



Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología

GRADO EN INGENIERÍA AMBIENTAL

Curso académico 2023/24

Trabajo Fin de Grado

**ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA COMPARATIVO DE
PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SUCCÍNICO**

Adrián de Galdo Dapena

ANEXO*

(*) A rellenar por los alumnos matriculados en los Dobles Grados ofertados por la ESCET

ORIGINALIDAD DEL TRABAJO FIN DE GRADO

El alumno/a Adrián de Galdo Dapena con DNI 50573115W matriculado en el doble grado en Ingeniería Química e Ingeniería Ambiental, que presenta el TRABAJO FIN DE GRADO correspondiente al grado de Ingeniería Ambiental titulado ***Análisis de ciclo de vida comparativo de procesos de producción de ácido succínico.***

Declara que al menos el 80% de la memoria del TRABAJO FIN DE GRADO es original y no presenta solapamiento con el otro Trabajo Fin de Grado defendido o por defender.

miércoles, 6 de marzo de 2024

Fdo. 

©2023 <Adrián de Galdo Dapena>

Algunos derechos reservados

*Este documento se distribuye bajo la licencia "Atribución 4.0 Internacional" de Creative Commons,
disponible en: <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.es>*

Índice

1	Resumen.....	1
2	Introducción.....	3
2.1	Polímeros y biopolímeros: Problemática y solución	3
2.2	Monómero propuesto: ácido succínico.....	5
2.3	Análisis de Ciclo de Vida.....	6
3	Objetivos del TFG.....	7
4	Solución técnica/resultados.....	8
4.1	Objetivo del ACV.....	8
4.2	Alcance del estudio	8
4.2.1	Unidad funcional	8
4.2.2	Sistemas estudiados. Esquemas de las entradas y las salidas	8
4.2.3	Límites del ACV	12
4.2.4	Metodología y clasificación de impactos	12
4.2.4.1	Selección de la metodología. Contexto	12
4.2.4.2	Categorías de impacto ambiental.....	13
4.2.5	Herramienta utilizada. SimaPro 9.5.....	15
4.3	Análisis de inventario.....	16
4.3.1	Sistema 1	17
4.3.2	Sistemas 2, 3 y 4.....	20
4.4	Evaluación de impactos.....	23
4.4.1	Estudio autocomparativo	23
4.4.1.1	Sistema 1. Caracterización	23
4.4.1.2	Sistema 1. Ponderación	26
4.4.1.3	Sistema 1. Efecto de los productos evitados	30
4.4.1.4	Sistema 1. Interpretación de resultados. Mejoras	32
4.4.2	Estudio comparativo.....	34

4.4.2.1	Sistemas 3 y 4. Escenario de residuos	34
4.4.2.2	Sistema 1, 2, 3 y 4. Caracterización	36
4.4.2.3	Sistema 1, 2, 3 y 4. Ponderación	37
4.4.2.4	Sistema 3. Efecto de los productos evitados	38
4.4.2.5	Sistema 4. Efecto de los productos evitados.	40
4.4.2.6	Sistemas 1, 3 y 4. Comparación después de aplicar descuentos de impactos.	42
4.4.3	Sistemas 1, 2, 3 y 4. Interpretación de los resultados.....	43
5	Conclusiones	45
6	Bibliografía.....	46
7	ANEXOS.....	48
7.1	Anexo I. Entradas del inventario.....	48

Índice Tablas

Tabla 1. Usos del anhídrido y ácido succínico. Extracto de Kirk-Othmer enciclopedia of Chemical Technology [3].	4
Tabla 2. Caracterización de impactos. Relación entre los métodos ReCiPe 2016 (x) y el EF3 (y).	18
Tabla 3. Inventario del sistema 1. De anhídrido maleico a ácido succínico. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico	20
Tabla 4. Inventario del sistema 2. De anhídrido maleico a ácido succínico. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico	21
Tabla 5. Inventario de los sistemas 3 y 4. Procesos fermentativos. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico	21
Tabla 6. Sistema 1. Caracterización de impactos ambientales por salida de una tonelada de ácido succínico.	23
Tabla 7. Sistema 1. Subsistema acondicionamiento de anhídridos. Caracterización de impactos ambientales.	24
Tabla 8. Sistema 1. Subsistema obtención anhídrido maleico. Caso estudio y base de datos de ecoinvent. Caracterización	25
Tabla 9. Método EF 3. Relación entre la caracterización y la ponderación.	27
Tabla 10. Sistema 1. Ponderación. Resultados obtenidos por categoría y subsistema.	27
Tabla 11. Sistema 1. Subsistema anhídrido maleico. Caso estudio y base de datos de ecoinvent. Ponderación	29
Tabla 12. Caracterización y ponderación. Sistema 3 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados.	30
Tabla 13. Sistema 3, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización y ponderación de impactos	34
Tabla 14. Sistema 4, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización y ponderación de impactos	35
Tabla 15. Todos los sistemas. Caracterización de impactos ambientales	36
Tabla 16. Todos los sistemas. Ponderación de impactos ambientales	37
Tabla 17. Caracterización y ponderación. Sistema 3 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados.	39

Tabla 18. Caracterización y ponderación. Sistema 4 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados..... 40

Tabla 19. Entradas del inventario. Equivalencia entre la entrada listada y la entrada en el software utilizado, SimaPro..... 48

Índice Figuras

Figura 1: Diagrama del sistema 1. Proceso de hidrogenación innovador, con anhídrido maleico de origen biológico. Parte del diagrama extraído de “Maleic anhydride from bio-based 1-butanol and furfural: a life cycle assessment at the pilot scale” [12]	10
Figura 2. Diagrama del sistema 2. Proceso convencional petroquímico, con anhídrido maleico de origen fósil.....	11
Figura 3. Sistemas 3 y 4 respectivamente. Procesos puramente fermentativos	11
Figura 4. Interfaz del software empleado. SimaPro 9.5	16
Figura 5. Inventario en SimaPro. Ejemplo del sistema 1, entradas y salidas correspondientes a la obtención del hidrógeno y su acondicionamiento por tonelada de ácido succínico producido	16
Figura 6. Caracterización de impactos. Ejemplo de relación entre la Acidificación del método ReCiPe 2016 y del EF3	17
Figura 7. Sistema 1. Caracterización de impactos ambientales sobre el 100% de cada categoría.....	24
Figura 8. Método EF 3. Relación entre la caracterización y la ponderación. Ejemplo para la Acidificación	26
Figura 9. Sistema 1. Ponderación de impactos	28
Figura 10. Ponderación del sistema 1. Comparación con maleico de la ruta del n-butano y bio-maleico	29
Figura 11. Sistema 1. Caracterización sobre el 100% de cada categoría con descuento de carga de impactos ambientales	31
Figura 12. Sistema 1. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales	31
Figura 13. Sistema 3, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización de impactos	34
Figura 14. Sistema 4, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización de impactos	35
Figura 15. Todos los sistemas. Caracterización de impactos	36
Figura 16. Todos los sistemas. Ponderación de impactos ambientales	38
Figura 17. Sistema 3. Caracterización sobre el 100% de cada categoría con descuento de carga de impactos ambientales	39
Figura 18. Sistema 3. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales	40
Figura 19. Sistema 4. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales	41

Figura 20. Sistema 4. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales	41
Figura 21. Caracterización sistemas 1, 3 y 4. Aplicación de descuentos de carga ambiental.....	42
Figura 22. Ponderación sistemas 1, 3 y 4. Aplicación de descuentos de carga ambiental	42

1 Resumen.

El ácido succínico es un compuesto de gran interés industrial por ser una molécula plataforma. Se define como aquel compuesto que puede ser empleado como materia prima en muchos procesos industriales de gran interés y que además pueda tener origen biológico. Su utilidad reside en ser el sustituto a los combustibles fósiles, los cuales deben evitarse para evitar diferentes consecuencias ambientales. Un uso destacable e importante es como monómero de biopolímeros. Se van a valorar diferentes procesos para obtener el ácido succínico a través de la metodología del Análisis de Ciclo de Vida (ACV).

El Análisis de Ciclo de Vida es una metodología que se utiliza para identificar y analizar los puntos críticos de un proceso industrial. El fin último es proporcionar mejoras al proceso de fabricación desde diferentes enfoques. Uno de los enfoques más comunes es ayudar a elegir entre diferentes opciones y sistemas estudiados las mejores alternativas para la fabricación, como la elección de materias primas, o la elección de diferentes vías para dar diferentes coproductos.

El ACV se basa en la cuantificación y valoración de los impactos del proceso industrial en las categorías de impacto ambiental. Un mayor valor de cargas de impacto ambiental conlleva a procesos más dañinos para la salud humana, ecosistemas, o consumo de recursos. Por tanto, un estudio llevado con esta metodología tratará de minimizar estos impactos y escoger las alternativas menos impactantes.

El ACV se lleva a cabo con el método EF 3, el cual es el recomendado por la Comisión Europea actualmente. Este método se basa en otros métodos previos y en organismos con criterio respaldado, por ejemplo, para evaluar el cambio climático se basa en el dictamen del Panel Intergubernamental del Cambio Climático (IPCC). Es un método que emplea solo impactos de punto medio y no de punto final, y tiene la posibilidad de tanto normalizar como ponderar los impactos, no solo caracterizarlos.

Este proyecto consiste en dos estudios. El primer estudio es autocomparativo, donde se evalúa el sistema escogido (sistema 1), en el que se valora la fabricación de ácido succínico a través de anhídrido biomaleico que proviene de bio-furfural, consiguiendo además como coproducto 2,3-butanodiol. Para este primer estudio se valoran también los escenarios de que el anhídrido maleico no sea de origen biológico sino de origen petroquímico, proveniente de la oxidación de n-butano o la oxidación de benceno.

El segundo estudio es un estudio comparativo, donde se evalúan otros tres sistemas (sistemas 2, 3 y 4), y se comparan a los resultados obtenidos con el sistema 1. El sistema 2 consiste en la ruta enteramente petroquímica con un proceso convencional. Los sistemas 3 y 4 son puramente biológicos, consistiendo en fermentadores que obtienen directamente el ácido succínico. El sistema 3 obtiene como coproducto sulfato de amonio, mientras que el sistema 4 obtiene bioetanol.

Previo a comenzar los estudios, el ACV exige la definición del objetivo y alcance de estos. El objetivo del ACV es el de escoger las mejores alternativas para la fabricación de ácido succínico y realizar propuestas para la mejora del sistema escogido. El alcance determina la unidad funcional del estudio

(1000 kg de ácido succínico), el límite de los sistemas estudiados, la herramienta empleada, etc. La herramienta empleada es SimaPro 9.5, la cual utiliza como principal base de datos ecoinvent, la cual es la mayor base de datos que existe y es la más empleada mundialmente.

Se ha realizado el inventario de los sistemas involucrados donde se han identificado las entradas y salidas de los procesos. Posteriormente, los estudios han sido llevados de forma sistemática, empezando por la caracterización de los impactos ambientales, donde se cuantifican los impactos asociados a las categorías de impacto ambiental. Para los sistemas 3 y 4 se aplicaron escenarios de residuos previamente para tratar el agua residual producida.

Para que las categorías de impacto ambiental pudiesen ser comparables entre sí, seguidamente se ponderaron los impactos, evaluando de esta forma la importancia relativa de estos sobre el conjunto. Asimismo, se aplicaron deducciones en los sistemas si estos presentaban coproductos con los que se pudiesen restar cargas de impacto ambiental.

Para acabar el estudio autocomparativo se interpretaron el conjunto de los resultados y se propusieron mejoras; mientras que, en el estudio comparativo, previamente se compararon los sistemas 1, 3 y 4 tras atribuir el efecto de impactos ambiental de fabricar coproductos. Seguidamente se realizó la interpretación general de los resultados. Por último, se recogieron en una sección final todas las conclusiones más relevantes originadas de ambos estudios.

2 Introducción.

2.1 Polímeros y biopolímeros: Problemática y solución

Los polímeros son compuestos extremadamente necesarios por sus propiedades (mayormente inertes, baja densidad, resistencia mecánica variable...): son imprescindibles en la industria alimentaria y en la sanitaria por seguridad biológica, en aplicaciones industriales porque añaden resistencia a los materiales sin aumentar mucho su peso, en materiales que necesiten ser aislantes eléctricos o transparentes, etc.

Es por todo esto que es muy importante encontrar una forma sostenible de producirlos, puesto que se están propiciando cambios adversos en la atmósfera y en los océanos (aumento de temperatura global, la acidificación y contaminación de las aguas, etc), debido al consumo excesivo de recursos fósiles y a la incorporación de más dióxido de carbono y metano al ciclo del carbono (carbono que se encontraba principalmente encerrado en yacimientos en el subsuelo).

Además, los polímeros actuales que no se tratan suelen acabar formando islas de basura en los océanos, afectan al turismo y a la pesca, bloquean canales, etc. En particular, acaban degradándose parcialmente formando microplásticos, los cuales están invadiendo las cadenas tróficas[1].

Esas son las consecuencias más directas, pero puede que dos de los peores efectos adversos del cambio climático sean la disparidad de Índice de Desarrollo Humano entre las naciones, destacando cómo contaminar más o menos está ligado a la riqueza y progreso del país (es necesario revertir esto, volviendo más eficiente la tecnología), o la pérdida de resiliencia que se está dando en el mundo.

Esta pérdida de resiliencia se debe a que cada vez hay menos diversidad, y, asimismo por la globalización, ahora las perturbaciones que se dan en el plano económico (como en las crisis), ambiental (como los ejemplos mencionados anteriormente) o hasta sanitario (como se ha visto con la COVID-19) se propagan más rápidamente[2].

Por definición los monómeros de los biopolímeros deben haberse fabricado vía recursos renovables o tener un origen biológico (con carbono que ya pertenecía al ciclo del carbono). Los biopolímeros que además sean biodegradables evitarían los problemas de los plásticos convencionales al descomponerse completamente.

Cuando además de tener este origen biológico, estos monómeros son de gran interés industrial para la fabricación de otros compuestos químicos o materiales con diversas aplicaciones, se denominan moléculas plataforma. Por lo mencionado, se va a proponer un compuesto que cumpla con dicha definición, el anhídrido o ácido succínico, que además de servir para fabricar biopolímeros, es útil y necesario para la industria en general.

La Tabla 1 resume los principales usos que se le pueden dar al ácido succínico:

Tabla 1. Usos del anhídrido y ácido succínico. Extracto de Kirk-Othmer enciclopedia of Chemical Technology [3].

