes, en especial glicerol.
- Acetogénesis: bacterias acetogénicas de lento crecimiento metabolizan los alcoholes, el ácido láctico y los ácidos grasos volátiles, produciendo ácido acético e hidrógeno.
- Metanogénesis: el ácido acético, hidrógeno y CO<sub>2</sub> producido, es transformado por acción de las bacterias metanogénicas, formando CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> y agua.

### *2.1.4. Biogás*

El biogás es una mezcla formada principalmente por metano y dióxido de carbono, junto con agua y otras trazas de gases. Resulta del proceso de degradación natural de la biomasa realizado por una gran variedad de microorganismos en la ausencia de oxígeno, en el proceso de digestión anaerobia descrito anteriormente. El prefijo 'bio' se refiere tanto al proceso de producción biológico como a la renovabilidad de la materia prima (biomasa), en oposición al gas natural cuyo origen es fósil (EBA, 2019).

El biogás puede tener distintos usos, tales como:

- Electricidad y calor: uso más común, mediante la cogeneración.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

- Biometano: proceso de mejoramiento de biogás para purificar el biogás crudo y convertirlo en un gas natural renovable (GNR), eliminando el dióxido de carbono, agua y otros contaminantes.

Adicionalmente, la digestión anaerobia de biomasa tiene un subproducto llamado digestato, el cual consiste en el material residual que puede ser utilizado como un fertilizante orgánico (EBA, 2019).

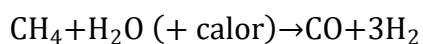
### 2.1.5. Reformado de biogás

El reformado de gas natural o biogás es un proceso de producción de hidrógeno avanzado y maduro, que procesa el metano del gas natural con procesos térmicos, tales como el reformado con vapor y la oxidación parcial (Department of Energy, 2017).

#### 2.1.5.1. Reformado de biogás con vapor

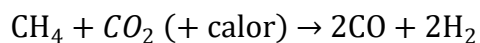
Proceso en el cual se utiliza vapor a alta temperatura (700 – 1000 [°C]) para producir hidrógeno desde una fuente de metano. La reacción del metano con el vapor generalmente se produce bajo presiones de 3-25 [bar] en presencia de un catalizador para producir hidrógeno, monóxido de carbono y una pequeña cantidad de dióxido de carbono (Department of Energy, 2017), como se observa en la Ecuación 2.1.1.

*Ecuación 2.1.1. Reacción del metano en el reformado con vapor.*



Además, la presencia de CO<sub>2</sub> en el biogás juega una importante labor como reacción secundaria (González y otros, 2023), demostrada en la Ecuación 2.1.2:

*Ecuación 2.1.2. Reacción del dióxido de carbono en el reformado con vapor.*

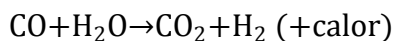


Ambas reacciones son fuertemente endotérmicas, con entalpías de reacción de 206 y 247 [kJ/mol], respectivamente.

Posteriormente, el monóxido de carbono producido sufre la “reacción de desplazamiento del gas de agua” (abreviada como WGSR, del inglés *water-gas shift reaction*), en la cual se produce dióxido de carbono y más hidrógeno con la ayuda de un catalizador.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

*Ecuación 2.1.3. Reacción de desplazamiento del gas de agua.*



La reacción global del proceso de reformado de biogás con vapor + WGS es endotérmica, por lo que el calor debe ser entregado a la reacción para que esta se produzca.

#### *2.1.6. Permeado de hidrógeno en membranas de paladio*

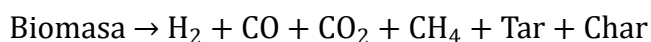
En general, los metales nobles poseen propiedades de sorción de varias moléculas e iones, además de su alta actividad catalítica los hace versátiles en un amplio rango de procesos químicos. Por sobre todo, las membranas basadas en paladio son las más estables en su operación (Alentiev y otros, 2025), por lo que han ganado atención a pesar de no ser el único metal con una alta selectividad ante el hidrógeno y de no ser el más rápido transportador de hidrógeno.

El proceso consiste en la disolución-difusión del hidrógeno, el cual atraviesa la membrana metálica y se permea en forma pura, dejando atrás otras moléculas más grandes.

#### *2.1.7. Pirólisis*

La pirólisis es un método de descomposición térmica de biomasa y materia orgánica que ocurre en la ausencia de oxígeno (FASTECH, 2024). El empleo de altas temperaturas rompe los enlaces de los compuestos orgánicos y se obtienen distintos productos, tales como: líquidos (bio-combustibles o alquitrán), gaseosos (gas de síntesis o gases no condensables) y sólidos (residuo rico en carbono o *char*).

*Ecuación 2.1.4. Reacción de la pirólisis de biomasa.*



Existen 2 tipos principales de pirólisis para la producción de hidrógeno:

- Pirólisis rápida: convierte biomasa en bio-combustibles líquidos a temperaturas entre 650 y 1000 [°C], produciendo un 60-75% de líquido, hasta un 20% de *char* y 10-20% de gases no condensables.
- Pirólisis *flash* o pirólisis muy rápida: descomposición térmica ultrarrápida, que utiliza temperaturas entre 400 y 600 [°C] y tiempos de residencia muy cortos (segundos o milisegundos) logrando altas tasas de calentamiento (sobre 1000 °C/s). Como resultado,

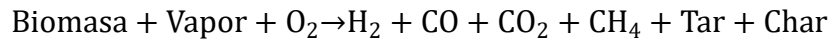
Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

se maximiza la formación de bio-combustibles líquidos y productos gaseosos versus la producción de alquitrán y sólidos.

#### 2.1.8. Gasificación

La gasificación es un proceso que no involucra la quema de biomasa. Este método incluye el calentamiento de biomasa junto con vapor de agua y oxígeno a temperaturas por sobre los 700 [°C] en un sistema controlado, resultando en la producción CO, H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>. Por consecuencia, ocurre un proceso de WGSR que genera hidrógeno y dióxido de carbono adicionales (Obiora et al., 2024).

*Ecuación 2.1.5. Reacción de gasificación de la biomasa.*



#### 2.1.9. Licuefacción Hidrotermal

La licuefacción hidrotermal (HTL por sus siglas en inglés) es un proceso de conversión de biomasa a bio-combustibles líquidos con el uso de agua en condiciones subcríticas o supercríticas: a temperaturas de 280 a 370 [°C] y presiones de 100 a 250 [bar]. Otros subproductos son gases ligeros, fases acuosas y sólidos como *char* o coque (Gollakota et al., 2018).

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

## 2.2. Estado del arte

Para desarrollar este trabajo de título, es necesario mapear el conocimiento existente y actualizado respecto a las tecnologías de producción de hidrógeno a partir de biomasa lignocelulósica, a la existencia de modelos cinéticos, estequiométricos o de equilibrio que puedan aplicarse para simular estos procesos en Aspen Plus, a los indicadores y metodologías de análisis energético y al marco comparativo entre tecnologías. Así, es posible definir el campo de la investigación, cuyos alcances sean debidamente establecidos mediante el presente inciso.

### *2.2.1. Panorama de rutas tecnológicas*

Según el reporte global de hidrógeno 2025 (IEA, 2025), dos-tercios de la demanda total de hidrógeno del año 2024, fue producido por el reformado de gas natural, sea por reformado de metano con vapor o reformado autotérmico. A pesar de que la producción de hidrógeno de bajas emisiones (proyectos que utilizan electrólisis o combustibles fósiles con captura, uso y almacenamiento de carbono (CCUS)) aumentó un 10% durante el 2024 llegando a 1 [Mt], sin embargo, no ha llegado al 1% de la producción global de H<sub>2</sub>. Inclusive, pequeñas productoras de hidrógeno a partir de biomasa, y de metano a partir de pirólisis han contribuido, pero su aporte sigue siendo marginal.

Para el 2030, se proyecta la producción de 37 [Mt] de hidrógeno de bajas emisiones (IEA, 2025). No obstante, la producción de rutas tecnológicas a partir de biomasa se proyecta a cifras menores a 1 [Mt].

#### *2.2.1.1. Digestión anaerobia + reformado de biogás*

El reformado de metano con vapor (SMR, por sus siglas en inglés) o el reformado de biogás con vapor (SBR) ha sido ampliamente estudiado debido a las aplicaciones industriales del gas de síntesis y a una etapa primaria para la producción de pilas de combustible de hidrógeno. Según el análisis bibliométrico de (Szablowski et al., 2025), los estudios sobre SMR se han ido incrementando año a año, no obstante, la gran mayoría estudia el proceso mediante experimentos a escala laboratorio con el uso de varios catalizadores, por lo que las instalaciones industriales no son consideradas. (Szablowski et al., 2025) también indican el grado de conversión a metano de diferentes catalizadores dentro de un rango de temperaturas.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Los parámetros importantes que se deben estudiar para un SMR exitoso son la razón vapor-carbón, S:C, la temperatura y la presión, las cuales afectan la conversión y el equilibrio de las reacciones del proceso. La aplicación de reformado no catalítico opera a temperaturas muy superiores y está menos desarrollado experimentalmente, mientras que el catalítico es la base industrial. De los catalizadores, el níquel es uno de los más populares por su alta actividad y bajo costo. Sin embargo, la coquización y sinterización generan serios problemas de desactivación del catalizador. Por lo tanto, actualmente los catalizadores modificados a base de níquel son los más frecuentes para el SMR catalítico.

Respecto a la etapa de purificación del hidrógeno, (Szablowski et al., 2025) consideran tanto la adsorción por cambio de presión (PSA) como el uso de aminas como monoetanolamina (MEA) o metildietanolamina (MDEA) y el uso de reactores de reformado con membrana. Estos últimos son recomendados porque pueden purificar el hidrógeno en el mismo momento en que es producido en el reformado.

#### 2.2.1.2. Pirólisis

(Alvarado-Flores et al., 2024) indican que los principales desafíos del uso de pirólisis de biomasa lignocelulósica son la necesidad de poder utilizar el bio-combustible producido en vez de petróleo, de poder explicar con más detalle el efecto sinérgico de la co-pirólisis de la biomasa y resolver el problema de los depósitos de carbono en los catalizadores que se desactivan debido al exceso de coque.

Además, el proceso de pirólisis enfrenta desafíos económicos, con costos de producción de hidrógeno desde \$1,21 hasta \$2,42 [USD/kilogramo]. (Anand y otros, Green hydrogen for a sustainable future: A review of production methods, innovations, and applications, 2025) afirman que incrementar la eficiencia del proceso, escalar las operaciones a nivel industrial y reducir el consumo de energía son fundamentales para mejorar su viabilidad económica.

#### 2.2.1.3. Otros procesos termoquímicos

Según el análisis de problemas operacionales de la gasificación supercrítica (SCWG) y licuefacción hidrotermal de la biomasa de (Ghavami et al., 2021), la conversión de la biomasa de 2° generación requiere de procesos tecnológicamente avanzados, ya que los resultados actuales reflejan mayores costos de producción que los procesos convencionales basados en combustibles fósiles. Más aun cuando los problemas operacionales como problemas mecánicos

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

y térmicos en los reactores por las altas presiones y temperaturas, corrosión en las líneas y la desactivación de catalizadores son el principal obstáculo del desarrollo de las tecnologías de SCWG y HTL.

Además, concluyen que los procesos hidrotermales se presentan como rutas prometedoras por el alto contenido de humedad de la biomasa: altas eficiencias energéticas, rendimiento y calidad del producto en comparación a procesos térmicos.

### *2.2.2. Modelación y simulación con Aspen Plus*

#### *2.2.2.1. Digestión anaerobia + reformado de biogás*

La modelación de la digestión anaerobia es compleja debido a las distintas reacciones que operan de forma sincrónica e impredecible dentro del digestor. No obstante, (Rajendran y otros, 2014) diseñaron un modelo de simulación de procesos en Aspen Plus que predice la producción de biogás a partir de cualquier tipo de sustrato en cualquier condición de proceso dada. La inclusión de 46 reacciones, basada en las 4 etapas de la digestión anaerobia y dividida en un set (a) y un set (b), explica cómo las moléculas complejas como carbohidratos, proteínas y grasas se degradan a monómeros y finalmente en metano y dióxido de carbono.

Este modelo funciona con la especificación de variables del sustrato como sólidos totales, sólidos volátiles, composición másica, temperatura, pH y tiempo de retención hidráulica. (Rajendran y otros, 2014) validaron el modelo con distintos casos de laboratorio e industriales, demostrando la robustez del modelo con cambios de composición en el sustrato. Este modelo ha sido utilizado por múltiples trabajos posteriores hasta la actualidad.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

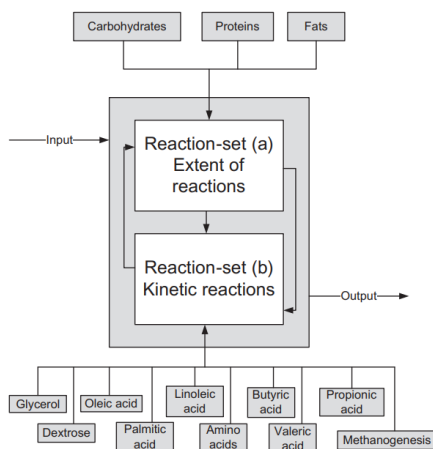


Figura 2.2.1. Diagrama de bloques del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014).

Respecto al reformado de biogás, (Hajizadeh et al., 2022) estudian la producción de hidrógeno a partir de biomasa en Aspen Plus, a través de un ambiente psicrófilo ( $< 20$  [°C]) junto con el reformado seco de metano (DMR), proceso que utiliza  $\text{CO}_2$  en vez de vapor de agua del reformado con vapor. Concluyen que, en las condiciones óptimas de operación, 48,07 [kg/h] de biogás pueden producir 8,11 [kg/h] de hidrógeno con una eficiencia energética de 72,85%.

Ahora bien, (Kourdoorli y otros, 2023) simularon y validaron los distintos procesos de reformado de biogás, tales como el reformado con vapor, reformado en seco, oxidación parcial y combinaciones entre tecnologías, con el fin de compararlos bajo ciertos criterios. Los resultados concluyeron que el reformado de vapor es el mejor en términos de producción de hidrógeno (5,71 [l/d] de  $\text{H}_2$  por 0,33 [l/d] de substrato), eficiencia energética (82,72%) y producción de  $\text{CO}_2$  (12,83 [kg  $\text{CO}_2$ ] por 1 [kg  $\text{H}_2$ ] producido). Para el paso previo de digestión anaerobia, se utilizó el modelo elaborado anteriormente por (Rajendran y otros, 2014).

