



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO DE LA FACULTAD DE
INGENIERÍA QUÍMICA

TESIS

MAESTRÍA EN CIENCIAS EN INGENIERÍA QUÍMICA

**SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS PARA LA
PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE QUÍMICOS VERDES:
HACIA UNA INDUSTRIA ECOEFICIENTE**

PRESENTA:

I.Q. CARLOS ANTONIO PADILLA ESQUIVEL

DIRECTOR DE TESIS:

DR. JOSÉ MARÍA PONCE ORTEGA

CO-DIRECTOR DE TESIS:

DR. LUIS GERMÁN HERNÁNDEZ PÉREZ

MORELIA, MICHOACÁN

FEBRERO 2025



Asunto: Impresión de Tesis.

M.P.P. Venecia Azereet Medina Ortiz.
Jefe del Departamento de Titulación de la
U.M.S.N.H.

Por este medio nos dirigimos a usted de la manera más atenta para notificarle, que después de haberle dado seguimiento al desarrollo de la tesis: "SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS PARA LA PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE QUÍMICOS VERDES: HACIA UNA INDUSTRIA ECOEFICIENTE", después de haber revisado el manuscrito que presentó el alumno **Carlos Antonio Padilla Esquivel**, con matrícula **1358157K**, concluimos que cumple con los requisitos académicos y con lo establecido en el Reglamento General de Estudios de Posgrado para el desarrollo de su Tesis.

Por lo anterior este Comité Tutorial da el aval para su impresión final.

Director de Tesis: Dr. José María Ponce Ortega 03002829

Codirector: Dr. Luis Germán Hernández Pérez CONV0611

Vocales:

Dr. Luis Fernando Lira Barragán 08004447

Dr. Fabricio Nápoles Rivera 12002518

Dr. César Ramírez Márquez EXT21147

Atentamente.

Morelia, Michoacán a 06 de febrero de 2025.

Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga

Coordinadora del Programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química.



DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE
POSGRADO ING. QUÍMICA

MCCP/mcpa.

DEPARTAMENTO DE POSGRADO

Facultad de Ingeniería Química / Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Francisco J. Mojca 578 / Col. Pórtico del Río / C.P. 60360 / Morelia, Michoacán / Tel. y Fax: 443-327 3588

http://posgrado.ig.umsnh.mx/

Asunto: Impresión de Tesis.

AGRADECIMIENTOS

A lo largo de este camino, él contado con el apoyo incondicional de personas que han sido fundamentales en mi formación y crecimiento.

A mis padres, **Elvia Esquivel Velazco** y **Carlos Padilla Romero**, por su amor, sacrificio y enseñanzas. Gracias por ser mi mayor inspiración y por brindarme siempre su apoyo incondicional. Su esfuerzo y dedicación han sido la base sobre la cual construyó este logro.

A mis hermanos, **Miguel**, **Hazel** y **Pedro**, por su compañía, palabras de aliento y por recordarme siempre la importancia de la familia. Su apoyo ha sido un pilar en mi vida y me motiva a seguir adelante.

A mis compañeros de posgrado, **Oscar** y **Eduardo**, con quienes compartí retos, desarrollos y aprendizajes. Gracias por su amistad y por hacer de esta etapa una experiencia enriquecedora y llena de compañerismo.

A mi amigo **Eduardo**, por su apoyo incondicional y por estar presente en este camino. Su amistad ha sido una fuente de motivación y fortaleza.

A todos ustedes, mi más sincero agradecimiento. Este logro es también suyo.

AGRADECIMIENTOS INSTITUCIONALES

La culminación de esta tesis de maestría ha sido posible gracias al apoyo, guía y conocimiento brindado por diversas personas, a quienes deseo expresar mi más profundo reconocimiento y gratitud.

En primer lugar, mi más sincero agradecimiento a mi asesor, el **Dr. José María Ponce Ortega**, por su invaluable orientación, paciencia y confianza a lo largo de este proceso. Su experiencia y liderazgo han sido esenciales para mi crecimiento académico y profesional. Gracias por su tiempo, dedicación y por transmitirme sus conocimientos con generosidad.

De igual manera, agradezco a mi Co-asesor, el **Dr. Luis Germán Hernández Pérez**, por su constante apoyo y disposición para guiarme en el desarrollo de este trabajo. Sus observaciones y consejos fueron cruciales para mejorar la calidad de esta investigación y fortalecer mis habilidades como investigador.

Extiendo mi reconocimiento y gratitud al **Dr. Fabricio Nápoles Rivera**, al **Dr. Luis Fernando Lira Barragán** y al **Dr. César Ramírez Márquez**, por formar parte de mi comité tutorial y por sus valiosas sugerencias y aportaciones. Su retroalimentación me permitió ampliar mis perspectivas y mejorar el enfoque de esta investigación. Su compromiso y disposición para compartir su conocimiento han sido una fuente de aprendizaje invaluable.

A la **M.C. Tania Itzel Serrano Arévalo**, le agradezco profundamente por brindarme la oportunidad de trabajar con ella y permitirme desarrollar mis habilidades en un ambiente de aprendizaje y colaboración. Su apoyo y confianza han sido fundamentales para obtener grandes resultados en este proyecto, y su compromiso con la excelencia ha sido una gran inspiración.

Asimismo, quiero expresar mi agradecimiento al **M.C. Francisco Javier López Flores**, por darme la oportunidad de trabajar con él y contribuir al desarrollo de esta investigación. Su orientación, apoyo y disposición para compartir su experiencia fueron esenciales en la consolidación de este trabajo.

Al **Dr. César Ramírez Márquez**, le expreso mi más sincera gratitud por compartir su vasto conocimiento y brindarme su apoyo incondicional en cada etapa de este proceso. Sin duda

alguna, su guía y consejos han sido fundamentales para mi formación, no solo en el ámbito académico, sino también en el desarrollo de habilidades clave para la investigación.

Quiero extender mi profundo agradecimiento a **la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación** por el apoyo económico brindado durante el desarrollo de mis estudios de posgrado. Su respaldo ha sido crucial para la realización de esta investigación y ha contribuido significativamente a mi formación académica.

Agradezco también a la **División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química** y a la **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo**, para proporcionarme los recursos, el espacio y la formación necesarios para la realización de este trabajo. Su compromiso con la educación y la investigación ha sido fundamental para mi desarrollo académico y profesional.

A cada una de las personas e instituciones mencionadas, mi más profundo agradecimiento. Su apoyo ha sido una pieza clave en la culminación de esta etapa académica, y su enseñanza quedará marcada en mi formación profesional y personal.

ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN	1
1.1	ANTECEDENTES.....	6
1.2	PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	8
1.3	JUSTIFICACIÓN	9
1.4	HIPÓTESIS.....	9
1.5	OBJETIVO GENERAL	10
1.5.1	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	10
2.	MARCO TEÓRICO	11
2.1	SIMULACIÓN DE PROCESOS.....	11
2.2	SOFTWARE DE SIMULACIÓN.....	13
2.2.1	SOFTWARE SIMULADOR ASPEN PLUS™	14
2.3	HIDRÓGENO VERDE.....	15
2.4	NITRÓGENO VERDE	18
2.3.2	DESTILACIÓN CRIOGÉNICA	19
2.3.3	ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN	20
2.5	AMONÍACO VERDE.....	20
2.6	CAPTURA DE CARBONO.....	23
2.6.1	CAPTURA DE CARBONO POR ABSORCIÓN	26
2.7	UREA VERDE.....	29
2.8	ECOINDICADOR 99.....	30
2.8.1	USOS.....	32
2.8.2	TIPOS DE DAÑOS.....	33
2.8.3	UNIDADES.....	33
2.9	MÉTRICAS DE LA ECONOMÍA CIRCULAR	34
2.10	RED NEURONAL ARTIFICIAL	34
3.	METODOLOGÍA	37
3.1	SIMULACIÓN DE PROCESOS.....	37
3.1.1	PROPIEDADES FÍSICAS	37
3.1.2	DESCRIPCIÓN DEL MODELO	38
3.1.2.1.	HIDRÓGENO	38
3.1.2.2.	AMONÍACO.....	39
3.1.2.2.1.	UNIDAD DE REFORMA	40
3.1.2.2.2.	REACTOR DE CAMBIO DE BAJA TEMPERATURA	41
		vi

3.1.2.2.4. ELIMINACIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO.....	42
3.1.2.2.5. UNIDAD DE METANACIÓN.....	42
3.1.2.2.6. UNIDAD DE SÍNTESIS	43
3.1.2.3. CAPTURA DE CARBONO	45
3.1.2.4. UREA.....	46
3.2 CASO DE ESTUDIO 1	48
3.2.1 APLICACIÓN DEL ECOINDICADOR 99	50
3.2.2 APLICACIÓN DE METRICAS DE EC	52
3.2.3 ANÁLISIS ECONÓMICO.....	56
3.2 CASO DE ESTUDIO 2	57
3.2.1 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD	58
3.2.2 OPTIMIZACIÓN DE HIPERPARÁMETROS	60
3.2.3 OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	61
4. RESULTADOS	66
4.1 ANÁLISIS DE LAS SIMULACIONES DE PROCESO.....	66
4.2 RESULTADOS DEL CASO DE ESTUDIO 1.....	68
4.2.1 RESULTADOS DEL ECOINDICADOR 99	68
4.2.2 RESULTADOS DE LA METRICA EC.....	72
4.2.3 ANÁLISIS ECONÓMICO.....	76
4.2.4 ANÁLISIS INTEGRADO.....	76
4.3 RESULTADOS DEL CASO DE ESTUDIO 2.....	81
4.3.1 RESULTADOS DEL RNA.....	81
4.3.2 RESULTADOS DE LA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO	85
4.3.3 ANÁLISIS COMPARATIVO	89
5. CONCLUSIONES	92
6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	96

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1.	<i>Emisiones globales de CO_2 por combustión y procesos industriales</i>	1
FIGURA 2.	<i>Fuentes de energías renovables</i>	2
FIGURA 3.	<i>Tipos de fertilizante comerciales</i>	3
FIGURA 4.	<i>El fertilizante como nutrientes de las plantas</i>	4
FIGURA 5.	<i>Estado actual de la producción mundial de hidrógeno por fuente</i>	15
FIGURA 6.	<i>Colores de hidrógeno</i>	16
FIGURA 7.	<i>Modelo de producción de hidrógeno verde</i>	17
FIGURA 8.	<i>Diagrama de producción de hidrógeno verde</i>	17
FIGURA 9.	<i>Ciclo del fertilizante en la agricultura</i>	18
FIGURA 10.	<i>Modelo de producción de amoníaco verde</i>	21
FIGURA 11.	<i>Diagrama de producción de amoníaco verde</i>	22
FIGURA 12.	<i>Tipos de tecnologías de captura de carbono</i>	25
FIGURA 13.	<i>Diagrama de producción de absorción de CO_2</i>	27
FIGURA 14.	<i>Estructura química de la amina monoetanolamina</i>	28
FIGURA 14.	<i>Modelo de producción urea verde</i>	29
FIGURA 15.	<i>Diagrama de producción de absorción de la urea verde</i>	30
FIGURA 16.	<i>Ciclo de vida de un producto</i>	31
FIGURA 17.	<i>Estructura general de una rna de tipo MLP</i>	35
FIGURA 18.	<i>Diagrama de flujo del proceso de producción de hidrógeno verde en Aspen PlusTM</i>	39
FIGURA 19.	<i>Diagrama de flujo del proceso de la unidad de reforma en Aspen PlusTM</i>	40
FIGURA 20.	<i>Diagrama de flujo de la unidad de síntesis en aspen plusTM</i>	44
FIGURA 21.	<i>Diagrama de flujo del proceso de producción de amoníaco verde en Aspen PlusTM</i>	44
FIGURA 22.	<i>Diagrama de flujo del proceso de captura de carbono en Aspen PlusTM</i>	46
FIGURA 23.	<i>Diagrama de flujo del proceso de urea en Aspen PlusTM</i>	47
FIGURA 24.	<i>Producción de NH_3 por regiones en el 2023</i>	48
FIGURA 25.	<i>Uso de tecnologías de generación de energía en cada región</i>	50
FIGURA 26.	<i>Categorías de impacto para energías renovables</i>	51
FIGURA 26.	<i>Resultados del Ecoindicador 99</i>	69
FIGURA 27.	<i>Resultados de salud humana</i>	70
FIGURA 28.	<i>Resultados de calidad de los ecosistemas</i>	71
FIGURA 29.	<i>Resultados de recursos</i>	71
FIGURA 31.	<i>Producción de NH_3 y necesidades de material de cada región</i>	75
FIGURA 32.	<i>Análisis económico de la producción de amoníaco verde mediante diferentes fuentes de energía renovables</i>	76

FIGURA 33. <i>Análisis entre el ecoindicador 99 y las métricas de la ec en cada región</i>	77
FIGURA 34. <i>Análisis entre costos y Ecoindicador 99.</i>	80
FIGURA 35. <i>Análisis entre costos y DMR.</i>	81
FIGURA 36. <i>Gráfico de datos reales con los estimados por los modelos para las tres variables fundamentales.</i>	84
FIGURA 37. <i>Representación en 3d de la curva de pareto que relaciona F^{green_urea}, $TAC^{overall}$, $ELC^{overall}$</i>	86
FIGURA 38. <i>Sistema integrado de producción de urea verde en condiciones óptimas de funcionamiento.</i>	91

Abstract

Process simulation and optimization for the sustainable production of green chemicals: towards an eco-efficient industry

By:

Carlos Antonio Padilla Esquivel

Chemical Engineer

Directed by: Dr. José María Ponce Ortega

Co-directed by: Dr. Luis Germán Hernández Pérez

This study proposes the simulation and optimization of processes for producing green hydrogen, ammonia, and urea using Aspen PlusTM software and renewable resources. Strategies such as mass and energy integration are implemented, significantly reducing environmental impact by decarbonizing key industrial processes. Circular economy metrics and life cycle analysis highlight efficient resource use, waste minimization, and system sustainability. Artificial Neural Networks (ANN) were employed to develop accurate models for predicting critical process variables. The models achieved R^2 values above 0.99, demonstrating excellent performance in green ammonia and CO₂ capture processes, despite some variations in percentage error. Multi-objective optimization was carried out using deterministic, metaheuristic, and Bayesian approaches, with deterministic solutions standing out for balancing sustainability and efficiency in less computational time. Aspen Plus simulations validated the accuracy of ANN models, with errors below 2.1%. The integration of ANN and traditional simulations optimizes ecological processes, demonstrating technical feasibility and contributing to the transition toward a more sustainable industry. This approach strengthens the development of clean technologies, carbon capture, and green fertilizer production, establishing a solid foundation for future research.

Keywords: *process simulation, artificial neural networks, circular economy, energy integration, life cycle analysis, multi-objective optimization.*

Resumen

Simulación y optimización de procesos para la producción sostenible de químicos verdes: hacia una industria ecoeficiente

Por:

Carlos Antonio Padilla Esquivel

Ingeniero Químico

Dirigido por: Dr. José María Ponce Ortega

Codirigido por: Dr. Luis Germán Hernández Pérez

Este trabajo propone la simulación y optimización de procesos para la producción de hidrógeno, amoníaco y urea verdes mediante el software Aspen PlusTM, utilizando recursos renovables. Se integran estrategias de diseño como optimización másica y energética, reduciendo significativamente el impacto ambiental al descarbonizar procesos industriales clave. Además, se evalúan métricas de economía circular y análisis de ciclo de vida, resaltando el uso eficiente de recursos, la minimización de desechos y la sostenibilidad del sistema. El empleo de Redes Neuronales Artificiales (RNA) permitió desarrollar modelos precisos para predecir variables críticas en los procesos. Los modelos lograron valores de R^2 superiores a 0.99, mostrando excelente desempeño en amoníaco verde y captura de CO_2 , aunque con variaciones en el error porcentual. La optimización multiobjetivo se realizó mediante enfoques deterministas, metaheurísticos y bayesianos, destacando las soluciones deterministas por equilibrar sostenibilidad y eficiencia en menor tiempo computacional. Las simulaciones de Aspen Plus[®] validaron la precisión de las RNA, con errores menores al 2.1%. La integración de RNA y simulaciones tradicionales permite optimizar procesos de manera ecológica, demostrando viabilidad técnica y contribuyendo a la transición hacia una industria sostenible. Este enfoque refuerza el desarrollo de tecnologías limpias, captura de carbono y producción de fertilizantes verdes, estableciendo bases sólidas para futuras investigaciones.

Palabras clave: *simulación de procesos, redes neuronales artificiales, economía circular, integración energética, análisis de ciclo de vida, optimización multiobjetivo.*

1. INTRODUCCIÓN

La protección del medio ambiente se ha convertido en una de las principales prioridades a nivel global (Yung-Sheng et al., 2024), impulsada por la necesidad urgente de combatir el cambio climático y mitigar sus devastadoras consecuencias (Prall et al., 2023). Entre las principales estrategias se encuentra la reducción drástica del uso de combustibles fósiles (Padilla-Esquivel et al., 2023) y de las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) (Tian et al., 2024). En las últimas décadas, el impacto ambiental de la quema masiva de combustibles fósiles ha generado una preocupación creciente debido a su contribución significativa al cambio climático (Wang et al., 2023). Esto se debe a que una gran parte de la generación de electricidad, el transporte y la calefacción se basa en estos combustibles (Baigorri et al., 2023), produciendo dióxido de carbono, uno de los principales contaminantes atmosféricos (Muñoz-Díaz et al., 2023).

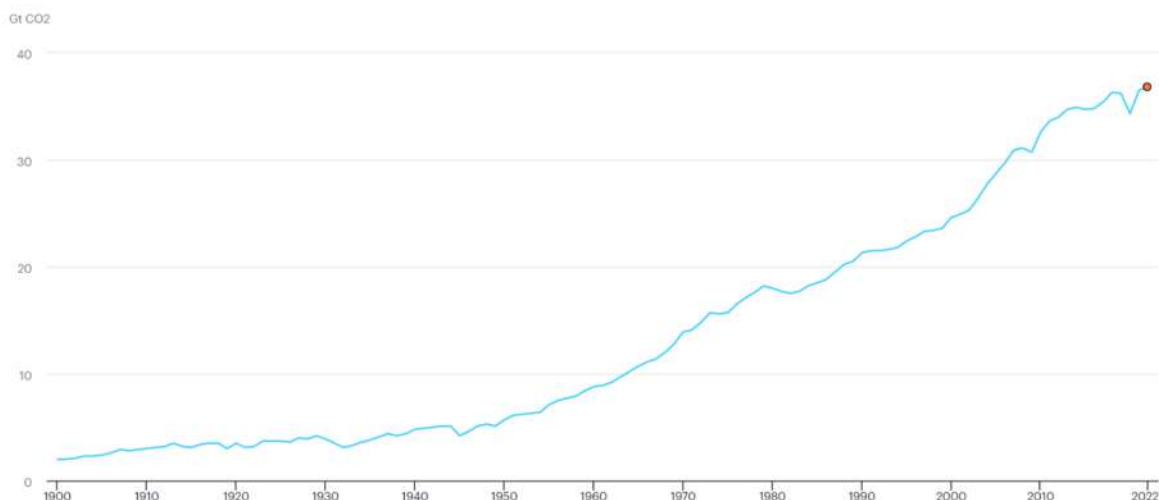


Figura 1. Emisiones globales de CO₂ por combustión y procesos industriales, 1900-2022.*

*Nota. Adaptado de IEA, Emisiones globales de CO₂ por combustión de energía y procesos industriales, 1900-2022, AIE, París. <https://www.iea.org/data-and-statistics/charts/global-co2-emissions-from-energy-combustion-and-procesos-industriales-1900-2022>, IEA. CC BY 4.0

En 2022, las emisiones globales de CO₂ relacionadas con la energía alcanzaron los 36,8 millones de toneladas anuales, marcando un aumento del 0.9% con respecto al año anterior y estableciendo un récord desde 1990 (IEA, 2023). Este crecimiento resalta la urgencia de acelerar la transición hacia fuentes de energía renovable, capaces de satisfacer las crecientes demandas energéticas sin comprometer el medio ambiente. Países de todo el mundo han estado promoviendo la electrificación de procesos clave utilizando fuentes limpias como la solar, la eólica, y la geotérmica (Oliveira et al., 2021).

El aumento sostenido de la demanda energética mundial está estrechamente ligado al crecimiento poblacional (Song et al., 2023). Se estima que la población global alcanzará los 10,000 millones de personas para 2050 (Serrano-Arévalo et al., 2024), lo que incrementará de manera exponencial las necesidades energéticas (Tarhan y Ali-Çil, 2021). Aunque los combustibles fósiles han impulsado el desarrollo económico global, su uso continuado tiene un costo ambiental inaceptable (Zhao et al., 2021; Yaqoob et al., 2022). Esto ha llevado a investigadores y científicos a explorar alternativas sostenibles para la generación de energía, con el fin de minimizar el impacto ambiental (Agyekum et al., 2022).



Figura 2. *Fuentes de energías renovables.*

En México, el sector de energías renovables ha experimentado un crecimiento notable en las últimas décadas (Palacios et al., 2024), reflejando el compromiso del país con la diversificación de su matriz energética y la reducción de su dependencia de los combustibles fósiles (Rivera et al., 2024). Este esfuerzo ha permitido que México avance significativamente en la adopción de fuentes de energía más limpias y sostenibles (Alnour et al., 2024), posicionándolo como un referente en la transición energética dentro de América Latina. La riqueza de recursos naturales del país es uno de los pilares fundamentales de este avance. México cuenta con condiciones ideales para la generación de energía solar en extensas zonas de su territorio (Jahanger et al., 2022), particularmente en el norte, así como con fuertes corrientes de viento en regiones como el Istmo de Tehuantepec, que favorecen el desarrollo de la energía eólica (de Jesús-Fernández y Watson, 2022). Además, la actividad geotérmica del país ofrece oportunidades únicas para la generación de energía geotérmica, mientras que la biomasa y los recursos hidroeléctricos complementan un portafolio energético diverso y prometedor (Alemán-Nava et al., 2014).



Figura 3. *Tipos de fertilizante comerciales.*

Estos desarrollos no solo apuntan a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, sino también a mejorar la seguridad energética del país, atrayendo inversiones

y generando empleos en sectores emergentes. Sin embargo, para aprovechar plenamente este potencial, es fundamental fortalecer las políticas públicas (Martínez-Cruz y Núñez, 2021), las infraestructuras de transmisión (Sovacool, 2021) y las estrategias de almacenamiento de energía (Pérez-Denicia et al., 2020).



Figura 4. *El fertilizante como nutrientes de las plantas.*

Paralelamente, en sectores clave como la agricultura, se están promoviendo soluciones sostenibles para mitigar el impacto ambiental de las prácticas tradicionales (Xuan-Huang et al., 2024). Los fertilizantes, esenciales para garantizar la productividad agrícola, actualmente dependen en gran medida de la utilización de combustibles fósiles como el gas natural y el carbón en sus procesos de fabricación (Khan et al., 2024). Esta dependencia genera importantes emisiones de dióxido de carbono, contribuyendo al calentamiento global (Zhang et al., 2021). En respuesta a este desafío, se han comenzado a explorar alternativas sostenibles, entre las que destacan la producción de fertilizantes utilizando hidrógeno verde y procesos de síntesis impulsados por energías renovables. Estas innovaciones tienen el potencial de transformar radicalmente la agricultura, permitiendo no solo una reducción

significativa en las emisiones de gases de efecto invernadero, sino también el fortalecimiento de prácticas agrícolas más respetuosas con el medio ambiente (Kausar et al., 2024).

La implementación de estas tecnologías y prácticas sostenibles no solo contribuirá a la mitigación del cambio climático, sino que también generará beneficios económicos y sociales, posicionando a México como un actor clave en la construcción de un futuro más verde y resiliente a nivel global (Verdugo et al., 2024).

La descarbonización se ha convertido en un pilar esencial en los esfuerzos globales para mitigar el cambio climático (Weijie y Shittu, 2025), desempeñando un papel crucial en la transición hacia economías sostenibles y resilientes (Dimic et al., 2024). Este proceso implica la reducción drástica de las emisiones de carbono mediante la adopción de tecnologías limpias (Kaashyap-Balaji, et al., 2024; Mandal et al., 2024), el diseño de procesos (Stefanussen-Foslie et al., 2023) industriales más eficientes (Ding et al., 2023) y la integración de energías renovables en los sistemas productivos (Shadram y Mukkavaara, 2024). Además de reducir la dependencia de los combustibles fósiles, la descarbonización fomenta la innovación en sectores clave como el transporte, la generación de energía y la agricultura, estableciendo nuevas vías para alcanzar los objetivos climáticos establecidos en acuerdos internacionales como el Acuerdo de París (Kumar-Jaysawal et al., 2022; El-Jaouhari et al., 2023). En este contexto, las herramientas de aprendizaje automático han emergido como aliados estratégicos en la lucha contra el cambio climático (Wang et al., 2024). Estas tecnologías permiten analizar grandes volúmenes de datos de manera eficiente, ofreciendo capacidades avanzadas para optimizar procesos industriales, prever tendencias ambientales y diseñar soluciones innovadoras (Raya-Tapia et al., 2023). Por ejemplo, el aprendizaje automático puede identificar patrones en el uso de recursos, lo que permite optimizar cadenas de suministro para reducir su huella de carbono (López-Flores et al., 2023). Asimismo, puede ser empleado para mejorar la eficiencia energética en edificios, prever demandas energéticas y diseñar redes inteligentes que integren fuentes renovables de manera más efectiva (Xiao et al., 2024).

Además, estas herramientas son fundamentales en la evaluación y mejora de tecnologías emergentes (Vashishtha et al., 2025), como la captura (Jeong-Park et al., 2024) y almacenamiento de carbono y la producción de hidrógeno verde (Alipour-Bonab et al., 2024).

Al simular escenarios y modelar impactos ambientales, el aprendizaje automático contribuye a acelerar el desarrollo y la implementación de soluciones tecnológicas que apoyen la transición hacia una economía baja en carbono (Soo et al., 2024).

En el ámbito agrícola, el aprendizaje automático puede optimizar el uso de fertilizantes y agua (Liao et al., 2023), promoviendo prácticas más sostenibles que no solo mejoran la productividad, sino que también reducen las emisiones de gases de efecto invernadero asociadas a estas actividades (Feng et al., 2024). Por otra parte, su aplicación en el monitoreo y modelado del cambio climático permite prever impactos a largo plazo, lo que facilita la toma de decisiones informadas en políticas públicas y estrategias de adaptación (Ahmad-Khan et al., 2024).

La combinación de descarbonización y aprendizaje automático no solo está transformando los sectores productivos tradicionales (Zhao et al., 2024), sino que también está sentando las bases para una economía más circular, resiliente e inclusiva. Con estas herramientas, es posible acelerar la transición energética y avanzar hacia un mundo sostenible donde el crecimiento económico esté alineado con la protección del medio ambiente y la justicia climática (Abudu et al., 2024).

1.1 ANTECEDENTES

En la actualidad se han reportado diversos trabajos de investigación donde se propone el uso de hidrogeno verde y amoníaco verde como materia prima o energía, tal es el caso de Harichandan et al. (2023) donde mencionan que el hidrógeno verde es una alternativa atractiva para el sistema energético dado que numerosas industrias, como la fabricación de mineral de hierro y acero, los fertilizantes, las refinerías y el transporte producen volúmenes significativos de dióxido de carbono y el hidrógeno verde desempeñará un papel crucial en la descarbonización de estos sectores. Herdem et al. (2023) reportan que el acoplamiento de electrolizadores de agua con fuentes solar y eólicas pueden ser una solución prometedora en un futuro cercano para utilizar el exceso de energía renovable. Wang et al. (2019) analizan las tecnologías de producción de hidrógeno basado en agua y biomasa, tomando en cuenta los impactos tecnológicos, económicos y ambientales. Meda et al. (2023) mencionan que el hidrogeno verde demuestra ser un candidato ideal en este dominio y puede generarse de manera sostenible mediante la electrolisis del agua utilizando energía solar, ya que sintetizado

de esta manera genera cero emisiones de carbono y es un activo adecuado para la descarbonización del medio ambiente. Patnaik et al. (2023) presentan y discuten las diferentes formas de producir hidrógeno verde, además analizan varias metodologías para minimizar las emisiones de CO₂ en las industrias siderúrgicas y compararlas con la tecnología del hidrógeno verde. Guerra et al. (2020) estudiaron las variables económicas y técnicas que influyen en la producción de amoníaco, ejecutando modelos de optimización y análisis de sensibilidad (p. ej., tiempo de operación, tamaño de la planta, costo de electricidad y precio de venta de amoníaco). Nayak-Luke et al. (2018) se centraron en el impacto de la intermitencia de las energías renovables en el tamaño de las plantas. Rouwenhorst et al. (2019) evaluaron y compararon alternativas para las diferentes etapas en la obtención de amoníaco como en la producción de hidrógeno, nitrógeno, síntesis, separación, almacenamiento y combustión de amoníaco. Salmon y Bañares-Alcántara (2021) realizaron un exhaustivo estudio en el que identificaron los beneficios y limitaciones entre el amoníaco y otros transportadores de hidrógeno, así como los costes asociados a su producción y transporte. El hidrógeno es un vector energético viable utilizado en aplicaciones como el suministro de energía y la exportación de energía química tanto a pequeña como a gran escala, respectivamente (Abdin et al., 2020). Así, se han realizado diferentes investigaciones sobre la producción de hidrógeno convencional (Bartels et al., 2010), hidrógeno verde (Serrano-Arévalo et al., 2023) y diseño de cadenas de suministro (Li et al., 2019). Aunque el hidrógeno se utiliza en la industria química, y pese a su eficiencia como combustible, su baja densidad energética restringe su almacenamiento y transporte (Tarhan y Çil, 2021). Teniendo esto en cuenta, las ventajas del amoníaco sobre el hidrógeno son evidentes; El amoníaco tiene una mayor densidad energética y un menor costo por unidad de energía, y el amoníaco es más fácil de transportar, de manipular y tiene mayor capacidad de producción (Valera-Medina et al., 2018). Dado que la quema de combustibles convencionales es responsable de la producción de GEI, el amoníaco se ha convertido en un candidato digno en la búsqueda de menores emisiones de carbono; sin embargo, una de las desventajas de utilizar amoníaco como combustible puro es su baja tasa de combustión. Como resultado, se han creado diferentes estudios para aumentar la velocidad de combustión del amoníaco mediante la adición de mezclas de hidrógeno y metano (Chai et al., 2021; Cardoso et al., 2021). Olabi et al. (2023) analizan la evaluación de los diferentes métodos de producción de amoníaco verde,

del mismo modo sus aplicaciones prometedoras en los sectores energéticos. Zhao et al. (2023) utilizaron un modelo de optimización mixto-entero lineal para el suministro de electricidad con bajas emisiones de carbono y un sistema de energía a múltiples escalas de tiempo que consta de baterías.

1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

A pesar de los significativos beneficios ambientales y económicos asociados con la producción de hidrógeno, amoníaco y urea verdes, su adopción y desarrollo a gran escala enfrentan diversos obstáculos técnicos, económicos y regulatorios. La generación de estos productos aún no alcanza la eficiencia ni la rentabilidad de los métodos convencionales basados en combustibles fósiles, lo que limita su competitividad en un mercado global dominado por tecnologías tradicionales. Un desafío importante radica en la infraestructura para la producción, almacenamiento y distribución de estas sustancias verdes. La implementación de sistemas adecuados requiere inversiones iniciales muy elevadas, lo que desalienta a muchos actores industriales y dificulta la integración de estas tecnologías en cadenas de suministro existentes. Además, las normativas actuales a menudo no están diseñadas para apoyar el desarrollo y la comercialización de productos verdes, lo que genera incertidumbre para los inversores y ralentiza el progreso.

La evaluación ambiental de los procesos verdes ofrece ventajas significativas al identificar oportunidades para reducir el impacto ambiental y mejorar la eficiencia a lo largo de la cadena de valor. En este contexto, la optimización de procesos mediante inteligencia artificial (IA) emerge como una solución prometedora. Sin embargo, su aplicación en la producción de hidrógeno, amoníaco y urea verdes enfrenta desafíos adicionales, como la necesidad de datos confiables, modelos predictivos robustos y un cambio cultural hacia la adopción de tecnologías digitales. La IA puede desempeñar un papel clave al optimizar las rutas de síntesis, mejorar la eficiencia energética y reducir los costos operativos, pero su implementación a gran escala aún está en una etapa inicial. Para superar estos desafíos, es fundamental diseñar estrategias integradas que combinen el desarrollo de infraestructuras adecuadas, el fortalecimiento de capacidades técnicas y campañas de sensibilización. De esta forma, se puede acelerar la transición hacia una economía sostenible y descarbonizada.

1.3 JUSTIFICACIÓN

En la actualidad, el consumo de energía eléctrica ha crecido de manera alarmante debido a la inserción en una sociedad caracterizada por un alto nivel de consumo y un crecimiento demográfico acelerado, lo que ha intensificado la dependencia de fuentes de energía tradicionales. Este modelo, basado principalmente en combustibles fósiles como el gas natural, el petróleo y el carbón, genera emisiones significativas de dióxido de carbono y otros gases de efecto invernadero, contribuyendo de manera directa al cambio climático.

En este escenario, la transición hacia alternativas sostenibles no solo es deseable, sino urgente. La producción de amoníaco verde se perfila como una solución prometedora para abordar estos desafíos. A diferencia del proceso Haber-Bosch convencional, que depende de fuentes fósiles y es responsable de un elevado porcentaje de emisiones globales, el amoníaco verde utiliza hidrógeno obtenido mediante electrólisis alimentada por fuentes de energía renovable, como la solar y la eólica. Este enfoque no solo permite reducir drásticamente las emisiones de gases de efecto invernadero, sino que también promueve el almacenamiento eficiente de energía renovable, facilitando su integración en la matriz energética. Además, la urea verde juega un papel crucial en la descarbonización de sectores industriales intensivos en energía y en la agricultura, al ser un fertilizante fundamental para la generación de alimentos. Su desarrollo fomenta la independencia energética, reduce la huella de carbono de las cadenas de suministro y fortalece la economía circular. Este proyecto se justifica en la necesidad de abordar los retos ambientales y energéticos actuales mediante la implementación de tecnologías innovadoras y sostenibles, contribuyendo a una transición energética efectiva y a la mitigación del cambio climático, mientras se exploran esquemas que maximicen la eficiencia y reduzcan el impacto ambiental de procesos industriales clave.

1.4 HIPÓTESIS

La implementación de estrategias de simulación y optimización de procesos en la producción de amoníaco a partir de fuentes renovables, como el hidrógeno verde, la captura de CO₂ y su integración en la cadena de suministro, permite mejorar la eficiencia operativa y reducir significativamente el impacto ambiental. Esto facilitaría la producción de fertilizantes sostenibles, como la urea verde, y consolidaría el desarrollo de una industria

química más ecoeficiente, contribuyendo al cumplimiento de los objetivos de sostenibilidad global.

1.5 OBJETIVO GENERAL

Desarrollar y aplicar herramientas de simulación y diseño óptimo en procesos químicos para la obtención de productos verdes de alto valor agregado.

1.5.1 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Implementar una estrategia de simulación en el software simulador Aspen PlusTM.
 - 1.1 Modelo hidrógeno verde.
 - 1.2 Modelo amoníaco verde.
 - 1.3 Modelo de captura de carbono.
 - 1.4 Modelo de urea verde.
2. Evaluar el ciclo de vida.
 - 2.1 Análisis completo de vida del proceso considerando todos los aspectos ambientales.
 - 2.2 Análisis económico.
 - 2.3 Métricas de la economía circular.
3. Aplicar métodos de diseño y optimización.
 - 3.1 Acoplamiento de Inteligencia Artificial.
 - 3.2 Integración de energías renovables.
 - 3.3 Uso sostenible de recursos naturales.
 - 3.4 Optimización de la eficiencia energética.
 - 3.5 Optimización económica.
 - 3.6 Optimización de producto final.