Use	
hot-melt adhesives adhesive primers for aluminized surfaces	<i>Adhesives and sealants</i>
plant growth regulators herbicide compositions fungicides pesticidal effervescent granules insecticides mosquito attractants	<i>Agriculture</i>
cement additives and cement compositions asphalt paving materials	<i>Building and construction</i>
manufacture of porous titanium oxide manufacture of sinterable boehmite powder manufacture of porous ceramics	<i>Ceramics</i>
coating compositions automobile topcoats powder coating radiations, uv-curable coating compositions photocurable ink compositions toners quinacridone pigments dye intermediates	<i>Coating, pigments, dyes, inks</i>
biodegradable polymers biodegradable packaging foams curing agent for epoxy resins epoxy elastomers preparation of liquid crystals modified polyamides water-soluble polymers	<i>Polymers and resins</i>
finishes for silk or cellulosic fabrics dyeing aids for cotton or polyamide fibers succinylation of silk wet strengthening agents adhesive composition for textile laminates textile bleaching agents	<i>Textiles and fibers</i>
bactericide tablets for swimming pools algicide compositions treatment of water for use in beauty parlor flue gas desulfurization air purification and disinfection	<i>Water and gas treatment</i>
catalyst manufacture fireproofing aids wood treatment superconductor manufacture electrolyte for lithium batteries leather manufacture animal feeds	<i>Miscellaneous</i>

Se puede observar que los usos del anhídrido succínico y su ácido son muy extensos, es una sustancia muy versátil que puede llegar a tener su aplicación en muchos campos y procesos de fabricación. Se destacó anteriormente la fabricación de biopolímeros, pero realmente cualquier campo sería digno de estudio.

2.2 Monómero propuesto: ácido succínico

El ácido succínico se puede emplear para sintetizar polímeros como el succinato de polibutileno (PBS) o algunos tipos de poliamidas (Nylon), polímeros que pueden ser biodegradados, por lo que es una buena propuesta de compuesto para ser estudiado. El ácido succínico, se obtiene principalmente vía fermentación de biomasa o vía hidratación de anhídrido succínico con agua.

Por un lado, existe un estudio de 2015 que valora económica y ambientalmente (consumos energéticos, uso de suelo...) diferentes rutas para la obtención de ácido succínico: puramente petroquímico convencional, fermentativo directo, y una previsión de cómo será con un proceso fermentativo mejorado; dejando en mejor lugar las rutas fermentativas para dar directamente el ácido que el petroquímico convencional [4].

La principal ventaja de un sistema puramente fermentativo es el origen biológico del mismo, el cual permite utilizar biomasa para fabricar el producto y evita emplear recursos fósiles. La principal desventaja del mismo es encontrar una operación de separación que no eleve demasiado el coste y que permita recuperar y purificar el ácido succínico del resto de coproductos y residuos originados por la fermentación.

Las principales operaciones de separación que se han ido especializando para estos procesos fermentativos han sido la electrodiálisis, la precipitación del ácido succínico como sal o la extracción reactiva basada en aminas, siendo esta última la que mejor permite competir económicamente con las rutas petroquímicas[5]. La ruta petroquímica generalmente tiene operaciones de separación más sencillas que necesitan menos etapas (como la destilación), pero el coste de su materia prima la perjudica.

El anhídrido succínico tiene como precursor el anhídrido maleico, el cual poseía originalmente como principal vía de fabricación la convencional ruta de oxidación catalítica de benceno, con el tiempo pasó a ser la oxidación directa de n-butano. Además, han surgido otras rutas como la hidrogenación de anhídrido maleico, ruta que resulta ser también técnica y económicamente viable [6], [7].

Por otro lado, en el estudio de 2015 mencionado no se valoró este caso de que el succínico pudiese provenir de hidrogenar un anhídrido maleico que se haya obtenido vía fermentación de bio-furfural, se debe completar el estudio ambiental valorando esta opción. Además, en ese estudio[4] se contempla un proceso con condiciones muy severas de temperatura y presión pero existen avances para que el anhídrido succínico se obtenga en condiciones menos severas (más amigables económica y ambientalmente)

Se va a utilizar la metodología del Análisis de Ciclo de Vida (ACV) para evaluar el caso en el que se emplea bio-furfural y compararlo con los demás casos, esto permitiría un análisis para comprobar qué ruta es ambientalmente mejor.

2.3 Análisis de Ciclo de Vida

El ACV permite identificar y cuantificar qué subprocesos son los que generan más impactos a la hora de producir el anhídrido o ácido succínico, esto indicará las partes del proceso que deberían tener más margen de mejora técnica, económica, o ambiental.

La herramienta también permite comparar dentro de un mismo subproceso, diferentes escenarios o alternativas, puesto que, para fabricar un mismo producto, este se puede producir de forma diferente: con o sin catalizadores, a una u otra determinada temperatura, con unas u otras materias primas, con equipos de diferentes características (diferente potencia, capacidad, estructura, material...), etc.

El ACV se debe realizar en base a la normativa vigente. La norma UNE-EN-ISO 14040:2006 es la pauta europea aplicada al marco legislativo español de la norma ISO internacional (son los principios y el marco estructural que debe tener un estudio de ACV). Además, se necesita también la norma UNE-EN-ISO 14044:2006 (donde se detalla en profundidad el contenido de la estructura).

En España, las normativas ISO 14040/14044 pueden ser certificadas por AENOR, siendo siempre una certificación voluntaria para las empresas. Los incentivos a ser certificados en las normas ISO podrían ser obtener ventajas fiscales, puesto que el ACV tiene buena sinergia con los sistemas de gestión ambiental, como con la ISO 14064 sobre el cálculo de la huella de carbono. Esta normativa te permite obtener el sello de cálculo de huella de carbono, la cual puede otorgar compensaciones económicas.

Si bien es cierto, la legislación contempló que la cada vez más obligatoria aplicación de medidas ambientales en las empresas volvía inoportuna una deducción por mejoras medioambientales. De esta manera, consideró que las ventajas para las empresas en la aplicación de otras normas ISO deberían ser otras, como la propia mejora en la imagen del producto y de la empresa (ecoetiquetas por cumplir esas normas), o ventajas por mejorar el propio proceso industrial (ahorro en costes), etc [8][9].

Para tener valor real el ACV de cara a las instituciones debe contener mínimo los siguientes cuatro apartados, los cuales serán el cuerpo del proyecto: *Definición del objetivo y alcance, análisis de inventario, evaluación de impactos, e interpretación de los resultados*[10][11].

El software utilizado para realizar el ACV ha sido SimaPro 9.5. Esta herramienta deja a su disposición diferentes metodologías que pueden seguirse a la hora de realizar la evaluación de impactos. La metodología empleada para cuantificar y clasificar los impactos ha sido *Environmental Footprint* (EF) 3.0 por ser la recomendada por la Comisión Europea.

3 Objetivos del TFG.

El objetivo del TFG es identificar y analizar las fortalezas y debilidades del proceso escogido de fabricación de ácido succínico. Por un lado, analizando las partes más críticas del proceso, por otro, comparando los resultados con otros procesos que desarrollan el mismo producto. Se va a llevar a cabo empleando la herramienta de Análisis de Ciclo de Vida.

Por lo tanto, el desarrollo viene sucedido de los siguientes objetivos:

- Desarrollar los apartados que estipulan el alcance del estudio, con el método de caracterización de impactos que se ha seguido y la herramienta empleada, que aseguran la repetibilidad y reproducibilidad del estudio.
- Escoger una unidad funcional que sea común en todos los sistemas estudiados para que los estudios sean comparables.
- Completar el inventario de consumos y emisiones de los diferentes sistemas evaluados a partir de los correspondientes balances de materia y energía
- Aplicar un método de deducción de cargas de impacto ambiental en base a los coproductos fabricados en cada sistema.
- Identificar las etapas de los sistemas que sean más críticas a través de los impactos ambientales, puesto que pueden estar ligadas a desaprovechamiento de energía o recursos.
- Proponer mejoras al proceso escogido que minimicen los impactos identificados.

4 Solución técnica/resultados.

El cuerpo de la memoria adecuará la estructura típica de un análisis de ciclo de vida (ACV): *Definición del objetivo y alcance, análisis de inventario, evaluación de impactos, e interpretación de los resultados*

4.1 Objetivo del ACV

Este estudio tiene como objetivo comparar las distintas rutas de fabricación que dan ácido succínico con la ruta que contiene bio-furfural para dar anhídrido succínico de origen biológico, distinguiéndose de la petroquímica en el origen biológico de la misma, y de las enteramente fermentativas por poseer una reacción catalítica.

El estudio pretende comprobar si la combinación de varios de los elementos de las rutas bióticas (materia prima de origen biológico) y las abióticas (poder emplear catalizadores o utilizar condiciones de operación peculiares) desarrollan un proceso mejor, desde una perspectiva ambiental.

El ACV deberá proponer mejoras en el proceso de fabricación de hidrogenación de anhídrido maleico de origen biomásico para obtener finalmente ácido succínico. También debe aportar vías de investigación que sean capaces de disminuir los impactos ambientales ocasionados durante su fabricación.

4.2 Alcance del estudio

4.2.1 Unidad funcional

La unidad funcional del estudio va a ser 1000 kg de ácido succínico de pureza 100% (se considera una purificación total en todos los sistemas estudiados). Todas las entradas y salidas que se cuantifican en el inventario de los procesos van a corresponder a esa cantidad de masa, eso permite la correcta comparación entre los distintos sistemas estudiados, además de la reproducibilidad del estudio.

4.2.2 Sistemas estudiados. Esquemas de las entradas y las salidas

Es necesario identificar las entradas y salidas del proceso, y estipular los límites del ACV, puesto que este análisis debe tener un principio y un final. Se van a analizar 4 sistemas:

1. Sistema de **hidrogenación innovador** de anhídrido maleico de origen biomásico para dar anhídrido succínico, con posterior hidratación para dar el ácido succínico. También se valorarán alternativas con maleico de origen petroquímico de las bases de datos de SimaPro.[12]
2. Sistema de **hidrogenación convencional** de anhídrido maleico de origen petroquímico para dar anhídrido succínico, con posterior hidratación para dar el ácido succínico.
3. Sistema **biológico convencional** a través de fermentadores y biomasa para producir ácido succínico.
4. Sistema **biológico innovador** a través de fermentadores y biomasa para producir ácido succínico.

El punto de vista más simple y el elegido para estudiar los sistemas implicados es el “de la cuna a la puerta”, que estudia los impactos ambientales de la obtención de las materias primas, el transporte de estas a la fábrica y el proceso de fabricación de los productos. Si además se valora la fase de uso y la disposición final del producto se pasaría al punto de vista de “la cuna a la tumba”.

El sistema 1 engloba bastantes subsistemas (ver Figura 1). Primero un fermentador, donde se obtiene bio-furfural por medio de la fermentación de pasto (*Panicum virgatum*), donde también se consigue como coproducto 2,3-butanodiol. En segundo lugar, se realiza una reacción catalítica en fase gas con el bio-furfural para dar el anhídrido maleico, el catalizador empleado es un fosfato de vanadio. La obtención del bio-furfural y el anhídrido maleico toma sus datos de literatura científica [12].

La bibliografía consultada contempla el escenario de obtener el 100% de la energía de los residuos vegetales utilizándolos como biocombustible, y también se tienen los datos del escenario con 0% de su aprovechamiento, se elige considerar que solo se aprovecha el 50% de esta energía.

En tercer lugar, el anhídrido maleico se hidrogena en un segundo reactor con un catalizador de níquel Raney y con un disolvente de anhídrido acético para dar anhídrido succínico en unas condiciones suaves de temperatura (100°C) y bajas de presión (15 bares). Este anhídrido debe hidratarse posteriormente con agua para obtener finalmente el ácido succínico.

Además, para el sistema 1 se va a contemplar dos variantes que sustituyen el primer fermentador y la primera reacción química, para ser objeto de comparación el anhídrido maleico de origen biomásico con anhídrido maleico que se obtuviera por medio de la oxidación de benceno y la oxidación de n-butano.

Los sistemas 2 (ver Figura 2), 3 y 4 (ver Figura 3) están más simplificados y menos desarrollados por el origen de sus datos, menos detallado[4]. La literatura consultada compara el proceso convencional de fabricación de anhídrido maleico con dos procesos fermentativos, uno que es el típico y otro que es más innovador.

En cuanto al sistema 2, la principal diferencia con las variantes petroquímicas del sistema 1 es el origen de los datos, en el primer sistema se utiliza la base de datos de SimaPro para el origen del anhídrido maleico y el sistema 2 se basa en otra literatura diferente[3]. Las variantes petroquímicas del sistema 1 consideran igualmente una posterior hidrogenación del anhídrido maleico con condiciones más suaves que las del sistema 2, pero el resto de los elementos pueden considerarse comunes.

Los diferencias entre los sistemas 3 y 4 son fáciles de ver con su inventario (ver Tabla 4), en dicha sección (4.3.) pueden verse el resto de las diferencias entre ambos sistemas en base a las distintas entradas que poseen y salidas que generan. Son sistemas que pueden resumirse en ser fermentadores en los que se emplea sorgo como biomasa y de los que se obtiene directamente por medio de la fermentación el ácido succínico. Los sistemas contemplan los servicios auxiliares necesarios para la separación y purificación del producto y de los coproductos que generan.