No obstante, este estudio comparativo se realizó a partir de datos experimentales, considerando un flujo de entrada de 0,33 [l/d], por lo que es necesario escalar la simulación en Aspen Plus a un caso industrial.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

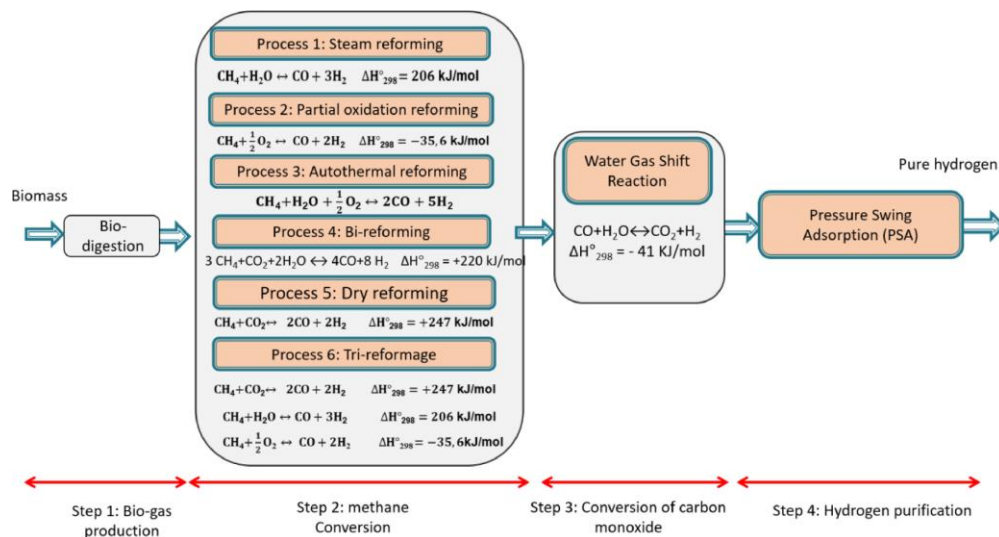


Figura 2.2.2. Acoplamiento del modelo de simulación de procesos de la digestión anaeróbica a los diferentes procesos de conversión de metano a hidrógeno. Obtenido de (Gollakota et al., 2018).

### 2.2.2.2. Pirólisis

Para el proceso de pirólisis de biomasa lignocelulósica, (Peters y otros, 2017) proponen por primera vez un modelo cinético de reacción para la pirólisis de biomasa, el cual consiste en 3 fases, la fase 1 es la descomposición de la biomasa en sus 3 principales componentes: celulosa, hemicelulosa y lignina. La fase 2 representa la descomposición y volatilización de fragmentos de biomasa, produciendo una alta fracción líquida. Por último, la fase 3 involucra a las reacciones de craqueo y carbonización, produciendo la fracción gaseosa y sólida, respectivamente.

Este modelo es capaz de calcular producciones de los productos de la pirólisis en un rango de temperaturas entre 420 y 650 [°C] y en tiempos de residencia de hasta 2500 [s], permitiendo una precisa simulación de pirólisis lenta y rápida de cualquier substrato de biomasa lignocelulósica de composición conocida.

### 2.2.2.3. Otros procesos termoquímicos

La gasificación impulsada por vapor de agua y oxígeno ha sido estudiada en múltiples modelos, pero su principal problema ha sido la falta de predicción de la concentración del alquitrán de biomasa formado en el proceso. (Cao et al., 2025) buscaron resolver este problema comparando dos técnicas de modelación de gasificación: modelo de gasificación convencional (CGM) y el modelo de gasificación real (RGM). En el primero, el alquitrán se considera un compuesto

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

inerte, mientras que en el segundo se incluyen las reacciones de craqueo y reformado de alquitrán en el proceso. Luego de una comparación con los datos experimentales, (Cao et al., 2025) concluyen que el modelo RGM es el más preciso, además, los autores realizaron análisis de sensibilidad de la razón vapor-biomasa (SBR, por sus siglas en inglés) y el porcentaje de oxígeno en el aire fueron útiles para estudiar el rendimiento del proceso.

### 2.2.3. Indicadores y metodologías para análisis energético

Para el análisis del rendimiento energético de cada proceso por estudiar, múltiples estudios expresan este concepto como la eficiencia energética “ $\eta$ ”, la cual compara la producción de valor calorífico del producto (hidrógeno) con la energía que entra al sistema (Simpson & Lutz, 2007). Esta expresión es obtenida del balance de energía del sistema, basado en la primera ley de la termodinámica. A modo de ejemplo, se presenta el análisis energético de un sistema de reformado de metano con vapor (SMR):

*Ecuación 2.2.1. Eficiencia energética del reformado de metano con vapor.*

$$\eta_{Thermal} = \frac{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}}{\dot{m}_{CH_4} \cdot LHV_{CH_4} + \dot{W}_{Compressor} + \dot{W}_{Pump}}$$

Donde:

- LHV: poder calorífico inferior de la sustancia [kJ/kg].
- M: flujo másico [kg/s].
- W: trabajo mecánico [kW] tanto del compresor como de la bomba.

Por su parte, (Kourdoorli y otros, 2023) calcularon la eficiencia de producción de hidrógeno según el valor calorífico de la biomasa, del biogás y del metano puro para comparar energéticamente las distintas alternativas dentro del proceso de reformado de metano, especificando que el reformado de metano con vapor es la más eficiente energéticamente, y a su vez una de las tecnologías menos contaminantes entre sus pares.

### 2.2.4. Marco comparativo entre tecnologías

La comparación entre rutas tecnológicas de la producción de hidrógeno a partir de biomasa ha sido estudiada por (Obiora et al., 2024) y se fundamentan según los siguientes criterios:

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 2.2.1. Criterios de comparación de tecnologías de producción de hidrógeno considerados por (Obiora et al., 2024).

Criterio	Unidad o descripción
Costo	\$/kg
Etapa de Innovación	Investigación, Desarrollo, Comercialización.
Consumo de energía	kWh/kg

Además, (Obiora et al., 2024) realizan la comparación entre el hidrógeno producido por biomasa según la tecnología (gasificación, pirólisis y procesos biológicos) y según las fuentes de energías renovables como energía solar, eólica y geotérmica, describiendo sus ventajas y desafíos.

## CAPÍTULO III

### 3. Metodología

#### 3.1. Descripción de la preparación de la simulación en Aspen Plus

##### 3.1.1. Establecimiento del modelo de cinética de reacción

El empleo del modelo de (Rajendran y otros, 2014) es importante para representar la digestión anaerobia de biomasa mediante reacciones con cinéticas de primer orden. Tal como se comentó anteriormente, este modelo considera 46 reacciones divididas en dos sets de reacciones: el primero posee las reacciones de hidrólisis y el segundo contiene las etapas de acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis, además de reacciones de degradación de aminoácidos.

No.	Compound	Hydrolysis reaction	Extent of reaction
1	Starch	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.6 ± 0.2
2	Cellulose	$(C_6H_{12}O_6)_n + H_2O \rightarrow n C_6H_{12}O_6$	0.4 ± 0.1
3	Hemicelulose	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow 2.5 C_2H_4O_2$	0.5 ± 0.2
4	Hemicelulose	$C_5H_8O_4 + H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_5$	0.6 ± 0.0
5	Xylose	$C_5H_{10}O_5 \rightarrow C_5H_4O_2 + 3 H_2O$	0.6 ± 0.0
6	Cellulose	$C_6H_{12}O_6 + H_2O \rightarrow 2 C_2H_6O + 2 CO_2$	0.4 ± 0.1
7	Ethanol	$2 C_2H_6O + CO_2 \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + CH_4$	0.6 ± 0.1
8	Soluble protein	$C_{13}H_{25}O_7N_3S + 6 H_2O \rightarrow 6.5 CO_2 + 6.5 CH_4 + 3 H_3N + H_2S$	0.5 ± 0.2
9	Insoluble protein (LP)	$LP + 0.3337 H_2O \rightarrow 0.045 C_6H_{14}N_4O_2 + 0.048 C_4H_7NO_4 + 0.047 C_4H_9NO_3 + 0.172 C_3H_7NO_3 + 0.074 C_5H_9NO_4 + 0.111 C_5H_9NO_2 + 0.25 C_2H_5NO_2 + 0.047 C_3H_7NO_2 + 0.067 C_3H_6NO_2S + 0.074 C_5H_{11}NO_2 + 0.07 C_6H_{13}NO_2 + 0.046 C_6H_{13}NO_2 + 0.036 C_9H_{11}NO_2$	0.6 ± 0.1
10	Triolein	$C_{57}H_{104}O_6 + 3 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + 3 C_{18}H_{34}O_2$	0.5 ± 0.2
11	Tripalmitate	$C_{51}H_{98}O_6 + 8.436 H_2O \rightarrow 4 C_3H_8O_3 + 2.43 C_{16}H_{34}O$	0.5 ± 0.3
12	Palmito-olein	$C_{37}H_{70}O_5 + 4.1 H_2O \rightarrow 2.1 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{34}O_2$	0.6 ± 0.2
13	Palmito-linolein	$C_{37}H_{68}O_5 + 4.3 H_2O \rightarrow 2.2 C_3H_8O_3 + 0.9 C_{16}H_{34}O + 0.9 C_{18}H_{32}O_2$	0.6 ± 0.2

Figura 3.1.1. Set de reacciones (a) del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014).

A partir de esto, es importante la adición de todos los compuestos presentes en el modelo a la simulación en Aspen Plus, asimilando las siguientes suposiciones:

- El sistema opera en estado estacionario y Aspen Plus realiza los cálculos de los balances de materia y energía bajo esa configuración.
- No se presentan pérdidas de energía en forma de calor en los equipos del sistema.
- No se presentan caídas de presión en los equipos ni en las corrientes.
- *Soluble protein*: las proteínas solubles se especificarán como un pseudocomponente de Aspen Plus denominado “PROTEIN”.
- *Insoluble protein (LP)*: las proteínas insolubles se especificarán como un pseudocomponente de Aspen Plus denominado “INS--PROT”.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

- Cenizas e inertes: pseudocomponente de Aspen Plus denominado “INERT”.

Para añadir las propiedades físicas faltantes de los pseudocomponentes, se utilizó la información de la base de datos construida por (Wooley & Putsche, 1996).

No.	Compound	Chemical reactions	Kinetic constant
<i>Amino acid degradation reactions</i>			
1	Glycine	$C_2H_5NO_2 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
2	Threonine	$C_4H_9NO_3 + H_2 \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
3	Histidine	$C_6H_8N_2O_2 + 4 H_2O + 0.5 H_2 \rightarrow CH_3NO + C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + 2 H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
4	Arginine	$C_6H_{14}N_4O + 3 H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + 4 H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
5	Proline	$C_5H_9NO_2 + H_2O + H_2 \rightarrow 0.5 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.5 C_5H_{10}O_2 + H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
6	Methionine	$C_5H_{11}NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + CO_2 + H_3N + H_2 + CH_4S$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
7	Serine	$C_3H_7NO_3 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
8	Threonine	$C_4H_9NO_3 + H_2O \rightarrow C_3H_6O_2 + H_3N + H_2 + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
9	Aspartic acid	$C_4H_7NO_4 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + 2 CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
10	Glutamic acid	$C_5H_9NO_4 + H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + 0.5 C_4H_8O_2 + H_3N + CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
11	Glutamic acid	$C_5H_9NO_4 + 2 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
12	Histidine	$C_6H_8N_3O_2 + 5 H_2O \rightarrow CH_3NO + 2 C_2H_4O_2 + 2 H_3N + CO_2 + 0.5 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
13	Arginine	$C_6H_{14}N_4O_2 + 6 H_2O \rightarrow 2 C_2H_4O_2 + 4 H_3N + 2 CO_2 + 3 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
14	Lysine	$C_6H_{14}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + C_4H_8O_2 + 2 H_3N$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
15	Leucine	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
16	Isoleucine	$C_6H_{13}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_5H_{10}O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
17	Valine	$C_5H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_4H_8O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
18	Phenylalanine	$C_9H_{11}NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6 + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
19	Tyrosine	$C_9H_{11}NO_3 + 2 H_2O \rightarrow C_6H_6O + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
20	Tytophan	$C_{11}H_{12}N_2O_2 + 2 H_2O \rightarrow C_8H_7N + C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
21	Glycine	$C_2H_5NO_2 + 0.5 H_2O \rightarrow 0.75 C_2H_4O_2 + H_3N + 0.5 CO_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
22	Alanine	$C_3H_7NO_2 + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 2 H_2$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
23	Cysteine	$C_3H_6NO_2S + 2 H_2O \rightarrow C_2H_4O_2 + H_3N + CO_2 + 0.5 H_2 + H_2S$	$1.28 \cdot 10^{-02}$
<i>Acidogenic reactions</i>			
24	Dextrose	$C_6H_{12}O_6 + 0.1115 H_3N \rightarrow 0.1115 C_5H_7NO_2 + 0.744 C_2H_4O_2 + 0.5 C_3H_6O_2 + 0.4409 C_4H_8O_2 + 0.6909 CO_2 + 1.0254 H_2O$	$9.54 \cdot 10^{-03}$
25	Glycerol	$C_3H_8O_3 + 0.4071 H_3N + 0.0291 CO_2 + 0.0005 H_2 \rightarrow 0.04071 C_5H_7NO_2 + 0.94185 C_3H_6O_2 + 1.09308 H_2O$	$1.01 \cdot 10^{-02}$
<i>Acetogenic reactions</i>			
26	Oleic acid	$C_{18}H_{34}O_2 + 15.2396 H_2O + 0.2501 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.6998 C_2H_4O_2 + 14.4978 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
27	Propionic acid	$C_3H_6O_2 + 0.06198 H_3N + 0.314336 H_2O \rightarrow 0.06198 C_5H_7NO_2 + 0.9345 C_2H_4O_2 + 0.660412 CH_4 + 0.160688 CO_2 + 0.00055 H_2$	$1.95 \cdot 10^{-07}$
28	Isobutyric acid	$C_4H_8O_2 + 0.0653 H_3N + 0.8038 H_2O + 0.0006 H_2 + 0.5543 CO_2 \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 1.8909 C_2H_4O_2 + 0.446 CH_4$	$5.88 \cdot 10^{-06}$
29	Isovaleric acid	$C_5H_{10}O_2 + 0.0653 H_3N + 0.5543 CO_2 + 0.8044 H_2O \rightarrow 0.0653 C_5H_7NO_2 + 0.8912 C_2H_4O_2 + C_3H_6O_2 + 0.4454 CH_4 + 0.0006 H_2$	$3.01 \cdot 10^{-08}$
30	Linoleic acid	$C_{18}H_{32}O_2 + 15.356 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 9.02 C_2H_4O_2 + 10.0723 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
31	Palmitic acid	$C_{16}H_{34}O + 15.253 H_2O + 0.482 CO_2 + 0.1701 H_3N \rightarrow 0.1701 C_5H_7NO_2 + 8.4402 C_2H_4O_2 + 14.9748 H_2$	$3.64 \cdot 10^{-12}$
<i>Methanogenic reactions</i>			
32	Acetic acid	$C_2H_4O_2 + 0.022 H_3N \rightarrow 0.022 C_5H_7NO_2 + 0.945 CH_4 + 0.066 H_2O + 0.945 CO_2$	$2.39 \cdot 10^{-03}$
33	Hydrogen	$14.4976 H_2 + 3.8334 CO_2 + 0.0836 H_3N \rightarrow 0.0836 C_5H_7NO_2 + 3.4154 CH_4 + 7.4996 H_2O$	$2.39 \cdot 10^{-03}$

Figura 3.1.2. Set de reacciones (b) del modelo de simulación de procesos de digestión anaerobia. Obtenido de (Rajendran y otros, 2014).