2. MARCO TEÓRICO

La transición hacia un modelo energético sostenible requiere la implementación de tecnologías limpias y eficientes, respaldadas por un marco teórico sólido que permita comprender los procesos químicos, las rutas tecnológicas y las implicaciones ambientales asociadas. En este sentido, se revisaron conceptos clave relacionados con la síntesis de amoníaco y urea, destacando tanto las tecnologías convencionales como los avances recientes hacia procesos más sostenibles. Asimismo, se abordó la integración de fuentes de energía renovable en la industria química, con especial énfasis en el papel del hidrógeno verde como vector energético esencial para la descarbonización. Además, el marco teórico explorará cómo la optimización de procesos mediante inteligencia artificial y técnicas de modelado avanzado puede contribuir a mejorar la eficiencia, reducir costos y minimizar el impacto ambiental de las operaciones industriales. También se discutirá la importancia de rediseñar las cadenas de suministro para incorporar criterios de sostenibilidad y eficiencia energética.

Este capítulo tiene como objetivo sentar las bases teóricas que orientarán el desarrollo del proyecto, estableciendo una conexión entre el conocimiento existente y las innovaciones propuestas. Con ello, se busca garantizar un enfoque integral que abarque los aspectos técnicos, ambientales y económicos necesarios para una transición hacia una producción sostenible y eficiente.

2.1 SIMULACIÓN DE PROCESOS

La simulación es el estudio de un sistema o sus partes mediante la manipulación de su representación de matemática o de su modelo físico y la simulación de procesos puede ser definida como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos que involucren el cálculo de balances de materia y energía acoplado con el equilibrio de fases y con las ecuaciones de transporte y cinética química. La solución de estos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento de dicho proceso (Martínez-Sifuentes et al., 2000; Gil-C et al., 2011).

En la simulación de procesos, las decisiones son predefinidas por quien modela en la forma de reglas de decisión y las variables de operación, además, la simulación de proceso efectuada en tiempo comprimido en vez de tiempo real, esto permite a quien modela correr la simulación miles de veces más rápido que el tiempo real y permite correr una multitud de experimento en un corto periodo de tiempo. Actualmente, la simulación está jugando un papel muy importante en la industria química, como una herramienta adecuada y oportuna para el diseño, caracterización, optimización y monitoreo del funcionamiento de procesos industriales. La simulación de procesos es útil durante todo el ciclo de vida de un proceso, desde la investigación y el desarrollo hasta el diseño del proceso y la producción (AspenTech, 2015).

El modelado se refiere a todos los pasos para desarrollar y validar un modelo para el proceso, mientras que la simulación se refiere al uso del modelo desarrollado para estudiar el comportamiento/respuesta del proceso para uno o más conjuntos de variables de entrada y diseño. En general, el modelado y la simulación se utilizan para optimizar la operación y el diseño del proceso. La optimización mejora el rendimiento de un proceso al cambiar las condiciones operativas, como la temperatura, la presión y la velocidad de flujo de las secuencias de proceso, pero sin cambiar el diagrama de flujo de ningún equipo o proceso. El reacondicionamiento y modernización de procesos se refiere al rediseño de una planta para el(los) objetivo(s) especificado(s), con mayor rendimiento, un menor consumo de energía y una calidad especificada del producto. Esto se logra mediante cambios en el equipo existente y/o la adición de equipos nuevos (que conducen a una nueva configuración del proceso) además de cambios en las condiciones de operación (Sharma y Rangaiah, 2016).

La variedad de aplicaciones de los simuladores de procesos es muy grande, anteriormente sólo lo usaban los ingenieros que diseñaban procesos, ahora una gran variedad de ingenieros lo utilizan. En principio, la simulación de procesos puede ser útil en todas las etapas de desarrollo de un proyecto industrial. En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación (Hernández-Pérez, 2020).

La simulación de procesos puede utilizarse en las siguientes etapas de desarrollo de un proyecto industrial (Martínez-Sifuentes et al., 2000; Himmelblau y Bischoff, 2021):

- a) Investigación y desarrollo. Una simulación sencilla se puede usar para probar la factibilidad técnica y económica del proyecto.
- b) Etapa crítica en la toma de decisiones. Se prueban diferentes alternativas de procesos y condiciones de operación y se toman decisiones. Cuando un proceso es económicamente atractivo, se deben probar diferentes alternativas de tamaño y localización de la planta industrial y determinar condiciones de operación óptimas.
- c) Planta piloto. Simulación con modelos más sofisticados para obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
- d) Diseño. La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.
- e) Simulación de plantas existentes. Puede ser muy útil cuando es necesario cambiar las condiciones de operación o cuando se requieren sustituir materias primas.

Para crear una simulación eficiente se debe contar con conocimientos sobre las propiedades física y químicas de los componentes y mezclas involucradas en el proceso a simular, de modo que sea factible realizar el cálculo requerido en un computador. La aplicación de la simulación de procesos se utiliza para evaluar el efecto en los cambios de los procesos, creación de nuevas rutas de procesos, costos de producción y equipos, impacto ambiental e investigación. Cabe mencionar, que la simulación de procesos ofrece resultados aproximados y supuestos, sin embargo, permite describir una propiedad en un rango bastante amplio de condiciones de operación, como temperaturas y presiones que no estuviesen cubiertas a totalidad por datos reales tomados in situ. De este modo, pueden hacerse estudios completos permitiendo hacer extrapolar valores dentro de ciertos límites para buscar condiciones de operación fuera del rango de propiedades conocidas.

2.2 SOFTWARE DE SIMULACIÓN

Existen simuladores para procesos industriales, químicos o bioquímicos. Un software de simulación de procesos es la mejor manera de realizar la simulación de procesos industriales (Ponce-Ortega y Hernández-Pérez, 2019), esto se debe a la gran cantidad de

ecuaciones y métodos numéricos que se necesitan para una correcta representación y predicción del comportamiento en la realidad.

Además, los simuladores de procesos generalmente están programados para usarse en el sistema operativo de una computadora, por lo que es aconsejable verificar la compatibilidad del software que se usará con el equipo que va a funcionar. Actualmente, existen varios simuladores de procesos que se distribuyen comercialmente y que ya tienen ecuaciones de modelado para ciertos equipos y métodos numéricos programados para la solución de ecuaciones termodinámicas específicas. Otro aspecto importante del software de simulación comercial es que tienen una base de datos simple con componentes usualmente utilizados en la industria de la transformación, así como sus propiedades fisicoquímicas y termodinámicas (Ponce-Ortega y Hernández-Pérez, 2019).

2.2.1 SOFTWARE SIMULADOR ASPEN PLUS™

El software simulador Aspen Plus™ es un simulador de procesos comercial ampliamente utilizado para la simulación de procesos, donde el enfoque implementado considera cero grados de libertad y se implementan simulaciones modulares secuenciales para analizar procesos (Hernández-Pérez et al., 2020).

Aspen Plus™ es el software de simulación de procesos químicos líder en el mercado utilizado por las industrias a granel, especializadas y bioquímicas para el diseño y la operación (AspenTech, 2015). Las principales ventajas de este simulador consisten en una gran base de datos de compuestos químicos específicos y operaciones unitarias.

Sin embargo, los modelos por unides de proceso menos comunes y/o nuevas no están fácilmente disponibles en los simuladores, pero pueden estar disponibles en la literatura o pueden desarrollarse a partir de principios elementales. Se puede implementar un modelo matemático para una nueva unidad de proceso en Aspen Custom Modeler, y luego se puede exportar a (incluido en) Aspen Plus™ o Aspen HYSYS™ para simular procesos que tengan una nueva unidad de proceso además de unidades proceso comunes como intercambiadores de calor, compresores, reactores y columnas (Sharma y Rangaiah, 2016).

Para el correcto funcionamiento de estas simulaciones, es necesario alimentar el programa con valores que se encuentren dentro de un grado adecuado, lo anterior para evitar

errores en el equipo de modo que surjan indeterminaciones debido al comportamiento termodinámico de las sustancias utilizadas y las interconexiones del equipo deben estar correctamente indicadas.

2.3 HIDRÓGENO VERDE

El hidrógeno es el primer elemento químico de tabla periódica, también es el elemento más ligero y abundante en el universo. Tiene la gran ventaja de ser un portador de energía sin carbono y puede producirse por electrolisis de agua o reformando con vapor de gas natural, carbón o biomasa (Muñoz-Díaz et al., 2023). Se considera el portador de energía del futuro debido a la mayor densidad de energía en masa y como beneficio tendremos menos problemas ambientales (Marchenko y Solomin, 2015).

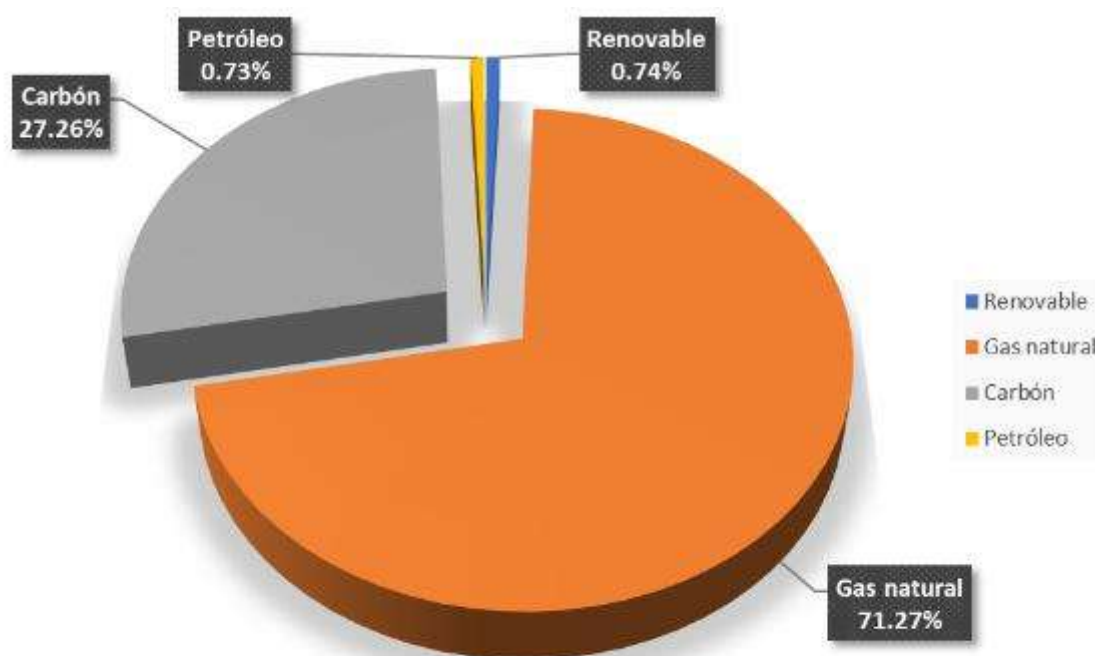


Figura 5. *Estado actual de la producción mundial de hidrógeno por fuente.**

*Nota. Adaptado de IEA, Global demand for pure hydrogen, 1975-2018, IEA, Paris. Current status of worldwide hydrogen production by source, IEA. Licence: CC BY 4.0

EL hidrógeno ofrece una gama de beneficios como portador de energía limpia, que está recibiendo una atención cada vez mayor como prioridades políticas. La creación de un gran mercado para el hidrógeno como vector energético ofrece soluciones eficaces tanto para

el control de emisiones y como vector para la seguridad del suministro energético; además, puede utilizarse como medio de almacenamiento de electricidad procedente de energías renovables intermitentes, como la energía eólica (Ball y Wietschel, 2009).

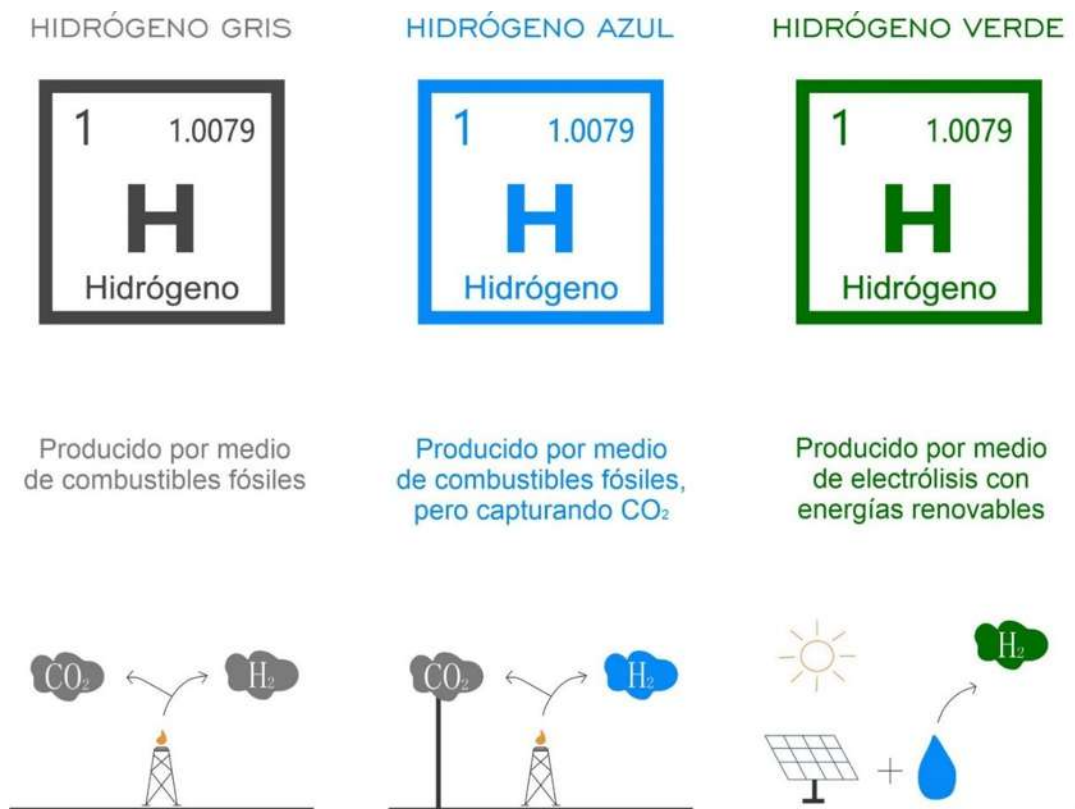


Figura 6. Colores de hidrógeno.

Es posible clasificar el hidrógeno por su proceso de producción, generando los conocidos “colores de hidrógeno”. Hage et al. (2021) y Patnaik, et al. (2023) reportan que hay tres formas de generar hidrógeno, representadas por los colores, gris, azul y verde; el hidrógeno gris, es el proceso más común, consiste en utilizar gas natural o carbón como materia prima que reacciona con vapor a altas temperaturas y presiones para producir gas de síntesis, que consiste principalmente en hidrógeno y monóxido de carbono, luego el gas de síntesis se hace reaccionar con agua adicional para producir hidrógeno y CO_2 , es un proceso muy establecido, pero genera grandes cantidades de CO_2 ; el hidrógeno azul, se considera el segundo proceso más común, se basa en los mismos procesos básicos que el hidrógeno gris, pero atrapa hasta el 90% de las emisiones de gases de efecto invernadero a través de la tecnología de captura de carbono; finalmente, el hidrógeno verde es el proceso más

prometedor, se basa en las energías renovables para impulsar la electrolisis que divide las moléculas en hidrógeno y oxígeno, la electrolisis es un proceso que requiere de bastante energía y que esta energía provenga de fuentes renovables de menor costo hace que el proceso de obtener hidrógeno verde.

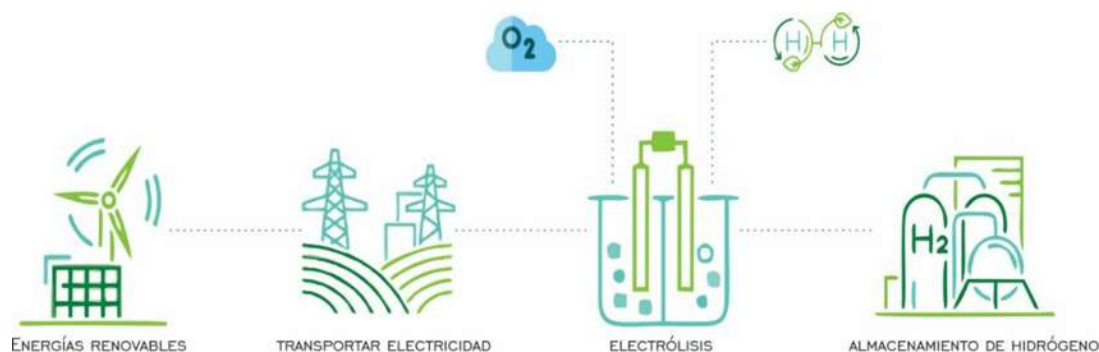


Figura 7. *Modelo de producción de hidrógeno verde.*

El hidrógeno verde tiene muchas ventajas en comparación con el hidrógeno tradicional. En primer lugar, es una fuente de energía renovable y no emite gases de efecto invernadero, lo que lo convierte en una alternativa sostenible y limpia a los combustibles fósiles. Además, el hidrógeno verde se puede producir localmente y puede utilizarse para generar energía renovable en pequeñas cantidades.

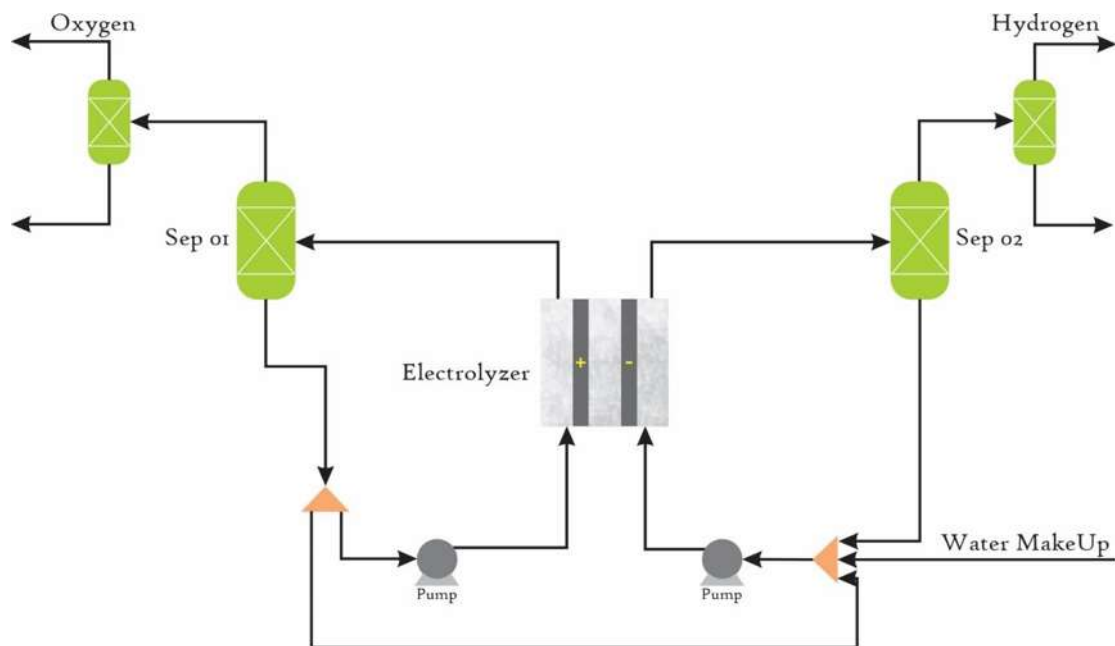


Figura 8. *Diagrama de producción de hidrógeno verde.*

Los métodos para la producción de hidrógeno verde son: reacciones de disociación del agua (p. ej., electrolisis del agua, termólisis del agua, disociación fotocatalítica del agua y disociación termoquímica del agua) y mediante la deshidrogenación de moléculas portadoras de hidrógeno (Wang et al., 2019). La aplicación del hidrogeno se enfoca en cada parte de nuestra vida social, incluyendo la industria, el hogar o el espacio. Generalmente se usa principalmente en la refinación del petróleo, la producción de amoniaco y en menor medida en la refinación de metales como el níquel, tungsteno, molibdeno, cobre, zinc, uranio y plomo (Sharma y Ghoshal, 2015; Nikolaidis y Poullikkas, 2017).



Figura 9. *Ciclo del fertilizante en la agricultura.*

2.4 NITRÓGENO VERDE

El nitrógeno existe en forma de moléculas diatómicas (N_2), compuestas por dos átomos de nitrógeno unidos por un enlace triple. A temperatura ambiente y presión atmosférica, el nitrógeno es un gas incoloro, inodoro e insípido (Clauwaert et al. 2017).

La importancia del nitrógeno en la naturaleza es fundamental, ya que desempeña un papel esencial en números procesos biológicos y ecológicos. El nitrógeno es un elemento químico necesario para la vida, y su disponibilidad y ciclo en los ecosistemas son críticos para mantener la salud y el equilibrio ambiental. El nitrógeno experimenta un ciclo continuo en la naturaleza, conocido como el ciclo del nitrógeno. Este ciclo incluye procesos como la fijación del nitrógeno, la amonificación y la nitrificación, la desnitrificación y la asimilación del nitrógeno por parte de las plantas (Tu et al., 2017).

A pesar de su aparente inactividad, el nitrógeno participa en una variedad de reacciones químicas, incluida la formación de compuestos nitrogenados como los óxidos de nitrógeno (NO_x) y amoníaco (NH_3) en condiciones adecuadas.

La obtención del nitrógeno del aire atmosférico es un proceso crucial debido a la abundancia del nitrógeno molecular en la atmosfera terrestre. Aunque el nitrógeno constituye aproximadamente el 78% del aire, la forma en que se extrae y se utiliza depende de diversos métodos industriales.

2.3.2 DESTILACIÓN CRIOGÉNICA

La destilación criogénica emerge como un método altamente eficaz para la separación de los componentes del aire, capitalizando las disparidades en los puntos de ebullición de los gases que conforman la atmósfera. Este procedimiento se desenvuelve en varias etapas:

- **Compresión del aire:** Inicialmente, el aire atmosférico es sometido a compresión para elevar tanto su presión como su temperatura. Luego, este aire comprimido experimenta un enfriamiento a través de intercambiadores de calor.
- **Separación por refrigeración:** El aire enfriado se expande mediante una unidad de expansión, generando una marcada disminución de la temperatura y permitiendo que los distintos componentes del aire se liquen a temperaturas específicas.
- **Separación de gases:** La mezcla licuada se introduce en una columna de destilación, donde tiene lugar la segregación de los gases. El oxígeno líquido

se recolecta en la parte superior de la columna, mientras que el nitrógeno líquido se recoge en la parte inferior.

Este enfoque demuestra su eficacia al producir nitrógeno de alta pureza y se emplea en sectores como la metalurgia, la electrónica y la producción de alimentos.

2.3.3 ADSORCIÓN POR CAMBIO DE PRESIÓN

La adsorción por cambio de presión, comúnmente denominada PSA (Pressure Swing Adsorption), representa otro método ampliamente utilizado para extraer nitrógeno del aire. Este proceso incorpora el uso de zeolitas u otros materiales adsorbentes, con pasos distintivos que abarcan:

- Adsorción: Mediante la compresión del aire, este atraviesa un lecho de adsorbente donde se retienen componentes no deseados, como el oxígeno, mientras que el nitrógeno transcurre sin obstáculos.
- Desorción: Se reduce la presión en el lecho adsorbente, provocando la liberación de los gases adsorbidos. En este punto, el nitrógeno se recolecta de manera selectiva.
- Recuperación y Almacenamiento: El nitrógeno liberado se recolecta y almacena en un tanque, mientras que el adsorbente se regenera para el próximo ciclo.

Este método resulta idóneo para aplicaciones que demandan producción continua y flujos variables de nitrógeno, como en la industria química y alimentaria.

2.5 AMONÍACO VERDE

El amoníaco (NH_3) es un químico industrial muy importante, con aproximadamente 176 millones de toneladas producidas anualmente, principalmente para uso en la agricultura como fertilizante (p. ej., urea), además, se puede utilizar como combustible libre de carbono, tiene una alta densidad de hidrógeno (la molécula de NH_3 tiene contenido de H del 17.75% en peso), que se puede almacenar y transportar fácilmente aprovechando infraestructuras existentes (Spatolisano y Pellegrini, 2023).

El amoníaco se ha convertido en uno de los compuestos químicos más buscados debido a su empleo en agricultura, energía y productos farmacéuticos. El amoníaco también se utiliza en la producción de papel, plásticos, explosivos, fibras y otros productos químicos de la industria (Chisalita et al., 2020). El sector agrícola, principal consumidor de amoníaco en la producción de fertilizantes, representa el 85% de la producción total de amoníaco (Rossetti, 2020). Los fertilizantes ricos en nitrógeno son fundamentales en el sector agrícola ya que generan una gran demanda de compuestos como el amoníaco y el ácido nítrico que se utilizan como materias primas. También es importante tener en cuenta que la demanda de estos compuestos depende del aumento de la población mundial y de sus necesidades dietéticas (Lim et al., 2021). Actualmente se producen alrededor de 200 millones de toneladas métricas de NH_3 cada año en todo el mundo (Aziz et al., 2020).

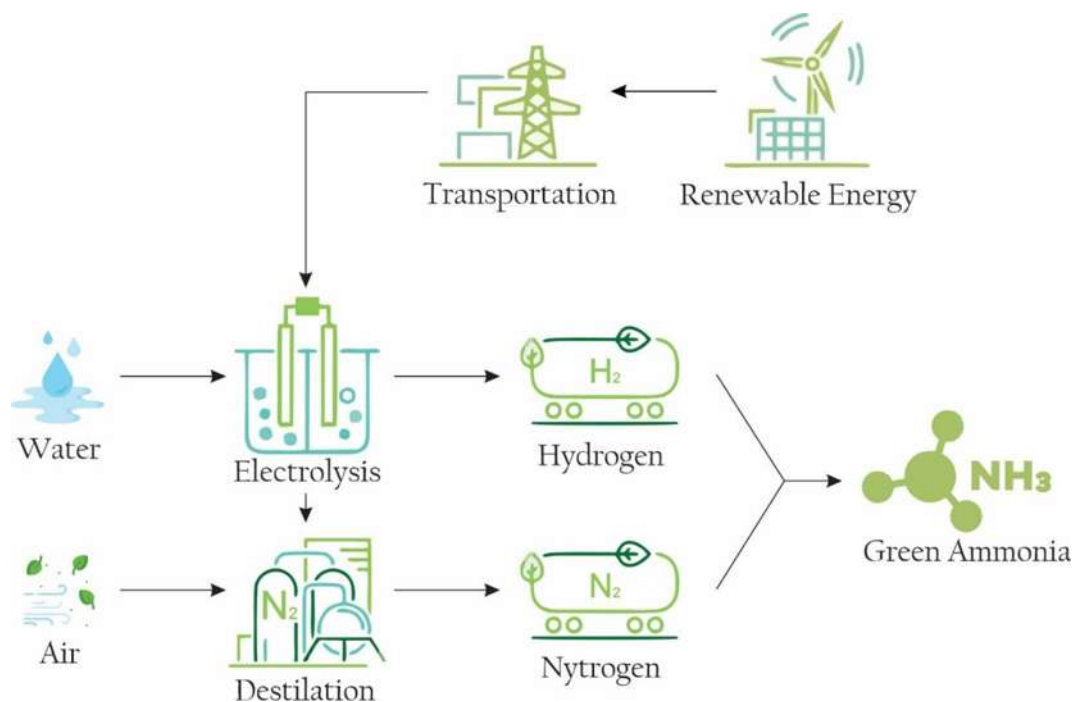


Figura 10. *Modelo de producción de amoníaco verde.*

Actualmente, el amoníaco se produce a gran escala a través del método Haber-Bosch, el proceso se lleva a cabo en tres etapas principales:

- Producción de gas de síntesis: en esta etapa, se mezcla el gas de natural (una mezcla de metano, butano y otros hidrocarburos) con vapor de agua y se somete a altas temperaturas y presiones para producir gas de síntesis. El gas de síntesis es una

mezcla de monóxido de carbono e hidrógeno (que en algunos casos tiene dióxido de carbono y metano) y es la materia prima principal para la producción de amoníaco.

- Síntesis de amoníaco: en esta etapa, el gas de síntesis se mezcla con nitrógeno y se hace pasar por un catalizador de hierro a alta presión y temperatura. El nitrógeno y el hidrógeno se mezclan para producir amoníaco. La alta presión y temperatura son necesarias para favorecer la reacción de equilibrio hacia la formación de amoníaco.
- Separación y purificación del amoníaco: finalmente, el amoníaco producido se separa del gas de síntesis y se purifica para eliminar cualquier impureza. El amoníaco se comprime y se almacena en tanques para su posterior uso.

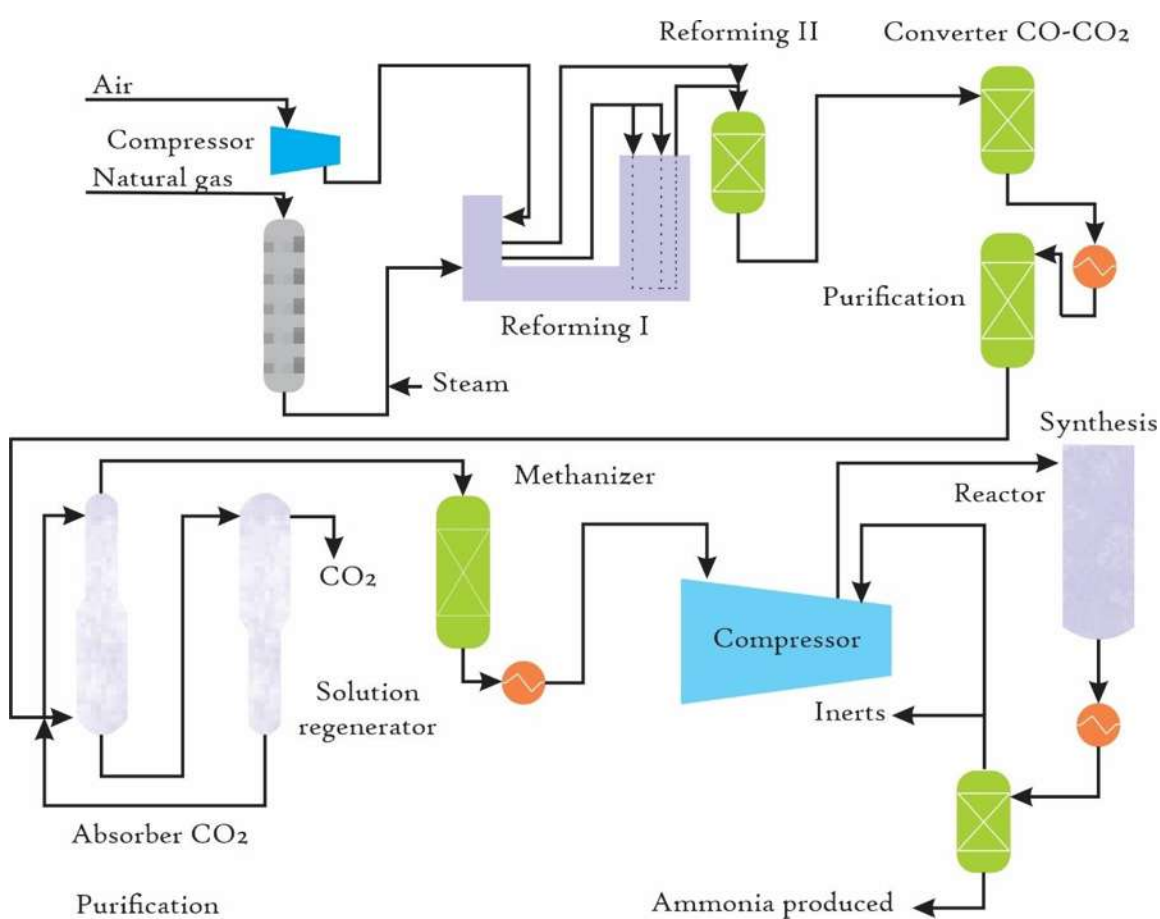


Figura 11. Diagrama de producción de amoníaco verde.

Aunque el proceso de Haber-Bosch ha sido utilizado durante décadas para la producción de amoníaco, tiene algunas desventajas ambientales significativas. En primer lugar, requiere grandes cantidades de energía (debido a las altas temperaturas y presiones

durante la síntesis) y emite grandes cantidades de dióxido de carbono (CO_2) durante la producción de gas de síntesis y la alta presión y temperatura necesarias para la síntesis de amoníaco (Nowicki et al., 2023).

Dado que se tiene en vista el objetivo de lograr la descarbonización, los investigadores se están centrando en permitir la síntesis de amoníaco a partir de hidrógeno verde partiendo de las fuentes de energías renovables. La transformación del hidrógeno verde en amoníaco es un paso necesario para reducir el costo final de la electricidad renovable altamente fluctuante en un sistema de energía completamente verde (Sagel et al., 2022). Se necesita un rediseño de una cadena de valor para mantenerse al día con la velocidad del cambio asociado con la descarbonización global y crear un camino claro para las materias primas verdes.

La síntesis de amoníaco verde requiere fuentes de energía que deriven de combustibles fósiles y otros recursos renovables. El amoníaco es amigable con el medio ambiente ya que no tiene los efectos directos que tienen los gases de efecto invernadero (GEI) y se sintetiza a través de fuentes de energía renovables (Valera-Medina et al., 2018). Algunas de las posibles alternativas a estas fuentes de energía incluyen la gasificación de biomasa (Zhang et al., 2020) y la electrólisis del agua. Con la electrólisis del agua, la energía renovable se puede utilizar no solo para producir hidrógeno, sino también para separar el nitrógeno del aire y alimentarlo a un proceso de síntesis de amoníaco (Palys et al., 2021); debido a este método de producción, este compuesto se conoce como “amoníaco verde” (Chehade y Dincer, 2021).

El amoníaco verde, también conocido como amoníaco de origen renovable, es un compuesto químico que se produce a partir de energías renovables, como la energía eólica, energía solar y la biomasa. A diferencia del amoníaco tradicional que se produce a partir de combustibles fósiles como el gas natural y el petróleo, el amoníaco verde es una alternativa más sostenible y respetuosa con el medio ambiente. Se produce a partir de la electrólisis del agua y el nitrógeno atmosférico.

2.6 CAPTURA DE CARBONO

Las emisiones excesivas de dióxido de carbono han exacerbado el calentamiento global desde la era industrial, ocasionando un notable incremento en la frecuencia y severidad

de desastres climáticos como incendios forestales y ciclones tropicales intensos (Zhang et al., 2024) estas emisiones son especialmente preocupantes debido a su impacto directo en el calentamiento global. Según la Agencia Internacional de la Energía (AIE, 2022), las emisiones globales de CO₂ de la industria energética en 2019 se estimaron en 33,4 Gt, lo que corresponde a un aumento del 16% desde 2009. Se reconoce ampliamente que ciertas industrias, como la producción de cemento, la petroquímica y las centrales eléctricas de carbón, son responsables de una significativa cantidad de emisiones de dióxido de carbono. Estas industrias contribuyen aproximadamente con el 56% del total de emisiones de CO₂ a nivel global. La reducción de las emisiones de estas fuentes industriales se ha convertido en un objetivo crucial para mitigar los efectos adversos sobre el medio ambiente y la sociedad (Fu et al., 2024).

La captura y almacenamiento de carbono (CCS) es reconocida como una herramienta crucial en la estrategia global para mitigar el cambio climático, sirviendo como un puente entre nuestra actual dependencia de los combustibles fósiles y un futuro energético sostenible dominado por fuentes renovables. Implementar CCS a gran escala en fuentes estacionarias presenta desafíos significativos, especialmente en términos de costos. Una estrategia para reducir estos costos podría ser la implementación inicial en escalas más pequeñas y controladas, lo cual también ofrece la oportunidad de optimizar tecnologías y procesos (Bains et al., 2017).

El sector industrial, en particular, enfrenta desafíos considerables en la reducción de sus emisiones de CO₂. Identificar áreas donde la captura de carbono (CC) pueda realizarse de manera más económica es fundamental para amortiguar los costos adicionales asociados con la implementación y demostración de tecnologías avanzadas. Por ejemplo, los procesos industriales como la producción de cemento y acero son responsables de una parte significativa de las emisiones de CO₂, y la implementación de CCS en estas industrias podría ser tanto un desafío técnico como una oportunidad económica.