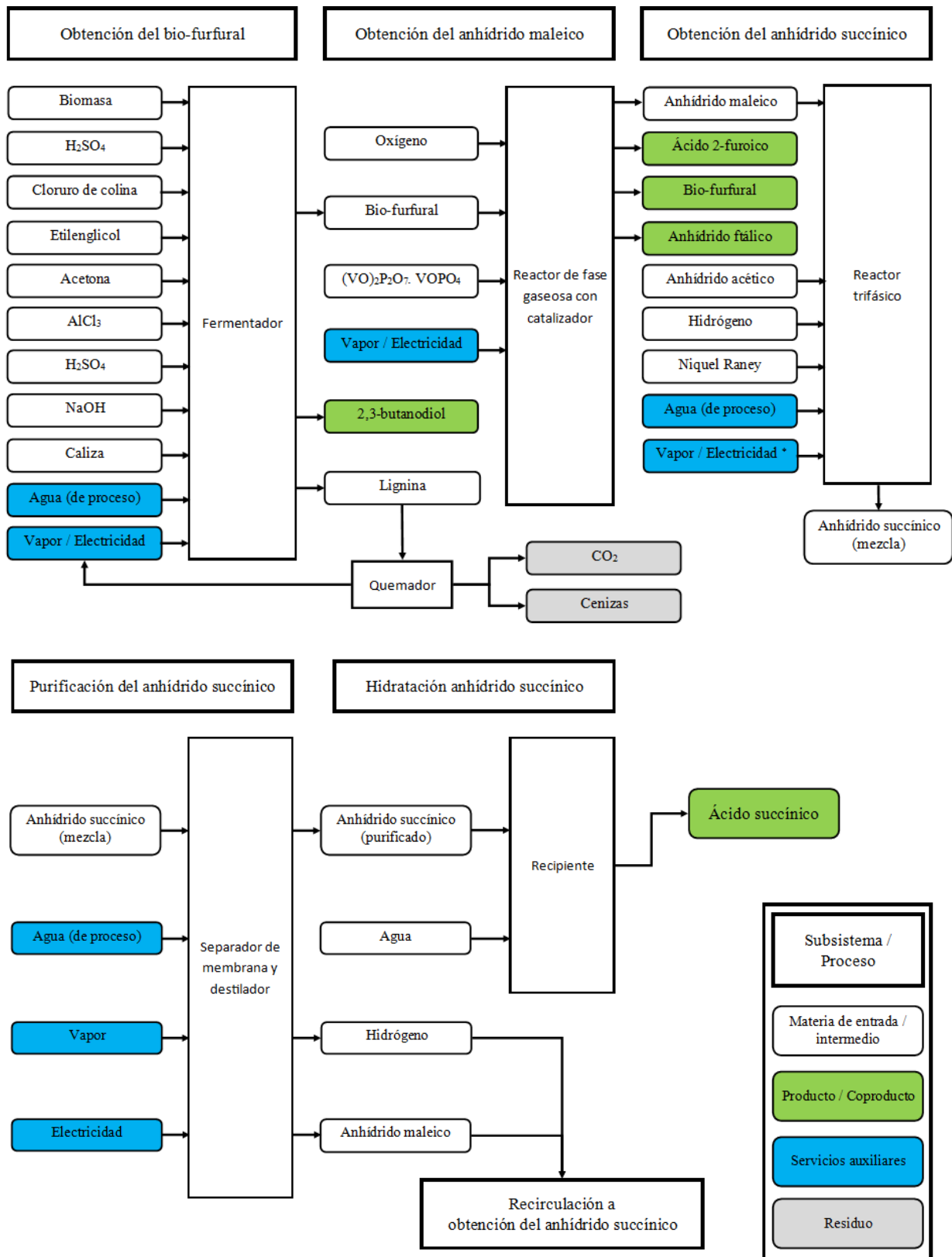


Figura 1: Diagrama del sistema 1. Proceso de hidrogenación innovador, con anhídrido maleico de origen biológico. Parte del diagrama extraído de "Maleic anhydride from bio-based 1-butanol and furfural: a life cycle assessment at the pilot scale"

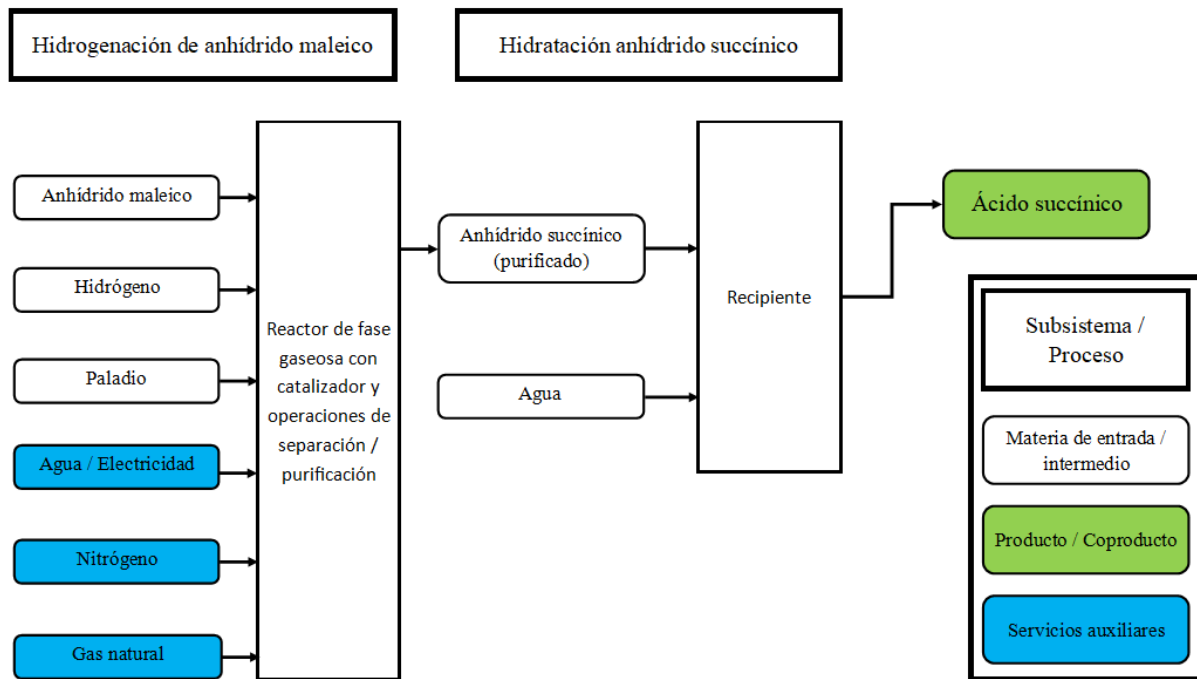


Figura 2. Diagrama del sistema 2. Proceso convencional petroquímico, con anhídrido maleico de origen fósil.

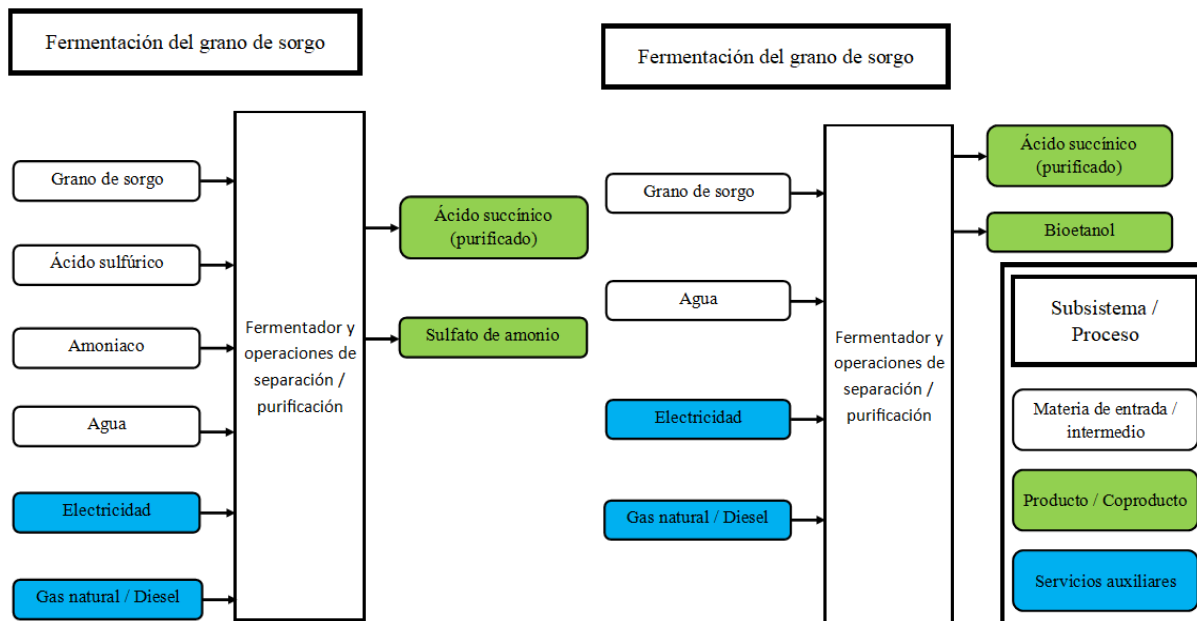


Figura 3. Sistemas 3 y 4 respectivamente. Procesos puramente fermentativos

Además de las aclaraciones que se van a dar en el inventario sobre las entradas de los sistemas estudiados, el ACV en sí mismo presenta limitaciones a tener en cuenta que se desarrollan en la siguiente sección (4.2.3).

4.2.3 Límites del ACV

Los límites del análisis de ciclo de vida comprenden las limitaciones técnicas que se puedan tener a la hora de evaluar los impactos ambientales, por lo que deben tenerse en cuenta.

- Límites geográficos. Relacionado con la base de datos empleada (ecoinvent), y la herramienta utilizada (SimaPro 9.5). Muchas veces la base de datos solo contempla valores de EE. UU., en la medida de lo posible se aplicarán los datos referidos a Europa cuando los haya. Es de suponer que no implique grandes cambios en los resultados finales esta elección, por la globalización de las tecnologías.

- Límites temporales. La base de datos para determinada maquinaria, procesos, u obtención de materias primas o energía desde la tecnosfera podría no estar del todo actualizada, puesto que la tecnología avanza muy rápidamente, siendo cada vez más eficiente. Sería lógico suponer que algunos impactos estén sobreestimados respecto a la situación actual, pero no lo suficiente como para dejar de ser representativos.

- Categorías de impactos excluidas del análisis. Se han excluido 3 de las 16 categorías de impacto ambiental (toxicidad humana cancerígena, eutrofización terrestre y ecotoxicidad en agua dulce) analizadas en el estudio, debido a los resultados de la Tabla 2.

- Límites en los escenarios de residuos. Solo va a tenerse en cuenta el tratamiento de las aguas residuales producidas, puesto que no se tienen datos concretos de los demás residuos.

4.2.4 Metodología y clasificación de impactos

4.2.4.1 Selección de la metodología. Contexto

La metodología a seguir para la identificación y clasificación de los impactos se puede clasificar en cuatro categorías[13]:

- Categoría 1. Los métodos que están basados en la propiedad de un recurso, no se recomienda el empleo de estos, se pueden cuantificar con la exergía.

- Categoría 2. Los métodos que evalúan la escasez de los recursos, se les designa como impactos de punto medio, los *midpoint*.

- Categoría 3. Engloban métodos que tratan solo sobre la escasez del agua, evaluación que depende de la localización geográfica.

- Categoría 4. Los métodos que cuantifican las consecuencias del agotamiento de los recursos para la sociedad, son los impactos de punto final, *endpoint*.

La evolución en la caracterización y valoración de los impactos ambientales ha experimentado muchos cambios a lo largo de los años, y cada país ha ido adaptándose cada cierto tiempo. En 2011 la Comisión

Europea no recomendaba ningún método en particular al analizar íntegramente las categorías 1 o la 3, aunque ya había métodos en estadios avanzados para la categoría 3, como *Swiss Ecoscarcity*.

En cuanto para la categoría 4, ReCiPe es el método que se aproximaba más a ser el recomendado entre los existentes, pero se pensaba que seguía estando inmaduro. Respecto a la categoría 2, el método posiblemente más recomendado era IMPACT 2002+, porque es una combinación de Eco-indicator 99 (lo que le otorga facilidad de empleo y comprensión de resultados), de CLM (lo que le otorga una gran base científica), y de la metodología del IPCC (mejor aproximación de los impactos referidos al cambio climático).

Sin embargo, entre 2013 y 2018 se puso en fase piloto la metodología EF (de *Environmental Footprint*), con la que se quiso establecer un marco europeo para el cálculo de huella ambiental, hasta que a partir de 2019 la Comisión Europea ya estableció la EF 3.0 como metodología de transición para el cálculo de la huella ambiental, la cual ha tenido su última actualización en 2022 (EF 3.1) [14].

La metodología EF va a ser la empleada por ser la más reciente indicada para Europa. Ha sido desarrollada en gran parte como inspiración de las metodologías predecesoras, lo que ha facilitado importar y tratar datos de la metodología ReCiPe 2016 para el sistema 1 con las relaciones obtenidas y detalladas en la Tabla 2.

Los impactos de punto final en otras metodologías se forman a partir de los de punto medio, como por ejemplo unificar consumo de recursos fósiles y consumo de recursos minerales que contribuirían al consumo de recursos en general. La metodología EF prescinde de los de impacto final y concretiza más cada categoría de impacto ambiental, las cuales son 16 en total.

En este estudio, aunque primero se listen y caractericen todas las categorías, después solo se analizarán las más representativas para los sistemas estudiados, utilizando la ponderación relativa de cada categoría de impacto ambiental. Es importante destacar que la ponderación depende mucho del método empleado porque cada método asigna una importancia relativa diferente a cada categoría de impacto ambiental, pero por las razones indicadas en esta misma sección, y sobre todo por ser el método recomendado por la Comisión Europea, se asume correcto el empleo del método EF 3.