### 3.1.2. Determinación del modelo termodinámico de Aspen Plus

El modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid) es el modelo más adecuado según la literatura, debido a que correlaciona y calcula las fracciones molares y coeficientes de actividades de los diferentes compuestos, tanto en la fase líquida como gaseosa, resultantes de la producción de biogás en la digestión anaerobia (Rajendran y otros, 2014).

### 3.1.3. Descripción del diagrama de flujos del proceso en Aspen Plus

La simulación construida se genera a partir de los trabajos de (Rajendran y otros, 2014) y (Kourdourli y otros, 2023), pero que sufre modificaciones tanto en el modelo de simulación de procesos (PSM) propuesto y en las etapas posteriores de producción de hidrógeno, con el fin de

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

realizar análisis de sensibilidad, un análisis de energético y también un ahorro de energía. Estas modificaciones se explicarán tanto en esta sección como en el análisis de resultados.

La alimentación del proceso va a corresponder a estiércol de vaca, estudiada tanto por (Rajendran y otros, 2014) y (Kourdourli y otros, 2023), cuya composición fue determinada según el trabajo de (Budiyono et al., 2011) y se presenta en la Tabla 3.1.1. Sin embargo, el flujo de esta alimentación se fija en 150 [m<sup>3</sup>/d], como referencia a la escala industrial según la literatura (Palatsi et al., 2011).

Tabla 3.1.1. Composición másica de la alimentación del sistema de DA + reformado con vapor.

Compuesto	Fórmula química	Fracción másica (kg/kg)
Agua	H <sub>2</sub> O	0,94
Glucosa	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	0,01
Amoniaco	NH <sub>3</sub>	0,001
Celulosa	(C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub> ) <sub>n</sub>	0,022
Hemicelulosa (ácido glutárico)	C <sub>5</sub> H <sub>8</sub> O <sub>4</sub>	0,01
Trioleína	C <sub>57</sub> H <sub>104</sub> O <sub>6</sub>	0,0004
Tripalmitina	C <sub>51</sub> H <sub>98</sub> O <sub>6</sub>	0,0004
SN-1—02	C <sub>37</sub> H <sub>68</sub> O <sub>5</sub>	0,0004
Proteína soluble	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> O <sub>7</sub> N <sub>3</sub> S	0,003
Queratina (proteína insoluble)	C <sub>4,39</sub> H <sub>8</sub> NO <sub>2</sub>	0,0018
Inertes	-	0,011

Por otro lado, el vapor que ingresa al sistema, necesario para el reformado de biogás, fue determinado a partir de uno de los parámetros más importantes de este proceso, la razón molar S/C (Boshagh y otros, 2025):

Ecuación 3.1.1. Razón S/C (vapor/carbono) para el reformado de metano con vapor.

$$\frac{S}{C} = \frac{\text{moles de vapor alimentados al reformado}}{n^{\circ} \text{ de átomos de C} \cdot \text{moles de hidrocarburos alimentados al reformado}}$$

Esta razón S/C fue fijada en un punto medio de las recomendaciones de la literatura (2,5) lo que equivale a que 1600 [mol/h] de biogás que ingresa al reformado son mezclados con 4000 [mol/h] de vapor de agua.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Por otro lado, el flujo molar de aire a ingresar a la cámara de combustión, útil para suministrar energía al sistema, es de 6600 [mol/h].

A continuación, se detallarán las características de cada bloque de la simulación del caso base realizado en Aspen Plus, que se observan en la Figura 3.1.3:

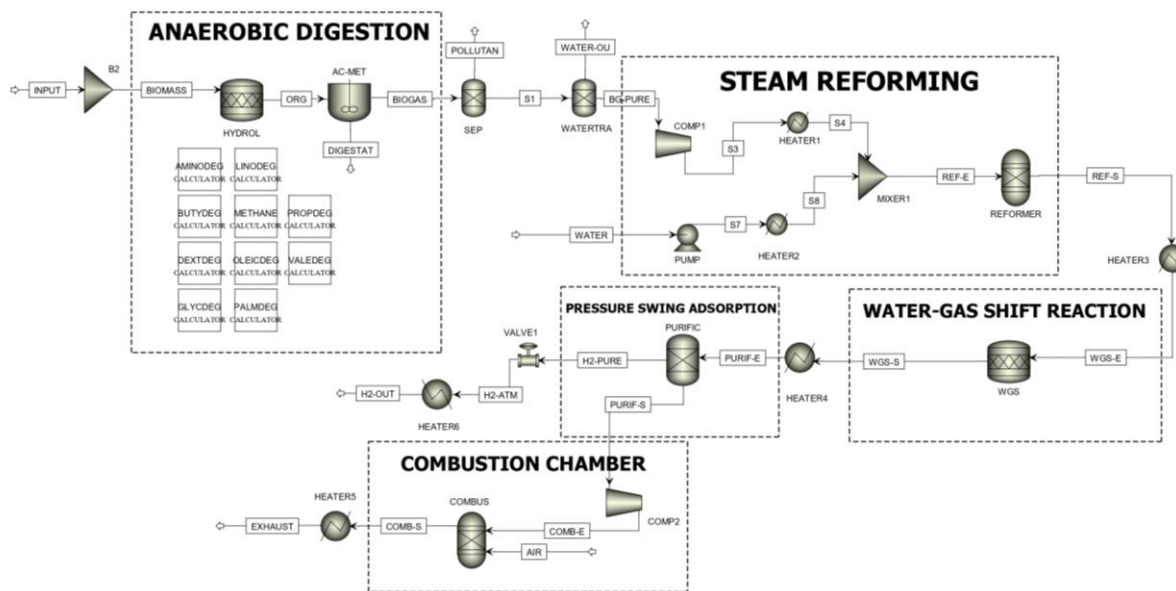


Figura 3.1.3. Flowsheet del proceso simulado en Aspen Plus (Simulación 1).

### 3.1.4. Etapa 1: Digestión anaerobia

#### 3.1.4.1. Mezclador de entrada “B2” (MIXER)

En la simulación estudiada su utilidad es poder mezclar agua u otras alimentaciones que se pueden agregar a la biomasa estudiada. No obstante, el sistema a estudiar sólo posee una alimentación, la cual ingresa a este mezclador de 1 [atm].

#### 3.1.4.2. Reactor de hidrólisis “HYDROL” (RSTOIC)

En este reactor se establecen las condiciones de la digestión anaerobia de la biomasa y se llevan a cabo las reacciones mostradas en la Figura 3.1.1. Este proceso opera bajo una temperatura de 328,15 [K] y una presión de 1 [atm].

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

#### 3.1.4.3. Reactor de acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis “AC-MET” (RCSTR)

Este bloque mantiene las mismas condiciones de operación (presión y temperatura) que el reactor de hidrólisis. Además, se establece un volumen de reactor de 3700 [m<sup>3</sup>]. Acá se opera el set de reacciones mostradas en la Figura 3.1.2.

#### 3.1.4.4. Purificador de biogás “SEP” (SEP)

La corriente de biogás sale de los reactores de digestión anaerobia a 328,15 [K] en fase vapor. Para simular la separación de los compuestos de interés (CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O) de los contaminantes (ácido acético, etanol, glicerol, azúcares, compuestos orgánicos volátiles, amoníaco, entre otros) se modela un bloque “Sep” que retire en un 100% estos componentes no deseados.

#### 3.1.4.5. Trampa de agua “WATERTRA” (SEP)

De forma adicional, para preparar el biogás para el reformado con vapor, se separa el agua del dióxido de carbono y del metano a través de un bloque “Sep” con un 100% de eficiencia de separación.

### 3.1.5. Etapa 2: Reformado de metano con vapor

#### 3.1.5.1. Compresor línea de biogás “COMP1” (COMP)

Compresor de tipo isoentrópico, que aumenta la presión del biogás hasta 10 [atm].

#### 3.1.5.2. Calentador de línea de biogás “HEATER1” (HEATER)

Este bloque “Heater” opera a 10 [atm] y calienta el biogás a la temperatura del proceso de reformado (973 [K]).

#### 3.1.5.3. Bomba de agua “PUMP” (PUMP)

El vapor, que ingresa como agua a T° ambiente, es procesado a través de una bomba cuya presión de descarga es de 10 [atm].

#### 3.1.5.4. Calentador de línea de vapor “HEATER2” (HEATER)

Con la misma condición de operación que el intercambiador del inciso 3.1.5.2 (10 [atm]), calienta la corriente de agua hasta vaporizarla a una temperatura de 973 [K]).

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

#### 3.1.5.5. Mezclador de biogás + vapor “MIXER1” (MIXER)

Antes de ingresar a la etapa de reformado, debido al uso de Aspen Plus es necesario mezclar el biogás y el vapor antes de su ingreso al horno de reformado. Este bloque “Mixer” trabaja a una presión de 10 [atm].

#### 3.1.5.6. Horno de reformado “REFORMER” (RGIBBS)

Para el reformado de metano con vapor, se considera un bloque “RGibbs”, el cual calculará según el equilibrio de fases y el equilibrio químico, la reacción química tal que minimice la energía libre de Gibbs del proceso. Bajo una temperatura de 973 [K] y una presión de 10 [atm], se especifica al reactor los posibles productos que debe entregar: H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y CO.

### 3.1.6. Etapa 3: Reacción de desplazamiento del gas del agua

#### 3.1.6.1. Enfriador de reformado “HEATER3” (HEATER)

Para llevar a cabo la reacción WGS, posterior al reformado de vapor, se debe enfriar la corriente gaseosa a una temperatura de 573 [K] a través de este bloque “Heater”.

#### 3.1.6.2. Reactor del desplazamiento del gas de agua “WGS” (RSTOIC)

Este reactor opera a una temperatura de 573 [K] y a una presión de 10 [atm]. La reacción, explicada en el punto 2.1.5.1, tiene un 98% de conversión de CO.

### 3.1.7. Etapa 4: Permeado de hidrógeno mediante membranas de paladio y licuefacción.

#### 3.1.7.1. Calentador de la corriente de producto “HEATER4” (HEATER)

Este bloque “Heater” prepara el producto para el permeado de hidrógeno, calentando la corriente hasta una temperatura de 723 [K] y bajo una presión de 10 [atm].

#### 3.1.7.2. Membrana de paladio para la permeación de hidrógeno “PURIFIC” (SEP)

Esta membrana puede alcanzar eficiencias de permeado de hidrógeno de 99,99%, por lo que el uso del bloque “Sep” es necesario para separar el hidrógeno.

#### 3.1.7.3. Válvula de hidrógeno “VALVE1” (VALVE)

Este bloque “Valve” posee un tipo de cálculo ‘flash adiabático’ según la presión de salida. Se utiliza para despresurizar el hidrógeno a una presión de salida de 1 [atm].

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

#### 3.1.7.4. Licuadora de hidrógeno “HEATER6” (HEATER)

Para emular el proceso de licuefacción de hidrógeno para entregar el producto en fase líquida, se modela un bloque “Heater” que opera a presión atmosférica y que enfría el hidrógeno a una temperatura de 20,3 [K].

### 3.1.8. Etapa 5: Cámara de combustión del gas de síntesis

#### 3.1.8.1. Turbina de descompresión del gas de síntesis “COMP2” (COMP)

Este bloque es útil para despresurizar el gas de síntesis a una presión de descarga de 1 [atm], a través de una turbina isoentrópica, previo a ingresar a la cámara de combustión.

#### 3.1.8.2. Cámara de combustión de gas de síntesis “COMBUS” (RGIBBS)

Para la producción de energía, se considera un bloque “RGibbs” como cámara de combustión del gas de síntesis. Este reactor calcula el avance de reacción según el equilibrio de fases y el equilibrio químico, a un punto en que se minimice la energía libre de Gibbs del proceso. Bajo una temperatura de 1042 [K] y una presión de 1 [atm], se especifica al reactor los posibles productos que debe entregar: H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> y CO.

#### 3.1.8.3. Enfriador de la corriente de gases de combustión “HEATER5” (HEATER)

Este bloque es útil como contador de la energía que pueden proveer los gases de combustión, enfriándolos hasta una temperatura de 350 [K].

Las especificaciones de todos los equipos se resumen a continuación, en la Tabla 3.1.2:

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 3.1.2. Especificaciones del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa sin integración energética (Simulación 1).

Equipo	Bloque Aspen Plus	Especificaciones
Mezclador	MIXER	P = 1 [atm]
Reactor de hidrólisis	RSTOIC	P = 1 [atm] T = 328,15 [K]
Digestor	RCSTR	P = 1 [atm] T = 328,15 [K] V = 3700 [m <sup>3</sup> ]
Purificador de biogás	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O = 1
Trampa de agua	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> = 1
Compresor de biogás	COMP	Isoentrópico P descarga = 10 [atm]
Calentador de biogás	HEATER	T = 973 [K] P = 10 [atm]
Bomba de agua	PUMP	T = 298 [K] P descarga = 10 [atm]
Calentador de vapor	HEATER	T = 973 [K] P = 10 [atm]
Mezclador	MIXER	P = 10 [atm]
Horno de reformado	RGIBBS	T = 973 [K] P = 10 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO
Enfriador de reformado	HEATER	T = 573 [K] P = 10 [atm]
Reactor WGS	RSTOIC	T = 573 [K] P = 10 [atm]
Calentador producto	HEATER	T = 723 [K] P = 10 [atm]
Membrana de paladio	SEP	Fracción H <sub>2</sub> = 0,999
Válvula de hidrógeno	VALVE	Flash adiabático P = 1 [atm]
Licuidora de hidrógeno	HEATER	T = 20,3 [K] P = 1 [atm]
Turbina de syngas	COMP	Isoentrópico P descarga = 1 [atm]

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Cámara de combustión	RGIBBS	T = 1042 [K] P = 1 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO
Enfriador gases	HEATER	T = 350 [K] P = 1 [atm]

### 3.2. Corrección del Modelo de Digestión Anaerobia en Aspen Plus

Para la convergencia del caso base y la correcta realización de los análisis de sensibilidad, se tuvo que corregir aspectos del modelo como:

#### 3.2.1. Estequiometría de reacciones

Para establecer una estequiometría correcta de las reacciones involucradas con los componentes de la biomasa, se definieron las siguientes formulas químicas:

Tabla 3.2.1. Compuestos con sus fórmulas químicas corregidas.

Compuesto	ID de Aspen Plus	Fórmula química
Celulosa	CELLULOSE	$C_6H_{10}O_5$
Almidón	STARCH	$(C_6H_{10}O_5)_7$
Proteínas insolubles	INS-PROT	$C_{4,323}H_{8,293}N_{1,222}O_{2,303}S_{0,067}$
Ácido Palmítico	PALM	$C_{16}H_{32}O_2$

En primer lugar, se definieron especificaciones para los pseudocomponentes, con el fin de que Aspen Plus calcule sus propiedades mediante el método termodinámico elegido, presentadas en la siguiente tabla:

Tabla 3.2.2. Propiedades de los pseudocomponentes.