La investigación y el desarrollo continúan explorando nuevas formas de hacer la CCS más rentable y eficiente. Esto incluye innovaciones en tecnologías de captura, métodos de almacenamiento seguro y la integración con otras estrategias de mitigación climática. Además, es crucial considerar no solo los costos directos de la tecnología CCS, sino también

los beneficios a largo plazo en términos de reducción de emisiones y mitigación de impactos ambientales.



Figura 12. Tipos de tecnologías de captura de carbono.

Bose et al. (2024) describen de forma general los tipos de tecnologías para la captura de carbono:

Absorción

El proceso de disolución del CO₂ en un medio a granel, como disolvente, es fundamental para la captura de este gas de los gases de combustión, aunque presenta desafíos significativos. Entre estos se incluyen la limitada capacidad de carga de CO₂, la corrosión del equipo, el alto consumo energético, la pérdida y degradación del solvente (Zhang y Donald., 2017).

Adsorción

Este método implica la captura de CO₂ de mezclas líquidas o gaseosas al adherirlo selectivamente a una superficie sólida denominada adsorbente. Es un proceso exotérmico y altamente selectivo, caracterizado por la unión física del dióxido de carbono al material adsorbente. A diferencia de la absorción convencional, este método ofrece ventajas

significativas como requisitos energéticos reducidos y una menor cantidad de inconvenientes operativos (Pardakhti et al., 2019). Además, la capacidad selectiva del adsorbente permite una separación eficiente del CO₂ de otros gases presentes en la corriente de alimentación, lo que lo convierte en una opción prometedora para aplicaciones industriales y ambientales de captura de carbono.

Separación por membrana

Este proceso emplea una membrana delgada que permite el paso selectivo de ciertas moléculas de gas mientras bloquea otras. La tecnología de separación por membrana ofrece una alternativa económica para la captura de CO₂ de los gases de combustión cuando no se requieren corrientes de gas de alta pureza (Liu et al., 2016). En comparación con otros métodos basados en el equilibrio, como la absorción y la adsorción, la separación por membrana presenta varias ventajas significativas: una eficiencia energética superior en la separación, aplicaciones industriales establecidas (como la separación de aire, la recuperación de hidrógeno y la captura de CO₂ del gas natural) y una alta densidad de empaquetamiento que minimiza el espacio necesario para la instalación. Además, la tecnología de membrana es adaptable a diversos procesos de captura de CO₂, incluyendo precombustión, poscombustión y oxidación.

Destilación criogénica

Este método implica la condensación de los componentes gaseosos de una mezcla a temperaturas extremadamente bajas mediante un sistema de refrigeración de ciclo cerrado y trampas de frío. Es efectivo para la captura de CO₂ proveniente de diversas fuentes como gases de combustión, gas natural y aire (Yousef et al., 2018).

2.6.1 CAPTURA DE CARBONO POR ABSORCIÓN

La absorción aplicada a los procesos de purificación de gases puede clasificarse dependiendo de la interacción entre los componentes del gas y el absorbente:

1. Absorción física: En este proceso el componente a eliminar de la corriente de gas es más soluble en el líquido que los demás componentes, pero no hay reacción química con el absorbente. La concentración en la fase líquida depende de la presión parcial del

componente en la fase gaseosa. Un ejemplo es la absorción de sulfuro de hidrógeno y dióxido de carbono en el dimetil éter de polietilenglicol (proceso Selexol).

2. Absorción con reacción reversible: Este tipo de absorción implica una reacción química entre el componente gaseoso que se absorbe y un componente de la fase líquida. Un ejemplo es la absorción de CO_2 con aminas. Con un aumento de temperatura se puede desorber el componente que pertenecía a la fase gas. Presenta una curva de equilibrio no lineal y la velocidad de reacción afecta al coeficiente de absorción.

3. Absorción con reacción irreversible: El producto de reacción que se forma no se descompone para regenerar el absorbente. Un ejemplo es la absorción de sulfuro de hidrógeno en una solución de quelato de hierro para formar partículas de azufre elemental.

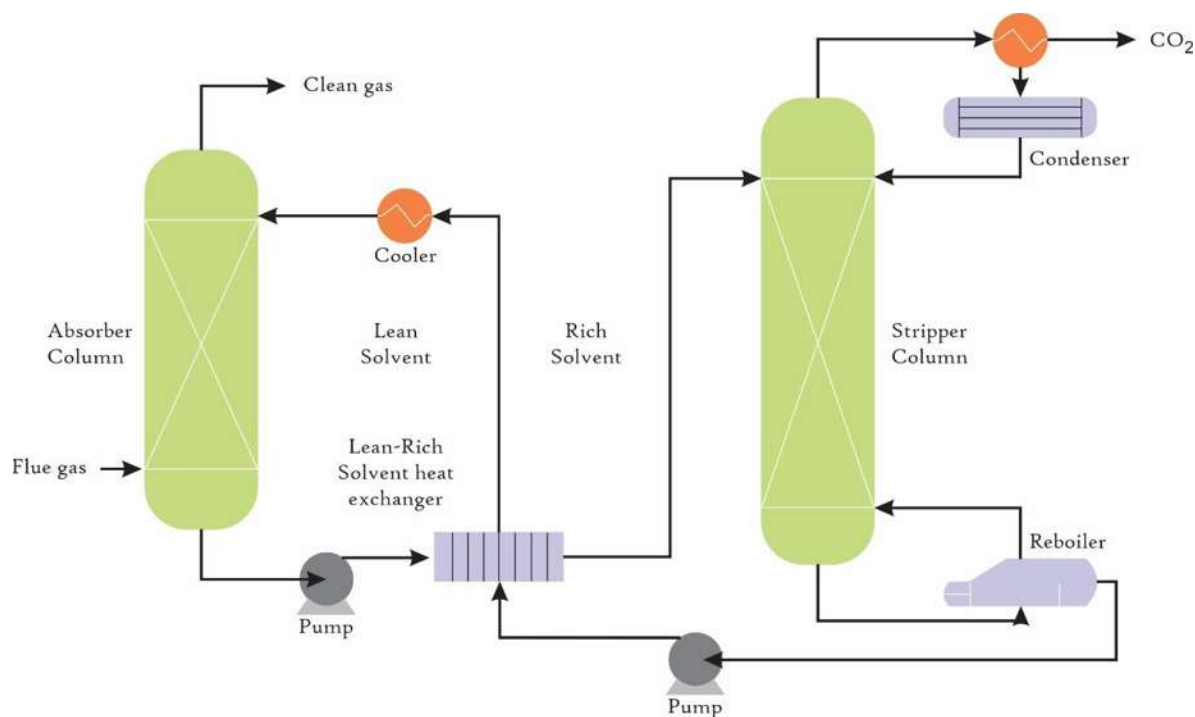


Figura 13. Diagrama de producción de absorción de CO_2 .

El proceso de absorción en los procesos de captura de CO_2 en postcombustión hace uso de la naturaleza reversible de una disolución acuosa alcalina absorbente, por lo general aminas, de una solución ácida o de un gas ácido. El diagrama de flujo del proceso de absorción de CO_2 es el representado en la **Figura 13**. Después de enfriar los gases de combustión se ponen en contacto con la solución absorbente (solución pobre), es necesario

un sistema de impulsión de gas para superar la pérdida de carga durante la absorción. La temperatura de esta etapa oscila normalmente entre 40 y 60 °C, el CO₂ es así atrapado por el solvente químico. Antes de abandonar esta etapa el gas es sometido a un lavado con agua, esta forma parte del balance total de agua, para eliminar las posibles gotas o vapor de absorbente que pueda arrastrar el gas. Es posible reducir la concentración de CO₂ del gas de salida hasta valores muy bajos, como resultado de la reacción química que se produce en el solvente, las concentraciones demasiado bajas en el gas de salida necesitan torres de absorción muy grandes. La solución rica, que contiene el CO₂ químicamente combinado, es bombeada al stripper (columna de regeneración) mediante la bomba de solución rica, pasando por un intercambio de calor para aprovechar el calor de la solución pobre de salida del stripper. La regeneración química del solvente es llevada a cabo entre 100 y 140 °C a una presión no mucho más alta de la presión atmosférica. El calor es aportado en el reboiler manteniendo de esta forma las condiciones de la desorción. Esto es lo que penaliza energéticamente este sistema. El vapor se recupera y es devuelto a la torre de regeneración, el CO₂ sale del stripper. El disolvente regenerado, con mínima concentración de CO₂ es bombeado a la torre de absorción. Antes de entrar en la torre, pasa por el intercambiador para adaptar su temperatura a las del proceso de absorción.

Las aminas con más interés comercial para la purificación de gases son monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA) y metildietanolamina (MDEA).

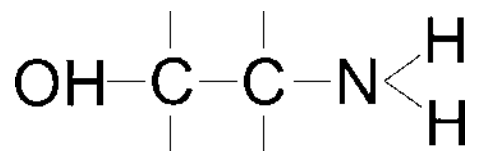


Figura 14. Estructura química de la amina monoetanolamina.

El CO₂ reacciona con el sistema agua-amina para dar carbamato o bicarbonato. La formación de carbamato, a partir de estas aminas primarias (RNH₂) o secundarias (R₁R₂NH₂), es la reacción que gobierna el proceso de absorción. Las aminas terciarias han sido rechazadas para esta aplicación porque su capacidad y reactividad es baja y son poco estables.

Las disoluciones acuosas de monoetanolamina han sido usadas a lo largo de los años para la eliminación de CO₂ y H₂S en el gas de síntesis, en la actualidad también se usa para

el tratamiento del gas natural a alta presión. Es apropiada para eliminación de CO_2 y H_2S cuando se encuentra en baja concentración en el gas y cuando no existan contaminantes minoritarios como COS o CS_2 . Esencialmente, su uso es óptimo para el tratamiento de gases a baja presión y elevada eliminación de CO_2 . El bajo peso molecular de la MEA conlleva a soluciones con alta capacidad a concentración moderada; su alta alcalinidad y facilidad de recuperación son algunas de las ventajas que contrarrestan los inconvenientes que existen. El principal problema es la formación de productos de reacción irreversible lo cual provoca pérdidas de este producto químico como absorbente en los procesos. Además, la MEA es más corrosiva que otras especies, especialmente si se sobrepasa el 20% de concentración en disolución. Esto limita la capacidad de la MEA para casos en los que la presión parcial de CO_2 sea elevada, donde podría cargarse mucho más.

2.7 UREA VERDE

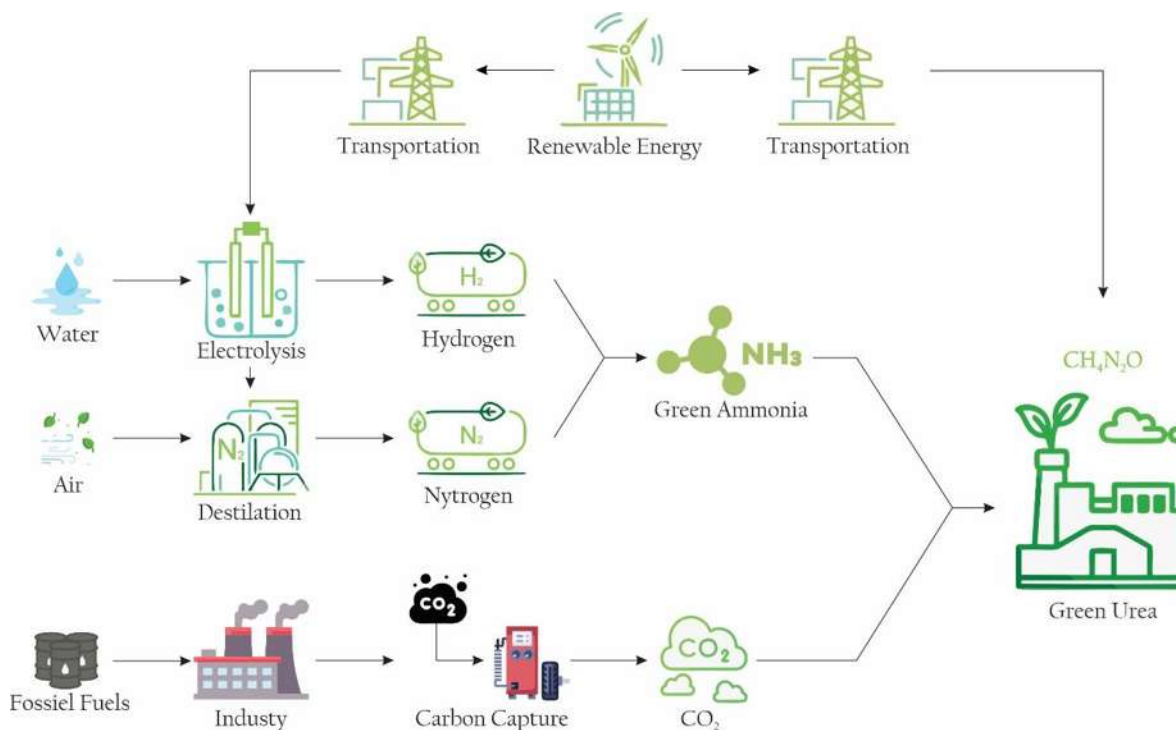


Figura 14. Modelo de producción urea verde.

La urea, uno de los fertilizantes más históricos y ampliamente utilizados a nivel mundial, se fabrica mediante un proceso de dos pasos que involucra la reacción entre dióxido de carbono y amoníaco (Devkota et al., 2021). Se proyecta que la demanda global de urea alcance los 183 millones de toneladas (Mt) para el año 2024 (Martín y Sánchez, 2024).

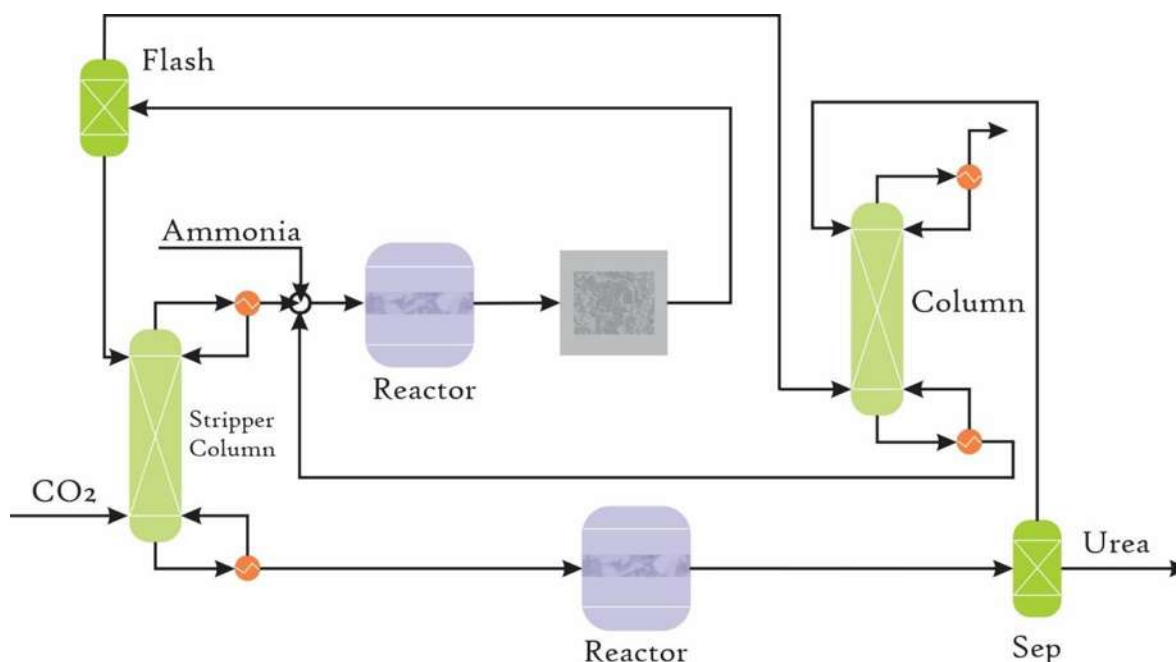


Figura 15. Diagrama de producción de absorción de la urea verde.

La urea, un derivado clave del amoníaco, es fundamental en la agricultura moderna para abordar la creciente demanda global de alimentos. Sin embargo, su producción actual depende en gran medida de combustibles fósiles escasos, lo que limita los avances hacia una agricultura sostenible y una economía baja en carbono. La síntesis de urea verde representa una oportunidad prometedora al capturar carbono y promover la sostenibilidad ambiental. Este enfoque propone estrategias innovadoras para incrementar la producción de urea mediante el uso de amoníaco verde y dióxido de carbono capturado, aprovechando así los beneficios de una economía basada en hidrógeno y la mitigación del cambio climático (Khan et al., 2024).

2.8 ECOINDICADOR 99

El Ecoindicador es un conjunto de número que expresan el impacto ambiental total de proceso o producto. Cada producto que utilizamos conlleva su propia carga ambiental, manifestándose de diversas maneras a lo largo de su ciclo de vida. Desde la extracción de materias primas hasta el proceso de fabricación, el producto pasa por etapas cruciales que impactan el entorno. La creación misma del artículo, su distribución, uso y eventual eliminación contribuyen a la compleja red de factores ambientales en juego. La fase de

extracción de materias primas implica la alteración del entorno para obtener los recursos necesarios. La fabricación, a menudo intensiva en energía y materiales, añade otra capa de impacto. La distribución y el embalaje también generan residuos y consumen recursos adicionales. Durante la fase de uso, el producto puede requerir energía continua o la utilización de materiales adicionales, generando así un impacto ambiental continuo. La disposición final del producto, ya sea a través de su desecho o reciclaje, también tiene consecuencias para el medio ambiente. La gestión de residuos, el agotamiento de recursos y la contaminación son consideraciones clave en esta etapa. Incluso la eliminación adecuada puede ser un desafío ambiental, ya que algunos productos pueden dejar residuos tóxicos o persistentes (Goedkoop y Spriensma, 2001).

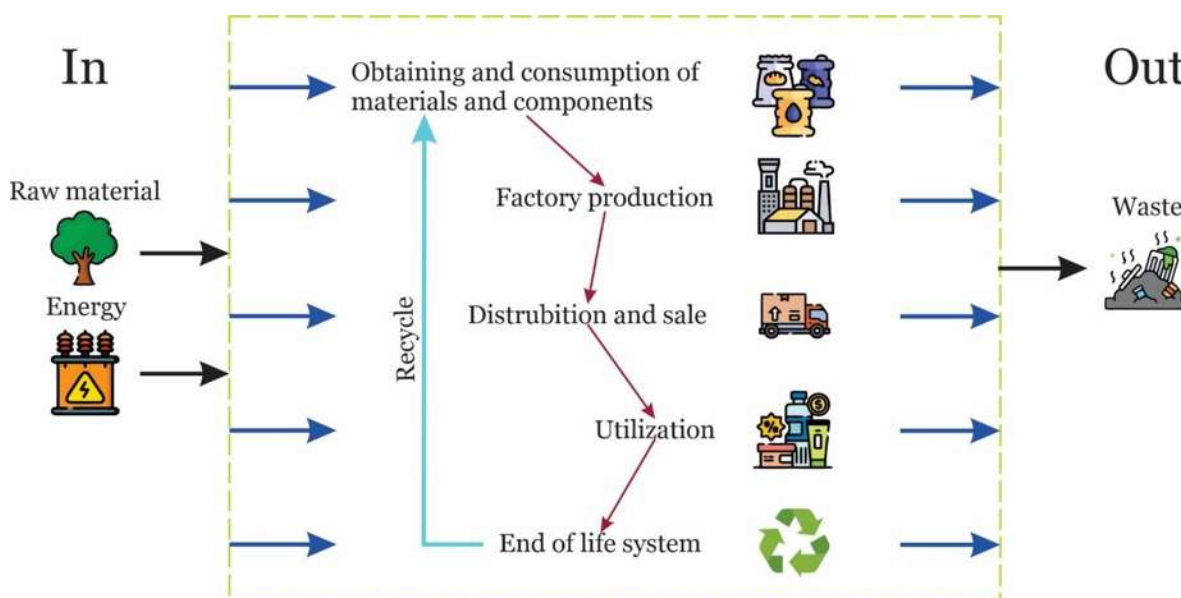


Figura 16. *Ciclo de vida de un producto.*

Para evaluar de manera integral el daño ambiental de un producto, es crucial realizar un análisis de todas las etapas de su ciclo de vida. El Análisis de Ciclo de Vida (LCA o Life Cycle Assessment) emerge como una herramienta esencial en esta tarea, proporcionando una comprensión completa y cuantificable de los impactos ambientales asociados con un artículo específico. En la búsqueda de soluciones sostenibles, la conciencia y comprensión de estos impactos a lo largo del ciclo de vida de los productos se convierten en elementos clave para orientar decisiones más informadas y responsables (El-Hafdaoui et al., 2024).

La **Ecuación 1** muestra la ecuación especializada para evaluar los puntos del Ecoindicador 99.

$$Eco - Indicator99 = \sum HH + \sum EQ + \sum AD \quad (1)$$

Donde HH es Salud Humana, EQ es Calidad de los Ecosistemas y AD es Agotamiento de Recursos.

$$HH = CC + CO + ECR + R \quad (2)$$

Donde CC es cambio climático, CO es agotamiento de la capa de ozono, ECR es efectos cancerígenos y respiratorios y R es radiación.

$$EQ = EX + AC + ES \quad (3)$$

Donde EX es ecotoxicidad, AC es acidificación oceánica y ES es eutrofización y uso del suelo.

$$AD = DR \quad (4)$$

Donde DR se incluye el agotamiento de recursos, como la arena y la grava, dentro del uso del suelo.

2.8.1 USOS

En el proceso de diseño, surgen numerosas opciones que el diseñador puede evaluar para seleccionar la más adecuada. Para la creación de proyectos ambientalmente sostenibles, es esencial incorporar los aspectos ambientales de un producto en el análisis y la elección de las opciones de diseño. Los valores estándar del Ecoindicador se han desarrollado específicamente como una herramienta destinada a cumplir esta función, sirviendo como una herramienta valiosa para los diseñadores, facilitando la búsqueda de alternativas ecológicas y diseñada para su uso interno.

El propósito fundamental del Ecoindicador es mejorar la compatibilidad ambiental de los productos. En consecuencia, se convierte en una herramienta versátil aplicable en todas las empresas y sectores. Su aplicación tiene un enfoque claro: contribuir a la creación de productos más respetuosos con el medio ambiente, consolidándose como una herramienta

esencial para los diseñadores en la toma de decisiones durante el proceso de diseño, con el objetivo de fomentar la adopción generalizada de prácticas más sostenibles en diversos ámbitos industriales.

2.8.2 TIPOS DE DAÑOS

Dentro del marco del Ecoindicador 99, se ha conceptualizado el término "medio ambiente" dividiéndolo en tres tipos de impactos (Goedkoop y Spriensma, 2001):

- En cuanto a la **salud humana**, esta categoría aborda el número y la duración de enfermedades, así como los años de vida perdidos debido a fallecimientos prematuros relacionados con factores ambientales. Los efectos considerados en esta categoría abarcan el cambio climático, la disminución de la capa de ozono, efectos cancerígenos y respiratorios, así como la radiación ionizante (nuclear).
- Referente a la **calidad del medio ambiente**, se focaliza en el impacto sobre la diversidad de especies, especialmente en plantas vasculares y organismos simples. Entre los efectos contemplados se encuentran la ecotoxicidad, acidificación, eutrofización y el uso del suelo.
- En lo que respecta a los **recursos**, esta categoría engloba la demanda adicional de energía necesaria en el futuro para extraer minerales de baja calidad y recursos fósiles. La disminución de recursos brutos, como arena y gravilla, se integra dentro de la consideración del uso del suelo.

2.8.3 UNIDADES

El valor estándar del Ecoindicador se puede considerar como cifras sin dimensión. Como base se utiliza el Pt (punto Ecoindicador). En la salud humana se emplea el indicador conocido como AVAD (Años de Vida Ajustados por Discapacidad), en la calidad de los ecosistemas se emplea la unidad PDF m² año, donde PDF (fracciones potencialmente desaparecidas) representa la fracción potencial de especies de plantas que desaparecen por cada metro cuadrado en un año. este indicador proporciona información sobre la pérdida de biodiversidad vegetal y finalmente los recursos que emplea la unidad MJ SE, donde MJ representa la cantidad de energía en mega julios y SE representa el excedente de energía necesario para extraer y utilizar los recursos naturales.

2.9 MÉTRICAS DE LA ECONOMÍA CIRCULAR

La métrica de la economía circular nos permite cuantificar la infraestructura utilizada en cualquier proceso industrial. La infraestructura necesaria para el proceso es proporcional a los requerimientos materiales conocidos que componen dicho proceso. La cuantificación de estos requerimientos permite entender el impacto del agotamiento de los recursos renovables; esta cuantificación se normaliza con el PEA (Potencial de Agotamiento Abiótico) (Valera-Medina et al., 2018).

Es importante mencionar que estas métricas han sido incorporadas con base en los indicadores de economía circular desarrollados por Serrano-Arévalo et al. (2024), quienes centran este trabajo en el indicador de impacto material relativo (DMR), el cual permite entender el impacto del agotamiento de los recursos renovables. indicador de impacto material relativo (DMR) que permite cuantificar los materiales que componen la infraestructura necesaria para el proceso. Además, este indicador especifica el impacto ambiental asociado al agotamiento de recursos no renovables por cantidad de producto (ecuación 5).

$$DMR = \frac{Materialreq^{Norm}}{prodtot} \quad (5)$$

Donde $Materialreq^{Norm}$ es el impacto asociado al consumo de recursos no renovables sobre las necesidades de materiales que componen la infraestructura total del sistema. El superíndice $Norm$ es un factor de normalización que permite transformar diferentes materiales en un material común con la intención de generar una comparación equitativa. transformarse en un material común con la intención de generar una comparación justa entre ellos. La variable $prodtot$ es la cantidad total de producto en el sistema, y las necesidades de material se cuantifican en función de la infraestructura utilizada.

2.10 RED NEURONAL ARTIFICIAL

La Redes Neuronales Artificiales (RNA) son métodos de aprendizaje automático (una subárea de la IA) (Saeed et al., 2021) que tratan de replicar el funcionamiento del cerebro humano de forma sencilla, lo que les permite identificar relaciones altamente no lineales (Wang et al., 2022; Malekian y Chitsaz, 2021). La RNA estándar se compone de tres capas:

una capa de entrada, una capa oculta y una capa de salida, mientras que la red neuronal multicapa perceptrón (MLP) incluye más de una capa oculta, añadiendo así profundidad al modelo. Algunas de las ventajas de MLP son su capacidad para resolver problemas altamente no lineales, manejar grandes volúmenes de datos, realizar proyecciones rápidas tras el entrenamiento y poseer una alta precisión del modelo. La figura 11 ilustra la estructura básica de la red neuronal MLP (Park y Lek, 2016; Haghighat, 2021).

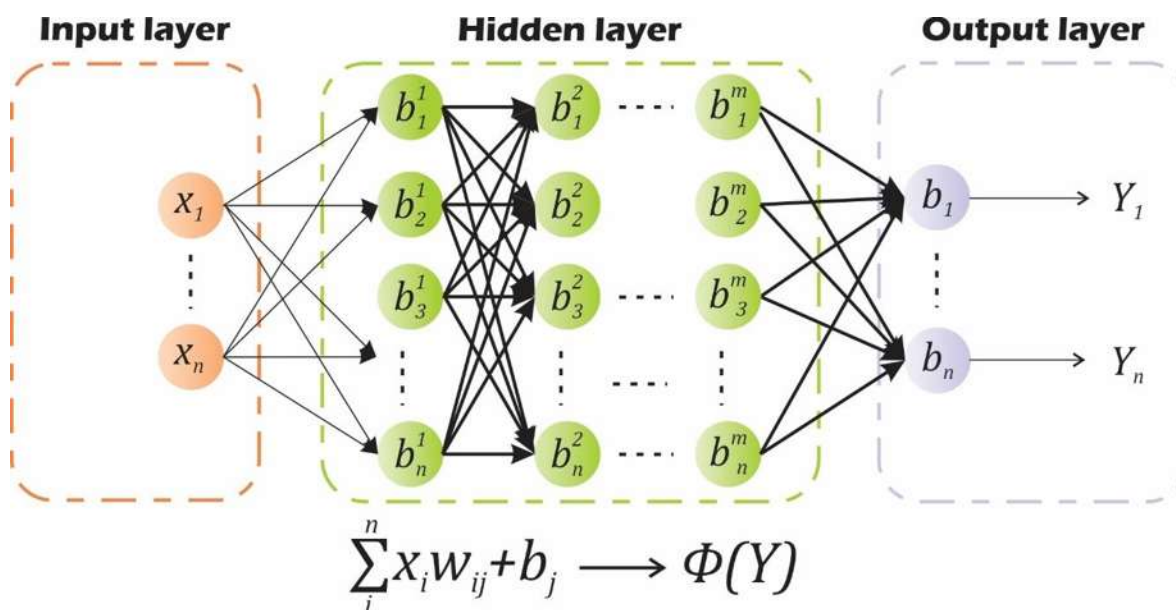


Figura 17. Estructura general de una RNA de tipo MLP.

Es crucial señalar que las tres capas diferentes mantienen una relación secuencial entre sí. La capa de entrada recibe la información de entrada, mientras que las capas ocultas reciben los datos de salida de cada neurona de la capa anterior, y la capa de salida recibe los datos de salida de las neuronas de la última capa oculta; en esta capa se obtienen los resultados de la variable de salida (López-Flores et al., 2022). Las capas se relacionan mediante el uso de pesos aleatorios y parámetros de sesgo aleatorios. La representación matemática se muestra en la **Figura 17**, donde i representa el número de neuronas de la capa oculta anterior y j representa el número de neuronas de la capa actual. y_i representa la salida de la neurona j , x_i representa la salida de la neurona i , w_{ij} representa la matriz de pesos aleatorios que relaciona la neurona j con la neurona i , b_j representa el valor de sesgo de la neurona j y ϕ simboliza la función de activación. La función de activación confiere no linealidad a la RNA y su elección influye significativamente en el rendimiento del modelo.

3. METODOLOGÍA

Este capítulo representa el núcleo operativo del presente proyecto de investigación, ya que define los procedimientos, técnicas y herramientas necesarias para alcanzar los objetivos planteados. En el presente estudio, se busca desarrollar un esquema integral para la producción sostenible de productos químicos de alto valor agregado, como el hidrógeno verde, el amoníaco y la urea, mediante la optimización de procesos, la transición energética y el rediseño de cadenas de suministro.

Para abordar este desafío, es fundamental establecer una metodología robusta que combine enfoques experimentales, simulaciones computacionales y análisis sistemáticos. La integración de tecnologías avanzadas, como la inteligencia artificial y los modelos de optimización, desempeñará un papel clave en la identificación de oportunidades de mejora en términos de eficiencia, reducción de costos y minimización del impacto ambiental.

En este capítulo, se describirá el enfoque metodológico adoptado, dividido en etapas clave que abarcan desde la recopilación de información y revisión bibliográfica hasta la implementación de simulaciones en software especializado y la validación de resultados. Además, se detallará cómo se abordará el análisis del ciclo de vida y el impacto ambiental, permitiendo identificar áreas críticas para la sostenibilidad en los procesos industriales evaluados.

3.1 SIMULACIÓN DE PROCESOS

3.1.1 PROPIEDADES FÍSICAS

Las propiedades termodinámicas en condiciones de alta temperatura y alta presión que se encuentran en las plantas de amoníaco se describen con precisión mediante modelos de ecuaciones de estado. La modificación RKS-BM de Redlich-Kwong se elige específicamente para esta aplicación y la mayoría de los parámetros de su modelo se extraen de los bancos de datos de propiedades físicas de Aspen. Para mejorar la precisión, se realizan varias modificaciones específicas al modelo RKS-BM.

Para empezar, se realizan ajustes en las propiedades del componente puro del amoníaco para refinar la presión de vapor y la entalpía de vaporización. Estas modificaciones

son cruciales para la sección de síntesis. En segundo lugar, los parámetros de interacción binaria que involucran H_2 , N_2 , Ar y CH_4 con amoníaco se ajustan para garantizar la solubilidad precisa de estas sustancias en amoníaco, lo que afecta significativamente las secciones de síntesis y refrigeración. En tercer lugar, se aplican modificaciones a los parámetros binarios del sistema de aire (N_2 , O_2 , Ar) para proporcionar una simulación precisa del equilibrio vapor-líquido en la planta de nitrógeno.

Además, dentro de la Unidad de Eliminación de CO_2 , las propiedades del líquido y del vapor se calculan utilizando el método NRTL del electrolito y la ecuación de estado RK, respectivamente, y con datos obtenidos de Göppert y Maurer (1988), los parámetros NRTL para los pares de electrolitos se determinan mediante regresión contra VLE (Equilibrio Vapor-Líquido).

El amoníaco se designa como un componente de Henry al que se aplica la ley de Henry y se describen las constantes de Henry específicas, lo que permite una caracterización más precisa dentro del sistema.

3.1.2 DESCRIPCIÓN DEL MODELO

3.1.2.1. HIDRÓGENO

En este proceso se utilizan agua alcalina y aire como materias primas, ya que son económicos y fácilmente disponibles. La primera etapa implica el uso del proceso de electrólisis para producir hidrógeno verde utilizando agua alcalina. Para empezar, el agua, alimentada a 25 °C y 8 bares, pasa por una bomba que aumenta su presión en 0,2 bares. En segundo lugar, se lleva a un divisor con un valor de 0,25 donde se obtienen dos corrientes, AIN y CIN. Luego, las dos corrientes se alimentan a un electrolizador alcalino con solo una pila Scope y un acceso directo de tipo Shortcut. La corriente AN-OUT resultante del electrolizador contiene oxígeno mientras que la corriente CAT-OUT contiene hidrógeno. Ambas corrientes contienen un porcentaje de agua. La corriente AN-OUT se alimenta a un recipiente Flash (AN-FLASH) con condiciones de operación de 7 bares y una temperatura de 75 °C para separar el oxígeno del agua. La corriente de salida de vapor del recipiente AN-FLASH contiene oxígeno con una fracción de 0.96 y la corriente de salida líquida contiene agua con una fracción de 0,90. La corriente CAT-OUT se alimenta a un recipiente Flash (CA-FLASH) con condiciones de operación de 7 bares y una temperatura de 75 °C para separar

componentes se alimentan a un compresor MCompr (MCOMPR2) con un modelo de 4 etapas. El modelo del compresor es isoentrópico y la presión de salida de la última etapa es de 27 bares. La temperatura de salida para las etapas 1, 2 y 3 es de 50 °C. Simultáneamente, el hidrógeno que se produjo en una etapa anterior se alimenta a un compresor MCompr (MCOMPR1) en las mismas condiciones operativas que MCOMPR2. Las corrientes de salida se alimentan a un mezclador. Luego, la corriente de salida se alimenta a un compresor Mcompr (MCOMPR3) con un modelo de 4 etapas. La presión de salida para la última etapa es de 275 bar y la temperatura de salida para las etapas es de 5 °C.

3.1.2.2.1. UNIDAD DE REFORMA

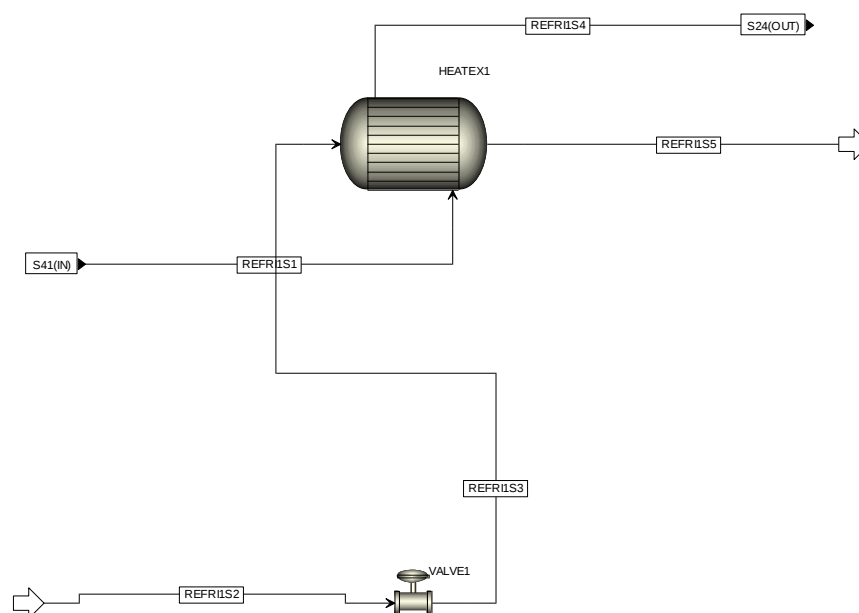


Figura 19. Diagrama de flujo del proceso de la unidad de reforma en Aspen PlusTM.