4.2.4.2 Categorías de impacto ambiental

De las 16 categorías de impacto ambiental, las más comunes a analizar son las de cambio climático, consumo de recursos fósiles o minerales, el consumo de agua, la eutrofización o acidificación de esta, además de alguna relacionada con la polución del aire o salud humana (ozono, materia particulada, toxicidad humana...). No todos los impactos se recogen con este método, por ejemplo, no se analiza impacto por ruido, aunque sí recoge una importante selección, que es la siguiente:

- Cambio climático. Esta categoría evalúa los gases de efecto invernadero que se emiten hacia la atmósfera y que propician el calentamiento global, en función de la capacidad que tenga dicho gas de retener calor. La unidad base con la que se unifican estos gases son kilogramos de CO₂ equivalentes, por ejemplo, para el método EF 3 emitir 1 kg de CH₄ equivaldría a 34 kg de CO₂ equivalentes.
- Agotamiento de la capa de ozono estratosférico. El ozono a nivel estratosférico protege de la radiación del sol, esta categoría lo cuantifica en un horizonte temporal a 100 años. Se mide en kilogramos de triclorofluorometano (CFC11) equivalentes.
- Radiación ionizante. Cuantifica el impacto de la radiación ionizante sobre la población, se utiliza como unidad base la radiación emitida por el uranio 235, en kilobequerelios (kBq), por ejemplo, el carbono 14 en el aire tiene un factor de 10 respecto a este, mientras que en el agua es de 0,0557. Aunque se trate del mismo emisor, en el agua la radiación es menor porque esta puede bloquear parte de la radiación.
- Formación de ozono a nivel de suelo (esmog fotoquímico). El esmog fotoquímico se forma por reacciones fotoquímicas con contaminantes que se dan mayormente por los vehículos de combustión en las ciudades, donde se emiten óxidos de nitrógeno u otros compuestos que al interaccionar con el oxígeno atmosférico y con la luz solar originan ozono, este es perjudicial para la salud al poderse respirar por formarse a alturas bajas. La unidad base es de 1 para los óxidos de nitrógeno, se utiliza kilogramos de NMVOC equivalentes, las siglas hacen referencia a compuestos orgánicos volátiles distintos del metano.
- Materia particulada. Esta categoría valora la incidencia de originar una enfermedad por la emisión de materia particulada. La unidad base es la incidencia que se origina por emitir un kilogramo de materia particulada de tamaño de 2,5 micras (disease inc.).
- Toxicidad humana, no cancerígena. Esta categoría cuantifica el aumento de morbilidad en la población humana por emisión de un compuesto perjudicial. En esta categoría el compuesto perjudicial es valorado de forma diferente en función de si este se emite a nivel de suelo, de aire o en el agua; también se diferencia en los campos anteriores si es originado por la agricultura o a nivel industrial (para el suelo), a nivel estratosférico o en interiores (para el aire), etc. La unidad base es la unidad tóxica comparativa para humanos (CTUh).
- Toxicidad humana cancerígena. Esta categoría es similar a la anterior, pero valorando los efectos cancerígenos de las sustancias emitidas. La unidad de medida es la misma (CTUh).
- Acidificación. La acidificación valora los efectos negativos de bajar el pH en el medio terrestre y acuático al emitir ciertas sustancias que alteran el pH. Se mide en moles equivalentes de protones (mol H⁺ eq).
- Eutrofización agua dulce. La eutrofización mide el efecto de que en el medio acuático se disponga de forma puntual muchos más nutrientes (fósforo) del que debería, por la alteración

del ecosistema que se puede propiciar. La eutrofización en agua dulce se mide en base a kilogramos equivalentes de fósforo (kg P eq).

- Eutrofización agua marina. Similar a la anterior, pero para el medio acuático marino (nitrógeno como nutriente limitante), midiéndose esta vez en base a kilogramos de nitrógeno equivalentes (kg N eq).
- Eutrofización terrestre. Similar a la anterior, pero para el medio terrestre, valorando la permanencia en el suelo y midiéndose en moles de nitrógeno equivalentes (mol N eq).
- Ecotoxicidad de agua dulce. La ecotoxicidad cuantifica los efectos de emitir sustancias que son tóxicas para los ecosistemas acuáticos, considerando el potencial de bioacumulación y su toxicidad en sí mismas. Se mide en la unidad tóxica comparativa para los ecosistemas (CTUe).
- Uso de suelo. Se cuantifica el impacto ambiental asociado a la transformación de zonas de bosque y de praderas en suelo urbano o la ocupación de suelo para uso de agricultura, entre otros. Se mide con el índice de calidad del suelo (Pt).
- Uso de agua. Se evalúa la cantidad de agua potencialmente consumible de la que se priva a humanos y ecosistemas acuáticos. Se mide en metros cúbicos de agua para consumir ponderada (m^3 depriv.).
- Consumo de combustibles fósiles. Se valora el agotamiento de los recursos fósiles, se mide en función de la energía que se obtiene de ellos, estandarizado en megajulios (MJ).
- Consumo de recursos minerales y de metales. Se valora el agotamiento de minerales y metales, se mide en comparación al impacto ambiental originado por el consumo de un kilogramo de antimonio (kg Sb eq).

4.2.5 Herramienta utilizada. SimaPro 9.5.

El software empleado, SimaPro 9.5, es una herramienta de trabajo reconocida a nivel internacional, la cual, tiene la base de datos más extensa y completa (ecoinvent) en cuanto a inventarios de ciclos de vida de procesos y productos. Es un programa desarrollado por la empresa Pré Consultants [15].

La Figura 4 muestra la interfaz de la aplicación utilizada. Se puede observar que el programa ofrece la metodología del ACV con todos los pasos de la normativa vigente (objetivo y alcance, inventario...), además se muestra la clasificación que se le da a los procesos (material, energía, transporte...), datos generales (como la referencia bibliográfica), u otra información de interés.

También se aprecia en la misma figura que se pueden encontrar fácilmente las propias referencias bibliográficas de la base de datos, incluyendo los procesos que se han tenido en cuenta y otros datos relevantes del inventario.

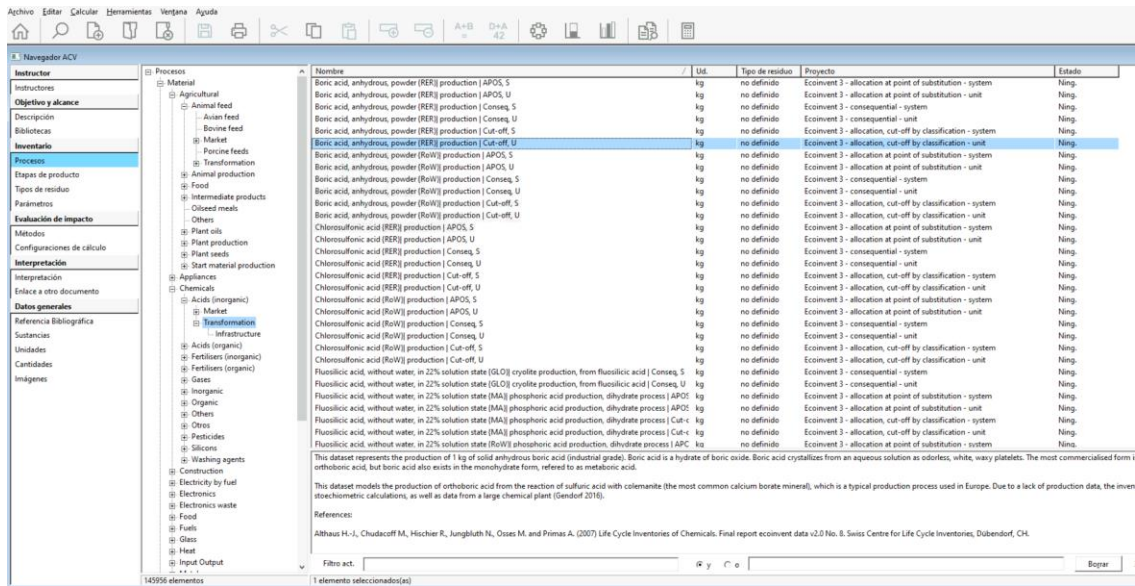


Figura 4. Interfaz del software empleado. SimaPro 9.5

4.3 Análisis de inventario

El análisis de inventario cuantifica las entradas y salidas de los sistemas estudiados (ver sección 4.2.2.) por tonelada de ácido succínico producido, en el Anexo I se encuentra la correspondencia de cada entrada con SimaPro y la base de datos empleada.

Como ejemplo de cómo se añade el inventario en SimaPro, se muestra la Figura 5 donde pueden observarse las entradas necesarias para acondicionar y obtener el hidrógeno que se utiliza en la segunda reacción catalítica del sistema 1.

Editar transformaciones proceso 'Hidrógeno acondicionado (Pre-reactor)'					
Documentación	Entrada/salida	Parámetros	Descripción del sistema		
Productos					
Salidas conocidas a la tecnósfera. Productos y co-productos					
	Hidrógeno acondicionado (Pre-reactor)	Cantidad	Ud.	Cantidad	Asignación % Categoría
	(Insertar línea aquí)	0,01737981444678	ton	Mass	100 % Otros
Salidas conocidas a la tecnósfera. Productos evitados					
	(Insertar línea aquí)	Cantidad	Ud.	Distribución	DS^2 or 2^DS Min
Entradas					
Entradas conocidas desde la naturaleza (recursos)					
	(Insertar línea aquí)	Cantidad	Ud.	Distribución	DS^2 or 2^DS Min
Entradas conocidas desde la tecnósfera (materiales/combustibles)					
	Hydrogen, gaseous (GLO) market for hydrogen, gaseous Cut-off, U	Cantidad	Ud.	Distribución	DS^2 or 2^DS Min
	(Insertar línea aquí)	0,01737981444678	ton	Indefinido	
Entradas conocidas desde la tecnósfera (electricidad/calor)					
	Electricity, medium voltage (ES) market for Cut-off, U	Cantidad	Ud.	Distribución	DS^2 or 2^DS Min
	(Insertar línea aquí)	101,55072618294	kWh	Indefinido	
	Tap water (RER) market group for Cut-off, U	Cantidad	Ud.	Distribución	DS^2 or 2^DS Min
	(Insertar línea aquí)	79,951448471158	kg	Indefinido	

Figura 5. Inventario en SimaPro. Ejemplo del sistema 1, entradas y salidas correspondientes a la obtención del hidrógeno y su acondicionamiento por tonelada de ácido succínico producido

4.3.1 Sistema 1

Por un lado, en el sistema 1 para los subsistemas que involucran la obtención del anhídrido maleico de origen biomásico, se han obtenido directamente los datos de impactos ambientales del anhídrido maleico del artículo “Maleic anhydride from bio-based 1-butanol and furfural: a life cycle assessment at the pilot scale” [12], aunque han tenido que ser tratados por cambiar del método ReCiPe 2016 al EF 3 utilizado en este estudio. También se adquieren los datos de producción de 2,3-butanodiol de esta manera, pero desde el artículo “Life Cycle Assessment of Microbial 2,3-Butanediol Production from Brewer’s Spent Grain Modeled on Pinch Technology”[16].

Se cargaron los mismos datos del sistema 1 en SimaPro usando tanto el método ReCiPe 2016 como el EF 3. Posteriormente, se representaron los resultados de ambos métodos para conseguir la relación entre cada categoría de impacto ambiental evaluada por el método de ReCiPe 2016 y el método EF 3.

Los datos se trataron representando relaciones lineales porque ajustaban correctamente entre las categorías, a pesar de cada método poseer unidades diferentes. Puede observarse en la Figura 6, que muestra cómo sería la categoría de acidificación del medio, donde puede observarse como por ejemplo aproximadamente 7 kg equivalentes de SO₂ para el método ReCiPe 2016 corresponde a unos 10 mol equivalentes de H⁺ para el método EF 3.

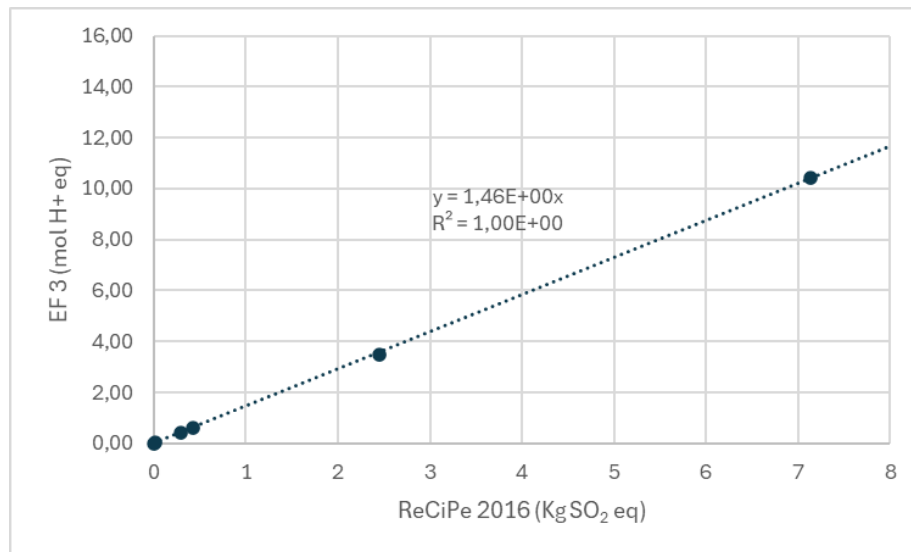


Figura 6. Caracterización de impactos. Ejemplo de relación entre la Acidificación del método ReCiPe 2016 y del EF3

Se ha sacado la ecuación de la recta $y = m \cdot x + n$, donde $n = 0$ porque se puede asegurar que 0 unidades de cualquier categoría son 0 unidades de su equivalente. De esta forma puede sacarse la relación de todas las categorías de impacto ambiental entre ambos métodos. El resumen de los resultados obtenidos se muestra en la Tabla 2.

Tabla 2. Caracterización de impactos. Relación entre los métodos ReCiPe 2016 (x) y el EF3 (y)

Categoría de impacto ambiental	ReCiPe 2016 Unidades	EF 3 Unidades	$y = m \cdot x$	R^2 (%)
Cambio climático	kg CO2 eq	kg CO2 eq	$GW_y = GW_x$	100
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	kg CFC11 eq	$O_3(\text{ext})_y = 6,36 \cdot 10^{-1} \cdot O_3(\text{ext})_x$	98,6
Radiación ionizante	kBq Co-60 eq	kBq U-235 eq	$I_y = 2,02 \cdot I_x$	97,7
Ozono (suelo)	kg NOx eq	kg NMVOC eq	$O_3(s)_y = 1,59 \cdot O_3(s)_x$	100
Materia particulada	kg PM2.5 eq	disease inc.	$Pm_y = 2,64 \cdot 10^{-5} \cdot Pm_x$	99,7
Toxicidad humana, no cancerígena	kg 1,4-DCB	CTUh	$THnC_y = 1,3 \cdot 10^{-8} \cdot THnC_x$	99,4
Toxicidad humana, cancerígena	kg 1,4-DCB	CTUh	$THC_y = 1,74 \cdot 10^{-8} \cdot THC_x$	73,31 ¹
Acidificación	kg SO2 eq	mol H+ eq	$Ac_y = 1,46 \cdot Ac_x$	100
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	kg P eq	$Eu_y = 6,08 \cdot 10^{-1} \cdot Eu_x$	96,9
Eutrofización, agua marina	kg N eq	kg N eq	$Eu_{s,y} = 4,9 \cdot 10 \cdot Eu_{s,x}$	95,6
Ecotoxicidad, agua dulce	kg 1,4-DCB	CTUe	$Ec_y = 1,92 \cdot 10^2 \cdot Ec_x$	57,21 ¹
Uso de suelo	m2a crop eq	Pt	$S_y = 1,39 \cdot 10^2 \cdot S_x$	99,8
Uso de agua	m3	m3 depriv.	$W_y = 3,55 \cdot 10 \cdot W_x$	99,8
Combustibles fósiles	kg oil eq	MJ	$F_y = 4,48 \cdot 10 \cdot F_x$	100
Minerales y metales	kg Cu eq	kg Sb eq	$M_y = 4,66 \cdot 10^{-3} \cdot M_x$	99,6

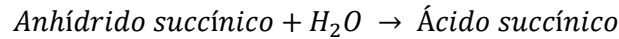
Nota 1. No se tendrán en cuenta los impactos de toxicidad humana cancerígena y ecotoxicidad por la baja relación entre modelos.