Componente	Punto de ebullición normal [K]	Densidad [kg/m <sup>3</sup> ]	Peso molecular [g/mol]
PROTEIN	343,15	1430	367,42
INS-PROT	343,15	1430	116,391
INERT	1000	3000	100

En segundo lugar, respecto al ácido palmítico, compuesto obtenido a partir de la degradación del triglicérido tripalmitina en la hidrólisis, se le asignó la fórmula química que corresponde la

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

degradación de este último en presencia de un medio acuoso (AUS-e-TUTE, s.f.), ya que la fórmula asignada por (Rajendran y otros, 2014),  $C_{16}H_{34}O$ , no se ajusta a la degradación de las macromoléculas en la digestión anaerobia.

En consecuencia, la corrección de la tripalmitina modificó la estequiometría de múltiples reacciones en la hidrólisis, resultando en:

Tabla 3.2.3. Estequiometrías corregidas del bloque "HYDROL" del modelo de DA.

Etapa de DA	N° - Componente	Estequiometría de reacción
Hidrólisis	1 – Almidón	$(C_6H_{10}O_5)_7 + 7 H_2O \rightarrow 7 C_6H_{12}O_6$
Hidrólisis	2 – Celulosa	$C_6H_{10}O_5 + H_2O \rightarrow C_6H_{12}O_6$
Hidrólisis	6 – Celulosa	$C_6H_{10}O_5 + H_2O \rightarrow 2 C_2H_6O + 2 CO_2$
Hidrólisis	9 – Proteínas insolubles	$C_{4,323}H_{8,293}N_{1,222}O_{2,303}S_{0,067} + 0,337 H_2O$ $\rightarrow 0,0045 C_6H_{14}N_{14}O_2 + 0,048 C_4H_7NO_4$ $+ 0,047 C_4H_9NO_3 + 0,172 C_3H_7NO_3$ $+ 0,074 C_5H_9NO_4 + 0,111 C_5H_9NO_2$ $+ 0,25 C_2H_5NO_2 + 0,047 C_3H_7NO_2$ $+ 0,067 C_3H_6NO_2S + 0,074 C_5H_{11}NO_2$ $+ 0,07 C_6H_{13}NO_2 + 0,046 C_6H_{13}NO_2$ $+ 0,036 C_9H_{11}NO_2$
Hidrólisis	11 – Tripalmitina	$C_{51}H_{98}O_6 + 3 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + 3 C_{16}H_{32}O_2$
Hidrólisis	12 -	$C_{37}H_{70}O_5 + 2 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + C_{16}H_{32}O_2 + C_{18}H_{34}O_2$
Hidrólisis	13 -	$C_{37}H_{68}O_5 + 2 H_2O \rightarrow C_3H_8O_3 + C_{16}H_{32}O_2 + C_{18}H_{32}O_2$

Por otro lado, ciertas reacciones de la acetogénesis no están correctamente balanceadas, por lo que se procedió a balancearlas para cumplir con la Ley de Conservación de la Masa.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Además, existen errores de tipeo en ciertas ecuaciones, como la fórmula química de la arginina en la reacción “4” de la degradación de aminas y el coeficiente estequiométrico del amoníaco en la ecuación “25” de la acidogénesis.

En consecuencia, las correcciones previamente planteadas modificaron la estequiometría de reacciones en la degradación de aminas, en la acidogénesis y en la acetogénesis resultando en:

Tabla 3.2.4. Estequiometrías corregidas del bloque “AC-MET” del modelo de DA.

Etapa de DA	N° - Componente	Estequiometría de reacción
Desaminación	4 – Arginina	$C_6H_{14}N_4O_2 + 3 H_2O$ $\rightarrow 0,5 C_2H_4O_2 + 0,5 C_3H_6O_2 + 0,5 C_5H_{10}O_2$ $+ 4 H_3N + CO_2$
Acidogénesis	25 – Glicerina	$C_3H_8O_3 + 0,04071 H_3N + 0,0291 CO_2$ $\rightarrow 0,005 H_2 + 0,04071 C_5H_7NO_2$ $+ 0,94185 C_3H_6O_2 + 1,09308 H_2O$
Acetogénesis	26 – Ácido oleico	$C_{18}H_{34}O_2 + 2 H_2O + 5 CO_2 + 3 NH_3$ $\rightarrow 3 C_5H_7NO_2 + 4 C_2H_4O_2 + 5 H_2$
Acetogénesis	30 – Ácido linoleico	$C_{18}H_{32}O_2 + 14,5992 H_2O + 0,8905 CO_2 + 0,1701 H_3N$ $\rightarrow 0,1701 C_5H_7NO_2 + 9,02 C_2H_4O_2$ $+ 12,219 H_2$
Acetogénesis	31 – Ácido palmítico	$C_{16}H_{32}O_2 + 2 H_2O + 6 CO_2 + 2 H_3N$ $\rightarrow 2 C_5H_7NO_2 + 6 C_2H_4O_2 + 2 H_2$

### 3.3. Integración energética del sistema

#### 3.3.1. Análisis energético

El proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa planteado por (Kourdoorli y otros, 2023) no considera la integración energética del sistema. Atendiendo las correcciones realizadas al modelo y a la adición de equipos como la trampa de agua de la corriente de biogás y de la

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

membrana de paladio, el análisis energético del proceso enuncia que se puede ahorrar un 64,16% de la energía que gasta actualmente el sistema, lo cual equivale a 298,9 [kW].

Por lo tanto, antes de realizar los análisis de sensibilidad y energéticos del sistema, es necesario realizar la integración energética para un ahorro energético y, en consecuencia, económico.

### *3.3.2. Análisis económico*

En el análisis energético que realiza Aspen Plus es posible obtener la información mediante 2 bases: energía y costo económico. Este último calcula el valor monetario según el producto entre la demanda energética de cada utilidad (servicio de calefacción o de enfriamiento) y el costo que tiene esta utilidad por defecto en su base de datos de ingeniería.

A modo de ejemplo, se decidió que Aspen Plus elija las utilidades de cada equipo, las cuales pueden ser:

#### *3.3.2.1. Fired Heat (1000)*

Representa un calentador a fuego directo, como por ejemplo un horno. Es decir, genera calor quemando un combustible. Es una utilidad cara y con más emisiones asociadas.

#### *3.3.2.2. LP Steam*

Vapor de baja presión usado como un servicio de calefacción. Utilizado generalmente para reboilers, precalentamientos o calentamientos moderados.

#### *3.3.2.3. Very High Temperature*

Medio de calentamiento a temperatura muy alta. Conceptualmente puede representar aceite térmico muy caliente o gases de combustión.

#### *3.3.2.4. HP Steam Generation*

Servicio de enfriamiento donde el proceso está tan caliente que puede generar vapor de alta presión a partir de agua de alimentación de caldera.

#### *3.3.2.5. Refrigerant 1*

Servicio de refrigeración por debajo de la temperatura ambiente mediante frío por ciclo de refrigeración mecánica.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

#### 3.3.2.6. *Very Low Temperature*

Una utilidad se refrigeración más fría que ‘Refrigerant 1’. Representa refrigeración criogénica (temperaturas por debajo de 0 [°C]).

### 3.4. Análisis de Sensibilidad

Con el fin de obtener datos del comportamiento del sistema modelado frente a variaciones de sus principales parámetros operacionales, se destinó el rendimiento de 4 análisis de sensibilidad, respecto a las siguientes variables:

#### 3.4.1. *Volumen del digestor*

En el primer análisis, se modificó el volumen del bloque “RCSTR” (AC-MET) con el fin de ver el impacto de esta variable en la cinética de reacción de la desaminación, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis.

#### 3.4.2. *Temperatura del horno de reformado*

Para el segundo análisis, se considera el amplio rango en la temperatura de operación del reformado de metano con vapor, el cual oscila entre los 700 y 1100 [°C] cuando se utiliza biogás como materia prima (Boshagh y otros, 2025).

#### 3.4.3. *Presión del horno de reformado*

Respecto al tercer análisis, la presión de operación del reformado de metano con vapor puede variar ampliamente entre 1 y 30 [atm] (Boshagh y otros, 2025).

#### 3.4.4. *Razón S-C que ingresa al horno de reformado*

Por último, la razón entre el flujo molar de vapor de agua y el flujo molar de carbono que ingresan al horno de reformado ha sido estudiado para valores entre 1 y 10 (Boshagh y otros, 2025). No obstante, (Di Nardo y otros, 2023) declaran que la razón molar entre el vapor y el biogás debe oscilar entre valores entre 0,5 y 2,5.

### 3.5. Búsqueda del punto óptimo de producción de hidrógeno

Por último, para llevar a cabo la comparación del proceso con otras tecnologías de producción de hidrógeno a partir de biomasa, es necesario determinar el punto óptimo de producción de hidrógeno a partir de los resultados de los análisis de sensibilidad detallados en el inciso 3.4 y respetando la integración energética realizada al sistema.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Por otro lado, se debe priorizar la modificación de las variables cuyo impacto es superior en la producción de hidrógeno, para continuar con las variables de menor impacto hasta llevar a la máxima producción posible. Este método debe realizarse para evitar errores de convergencia en Aspen Plus y mantener estable la integración energética.

### 3.6. Cálculo de la eficiencia energética de los sistemas simulados

Siempre y cuando los resultados de Aspen Plus sean de un sistema en convergencia, este indicará automáticamente los balances de materia y energía globales y de cada equipo en el estado estacionario establecido en las suposiciones del párrafo 3.1.1.

Por un lado, el balance de materia establece que:

*Ecuación 3.6.1. Balance de materia del sistema simulado.*

$$\sum M_{entrada} = \sum M_{salida}$$

Por otro lado, el balance de energía se puede escribir como:

*Ecuación 3.6.2. Balance de energía del sistema simulado.*

$$\sum M_{salida} \cdot H_{salida} - \sum M_{entrada} \cdot H_{entrada} = W + Q$$

Donde:

- $M_{entrada}$ : flujo que ingresa al sistema con una entalpía  $H_{entrada}$  específica.
- $M_{salida}$ : flujo que sale del sistema con una entalpía  $H_{salida}$  específica.
- $W$ : trabajo mecánico intercambiado con el exterior.
- $Q$ : calor intercambiado con el exterior.

El rendimiento energético de un proceso de reformado de biogás se cuantifica generalmente mediante la eficiencia térmica (Hajjaji, 2011). Según la primera ley de la termodinámica, la expresión del rendimiento energético se basa en la relación entre la energía producida y la energía consumida. Por consiguiente, se abarcará el hidrógeno producido como el biogás utilizado en la Ecuación 3.6.3, presentada a continuación:

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

*Ecuación 3.6.3. Eficiencia térmica del sistema de reformado de biogás con vapor.*

$$\eta = \frac{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}}{\dot{m}_{Biogás} \cdot LHV_{Biogás} + \dot{W}_{Compresor} + \dot{W}_{Bomba}}$$

Donde:

- $\dot{m}_{H_2}$ : flujo másico de salida del hidrógeno del sistema [kg/s].
- $\dot{m}_{Biogás}$ : flujo másico de entrada del biogás purificado [kg/s].
- $LHV_{H_2}$ : poder calorífico inferior del hidrógeno [kJ/kg], cuyo valor es 120,0 [MJ/kg] (The Engineering ToolBox, 2003).
- $LHV_{Biogás}$ : poder calorífico inferior del biogás [kJ/kg], el cual puede variar entre 16 y 28 [MJ/m<sup>3</sup>] según la composición de metano y dióxido de carbono (IEA, 2020). A partir de la densidad entregada por Aspen Plus del biogás obtenido de la digestión anaerobia de 1,1432 [kg/m<sup>3</sup>], y una composición en peso de metano de 25%, se determina que el valor del poder calorífico del biogás del sistema es de 17,25 [MJ/m<sup>3</sup>] (Laudington, s.f.), lo que equivale a 15,09 [MJ/kg].
- $\dot{W}$ : trabajo mecánico [kW] tanto del compresor como de la bomba.

Las eficiencias térmicas del compresor y la bomba se enuncian como 70% y 85% respectivamente en la literatura (Hajjaji, 2011). Por lo tanto, el cálculo de rendimiento energético de las simulaciones a realizar considerará estos factores.

### 3.7. Estudio comparativo entre tecnologías

Este estudio comparativo anexará distintas tecnologías de producción de hidrógeno al reformado de biogás con vapor, tales como pirólisis, gasificación, licuefacción hidrotermal, entre otros.

Dentro de los resultados que entrega Aspen Plus V9 para el sistema con producción optimizada, se considerará aquellos indicadores que tengan resultados tangibles dentro de la simulación, junto con otros cuya especificación será mediada a través de la literatura. determinaron los siguientes criterios e indicadores:

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

### 3.7.1. *Criterios de operación y rendimiento*

#### 3.7.1.1. Condiciones de operación

Es importante establecer las condiciones de operación de cada tecnología, con el fin de revisar su complejidad y logística necesaria. Se determinarán factores como temperatura y presión de operación.

#### 3.7.1.2. Eficiencia energética

Tal como se comentó en el párrafo 3.6, cada sistema tiene un recurso asociado, sea biomasa o biogás, cuya energía debe ser comparada con el poder calorífico del hidrógeno producido. De esta forma, es posible determinar la posición del reformado de biogás con vapor dentro de las eficiencias energéticas de las distintas tecnologías.

#### 3.7.1.3. Rendimiento en producción de hidrógeno por unidad de biomasa

Por otro lado, es menester calcular rendimientos de producción de todas las tecnologías bajo un mismo criterio. Para esto, se definió la siguiente razón de rendimiento:

*Ecuación 3.7.1. Rendimiento de producción de hidrógeno.*

$$\eta_{H_2} = \frac{[\text{kg}] \text{ de hidrógeno producido}}{[\text{kg}] \text{ de biomasa seca alimentada}}$$

### 3.7.2. *Criterios de materias primas*

#### 3.7.2.1. Tipo de biomasa aceptada

Existen diversos tipos de biomasa, por lo tanto, es importante investigar en la literatura las materias primas que son factibles de utilizar en cada uno de los procesos estudiados. A su vez, determinar si la tecnología como tal acepta el uso de la biomasa como materia prima o si esta requiere exclusivamente de biogás.

#### 3.7.2.2. Requerimiento de agua

Como se ha comentado anteriormente, el agua es un recurso escaso que se busca resguardar en la industria, por lo que es importante considerar un factor como la razón (Ecuación 3.7.2) entre el agua utilizada, sea vapor de reformado o agua de refrigeración, con el hidrógeno producido.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

*Ecuación 3.7.2. Requerimiento de agua.*

$$\eta_{H_2O} = \frac{[kg] \text{ de agua alimentados}}{[kg] \text{ de hidrógeno producidos}}$$

### 3.7.3. Criterios ambientales

#### 3.7.3.1. Emisiones directas de CO<sub>2</sub>

Para este criterio, es importante considerar tanto la combustión en hornos como la oxidación parcial del biogás o gas de síntesis en los cálculos a partir de los datos de Aspen Plus y de la investigación de la literatura, mediante la siguiente razón:

*Ecuación 3.7.3. Emisiones directas de dióxido de carbono.*

$$\eta_{CO_2} = \frac{[kg] \text{ de } CO_2 \text{ liberado}}{[kg] \text{ de hidrógeno producido}}$$

#### 3.7.3.2. Potencial de cambio climático

El GWP, por sus siglas en inglés, es un indicador que mide la contribución de un gas de efecto invernadero en relación al dióxido de carbono. Se expresa en CO<sub>2</sub>-equivalente (CO<sub>2</sub>e). La revisión de la literatura servirá para comparar las tecnologías según su impacto ambiental.