Esta unidad requiere un intercambiador de calor HeatX, con dirección de flujo en contracorriente, un diseño de Mode Desing y una especificación de fracción de vapor de salida de corriente fría 1. La constante U es 802.4 W/m² K. La corriente caliente S41 es alimentado a 31.5 °C y 278 bares, y la corriente fría REFRIS3 a -2.71 °C y 3.9 bares. La corriente caliente de salida S24 sale a 15 °C y 278 bar.

La principal reacción que tiene lugar en el reformador es la conversión de metano (CH₄) en una mezcla de monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂) e hidrógeno (H₂). Esta transformación química suele estar representada por la siguiente ecuación química:



En esta reacción, el metano reacciona con el vapor de agua para producir monóxido de carbono e hidrógeno. Este proceso, conocido como reformado de metano con vapor (SMR), es un paso crucial en la producción de hidrógeno y gas de síntesis, que son intermediarios esenciales para diversos procesos industriales, incluida la producción de amoníaco. El gas de síntesis producido, que contiene CO, CO₂ y H₂, sirve como precursor para reacciones posteriores en el proceso de producción de amoníaco.

3.1.2.2.2. REACTOR DE CAMBIO DE BAJA TEMPERATURA

El reactor de cambio de baja temperatura, modelado como reactor de flujo pistón (RPlug), funciona según la siguiente estequiometría de reacción:



En esta reacción química, el monóxido de carbono (CO) reacciona con agua (H₂O) para producir dióxido de carbono (CO₂) e hidrógeno (H₂). La reacción de cambio de baja temperatura es un paso importante en el proceso de producción de amoníaco, donde sirve para convertir el CO residual de las etapas anteriores en CO₂ y al mismo tiempo generar H₂ adicional. Modelar este reactor como un reactor de flujo de pistón implica que los reactivos fluyen a través del reactor sin ninguna mezcla perpendicular a la dirección del flujo; simulando así un sistema de flujo continuo donde se producen reacciones a medida que los reactivos se mueven a través del reactor.

3.1.2.2.3. REACTOR DE CAMBIO DE ALTA TEMPERATURA

El reactor de cambio de alta temperatura se modela como un reactor de flujo de pistón (RPlug) y sigue la misma estequiometría de reacción que el reactor de cambio de baja temperatura. En este sentido, tanto el reactor de cambio de baja temperatura como el reactor de cambio de alta temperatura simulan la misma transformación química. Esta reacción se conoce como reacción de desplazamiento y es crucial en los procesos industriales para convertir CO y H₂O en CO₂ y H₂.

3.1.2.2.4. ELIMINACIÓN DE DIÓXIDO DE CARBONO

El enfoque de modelado implica el uso de un modelo QUÍMICO con el identificador amoníaco para representar la química de la solución de electrolito. Este modelo QUÍMICO supone equilibrio químico para todas las reacciones iónicas dentro del amoníaco.

También se ha establecido un modelo de REACCIÓN cinética denominado NH₃. En este modelo cinético de NH₃, se puede suponer que todas las reacciones están en equilibrio químico, excepto aquellas reacciones que involucran CO₂ con OH⁻ y reacciones de CO₂ con NH₃. Esto implica que estas reacciones específicas que involucran CO₂ con OH⁻ y CO₂ con NH₃ se tratan cinéticamente en lugar de asumir un equilibrio instantáneo.

La elección de modelar cinéticamente ciertas reacciones permite una consideración más detallada de las velocidades de reacción y la dinámica involucradas en las interacciones entre CO₂, OH⁻ y NH₃. Este enfoque suele ser útil cuando reacciones específicas se desvían de las condiciones de equilibrio y exhiben un comportamiento dependiente de la velocidad.

3.1.2.2.5. UNIDAD DE METANACIÓN

El reactor de metanación, modelado como un reactor de flujo de pistón (RPlug), funciona con dos reacciones clave:



En estas reacciones, trazas de CO se convierten en CH₄ mediante su reacción con H₂, lo que da como resultado la formación de H₂O como subproducto. El proceso de metanación es crucial en materias primas de síntesis ricas en hidrógeno para reducir la presencia de CO, que puede actuar como un veneno catalítico en reacciones posteriores, particularmente en la síntesis de amoníaco.

El modelo de reactor de flujo de pistón significa que las reacciones ocurren a medida que los reactivos se mueven a través del reactor sin mezclarse lateralmente, simulando un sistema de flujo continuo. Esta elección de modelado es particularmente útil cuando se analizan reacciones que dependen de las características de flujo del sistema.

3.1.2.2.6. UNIDAD DE SÍNTESIS

La corriente S16 se alimenta al proceso de síntesis que luego pasa por un fraccionador que divide la corriente S-R9 con una fracción de 0,98 y la corriente S-R5 con una fracción de 0,02. La corriente SR-9 pasa por una serie de 3 intercambiadores de calor a contracorriente con áreas de 139.9 m², 159.9 m² y 190 m² para R001-HC, R001-HB y R001-HA, respectivamente, dando como resultado la corriente SR-R7. Posteriormente, las corrientes S-R5 y S-R7 se alimentan al reactor ROO1-A (RPlug), reactor adiabático donde tiene lugar la reacción:



La corriente de salida se alimenta al intercambiador de calor R001-HA y luego al reactor R001-B, y así sucesivamente hasta obtener la corriente S21.

En esta reacción, el nitrógeno (N₂) reacciona con H₂ para producir NH₃. Esta transformación química, conocida como proceso Haber-Bosch, es un paso crucial en la producción de amoníaco. La elección de un modelo de reactor de flujo de pistón implica que los reactivos fluyen a través de los lechos del convertidor sin mezclarse lateralmente, lo que refleja un sistema de flujo continuo donde las reacciones ocurren a lo largo de la trayectoria del flujo (ver **Figura 20**).

Los lechos convertidores en la síntesis de amoníaco se modelan como reactores de flujo de pistón (RPlug), y la estequiometría de reacción considerada para la síntesis de amoníaco (**Tabla 1**).

Tabla 1. Condiciones de operación en la síntesis del reactor.

Reactor	Tipo	Longitud (m)	Diámetro (m)	Presión (atm)
R001-A	Reactor adiabático	2.2	2	1.97
R001-B	Reactor adiabático	2.4	2	1.97
R001-C	Reactor adiabático	3.3	2	2.96
R002	Reactor adiabático	3.6	4	0.98

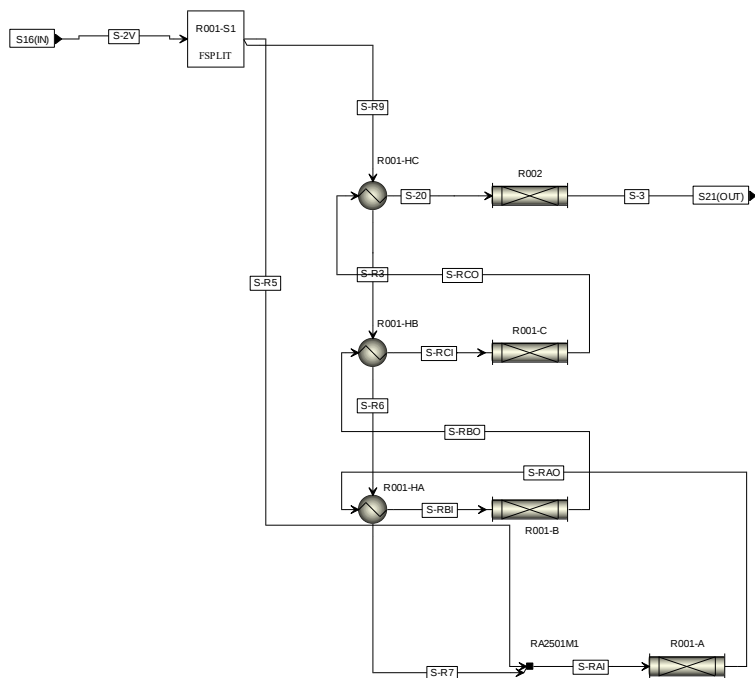


Figura 20. Diagrama de flujo de la unidad de síntesis en Aspen PlusTM.

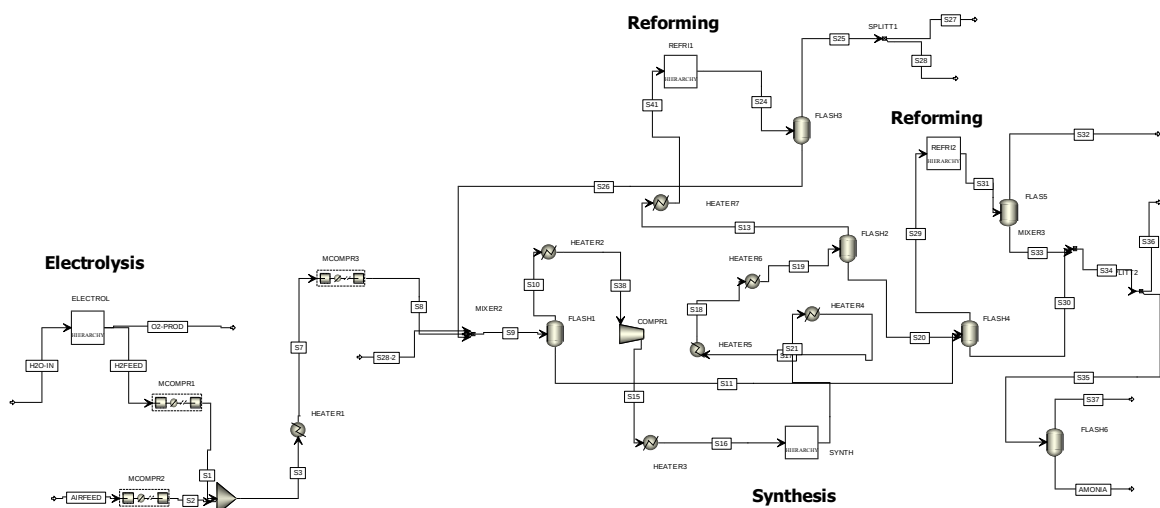


Figura 21. Diagrama de flujo del proceso de producción de amoníaco verde en Aspen Plus[®].

El proceso de producción de amoníaco se simuló en Aspen PlusTM (ver **Figura 21**) utilizando los Bloques para cada operación unitaria (**Tabla 2**).

Tabla 2. Bloques de operación utilizados en la simulación de producción de amoníaco en Aspen Plus®.

Bloques de operación de la unidad Aspen Plus utilizados en el modelo de producción de amoníaco			
Operación unitaria	Aspen "Block"	Plus	Comentarios / Especificaciones
Gas natural	Sep2	+	El azufre se hidrogena hasta obtener sulfuro de hidrógeno y luego se elimina.
Desulfuración	Rstoic	+	Las reacciones se definen en las subrutinas mediante RPlug. El gas reformado contiene aproximadamente 0,3% en volumen de CH ₄ .
Reformación	Rplug		
Conversión de monóxido de carbono	Rplug	+	El CO se convierte en CO ₂ en dos etapas catalíticas, la primera a alta temperatura y la segunda a baja temperatura.
	Fsplit	+	
	Heater		
Eliminación del dióxido de carbono	Flash2		El CO ₂ es capturado por el NH ₃ .
Metanación	Rplug + Sep2		El contenido residual de CO + CO ₂ es inferior a 10 ppm.
Síntesis	Rplug	+	Reaccionando con RPlug y alta presión.
	Fsplit	+	
	Heater		
Refrigeración	Valve	+	El gas amoníaco en el circuito de síntesis se licúa.
	HeatX		

3.1.2.3. CAPTURA DE CARBONO

El proceso comienza con la alimentación de una corriente de etanolamina (MEA) a 20 °C y 1.05 bares, que se utiliza como maquillaje para mantener un flujo constante de recirculación en el sistema. Luego, esta corriente es bombeada incrementando la presión en 0.05 bares y pasa a través de un intercambiador de calor a 37 °C y 1.08 bares antes de ingresar al absorbedor. Simultáneamente, se introduce una corriente de gases de combustión (FLUEGAS) compuesta por agua, dióxido de carbono, oxígeno y nitrógeno con fracciones molares de 0.115, 0.025, 0.162 y 0.698 respectivamente, a 50 °C y 108 kPa.

El absorbedor es de tipo Rate-Bases y consta de 30 etapas. La corriente principal se introduce en la etapa 6, mientras que la corriente FLUEGAS se introduce en la etapa 30. Además, se añade una corriente adicional que entra en la etapa 1 del proceso. La presión del condensador se mantiene en 100 kPa con una caída de presión de 5 kPa. La corriente líquida resultante (RICHSOL1) es de interés, mientras que la corriente de vapor se libera.

La corriente líquida RICHSOL1 se bombea incrementando la presión en 5 kPa, luego se enfría en un intercambiador a 70 °C y 1.05 bares, y se introduce en una columna de destilación RadFrac conocida como STRIPPER, que también es de tipo Rate-Bases y consta

de 22 etapas. La columna tiene un condensador Partial-Vapor-Liquid y un rebolier Kettle. Las especificaciones operativas incluyen una tasa de destilado de 270,000 kg/hr y una carga térmica del rebolier de 1.205x10⁹ kJ/hr. La corriente de alimentación entra en la segunda etapa de la columna, y se obtienen tres corrientes de salida: la primera rica en dióxido de carbono sale en la etapa 1, la segunda rica en agua también sale en la etapa 1, y finalmente la corriente BOTTOM1 se extrae en la etapa 22.

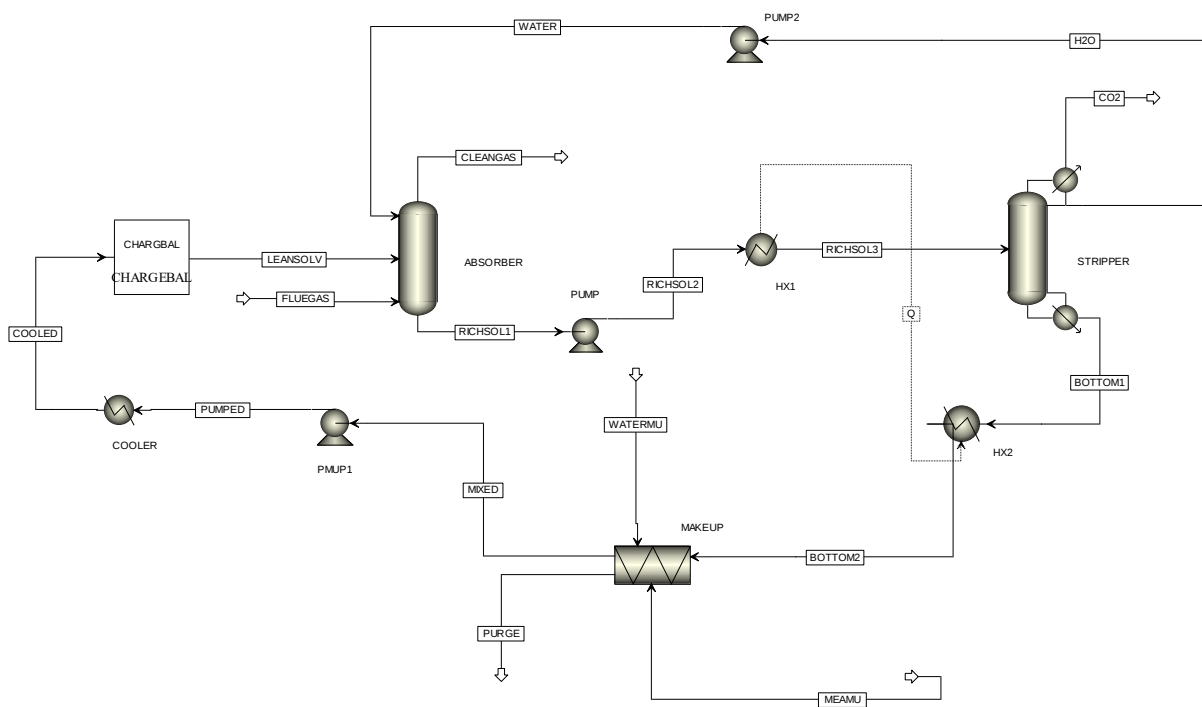


Figura 22. Diagrama de flujo del proceso de captura de carbono en Aspen PlusTM.

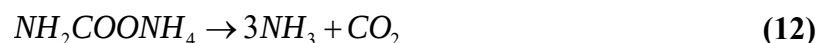
3.1.2.4. UREA

El proceso comienza con la introducción de una corriente inicial compuesta por dióxido de carbono, agua, nitrógeno y oxígeno a 100 °C y 141 kg/cm² en una columna de destilación RadFrac (E01) con 10 etapas. La corriente S06 se alimenta en la etapa 1 y la S07 en la etapa 10. El vapor resultante se dirige a un mezclador (M01), mientras que el líquido se introduce en el reactor A02. En paralelo, al mezclador M01 se añade amoníaco a 34 °C y 160 kg/cm² junto con la corriente S17. La mezcla resultante, S12, se introduce en el reactor RStoic (E02) donde tiene lugar la siguiente reacción:



con una conversión del 0.38. La corriente de salida, S04, se dirige a un flash (F01), donde el líquido se devuelve a la columna E01 y el vapor (S05) se envía a otra columna de destilación RadFrac (E03). Esta columna tiene 5 etapas y un reboiler con una carga de -3.2 kJ/hr. La presión en la etapa 1 es de 141 kg/cm². Del vapor generado, S15 se libera y S17 se recicla de vuelta a M01 para reiniciar el ciclo.

El reactor A02 se alimenta con la corriente S09 procedente de la columna E01, operando a 72.4 °C y 141 kg/cm², donde tiene lugar la reacción:



Con una conversión completa del NH₂COONH₄. La corriente resultante se dirige a un separador (SP1) que trabaja únicamente con líquidos a 141 kg/cm² y una salida de 72.4 °C y 141 kg/cm² en fase vapor y líquido. La corriente de vapor (S11) se alimenta al reactor RGibbs (A01) a 72.4 °C, donde se produce el producto S13 que se introduce en la columna E03. Finalmente, del separador SP1, la corriente fría S12 contiene el producto deseado, la urea.

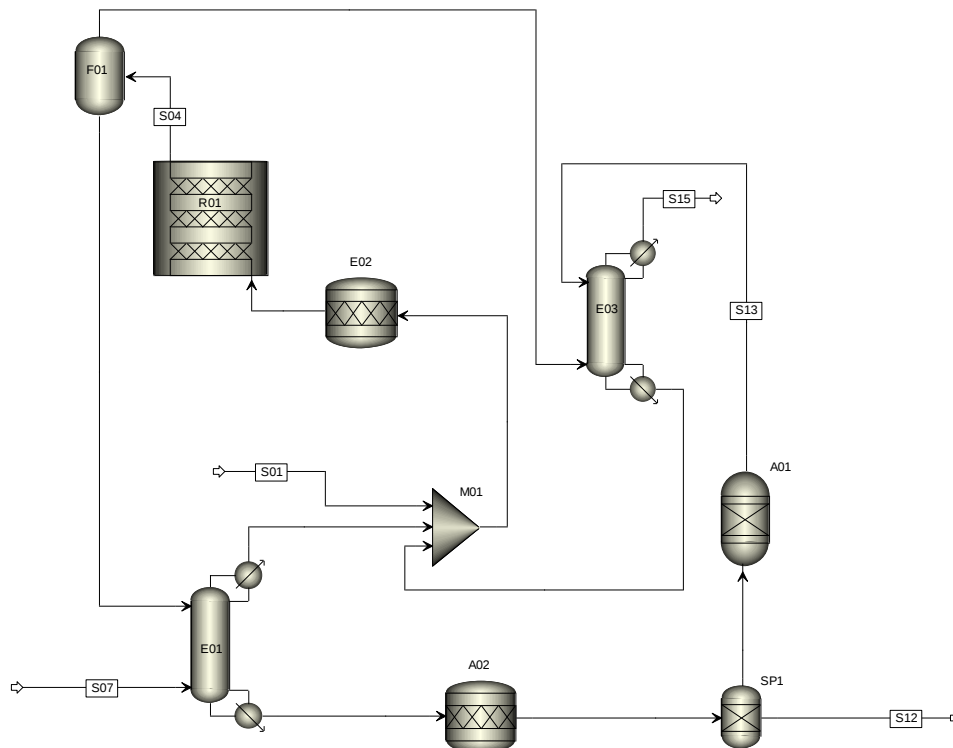


Figura 23. Diagrama de flujo del proceso de urea en Aspen PlusTM.

3.2 CASO DE ESTUDIO 1

Producción de amoníaco verde: el desempeño de los sistemas globales en el Ecoindicador 99 y las métricas de la economía circular

Aunque actualmente se producen grandes cantidades de amoníaco cada año en todo el mundo, Chehade y Dincer et al. (2021) afirman que se espera que la producción de amoníaco aumente aproximadamente un 2% en los próximos años. Chehade y Dincer et al. (2021) también informaron que al cierre de 2019 se produjo una cantidad estimada de 171,433,000.00 toneladas de amoníaco. Así, siguiendo esta tendencia, para este caso de estudio se consideró una proyección estimada de 177,145,348.60 toneladas de amoníaco, para el año 2023. También es importante señalar que este caso de estudio se realiza a nivel mundial con la intención de mostrar la producción de amoníaco en cada una de las regiones generadoras que producen esta sustancia química. Con base en el porcentaje de participación de cada una de las regiones reportado por Chehade y Dincer et al. (2021), la producción de amoníaco individual estimada para 2023 se muestra en la **Figura 24**.

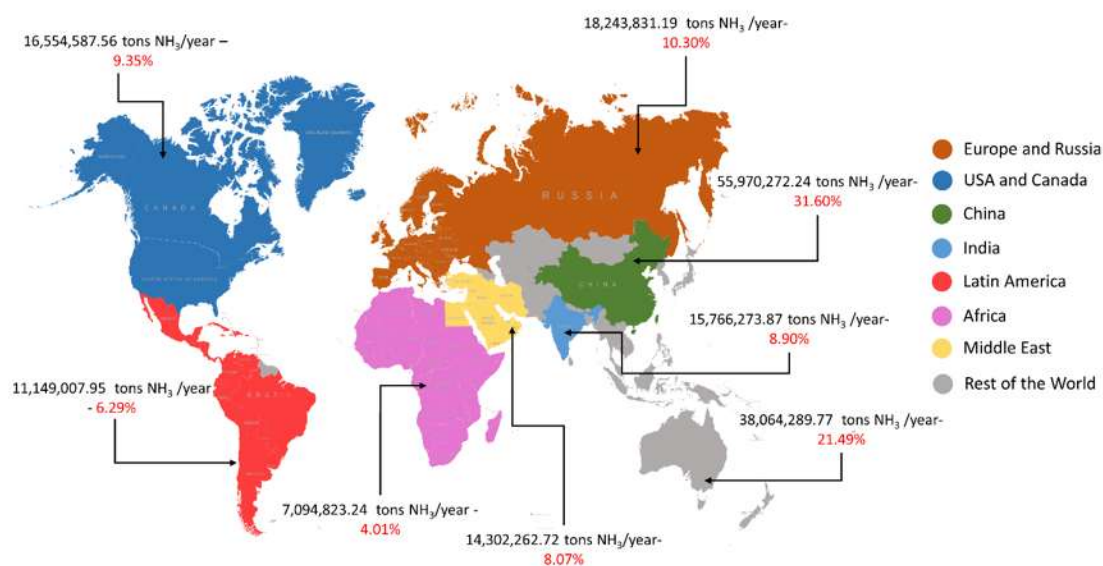


Figura 24. Producción de NH₃ por regiones en el 2023.

China es el mayor productor del mundo con prácticamente un tercio de la producción mundial de amoníaco (55,970,272.24 toneladas) al año. Europa y Rusia son el segundo y tercer mayor productor, respectivamente, y producen aproximadamente el 10.30% de amoníaco cada año.

África ocupa el último lugar como continente con menor producción de amoníaco (sin tener en cuenta a todos los pequeños productores del Resto del Mundo). Cabe señalar que los países más representativos fueron Mongolia, Australia, Pakistán, Afganistán y Kazajistán; todos ellos con una alta producción de amoníaco.

En general, el amoníaco del mundo todavía se produce mediante métodos convencionales utilizando materias primas fósiles. Un claro ejemplo de esto es China, que utiliza una mezcla para producir amoníaco compuesta por aproximadamente un 70% de carbón, un 10% de petróleo y un 20% de gas natural (Chehade y Dincer et al., 2021). Sin embargo, nuestro trabajo, al ser hipotético, sólo considerará el uso de tecnologías renovables para la producción de amoníaco con el fin de evaluar los posibles impactos ambientales que podrían ocurrir en la producción de amoníaco verde y aprender más sobre el futuro inminente que enfrentará nuestro mundo. Además, para conocer cómo se produce amoníaco en cada una de las regiones generadoras, es necesario especificar cómo cada región obtiene su demanda energética, y cómo se utilizará esta energía para generar amoníaco. Es importante mencionar que, dado que el objetivo de este caso de estudio es la obtención de amoníaco verde, las únicas fuentes de energía descritas serán las provenientes de tecnologías renovables. En este estudio de caso no se considerarán tecnologías convencionales ni fuentes de energía convencionales.

Para el año 2022, la utilización de tecnologías renovables en cada una de las regiones generadoras se reportó de la siguiente manera (EMBER, 2022): Europa y Rusia generaron el 31.28% de su energía total a partir de tecnologías renovables mientras que el otro 68.72% de su energía se generó a partir de Otro tipo de tecnologías (en su mayoría convencionales). Estados Unidos y Canadá generaron el 27.33% de su energía total a partir de tecnologías renovables. China generó el 28.18% de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables. India generó el 18.3% de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables. América Latina generó el 56.13% de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables. África generó el 21.83% de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables. Oriente Medio generó el 3.20% de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables, y el Resto del Mundo generó el 32.82% (promedio) de su energía eléctrica a partir de tecnologías renovables.

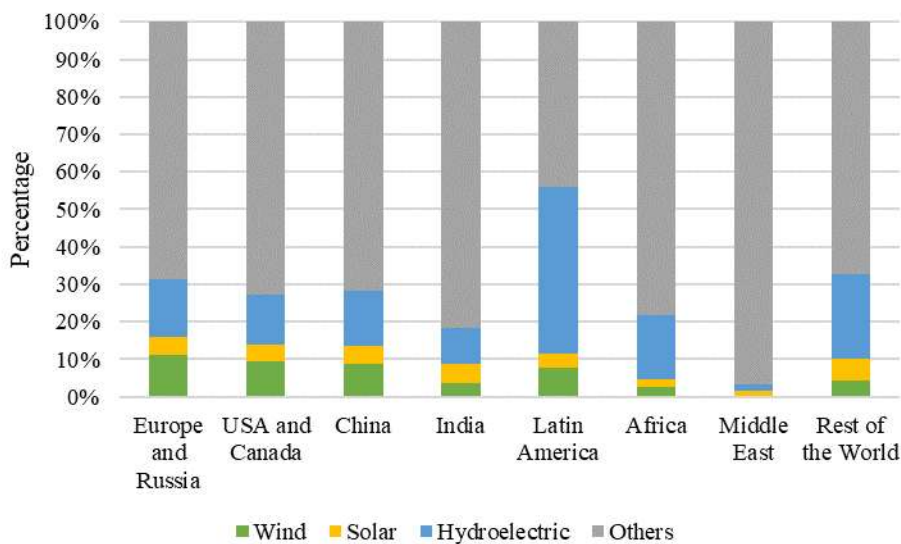


Figura 25. *Uso de tecnologías de generación de energía en cada región.*

Además, las tecnologías renovables más comunes y representativas (eólica, solar, hidroeléctrica) utilizadas en cada una de las regiones generadoras, y reportadas en 2022, se muestran en la **Figura 25**. La producción de energía renovable para la proyección de 2023 en este estudio de caso se basa en datos reportados previamente por EMBER (2022). Asume el uso exclusivo de energía renovable (100%) como fuente de energía en las plantas de producción de amoníaco. Por ejemplo, Europa y Rusia generan el 31.28% de su energía utilizando tecnologías renovables: el 11.16% a partir de energía eólica, el 4.85% a partir de energía solar y el 15.27% a partir de energía hidroeléctrica. En términos del total de energías renovables, la energía eólica, solar e hidroeléctrica constituyen el 35.68%, 15.51% y 48.82%, respectivamente. Este mismo criterio se ha aplicado también a otras regiones.

3.2.1 APLICACIÓN DEL ECOINDICADOR 99

Para desarrollar la metodología del Ecoindicador 99 es necesario recolectar datos relacionados con el uso de acero dentro de los equipos (intercambiadores de calor, contenedores flash, reactores y electrolizador), así como información respecto al consumo de agua y electricidad. Mediante la simulación realizada en el software Aspen PlusTM, se obtienen los siguientes valores: 9538.66217 kg de acero, 157921.9445 kg/año de agua y 787.8034 MW de electricidad.

CAPÍTULO III

Una vez recogidos estos valores de datos se realiza el análisis del Ecoindicador. Para ello se utiliza la base de datos SimaPro 9.5, donde se ha recopilado información relevante en tres categorías fundamentales: Salud Humana, Calidad de los Ecosistemas y Recursos. Estas categorías se aplican tanto al acero como al agua (**Tabla 3**).

Tabla 3. Categorías de impacto para el acero y agua.

Categorías de impacto	Acero	Agua
Cancerígenos (Pt/kg)	6.32×10^{-3}	2.870×10^{-6}
Compuestos orgánicos (Pt/kg)	8.01×10^{-2}	1.320×10^{-5}
Compuestos inorgánicos (Pt/kg)	0.00	0.00
Cambio climático (Pt/kg)	1.31×10^{-2}	4.350×10^{-6}
Radiación (Pt/kg)	4.51×10^{-4}	4.170×10^{-7}
Capa de ozono (Pt/kg)	4.55×10^{-6}	1.630×10^{-8}
Ecotoxicidad (Pt/kg)	7.45×10^{-2}	1.800×10^{-6}
Audición (Pt/kg)	2.710×10^{-3}	9.520×10^{-7}
Uso del suelo (Pt/kg)	3.730×10^{-3}	1.700×10^{-6}
Minerales (Pt/kg)	7.420×10^{-2}	1.270×10^{-6}
Combustibles fósiles (Pt/kg)	0.059	1.550×10^{-5}

Respecto a las energías renovables, se recopila información de las tres categorías proporcionadas en la literatura (**Figura 26**), según los estudios realizados por Sevensan et al. (2011), y Bicer et al. (2016).

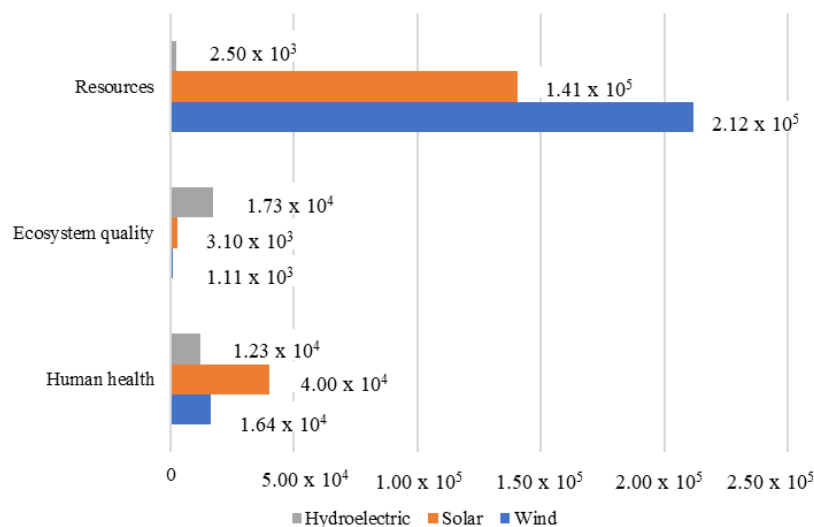


Figura 26. Categorías de impacto para energías renovables.

3.2.2 APLICACIÓN DE METRICAS DE EC

En este trabajo se incorporan métricas de CE para cuantificar la infraestructura utilizada en la producción de amoníaco verde. La infraestructura necesaria para el proceso es proporcional a los requerimientos materiales conocidos que componen dicho proceso. La cuantificación de estos requerimientos permite entender el impacto del agotamiento de recursos renovables; esta cuantificación se normaliza con el ADP (Abiotic Depletion Potential).

Es importante mencionar que estas métricas se han incorporado con base en los indicadores de CE desarrollados por Serrano-Arévalo et al. (2024) quienes enfocan este trabajo en el indicador de impacto material relativo (DMR) el cual permite cuantificar los materiales que componen la infraestructura necesaria para el proceso. Además, este indicador especifica el impacto ambiental asociado al agotamiento de recursos no renovables por cantidad de NH_3 producido para este caso específico (**Ecuación 13**).

$$DMR = \frac{Materialreq^{Norm}}{NH_3prod_{tot}} \quad (13)$$

Donde $Materialreq^{Norm}$ es el impacto asociado al consumo de recursos no renovables sobre los requerimientos de materiales que conforman la infraestructura total del sistema. El superíndice *Norm* es un factor de normalización que permite transformar materiales diferentes en un material común con la intención de generar una comparación justa entre ellos. La variable NH_3prod_{tot} es la cantidad total de amoníaco producido por el sistema, y los requerimientos de materiales se cuantifican de acuerdo a la infraestructura utilizada. La **Figura 21** muestra el equipamiento necesario en el sistema que se ha clasificado en intercambiadores de calor (*he*), recipientes flash (*fc*), reactores (*re*), electrolizadores (*h*) y tecnologías renovables (*jrt*). Por este motivo, los requerimientos materiales de la infraestructura descrita anteriormente se cuantifican en cada una de las siguientes clasificaciones (Ecuaciones 14 – 18):

$$Materialreq_{heat-ex}^{Norm} = \sum_{he} \left[ic_{he}^{heat-ex} REQ_{he}^{heat-ex} \right] \quad (14)$$

$$Materialreq_{flash}^{Norm} = \sum_{fc} [ic_{fc}^{flash} REQ_{fc}^{flash}] \quad (15)$$

$$Materialreq_{reactors}^{Norm} = \sum_{re} [ic_{re}^{reactors} REQ_{re}^{reactors}] \quad (16)$$

$$Materialreq_{elect}^{Norm} = \sum_h [ic_h^{elect} REQ_h^{elect}] \quad (17)$$

$$Materialreq_{renew}^{Norm} = \sum_{jrt} [ic_{jrt}^{renew} REQ_{jrt}^{renew}] \quad (18)$$

REQ es un parámetro que se refiere a la cantidad total de material requerido en la infraestructura de los equipos necesarios en el sistema. El parámetro también se representa en masa al material de referencia (normalizado) por unidad de capacidad de cada equipo; *ic* representa la capacidad de la infraestructura que depende de cada equipo (por ejemplo, área y potencia).

Para aplicar el indicador de impacto relativo del material (*DMR*), es necesario identificar la infraestructura utilizada en este caso de estudio, ilustrada en la **Figura 21**, que clasifica los equipos en intercambiadores de calor (*he*), recipientes de flash (*fc*), reactores (*re*), electrolizadores (*h*) y tecnologías renovables (*jrt*). Luego se les asocia un parámetro que engloba el material requerido en cada uno de los equipos del sistema (*REQ*). Para lograr esto, primero es necesario identificar la masa de los materiales enfatizando que dependen de la capacidad de la infraestructura. Posteriormente se les asigna un factor de normalización (*Norm*) que caracteriza la masa de los materiales con el fin de agruparlos como un conjunto único. El factor de normalización utilizado es el Potencial de Agotamiento Abiótico (*ADP*) que utiliza como unidad de referencia la masa equivalente de antimonio (*Sbeq*), cuantificando todos los materiales que componen una masa; independientemente de la naturaleza que la compone. Debido a que los equipos que componen el sistema (*he*, *fc* y *re*) son principalmente de acero (**Tabla 5 - 10**), se utiliza el factor de normalización del acero con un valor de $1,10 \times 10^{-6}$ toneladas *Sbeq* / toneladas con el fin de obtener la masa de los equipos en términos de *Sbeq*.