Se puede observar una gran linealidad entre la mayoría de las categorías. Como se mencionó en la sección de la metodología (4.2.4.), esto se debe a la evolución técnica e histórica que ha habido en la forma de evaluar la caracterización de impactos ambientales. Por ejemplo, para el cambio climático prácticamente la totalidad de los modelos lo evalúan en la actualidad de acuerdo con lo sugerido por el Grupo Intergubernamental de Expertos sobre el cambio climático (IPCC), por eso la pendiente de la recta es de $m = \frac{1 \text{ kg de CO2 EF 3}}{\text{kg de CO2 ReCiPe 2016}}$.

Solo se van a excluir la toxicidad humana cancerígena, la ecotoxicidad en agua dulce, y además la eutrofización terrestre, la cual en ReCiPe es ecotoxicidad terrestre en vez de eutrofización, por lo que no pueden relacionarse al no ser directamente dependientes una de la otra. Por lo tanto, de las 16 categorías que serían en total, solo se van a tener en cuenta las 13 restantes.

Por otro lado, se han empleado los datos del TFG “Diseño y optimización de una planta de producción de anhídrido succínico mediante hidrogenación de anhídrido maleico” [7] para completar el inventario de los subsistemas relacionados con las etapas de reacción de anhídrido maleico hacia anhídrido succínico, purificación e hidratación a su ácido. En este trabajo se cuantifica el anhídrido succínico

producido anualmente, por lo que se ha debido calcular cuánto ácido se formaría haciendo reaccionar a este anhídrido con agua de la siguiente forma:



$$n_{\text{anhídrido}} = \frac{16.701 \text{ ton}}{102,09 \frac{\text{ton}}{\text{kmol}}} = 163,59 \text{ kmol}$$

$$m_{H_2O} = 163,59 \text{ kmol} \cdot 18,02 \frac{\text{ton}}{\text{kmol}} = 2.947 \text{ ton } H_2O$$

$$m_{\text{ácido}} = 16.701 + 2.947,2 = 19.648 \text{ ton ácido succínico}$$

De esta forma se obtiene cuánto ácido succínico se obtiene anualmente. Para la cuantificación del inventario recogido del TFG se han realizado cálculos análogos a los siguientes:

$$H_2O_{\text{refrigeración,reactor}} = \frac{1.228 \frac{\text{kg } H_2O}{h} \cdot 8.000 \frac{h}{\text{año}} \cdot \frac{1 \text{ ton } H_2O}{1.000 \text{ kg } H_2O}}{19.648 \frac{\text{ton suc}}{\text{año}}} = 500 \frac{\text{kg } H_2O}{\text{ton suc}}$$

Además, para conocer la salida del coproducto se ha considerado la relación del artículo mencionado anteriormente[16], donde se expone que en la preparación del precursor (el bio-furfural), un 57,8% de lo producido es el coproducto 2,3-BDO, y un 42,2% el bio-furfural. Asimismo, se asume que la conversión del bio-furfural hacia el anhídrido maleico es total, puesto que en el artículo se detalla un 99,2% de conversión y una selectividad del 97,9%, por lo que es una buena aproximación.

También se ha considerado en el inventario el uso de una planta química industrial empleando la información existente en la base de datos de SimaPro. La fracción de planta que se corresponde con la producción de la unidad funcional seleccionada se calcula como se indica a continuación

$$\text{Fábrica industria química} = \frac{1 \text{ planta}}{25 \text{ años} \cdot 19648 \text{ ton ácido succínico/año}} = 2,04 \cdot 10^{-6} \text{ planta} \cdot \text{ton}^{-1}$$

Se ha valorado en base a la producción anual de ácido que se obtendría con los datos de la referencia anterior[7], y el tiempo de vida útil de la fábrica que se estipula en 25 años. Este valor se va a repetir en todos los sistemas pues se considera que las fábricas tengan la misma producción anual y mismo tiempo de operación.

Los resultados obtenidos para cada materia de entrada, catalizador y servicios auxiliares se disponen en la Tabla 3. Todos los datos de esta tabla están referenciados a entradas por tonelada de ácido succínico producido. El inventario de esta tabla no hace referencia a todo el sistema 1 por lo mencionado anteriormente, los impactos asociados al coproducto y la obtención del bio-maleico se obtendrán vía importación de datos de otros estudios[12], [16].

Tabla 3. Inventario del sistema 1. De anhídrido maleico a ácido succínico. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico

Entradas		
Materias primas y disolvente	Hidrógeno (kg)	17,38
	Anhídrido maleico (kg)	827,33
	Anhídrido acético (kg)	22,41
	Agua para reacción (kg)	150
Acondicionamiento anhídridos (pre-reactor)	Electricidad (kWh)	2,13
	Vapor de calefacción (kWh)	27,71
Acondicionamiento hidrógeno (pre-reactor)	Agua de refrigeración (kg)	79,95
	Electricidad (kWh)	101,55
Reactor	Agua de refrigeración (kg)	500,05
	Catalizador níquel Raney (kg)	0,02
Destilador multietapa	Agua de refrigeración (kg)	379,22
	Electricidad (kWh)	0,41
	Vapor de calefacción (kWh)	338,43
Fábrica industria química	Fracción planta (p)	2,04E-06
Salidas		
Coproducto	2,3-butanodiol (kg)	1133,17
Producto	Ácido succínico (kg)	1000

Por otro lado, también se evaluará la reacción de anhídrido maleico a succínico del sistema 1 con maleico de origen petroquímico de la base de datos de SimaPro.

4.3.2 Sistemas 2, 3 y 4

En cuanto a los sistemas 2, 3 y 4, se han tomado sus inventarios del artículo “Sustainability metrics for succinic acid production: A comparison between biomass-based and petrochemical routes” [4]. A diferencia del primer sistema, en el sistema 2 se valora un proceso más convencional, esto supone un catalizador de paladio y condiciones de operación más severas, con todos los impactos ambientales que ello conlleva.

Se disponen los datos recogidos del sistema 2 en la Tabla 4. Este sistema no presenta ni escenarios de residuos ni coproductos, y como se ha comentado anteriormente la fracción de la fábrica va a tener el mismo valor.

Tabla 4. Inventario del sistema 2. De anhídrido maleico a ácido succínico. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico

Entradas		
Materias primas	Hidrógeno (kg)	254,31
	Anhídrido maleico (kg)	890,08
	Agua (Litros)	163,53
Catalizador	Paladio (kg)	0,01
Servicios auxiliares	Agua de proceso (Litros)	141,10
	Nitrógeno (kg)	72,88
	Gas Natural (kg) / (m ³)	101,72 / 98,76
	Electricidad (kWh)	356,03
Fábrica industria química	Fracción planta (p)	2,04E-06
Salidas		
Producto	Ácido succínico (kg)	1000,00

Por lo general, lo que cambia a grandes rasgos respecto al sistema 1 es el catalizador empleado y los servicios auxiliares necesarios, debido a lo comentado de que el sistema 1 se basa en un proceso más innovador a más baja presión y temperatura que el sistema 2, además de emplear un catalizador basado en níquel y aluminio, metales menos raros. Esto por ejemplo se ve en que el sistema 2 requiere mucha más electricidad en total que el primero. Todo esto se traducirá en distintos impactos ambientales

En cuanto a los sistemas 3 y 4, se pueden agrupar en una misma tabla (ver Tabla 5), por lo parecidos que son ambos procesos fermentativos. Los sistemas 3 y 4 comparten la mayoría de las entradas, diferenciándose en que el sistema 4 evita la utilización de ácido sulfúrico y amoníaco del sistema 3, además de producir como coproducto etanol. Mientras que el sistema 3 utiliza aproximadamente la mitad del agua subterránea y grano de sorgo que el otro sistema, y como coproducto obtiene sulfato de amonio. Ambos sistemas tendrían ventajas y desventajas que se analizarán con los resultados de la evaluación de impacto ambiental.

Tabla 5. Inventario de los sistemas 3 y 4. Procesos fermentativos. Entradas y salidas por tonelada de ácido succínico

Entradas			
Sistemas considerados		Sistema 3	Sistema 4
Materias primas	Grano sorgo (kg)	2447,13	5339,2
	Ácido sulfúrico (kg)	1110	-
	Amoniaco (kg)	388,5	-
Agua (general)	Agua potable (kg)	277,9	1578,99
	Agua subterránea (kg)	27790,2	53685,61
Servicios auxiliares	Gas Natural (g) / (dm ³)	1,5 / 1,46	2,30 / 2,23
	Diesel (kg)	0,46	0,89
	Electricidad (kWh)	1249,29	2204,62
Fábrica industria química	Fracción planta (p)	2,04E-06	2,04E-06
Salidas			
Sistemas considerados		Sistema 3	Sistema 4
Producto	Ácido succínico (kg)	1000	1000
Coproducto	Sulfato de amonio (kg)	1333,33	-
	Etanol (kg)	-	1250
Residuos	Aguas residuales (Litros)	13895,1	12631,91

Los resultados del inventario involucran todos los subsistemas reflejados en la sección que acota el ACV de los sistemas estudiados (4.2.2.), junto con los datos de caracterización que se van a importar de los estudios anteriormente citados [12], [16], y convertidos al método EF 3 con las relaciones de la Tabla 2. Una vez obtenidos estos resultados, puede pasarse a la evaluación de impactos ambiental.

4.4 Evaluación de impactos.

En cuanto a la evaluación de impactos, para cada sistema estudiado primero van a caracterizarse los impactos ambientales surgidos de los inventarios realizados, y se proseguirá con la ponderación de estos. Además, se analizará la posibilidad de descontar cargas a los impactos ambientales en función de los coproductos producidos en los sistemas 1, 3 y 4.

4.4.1 Estudio autocomparativo

En esta primera sección se va a contemplar el análisis exclusivo del sistema 1, junto a las variantes propuestas del mismo.

4.4.1.1 Sistema 1. Caracterización

Para el sistema 1, surgida de las entradas del inventario y los datos importados de los estudios citados [12], [16], se obtuvo la caracterización de los impactos recogida en la Tabla 6.

Tabla 6. Sistema 1. Caracterización de impactos ambientales por salida de una tonelada de ácido succínico.

Categoría de impacto ambiental	Unidad	Total	Reactor	Anhídridos	Hidrógeno	Destilación	Agua de reacción	Fábrica
Cambio climático	kg CO2 eq	7,35E+02	5,99E-01	2,68E+02	6,08E+01	1,28E+02	4,97E-02	2,77E+02
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,35E-03	3,39E-08	2,28E-03	4,16E-05	1,83E-05	3,31E-09	1,66E-05
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	1,81E+02	1,00E-01	9,35E+01	3,38E+01	5,47E+00	1,77E-02	4,83E+01
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	4,19E+00	3,34E-03	2,45E+00	2,85E-01	2,09E-01	1,65E-04	1,24E+00
Materia particulada	disease inc.	7,42E-05	6,00E-08	4,57E-05	2,91E-06	3,73E-06	2,66E-09	2,18E-05
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	4,19E-05	2,25E-08	8,68E-06	6,57E-07	4,46E-07	2,93E-09	3,21E-05
Acidificación	mol H+ eq	1,88E+01	1,93E-02	1,42E+01	6,13E-01	4,20E-01	2,76E-04	3,47E+00
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	1,31E+00	3,29E-04	9,78E-01	1,32E-02	1,23E-02	3,57E-05	3,07E-01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,11E+01	7,80E-04	4,06E+01	7,93E-02	6,06E-02	5,32E-05	3,75E-01
Uso de suelo	Pt	1,07E+05	2,54E+00	1,02E+05	3,99E+02	1,69E+02	2,02E-01	4,51E+03
Uso de agua	m3 depriv.	7,02E+02	2,22E+01	5,27E+02	2,53E+01	1,88E+01	6,46E+00	1,03E+02
Combustibles fósiles	MJ	1,53E+04	7,64E+00	6,54E+03	3,19E+03	1,91E+03	8,51E-01	3,61E+03
Minerales y metales	kg Sb eq	1,01E-01	2,01E-05	3,84E-02	1,10E-04	4,50E-05	2,45E-07	6,28E-02

Se ha marcado cada celda con sombreado azul en función del peso de la caracterización por fila de la tabla, correspondiendo cada fila a una categoría de impacto ambiental. También se pueden ver estos resultados en forma de gráfica sobre el total de impactos en la Figura 7.

En dicha figura se puede observar que los subsistemas correspondientes a la propia fábrica y al acondicionamiento y obtención de los anhídridos (acético y maleico) son los que más impactos generan. Mientras que el propio reactor y el agua para hidratar el anhídrido succínico generan poco impacto, siendo la obtención del hidrógeno y su acondicionamiento, además de la destilación, los siguientes impactos más representativos.

De forma general, los impactos relacionados con la propia fábrica son intrínsecos a cualquier proceso que se pueda realizar en todo tipo de industria química, por este motivo se va a desestimar analizar el compartimento “Fábrica”.

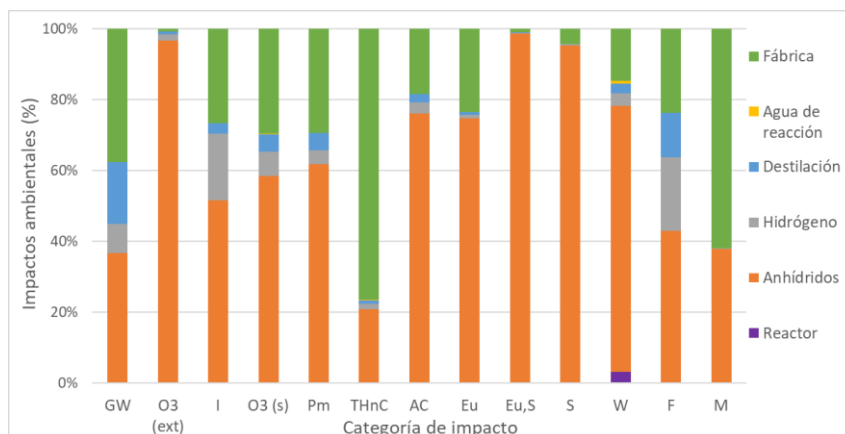


Figura 7. Sistema 1. Caracterización de impactos ambientales sobre el 100% de cada categoría.

A continuación, se han desglosado las entradas que corresponden al acondicionamiento de los anhídridos, obteniendo los resultados de la Tabla 7.