En el siguiente capítulo, se presentarán resultados sobre 3 simulaciones distintas, ya que cada una se diferencia de la otra según el avance en la metodología, estas son:

1. Simulación 1: Simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa sin integración energética. Esta simulación considera como base los modelos propuestos por (Rajendran y otros, 2014) y (Kourdourli y otros, 2023), más las correcciones realizadas a ambos modelos.
2. Simulación 2: Simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa con integración energética. Esta simulación abarca tanto la integración energética como su posterior análisis energético, junto con los análisis de sensibilidad escritos en el párrafo 3.4. Las especificaciones de cada equipo están disponibles en el Apéndice A.
3. Simulación 3: Simulación del punto óptimo de producción de hidrógeno a partir de biomasa. Esta simulación recoge los mejores resultados de los análisis de sensibilidad para maximizar la producción, manteniendo el principio de integración energética. Las especificaciones de Aspen Plus para el sistema están disponibles en el Apéndice B.

## CAPÍTULO IV

### 4. Análisis de Resultados

#### 4.1. Integración energética

En primer lugar, los resultados de composiciones molares de las corrientes principales de la Simulación 1, entregados por Aspen Plus, son:

*Tabla 4.1.1. Características de las principales corrientes de la Simulación 1.*

Corriente	BG-PURE	REF-E	REF-S	WGS-S	H2-OUT	COMB-E	AIR	
Temperatura (K)	328,15	973	973	573	20,3	527	298	
Presión (atm)	1	10	10	10	1	1	1	
Flujo molar (mol/h)	1529,31	5717,31	6896,89	6896,89	2325,16	4544,73	6533	
Fracción molar %	CH4	47,2	13,1	2,3	2,3	0	3,5	0
	CO2	52,8	14,7	15,0	20,6	0	31,3	0
	H2O	0	72,1	48,5	42,8	0	65,0	0
	H2	0	0,0	28,5	34,1	100	0,0	0
	CO	0	0	5,8	0,1	0	0,2	0
	N2	0	0	0	0	0	0	79
	O2	0	0	0	0	0	0	21

A partir de la información presentada en la Tabla 4.1.1, se observa en el reformado la conversión de una importante fracción de metano y de vapor en monóxido de carbono e hidrógeno, aumentando la producción de este último gracias a la reacción WGS, consumiendo tanto el monóxido de carbono producido como una fracción del vapor de agua.

Al converger la simulación y obtener estos resultados, se procede a utilizar la herramienta ‘Energy Analysis’ de Aspen Plus, mediante la cual el programa calcula el calor o el trabajo de cada equipo, según corresponda. Esto no sólo incluye a los bloques “Heater” o “HeatX”, sino que también a los reactores, separadores, bombas, turbinas, compresores y válvulas pertenecientes al sistema, registrándolos como servicios de calefacción (heating utilities) o servicios de enfriamiento (cooling utilities) según sea la función del equipo.

De esta forma, el análisis energético de la Simulación 1 entrega utilidades de energía totales (la suma de los servicios de calefacción y enfriamiento) de 465,9 [kW], como se puede observar en la Figura 4.1.1:

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

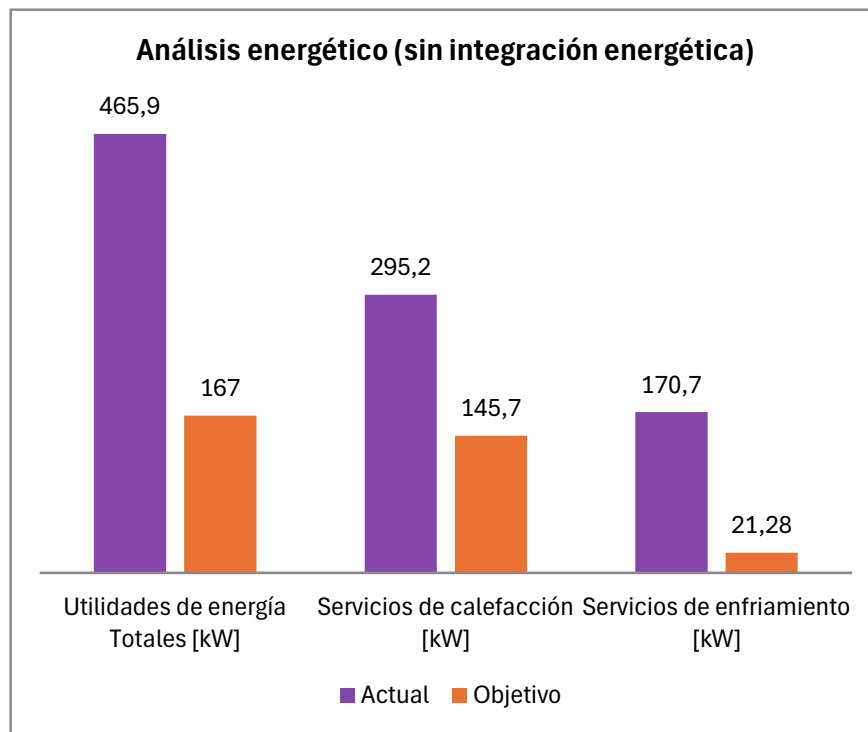


Figura 4.1.1. Análisis energético de la Simulación 1.

Además, el análisis energético de Aspen Plus calcula la cantidad de energía que es posible ahorrar dentro del sistema. Es decir, toda la energía proveniente de las corrientes, bloques ‘Heater’, entre otros componentes del sistema que puede reutilizarse en otras etapas del proceso para lograr un ahorro energético y a la vez económico, en un proceso conocido como integración energética. En la Tabla 4.1.2 se muestra que un 64,16% de la energía total que necesita el sistema puede ser reducida por el proceso mismo, con un total de energía consumida ‘objetivo’ de 167 [kW].

Tabla 4.1.2. Resultados del análisis energético de la Simulación 1.

Propiedad	Actual	Objetivo	Ahorro disponible	% Actual
Utilidades de energía totales [kW]	465,9	167	298,9	64,16
Servicios de calefacción [kW]	295,2	145,7	149,5	50,63
Servicios de enfriamiento [kW]	170,7	21,28	149,4	87,54

Para esto, ha sido necesario integrar un reciclo de los gases de salida de la cámara de combustión, en el proceso de calentamiento de la corriente de agua a utilizar en el reformado



Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

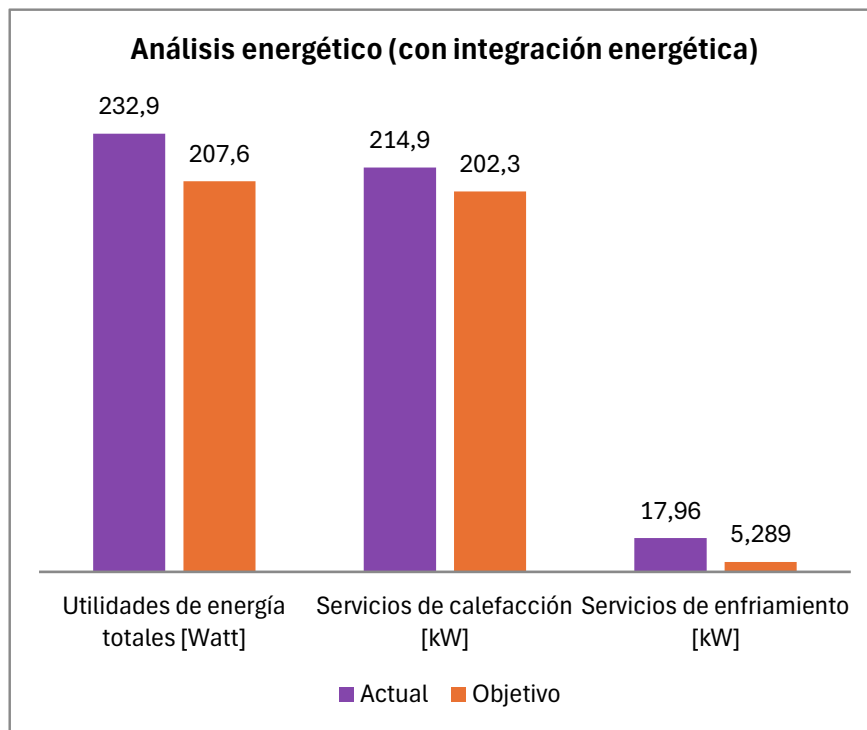


Figura 4.1.3. Análisis energético de la Simulación 2.

También, esta corrección reduce en un 50% el consumo energético total y en un 91,5% los ahorros energéticos posibles, tal como se muestra en la Tabla 4.1.4. Estos resultados demuestran la importancia de implementar la cámara de combustión al sistema, tanto por dar un segundo uso al gas de síntesis antes de salir del sistema como por el ahorro energético que puede producir el combustible producido en la caldera.

Tabla 4.1.4. Resultados del análisis energético de la Simulación 2.

Propiedad	Actual	Objetivo	Ahorro disponible	% Actual
Utilidades de energía totales [kW]	232,9	207,6	25,27	10,88
Servicios de calefacción [kW]	214,9	202,3	12,6	5,9
Servicios de enfriamiento [kW]	17,96	5,289	12,67	70,56

La fracción de energía que permanece disponible para ser ahorrada (25,27 [kW]) continúa como remanente porque no ha sido posible utilizar el combustible como un servicio de calefacción en otros equipos, ya que al calefaccionar el agua disminuye en sobremanera su temperatura y poder calorífico. A pesar de esto, se utilizó este combustible frío como fluido de servicio para enfriar

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

la corriente de gas que ingresará al reactor WGS en el ‘HX-2’, pensando en que recuperaría la energía suficiente para integrarlo energéticamente en la calefacción del biogás. Aun así, no fue suficiente y se estableció la salida del combustible del intercambiador como la corriente de ‘venteo’.

#### 4.2. Impacto económico de la integración energética

Además del enfoque energético, se consideró el impacto económico de cada sistema planteado según la demanda de cada utilidad planteada en el inciso 3.3.2, las cuales están presentadas según su bloque correspondiente en la Tabla 4.2.1.

*Tabla 4.2.1. Utilidades entregadas por Aspen Plus al Caso 1.*

Utilidad	Bloque (s) que la utilizan
Fired Heat (1000)	HEATER1, HEATER2, COMBUS, HEATER4
LP Steam	AC-MET, HYDROL
Very High Temperature	REFORMER
HP Steam Generation	HEATER3, WGS
Refrigerant 1	HEATER5
Very Low Temperature	HEATER6

En consecuencia, el análisis económico, comparando el sistema original y el sistema con integración energética, resulta en:

*Tabla 4.2.2. Resultados del análisis económico de energía de las Simulaciones 1 y 2.*

Caso	Actual	Objetivo	Ahorro disponible	% Actual
Simulación 1 [\$USD/año]	47120	16370	30756	65,27
Simulación 2 [\$USD/año]	27820	18490	9331	33,54

A partir de los resultados mostrados en la Tabla 4.2.2, se observa una disminución del 40,9% del costo monetario del sistema, junto con una reducción del 69,7% del costo de la energía disponible para ser ahorrada.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

En síntesis, se ha demostrado que la integración energética del sistema representa una oportunidad plausible respecto al ahorro de energía y de costos por: mejorar potencialmente la eficiencia del proceso al requerir de menor cantidad de materias primas, fomentar la economía circular en un sistema de producción de hidrógeno en desarrollo y reducir las emisiones de gases de efecto invernadero con el menor uso de energía proveniente de fuentes no renovables.

### 4.3. Análisis de sensibilidad

A continuación, se presentan los resultados y las principales conclusiones obtenidas de cada uno de los 4 análisis de sensibilidad realizados a la Simulación 2:

#### 4.3.1. Análisis de sensibilidad al volumen del digestor

El volumen del digestor, rescatado a partir de los procedimientos industriales estudiados por fue inicialmente estudiado para variar entre volúmenes de 3000 y 4500 [m<sup>3</sup>], mayores y menores al volumen original de 3700 [m<sup>3</sup>], obteniendo resultados de forma exitosa en un rango definido, como se observa en la Figura 4.3.1.

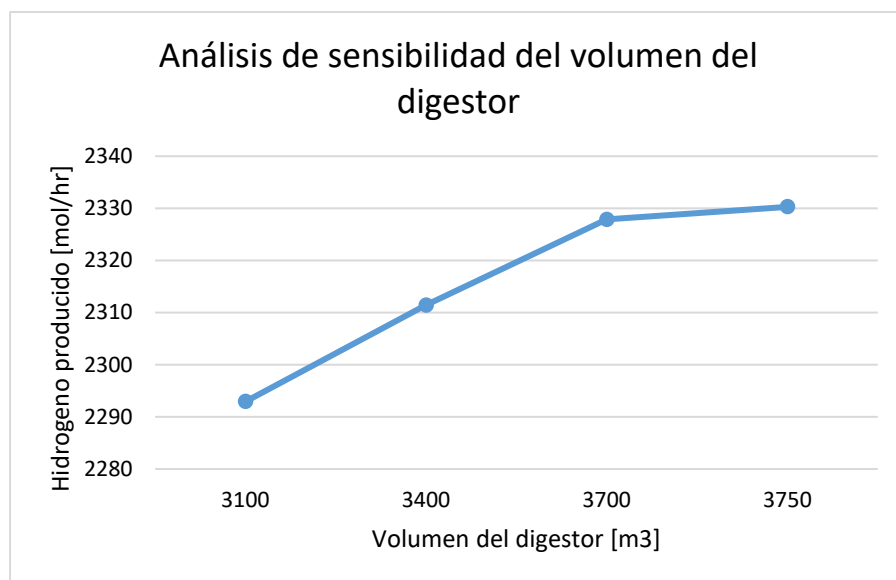


Figura 4.3.1. Resultados del análisis de sensibilidad del volumen del digestor.

No obstante, a volúmenes por sobre los 3800 [m<sup>3</sup>], el análisis no converge. Esto se puede deber a la rigidez del modelo de DA, el cual bajo perturbaciones leves puede causar conversiones extremas o composiciones límites que carezcan de sentido físico. A su vez, a volúmenes grandes se observan tiempos de residencias mayores, que pueden provocar conversiones cercanas al

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

100% en ciertas reacciones intermedias, por las cuales algunos reactantes no están presentes en ciertas reacciones y Aspen informa que hay un error de convergencia. Ese es el caso del amoníaco ( $\text{NH}_3$ ) y del ácido acético ( $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2$ ), compuestos que son reactantes en reacciones como la hidrólisis (bloque HYDROL) y productos en las distintas reacciones posteriores (bloque AC-MET) que carecen de flujo para llevarlas a cabo, perdiendo el sentido físico y llevando al sistema a no encontrar una solución bajo las condiciones de volumen dadas.