Además, se han utilizado valores reportados en la literatura para los requerimientos de material normalizados (*REQ*) de los electrolizadores (*h*) y tecnologías renovables (*jrt*) que

CAPÍTULO III

pueden ser utilizados en este caso de estudio para obtener la masa equivalente de antimonio (Sb_{eq}) con los valores mostrados en la **Tabla 4**. Vale la pena señalar que la masa de Sb_{eq} para el resto de equipos (he, fc y re) se obtendrá normalizando la masa del acero que los compone.

Tabla 4. Requerimientos de material en función de la capacidad del equipo.

Infraestructura	Requerimientos de material	Unidades
<i>Tecnología</i>		
Eólica	62.32×10^{-1}	tons Sb_{eq} / MW
Solar	2.344×10^{-1}	tons Sb_{eq} / MW
Hidroeléctrica	5.236×10^{-1}	tons Sb_{eq} / MW
<i>Electrolizador</i>	2.701×10^{-1}	tons Sb_{eq} / MW

Tabla 5. Clasificación de intercambiadores de calor.

Equipo	Clasificación	Área (m ²)	Acero (ton)	Sb_{eq} (ton)
	B1	94.54	1.48	1.63×10^{-6}
	B2	255.48	4.01	4.41×10^{-6}
	B3	923.33	14.50	1.59×10^{-5}
	R001-HA	190.00	2.98	3.28×10^{-6}
	R001-HB	159.99	2.51	2.76×10^{-6}
	R001-HC	139.98	2.20	2.42×10^{-6}
	HEATEX1	125.27	2.00	2.20×10^{-6}
	HEATEX2	115.01	1.81	1.99×10^{-6}
	HEATEX3	612.96	9.62	1.06×10^{-5}
	HEATEX4	477.93	7.50	8.25×10^{-6}
	HEATEX5	220.12	3.46	3.80×10^{-6}
	HEATEX6	4.90	0.08	8.47×10^{-8}

Tabla 6. Clasificación de los recipientes de flash.

Equipo	Clasificación	Diámetro (m)	Altura (m)	Área (m ²)	Acero (ton)	Sb_{eq} (ton)
	PSA	1.68	3.66	23.68	1.14	1.25×10^{-6}
	CA-FLASH	6.10	18.14	405.69	20.56	2.26×10^{-5}
	AN-FLASH	4.42	13.26	214.78	10.89	1.20×10^{-5}
	FLASH1	1.83	3.66	26.27	1.24	1.36×10^{-6}

CAPÍTULO III

	FLASH2	1.98	5.79	42.21	2.13	2.34×10^{-6}
	FLASH3	1.52	4.11	23.35	1.16	1.28×10^{-6}
	FLASH4	1.98	6.10	44.11	2.24	2.46×10^{-6}
	FLASH5	0.91	3.66	11.82	0.62	6.79×10^{-7}
	FLASH6	1.98	6.10	44.11	2.24	2.46×10^{-6}

Tabla 7. Clasificación de los reactores.

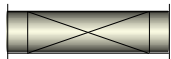
Equipo	Clasificación	Diámetro (m)	Altura (m)	Área (m ²)	Acero (ton)	Sb _{eq} (ton)
	R001-A	2.00	2.20	20.11	0.82	8.98×10^{-7}
	R001-B	2.00	2.40	21.36	0.89	9.79×10^{-7}
	R001-C	2.00	3.30	27.02	1.22	1.35×10^{-6}
	R002	4.00	3.60	70.37	2.68	2.94×10^{-6}
	CATCON	2.44	8.69	75.88	3.93	4.32×10^{-6}

Tabla 8. Clasificación de los electrolizadores.

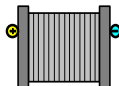
Equipo	Clasificación	Capacidad (MW)	Requerimientos de material (tons Sb eq / Sb _{eq} (ton) MW)
	STACK	752.60	2.70×10^{-1} 203.26

Tabla 9. Requerimientos de electricidad.

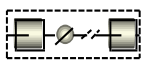
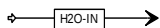
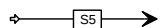
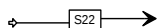
Equipo	Clasificación	Energía (MW)
	REC-PUMP	0.05
	AN-PUMP	0.02
	MCOMPR1	8.31
	MCOMPR2	5.83
	MCOMPR3	19.45
	COMPR1	1.54
	STACK	752.60

Tabla 10. Agua usada.

Corriente	Clasificación	Flujo (kg/h)
-----------	---------------	--------------

	H2-IN	18.02
	S5	180152.80
	S22	52000.00

Debido a que la separación de aire requiere cantidades sustanciales de energía y opera en condiciones extremas, se incluye un compresor en la simulación del proceso y el análisis. Todas las unidades y equipos están incluidos tanto en el análisis Ecoindicador 99 como en el CE. Considerando lo anterior, la novedad de este estudio radica en la exploración del impacto de los indicadores CE y el ACV en la configuración de la producción de amoníaco, utilizándolos como herramientas simplificadas durante la fase de diseño. Los indicadores CE se centran en el agotamiento de los recursos no renovables en la infraestructura, mientras que la metodología Ecoindicador 99 se basa en un enfoque de ACV, lo que permite la estimación de los efectos ambientales a partir de una amplia gama de bases de datos. Ambas métricas abordan de forma exhaustiva tanto el diseño como las condiciones operativas del proceso de producción de amoníaco, lo que garantiza un análisis riguroso y completo.

3.2.3 ANÁLISIS ECONÓMICO

Se realizó un análisis económico que incluyó todas las diferentes fuentes de energía renovable disponibles en cada región (eólica, solar e hidroeléctrica), ya que las fuentes de energía disponibles varían considerablemente de una región a otra. En este proceso, la obtención de datos precisos relacionados con el costo asociado con la generación de energía a partir de fuentes renovables se convirtió en una prioridad.

Posteriormente, se creó una proyección de costos que tomó en consideración todas las tendencias y factores económicos relevantes de cada región para el año 2023. El establecimiento de este análisis nos permitió determinar el costo de la producción de amoníaco verde en cada región de interés, teniendo en cuenta las características específicas de las fuentes de energía renovables, así como las condiciones económicas que se proyectaban para 2023.

Una vez determinados los costos de producción de amoníaco verde por región, la siguiente fase del análisis se centró en evaluar el impacto ambiental que tendría la producción de amoníaco verde en cada región. Este análisis integrado permite tomar decisiones informadas y permite considerar tanto los aspectos económicos como ambientales al momento de seleccionar la región más adecuada para la producción de amoníaco verde sustentable. Campion et al. (2023) presentaron ecuaciones específicas para calcular el costo de la producción de amoníaco verde en función de la fuente de energía que se utilice. La ecuación (19) se utiliza para calcular el costo del amoníaco verde utilizando energía solar, mientras que la ecuación (20) se utiliza para calcular el costo del amoníaco verde utilizando energía eólica. Estas ecuaciones proporcionan una comprensión detallada de cómo los costos se ven influenciados por variables relacionadas con la generación de energía a partir de fuentes renovables.

$$NH_3 \text{ cost}_s = 174.78 \frac{USD}{MWhr} \quad (19)$$

$$NH_3 \text{ cost}_w = 221.96 \frac{USD}{MWhr} \quad (20)$$

La ecuación (21) calcula el costo del amoníaco verde utilizando energía hidroeléctrica (Sousa et al., 2022).

$$NH_3 \text{ cost}_{hp} = 661.59 \frac{USD}{tons} \quad (21)$$

3.2 CASO DE ESTUDIO 2

Optimización de la producción de urea verde: Integración de inteligencia artificial, simulación de procesos y técnicas avanzadas de optimización

El proceso comienza con la modelación y simulación de las distintas etapas implicadas en la producción de urea verde mediante Aspen PlusTM. Estas etapas incluyen la producción de hidrógeno verde, las unidades de síntesis, la producción de amoníaco verde, los procesos de captura de CO₂ y la síntesis de urea verde. Cada proceso se diseña e intensifica para minimizar el consumo de energía manteniendo la eficiencia.

3.2.1 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

Una vez finalizadas las simulaciones, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad exhaustivo para cada proceso con el fin de recopilar una base de datos de parámetros operativos. Se identifican las variables de decisión clave para cada planta y se definen las variables objetivo, incluida la producción de amoníaco verde, el CO₂ capturado, la urea verde producida, los costes totales y el consumo de energía. Este paso sienta las bases para posteriores análisis y optimizaciones.

Tabla 11. Variables de decisión para análisis de sensibilidad.

Plantas	Parámetros	Símbolos	Valores
<i>Amoníaco verde</i>	Flujo de hidrógeno (kg/hr)	F^{H_2}	11,000 - 11,500
	Flujo de nitrógeno (kg/hr)	F^{N_2}	45,000 - 55,000
	División del flujo hacia el electrolizador	$SPLT^{electrol}$	0.1 - 0.6
	Presión del compresor (bar)	$P^{MCOMPR3}$	250 - 308
	División del flujo antes de la purificación final	$SPLT^2$	0.01667 - 0.5
	Presión en los recipientes de separación-4 (bar)	P^{FLASH4}	15 - 45
	Presión en los recipientes de separación-5 (bar)	P^{FLASH5}	15 - 45
	Presión en los recipientes de separación-6 (bar)	P^{FLASH6}	10 - 30
<i>Captura de CO₂</i>	Flujo de gas de O ₂ (kg/hr)	$R^{Fluegas - O_2}$	500,000 - 557,214
	Makeup - Outmass	$Makeup^{Outmass}$	45,000 - 55,000
	Makeup - MassFrac	$Makeup^{MassFrac}$	0.1 - 0.35
	presión en la columna Stripper (bar)	$P^{stripper_column}$	0.8-1.3
<i>Urea verde</i>	NH ₃ variable (kg/hr)	F^{NH_3}	45,000 - 65,000
	CO ₂ variable (kg/hr)	F^{CO_2}	31,313 - 45,000
	F01, press (bar)	P^{F01}	142 - 173
	E02, temp (°C)	T^{E02}	150 - 180
	R01, diam (meter)	D^{R01}	2 - 3
	R01, length (meter)	L^{R01}	25 - 40

El análisis de sensibilidad, realizado con Aspen Plus utilizando las Herramientas de Análisis de Modelos - Sensibilidad, se evaluó el impacto de diferentes variables operativas

en la producción de amoníaco verde, secuestro de carbono y urea verde. La **Tabla 11** presenta las variables de decisión seleccionadas para este análisis.

En la simulación del amoníaco verde, se consideraron ocho variables de decisión, incluyendo los caudales de H_2 y N_2 (kg/h), la división del caudal hacia el electrolizador (ELECTROL, REC-SPLT), la presión en el compresor MCOMPR3 (bares), la división del caudal antes de la purificación final (SPLITT2) y la presión en los recipientes de separación (FLASH4, FLASH5 y FLASH6, en bares). Las principales variables de respuesta fueron el amoníaco verde producido ($F^{green-NH_3}$), el costo total anual ($TAC^{green-NH_3}$) y el consumo total de energía ($ELC^{green-NH_3}$). Este análisis generó 6,552 iteraciones, dando como resultado 72,072 datos totales, con 52,416 datos de variables de decisión y 19.656 datos de respuesta.

En la simulación de captura de carbono, se seleccionan cuatro variables de decisión, relacionadas con el flujo de gas (Fluegas) y la manipulación de la cantidad de O_2 (kg/h), los parámetros MakeUp (Outmass y MassFrac), y la presión en la columna Stripper (bares). Al igual que en la simulación anterior, se analizaron como variables de respuesta el flujo de CO_2 capturado (F^{CO_2}), el coste total anual (TAC^{CO_2-cap}) y el consumo total de energía (ELC^{CO_2-cap}). Este análisis arrojó 625 iteraciones y un total de 4.375 datos, distribuidos en 2,500 datos de variables de decisión y 1,875 variables de respuesta.

Para la simulación de la urea verde, se seleccionaron seis variables de decisión: la $F^{green-NH_3}$ y F^{CO_2} (kg/h), la presión del recipiente de separación F01 (bar), la temperatura del reactor E02 ($^{\circ}C$) y las dimensiones del reactor R01 (altura y diámetro, en metros). Las principales variables de respuesta fueron la urea verde producida ($F^{green-urea}$), el coste total anual ($TAC^{green-urea}$) y el consumo total de energía (ELC^{CO_2-cap}). El análisis dio lugar a 4.047 iteraciones, con un total de 36,423 datos, distribuidos en 24,282 datos de variable de decisión y 12,141 datos de respuesta.

Por último, los TAC y los consumos energéticos se calcularon utilizando Aspen Process Economic Analyzer (APEA), una herramienta basada en la tecnología Aspen Icarus que permite generar estimaciones tanto detalladas como conceptuales.

3.2.2 OPTIMIZACIÓN DE HIPERPARÁMETROS

Se sabe con certeza que la selección de los hiperparámetros tiene un impacto considerable en el desempeño de los modelos de RNA. Así pues, la correcta modificación de los hiperparámetros es un avance esencial durante la etapa de entrenamiento de los modelos de RNA (Nakata y Shimazaki, 2017). Los métodos convencionales, como la prueba y el error, han sido ampliamente empleados para modificar estos hiperparámetros (Li et al., 2019). No obstante, estos procedimientos pueden resultar ineficaces y requerir mucho tiempo, particularmente para modelos complejos con una amplia variedad de parámetros. Para tratar estas restricciones, se han creado e instaurado varios métodos de optimización, tales como la búsqueda aleatoria, los algoritmos genéticos, la búsqueda en cuadrícula y la optimización bayesiana, con el objetivo de optimizar la adaptación del modelo (Wu et al., 2019; Alibrahim y Ludwig, 2021). Dentro de estos procedimientos, la optimización bayesiana sobresale como una estrategia potente y eficaz, dado que detecta de manera sistemática configuraciones ideales mucho más rápido que los métodos convencionales, como la búsqueda aleatoria o la búsqueda en cuadrícula.

El enfoque bayesiano sobresale al tratar el complicado desafío de optimizar funciones objetivo de alta dimensión, no convexas y potencialmente ruidosas, que son comunes en aplicaciones de aprendizaje automático (Cho et al., 2020; Theckel-Joy et al., 2020). Elabora de manera iterativa un modelo probabilístico alternativo, frecuentemente fundamentado en procesos gaussianos o modelos basados en árboles, con el fin de aproximar la auténtica función meta. Entonces, este modelo alternativo se emplea para sugerir el siguiente grupo de hiperparámetros a analizar, balanceando la exploración (indagación de nuevas zonas) y la explotación (reestructuración de áreas bien conocidas) mediante una función de adquisición.

La **Tabla 12** muestra los hiperparámetros optimizados, acompañados de sus valores mínimo y máximo correspondientes y el tamaño de paso establecido para cada parámetro. Estos rangos se determinaron a partir de experimentos de entrenamiento preliminares llevados a cabo a través del método de prueba y error. Es crucial destacar que el ritmo de aprendizaje no se vincula a un tamaño de paso establecido, sino que se muestrea de manera aleatoria dentro del rango determinado en una escala logarítmica, lo que facilita un análisis más extenso de los posibles valores.

Tabla 12. Espacio de búsqueda de hiperparámetros para el algoritmo de hiperbanda.

Hiperparámetros	Escala	Mín	Max	Paso
Hidden layer	Integer	1	5	1
Neuron per layer	Integer	5	50	1
Learning rate	Log	1e-5	1e-1	-
L2 regularization	Log	1e-4	1e-1	-

Para mitigar el sobreajuste, se emplearon dos técnicas clave: La regularización L2 y la parada anticipada. El mecanismo de parada temprana, configurado con un valor de paciencia de 10, garantiza que el entrenamiento se detiene cuando no se detecta ninguna mejora significativa en el rendimiento del modelo a lo largo de épocas sucesivas. Este proceso sistemático de optimización de hiperparámetros, que incluye la regularización L2 como una de las variables ajustadas, mejora la alineación de los modelos con los datos. Mediante el ajuste fino de parámetros como la regularización L2, junto con otros, el proceso logra un equilibrio óptimo entre la precisión predictiva y la generalizabilidad, mitigando aún más el riesgo de sobreajuste.

3.2.3 OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO

Con el objetivo de establecer un modelo matemático para llevar a cabo la optimización multiobjetivo, se presentan las representaciones matemáticas de la RNA aplicada al proceso integral de producción de urea verde. Es bien sabido que cualquier modelo predictivo basado en aprendizaje automático o inteligencia artificial utiliza un conjunto de datos para encontrar un modelo f que permita realizar predicciones sobre las variables deseadas, representado como $[y_1, y_2, \dots, y_m] = f(x_1, x_2, \dots, x_i)$ donde m corresponde al número de variables de salida e i al número de variables de entrada del modelo. En este contexto, las plantas modeladas por RNA pueden describirse matemáticamente mediante las ecuaciones presentadas. Estas ecuaciones representan los modelos desarrollados para cada planta dentro del esquema integral de producción de urea verde, estableciendo la relación entre las variables clave de salida y sus correspondientes variables de entrada, cuyo detalle se recoge en la **Tabla 11**.

$$\begin{bmatrix} F^{green_NH_3} \\ TAC^{green_NH_3} \\ ELC^{green_NH_3} \end{bmatrix} = f^{ANN} \left(F^{H_2}, F^{N_2}, SPLT^{electrol}, P^{MCOMPR3}, SPLT^2, P^{FLASH4}, P^{FLASH5}, P^{FLASH6} \right) \quad (22)$$

En concreto, la **Ecuación 12** corresponde a la planta de amoníaco y predice el flujo de amoníaco verde producido ($F^{green_NH_3}$), el costo total anual ($TAC^{green_NH_3}$) y el consumo total de energía ($ELC^{green_NH_3}$), en función de ocho variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{CO_2} \\ TAC^{CO_2-cap} \\ ELC^{CO_2-cap} \end{bmatrix} = f^{ANN} \left(R^{Fluegas-O_2}, Makeup^{Outmass}, Makeup^{MassFrac}, P^{stripper_column} \right) \quad (23)$$

La **Ecuación 2** describe la planta de captura de CO₂, modelando el flujo de CO₂ capturado (F^{CO_2}), el costo total anual (TAC^{CO_2-cap}) y el consumo total de energía (ELC^{CO_2-cap}) a partir de cuatro variables de entrada.

$$\begin{bmatrix} F^{green_urea} \\ TAC^{green_urea} \\ ELC^{green_urea} \end{bmatrix} = f^{ANN} \left(F^{green_NH_3}, F^{CO_2}, P^{F01}, T^{E02}, D^{R01}, L^{R01} \right) \quad (24)$$

Por último, la **Ecuación 3** representa la planta de urea verde, prediciendo el flujo de urea verde producida (F^{green_urea}), el costo total anual (TAC^{green_urea}) y el consumo total de energía (ELC^{green_urea}) en función de seis variables de entrada. Es importante señalar que las predicciones de las **Ecuaciones 1 y 2**, que corresponden al flujo de amoníaco verde producido ($F^{green_NH_3}$) y CO₂ capturado (F^{CO_2}), respectivamente.

Para calcular el costo total anual ($TAC^{overall}$) del esquema integral, se realiza la suma de los costos individuales de cada planta, expresada matemáticamente de la siguiente manera,

$$TAC^{overall} = TAC^{green_amm} + TAC^{CO_2-cap} + TAC^{green_urea} \quad (25)$$

Del mismo modo, el consumo global de energía eléctrica ($ELC^{overall}$) del esquema integral se obtiene sumando los consumos individuales de energía de cada planta, representados del siguiente modo:

$$ELC^{overall} = ELC^{green_amm} + ELC^{CO_2_cap} + ELC^{green_urea} \quad (26)$$

En consecuencia, la función objetivo del modelo considera la maximización de la producción de urea verde, junto con la minimización del costo total anual global y del consumo global de energía eléctrica del esquema integral.

$$O.F. = \{ \max UREA, \min TAC^{overall}, \min ELC^{overall} \} \quad (27)$$

Cabe señalar que esta función objetivo corresponde a un modelo de optimización multiobjetivo, diseñado para equilibrar eficazmente los diferentes objetivos operativos del sistema.

Además, para identificar la solución que equilibra eficazmente los distintos objetivos, se realiza una normalización de las variables objetivo mediante la técnica Min-Max Scaling. Este método reescala los valores de las variables objetivo a un rango uniforme entre 0 y 1, asegurando que todas las variables son comparables, independientemente de sus magnitudes o unidades originales. Las ecuaciones utilizadas para la normalización son las siguientes:

$$F^{green_urea_scaled} = \frac{F^{green_urea} - \min(F^{green_urea})}{\max(F^{green_urea}) - \min(F^{green_urea})} \quad (28)$$

$$TAC^{overall_scaled} = \frac{TAC^{overall} - \min(TAC^{overall})}{\max(TAC^{overall}) - \min(TAC^{overall})} \quad (29)$$

$$ELC^{overall_scaled} = \frac{ELC^{overall} - \min(ELC^{overall})}{\max(ELC^{overall}) - \min(ELC^{overall})} \quad (30)$$

En las **Ecuaciones 28, 29 y 30**, los valores originales de las variables objetivo (F^{green_urea} , $TAC^{overall}$, y $ELC^{overall_scaled}$) se transforman en valores escalados, lo que facilita su comparación en una escala común. Por ejemplo, representa la producción de urea verde normalizada con respecto a los valores mínimo ($\min(TAC^{overall})$) y máximo ($\max(TAC^{overall})$) observados en las soluciones.

Además, para evaluar y seleccionar la solución más equilibrada, se calcula para cada solución un indicador denominado puntuación de equilibrio (BS). Esta puntuación se obtiene sumando los valores normalizados de las variables objetivo de la siguiente manera:

$$B.S. = (1 - F^{green_urea}) + TAC^{overall_scaled} + ELEC^{overall_scaled} \quad (31)$$

Donde $1 - F^{green_urea}$ penaliza las soluciones con menor producción de urea verde, $TAC^{overall_scaled}$ evalúa los costos totales anuales en su escala normalizada y $ELC^{overall_scaled}$ representa el consumo total de energía normalizado.

Por lo tanto, la solución con el menor $B.S.$ se considera la más equilibrada, ya que minimiza las soluciones relativas de todas las variables objetivo. Este enfoque garantiza que ninguna variable domine sobre las demás, promoviendo un compromiso adecuado entre la maximización de la producción de urea verde, la minimización de los costos totales anuales y la reducción del consumo total de energía.

Por otro lado, se emplean tres enfoques de optimización diferentes: metaheurístico, determinista y bayesiano, con el objetivo de identificar la mejor solución para el esquema integrado de producción de urea verde. Cada enfoque aporta ventajas únicas y se basa en principios diferentes, lo que permite una evaluación exhaustiva de los resultados obtenidos.

Optimización metaheurística: se utiliza el algoritmo NSGA-3 (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm III), un algoritmo evolutivo diseñado específicamente para problemas de optimización multiobjetivo (Deb et al., 2014; Blank y Deb, 2020). Este enfoque se basa en la simulación de procesos evolutivos, en los que una población inicial de soluciones se mejora iterativamente mediante operadores como el cruce, la mutación y la selección. El NSGA-3 es particularmente eficaz en el manejo de múltiples objetivos en conflicto, permitiendo explorar una amplia gama de soluciones equilibradas, considerando objetivos como la maximización de la producción, la minimización de costes y la reducción del consumo energético.

Optimización bayesiana: El algoritmo utilizado en este enfoque es el Multi-objective Tree-structured Parzen Estimator (MOTPE), una técnica que combina el modelado probabilístico y una estructura arborescente para explorar eficientemente el espacio de

búsqueda (Ozaki et al., 2020; Shuhei, 2023). A diferencia de los métodos tradicionales, el TPE utiliza distribuciones probabilísticas para priorizar las regiones prometedoras del espacio de soluciones, lo que reduce significativamente el número de evaluaciones necesarias para encontrar óptimos.

Optimización determinista: Para este enfoque se utiliza la herramienta OMLT (Optimization and Machine Learning Toolkit), que permite integrar modelos de aprendizaje automático, como las redes neuronales, en problemas de optimización determinista (Ceccon et al., 2022; López-Flores et al., 2024). Este enfoque se basa en la construcción de modelos matemáticos exactos que representan el sistema, utilizando RNAs para capturar relaciones complejas entre variables de entrada y salida. La optimización determinista es particularmente ventajosa cuando se requiere precisión y fiabilidad, ya que permite garantizar que las soluciones obtenidas cumplen con restricciones estrictas y objetivos específicos del sistema. Por otra parte, OMLT se ha aplicado para la optimización de la gestión del agua y la producción de gas de esquisto (López-Flores et al., 2023), el despacho de sistemas de almacenamiento de energía (Hou et al., 2023), el diagrama de flujo de procesos químicos de reactores de Gibbs (Bugosen et al., 2024), los sistemas energéticos integrados (Jalving et al., 2023) y la producción de paneles solares fotovoltaicos (López-Flores et al., 2024).

La integración de estos tres métodos proporciona una visión robusta que facilita valorar su efectividad en aspectos como la cercanía al ideal global, la rapidez de convergencia y la administración de metas conflictivas. Los métodos metaheurísticos sobresalen en la exploración de grandes espacios y la creación de frentes de Pareto, los métodos bayesianos resultan eficientes en situaciones con recursos escasos y los métodos deterministas ofrecen soluciones exactas y confiables, lo que los convierte en útiles para verificar resultados.

4. RESULTADOS

4.1 ANÁLISIS DE LAS SIMULACIONES DE PROCESO

La simulación detallada del proceso respaldada en este trabajo no sólo demuestra su viabilidad técnica, sino que también sigue el camino para un enfoque más sostenible y respetuoso con el medio ambiente dentro de la producción industrial. Esta investigación se ha marcado como objetivo implementar fuentes de energía limpia, comúnmente conocidas como energías verdes, para minimizar el impacto ambiental asociado al proceso. Este enfoque también ha demostrado ser particularmente eficaz a la hora de aprovechar las corrientes frías y calientes para crear un intercambio de calor, aplicando la integración energética para reducir significativamente el consumo total de energía (Tabla 13-15).

Tabla 13. Balance de materia y energía para el amoníaco.

		H ₂ O-IN	H ₂ FEED	AIRFEED	AMMONIA
Fase		Líquida	Vapor	Vapor	Líquida
Temperatura	C	25	77.240	33	33.425
Presión	bar	8	7	2.942	20
Entalpía molar	cal/mol	-68268.935	23.165	362.842	-15729.870
Flujo másico	kg/h	18.015	11078.892	68498.058	54968.090
CO ₂	kg/h	0	0	31.219	7.294
CO	kg/h	0	0	0	0
H ₂	kg/h	0	11078.892	0	1.974
N ₂	kg/h	0	0	51687.531	16.411
CH ₄	kg/h	0	0	0	0
AR	kg/h	0	0	897.378	10.465
NH ₃	kg/h	0	0	0	54705.730
H ₂ O	kg/h	18.015	0	0	0
O ₂	kg/h	0	0	15881.929	226.213

Tabla 14. Balance de materia y energía para la captura de carbono.

		MEAMU	FLUEGAS	CO ₂
Fase		Líquida	Vapor	Vapor
Temperatura	C	20	50	94.98563822
Presión	bar	1.05	1.08	1
Entalpía molar	cal/mol	-64527.87666	-8816.302141	-62837.55305
Flujo másico	kg/hr	26.04928862	950000	120150
MEA	kg/hr	26.04928862	0	22.29295663

CAPÍTULO IV

H ₂ O	kg/hr	0	70520.40734	82665.61797
CO ₂	kg/hr	0	37451.16733	37415.80391
H ₂ S	kg/hr	0	0	0
O ₂	kg/hr	0	176451.2185	15.04917857
N ₂	kg/hr	0	665577.2068	31.23596379

Tabla 15. Balance de materia y energía para la urea.

		S01	S07	S15	S12
Fase		Líquida	Vapor	Vapor	Líquida
Temperatura	C	34	100	86.1616566	72.4
Presión	kg/sqcm	160	141	141	141
Entalpía molar	cal/mol	-15807.6763	-87575.3566	-4406.80531	-70192.5738
Flujo másico	kg/hr	24153.5917	32939.5373	1603.95875	55486.7846
UREA	kg/hr	0	0	6.63E-05	42571.2017
CARB	kg/hr	0	0	0.00022463	0
CO ₂	kg/hr	0	31312.9727	113.868246	0
NH ₃	kg/hr	24153.5917	0	8.53972294	0
H ₂ O	kg/hr	0	142.620967	3.81301313	12909.3697
N ₂	kg/hr	0	1283.95117	1280.25245	3.70301054
O ₂	kg/hr	0	199.9925	197.485025	2.51019959

El uso de recursos renovables es una de las principales fortalezas de esta investigación siendo el agua y el aire algunos de sus insumos iniciales. Estos recursos se gestionan de forma eficiente y sostenible durante todo el proceso gracias a la herramienta de integración másica. Esta estrategia innovadora no sólo asegura un manejo más eficiente de las materias primas, sino que también contribuye a mitigar la huella ambiental del proceso.

En los resultados prácticos obtenidos (**Tabla 13**), la implementación de un flujo de alimentación de 18.01528 kg/hr permitió mantener de manera exitosa un flujo constante en el MAKEUP de 7,227,461.838 kg/hr, evidenciando la robustez del sistema desarrollado gracias a la integración másica. Asimismo, al utilizar un caudal de alimentación de aire de 68,498.0585 kg/hr, se alcanzó una producción de amoníaco de 54,705.7307 kg/hr, lo que reafirma la efectividad y eficiencia del proceso en términos de rendimiento y producción.

En relación con la captura de carbono (**Tabla 14**), esta tecnología se destaca como una solución clave para el futuro de la industria moderna debido a su capacidad para mitigar los gases de efecto invernadero. En este caso, el gas contaminante se captura mediante aminas, logrando retener un total de 37,415.80391 kg/hr, lo que permite aprovecharlo como materia prima para otros procesos.

Finalmente, en la producción de urea (**Tabla 15**), se demuestra el potencial de aplicar herramientas y materias primas sustentables. Al emplear amoníaco verde y dióxido de carbono (31,312.9727 kg/hr y 24,153.5917 kg/hr, respectivamente), se obtiene urea verde, un fertilizante de alta demanda a nivel mundial por su contribución a la producción sostenible de alimentos.

Estos hallazgos no solo respaldan la viabilidad técnica de la simulación de procesos, sino que también enfatizan el papel crucial que desempeñan en la transformación de la industria hacia una práctica más sostenible y respetuosa con el medio ambiente. Este enfoque integrador hacia la energía limpia y la gestión eficiente de los recursos sienta las bases para futuras investigaciones y desarrollos en el campo de la ingeniería de procesos con un enfoque medioambiental.

4.2 RESULTADOS DEL CASO DE ESTUDIO 1

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para la metodología propuesta en el caso de estudio 1.

4.2.1 RESULTADOS DEL ECOINDICADOR 99

Para este estudio de caso en particular, los resultados obtenidos a través del Ecoindicador 99 brindan información valiosa sobre el impacto ambiental que se generó en varias regiones del mundo. Los datos reportados en la **Figura 26** muestran el Ecoindicador 99 puntos (Pt) por tonelada de amoníaco (Pt/Ton NH₃).

Las regiones de Europa y Rusia producen altos niveles de amoníaco verde, más de 18 millones de toneladas al año. Sin embargo, en los resultados se puede observar un impacto ambiental significativo; es una puntuación del Ecoindicador 99 de 3.7×10^9 , lo que se traduce en un valor normalizado de aproximadamente 2.07×10^2 Pt/Ton NH₃. Esto indica que la producción de amoníaco verde en estas regiones genera un impacto ambiental

considerable. Las regiones de América del Norte y Canadá son similares a las de Europa y Rusia con una producción de 16,5 millones de toneladas al año. Su puntuación del Ecoindicador 99 es 3.22×10^9 , lo que equivale a un valor normalizado de 1.95×10^2 Pt/Ton NH_3 . Esto demuestra que, aunque la producción de amoníaco es alta, el impacto ambiental de la producción de amoníaco verde es considerable. China, uno de los mayores productores de amoníaco verde, produce más de 55 millones de toneladas al año; y como era de esperar, su puntuación Ecoindicador 99 es alta con un valor de 3.09×10^{10} , lo que equivale a un valor normalizado de 1.95×10^2 Pt/Ton NH_3 , un valor similar al de América del Norte y Canadá.

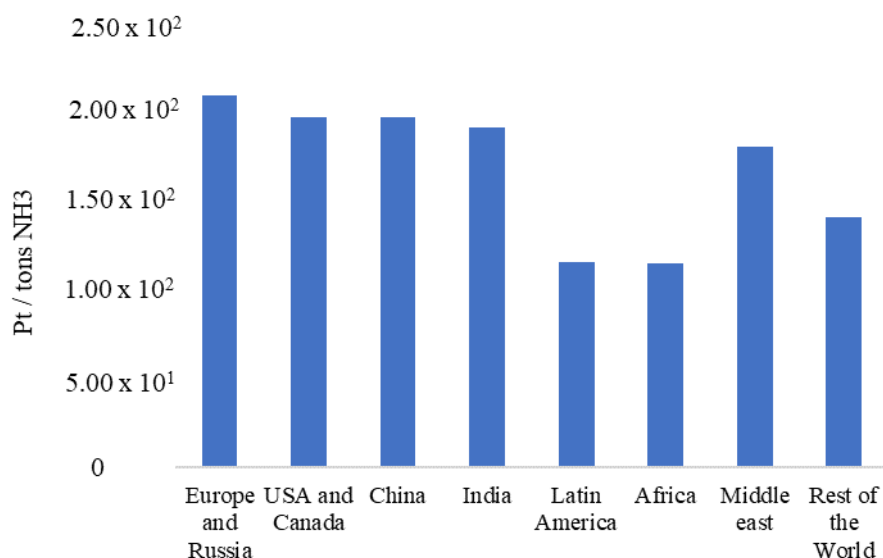


Figura 26. Resultados del Ecoindicador 99.

Esto demuestra que la producción de amoníaco verde en China tiene un impacto ambiental significativo. India produce casi 16 millones de toneladas de amoníaco verde al año, pero con un impacto ambiental sustancialmente menor en comparación con las otras regiones mencionadas anteriormente. La puntuación del Ecoindicador 99 de la India es 2.28×10^9 , lo que equivale a un valor normalizado de 1.89×10^2 Pt/Ton NH_3 . América Latina produce alrededor de 11 millones de toneladas de amoníaco verde al año, y su puntuación en el Ecoindicador 99 es de 1.27×10^9 , lo que resulta en un valor normalizado de 1.14×10^2 Pt/Ton NH_3 . Este es un valor moderado en relación con la producción. África produce aproximadamente 7 millones de toneladas de amoníaco verde al año y su puntuación

en el Ecoindicador 99 es de 8.02×10^8 , lo que da como resultado un valor normalizado de 1.13×10^2 Pt/Ton NH_3 . Oriente Medio produce alrededor de 14,3 millones de toneladas de amoníaco verde al año, y su puntuación en el Ecoindicador 99 es de 2.55×10^9 , lo que da como resultado un valor normalizado de 1.79×10^2 Pt/Ton NH_3 , que es un valor significativo en relación a su producción. El Resto del Mundo con una producción anual de 38 millones de toneladas de amoníaco verde al año obtuvo una puntuación del Eco-indicador 99 de 5.28×10^9 , lo que resulta en un valor normalizado de 1.39×10^2 Pt/Ton NH_3 .

Las representaciones gráficas, específicamente las **Figuras 27 - 29**, exhiben los resultados detallados del Ecoindicador 99 en relación con la salud humana, la calidad de los ecosistemas y el impacto en los recursos. Al observar estos datos visuales, se destaca una coherencia relativa en el impacto en la salud humana entre Europa, Rusia, América del Norte, Canadá y China, mientras que América Latina y África presentan un impacto menor en este aspecto.