Tabla 7. Sistema 1. Subsistema acondicionamiento de anhídridos. Caracterización de impactos ambientales.

Categoría de impacto ambiental	Unidad	Total	Anhídrido acético	Anhídrido maleico	Electricidad	Calor
Cambio climático	kg CO2 eq	2,68E+02	8,25E+01	1,74E+02	6,84E-01	1,05E+01
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,28E-03	1,06E-05	2,26E-03	4,18E-08	1,50E-06
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	9,35E+01	6,47E+00	8,61E+01	4,82E-01	4,36E-01
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	2,45E+00	2,75E-01	2,15E+00	2,55E-03	1,70E-02
Materia particulada	disease inc.	4,57E-05	3,86E-06	4,15E-05	1,51E-08	3,04E-07
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	8,68E-06	1,23E-06	7,41E-06	7,50E-09	3,58E-08
Acidificación	mol H+ eq	1,42E+01	3,92E-01	1,38E+01	5,78E-03	3,42E-02
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	9,78E-01	2,11E-02	9,56E-01	2,49E-04	9,99E-04
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,06E+01	6,72E-02	4,05E+01	9,16E-04	4,94E-03
Uso de suelo	Pt	1,02E+05	2,94E+02	1,02E+05	2,45E+00	1,38E+01
Uso de agua	m3 depriv.	5,27E+02	1,74E+02	3,53E+02	4,44E-01	1,94E-01
Combustibles fósiles	MJ	6,54E+03	1,55E+03	4,82E+03	1,58E+01	1,56E+02
Minerales y metales	kg Sb eq	3,84E-02	8,34E-04	3,76E-02	1,91E-06	3,60E-06

Se observa que lo que más impactos genera es conseguir como materia prima el propio anhídrido maleico, seguido de conseguir el anhídrido acético y siendo el propio acondicionamiento de las corrientes (electricidad para la presión y calor de vapor para la temperatura) significativamente menor.

Es por estos resultados que puede considerarse que para mejorar el proceso de fabricación de anhídrido succínico es determinante mejorar el proceso de obtención de anhídrido maleico, por lo menos si se sigue esta ruta. De la base de datos de ecoinvent, se puede obtener el anhídrido maleico desde dos rutas petroquímicas diferentes, vía oxidación del butano y oxidación del benceno.

Un resumen de las tres rutas posibles se recoge en la Tabla 8, donde se pueden comparar las dos rutas con maleico de origen petroquímico mencionadas con el maleico de origen biomásico del sistema 1. Se puede observar en dicha tabla que volver a las rutas únicamente petroquímicas puede ser aconsejable

para mejorar algunos impactos ambientales (acidificación, eutrofización...), pero puede ser negativo para otros impactos (cambio climático, radiación ionizante, consumo de combustibles fósiles...).

Tabla 8. Sistema 1. Subsistema obtención anhídrido maleico. Caso estudio y base de datos de ecoinvent. Caracterización

Categoría de impacto	Unidad	Sistema 1	Oxidación n-butano	Oxidación benceno
Cambio climático	kg CO2 eq	1,74E+02	1,82E+03	3,40E+03
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,26E-03	7,61E-04	4,27E-05
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	8,61E+01	4,03E+02	1,12E+02
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	2,15E+00	5,13E+00	8,33E+00
Materia particulada	disease inc.	4,15E-05	4,74E-05	9,78E-05
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	7,41E-06	1,33E-05	1,41E-05
Acidificación	mol H+ eq	1,38E+01	9,40E+00	8,85E+00
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	9,56E-01	4,11E-01	5,29E-01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,05E+01	1,36E+00	1,40E+00
Uso de suelo	Pt	1,02E+05	7,44E+03	2,70E+03
Uso de agua	m3 depriv.	3,53E+02	1,54E+02	1,17E+03
Combustibles fósiles	MJ	4,82E+03	5,24E+04	5,97E+04
Minerales y metales	kg Sb eq	3,76E-02	1,03E-02	9,74E-03

Por un lado, que la ruta del sistema 1 tenga peores resultados en acidificación, eutrofización o uso de suelo se debería principalmente a la agricultura para obtener la biomasa de materia prima. Estos impactos vienen derivados de la utilización de fertilizantes y fitosanitarios, entre otros, que también parecen favorecer a la destrucción de la capa de ozono; además de un importante impacto en recursos minerales, presumiblemente por el catalizador empleado en la reacción para dar el anhídrido maleico.

Por otro lado, la parte buena de esta ruta es el menor empleo de recursos fósiles, tanto como de materias primas como de combustibles, que conlleva a su vez un menor impacto al cambio climático. El uso del agua es peculiar porque para el sistema 1 queda por encima de la ruta del n-butano y por debajo de la del benceno, esto se debe más a la obtención del propio n-butano y el benceno a los servicios auxiliares empleados para transformarlos en maleico.

La combustión y utilización de recursos fósiles de las rutas petroquímicas probablemente derivan en un mayor impacto a las categorías de materia particulada, radiación ionizante y toxicidad humana, y por este motivo son mayores los impactos en estas rutas convencionales que para la ruta del bio-furfural.

Si se valora únicamente la caracterización de impactos se puede cometer el error de comparar en base a unidades diferentes, es decir, diferentes categorías no son comparables entre sí por las distintas unidades que posee cada categoría. Una comparación en profundidad de los sistemas o las rutas resulta complicada si no es categoría por categoría, pero es difícil ver los sistemas o las rutas como un todo de esta forma.

Por lo tanto, surgido de esta necesidad, y puesto que para poder determinar qué ruta puede ser más aconsejable se debería seguir un criterio, se va a utilizar la ponderación que emplea el método EF 3, el cuál asigna una importancia relativa a cada categoría de impacto ambiental.

4.4.1.2 Sistema 1. Ponderación

Se pasa a ponderar las categorías de impacto ambiental con sus respectivas importancias relativas. De esta forma se va a poder realizar un análisis más profundo y comparable entre el sistema 1 obteniendo el maleico que proviene de bio-furfural y el mismo sistema 1 pero con rutas petroquímicas para la obtención del maleico.

Para poder sacar la ponderación de los datos importados de los artículos científicos anteriormente citados [12], [16], se ha debido sacar la relación entre la caracterización y la ponderación del modelo EF 3. Esta relación es extraíble de la representación gráfica como se hizo en la Figura 6 para relacionar los modelos, pero esta vez con la caracterización y ponderación de un mismo modelo. Se da un ejemplo para la acidificación en la Figura 8.

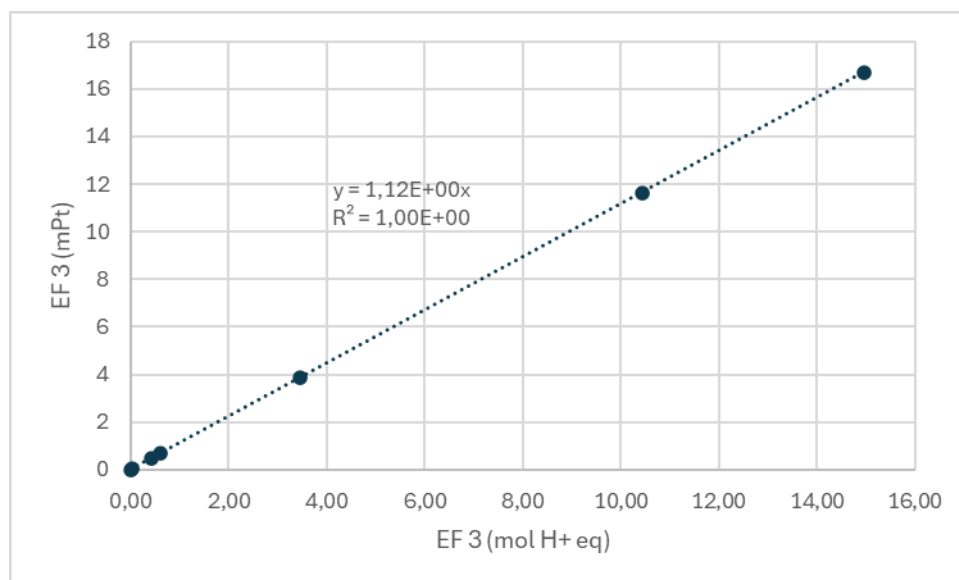


Figura 8. Método EF 3. Relación entre la caracterización y la ponderación. Ejemplo para la Acidificación

De forma análoga que para la Figura 6, se ha sacado la ecuación de la recta $y = m \cdot x + n$, donde $n = 0$. Se puede observar que esta vez la linealidad es completamente directa, demostrado por la $R^2 = 100$, esto se debe a que la ponderación que se le da a cada categoría se extrae directamente de la caracterización de impactos, y se aplica a todas las categorías de impacto ambiental. Los resultados de las relaciones para todas las categorías ambientales se recogen en la Tabla 9.

Tabla 9. Método EF 3. Relación entre la caracterización y la ponderación.

Categoría de impacto ambiental	Caracterización Unidades	Ponderación Unidades	$y = m \cdot x$	R^2
Cambio climático	kg CO2 eq	mPt	$GW_y = 2,6 \cdot 10^{-2} \cdot GW_x$	100
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	mPt	$O_3(ext)_y = 1,18 \cdot 10^3 \cdot O_3(ext)_x$	100
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	mPt	$I_y = 1,19 \cdot 10^{-2} \cdot I_x$	100
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	mPt	$O_3(s)_y = 1,18 \cdot O_3(s)_x$	100
Materia particulada	disease inc.	mPt	$Pm_y = 1,51 \cdot 10^5 \cdot Pm_x$	100
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	mPt	$THnC_y = 8,01 \cdot 10^4 \cdot THnC_x$	100
Acidificación	mol H+ eq	mPt	$Ac_y = 1,12 \cdot Ac_x$	100
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	mPt	$Eu_y = 1,74 \cdot 10^1 \cdot Eu_x$	100
Eutrofización, agua marina	kg N eq	mPt	$Eu_{s,y} = 1,51 \cdot Eu_{s,x}$	100
Uso de suelo	Pt	mPt	$S_y = 9,69 \cdot 10^{-5} \cdot S_x$	100
Uso de agua	m3 depriv.	mPt	$W_y = 7,42 \cdot 10^{-3} \cdot W_x$	100
Combustibles fósiles	MJ	mPt	$F_y = 1,28 \cdot 10^{-3} \cdot F_x$	100
Minerales y metales	kg Sb eq	mPt	$M_y = 1,19 \cdot 10^3 \cdot M_x$	100

Por medio de las relaciones de la Tabla 9 se puede hacer el reflejo de la Tabla 6 pero con la ponderación en vez de con la caracterización, obteniendo así los resultados recogidos en la Tabla 10.

Tabla 10. Sistema 1. Ponderación. Resultados obtenidos por categoría y subsistema.

Categoría de impacto	Unidad	Total	Reactor	Anhídridos	Hidrógeno	Destilación	Agua de reacción	Fábrica
Total	mPt	3,21E+02	2,76E-01	1,85E+02	9,30E+00	8,32E+00	5,35E-02	1,19E+02
Cambio climático	mPt	1,91E+01	1,56E-02	6,97E+00	1,58E+00	3,34E+00	1,29E-03	7,21E+00
Ozone depletion	mPt	2,83E+00	3,99E-05	2,74E+00	4,90E-02	2,16E-02	3,89E-06	1,96E-02
Radiación ionizante	mPt	2,12E+00	1,19E-03	1,07E+00	4,02E-01	6,49E-02	2,10E-04	5,73E-01
Photochemical ozone formation	mPt	4,91E+00	3,93E-03	2,86E+00	3,35E-01	2,46E-01	1,94E-04	1,46E+00
Materia particulada	mPt	1,12E+01	9,03E-03	6,86E+00	4,38E-01	5,61E-01	4,00E-04	3,28E+00
Toxicidad humana, no cancerígena	mPt	3,38E+00	1,80E-03	7,15E-01	5,26E-02	3,57E-02	2,35E-04	2,57E+00
Acidificación	mPt	2,09E+01	2,15E-02	1,59E+01	6,84E-01	4,68E-01	3,08E-04	3,87E+00
Eutrofización, agua dulce	mPt	2,29E+01	5,72E-03	1,70E+01	2,30E-01	2,15E-01	6,22E-04	5,36E+00
Eutrofización, agua marina	mPt	6,22E+01	1,18E-03	6,14E+01	1,20E-01	9,17E-02	8,06E-05	5,67E-01
Uso de suelo	mPt	1,04E+01	2,46E-04	9,91E+00	3,87E-02	1,64E-02	1,95E-05	4,36E-01
Uso de agua	mPt	5,21E+00	1,65E-01	3,91E+00	1,88E-01	1,39E-01	4,80E-02	7,61E-01
Combustibles fósiles	mPt	1,95E+01	9,78E-03	8,37E+00	4,08E+00	2,45E+00	1,09E-03	4,62E+00
Minerales y metales	mPt	1,20E+02	2,38E-02	4,55E+01	1,30E-01	5,33E-02	2,91E-04	7,45E+01

Para la ponderación todas las categorías pasan a tener las mismas unidades por lo que ahora se pueden totalizar por subsistema. En la valoración sobre el total se puede observar que sigue siendo el acondicionamiento de los anhídridos, maleico y acético, lo que relativamente conlleva más impactos ambientales respecto a los demás subsistemas.

Para poder visualizar mejor qué categorías de impacto resultan más relevantes se representa la Figura 9. En dicha figura se aprecian puntos en común con la anterior caracterización entre los subsistemas, como que el subsistema de la fábrica y el de acondicionamiento y obtención de los anhídridos acético y maleico son los que más impacto ambiental conllevan. Se destaca de la fábrica que el consumo de

recursos minerales y metales supone la mayor carga, si bien para las demás categorías deja de ser muy relevante.

Centrándose en el propio proceso, en cuanto al subsistema de los anhídridos se puede apreciar un mayor peso en la categoría de la eutrofización marina, después en consumo de minerales y metales, eutrofización de agua dulce, y acidificación. Como se comentó en la caracterización, las cargas de impacto ambiental en las eutrofizaciones y la acidificación pueden deberse a la parte biológica del proceso (obtención del bio-furfural), mientras que el consumo de minerales y metales al reactor para obtener anhídrido maleico a través de bio-furfural.