Por otro lado, se evaluó modificar la temperatura del reactor para evaluar condiciones mesófilas y termófilas. No obstante, el comportamiento microbiano y la cinética de las reacciones cambia, por lo que la rigidez y precisión que tiene el modelo propuesto por (Rajendran y otros, 2014) a la temperatura de operación actual, 328,15 [K], son impedimentos para utilizar esta variable en los análisis de sensibilidad.

#### 4.3.2. Análisis de sensibilidad a la presión del horno de reformado

Para el análisis de los parámetros operacionales del horno de reformado, es importante considerar que el horno de reformado está simulado como un reactor 'RGibbs' en Aspen Plus. Este bloque minimiza la energía libre de Gibbs total del sistema a T y P fijos:

*Ecuación 4.3.1. Expresión de la energía libre de Gibbs total.*

$$G_{total} = \sum_i n_i \mu_i$$

Donde:

- $n_i$ : moles del componente i.
- $\mu_i$ : potencial químico del componente i, el cual a T y P constantes es la energía libre de Gibbs molar parcial del componente i.

De esta forma, el bloque cambia las cantidades de moles de cada especie, respetando los balances de masa, hasta encontrar el mínimo de Gibbs total.

Utilizando definiciones termodinámicas, es importante tener en cuenta:

*Ecuación 4.3.2. Definición de potencial químico.*

$$\mu_i(T, P, fase) = \mu_i^\circ(T) + RT \ln \left( \frac{f_i}{f_i^\circ} \right)$$

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Donde:

- $\mu_i^\circ$ : potencial químico en el estado estándar (1 [bar]).
- $f_i$ : fugacidad del componente  $i$  en la mezcla.
- $f_i^\circ$ : fugacidad en el estado estándar (1 [bar]).

Ya que se trata únicamente de fase gaseosa en el horno de reformado, al elegir el modelo termodinámico NRTL, Aspen Plus ocupa la ley de gas ideal para representar esta fase (Adams, 2022). Por lo tanto, el programa asume las siguientes definiciones de fugacidad según el enfoque  $\gamma$ - $\phi$ :

*Ecuación 4.3.3. Fugacidad de fase vapor según modelo NRTL.*

$$f_i^v = y_i P$$

*Ecuación 4.3.4. Fugacidad en el estado estándar.*

$$f_i^\circ = P^\circ = 1 \text{ [bar]}$$

Uniendo las expresiones de la Ecuación 4.3.1, Ecuación 4.3.2, Ecuación 4.3.3 y Ecuación 4.3.4, se obtiene:

$$G_{total} = \sum_i n_i \mu_i^\circ(T) + RT \sum_i n_i \ln(y_i P)$$

Agrupando términos

*Ecuación 4.3.5. Expresión de la energía libre de Gibbs para el horno de reformado.*

$$G_{total} = \sum_i n_i \mu_i^\circ(T) + RT \sum_i n_i \ln(y_i) + \mathbf{RT n_{tot} \ln(P)}$$

Es importante considerar que las reacciones del reformado de biogás con vapor poseen un  $\Delta n_{tot} > 0$  como se detalla en la Ecuación 2.1.1 y en la Ecuación 2.1.2. Es decir, que a presiones por sobre 1 [bar] el  $\Delta G$  será positivo tanto por el término logarítmico como por la naturaleza de la reacción (moles finales mayores a moles iniciales), por lo que los incrementos de presión de reformado irán disminuyendo la conversión de la reacción al tener muchos moles de gas, y, por ende, un mayor valor de  $\Delta G$  según la expresión en negrita de la Ecuación 4.3.5. En resumen, a menores presiones la reacción “prefiere” avanzar al estado con más moles de gas, es decir, a los productos, favoreciendo la producción de hidrógeno.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

En consecuencia, estos resultados se pueden observar en el análisis de sensibilidad de la Figura 4.3.2:

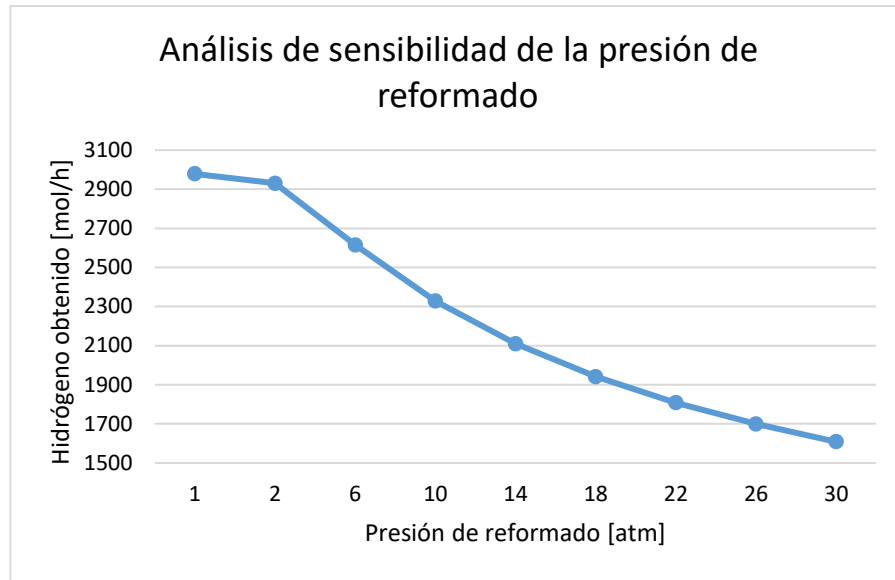


Figura 4.3.2. Resultados del análisis de sensibilidad de la presión de reformado.

Se observa a menores presiones un considerablemente mayor flujo molar de hidrógeno obtenido.

#### 4.3.3. Análisis de sensibilidad a la temperatura del horno de reformado

Siguiendo la Ecuación 4.3.5, la temperatura influye fuertemente con la expresión del potencial químico y del equilibrio químico (para cada reacción  $\Delta G = 0$ ):

Ecuación 4.3.6. Energía libre de Gibbs de reacción en equilibrio químico.

$$\Delta G_r^\circ = -RT \ln(K)$$

Donde:

- K: constante de equilibrio de reacción.

Al mismo tiempo, por definición:

$$\Delta G_r^\circ = \Delta H_r^\circ - T\Delta S_r^\circ$$

De esta forma, al aumentar la temperatura, el término  $-T\Delta S_r^\circ$  se hace más negativo, disminuyendo  $\Delta G_r^\circ$  y según la Ecuación 4.3.6, esto genera un aumento en la constante K. Las reacciones endotérmicas, como las de reformado, ven aumentadas su conversión con mayores valores de K, impulsando al equilibrio a correrse hacia los productos. Esto se puede observar en

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

la Figura 4.3.3, donde la producción de hidrógeno aumenta considerablemente al aumentar la temperatura, llegando a un techo límite de conversión máxima posible a los 1200 [K].

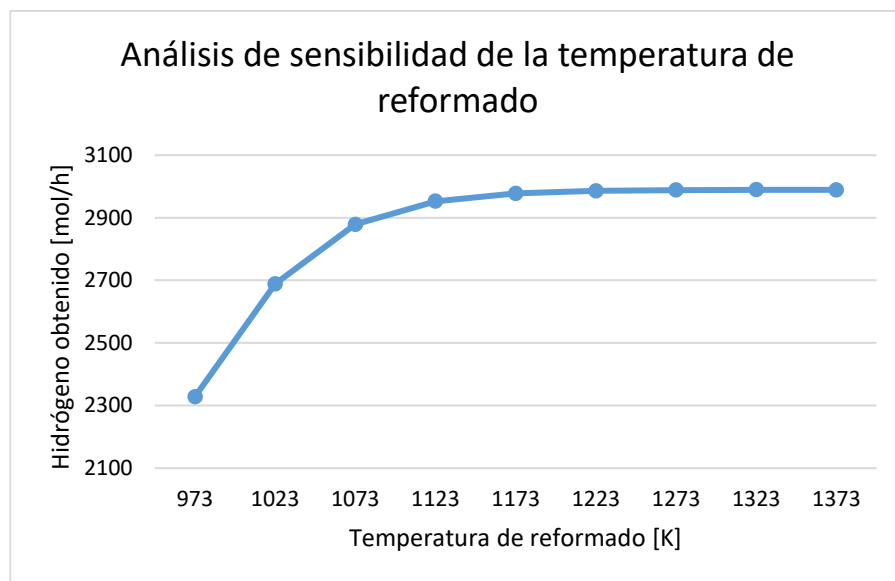


Figura 4.3.3. Resultados del análisis de sensibilidad de la temperatura de reformado.

En síntesis, respecto a los análisis del bloque RGIBBS se observa que el reactor es bastante útil para obtener productos de procesos industriales con reacciones múltiples o de cinéticas y/o estequiometrías desconocidas. No obstante, sería más conveniente considerar las cinéticas de reacción involucradas en el reformado de biogás con vapor que han sido estudiadas en la literatura, como las de (Xu & Froment, 1989) o de (Chan y otros, 2005).

Al considerar estas cinéticas con un bloque RCSTR o RPLUG, los resultados de esta operación serían mucho más precisos. No obstante, el bloque RGIBBS cumple cómodamente con el objetivo de esta investigación de realizar análisis de sensibilidad y poder testear el sistema más libremente, sin restringirse por cinéticas rígidas para ciertas condiciones operacionales como la temperatura.

#### 4.3.4. Análisis de sensibilidad a la razón S-C que ingresa al horno de reformado

Según el análisis de sensibilidad realizado, es correcto que a mayores flujos de vapor circulando en el sistema se incrementa la producción de hidrógeno. Sin embargo, los resultados mostrados en la Figura 4.3.4 no son los más favorables para encontrar el punto óptimo.

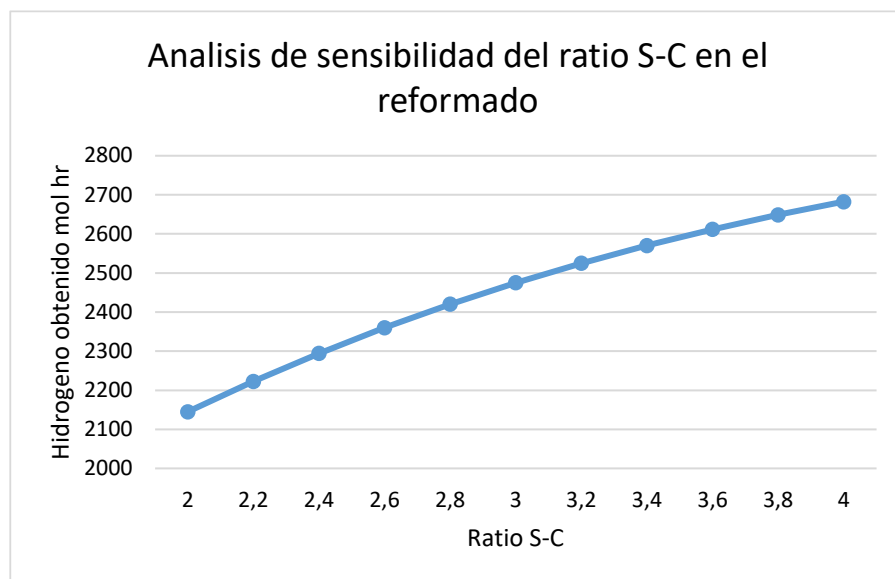


Figura 4.3.4. Resultados del análisis de sensibilidad de la razón S-C en el reformado.

En primer lugar, el incremento en la producción de hidrógeno es bajo, bastante inferior a los análisis realizados a la presión y temperatura del equipo reformador. En segundo lugar, el aumento del caudal de agua utilizado afecta la estabilidad de la integración energética con la corriente de gases de la cámara de combustión debido a que la energía que suministra dicha corriente es suficiente para un flujo levemente superior al establecido en las Simulaciones 1 y 2. Por último, este aumento de caudal es costoso económicamente para el sistema y no recomendable en la búsqueda de un sistema sustentable que no utilice de sobremanera recursos en escasez como el agua.

#### 4.4. Búsqueda del punto óptimo de producción de hidrógeno.

A partir de los cuatro análisis de sensibilidad realizados y a respetando la integración energética establecida en el sistema, se realizó la optimización de la producción de hidrógeno. En la Tabla 4.4.1, se muestran las modificaciones realizadas a las variables de proceso, enumeradas según el orden establecido en el párrafo 3.5.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 4.4.1. Parámetros optimizados para la Simulación 3.

Parámetro	Valor en Simulación 2	Valor en Simulación 3
Temperatura [K]	973	1040
Presión [atm]	10	1
S-C [mol/mol]	2,5	2,6
Flujo de agua [mol/h]	4000	4160

Estos cambios en las variables de proceso volvieron necesaria la modificación del flowsheet de la Simulación 2, debido a la eliminación de la bomba y del compresor al trabajar con presión atmosférica. A continuación, en la Figura 4.4.1, se observa el flowsheet de la simulación en su versión final:

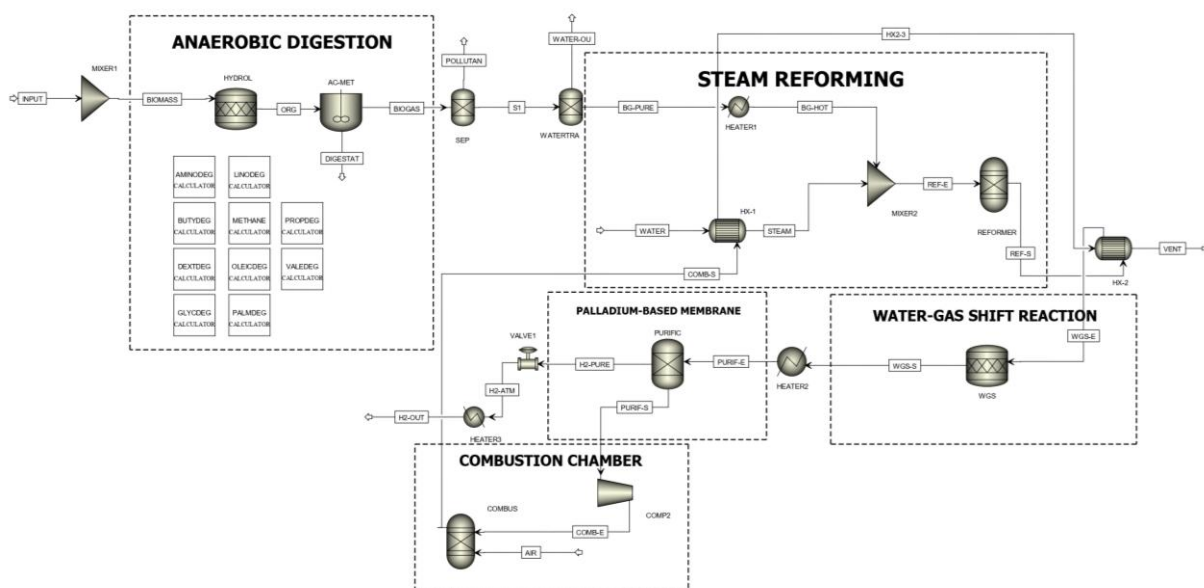


Figura 4.4.1. Flowsheet del proceso de máxima producción simulado en Aspen Plus (Simulación 3).