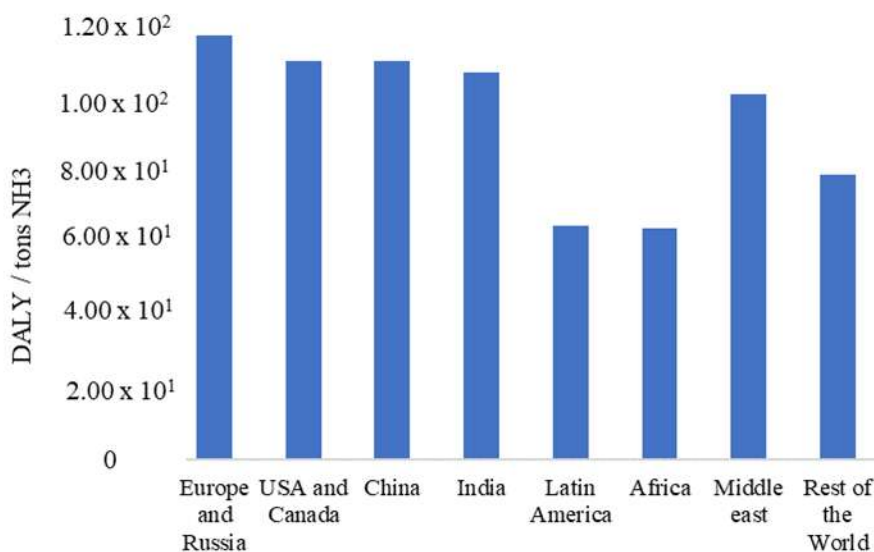


Figura 27. *Resultados de salud humana.*

A pesar de estas tendencias, surge una discrepancia intrigante al analizar el impacto ambiental derivado de la producción de amoníaco verde. China, como el principal actor en la producción, muestra un impacto ambiental comparativamente más sostenible en contraste con regiones como Europa, Rusia, América del Norte, Canadá, India y Medio Oriente.

Aunque estas últimas tienen una producción inferior, su huella ambiental es más pronunciada. Este fenómeno podría atribuirse a las notables disparidades en la cantidad y disponibilidad de recursos de energía renovable, como la eólica, solar e hidroeléctrica, que varían de una región a otra. Esto sugiere que el costo de producción puede experimentar aumentos considerables en función de la región.

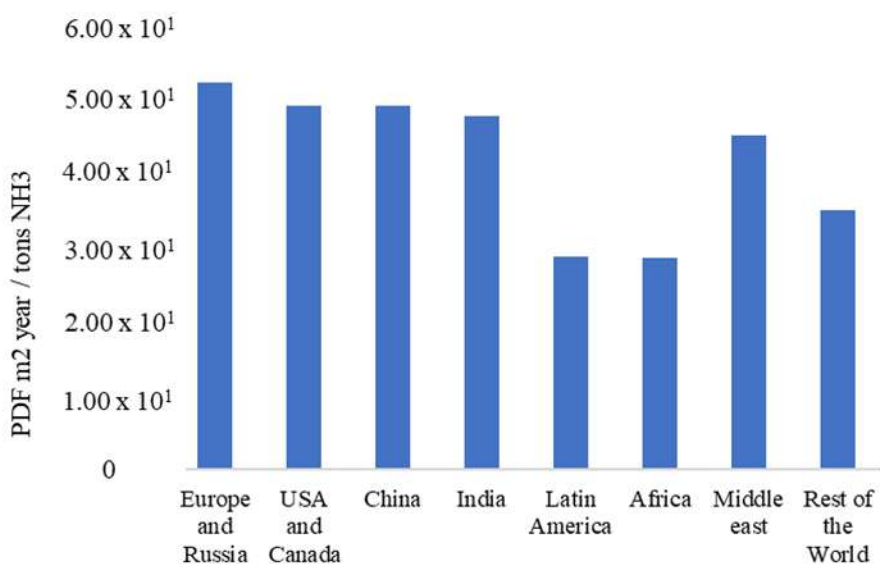


Figura 28. *Resultados de calidad de los ecosistemas.*

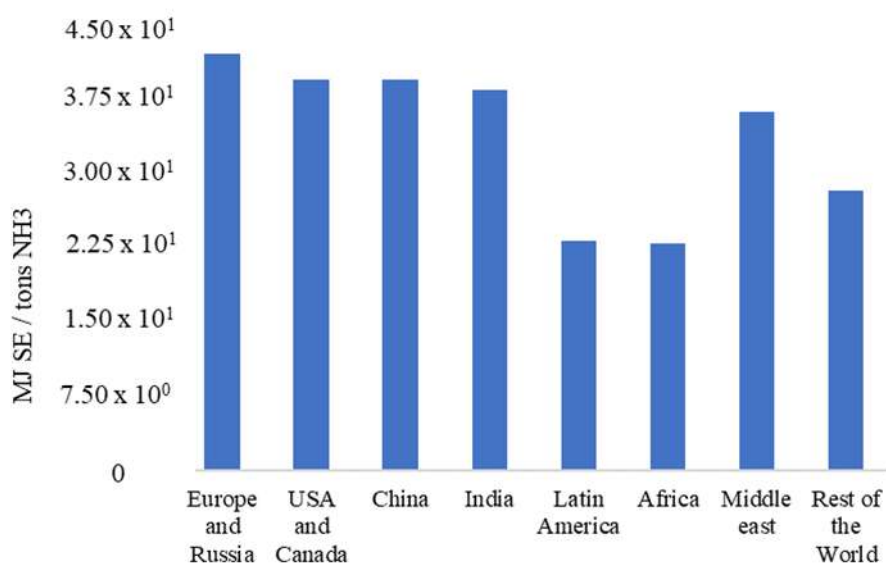


Figura 29. *Resultados de recursos.*

Adicionalmente, se observa una variación en la eficiencia de las tecnologías empleadas para convertir la energía renovable en electricidad según la región. La selección de tecnologías más eficientes y menos contaminantes se presenta como un factor clave que puede influir positivamente tanto en la cantidad de energía necesaria como en la huella ambiental global. Estos descubrimientos resaltan la necesidad de considerar, no solo la cantidad de producción, sino también la eficiencia y sostenibilidad al elegir tecnologías y gestionar recursos en diferentes contextos geográficos.

4.2.2 RESULTADOS DE LA METRICA EC

Para satisfacer la producción mundial de amoníaco en 2023 (177,15 millones de toneladas), se necesitan 597,437.15 toneladas de Sb_{eq} , distribuidas regionalmente. China representa el 38.14% de estas necesidades, seguida por Europa y Rusia (13.91%), EE.UU. y Canadá (12.46%), India (8.14%), América Latina (4.77%), Oriente Medio (4.14%) y África (2.74%). El resto del mundo requiere un 15.70%.

En todas las regiones, los equipos como intercambiadores de calor, recipientes flash y reactores tienen material de bajo impacto, debido al predominio del acero en su fabricación (Tabla 16). Por el contrario, los electrolizadores y tecnologías renovables generan un impacto significativo, ya que emplean materiales como hierro, aluminio, cobre, resina epoxi y níquel.

Tabla 16. Requerimientos totales de material en la infraestructura del sistema.

Productores	Intercambiadores de calor (tons Sb_{eq})	Recipiente Flash (tons Sb_{eq})	Reactores (tons Sb_{eq})	Electrolizadores (tons Sb_{eq})	Eólica (tons Sb_{eq})	Solar (tons Sb_{eq})	Hidroeléctrica (tons Sb_{eq})	Total (tons Sb_{eq})
Europa y Rusia	2.182×10^{-3}	1.767×10^{-3}	3.992×10^{-4}	7,732.55	66,631.50	1,089.42	7,660.19	83,113.66
USA y Cándada	1.980×10^{-3}	1.603×10^{-3}	3.622×10^{-4}	7,016.58	59,403.26	991.45	7,033.37	74,444.67
China	6.695×10^{-3}	5.420×10^{-3}	1.225×10^{-3}	23,722.71	175,262.81	3,694.60	25,163.45	22,7843.58
India	1.886×10^{-3}	1.527×10^{-3}	3.450×10^{-4}	6,682.45	33,249.52	1,698.84	6,972.98	48,603.80
América Latina	1.334×10^{-3}	1.080×10^{-3}	2.439×10^{-4}	4,725.45	15,839.62	284.57	7,622.93	28,472.57
África	8.486×10^{-4}	6.870×10^{-4}	1.552×10^{-4}	3,007.10	8,284.25	255.34	4,835.98	16,382.68
Medio Oriente	1.711×10^{-3}	1.385×10^{-3}	3.129×10^{-4}	6,061.94	10,065.69	2,289.34	6,342.93	24,759.90
Resto del mundo	4.553×10^{-3}	3.686×10^{-3}	8.328×10^{-4}	16,133.35	52,429.33	2,497.75	22,755.87	93,816.32

Las tecnologías eólicas dominan las necesidades materiales en la mayoría de las regiones, representando entre el 40% y el 80% del total, mientras que las tecnologías solares

son las menos utilizadas (entre el 1% y el 9%). Por ejemplo, China destina el 76.92% de sus recursos a tecnologías eólicas, mientras que India y América Latina asignan el 68.41% y 55.63%, respectivamente. África divide sus materiales entre tecnologías eólicas (50%), hidroeléctricas (29.52%) y electrolizadores (18.36%). Oriente Medio presenta una distribución más equitativa, destinando un 40.65% a tecnologías eólicas, seguida por hidroeléctricas (25.62%) y electrolizadores (24.48%).

Tabla 17. Configuración resultante para el indicador *DMR* en cada región.

Productores	Producción (ktons NH ₃ / year)	tons Sb _{eq}	Energía Total (MW)	<i>DMR</i> (tons Sb _{eq} year / tons NH ₃)
Europe and				
Russia	18,243.83	83,113.66	29,969.67	4.56 x 10 ⁻³
USA and Canada	16,554.59	74,444.67	27,194.70	4.50 x 10 ⁻³
China	55,970.27	227,843.58	91,943.97	4.07 x 10 ⁻³
India	15,766.27	48,603.80	25,899.71	3.08 x 10 ⁻³
Latin America	11,149.01	28,472.57	18,314.80	2.55 x 10 ⁻³
Africa	7,094.82	16,382.68	11,654.87	2.31 x 10 ⁻³
Middle East	14,302.26	24,759.90	23,494.74	1.73 x 10 ⁻³
Rest of the World	38,064.29	93,816.32	62,529.30	2.46 x 10 ⁻³

En resumen, las tecnologías eólicas lideran el consumo de materiales en todas las regiones, mientras que las solares tienen menor impacto, reflejando patrones consistentes de uso de recursos en la producción de amoníaco sostenible.

Además, la **Tabla 18** muestra el *DMR* para cada uno de los equipos que se requieren en el sistema y con los que es posible la producción de amoníaco. Conocer el *DMR* individual de cada equipo permite identificar la etapa del proceso en la que la infraestructura participa con menor y mayor impacto en el agotamiento de los recursos no renovables, en este sentido, re muestra el menor impacto en todas las regiones, mientras que las tecnologías eólicas tienen el mayor impacto, específicamente las requeridas en África. Además, se muestra que he, fc y re son eficientes debido al bajo impacto que tienen en todas las regiones, sin embargo, h y jrt son ineficientes en comparación con los equipos anteriores, y las tecnologías solares representan el menor impacto en comparación con el resto de tecnologías y a su vez,

CAPÍTULO IV

Latinoamérica y Oriente Medio tienen el menor y mayor impacto global en el uso de tecnologías solares, respectivamente. Las tecnologías hidroeléctricas tienen el mayor impacto en América Latina y el menor en Europa y Rusia. Por último, las tecnologías que mayor impacto tienen a nivel mundial son las de energía eólica, donde el mayor impacto se encuentra en la región de Oriente Medio y el menor en África.

Table 18. Indicador *DMR* en la infraestructura del sistema.

Productores	Intercambiadores de calor	Recipiente Flash	Reactores	Electrolizadores	Eólica	Solar	Hidroeléctrica
<i>DMR (tons S_{eq} year / tons NH₃)</i>							
Europa y Rusia	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	3.652×10^{-3}	5.971×10^{-5}	4.199×10^{-4}
USA y Canadá	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	3.588×10^{-3}	5.989×10^{-5}	4.249×10^{-4}
China	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	3.131×10^{-3}	6.601×10^{-5}	4.496×10^{-4}
India	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	2.109×10^{-3}	1.078×10^{-4}	4.423×10^{-4}
América Latina	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	1.421×10^{-3}	2.552×10^{-5}	6.837×10^{-4}
África	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	1.168×10^{-3}	3.599×10^{-5}	6.816×10^{-4}
Medio Oriente	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	7.038×10^{-3}	1.601×10^{-4}	4.435×10^{-4}
Resto del mundo	1.196×10^{-10}	9.683×10^{-11}	2.188×10^{-11}	4.238×10^{-4}	1.377×10^{-3}	6.562×10^{-5}	5.978×10^{-4}

En base a lo expuesto anteriormente, cabría esperar que las necesidades de material fueran proporcionales a la producción de amoníaco, es decir, a mayor demanda de amoníaco, mayores necesidades de material, sin embargo, la **Figura 31** muestra cómo funciona realmente la producción de amoníaco y el uso de las necesidades de material (*Materialreq^{Norm}*). Al comparar las regiones del Resto del Mundo con la región de Europa y Rusia, se observa que el Resto del Mundo produce prácticamente el doble de amoníaco que Europa y Rusia, sin embargo, las necesidades de material de ambas regiones son bastante similares, 93,816.32 toneladas de *S_{eq}* y 83,113.66 toneladas de *S_{eq}*, respectivamente. Esto es peculiar, ya que cabría esperar que las necesidades de material del Resto del Mundo duplicaran (173,409.97 toneladas *S_{eq}*) las de Europa y Rusia. Sin embargo, es importante destacar que Europa y Rusia utilizan una mayor cantidad de tecnologías eólicas en comparación con el Resto del Mundo. En la **Figura 31**, puede observarse que la producción de amoníaco de Oriente Medio y la India es similar, con un 8.07% y un 8.90%, respectivamente. Sin embargo, las necesidades de material de Oriente Medio son de 24,759.89 toneladas de *S_{eq}*, mientras que las de India son de 48,603.79 toneladas de *S_{eq}*,

prácticamente el doble. Una explicación de este hecho es que en Oriente Medio el uso de tecnologías eólicas es prácticamente nulo, mientras que en la India el uso de tecnologías eólicas es más frecuente. Así pues, puede afirmarse que el valor de las necesidades de material está vinculado al tipo de infraestructura necesaria, y no es proporcional a la cantidad de amoníaco producida.

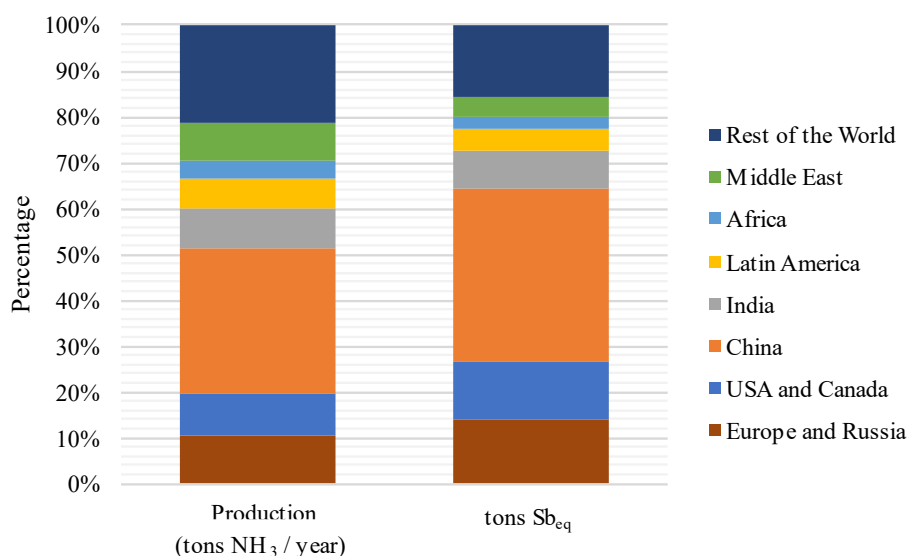


Figura 31. *Producción de NH₃ y necesidades de material de cada región.*

La **Tabla 18** muestra que el uso de tecnologías eólicas tiene un mayor impacto en el agotamiento de los recursos no renovables debido a la naturaleza de sus componentes (acero, Fe, Al, resina epoxi, fibra de vidrio), mientras que las tecnologías solares tienen un menor impacto en el agotamiento de los recursos no renovables. Los intercambiadores de calor (*he*), los recipientes de inflamación (*fc*) y los reactores (*re*), que también se fabrican principalmente en acero, tienen un impacto menor en el agotamiento de los recursos no renovables. Teniendo en cuenta lo anterior, es conveniente utilizar infraestructuras de tecnologías solares debido a su bajo impacto en el indicador *DMR*. No se recomiendan las tecnologías eólicas, ya que son las que mayor impacto tienen sobre los recursos no renovables. Las tecnologías hidroeléctricas se sitúan en un término medio.

4.2.3 ANÁLISIS ECONÓMICO

Para realizar el análisis económico se partió de la proyección para el año 2023. Tomando cada segmento tecnológico correspondiente, se obtuvo el costo del amoníaco verde para diferentes fuentes de energía renovables, anualmente y por región.

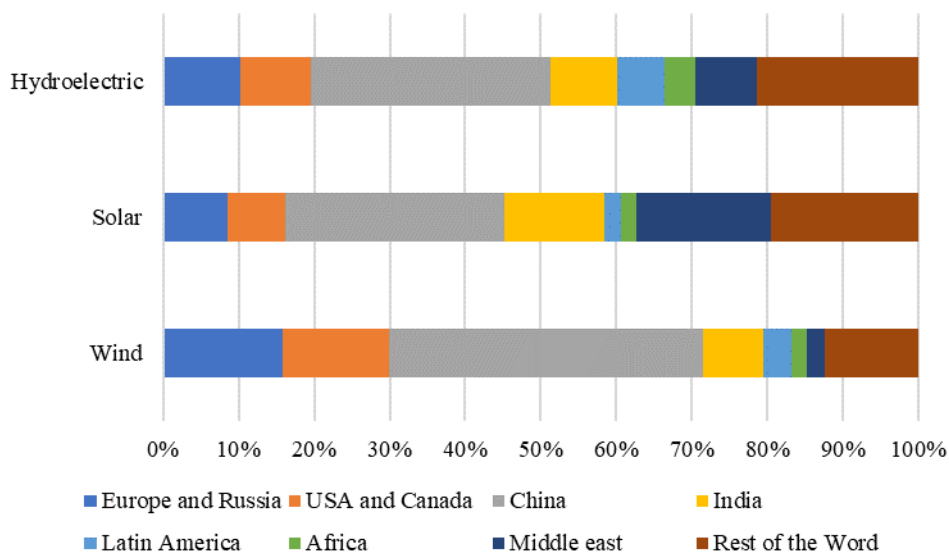


Figura 32. *Análisis económico de la producción de amoníaco verde mediante diferentes fuentes de energía renovables.*

La **Figura 32** ilustra el costo de producción de amoníaco verde como porcentaje, donde los datos varían dependiendo de la región y el tipo de energía renovable que se esté utilizando. La energía hidroeléctrica es la tecnología más económica debido a sus costos relativamente bajos de operación y mantenimiento además de ser una fuente de energía constante y predecible (Rahman et al., 2022); en comparación con la energía eólica y solar, que pueden ser erráticas y dependen de las condiciones climáticas que resultan en costos de energía fluctuantes. Además, muchas regiones ya han establecido grandes cantidades de infraestructura de energía hidroeléctrica, lo que hace que la adopción de energía hidroeléctrica sea un procedimiento más económico y eficiente. Todos estos factores hacen de la energía hidroeléctrica una opción atractiva desde una perspectiva de costos para la producción de amoníaco verde.

4.2.4 ANÁLISIS INTEGRADO

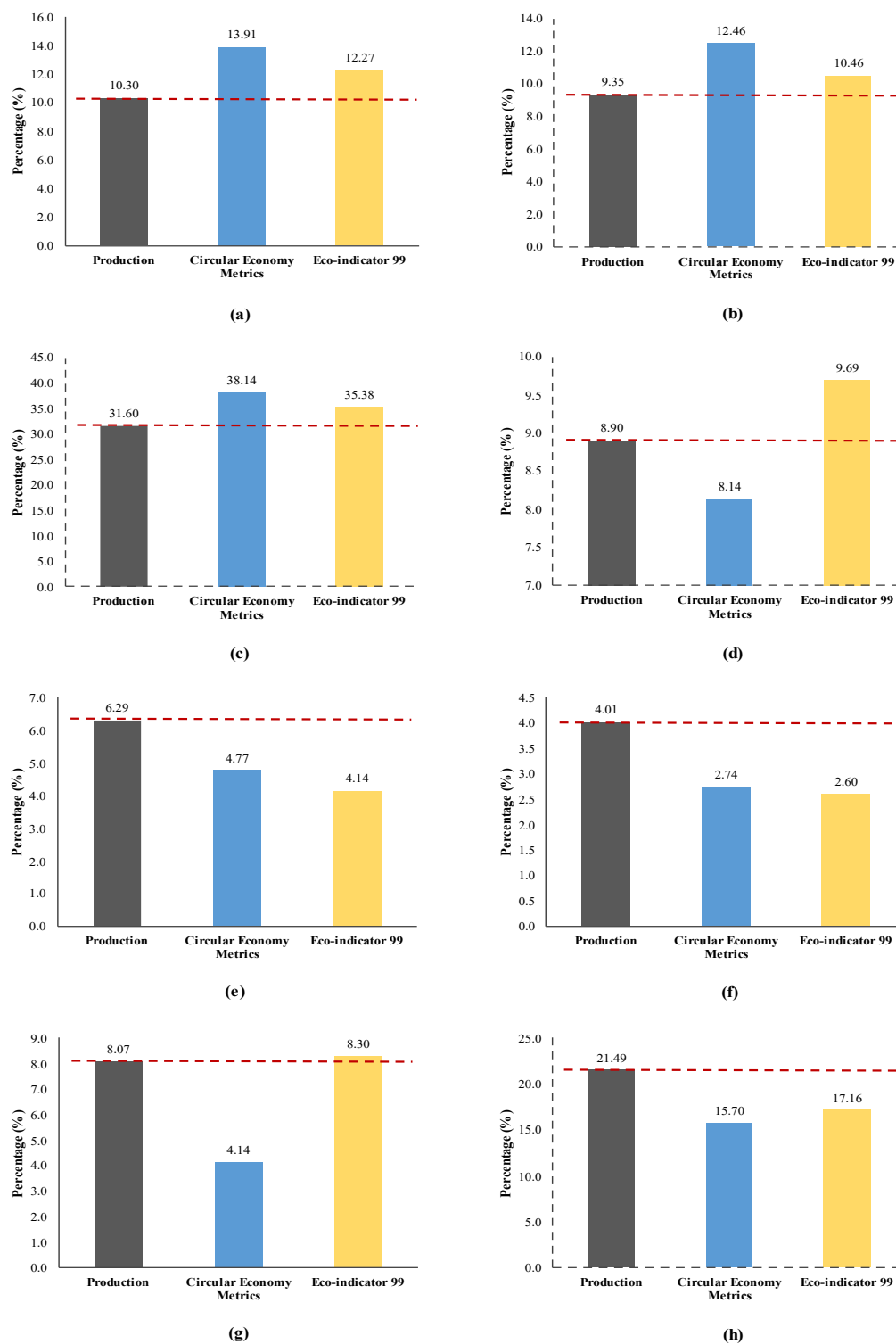


Figura 33. *Análisis entre el Ecoindicador 99 y las métricas de la EC en cada región. (a) Europa y Rusia, (b) EE.UU. y Canadá, (c) China, (d) India, (e) Latinoamérica, (f) África, (g) Oriente Medio, (h) Resto del Mundo.*

En términos generales, este caso de estudio examina las métricas medioambientales, económicas y de CE (Economía Circular). Es crucial analizar estos aspectos conjuntamente para comprender las correlaciones entre ellos. Por ejemplo, la **Figura 33** ilustra la relación entre el Ecoindicador 99 y las métricas de CE en varias regiones. Es importante señalar que estos cuantificadores se miden en unidades diferentes. Por lo tanto, presentamos su comportamiento mostrando la proporción del impacto del Ecoindicador 99 (en Pt) y de la métrica CE (en toneladas Sb_{eq}) en relación con el impacto total, haciendo referencia a la producción de amoníaco en cada región. Este enfoque permite comprender el comportamiento de los cuantificadores independientemente de sus unidades de medida.

Globalmente, los impactos para 2023 en la producción de amoníaco relacionados con el Ecoindicador 99 ascienden a 3.08×10^{10} Pt y a 5.97×10^5 toneladas Sb_{eq} en el uso de recursos no renovables asociados a infraestructuras. La producción total de amoníaco es de $1,77 \times 10^8$ toneladas. Europa y Rusia contribuyen en un 10,30% a la producción mundial de amoníaco, con impactos del 13.91% y el 12.27% para el CE y el Ecoindicador 99, respectivamente. Esta correlación es evidente, ya que ambos porcentajes superan la participación de referencia (toneladas de amoníaco producidas), lo que sitúa a estos cuantificadores por encima de la línea de referencia (véase la línea roja de la **Figura 33**). EE.UU. y Canadá muestran una tendencia similar, con una contribución del 9,35% a la producción de amoníaco y unos impactos del 12.46% y el 10.46% para el CE y el Ecoindicador 99, respectivamente. Otras regiones como China, América Latina, África y el Resto del Mundo también muestran esta tendencia, con cuantificadores siempre por encima o por debajo de la línea de referencia. Sin embargo, India y Oriente Medio muestran comportamientos diferentes entre los dos cuantificadores, con uno por encima y otro por debajo de la línea de referencia. Por ejemplo, la India contribuye en un 8,90% a la producción de NH_3 , con un impacto del 8.14% para el EC y del 9.69% para el Ecoindicador 99, lo que indica que el EC está por debajo de la línea de referencia, mientras que el Ecoindicador 99 está por encima. Oriente Medio muestra una contribución del 8,07% en la producción de NH_3 , con un 4.14% para el CE y un 8.30% para el Ecoindicador 99.

Aunque existe una correlación general entre los dos cuantificadores, no todas las regiones presentan este patrón. Una razón clave de esta variación es el impacto

medioambiental de las tecnologías de generación de energía utilizadas en cada región. Estas regiones dependen de diferentes recursos energéticos para la producción de amoníaco. Por ejemplo, los valores de impacto CE son 62.32×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW , 2.344×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW y 5.236×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW para las tecnologías eólica, solar e hidroeléctrica, respectivamente (véase la **Tabla 4**). Las tecnologías eólicas tienen el mayor impacto material, mientras que las tecnologías solares tienen el menor. En cambio, los impactos totales del Ecoindicador 99 (considerando las categorías de Salud Humana, Calidad de los Ecosistemas y Recursos) son de $3.23 \times 10^6 Pt$, $1.87 \times 10^5 Pt$ y $3.54 \times 10^4 Pt$ para las tecnologías eólica, solar e hidroeléctrica, respectivamente, considerando la electricidad, el acero y el agua (véanse la **Figura 26** y la **Tabla 3**). En este caso, las tecnologías eólicas vuelven a tener el mayor impacto, y las hidroeléctricas el menor. Cabe destacar que ambos cuantificadores muestran el mayor impacto en las tecnologías eólicas. Sin embargo, el EC cuantifica el impacto de los recursos no renovables asociados a la infraestructura de un sistema en la fase de fabricación, mientras que el Ecoindicador 99 considera los impactos ambientales a lo largo del ciclo de vida, incluidas las fases de fabricación y desmantelamiento. Esta diferencia es especialmente evidente en la penalización de las tecnologías solares por parte del Ecoindicador 99, debido principalmente a su importante impacto durante la fase de desmantelamiento, mientras que el CE se centra únicamente en los materiales utilizados en la fabricación.

Los factores económicos también desempeñan un papel fundamental en la elección de las fuentes de energía. Según los informes, las tecnologías hidroeléctricas son las más rentables, lo que plantea a los responsables de la toma de decisiones un dilema entre el impacto ambiental y la viabilidad económica. En este sentido, se ha analizado el comportamiento asociado a la infraestructura de tecnologías renovables en cada una de las regiones con el fin de conocer la región más factible en términos de aspectos económicos e impactos ambientales. En la **Figura 33** se observa que África es la región con menor impacto económico e impacto sobre el Eco-Indicador 99 ($1.27 \times 10^{14} USD$ y $8.02 \times 10^8 Pt$), mientras que China es la región más afectada en ambos aspectos ($2.36 \times 10^{15} USD$ y $1.09 \times 10^{10} Pt$), es importante mencionar que el impacto está asociado al tipo de tecnología a utilizar (eólica, solar e hidroeléctrica).

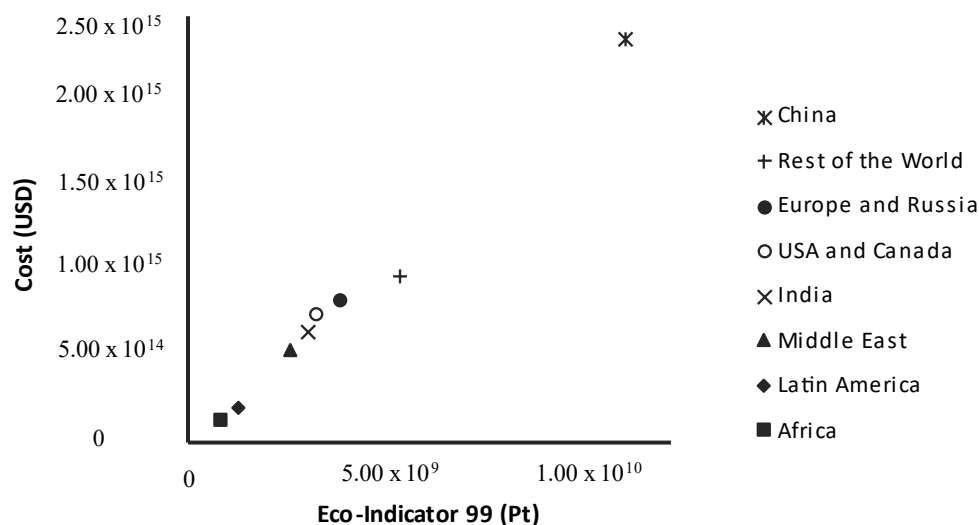


Figura 34. *Análisis entre costos y Ecoindicador 99.*

La **Figura 33** muestra el coste asociado a las tecnologías renovables y el indicador *DMR*, que da como resultado que África y Oriente Medio son los candidatos con menor coste (1.27×10^{14} USD) y *DMR* (1.73×10^{-3} toneladas Sb_{eq} año / toneladas NH_3), respectivamente; además, China es la región con menor coste (2.36×10^{15} USD) y Europa y Rusia con menor *DMR* (4.56×10^{-3} toneladas Sb_{eq} año / toneladas NH_3), sin embargo, en este escenario (coste vs. *DMR*) ninguna de las regiones es capaz de coexistir en ambos aspectos. En conclusión, este análisis revela una correlación entre las métricas CE y el Ecoindicador 99, destacando su dependencia de las etapas del proceso estudiado. Al analizar el Eco-Indicador 99 específicamente en la fase de fabricación, las métricas CE pueden servir como herramientas para un análisis simplificado, proporcionando cuantificadores indirectos y aproximados del impacto ambiental en el ACV. Es importante reconocer que este análisis ofrece una visión general, destacando que el principal impacto en la producción de amoníaco viene determinado por el tipo de tecnología utilizada para la generación de energía eléctrica.

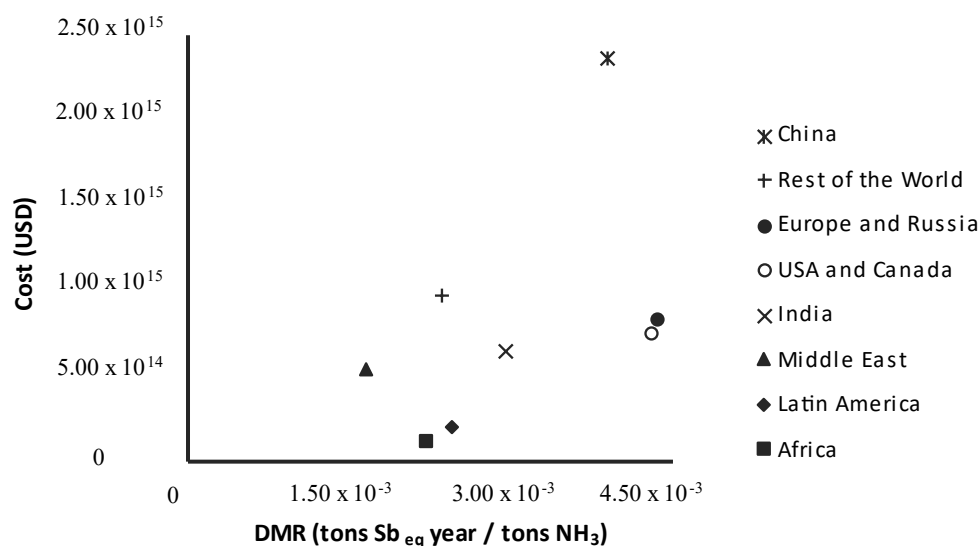


Figura 35. *Análisis entre costos y DMR.*

4.3 RESULTADOS DEL CASO DE ESTUDIO 2

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para la metodología propuesta en el caso de estudio 1.

4.3.1 RESULTADOS DEL RNA

Los conjuntos de datos de las tres plantas (amoníaco verde, captura de CO₂ y urea verde) se dividieron aleatoriamente, asignando el 80% al conjunto de entrenamiento y el 20% al conjunto de validación. Los modelos de RNA se entrenaron utilizando la función de activación ReLU, el optimizador Adam (estimación adaptativa del momento) y el error cuadrático medio (MSE) como función de pérdida. En Keras-Tuner, el número máximo de épocas de entrenamiento se fijó en 200, mientras que el algoritmo de optimización bayesiano se configuró para permitir hasta 500 ensayos. Además, se eligió la pérdida de validación (MSE) como función objetivo a minimizar, lo que ayudó a abordar posibles problemas de sobreajuste en los modelos.

A continuación, se presentan las arquitecturas de los mejores modelos obtenidos mediante la optimización de hiperparámetros:

- Amoníaco verde: Ocho entradas, tres salidas y cuatro capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda, tercera y cuarta capas ocultas es de 50, 25, 50 y 35,

respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0,0026 y las regularizaciones L2 son iguales a 0.00015, 0.0001, 0.0001, y 0.0001.

- Captura de CO₂: Cuatro entradas, tres salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 40, 35 y 40, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0.0052 y las regularizaciones L2 son iguales a 0.0001, 0.00035, y 0.0001.
- Urea verde: Seis entradas, tres salidas y tres capas ocultas. El número de neuronas en la primera, segunda y tercera capas ocultas es de 40, 40 y 40, respectivamente. Además, la tasa de aprendizaje es igual a 0.0011 y las regularizaciones L2 son iguales a 0.00056, 0.0001, y 0.0001.

Es importante mencionar que las estructuras óptimas de los modelos desarrollados (amoníaco verde, CO₂, captura y urea verde) se identificaron en los experimentos 73, 37 y 205, respectivamente. Esto confirma que el límite máximo de 500 experimentos establecido fue suficiente y adecuado para garantizar la optimización efectiva de los modelos.