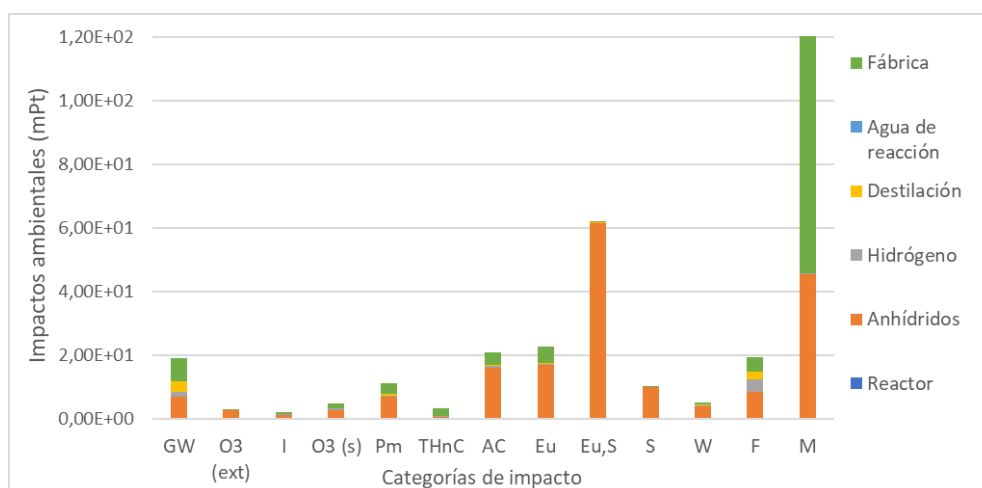


Figura 9. Sistema 1. Ponderación de impactos

También, se puede apreciar que el consumo de recursos fósiles y la categoría del cambio climático son semejantes, teniendo relevancia el subsistema dedicado a la obtención y acondicionamiento del hidrógeno, cuestión muy energéticamente exigente; y también el proceso de la destilación, donde se consume energía para producir el vapor que se necesita para calentar la corriente de alimentación a la columna y el calderín de esta. Por otro lado, la generación de materia particulada y uso de suelo parecen menos representativos, y las otras categorías que faltan por mencionar no son muy relevantes.

De todo este análisis, se reafirma que lo determinante del sistema 1 es la obtención del anhídrido maleico. Por lo tanto, conviene ir hacia lo más concreto y analizar la obtención del anhídrido maleico desde las diferentes rutas. De forma análoga a la Tabla 8 se obtienen los resultados de la Tabla 11 pero para la ponderación.

Se observa en dicha tabla que la obtención de maleico por medio de la ruta de oxidación de benceno es la más ambientalmente impactante y por una gran diferencia: un 48 y un 43% más que la oxidación de n-butano y el caso elegido (bio-maleico desde bio-furfural) respectivamente; por lo tanto, va a quedar excluida del siguiente análisis.

Tabla 11. Sistema 1. Subsistema anhídrido maleico. Caso estudio y base de datos de ecoinvent. Ponderación

Categoría de impacto	Unidad	Sistema 1	Oxidación n-butano	Oxidación benceno
Total	mPt	1,74E+02	1,68E+02	2,49E+02
Cambio climático	mPt	4,54E+00	4,74E+01	8,83E+01
Ozono (capa protectora)	mPt	2,66E+00	8,96E-01	5,02E-02
Radiación ionizante	mPt	1,02E+00	4,79E+00	1,33E+00
Ozono (suelo)	mPt	2,53E+00	6,04E+00	9,81E+00
Materia particulada	mPt	6,25E+00	7,14E+00	1,47E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	mPt	5,94E-01	1,07E+00	8,73E+00
Acidificación	mPt	1,54E+01	1,05E+01	9,87E+00
Eutrofización, agua dulce	mPt	1,67E+01	7,15E+00	9,22E+00
Eutrofización, agua marina	mPt	6,13E+01	2,06E+00	1,06E+01
Uso de suelo	mPt	9,88E+00	7,21E-01	2,61E-01
Uso de agua	mPt	2,62E+00	1,15E+00	8,71E+00
Combustibles fósiles	mPt	6,17E+00	6,71E+01	7,63E+01
Minerales y metales	mPt	4,46E+01	1,22E+01	1,16E+01

En base a estos resultados, actualmente la ruta elegida (bio-furfural que de bio-maleico) resulta un 3,5% más ambientalmente impactante que la ruta de oxidación del n-butano, aunque cabe destacar que la ruta del n-butano es la convencional y que lleva existiendo desde hace más tiempo, lo que quiere decir que tiene mucha trayectoria, pero ya menos expectativas a mejorar. Sin embargo, para la ruta del bio-maleico se siguen realizando estudios y mejoras, además que solo se ha tenido en cuenta un 50% de recuperación energética de la biomasa como escenario de residuos. Asimismo, no se ha tenido aun en cuenta el descuento de impactos ambientales que va a contemplarse en la sección siguiente (4.4.1.3)

Para poder analizar mejor estos resultados se representa la Figura 10, donde solo se van a representar los resultados que por categorías lleguen a un 5% respecto a su total, en mínimo una de las dos rutas que se comparan.

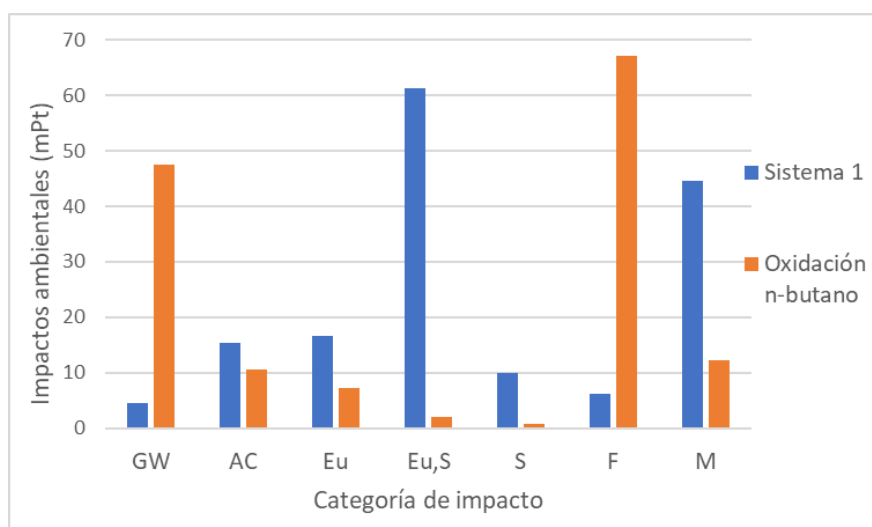


Figura 10. Ponderación del sistema 1. Comparación con maleico de la ruta del n-butano y bio-maleico

Se observa en dicha figura que los impactos ambientales más representativos de cada ruta no son comunes a la otra. Como era de esperar, el consumo de recursos fósiles y el cambio climático es más impactante para la ruta petroquímica. También, como se comentó para la caracterización, el bio-maleico tiene como grandes perjuicios las eutrofizaciones (más en concreto la marina) y el consumo de minerales y metales (probablemente por el catalizador de la reacción del bio-furfural para dar el bio-maleico).

En cuanto a la acidificación, esta resulta parecida en ambos casos y lo más probable es que se deba por un lado al uso de fertilizantes (caso base del sistema 1), y por el otro por el azufre que contiene los combustibles fósiles (caso petroquímico) o los óxidos de nitrógeno que se pueden producir en la combustión de estos. El uso de suelo se debería principalmente a la agricultura.

4.4.1.3 Sistema 1. Efecto de los productos evitados

Se puede realizar la suposición de que producir el coproducto 2,3-butanodiol a través del sistema 1 evitaría que la industria química tenga que producirlo de otra forma. Se va a considerar, por lo tanto, una disminución a la carga de impactos ambientales en función de la cantidad de 2,3-BDO producido. El análisis es el mismo que el del resto del ACV, tanto para la caracterización como la ponderación, pero teniendo en cuenta que el peso del 2,3-BDO debe ser negativo. Los resultados obtenidos serían los recogidos en la Tabla 12.

Tabla 12. Caracterización y ponderación. Sistema 3 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados.

Categoría de impacto ambiental	Caracterización de impactos ambientales				Ponderación de impactos ambientales			
	Unidad	Total bruto	2,3-BDO	Total neto	Unidad	Total bruto	2,3-BDO	Total neto
Cambio climático	kg CO2 eq	7,35E+02	-8,22E+03	-7,49E+03	mPt	1,91E+01	-2,14E+02	-1,95E+02
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,35E-03	1,96E-03	4,31E-03	mPt	2,83E+00	2,31E+00	5,14E+00
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	1,81E+02	-2,11E+01	1,60E+02	mPt	2,12E+00	-2,50E-01	1,87E+00
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	4,19E+00	-3,43E+00	7,55E-01	mPt	4,91E+00	-4,04E+00	8,66E-01
Materia particulada	disease inc.	7,42E-05	-4,43E-05	2,99E-05	mPt	1,12E+01	-6,67E+00	4,48E+00
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	4,19E-05	-1,15E-06	4,08E-05	mPt	3,38E+00	-9,20E-02	3,29E+00
Acidificación	mol H+ eq	1,88E+01	-8,09E+01	-6,21E+01	mPt	2,09E+01	-9,03E+01	-6,94E+01
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	1,31E+00	-4,86E-01	8,26E-01	mPt	2,29E+01	-8,47E+00	1,44E+01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,11E+01	-3,28E+02	-2,87E+02	mPt	6,22E+01	-4,96E+02	-4,34E+02
Uso de suelo	Pt	1,07E+05	-4,09E+03	1,03E+05	mPt	1,04E+01	-3,96E-01	1,00E+01
Uso de agua	m3 depriv.	7,02E+02	-1,17E+03	-4,65E+02	mPt	5,21E+00	-8,66E+00	-3,45E+00
Combustibles fósiles	MJ	1,53E+04	-1,38E+04	1,44E+03	mPt	1,95E+01	-1,77E+01	1,85E+00
Minerales y metales	kg Sb eq	1,01E-01	6,07E-02	1,62E-01	mPt	1,20E+02	7,20E+01	1,92E+02
Total	-	-	-	-	mPt	3,21E+02	-7,73E+02	-4,51E+02

Hay dos valores positivos para el coproducto, corresponden al ozono a nivel estratosférico y el de consumo de recursos minerales, esto se debe a que en el propio artículo mencionado restaban impactos ambientales porque se trataban los residuos recuperando energía eléctrica, entre otros, y esa valoración quedaba negativa.

Lo más destacable de los resultados es que el total de la ponderación resulta negativo (-451 mPt), esto indica que el sistema 1 es un proceso relativamente más beneficioso para el medio ambiente que el proceso del artículo científico mencionado anteriormente[16]. Se pasa a representar los resultados de la caracterización en la Figura 11.

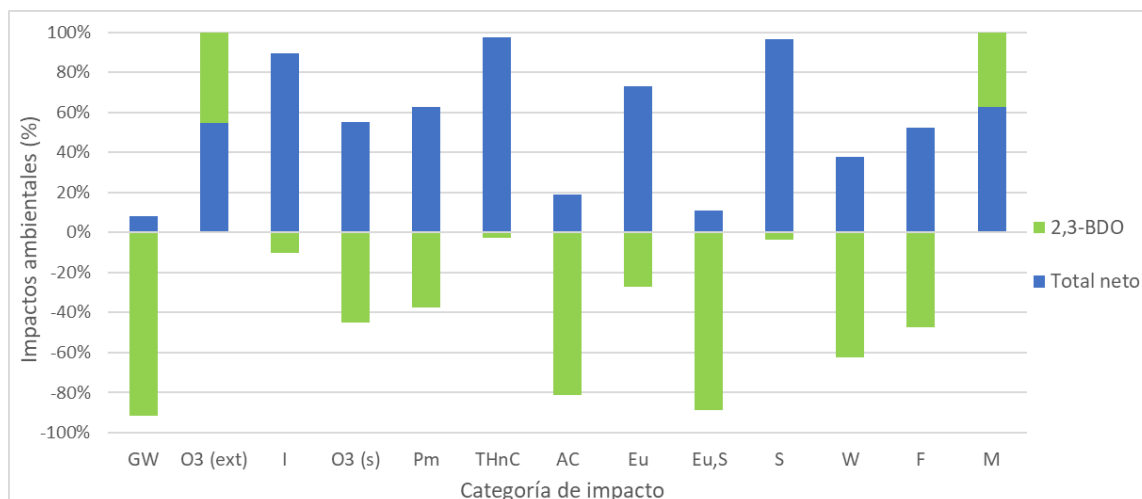


Figura 11. Sistema 1. Caracterización sobre el 100% de cada categoría con descuento de carga de impactos ambientales

Se puede observar que hay categorías que restan mucho por categoría respecto al sistema original (cambio climático, acidificación, eutrofización marina), categorías que empeoran bastante (radiación ionizante, toxicidad humana no cancerígena, uso de suelo) u otras categorías que se quedarán más o menos neutrales (ozono a nivel de suelo, consumo de recursos fósiles).

Se pasa a analizar la ponderación de impactos ambientales en la Figura 12, donde se han escogido las primeras cinco categorías de impacto ambiental que presentan los mayores valores absolutos.

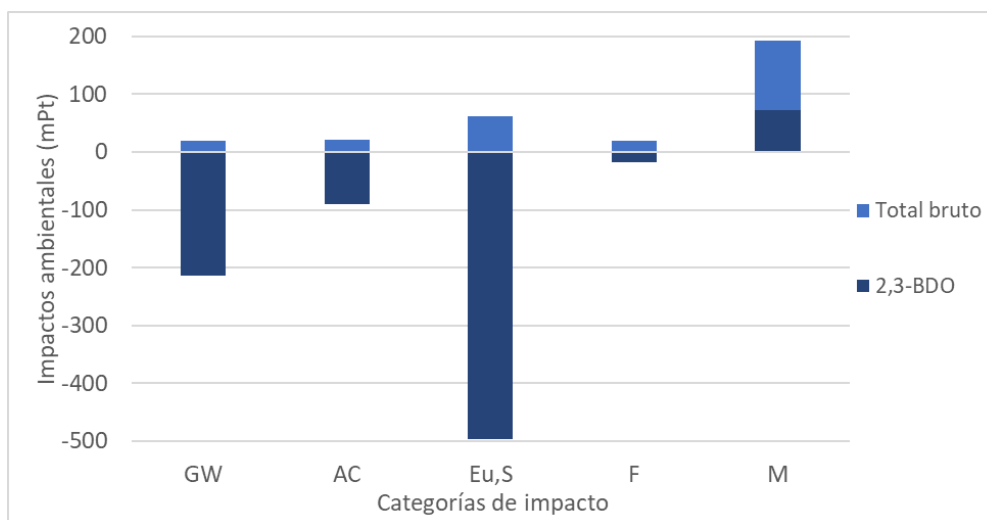


Figura 12. Sistema 1. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales

Se puede observar que producir el anhídrido succínico por medio del sistema 1 evitaría los mayores impactos asociados a la producción del 2,3-butanodiol según la ruta del artículo mencionado[16], sin embargo, el consumo de recursos minerales y de metales empeoraría, pero es un impacto ambiental muy opacado por la mejoría que se da sobre todo en la eutrofización marina, seguida del cambio climático y la acidificación.