Además, en la Tabla 4.4.2, se adjuntan los resultados de la composición y caracterización de corrientes de esta simulación. Es posible observar un aumento en la fracción molar de hidrógeno en todas las etapas del proceso, debido a que el consumo del metano del biogás en el reformado es casi absoluto, demostrando que las nuevas condiciones operacionales establecidas maximizan la conversión de la reacción y, por ende, se produce una mayor cantidad de monóxido de carbono, el cual también será útil para maximizar la producción de hidrógeno en la reacción WGS.

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 4.4.2. Características de las principales corrientes de la Simulación 3.

Corriente	BG-PURE	REF-E	REF-S	WGS-S	H2-OUT	COMB-E	AIR	
Temperatura (K)	328,15	973	973	573	20,3	528	298	
Presión (atm)	1	1	1	1	1	1	1	
Flujo molar (mol/h)	1529,31	5752,31	7253,52	7253,52	2990,99	4262,52	6500	
Fracción molar %	CH4	47,2	13,1	0,0	0,0	0	0,0	0
	CO2	52,8	14,6	13,4	21,8	0	37,0	0
	H2O	0	72,3	45,1	36,8	0	62,7	0
	H2	0	0,0	32,9	41,2	100	0,0	0
	CO	0	0	8,5	0,2	0	0,3	0
	N2	-	0	0	0	0	0	79
	O2	-	0	0	0	0	0	21

Para los cambios de volumen, los menos significativos en el sistema, ya no se hizo posible la convergencia del sistema, por lo que el volumen permanece idéntico al de la Simulación 2. Los resultados de la Simulación 3 (simulación optimizada) se observan en la Tabla 4.6.1, mientras que el análisis de estos se ubica en el párrafo 4.6.

Sin embargo, al tratar corrientes gaseosas de biogás y vapor a presiones 10 veces menor a las originales, es importante notar que el volumen de los equipos, como el horno de reformado e intercambiadores de calor, va a aumentar en la misma magnitud. Por lo tanto, se requiere de estudios económicos para determinar el aumento de los costos de capital (CAPEX) por el uso de equipos más grandes, y si este costo no es rentable a pesar del aumento de producción de hidrógeno.

Además, es importante mencionar que no se está considerando el uso de catalizadores en los procesos estudiados. En primer lugar, sería relevante anexar a las simulaciones de Aspen Plus el efecto de catalizadores de níquel soportados en óxido de aluminio (Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) o en óxido de zinc (Ni/ZnO) para el reformado de biogás con vapor (Nogales-Delgado y otros, 2023).

### 4.5. Cálculo de la eficiencia energética de los sistemas simulados.

A partir del uso de la Ecuación 3.6.3, es posible determinar el rendimiento de cada sistema simulado en Aspen Plus. Los datos obtenidos por el programa determinaron los resultados de eficiencia energética, presentados en la Tabla 4.5.1:

## Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 4.5.1. Resultados de la eficiencia energética de las simulaciones realizadas.

	Flujo Hidrógeno	Flujo biogás	Trabajo compresor	Trabajo bomba	LHV Hidrógeno	LHV Biogás	$\eta$
Unidad	kg/s	kg/s	kW	kW	MJ/kg	MJ/kg	%
Simulación 1	0,001317	0,0136	4,92842	0,0641	120,0	15,09	74,4
Simulación 2	0,001303	0,0136	4,92842	0,0622	120,0	15,09	73,6
Simulación 3	0,001675	0,0136	-	-	120,0	15,09	97,8

El uso de la presión atmosférica, en reemplazo de una presión de 10 [atm], no solo ha sido útil para incrementar la producción de hidrógeno, sino también para aumentar la eficiencia energética del proceso al no requerir la necesidad de bomba para agua y el compresor para biogás. Por otro lado, se observa que el priorizar las variables de proceso del reformado por sobre las variables de proceso de la digestión anaerobia impulsa la mejora del rendimiento energético.

Se puede agregar que la alta eficiencia energética posiciona al sistema optimizado de este estudio como una tecnología con alta proyección para desarrollar industrialmente. Además, indica la importancia de la realización de simulaciones de procesos en programas como Aspen Plus para su posterior integración a proyectos de ingeniería de procesos en las industrias.

### 4.6. Comparación de los sistemas simulados

En síntesis, los resultados de las Simulaciones 1, 2 y 3 se muestran en la Tabla 4.6.1, principalmente respecto a criterios como la producción de hidrógeno, la eficiencia energética y el consumo y costo de la energía utilizada.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 4.6.1. Comparación de resultados de los sistemas simulados.

Criterio	Simulación 1	Simulación 2	Simulación 3
Flujo de gases a la salida del reformado [mol/h]	6897	6759	7254
Fracción molar de hidrógeno a la salida del reformado [% mol/mol]	28,45	28,61	32,92
Flujo de hidrógeno a la salida del sistema [mol/h]	2352	2327	2991
Eficiencia energética [%]	75,1	74,8	97,8
Consumo de energía total [kW]	465,90	232,90	292,50
Servicios de calefacción [kW]	295,20	214,90	268,40
Servicios de enfriamiento [kW]	170,70	17,96	24,07
Ahorro disponible total [%]	64,16	10,88	11,81
Costo económico de la energía [\$USD/año]	47120	27820	37480

Respecto a estos resultados, en la Simulación 3 se observa un aumento del 28,5% en la producción de hidrógeno en comparación a la Simulación 2, acreditando la importancia de la ejecución de análisis de sensibilidad y de la implementación de sus resultados más relevantes. No obstante, el costo económico se incrementa en un 34,7%, por ende, es menester realizar un análisis económico entre las ganancias otorgadas por la producción de hidrógeno y el costo de los fluidos de servicio, además de analizar con referencia a la industria el uso y costo de estos últimos.

También, es relevante agregar que el aumento de la temperatura y disminución de la presión de reformado forzaron la generación de más productos dentro del RGIBBS de Aspen Plus, incrementando el flujo de gases a la salida del reformado y la fracción de hidrógeno dentro de la corriente de salida del reformado. Gracias a estos resultados es posible acreditar las aseveraciones realizadas en los párrafos 4.3.2 y 4.3.3.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

#### 4.7. Estudio comparativo entre tecnologías

A partir de los criterios establecidos en el párrafo 3.7, los resultados de la Simulación 3 en Aspen Plus y los datos obtenidos de la investigación en la literatura, se presentan en las siguientes tablas comparativas de las tecnologías de producción de hidrógeno a partir de biomasa.

##### *4.7.1. Análisis de los criterios de operación y rendimiento*

Según los datos de la Tabla 4.7.1, se observa que las temperaturas más exigentes corresponden al proceso de reformado, convirtiéndose este en un sistema con mayores servicios de calefacción. Por otro lado, el proceso de licuefacción hidrotermal propone alcanzar el punto crítico del agua, por lo que la presión de operación es bastante más elevada que el resto de las tecnologías. Sobre la eficiencia energética, es notable que los ajustes realizados al proceso de reformado con vapor incrementaron la eficiencia energética por sobre los valores reportados en la literatura. Esta ventaja también puede considerarse como una anomalía debido a las limitaciones de la simulación por el uso del reactor RGibbs, en vez de un reactor RCSTR o RPlug que indique precisamente las cinéticas y órdenes de las reacciones propias del reformado de biogás con vapor. Por otro lado, se observa que procesos termoquímicos como la pirólisis y la gasificación presentan las menores eficiencias energéticas.

Respecto al rendimiento de producción de hidrógeno, el valor de la simulación se ajusta a los estándares esperados por un proceso de reformado con vapor, pero podría incrementarse con la implementación de catalizadores. No obstante, la producción del caso optimizado es bastante inferior a la de otros procesos como la pirólisis o la gasificación, donde puede producir hasta 6 veces más hidrógeno a partir de una misma materia prima. Por lo tanto, debido a la contrariedad entre eficiencia energética y rendimiento de producción de hidrógeno es necesario la realización de análisis técnico-económicos de cada tecnología postulada en este trabajo.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Tabla 4.7.1. Comparación de tecnologías en base a criterios de operación y rendimiento.

Indicador	Simulación 3	Reformado de metano con vapor	Pirólisis	Gasificación	Licuefacción hidrotermal
Temperatura de operación [°C]	767	700-1100	350-700	500-800	300-350
Presión de operación [atm]	1	1-30	1	1-30	40-200
Eficiencia energética [%]	97,8	74-85	35-50	30-60	85-90
Rendimiento de H <sub>2</sub> [kg H <sub>2</sub> /kg biomasa seca]	0,022	0,014-0,028	0,03-0,12	0,085-0,126	0,02-0,05
Referencias	Aspen Plus	(Boshagh y otros, 2025), (NETL, s.f.), (Kourdourli y otros, 2023)	(Boshagh y otros, 2025), (NETL, s.f.), (Anand y otros, 2025)	(Boshagh y otros, 2025), (NETL, s.f.), (Anand y otros, 2025)	(Ghavami N. y otros, 2023), (NETL, s.f.)

4.7.2. Análisis de los criterios de materias primas

La búsqueda en la literatura no entregó los resultados esperados en los indicadores presentes en la Tabla 4.7.2, además de los criterios de la Tabla 4.7.3, para los procesos de pirólisis ni licuefacción hidrotermal. Por lo tanto, el análisis de dichas secciones se realizará a partir de la simulación, el reformado de metano con vapor y la gasificación.

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Respecto a las materias primas, cabe destacar que toda biomasa con azufre dentro de su composición debe pasar por un pretratamiento de desulfuración para ser utilizada en cualquiera de los procesos de producción de hidrógeno estudiados (Boshagh y otros, 2025).

Por otro lado, el consumo hídrico de la simulación va de la mano con lo establecido en la literatura para el reformado con vapor, aclarando que la razón en Aspen Plus es levemente superior debido al aumento de la razón S-C durante la optimización del proceso. Además, se observa un consumo de agua altamente superior en el proceso de gasificación.

*Tabla 4.7.2. Comparación de tecnologías en base a criterios de materias primas.*

Indicador	Simulación 3	Reformado de metano con vapor	Gasificación
Materia prima biológica	Biomasa lignocelulósica	Biogás	Biomasa lignocelulósica
Requerimiento de agua [kg H <sub>2</sub> O/kg H <sub>2</sub> ]	12,43	11,9	38,9
Referencias	Aspen Plus	(Cho y otros, 2023)	(Cho y otros, 2023)

#### *4.7.3. Análisis de los criterios ambientales*

Por último, para el análisis de las emisiones directas de dióxido de carbono de la simulación, se consideró únicamente las emisiones contaminantes del venteo de los gases de combustión y se descartó las emisiones del digestato que contabiliza Aspen Plus, ya que este líquido puede reingresar a las líneas de producción para otros usos, a modo de ejemplo, como fertilizante orgánico por su elevado contenido de carbono.

A partir de esta decisión, se observa la importancia de la captura, uso y almacenamiento de carbono (CCUS) para poder reducir las emisiones contaminantes. Por lo tanto, se recomienda tanto en simulaciones, mediante un bloque “Sep”, como en procesos industriales realizar esta práctica de almacenamiento del CO<sub>2</sub> proveniente del gas de síntesis. De hecho, esta práctica podría llevar a un punto cercano a emisiones cero (Ji & Wang, 2021).

Por otro lado, el potencial de cambio climático es propio de un Análisis de Ciclo de Vida (ACV), por consiguiente, solo estará disponible en la literatura para los procesos que han sido

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

estudiados, como lo son el reformado de metano con vapor y la gasificación. Nuevamente se observa la importancia de la captura de carbonos para que tanto el reformado de metano con vapor como el proceso simulado de reformado de biogás con vapor, sean ambientalmente competitivos con otras tecnologías de producción de hidrógeno.

Tabla 4.7.3. Comparación de tecnologías en base a criterios ambientales.

Indicador	Simulación 3	Reformado de metano con vapor	Gasificación
Emisiones directas de CO <sub>2</sub> [kg CO <sub>2</sub> /kg H <sub>2</sub> ]	11,6	10-12 (0,2 – 2 con CCS)	22-26
Potencial de cambio climático [kg CO <sub>2</sub> eq]	-	10,56 – 13,80 (3,50-3,90 con CCS)	2,67 – 4,40
Referencias	Aspen Plus	(Ji & Wang, 2021)	(Ji & Wang, 2021)

Cabe destacar que la elaboración tanto de análisis técnico-económicos y de ACV deben ser realizados con programas distintos a Aspen Plus y presentan un desafío en la estandarización de la simulación de procesos como un primer paso en el inicio de todo proyecto de ingeniería de procesos. La determinación de las inversiones o gastos de capital (CAPEX) y de los gastos operativos (OPEX) son decisivos para determinar si un proyecto de ingeniería es rentable o factible.

## CAPÍTULO V

---

### 5. Conclusiones

#### 5.1. Conclusiones

Para finalizar, este trabajo de investigación cumplió su objetivo general de modelar y simular en Aspen Plus un proceso de digestión anaerobia (DA) acoplada a un reformado de biogás con vapor (SBR) para la producción de hidrógeno a partir de biomasa, mediante diversas correcciones al modelo de (Rajendran y otros, 2014) y adaptaciones al modelo de reformado de (Kourdourli y otros, 2023).

Al mismo tiempo, es meritorio destacar el cumplimiento de los objetivos específicos: primero, la integración energética del sistema fue exitosa, demostrando la relevancia de diseñar procesos industriales con consideración del gasto energético y de los costos monetarios y medio ambientales que puede traer un excesivo uso de sistemas de calefacción y de enfriamiento.

Segundo, los análisis de sensibilidad realizados a las variables de proceso como la temperatura y presión de reformado, razón S-C y volumen del digestor, no sólo permitieron incrementar significativamente la producción de hidrógeno del sistema hasta su punto óptimo, sino que también contribuyeron al mejor entendimiento de éste y del funcionamiento de cada bloque de simulación de Aspen Plus. A modo de ejemplo, el reactor RGibbs es capaz de decodificar reacciones químicas, sus estequiometrías y cinéticas mientras minimiza la energía libre de Gibbs, pero puede ser más preciso el uso de un reactor RCSTR o RPLUG con una cinética y órdenes de reacción del reformado conocidos y adaptados a Aspen Plus para presentar una simulación más precisa.

Como último objetivo, se ha demostrado que el sistema DA+SBR es una ruta con proyección industrial al ser energéticamente competitiva, debido a que su eficiencia energética destaca frente a otras tecnologías e incluso tuvo un valor más alto a lo esperado en procesos de reformado, lo cual se justifica debido a la maximización de producción de hidrógeno y en cierta parte a la ausencia de un modelo cinético que describa tan detalladamente el reformado como lo hace el modelo de simulación de procesos de (Rajendran y otros, 2014). No obstante, la simulación optimizada está en desventaja frente a otras tecnologías en términos de rendimientos

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

de producción y emisiones de gases de efecto invernadero, a menos que se implemente la tecnología CCUS. Por lo tanto, es menester implementar análisis técnicos y económicos para determinar el verdadero potencial de esta tecnología y analizar donde están sus fortalezas y debilidades.