La **Tabla 19** presenta las métricas de evaluación de los tres modelos RNA desarrollados para predecir $F^{green_NH_3}$, F^{CO_2} , y F^{green_urea} , así como los costos totales anuales ($TAC^{green_NH_3}$, $TAC^{CO_2_cap}$, y TAC^{green_urea}) y la electricidad total consumida ($ELC^{green_NH_3}$, $ELC^{CO_2_cap}$ y ELC^{green_urea}) en cada proceso. Las métricas utilizadas para evaluar el rendimiento de los modelos incluyen RMSE (Root Mean Square Error), MAE (Mean Absolute Error), MAPE (Mean Absolute Percentage Error) y el coeficiente de determinación (R^2), aplicados tanto al conjunto de datos de entrenamiento como al de prueba. En general, los modelos muestran un buen ajuste, con valores bajos de RMSE, MAE y MAPE, acompañados de valores altos de R^2 . Esto indica que los modelos predicen con precisión las variables objetivo tanto en la fase de entrenamiento como en la de prueba. Además, la similitud entre las métricas de los dos conjuntos sugiere que los modelos están bien generalizados y no presentan problemas significativos de sobreajuste.

El modelo para la producción de amoníaco verde muestra un rendimiento sobresaliente, con valores R^2 superiores a 0.99 tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de prueba, y valores RMSE y MAE muy bajos ($F^{green_NH_3}$). Esto confirma la gran

precisión del modelo en la predicción de esta variable. Las predicciones para el hidrogeno y para el amoníaco también son razonablemente precisas, aunque los valores R^2 son ligeramente inferiores, en particular para el en el conjunto de prueba (0.9650). En cuanto a la captura de CO_2 , el modelo también funciona de forma excelente, con valores R^2 superiores a 0.99 para el en ambos conjuntos de datos. Sin embargo, las predicciones para el $TAC^{green_NH_3}$ y $ELC^{green_NH_3}$ muestran un rendimiento ligeramente inferior, con valores R^2 en torno a 0.95 en el conjunto de prueba. Además, el MAPE para el consumo de electricidad alcanza valores elevados (35% en el conjunto de prueba), lo que indica mayores errores porcentuales relativos para esta variable. El modelo desarrollado para la producción de urea verde también muestra resultados robustos, con valores R^2 cercanos a 0.99 tanto para el conjunto de entrenamiento como para el de prueba. Sin embargo, la predicción muestra un MAPE inusualmente alto (5,5641 en el conjunto de prueba), lo que podría indicar la presencia de valores atípicos o una distribución de datos muy dispersa. A pesar de este elevado valor, el RMSE y el MAE de se mantienen bajos, lo que sugiere que los errores absolutos están bien controlados.

Tabla 19. Métricas de evaluación de los tres modelos RNA.

Variables/Métricas	Train Set				Test Set			
	RMSE	MAE	MAPE	R^2	RMSE	MAE	MAPE	R^2
$F^{green_NH_3}$	0.0447	0.0363	0.1500	0.9980	0.0465	0.3770	0.1613	0.9977
$TAC^{green_NH_3}$	0.1640	0.0711	0.2263	0.9733	0.1828	0.0776	0.2148	0.9650
$ELC^{green_NH_3}$	0.1273	0.0635	0.2027	0.9836	0.1460	0.0676	0.1964	0.9791
F^{CO_2}	0.0883	0.0680	0.1529	0.9921	0.0891	0.0697	0.1660	0.9913
$TAC^{CO_2_cap}$	0.1793	0.1041	0.1758	0.9675	0.2006	0.1153	0.1818	0.9564
$ELC^{CO_2_cap}$	0.2757	0.1526	0.4310	0.9251	0.2456	0.1484	0.3512	0.9369
F^{green_urea}	0.0549	0.0429	1.0835	0.9969	0.0591	0.0459	0.1927	0.9965
TAC^{green_urea}	0.1794	0.1100	0.5304	0.9679	0.2224	0.1386	5.5641	0.9498
ELC^{green_urea}	0.2003	0.1148	0.4503	0.9594	0.2630	0.1454	0.3952	0.9340

La **Figura 36** exhibe diagramas de dispersión que contrastan los datos reales con los estimados por los modelos para las tres variables fundamentales: amoníaco verde, CO_2 capturado y urea verde, en los conjuntos de entrenamiento y prueba. La línea negra discontinua simboliza proyecciones perfectas, donde los valores actuales y los proyectados se ajustan de manera precisa. Por lo general, los gráficos evidencian un desempeño

sobresaliente de los tres modelos, dado que la mayoría de los puntos se alinean con la línea de predicción ideal, lo que señala una alta exactitud en la predicción. El modelo de amoníaco verde se distingue por su alta exactitud y su error mínimo, en cambio, el modelo de urea verde también exhibe un ajuste próximo a la línea de ajuste.

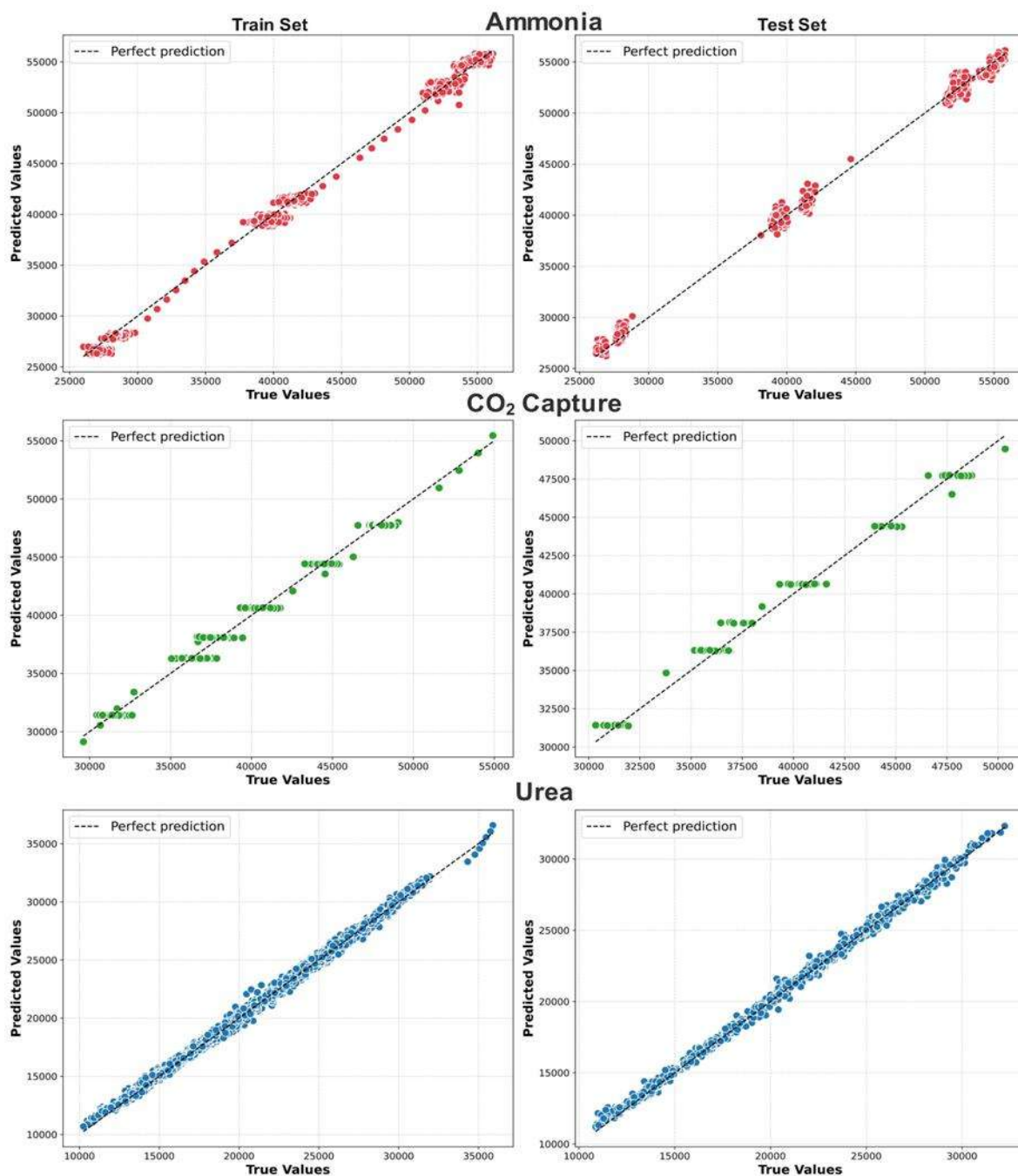


Figura 36. Gráfico de datos reales con los estimados por los modelos para las tres variables fundamentales.

4.3.2 RESULTADOS DE LA OPTIMIZACIÓN MULTIOBJETIVO

La **Figura 37** ofrece una representación tridimensional de la curva de Pareto, que ilustra el comportamiento de los tres objetivos es: F^{green_urea} , $TAC^{overall}$, y $ELC^{overall}$. Esta representación pone de relieve distintos enfoques de optimización, como las soluciones deterministas, metaheurísticas y bayesianas, así como el punto utópico (UP). El punto utópico se define como un ideal teórico en el que cada objetivo alcanza su valor más deseable: F^{green_urea} máximo, $TAC^{overall}$ mínimo y $ELC^{overall}$ mínimo. Aunque no es alcanzable en la práctica, sirve de referencia para evaluar lo cerca que están las soluciones reales del equilibrio ideal. Por el contrario, el punto nadir representa el peor escenario posible para cada objetivo. En este caso, el UP corresponde a F^{green_urea} de 36,448.67 kg/h, $TAC^{overall}$ de 118.527×10^6 USD/año y $ELC^{overall}$ de 43,192 kWh. El punto nadir refleja el escenario opuesto, con valores de 10,886 kg/h, 126.82×10^6 USD/año y 47,391 kWh, respectivamente. Es importante señalar que el punto nadir no se presenta en la **Figura 37**, ya que su significativa distancia de las soluciones encontradas da lugar a una distribución visualmente poco clara o atractiva. Por otra parte, los valores UP y nadir se utilizaron como límites mínimo y máximo para calcular los objetivos escalados (**Ecuaciones 28, 29 y 30**). A continuación, esta información se utilizó para determinar la puntuación de equilibrio (**Ecuación 31**) de todas las soluciones obtenidas. En la **Figura 37**, sólo se muestran las 10 mejores soluciones identificadas mediante los enfoques metaheurístico y bayesiano, lo que proporciona una representación más clara y centrada de los resultados más destacados.

Las soluciones metaheurísticas, marcadas en azul, logran un equilibrio aceptable entre los objetivos, aunque presentan una mayor variabilidad y tienden a desviarse más de la UP. Una solución metaheurística representativa alcanza F^{green_urea} de 33,995,10 kg/h, $TAC^{overall}$ de 120.21×10^6 USD y $ELC^{overall}$ de 43,359,01 kWh. Otra solución ofrece un mayor F^{green_urea} de 34,380.58 kg/h, pero viene con un mayor $TAC^{overall}$ 120.60×10^6 USD y ligeramente mayor de $ELC^{overall}$ 43,374.84 kWh. Aunque estas soluciones alcanzan altos niveles de producción de urea, $ELC^{overall}$ y $TAC^{overall}$ son valores más altos en comparación con los de la solución determinista, lo que las hace menos competitivas en términos de equilibrio global. Las soluciones bayesianas, marcadas en verde, tienden a obtener peores resultados en términos de equilibrio general debido a unos valores de $TAC^{overall}$ y $ELC^{overall}$ más elevados.

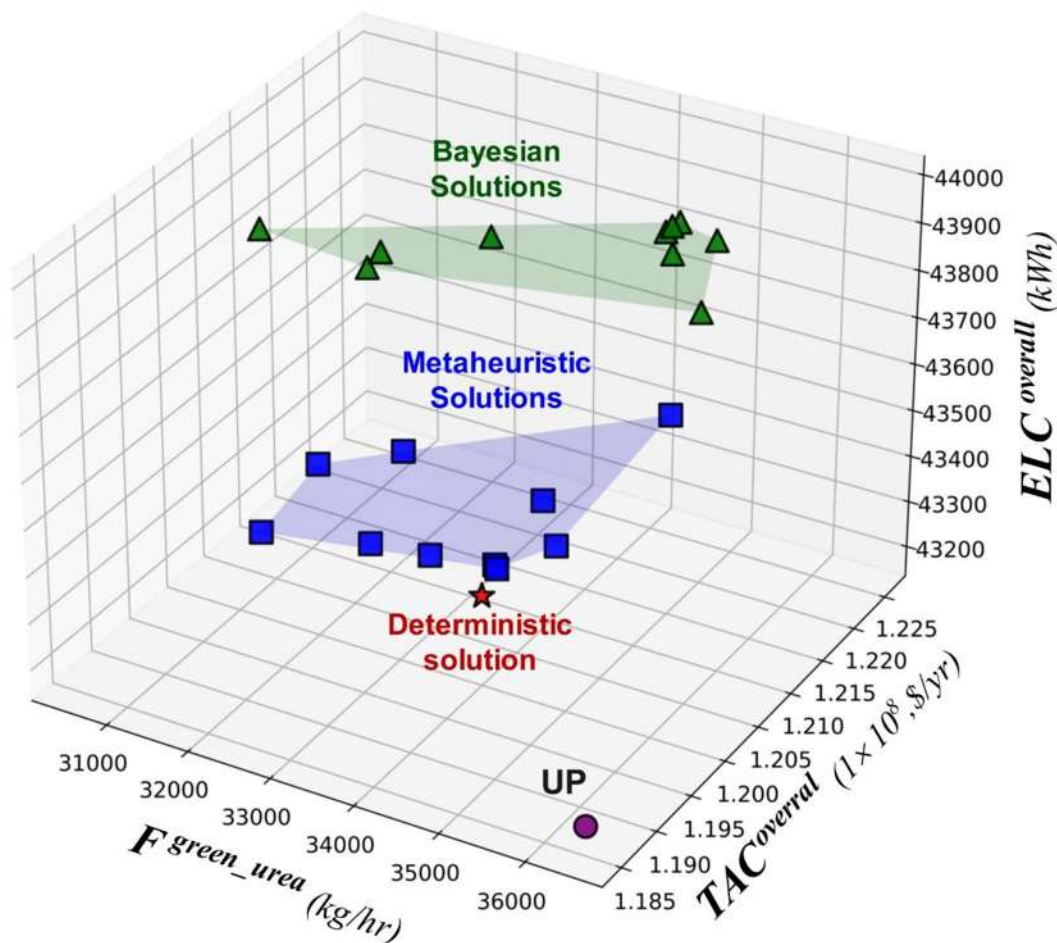


Figura 37. Representación en 3D de la curva de Pareto que relaciona F^{green_urea} , $TAC^{overall}$, y $ELC^{overall}$.

Por ejemplo, una solución bayesiana representativa alcanza un F^{green_urea} de 34,986.93 kg/h, pero su $TAC^{overall}$ aumenta a 121.40×10^6 USD, y su $ELC^{overall}$ llega a 43,965.58 kWh. Otra solución bayesiana consigue un rendimiento similar, con una producción de 35.066,23 kg/h, un $TAC^{overall}$ de 121.39×10^6 USD y un $ELC^{overall}$ de 43,981.63 kWh. Aunque estas soluciones maximizan la producción de urea, sus elevados $TAC^{overall}$ y $ELC^{overall}$ las alejan del equilibrio ideal. La solución determinista, marcada en rojo, es la más equilibrada entre las alternativas analizadas. Consigue a F^{green_urea} de 33,858 kg/h, a $TAC^{overall}$ de 120.16×10^6 USD y a $ELC^{overall}$ de 43,299.29 kWh. Comparada con las soluciones metaheurísticas y bayesianas, su $ELC^{overall}$ es inferior a la de la mayoría de las soluciones metaheurísticas y bayesianas.

competitiva con las bayesianas. Su $TAC^{overall}$ se encuentra entre los valores más bajos observados en el espacio de Pareto, siendo sólo un 1.38% superior al UP, mientras que su $ELC^{overall}$ está sólo un 0.25% por encima del UP. En cuanto a la producción de urea (F^{green_urea}), aunque no es la máxima, se aproxima razonablemente a la ideal, alcanzando el 92.91% de la UP. Este equilibrio hace que la solución determinista sea la más robusta y eficiente, maximizando la producción de urea sin un aumento desproporcionado de los costes ni del consumo energético.

Entre las soluciones más cercanas a la UP, la solución determinista destaca por equilibrar eficazmente F^{green_urea} , $TAC^{overall}$, y $ELC^{overall}$. Aunque algunas soluciones metaheurísticas y bayesianas demuestran un rendimiento interesante, tienden a priorizar la optimización de un objetivo a expensas de otros, como maximizar la producción de urea a costa de mayores gastos y consumo energético. En cambio, la solución determinista combina una elevada producción de urea con un consumo de energía moderado y competitivo $TAC^{overall}$, lo que la convierte en una opción más equilibrada y práctica en escenarios que requieren compromisos entre objetivos.

En la **Tabla 20** se presentan las tres soluciones con el mejor *B.S.* (de los enfoques metaheurístico y bayesiano) junto con la solución determinista, comparando los valores obtenidos para los objetivos, el *B.S.* y el tiempo computacional necesario para alcanzar cada solución. Esta comparación permite evaluar no sólo el rendimiento de las soluciones, sino también su viabilidad práctica en términos de recursos computacionales y prioridades específicas de los responsables de la toma de decisiones. F^{green_urea} , $TAC^{overall}$, y $ELC^{overall}$.

La solución determinista destaca por ofrecer un rendimiento equilibrado (*B.S.* igual a 0.3236) con el menor tiempo de cálculo (12 minutos). Su consumo F^{green_urea} (33,858 kg/h) es competitivo a la vez que moderado $TAC^{overall}$ (120.16×10^6 USD/año) y reducido $ELC^{overall}$ (43,299.29 kWh). Esta combinación de atributos la convierte en una opción eficiente para aplicaciones en las que la velocidad y el equilibrio de objetivos son fundamentales. Además, su perfil energético y económico lo alinea con los objetivos de sostenibilidad asociados a la producción ecológica de urea. Las soluciones metaheurísticas, aunque requieren más tiempo de cálculo (48 minutos), ofrecen mayor flexibilidad a la hora de explorar diversas

configuraciones. La solución representativa, con un $B.S.$ igual a 0.3387, consigue un rendimiento ligeramente superior F^{green_urea} (33,995.10 kg/h) al de la solución determinista, pero a costa de un costo mayor $TAC^{overall}$ (120.21×10^6 USD/año) y más elevado $ELC^{overall}$ (43,359.01 kWh). Por otro lado, las soluciones bayesianas, aunque presentan los valores más altos de $B.S.$ (0.5878-0.5980), ofrecen alternativas centradas en maximizar F^{green_urea} , alcanzando hasta 35,066.23 kg/h. Sin embargo, esta estrategia implica costos más elevados ($TAC^{overall} > 121.3 \times 10^6$ USD/año) y un consumo de energía significativamente alto ($ELC^{overall} > 43,900$ kWh), además de un tiempo computacional considerablemente mayor (más de 16 horas).

En el contexto de la producción ecológica de urea, la solución determinista destaca como la opción más eficiente, ya que logra un notable equilibrio entre objetivos, un menor impacto ambiental y un tiempo de cálculo significativamente inferior. Esto la convierte en una opción ideal para aplicaciones con limitaciones de tiempo y centradas en la sostenibilidad. Por otro lado, los enfoques metaheurísticos y bayesianos complementan este análisis ofreciendo una mayor flexibilidad, permitiendo priorizar objetivos específicos, como la producción en masa o la adaptación a restricciones particulares. Esta diversidad de opciones amplía las posibilidades de los responsables de la toma de decisiones, permitiéndoles ajustar las soluciones a sus prioridades medioambientales, económicas y estratégicas en función del contexto específico en el que se apliquen.

Por otro lado, el espacio de búsqueda asociado al modelo integral de producción de urea verde basado en RNA es muy complejo debido al gran número de variables e interacciones no lineales implicadas. Esta complejidad repercute directamente en el tiempo computacional, que depende tanto de las características del modelo como de los enfoques de optimización empleados. La optimización bayesiana, que realizó 2,500 ensayos, requirió el mayor tiempo computacional (16.8 horas). Esto se debe a que la optimización bayesiana explora el espacio de búsqueda de una manera más exhaustiva y dirigida, seleccionando cuidadosamente los puntos a evaluar basándose en un modelo probabilístico. Aunque este enfoque es útil para obtener configuraciones de alto rendimiento, es costoso desde el punto de vista computacional. El enfoque metaheurístico, que utiliza una población de 100 individuos y 100 generaciones, realiza 10,000 evaluaciones. Aunque este método también

explora un gran número de configuraciones, su diseño basado en la heurística permite evaluar múltiples soluciones en paralelo, lo que se traduce en un tiempo computacional más moderado (48 minutos). Esto convierte a las soluciones metaheurísticas en una opción viable para explorar una amplia gama de configuraciones posibles en menos tiempo, aunque a costa de no garantizar siempre un rendimiento óptimo. En cambio, el enfoque determinista aprovechó la reformulación OMLT de los modelos de RNA implementando el solucionador CONOPT en el entorno Pyomo. Este solver, diseñado específicamente para problemas de optimización no lineal, permitió alcanzar una solución equilibrada en tan solo 12 minutos. Su eficiencia radica en el uso de técnicas numéricas avanzadas, como los métodos de punto interior y gradiente, que aseguran una rápida convergencia a soluciones óptimas, incluso en modelos complejos con múltiples restricciones y no linealidades.

Tabla 20. Resultados obtenidos con los tres métodos de optimización.

Approach	F^{green_urea} (kg/hr)	$TAC^{overall}$ (USD/year)	$ELC^{overall}$ (kW/h)	B.S.	Tiempo de computo (minutos)
Metaheurístico	33,995.1016	120,211,480	43,359.0117	0.3387	48
	34,380.5781	120,603,448	43,374.8438	0.3746	
	33,667.0781	120,569,600	43,300.1563	0.3806	
Bayesiana	34,986.9258	121,401,728	43,965.5820	0.5878	1,010
	35,066.2305	121,393,744	43,981.6367	0.5875	
	32,131.5723	120,753,664	43,867.5625	0.5980	
Determinista	33858	120,160,355	43,299.29	0.3236	12

4.3.3 ANÁLISIS COMPARATIVO

La **Tabla 21** presenta un resumen de los resultados del proceso de optimización, comparando las predicciones generadas por los modelos RNA descritos en el apartado 3.2.3 (**Optimización multiobjetivo**) con las simulaciones realizadas en el software Aspen Plus. Cabe señalar que los valores óptimos de funcionamiento determinados para cada planta (véase la **Tabla 11**) mediante el proceso de optimización sirvieron de base para las simulaciones correspondientes en Aspen Plus. Además, para evaluar la precisión de los modelos RNA, se calcula el porcentaje de error de las variables clave, lo que permite identificar las discrepancias y analizar su impacto en las operaciones.

Table 21. Resultados del proceso de optimización y validación en Aspen Plus®.

Variables	Resultados de la optimización/ modelos ANN	Resultados de Aspen Plus®	Error (%)
$F^{green_NH_3}$	45,000.0000	45,018.6841	0.0415
F^{CO_2}	34,385.9166	35,071.2276	1.9540
F^{green_urea}	33,858.0119	34,588.4074	2.1116
$TAC^{overall}$	120,160,355.6	121,456,220	1.0669

Para $F^{green_NH_3}$, el modelo RNA muestra una precisión extraordinariamente alta, con un error de sólo el 0.0415%. Esta discrepancia mínima refleja una excelente correspondencia entre el modelo y la simulación, lo que indica que la RNA puede aplicarse con confianza para este parámetro sin necesidad de ajustes adicionales. Para F^{CO_2} , el modelo RNA subestima el valor obtenido en Aspen Plus, con un error aproximado del 1.95%. Aunque esta discrepancia es mayor que la observada para $F^{green_NH_3}$, sigue siendo razonable y aceptable para la mayoría de las aplicaciones prácticas. Sin embargo, puede ser necesario un ajuste fino si se busca una mayor precisión en procesos sensibles. Para F^{green_urea} , el error alcanza el 2.1%, ligeramente superior al observado para la predicción del CO_2 . Esto sugiere que el modelo RNA tiende a subestimar los resultados en comparación con Aspen Plus. A pesar de ello, el nivel de precisión sigue siendo muy bueno, aunque puede ser necesario recalibrarlo para escenarios que exijan predicciones más ajustadas. En términos económicos, $TAC^{overall}$ se observa un error del 1.07% entre las estimaciones del modelo RNA y los resultados de Aspen Plus®. Este nivel de error es insignificante comparado con la magnitud de los valores implicados, lo que valida la utilidad del modelo RNA para un análisis económico rápido y fiable. Por último, $ELC^{overall}$ tiene un error del 2%, lo que indica que el modelo RNA subestima ligeramente este parámetro. Aunque esta discrepancia podría ser relevante en casos en los que el consumo de energía sea un factor crítico, el nivel de precisión es suficiente para estudios exploratorios o de diseño inicial.

En general, los resultados muestran que el modelo RNA proporciona predicciones muy precisas para las variables clave del proceso, con errores que oscilan entre el 0.0415% y el 2.1%. Estas discrepancias son aceptables para la mayoría de las aplicaciones prácticas,

lo que refuerza la validez del modelo como herramienta eficaz y fiable en la optimización de procesos.

La **Figura 38** ilustra el diagrama esquemático del sistema integrado para la producción de urea verde, que incluye la planta de electrólisis, la planta de amoníaco verde, la planta de captura de carbono y la planta de urea verde. El diagrama destaca las condiciones óptimas de funcionamiento determinadas en este estudio, proporcionando una visión global de los procesos y su interconexión bajo los parámetros óptimos identificados.

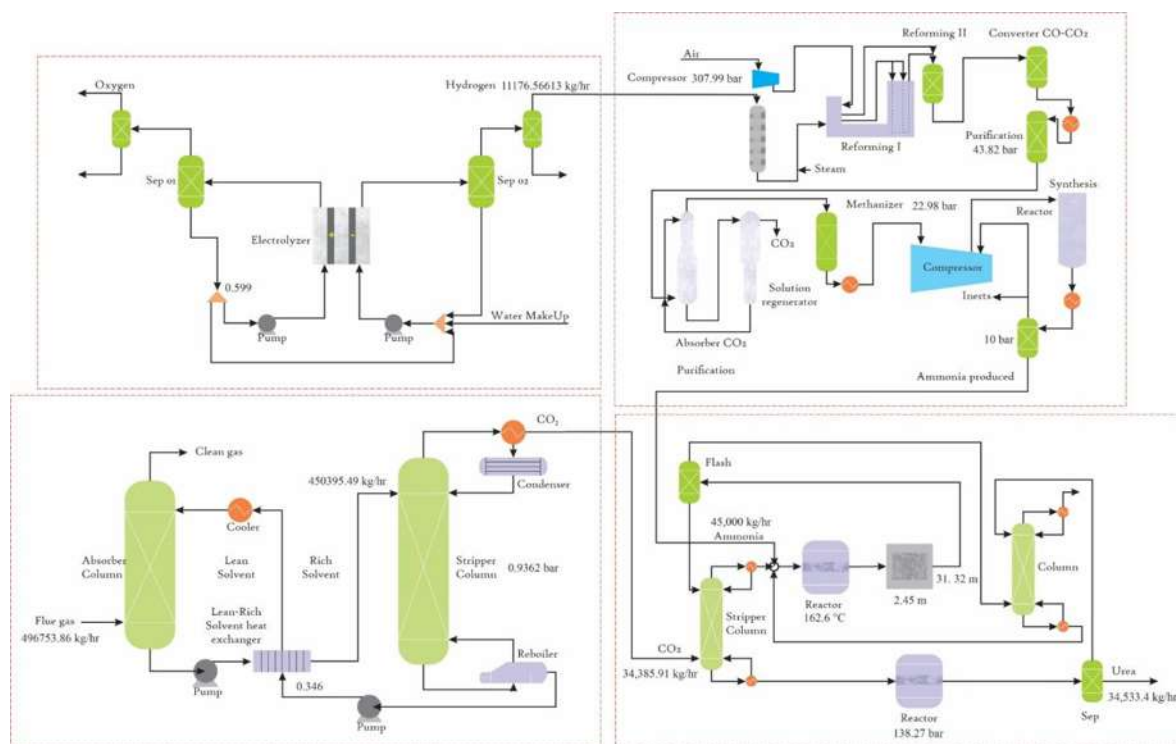


Figura 38. Sistema integrado de producción de urea verde en condiciones óptimas de funcionamiento.

5. CONCLUSIONES

El presente proyecto científico sobre la producción sostenible de productos verdes alto valor agregado culmina con varias conclusiones clave que subrayan la interacción entre la gestión medioambiental y las demandas industriales:

- La simulación de los procesos demuestra no solo su viabilidad técnica, sino también su potencial para transformar la industria hacia prácticas más sostenibles mediante el uso de energías limpias y renovables. La integración energética y másica permite optimizar el consumo de recursos y minimizar el impacto ambiental.
- El uso de aire y agua como insumos iniciales, junto con estrategias de integración másica, asegura un manejo eficiente de las materias primas. Esto permitió alcanzar una producción de amoníaco de 54,705.73 kg/h con un flujo de alimentación de aire de 68,498.06 kg/h, evidenciando un sistema robusto y eficiente.
- La implementación de tecnologías de captura de carbono mediante aminas logró retener 37,415.80 kg/h de CO₂, destacando su eficacia en la reducción de gases de efecto invernadero y permitiendo su reutilización como materia prima en procesos posteriores.
- La utilización de amoníaco y dióxido de carbono verdes permite la generación de urea verde, un fertilizante sostenible y de alta demanda. Este proceso no solo reduce la dependencia de insumos contaminantes, sino que también contribuye a la sostenibilidad agrícola.
- Los resultados obtenidos sientan las bases para el desarrollo de tecnologías de producción industrial más limpias y eficientes. Este enfoque integrador fomenta un cambio estructural hacia una industria más respetuosa con el medio ambiente, al tiempo que mejora el rendimiento y la rentabilidad.
- Este trabajo constituye un modelo para la aplicación de herramientas avanzadas en la simulación de procesos, promoviendo investigaciones futuras en ingeniería sostenible y en el desarrollo de productos que reduzcan la huella ambiental.
- La combinación de integración energética, captura de carbono y uso de insumos renovables demuestra que es posible avanzar hacia una industria más verde sin comprometer la eficiencia ni la viabilidad económica.

- El cambio hacia el amoníaco verde, que aprovecha recursos renovables como la gasificación de biomasa y la electrólisis del agua, supone un cambio fundamental en la producción de amoníaco. Este avance es crucial para reducir el impacto ambiental asociado a los métodos tradicionales de síntesis de amoníaco, como los relacionados con los combustibles fósiles.
- El estudio pone de relieve que la elección de utilizar tecnologías renovables en lugar de métodos convencionales repercute significativamente en los requisitos materiales, así como en la huella ecológica de la producción de amoníaco. La tecnología eólica, por ejemplo, presenta una mayor influencia en el agotamiento de los recursos no renovables en comparación con la tecnología solar, lo que pone de relieve el carácter crítico de la selección de las fuentes renovables adecuadas.
- La incorporación de métricas de ACV y EC ofrece un marco completo para evaluar la sostenibilidad de la producción de amoníaco. Este enfoque no sólo mejora la comprensión del impacto ambiental, sino que también mejora las estrategias de gestión de recursos dentro del proceso de producción.
- El estudio establece un nuevo punto de referencia en la producción de amoníaco, abogando por una transición hacia prácticas más responsables con el medio ambiente. Allana el camino para futuras investigaciones y procesos industriales que alineen sus consideraciones medioambientales con su eficiencia operativa, demostrando la viabilidad e importancia del amoníaco verde.
- Los impactos globales para 2023 asociados al Ecoindicador 99 corresponden a un total de $3.08 \times 10^{10} \text{ Pt}$ y 5.97×10^5 toneladas Sb_{eq} en el uso de recursos no renovables asociados al EC, lo anterior para una producción de amoníaco de 1.77×10^8 toneladas.
- La CE muestra un impacto de 62.32×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW , 2.344×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW , y 5.236×10^{-1} toneladas Sb_{eq} / MW para las tecnologías eólica, solar e hidroeléctrica, respectivamente. Donde las tecnologías eólicas tienen el mayor impacto material, mientras que las tecnologías solares tienen el menor.
- Los impactos totales del Ecoindicador 99 son de $3.23 \times 10^6 \text{ Pt}$, $1.87 \times 10^5 \text{ Pt}$ y $3.54 \times 10^4 \text{ Pt}$ para las tecnologías eólica, solar e hidroeléctrica, respectivamente. Las tecnologías eólicas presentan el impacto más significativo, a diferencia de las hidroeléctricas, que tienen un impacto menor en comparación.

- Esta investigación sugiere un cambio de paradigma hacia prácticas más sostenibles desde el punto de vista medioambiental. Las metodologías y conocimientos que aquí se ofrecen van más allá de la producción de amoníaco, urea y captura de carbono y sirven de guía a la industria química en su camino hacia un futuro más sostenible y respetuoso con el medio ambiente.
- Los modelos de Redes Neuronales Artificiales (RNA) desarrollados muestran un desempeño sólido en la predicción de variables clave para los procesos de amoníaco verde, captura de CO₂ y urea verde. Las métricas de evaluación (RMSE, MAE, MAPE y R²) evidencian una alta precisión, con valores de R² superiores a 0.99 en la mayoría de los casos. Los modelos están bien generalizados y no presentan problemas significativos de sobreajuste.

Diferencias entre procesos:

- Amoníaco verde: El modelo obtuvo los mejores resultados, destacándose por su alta exactitud en las predicciones, con valores de R² superiores a 0.99 y errores bajos (RMSE y MAE).
- Captura de CO₂: Aunque el rendimiento es excelente, se observan errores porcentuales elevados (MAPE) en el consumo de electricidad.
- Urea verde: El modelo presenta un alto desempeño general, aunque el MAPE elevado para una variable sugiere posibles valores atípicos o dispersión en los datos.

Optimización multiobjetivo:

- La solución determinista se destaca por equilibrar los objetivos de producción, costos y consumo energético, alcanzando resultados competitivos en un tiempo computacional significativamente menor (12 minutos).
- Las soluciones metaheurísticas ofrecen mayor flexibilidad y exploración de configuraciones en menos tiempo (48 minutos), pero con menor optimización global.
- Las soluciones bayesianas maximizan la producción de urea, aunque presentan mayores costos y consumo energético, además de requerir tiempos computacionales más prolongados.

Análisis comparativo con Aspen Plus®: Los modelos RNA muestran una alta precisión al ser validados con simulaciones de Aspen Plus®, con errores porcentuales generalmente bajos (0.04% a 2.1%), lo que confirma la confiabilidad de las RNA para predecir parámetros clave y su potencial para complementar simulaciones tradicionales.

Recomendaciones y aplicaciones:

- La solución determinista destaca como la más eficiente para aplicaciones prácticas, al equilibrar objetivos de sostenibilidad y eficiencia en menor tiempo.
- Las soluciones metaheurísticas y bayesianas complementan el análisis, ofreciendo opciones para priorizar objetivos específicos según las necesidades del contexto.
- La implementación de RNA en la optimización de procesos ecológicos es viable y efectiva, especialmente en escenarios que requieren minimizar el impacto ambiental y maximizar la eficiencia operativa.

Complejidad y recursos computacionales: Los métodos deterministas, como el uso de solucionadores no lineales, ofrecen resultados rápidos y equilibrados, siendo una alternativa eficiente para modelos complejos con múltiples restricciones.