Para finalizar, este estudio demuestra la relevancia que toma la simulación de procesos industriales como un primer paso en los proyectos de ingeniería, en especial para tecnologías emergentes, para verificar puntos óptimos de producción, puntos de ahorro energético, y a su vez habilitar su comparación y testeo con otras tecnologías de producción.

## 5.2. Recomendaciones

Como se ha mencionado anteriormente, para trabajos futuros en Aspen Plus es relevante simular el proceso con un modelo cinético definido para el reformado de biogás con vapor, con el fin de obtener una mayor precisión en los resultados. Además, es bastante factible incluir catalizadores propios a cada proceso a la simulación de Aspen Plus para mejorar la producción y asemejar aún más el proceso a escalas industriales.

Asimismo, refinar las utilidades implementadas por Aspen Plus, para que estas se asemejen a fluidos de servicio que se utilicen en las plantas de procesos nacionales e internacionales de producción de hidrógeno sería una estrategia bastante relevante para realizar análisis económicos más precisos y reanudar el estudio comparativo con otras tecnologías a través de indicadores económicos relevantes. Respecto a este tema, se vuelve relevante realizar estudios técnico-económicos que consideren los gastos de capital (CAPEX) y gastos operativos (OPEX) para determinar la rentabilidad y factibilidad del proceso.

Por otro lado, se recomienda diseñar nuevas simulaciones respecto a otros métodos de reformado para la producción de hidrógeno, tales como reformado de metano en seco (DRM), oxidación parcial (POX), reformado autotérmico (ATR), entre otros.

## REFERENCIAS

---

- Adams, T. A. (2022). *Learn Aspen Plus in 24 Hours, 2nd Edition*. McGraw-Hill Education. <https://www.accessengineeringlibrary.com/content/book/9781264266654?implicit-login=true>
- Alentiev, D. A., Bermeshev, M. V., Volkov, A. V., Petrova, I. V., & Yaroslavtsev, A. B. (2025). Palladium Membrane Applications in Hydrogen Energy and Hydrogen-Related Processes. *Polymers*, *17*(6), 743. <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/polym17060743>
- Alvarado-Flores, J. J., Alcaraz-Vera, J. V., Ávalos-Rodríguez, M. L., Guzmán-Mejía, E., Rutiaga-Quiñones, J. G., Pintor-Ibarra, L. F., & Guevara-Martínez, S. J. (2024). Thermochemical Production of Hydrogen from Biomass: Pyrolysis and Gasification. *Energies*, *17*, 537. <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/en17020537>
- Anand, C., Chandraja, B., Nithiya, P., Akshaya, M., Tamizhdurai, P., Shoba, G., . . . Alam, M. W. (2025). Green hydrogen for a sustainable future: A review of production methods, innovations, and applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, *111*, 319-341. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.02.257>
- Anand, C., Chandraja, B., Nithiya, P., Akshaya, M., Tamizhudurai, P., Shoba, G., . . . Alam, M. W. (2025). Green hydrogen for a sustainable future: A review of production methods, innovations, and applications. *International Journal of Hydrogen Energy*, *111*, 319-341. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.02.257>
- AUS-e-TUTE. (n.d.). *Acid Hydrolysis of Triglycerides Chemistry Tutorial*. AUS-e-TUTE: <https://www.ausetute.com.au/hydrolysisstg.html>
- Boshagh, F., Yoon, H.-J., & Lee, C.-J. (2025). Key parameters influencing steam-reforming performance for hydrogen production. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *218*, 115777. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.rser.2025.115777>
- Budiyono, B., Widiassa, I. N., Johari, S., & Sunarso. (2011). Study on Slaughterhouse Wastes Potency and Characteristic for Biogas Production. *International Journal of Waste Resources*, *1*(2), 4-7. <https://doi.org/https://eprints.undip.ac.id/36607/>

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Cao, Y., Bai, Y., & Du, J. (2025). Aspen plus modeling of steam O<sub>2</sub>-enriched air gasification of biomass with tar content evaluation: A comparative study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 147, 149985. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.06.175>

Chan, S., Hoang, D., & Ding, O. (2005). Transient performance of an autothermal reformer—A 2-D modeling approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 48, 48, 4205-4214. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2005.02.042>

Cho, H. H., Strezov, V., & Evans, T. J. (2023). A review on global warming potential, challenges and opportunities of renewable hydrogen production technologies . *Sustainable Materials and Technologies*, 35, e00567. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.susmat.2023.e00567>

CNE. (2007). *GUÍA PARA EVALUACIÓN AMBIENTAL ENERGÍAS RENOVABLES NO CONVENCIONALES PROYECTOS DE BIOMASA*. Comisión Nacional de Energía. <https://energia.gob.cl/sites/default/files/documentos/guiabiomasaecia.pdf>

Department of Energy. (2017). *Hydrogen Production: Natural Gas Reforming*. U.S. Department of Energy: <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/hydrogen-production-natural-gas-reforming>

Di Nardo, A., Portarapillo, M. R., & Di Benedetto, A. (2023). Hydrogen production via steam reforming of different fuels: thermodynamic comparison. *International Journal of Hydrogen Energy*, 55, 1143-1160. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.11.215>

EBA. (2019). *Biogas Basics*. European Biogas Association: <https://www.europeanbiogas.eu/wp-content/uploads/2019/08/Biogas-Basics-v6.pdf>

EIA. (30 de Julio de 2024). *Biomass explained*. U.S. Energy Information Administration (EIA): <https://www.eia.gov/energyexplained/biomass/>

FASTECH. (2024). *Pyrolysis and Its Role in Hydrogen Production*. FASTECH: <https://www.fastechus.com/blog/pyrolysis-the-future-of-hydrogen-production>

Gençer, E. (2025). *Hydrogen*. MIT Climate Portal: <https://climate.mit.edu/explainers/hydrogen>

- Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.
- Ghavami, N., Özdenkçi, K., Salierno, G., Björklund-Sänkiaho, M., & De Blasio, C. (2021). Analysis of operational issues in hydrothermal liquefaction and supercritical water gasification processes: a review. *Biomass Conversion and Biorefinery*, *13*, 12367-12394. <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/s13399-021-02176-4>
- Ghavami, N., Özdenkçi, Salierno, G., Björklund-Sänkiaho, M., & De Blasio, C. (2023). Analysis of operational issues in hydrothermal liquefaction and supercritical water gasification processes: a review. *Biomass Conversion and Biorefinery*, *13*, 12367-12394. <https://doi.org/https://doi.org/10.1007/s13399-021-02176-4>
- Gollakota, A., Kishore, N., & Gu, S. (2018). A review on hydrothermal liquefaction of biomass. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *81*, 1378-1392. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.178>
- González, J. F., Álvarez-Medina, C. M., & Nogales-Delgado, S. (2023). Biogas Steam Reforming in Wastewater Treatment Plants: Opportunities and Challenges. *Energies*, *6343*(17), 16. <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/en16176343>
- Hajizadeh, A., Mohamadi-Baghmolaei, M., Cata Saady, N. M., & Zendehboudi, S. (2022). Hydrogen production from biomass through integration of anaerobic digestion and biogas dry reforming. *Applied Energy*, *309*(118442). <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2021.118442>
- Hajjaji, N. (2011). *Analyse de cycle de vie exergétique de systèmes de production d'hydrogène*. HAL.
- IEA. (2020). *Outlook for biogas and biomethane: Prospects for organic growth*. IEA: <https://www.iea.org/reports/outlook-for-biogas-and-biomethane-prospects-for-organic-growth>
- IEA. (2025). *Global Hydrogen Review 2025*. International Energy Agency: <https://iea.blob.core.windows.net/assets/12d92ecc-e960-40f3-aff5-b2de6690ab6b/GlobalHydrogenReview2025.pdf>
- IEA. (27 de Febrero de 2025). *Hydrogen*. IEA: <https://www.iea.org/energy-system/low-emission-fuels/hydrogen>

- Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.
- Ji, M., & Wang, J. (2021). Review and comparison of various hydrogen production methods based on costs and life cycle impact assessment indicators. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(78), 38612-38635. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.09.142>
- Kourdourli, F., Estel, L., Taouk, B., & Abdelouahed, L. (2023). Modeling of hydrogen production from biomass bio-digestion under Aspen Plus. *Computers and Chemical Engineering*, 175, 108273. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2023.108273>
- Laudington, D. (s.f.). *Calculating the Heating Value of Biogas*. [https://masters.donntu.ru/2013/fkita/alexandrova/library/Heating\\_Value\\_of\\_Biogas\\_copy.pdf](https://masters.donntu.ru/2013/fkita/alexandrova/library/Heating_Value_of_Biogas_copy.pdf)
- NETL. (s.f.). 7.3. *Technologies for Hydrogen Production*. National Energy Technology Laboratory: <https://www.netl.doe.gov/research/carbon-management/energy-systems/gasification/gasifipedia/technologies-hydrogen>
- Nogales-Delgado, S., Álvarez-Medina, C. M., Montes, V., & González, J. F. (2023). A Review on the Use of Catalysis for Biogas Steam Reforming. *Catalysts*, 13(12), 1482. <https://doi.org/https://doi.org/10.3390/catal13121482>
- Obiora, N. K., Ujah, C. O., Asadu, C. O., Kolawole, F. O., & Ekwueme, B. N. (2024). Production of hydrogen energy from biomass: Prospects and challenges. *Green Technologies and Sustainability*, 2(3), 100100. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.grets.2024.100100>
- Palatsi, J., Viñas, M., Guivernau, M., Fernandez, B., & Flotats, X. (2011). Anaerobic digestion of slaughterhouse waste: Main process limitations and microbial community interactions. *Bioresource Technology*, 102, 2219-2227. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.09.121>
- Peters, J. F., Banks, S. W., Bridgwater, A. V., & Dufour, J. (2017). A kinetic reaction model for biomass pyrolysis processes in Aspen Plus. *Applied Energy*, 188, 595-603. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2016.12.030>

- Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.
- Rajendran, K., Kankanala, H. R., Lundin, M., & Taherzadeh, M. J. (2014). A novel process simulation model (PSM) for anaerobic digestion using Aspen Plus. *Biosource Technology*, 168, 7-13. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2014.01.051>
- Simpson, A. P., & Lutz, A. E. (2007). Exergy analysis of hydrogen production via steam methane reforming. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32, 4811-4820. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2007.08.025>
- Szablowski, L., Wojcik, M., & Dybinski, O. (2025). Review of steam methane reforming as a method of hydrogen production. *Energy*, 316, 134540. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2025.134540>
- The Engineering ToolBox. (2003). *Higher Calorific Values of Common Fuels: Reference & Data*. The Engineering ToolBox: [https://www.engineeringtoolbox.com/fuels-higher-calorific-values-d\\_169.html](https://www.engineeringtoolbox.com/fuels-higher-calorific-values-d_169.html)
- Torres, R., Vivanco, E., & García, N. (2020). *Producción de Hidrógeno*. Biblioteca del Congreso Nacional de Chile: [https://obtienearchivo.bcn.cl/obtienearchivo?id=repositorio/10221/28898/1/Produccion\\_de\\_Hidrogeno.pdf](https://obtienearchivo.bcn.cl/obtienearchivo?id=repositorio/10221/28898/1/Produccion_de_Hidrogeno.pdf)
- Vassilev, S. V., Baxter, D., Andersen, L. K., & Vassileva, C. G. (2010). An overview of the chemical composition of biomass. *Fuel*, 89(5), 913-933. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2009.10.022>
- Wooley, R. J., & Putsche, V. (1996). *Development of an ASPEN PLUS Physical Property Database for Biofuels Components*. National Renewable Energy Laboratory. <https://doi.org/10.2172/257362>
- Xu, J., & Froment, G. F. (1989). Methane steam reforming, methanation and water-gas shift: I. Intrinsic kinetics. *AIChE Journal*, 35(1), 88-96. <https://doi.org/10.1002/aic.690350109>

## APÉNDICE

### Apéndice A. Especificaciones del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa con integración energética (Simulación 2).

Equipo	Bloque Aspen Plus	Especificaciones
Mezclador	MIXER	P = 1 [atm]
Reactor de hidrólisis	RSTOIC	P = 1 [atm] T = 328,15 [K]
Digestor	RCSTR	P = 1 [atm] T = 328,15 [K] V = 3700 [m <sup>3</sup> ]
Purificador de biogás	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O = 1
Trampa de agua	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> = 1
Compresor de biogás	COMP	Isoentrópico P descarga = 10 [atm]
Calentador de biogás	HEATER	T = 973 [K] P = 10 [atm]
Bomba de agua	PUMP	T = 298 [K] P descarga = 10 [atm]
Intercambiador de calor de vapor	HEATX	T salida corriente caliente = 973 [K]
Mezclador	MIXER	P = 10 [atm]
Horno de reformado	RGIBBS	T = 973 [K] P = 10 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO
Intercambiador de calor de reformado	HEATX	T salida corriente fría = 573 [K]
Reactor WGS	RSTOIC	T = 573 [K] P = 10 [atm]
Calentador producto	HEATER	T = 723 [K] P = 10 [atm]
Membrana de paladio	SEP	Fracción H <sub>2</sub> = 0,999
Válvula de hidrógeno	VALVE	Flash adiabático P = 1 [atm]

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Licuadora de hidrógeno	HEATER	T = 20,3 [K] P = 1 [atm]
Turbina de syngas	COMP	Isoentrópico P descarga = 1 [atm]
Cámara de combustión	RGIBBS	T = 1042 [K] P = 1 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO

Apéndice B. Especificaciones del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa en el punto óptimo (Simulación 3).

Equipo	Bloque Aspen Plus	Especificaciones
Mezclador	MIXER	P = 1 [atm]
Reactor de hidrólisis	RSTOIC	P = 1 [atm] T = 328,15 [K]
Digestor	RCSTR	P = 1 [atm] T = 328,15 [K] V = 3700 [m <sup>3</sup> ]
Purificador de biogás	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O = 1
Trampa de agua	SEP	T = 328,15 [K] Fracción CH <sub>4</sub> , CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> = 1
Compresor de biogás	COMP	Isoentrópico P descarga = 10 [atm]
Calentador de biogás	HEATER	T = 1040 [K] P = 10 [atm]
Intercambiador de calor de vapor	HEATX	T salida corriente caliente = 1040 [K]
Mezclador	MIXER	P = 1 [atm]
Horno de reformado	RGIBBS	T = 1040 [K] P = 1 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO
Intercambiador de calor de reformado	HEATX	T salida corriente fría = 573 [K]
Reactor WGS	RSTOIC	T = 573 [K] P = 10 [atm]

Modelación y simulación del proceso de producción de hidrógeno a partir de biomasa: análisis energético y estudio comparativo entre tecnologías.

Calentador producto	HEATER	T = 723 [K] P = 10 [atm]
Membrana de paladio	SEP	Fracción H <sub>2</sub> = 0,999
Válvula de hidrógeno	VALVE	Flash adiabático P = 1 [atm]
Licuada de hidrógeno	HEATER	T = 20,3 [K] P = 1 [atm]
Turbina de syngas	COMP	Isoentrópico P descarga = 1 [atm]
Cámara de combustión	RGIBBS	T = 1042 [K] P = 1 [atm] Productos: H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CH <sub>4</sub> , H <sub>2</sub> , O <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> y CO