6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abdin, Z., Zafaranloo, A., Rafiee, A., Mérida, W., Lipiński, W., & Khalilpour, K. R. (2020). Hydrogen as an energy vector. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 120, 109620. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109620>
- Abudu, H., Wesseh-Jr, P. K. y Lin, B. (2024). Climate bonds toward achieving net zero emissions and carbon neutrality: Evidence from machine learning technique. *Journal of Management Science and Engineering*. 9(1), 1-15. <https://doi.org/10.1016/j.jmse.2023.10.001>
- Ahmad-Khan, K., Khalid-Anser, M., Pala, F., Barut, A. y Wasif-Zafar, M. (2024). Promoting sustainability in developing Countries: A Machine Learning-based approach to understanding the relationship between green investment and environmental degradation. *Gondwana Research*. 132, 136-149. <https://doi.org/10.1016/j.gr.2024.03.013>
- Agyekum, E. B., Nutakor, C., Agwa, A. M. y Kamel, S.A. (2022). A critical review of renewable hydrogen production methods: factors affecting their scale-up and its role in future energy generation. *Membranes*. 12(173). <https://doi.org/10.3390/membranes12020173>
- Alemán-Nava, G. S., Casiano-Flores, V. H., Cárdenas-Chávez, D. L., Díaz-Chávez, R., Scarlat, N., Mahlknecht, J., Jean-Francois, D. y Parra, R. (2014). Renewable energy research in Mexico: a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 32, 140-153. <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2014.01.004>
- Alibrahim, H. y Ludwing, S. A. (2021). Hyperparameter optimization: Comparing genetic algorithm against grid search and Bayesian optimization. *IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. 1551-1559. <https://doi.org/10.1109/CEC45853.2021.9504761>
- Alipour-Bonad, S., Waite, T., Song, W., Flynn, D. y Yazdani-Asrami, M. (2024). Machine learning-powered performance monitoring of proton exchange membrane water electrolyzers for enhancing green hydrogen production as a sustainable fuel for

- aviation industry. *Energy Reports*. 12, 2270-2282.
<https://doi.org/10.1016/j.egy.2024.08.028>
- Alnour, M., Awan, A. y Emran-Hossain, M. D. (2024). Towards a green transportation system in Mexico: The role of renewable energy and transport public-private partnership to curb emissions. *Journal of Cleaner Production*. 442, 140984.
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.140984>
- Atilhan, S., Park, S., El-Halwagi, M. M., Atilhan, M., Moore, M. y Nielsen, R. B. (2021). Green hydrogen as an alternative fuel for the shipping industry. *Current Opinion in Chemical Engineering*. 31(100668). <https://doi.org/10.1016/j.coche.2020.100668>
- Aziz, M., Wijayanta, A. T., & Nandiyanto, A. B. D. (2020). Ammonia as effective hydrogen storage: A review on production, storage and utilization. *Energies*, 13(12), 3062.
<https://doi.org/10.3390/en13123062>
- Baigorri, J., Zaversky, F. y Astrain, D. (2023). Massive grid-scale energy storage for next-generation concentrated solar power: A review of the potential emerging concepts. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 185, 113633.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2023.113633>
- Bains, P., Psarras, P. y Wilcox, J., (2017). CO₂ capture from the industry sector. *Progress in Energy and Combustion Science*. 63(1), 146-172.
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2017.07.001>
- Ball, M. y Wietschel, M. (2009). The future of hydrogen – opportunities and challenges. *International Journal of Hydrogen Energy*. 34(2), 615-627.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.11.014>
- Bartels, J. R., Pate, M. B., & Olson, N. K. (2010). An economic survey of hydrogen production from conventional and alternative energy sources. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(16), 8371-8384.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.04.035>

- Bicer, Y., Dincer, I., Zamfirescu, C., Vezina, G. y Raso, F. (2016). Comparative life cycle assessment of various ammonia production methods. *Journal of Cleaner Production*. 135, 1379-1395. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.07.023>
- Blank, J. y Deb, K. (2020). Pymoo: Multi-Objective Optimization in Python. *IEEE Access*. 8, 89497-89509. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2990567>
- Bose, D., Bhattacharya, R., Kaur, T., Pandya, R., Sarkar, A., R., Ray, Mondal, S., Mondal, A., Ghosh, P. y Chemudupati, R. I. (2024). Innovative approaches for carbon capture and storage as crucial measures for emission reduction within industrial sectors. *Carbon Capture Science & Technology*. <https://doi.org/10.1016/j.ccst.2024.100238>
- Bugosen, S. I., Laird, C. D. y Parker, R. B. (2024). Process flowsheet optimization with surrogate and implicit formulations of a Gibbs reactor. *Arxiv*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2310.09307>
- Clauwaert, P., Muys, M., A. Alloul, J. De Paepe, A. Luther, X. Sun, C. Ilgrande, M. E. R. Christiaens, X. Hu, D. Zhang, R. E. F. Lindeboom, B. Sas, K. Rabaey, N. Boon, F. Ronsse, D. Geelen y S. E. Vlaeminck. (2017). Nitrogen cycling in Bioregenerative Life Support Systems: Challenges for waste refinery and food production processes. *Progress in Aerospace Sciences*. 91, 87-98. <https://doi.org/10.1016/j.paerosci.2017.04.002>
- Cardoso, J. S., Silva, V., Rocha, R. C., Hall, M. J., Costa, M., & Eusébio, D. (2021). Ammonia as an energy vector: Current and future prospects for low-carbon fuel applications in internal combustion engines. *Journal of Cleaner Production*, 296, 126562. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126562>
- Campion, N., Nami, H., Swisher, P. R., Hendriksen, P. V. y Münster, M. (2023). Techno-economic assessment of green ammonia production with different wind and solar potentials. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 173, 113057. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.113057>
- Ceccon, F., Jalving, J., Haddad, J., Thebelt, J., Tsay, C., Laird, C. D. y Misener, R. (2022). OMLT: Optimization & machine learning toolkit. *Arxiv*. 1. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2202.02414>

- Chai, W. S., Bao, Y., Jin, P., Tang, G., & Zhou, L. (2021). A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 147, 111254. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111254>
- Cho, H., Kim, Y., Lee, E., Choi, E., Lee, Y. and Rhee, W. (2020). Basic Enhancement Strategies When Using Bayesian Optimization for Hyperparameter Tuning of Deep Neural Networks. *IEEE Access*. 8, 52588-52608. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2981072>
- Chisalita, D. A., Petrescu, L., & Cormos, C. C. (2020). Environmental evaluation of European ammonia production considering various hydrogen supply chains. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 130, 109964. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.109964>
- De Jesús-Fernández, A. y Watson, J. (2022). Mexico's renewable energy innovation system: Geothermal and solar photovoltaics case study. *Environmental Innovation and Societal Transitions*. 43, 200-219. <https://doi.org/10.1016/j.eist.2022.04.004>
- Deb, K. y Jain, H. (2014). An evolutionary many-objective optimization algorithm using reference-point-based nondominated sorting approach, part i: solving problems with box constraints. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. 18(4), 577-601. <https://doi.org/10.1109/TEVC.2013.2281535>
- Devkota, S., Karmacharya, P., Maharjan, S., Khatiwada, D. y Uprety, B. (2024). Decarbonizing urea: Techno-economic and environmental analysis of a model hydroelectricity and carbon capture based green urea production. *Applied Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.123789>
- Devkota, S., Pokhrel, R., Rayamajhi, B., y Uprety, B. (2021). Design and cost estimation of a CO₂ capture plant from cement flue gas for urea production in Nepal. *International Journal of Greenhouse Gas Control*. <https://doi.org/10.1016/j.ijggc.2021.103484>
- Dimic, N., Hernandez-Tinoco, M., Piljak, V. y Vulcanovic, M. (2024). Carbon VIX: A case of decarbonized SPACs. *Finance Research Letters*. 70, 106360. <https://doi.org/10.1016/j.frl.2024.106360>

- Ding, K., Li, A., Lv, J. y Gu, F. (2023). Decarbonizing ceramic industry: Technological routes and cost assessment. *Journal of Cleaner Production*. 419, 138278. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2023.138278>
- El-Hafdaoui, H., Jelti, F., Khallaayoun, A., Jamil, A. y Ouazzani, K. (2024). Energy and environmental evaluation of alternative fuel vehicles in Maghreb countries. *Innovation and Green Development*. 3(1), 100092. <https://doi.org/10.1016/j.igd.2023.100092>
- El-Jaouhari, A., Arif, J., Samadhiya, A. y Kumar, A. (2023). Net zero supply chain performance and industry 4.0 technologies: Past review and present introspective analysis for future research directions. *Heliyon*. 9(11), e21525. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e21525>
- Feng, S., Liu, G., Shan, T., Li, K. y Lai, S. (2024). Predicting green technology innovation in the construction field from a technology convergence perspective: A two-stage predictive approach based on interpretable machine learning. *Journal of Environmental Management*. 372, 123203. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.123203>
- Fu, J., Ahmad, N. N. R., Leo, C. P., Aberilla, J. M., De la-Cruz, I. J. C., Alamani, B. G. y Koh, S. P. (2024). Techno-economic and life cycle assessment of membrane separation in post-combustion carbon capture: A review. *Gas Science and Engineering*. <https://doi.org/10.1016/j.jgsce.2024.205401>
- Goedkoop, Mark & Spriensma, R. (2001). *The Eco-Indicator 99: A Damage Oriented Method for Life Cycle Impact Assessment*. PRé.
- Göppert, U. and Maurer, G., (1988). Vapor—liquid equilibria in aqueous solutions of ammonia and carbon dioxide at temperatures between 333 and 393 K and pressures up to 7 MPa. *Fluid Phase Equilibria*. 41(1-2), 153-185. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(88\)80042-6](https://doi.org/10.1016/0378-3812(88)80042-6)
- Guerra, C. F., Reyes-Bozo, L., Vyhmeister, E., Caparrós, M. J., Salazar, J. L., & Clemente-Jul, C. (2020). Technical-economic analysis for a green ammonia production plant in

- Chile and its subsequent transport to Japan. *Renewable Energy*, 157, 404-414. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2020.05.041>
- Gil, I. D., Guevara, J. R., García, J. L. y Leguizamón, A. (2011). *Análisis y simulación de procesos químicos*. Universidad Nacional de Colombia.
- Harichandan, S., Kumar-Kar, S. y Kumar-Rai, P. (2023). A systematic and critical review of green hydrogen economy in India. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.04.316>
- Hernández-Pérez, L. G., Lira-Barragán, L. F. y Ponce-Ortega, J. M. (2020). Hybrid multiobjective optimization using deterministic and metaheuristic techniques for flowback water reusing in hydraulic fracturing processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 59(34), 15298–15308. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c02867>
- Hernández-Pérez, L. G., Ramírez-Márquez, C., Segovia-Hernández, J. G. y Ponce-Ortega, J. M. (2020). Simultaneous structural and operating optimization of process flowsheets combining process simulators and metaheuristic techniques: The case of solar-grade silicon process. *Computers & Chemical Engineering*, 140(106946), 1-12. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2020.106946>
- Himmelblau, D. M. y Boschhoff, K. B. (2021). *Análisis y simulación de procesos*. Reverte, S., Kar, S. K. y Rai, P. K. (2023). A systematic and critical review of green hydrogen economy in India. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.04.316>
- Hou, S., Salazar-Duque, E. M., Palensky, P. y Vergara, P. P. (2023). A constraint enforcement deep reinforcement learning framework for optimal energy storage systems dispatch. *Arxiv*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.14304>
- International Energy Agency. (2023). Emisiones de CO₂ en 2022. CC BY 4.0 <https://www.iea.org/reports/co2-emissions-in-2022>
- International Energy Agency. (2019), The Future of Hydrogen. CC BY 4.0 <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>
- Jahanger, A., Zubair-Chishti, M., Chukwuma-Onwe, J., Awan, A. (2022). How far renewable energy and globalization are useful to mitigate the environment in Mexico?

- Application of QARDL and spectral causality analysis. *Renewable Energy*. 201(1), 514-525. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2022.10.081>
- Jeong-Park, Y., Yoon, S. y Eun-Jerng, S. (2024). Machine learning of metal-organic framework design for carbon dioxide capture and utilization. *Journal of CO₂ Utilization*. 89, 102941. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2024.102941>
- Jalving, J., Ghouse, J., Cortes, N., Gao, X., Knueven, B., Agi, D., Martin, S., Chen, X., Guittet, D., Tumbalan-Gooty, R., Bianchi, L., Beattie, K., Gunter, D., Siirola, J. D., Miller, D. C. y Dowling, A. W. (2023). Beyond price taker: Conceptual design and optimization of integrated energy systems using machine learning market surrogates. *Applied Energy*. 351, 121767. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2023.121767>
- Kaashyap-Balaji, R., Preuss, N. y You, F. (2024). From fertilizer to fuel: Ammonia's evolution and role in global decarbonization. *Nexus*. 100040. <https://doi.org/10.1016/j.ynexs.2024.100040>
- Kausar, A., Rasul, F. y Asghar, N. (2024). How to get green with agricultural footprint: A global analysis of carbon emissions, environmental taxes, and agrochemical use. *Journal of Environmental Management*. 370, 122665. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.122665>
- Khan, A., Abbas, A. y Dickson, R. (2024). Towards a low-carbon future: exploring green urea synthesis for sustainable agriculture. *Green Chemistry*. 26(3). 1551-1565. <https://doi.org/10.1039/d3gc03228k>
- Khan, S., Wang, A., Liu, A., Khan, I., Sadiq, S., Khan, A., Humayun, M., Khan, A., Abumousa, R. A. y M. Bououdina, M. (2024). Bio-inspired green nanomaterials for tomato plant cultivation: An innovative approach of green nanotechnology in agriculture. *Chemical Engineering Journal Advances*. 20, 100677. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.100677>
- Kumar-Jaysawal, R., Chakraborty, S., Elangovan, D. y Padmanaban, S. (2022). Concept of net zero energy buildings (NZEB) - A literature review. *Cleaner Engineering and Technology*. 11, 100582. <https://doi.org/10.1016/j.clet.2022.100582>

- Liao, X., Liao, G. y Cao, J. (2023). Modeling of green agricultural environment and rape hyperspectral analysis based on machine learning algorithm. *Optik*. 273, 170395. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2022.170395>
- Li, D., Huang, F., Yan, L., Cao, Z., Chen, J. y Ye, Z. (2019). Landslide susceptibility prediction using particle-swarm-optimized multilayer perceptron: Comparisons with multilayer-perceptron-only, BP neural network, and information value models. *Applied Sciences*. 9(18). <https://doi.org/10.3390/app9183664>
- Li, L., Manier, H., & Manier, M. A. (2019). Hydrogen supply chain network design: An optimization-oriented review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 103, 342-360. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.12.060>
- Liu, G., Jin, W. y Xu, N. (2016). Two-dimensional-material membranes: a new family of high-performance separation membranes. *Angewandte Chemie International Edition*. 55(43), 13384-13397. <https://doi.org/10.1002/anie.201600438>
- Lim, J., Fernández, C. A., Lee, S. W., & Hatzell, M. C. (2021). Ammonia and nitric acid demands for fertilizer use in 2050. *ACS Energy Letters*, 6(10), 3676-3685. <https://doi.org/10.1021/acsenergylett.1c01614>
- López-Flores, F. J., Ramírez-Márquez, C., Rubio-Castro, E. y Ponce-Ortega, J. M. (2024). Solar photovoltaic panel production in Mexico: A novel machine learning approach. *Environmental Research*. 246, 118047. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.118047>
- López-Flores, F. J., Lira-Barragán, L. F., Rubio-Castro, E., El-Halwagi, M. M. y Ponce-Ortega, J. M. (2023). Hybrid machine learning-mathematical programming approach for optimizing gas production and water management in shale gas fields. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 11(15), 6043-6056. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c00632>
- López-Flores, F. J., Rubio-Castro, E. y Ponce-Ortega, J. M. (2022). Incorporating machine learning for thermal engines modeling in industrial waste heat recovery. *Chemical Engineering Research and Design*. 181, 239-252. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2022.03.022>

- Mandal, S., Adhikari, A., Chaulagain, A., Thapa, A., Mani-Gautam, S., Prasad-Lohani, S. y Thapa, A. (2024). Techno-enviro-economic assessment of hydropower-driven decarbonization pathways for Nepalese cement industry. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 12(6), 114729. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2024.114729>
- Marchenko, O. V. y Solomin, S. V. (2015). The future energy: hydrogen versus electricity. *International Journal of Hydrogen Energy*. 40(10), 3801-3805. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.01.132>
- Martín, M. y Sánchez, A. (2024). Biomass pathways to produce green ammonia and urea. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*. <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2024.100933>
- Martínez-Cruz, A. L., Núñez, H. M. (2021). Tension in Mexico's energy transition: Are urban residential consumers in Aguascalientes willing to pay for renewable energy and green jobs. *Energy Policy*. 150, 112145. <https://doi.org/10.1016/j.enpol.2021.112145>
- Martínez-Sifuentes, V. H., Alonso-Dávila, P. A., López-Toledo, J., Salado-Carbajal, M. y Rocha-Uribe, J. A. (2000). *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. Plaza Y Valdés.
- Muñoz-Díaz, M. T., Chávez-Oróstica, H. y Guajardo, J. (2023). Economic analysis: green hydrogen production systems. *Processes*. 11, 1390. <http://doi.org/10.3390/pr11051390>
- Meda, U. S., Rajyaguru, Y. V. y Pandey, A. (2023). Generation of green hydrogen using self-sustained regenerative fuel cells: opportunities and challenges. *International Journal of Hydrogen Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.430>
- Milani, D., Kiani, A., Haque, N., Giddey, S. y Feron, P. (2022). Green pathways for urea synthesis: A review from Australia's perspective. *Sustainable Chemistry for Climate Action*. <https://doi.org/10.1016/j.scca.2022.100008>
- Nakata, M. y Shimazaki, T. (2017). PubChemQC Project: A Large-Scale First-Principles Electronic Structure Database for Data-Driven Chemistry. *J Chem Inf Model*. 57(6), 1300-1308. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.7b00083>

- Nayak-Luke, R., Bañares-Alcántara, R., & Wilkinson, I. (2018). “Green” ammonia: impact of renewable energy intermittency on plant sizing and levelized cost of ammonia. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 57(43), 14607-14616. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.8b02447>
- Nikolaides, P. y Poullikkas, A. (2017). A comparative overview of hydrogen production processes. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 67, 597-611. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.09.044>
- Nowicki, D. A., Agnew, G. D. y Irvine, J. T. S. (2023). Green ammonia production via the integration of a solid oxide electrolyser and a Haber-Bosch loop with a series of solid electrolyte oxygen pumps. *Energy Conversion and Management*. 280(116816). <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.116816>
- Olabi, A. G., Abdelkareem, M. A., Al-Murisi, M., Shehata, N., Alamia, A. H., Radwan, A., Wilberforce, T., Chaegh, K. J. y Sayed, E. T. (2023). Recent progress in green ammonia: production, applications, assessment; barriers, and its role in achieving the sustainable development goals. *Energy Conversion and Management*. 227(116594). <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116594>
- Oliveira, A. M., Beswick, R. R. y Yan, Y. (2021). A green hydrogen economy for a renewable energy society. *Current Opinion in Chemical Engineering*. 33(100701). <https://doi.org/10.1016/j.coche.2021.100701>
- Ozaki, Y., Tanigaki, Y., Watanabe, S. y Onishi, M. (2020). Multiobjective tree-structured parzen estimator for computationally expensive optimization problems. *Association for Computing Machinery*. 533-541. <https://doi.org/10.1145/3377930.3389817>
- Padilla-Esquivel, C. A., Hernández-Pérez, L. G., y Ponce-Ortega, J. M. (2023). Análisis comparativo de combustibles para optimizar la generación de energía eléctrica a través de un ciclo Rankine regenerativo. *Naturaleza y Tecnología*, 10(3). <http://repositorio.ugto.mx/handle/20.500.12059/10265>
- Pardakhti, M., Zachary-Tobin, T. J., Dutta, B., Moharreri, E., Shemshaki, N. S., Suib, S. y Srivastava, R. (2019). Trends in solid adsorbent materials development for CO₂

- p>capture.
- ACS Appl. Mater. Interfaces.*
- 34533-34559.
-
- <https://doi.org/10.1021/acsami.9b08487>
- Patnaik, D., Pattanaikb, A. K., Bagalb, K. y Rathc, A. (2023). Reducing CO₂ emissions in the iron industry with green hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy.*
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.099h>
- Palacios, A., Koon-Koon, R., Castro-Olivera, P. M., Miranda-Flores, G., Taylor, L. y Córdova-Lizama, A. (2024). Pathways to hydrogen production through variable renewable energy capacity: A study of Mexico and Jamaica. *Energy Conversion and Management.* 311, 118483. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118483>
- Palys, M. J., Wang, H., Zhang, Q., & Daoutidis, P. (2021). Renewable ammonia for sustainable energy and agriculture: vision and systems engineering opportunities. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 31, 100667.
<https://doi.org/10.1016/j.coche.2020.100667>
- Pérez-Denicia, E., Fernández-Luqueño, F., Vilariño-Ayala, D., Montaña-Zetina, L. M. y Maldonado-López, L. A. (2017). Renewable energy sources for electricity generation in Mexico: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews.* 78, 597-613.
<https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.05.009>
- Prall, M., Olazabal, M. y Lehmann, M. (2023). Socio-economic projections in urban climate change adaptation planning: Practices and prospects for just adaptation. *Habitat International.* 142, 102946. <https://doi.org/10.1016/j.habitatint.2023.102946>
- Ponce-Ortega, J. M. y Hernández-Pérez, L. G. (2019). *Optimization of Process Flowsheets through Metaheuristic Techniques.* Springer. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-91722-1>
- Q. Tu, Z. He, L. Wu, K. Xue, G. Xie, P. Chain, P. B. Reich, S. E. Hobbie y J. Zhou. (2017). Metagenomic reconstruction of nitrogen cycling pathways in a CO₂-enriched grassland ecosystem. *Soil Biology and Biochemistry.* 106, 99-108.
<https://doi.org/10.1016/j.soilbio.2016.12.017>
- Rahman, A., Farrok, O., & Haque, M. M. (2022). Environmental impact of renewable energy source based electrical power plants: Solar, wind, hydroelectric, biomass, geothermal,

- tidal, ocean, and osmotic. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 161, 112279. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112279>
- Raya-Tapia, A. Y., López-Flores, F. J. y Ponce-Ortega, J. M. (2023). Incorporating deep learning predictions to assess the water-energy-food nexus security. *Environmental Science & Policy*. 144, 99-109. <https://doi.org/10.1016/j.envsci.2023.03.010>
- Rivera, G., Ortiz, M., Rivera-Arriaga, E. y Mendoza, E. (2024). Identification of applicable regulation and public policy gaps regarding marine renewable energy in Mexico. *Ocean & Coastal Management*. 254, 107171. <https://doi.org/10.1016/j.ocecoaman.2024.107171>
- Rossetti, I. (2020). Reactor design, modelling and process intensification for ammonia synthesis. *Sustainable Ammonia Production*, 17-48. https://doi.org/10.1007/978-3-030-35106-9_2
- Rouwenhorst, K. H., Van der Ham, A. G., Mul, G., & Kersten, S. R. (2019). Islanded ammonia power systems: Technology review & conceptual process design. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114, 109339. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109339>
- Safari, F. y Dincer, I. (2020). A review and comparative evaluation of thermochemical water splitting cycles for hydrogen production. *Energy Conversion and Management*. 205(112182). <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2019.112182>
- Sagel, V. N., Rouwenhorst, K. H. R. y Faria, J. A. (2022). Green ammonia enables sustainable energy production in small island developing states: a case study on the island of Curaçao. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 161(112381). <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112381>
- Salmon, N., & Bañares-Alcántara, R. (2021). Green ammonia as a spatial energy vector: a review. *Sustainable Energy & Fuels*, 5(11), 2814-2839. <https://doi.org/10.1039/D1SE00345C>

- Serrano-Arévalo, T. I., Díaz-Alvarado, F. A., Tovar-Facio, J., y Ponce-Ortega, J. M. (2023). The impact of circular economy indicators in the optimal planning of energy systems. *Sustainable Production and Consumption*. <https://doi.org/10.1016/j.spc.2023.12.018>
- Serrano-Arévalo, T. I., Tovar-Facio, J., y Ponce-Ortega, J. M. (2023). Optimal incorporation of intermittent renewable energy storage units and green hydrogen production in the electrical sector. *Energies*, 16(6), 2609. <https://doi.org/10.3390/en16062609>
- Serrano-Arévalo, T. I., Padilla-Esquivel, C. A., Hernández-Pérez, L. G., Díaz-Alvarado, F. A., Ramírez-Márquez, C. y Ponce-Ortega, J. M. (2024). Green Ammonia Production: The Performance of Global Systems in Eco-Indicator 99 and Circular Economy Metrics. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 12(33), 12652-12669. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.4c05181>
- Sevencan, S. Ciftcioglu, G. y Neşet-Kadirgan, M. A. (2011). A preliminary environmental assessment of power generation systems for a stand-alone mobile house with Cradle to gate approach. *Gazi University Journal of Science*. 24(3), 487-494.
- Shadram, F. y Mukkavaara, J. (2024). Investigating the potential for realizing life cycle net-zero energy buildings in Europe using multi-objective optimization. *Energy Reports*. 12, 5648-5670. <https://doi.org/10.1016/j.egyr.2024.11.042>
- Sharma, S. y Ghoshal, S. K. (2015). Hydrogen the future transportation fuel: from production to applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 43, 1151-1158. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.11.093>
- Sharma, S. y Rangaiah, G. P. (2016). Mathematical modeling, simulation and optimization for process design. *Chemical process retrofitting and revamping: techniques and applications*. 4, 97.117. <https://doi.org/10.1002/9781119016311.ch4>
- Shepherd, J., Ali-Khan, M. H., Amal, R., Daiyan, R. y MacGill, I. (2022). Open-source project feasibility tools for supporting development of the green ammonia value chain. *Energy Conversion and Management*. 274(116413). <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116413>

- Shuhei, W. (2023). Tree-structured parzen estimator: understanding its algorithm components and their roles for better empirical performance. *Arxiv*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.11127>
- Sousa, J., Waiblinger, W. y Friedrich, K. A. (2022). Techno-economic study of an electrolysis-based green ammonia production plant. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 61(39), 14515-14530. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c00383>
- Spatolisano, E. y Pellegrini, L. A. (2023). Haber-Bosch process intensification: a first step towards small-scale distributed ammonia production. *Chemical Engineering Research & Design*. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2023.06.031>
- Stefanussen-Foslie, S., Straus, J., Rugstad-Knudsen, B. y Korpås, M. (2023). Decarbonizing integrated chlor-alkali and vinyl chloride monomer production: Reducing the cost with industrial flexibility. *Advances in Applied Energy*. 12, 100152. <https://doi.org/10.1016/j.adapen.2023.100152>
- Song, X., Hao, X., Lin, Y., Ai, G., Yin, W., Hu, J. y Zhang, S. (2023). Energy performance assessment on vertical greening systems with green roof in hot summer and cold winter regions based on long-term experimental data. *Urban Forestry & Urban Greening*. 103, 128597. <https://doi.org/10.1016/j.ufug.2024.128597>
- Sousa, J., Waiblinger, K. P. y Friedrich, K. A. (2022). Techno-economic study of an electrolysis-based green ammonia production plant. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 61(39). 14515-14530. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c00383>
- Sovacool, B. K. (2021). Clean, low-carbon but corrupt? Examining corruption risks and solutions for the renewable energy sector in Mexico, Malaysia, Kenya and South Africa. *Energy Strategy Reviews*. 38, 100723. <https://doi.org/10.1016/j.esr.2021.100723>
- Soo, A., Gao, L. y Kyong-Shon, H. (2024). Machine learning framework for wastewater circular economy — Towards smarter nutrient recoveries. *Desalination*. 592, 118092. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2024.118092>

- Staffell, I., Scamman, D., Velazquez-Abad, A., Balcombe, P., Dodds, P. E., Ekins, P., Shah, N. y Ward, K. R. (2019). The role of hydrogen and fuel cells in the global energy system. *Royal Society of Chemistry*. 12, 463-491.
<https://doi.org/10.1039/C8EE01157E>
- Tarhan, C. y Ali- Çil, M. (2021). A study on hydrogen, the clean energy of the future: hydrogen storage methods. *Journal of Energy Storage*. 40(102676).
<https://doi.org/10.1016/j.est.2021.102676>
- Theckel-Joy, T., Rana, S., Gupta, S. y Venkatesh, S. (2020). Fast hyperparameter tuning using Bayesian optimization with directional derivatives. *Knowledge-Based Systems*. 205, 106247. <https://doi.org/10.1016/j.knosys.2020.106247>
- Tian, P., Yang, S., Yang, M., Xie, D., Yu, H. y Wang, X. (2024). Effect of iron-based nanomaterials on organic carbon dynamics and greenhouse gas emissions during composting Process. *Environmental Research*. 263(3), 120281.
<https://doi.org/10.1016/j.envres.2024.120281>
- Valera-Medina, A., Xiao, H., Owen-Jones, M., David, W. I., & Bowen, P. J. (2018). Ammonia for power. *Progress in Energy and Combustion Science*, 69, 63-102.
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2018.07.001>
- Vashishtha, G., Chauhan, S., Sehri, M., Zimroz, R., Dumond, P., Kumar, R. y Kumar-Gupta, M. (2025). A roadmap to fault diagnosis of industrial machines via machine learning: A brief review. *Measurement*. 242, 116216.
<https://doi.org/10.1016/j.measurement.2024.116216>
- Verdugo, L., Bojórquez, A., Galaz, O., Romo-León, J. R., Sánchez-Mejía, Z. M., Yépez, E. A., Álvarez-Yépiz, J. C. (2024). Assessing two decades of landscape greenness in relation to temperature and precipitation in a tropical dry forest of Northwestern Mexico. *Ecological Indicators*. 166, 112369.
<https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2024.112369>

- Wang, W., Ma, Y., Chen, G., Quan, C., Yanik, J., Gao, N. y Tu, X. (2022). Enhanced hydrogen production using a tandem biomass pyrolysis and plasma reforming process. *Fuel Processing Technology*. 234(107333). <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2022.107333>
- Wang, M., Wang, G., Sun, Z., Zhang, Y. y Xu, D. (2019). Review of renewable energy-based hydrogen production processes for sustainable energy innovation. *Global Energy Interconnection*. 2(5), 436-443. <https://doi.org/10.1016/j.gloi.2019.11.019>
- Wang, Y., Gub, J., N, J. (2023). Influence of biochar on soil air permeability and greenhouse gas emissions in vegetated soil: A review. *Biogeotechnics*. 1(4), 1000040. <https://doi.org/10.1016/j.bgtech.2023.100040>
- Wang, Q., Shan, Y., Shi, W., Zhao, F., Li, Q., Sun, P. y Wu, Y. (2024). Assessing spatiotemporal variations of soil organic carbon and its vulnerability to climate change: A bottom-up machine learning approach. *Climate Smart Agriculture*. 1(2), 100025. <https://doi.org/10.1016/j.csag.2024.100025>
- Weijie, S. Shittu, E. (2025). Assessment of mobility decarbonization with carbon tax policies and electric vehicle incentives in the U.S. *Applied Energy*. 379, 124838. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2024.124838>
- Wu, J., Xiu-Yun, C., Zhang, H., Li-Dong, X., Lei, H. y Si-Hao, D. (2019). Hyperparameter Optimization for Machine Learning Models Based on Bayesian Optimization. *Journal of Electronic Science and Technology*. 17(1), 26-40. <https://doi.org/10.11989/JEST.1674-862X.80904120>
- Xiao, F., Zhang, Z., Wu, Z., He, W. y Li, J. (2024). Machine learning-based climate zoning and asphalt selection for pavement infrastructure under changing climate: A focused study of Ningxia, China. *International Journal of Transportation Science and Technology*. <https://doi.org/10.1016/j.ijtst.2024.10.001>
- Xuan-Huang, L., Zhou, X., Chi, L., Meng, H., Chen, G., Shen C. y Wu, J. (2024). Stimulating innovation or enhancing productivity? The impact of environmental regulations on agricultural green growth. *Journal of Environmental Management*. 370, 122706. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.122706>

- Yaqoob, S. J., Motahhir, S. y Agyekum, B. E. (2022). A new model for photovoltaic panel using proteus software tool under arbitrary environmental conditions. *Journal of Cleaner Production*. 333(120074). <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.130074>
- Yousef, A. M., El-Maghlany, W. M., Eldrainy, Y. A. y Attia, A. (2018). New approach for biogas purification using cryogenic separation and distillation process for CO₂ capture. *Energy*. 328-351. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.05.106>
- Young-Sheng, C., Jia-An, Y., Chih-Yang, C., Meng-Chun, T. y Ta-Kang, L. (2024). Investigating stakeholders' perceptions of environmental protection fleets within the framework of policies designed to mitigate marine debris. *Journal of Environmental Management*. 371, 123204. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.123204>
- Zhang, H., Harle, J. V., Maréchal, F. y Desideri, U. (2021). Techno-economic comparison of 100% renewable urea production processes. *Applied Energy*. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.116401>
- Zhang, S., Shen, Y., Zheng, C., Xu, Q., Sun, Y., Li, L., Yang, X., Zhou, H., Ma, H., Li, Z., Zhang, Y., Liu, W. y Gao, X. (2024). Recent advances, challenges, and perspectives on carbon capture. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*. 18(75). <https://doi.org/10.1007/s11783-024-1835-0>
- Zhao, C., Wub, W., Hao, P., Wang, Y. y Zhou, X. (2024). Machine learning for optimal net-zero energy consumption in smart buildings. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*. 64, 103664. <https://doi.org/10.1016/j.seta.2024.103664>
- Zhao, Y., Ramzan, M., Sunday-Adebayo, T., Damola-Oladipupo, S., Adeshola, I. y Agyekum, B. (2021). Role of renewable energy consumption and technological innovation to achieve carbon neutrality in Spain: fresh in sihts from wavelet coherence and spectral causality approaches. *Environmental Economics & Management*. 9. <http://doi.org/10.3389/fenvs.2021.769067>
- Zhang, H., Wang, L., Maréchal, F., & Desideri, U. (2020). Techno-economic comparison of green ammonia production processes. *Applied Energy*, 259, 114135. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.114135>

Zhang, Z. y Donald, Huisingh, D. (2017). Carbon dioxide storage schemes: Technology, assessment and deployment. *Journal of Cleaner Production*. 142(2), 1055-1064.
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.06.199>

29% Similitud general

El total combinado de todas las coincidencias, incluidas las fuentes superpuestas, para ca...

Fuentes principales

- 25%  Fuentes de Internet
- 18%  Publicaciones
- 0%  Trabajos entregados (trabajos del estudiante)

Marcas de integridad

N.º de alertas de integridad para revisión

No se han detectado manipulaciones de texto sospechosas.

Los algoritmos de nuestro sistema analizan un documento en profundidad para buscar inconsistencias que permitirían distinguirlo de una entrega normal. Si advertimos algo extraño, lo marcamos como una alerta para que pueda revisarlo.

Una marca de alerta no es necesariamente un indicador de problemas. Sin embargo, recomendamos que preste atención y la revise.

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



A quien corresponda,

Por este medio, quien abajo firma, bajo protesta de decir verdad, declara lo siguiente:

- Que presenta para revisión de originalidad el manuscrito cuyos detalles se especifican abajo.
- Que todas las fuentes consultadas para la elaboración del manuscrito están debidamente identificadas dentro del cuerpo del texto, e incluidas en la lista de referencias.
- Que, en caso de haber usado un sistema de inteligencia artificial, en cualquier etapa del desarrollo de su trabajo, lo ha especificado en la tabla que se encuentra en este documento.
- Que conoce la normativa de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, en particular los Incisos IX y XII del artículo 85, y los artículos 88 y 101 del Estatuto Universitario de la UMSNH, además del transitorio tercero del Reglamento General para los Estudios de Posgrado de la UMSNH.

Datos del manuscrito que se presenta a revisión		
Programa educativo	Maestría en Ciencias en Ingeniería Química	
Título del trabajo	Simulación y optimización de procesos para la producción sostenible de químicos verdes: hacia una industria ecoeficiente	
	Nombre	Correo electrónico
Autor/es	Carlos Antonio Padilla Esquivel	1358157k@umich.mx
Director	José María Ponce Ortega	jose.ponce@umich.mx
Codirector	Luis Germán Hernández Pérez	germanius:
Coordinador del programa	María del Carmen Chávez Praga	cparga@umich.mx

Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Asistencia en la redacción	Si	Coherencia de información

Formato de Declaración de Originalidad y Uso de Inteligencia Artificial

Coordinación General de Estudios de Posgrado
Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo



Uso de Inteligencia Artificial		
Rubro	Uso (sí/no)	Descripción
Traducción al español	No	
Traducción a otra lengua	No	
Revisión y corrección de estilo	No	
Análisis de datos	No	
Búsqueda y organización de información	No	
Formateo de las referencias bibliográficas	No	
Generación de contenido multimedia	No	
Otro	No	

Datos del solicitante	
Nombre y firma	Carlos Antonio Padilla Esquivel
Lugar y fecha	20 de diciembre de 2024, Morelia, Michoacán, México.