4.4.1.4 Sistema 1. Interpretación de resultados. Mejoras

Los impactos ambientales más representativos del sistema 1 corresponden a los subsistemas de la propia fábrica química y al de obtención y acondicionamiento de los anhídridos acético y maleico. Se ha desarrollado en particular este último subsistema para identificar que es la obtención del anhídrido maleico en concreto lo que tiene mayor carga de impacto ambiental.

Se puede seguir cualquiera de las rutas sugeridas en esta sección (4.4.1.) para obtener anhídrido maleico que después se utilice para conseguir anhídrido y ácido succínico. Sin embargo, las ventajas de las rutas biológicas pueden compensar los inconvenientes de las petroquímicas. Esto principalmente se debe a que los procesos biológicos aún tienen muchas expectativas a mejorar, mientras que los petroquímicos han tenido mucha evolución histórica y pueden estar llegando a su asíntota.

Por un lado, se ha observado que de las rutas petroquímicas se espera principalmente un mayor consumo de recursos fósiles y mayor impacto al cambio climático, categorías de impacto ambiental que están bastante ligadas. Estas categorías son perjudiciales porque los recursos fósiles son por definición no renovables; junto con el cambio climático resultan ser categorías muy dañinas por las consecuencias ambientales comentadas en la introducción de este trabajo.

Por otro lado, la ruta biológica tiene como mayores cargas las categorías de eutrofización de las aguas (marina y dulce) y el consumo de recursos minerales y de metales. La eutrofización es provocada por un elevado contenido de nutrientes (fósforo y nitrógeno) en el agua que vuelve de los cultivos a los ríos. Este elevado aumento de nutrientes deriva en una proliferación de microorganismos y pérdida de diversidad. Suele derivar en un agotamiento del oxígeno contenido en el agua y por ello lleva a la anoxia a los ecosistemas acuáticos afectados. Los fertilizantes generalmente contienen también compuestos con azufre, el cual junto al nitrógeno puede derivar en la acidificación.

Asimismo, los resultados iniciales de la ponderación indican que de forma general el sistema 1 planteado solo representa un 3,5% más de impacto ambiental que la mejor ruta petroquímica estudiada (sección 4.4.1.2). Esto ha sido teniendo en cuenta limitaciones técnicas, como que solo se aprovechaba energéticamente un 50% de la biomasa; o límites del sistema, como no contener más escenarios de residuos (en concreto, para las cenizas de la biomasa).

Si además se tiene en cuenta la ponderación tras el efecto de producir el coproducto (sección 4.4.1.3) se puede asumir que las rutas petroquímicas analizadas son peores para el cómputo global de los impactos ambientales que la que posee maleico de origen biomásico, aunque las petroquímicas puedan ser mejores en alguna categoría en particular, como para el consumo de minerales y metales.

Las mejoras que deberían priorizarse para el sistema 1 sería:

- Aprovechar una mayor cantidad de los residuos de la biomasa (solo se ha valorado el aprovechamiento energético del 50%).

- Sustitución del catalizador para la reacción que da anhídrido maleico a partir de bio-furfural para que no sea de paladio sino otro metal menos impactante (disminución de consumo de minerales y metales).
- Nuevas tecnologías en agricultura o aprobación de más organismos genéticamente modificados (OMG): disminución de fertilizantes y fitosanitarios (menos impacto en las eutrofizaciones, uso de suelo, acidificación...).
- Aprovechar las cenizas de la valorización energética de la biomasa como fertilizante o como materia prima para otros procesos (escenarios de residuos que disminuyan impactos ambientales).

Además de lo mencionado, en un estudio posterior deberían compartimentarse aún más los subsistemas analizados para identificar más puntos críticos del proceso.

4.4.2 Estudio comparativo.

En esta sección se van a analizar los resultados obtenidos del sistema 1 en contraposición a los sistemas 2, 3 y 4. El estudio comparativo va a tener una estructura análoga al estudio autocomparativo, pero aplicándola a todos los sistemas, aunque se va a añadir un apartado que trate sobre los escenarios de residuos que aplican a los sistemas 3 y 4, puesto que para el sistema 1 no se contemplaba.

4.4.2.1 Sistemas 3 y 4. Escenario de residuos

Para el sistema 3 y 4 se ha tenido en cuenta el tratamiento de las aguas que se utilizan porque la cantidad empleada de esta por masa de ácido succínico producido resulta relativamente grande en comparación a los otros dos sistemas, además de que puede mejorar los resultados suponer que se trata. Por un lado, se obtuvo la Figura 13 tratando los datos del sistema 3 (ver Tabla 13).

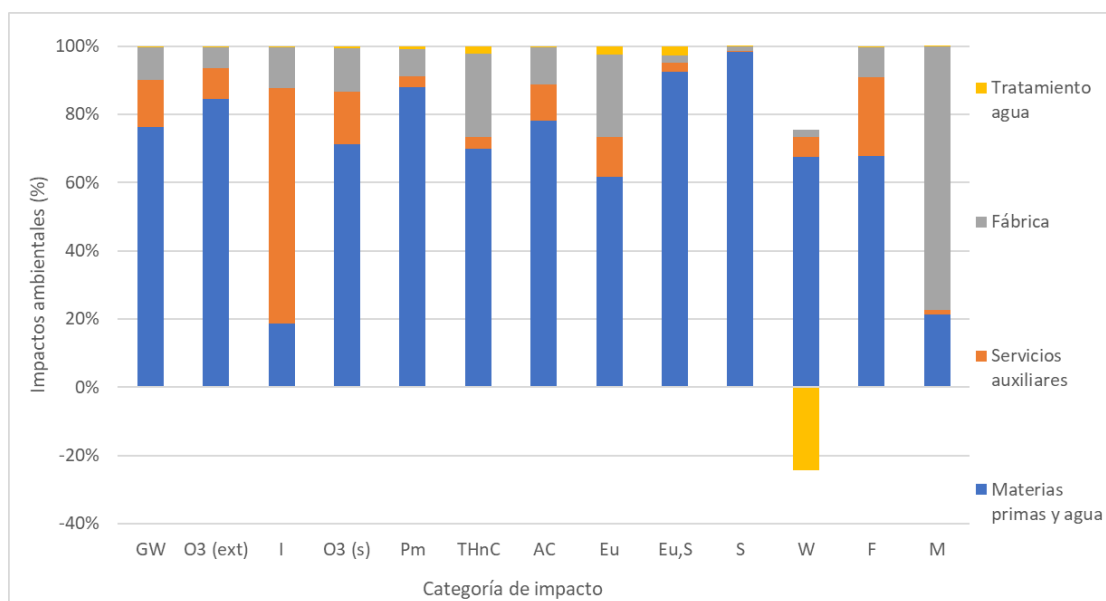


Figura 13. Sistema 3, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización de impactos

Se observa que los impactos asociados al uso del agua se reducen bastante (porque sería agua que se reciclaría), y, sin embargo, no añade el tratamiento mucho valor relativo a los otros impactos. Se dispone a continuación la Tabla 13 para valorar cuantitativamente el cambio de tratar o no el agua

Tabla 13. Sistema 3, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización y ponderación de impactos

Categoría de impacto	Caracterización de impactos ambientales				Ponderación de impactos ambientales			
	Unidad	Total bruto	Tratamiento agua	Total neto	Unidad	Total bruto	Tratamiento agua	Total neto
Cambio climático	kg CO2 eq	2,90E+03	1,39E+01	2,92E+03	mPt	7,55E+01	3,62E-01	7,58E+01
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,73E-04	1,05E-06	2,74E-04	mPt	3,21E-01	1,23E-03	3,22E-01
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	4,09E+02	1,85E+00	4,10E+02	mPt	4,85E+00	2,20E-02	4,87E+00
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	9,69E+00	6,43E-02	9,76E+00	mPt	1,14E+01	7,57E-02	1,15E+01
Materia particulada	disease inc.	2,70E-04	2,53E-06	2,73E-04	mPt	4,07E+01	3,81E-01	4,11E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	1,28E-04	2,78E-06	1,31E-04	mPt	1,03E+01	2,23E-01	1,05E+01
Acidificación	mol H+ eq	3,20E+01	1,56E-01	3,21E+01	mPt	3,57E+01	1,74E-01	3,58E+01
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	1,23E+00	3,14E-02	1,27E+00	mPt	2,15E+01	5,46E-01	2,20E+01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	1,93E+01	5,76E-01	1,98E+01	mPt	2,92E+01	8,72E-01	3,00E+01
Uso de suelo	Pt	3,36E+05	2,06E+02	3,37E+05	mPt	3,26E+01	1,99E-02	3,26E+01
Uso de agua	m3 depriv.	3,35E+03	-1,08E+03	2,26E+03	mPt	2,48E+01	-8,02E+00	1,68E+01
Combustibles fósiles	MJ	4,04E+04	1,56E+02	4,05E+04	mPt	5,17E+01	1,99E-01	5,19E+01
Minerales y metales	kg Sb eq	8,12E-02	1,80E-04	8,14E-02	mPt	9,64E+01	2,13E-01	9,66E+01
Total	-	-	-	-	mPt	4,35E+02	-4,93E+00	4,30E+02

Se observa que el total neto disminuye por tratar el agua, aunque no lo hace de forma significativa (aproximadamente 1%), esto se debe al peso que se le da al uso del agua en la ponderación, puesto que por lo que se concluyó con las relaciones de la Tabla 9, por metro cúbico de agua solo se pondera $1 \text{ m}^3 \text{depriv.} = 7,42 \mu\text{Pt}$. De igual manera se realiza para el sistema 4, obteniéndose la Figura 14.

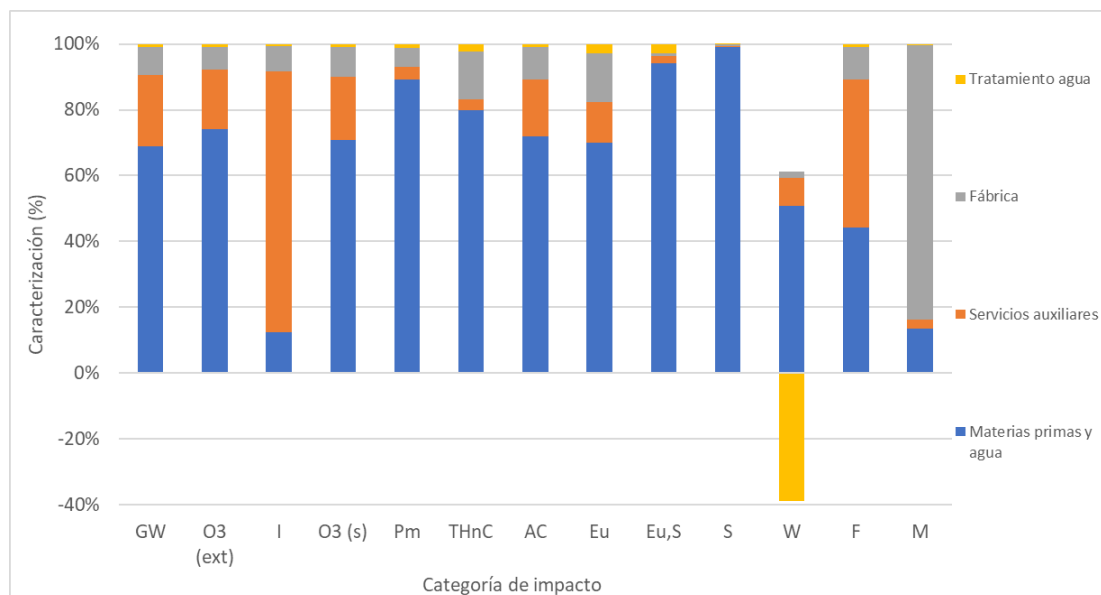


Figura 14. Sistema 4, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización de impactos

En este caso como el sistema 4 utilizaba más agua, su tratamiento resulta más favorecedor. En principio, acorde a la caracterización parece útil realizar el tratamiento, pero debe contemplarse la ponderación. Los resultados del sistema 4 teniendo en cuenta el tratamiento del agua se recogen en la Tabla 14.

Tabla 14. Sistema 4, escenario de residuos (tratamiento del agua). Caracterización y ponderación de impactos

Categoría de impacto	Caracterización de impactos ambientales				Ponderación de impactos ambientales			
	Unidad	Total bruto	Tratamiento agua	Total neto	Unidad	Total bruto	Tratamiento agua	Total neto
Cambio climático	kg CO2 eq	3,22E+03	2,74E+01	3,25E+03	mPt	8,39E+01	7,13E-01	8,46E+01
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,40E-04	2,06E-06	2,42E-04	mPt	2,82E-01	2,42E-03	2,84E-01
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	6,27E+02	3,64E+00	6,30E+02	mPt	7,44E+00	4,33E-02	7,48E+00
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	1,36E+01	1,27E-01	1,37E+01	mPt	1,60E+01	1,49E-01	1,61E+01
Materia particulada	disease inc.	3,83E-04	4,99E-06	3,88E-04	mPt	5,76E+01	7,51E-01	5,84E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	2,19E-04	5,47E-06	2,25E-04	mPt	1,76E+01	4,38E-01	1,80E+01
Acidificación	mol H+ eq	3,45E+01	3,08E-01	3,48E+01	mPt	3,85E+01	3,43E-01	3,88E+01
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	2,03E+00	6,17E-02	2,09E+00	mPt	3,53E+01	1,08E+00	3,64E+01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,03E+01	1,13E+00	4,14E+01	mPt	6,10E+01	1,72E+00	6,27E+01
Uso de suelo	Pt	7,24E+05	4,05E+02	7,24E+05	mPt	7,01E+01	3,92E-02	7,01E+01
Uso de agua	m3 depriv.	3,35E+03	-2,13E+03	1,23E+03	mPt	2,49E+01	-1,58E+01	9,09E+00
Combustibles fósiles	MJ	3,61E+04	3,07E+02	3,64E+04	mPt	4,62E+01	3,93E-01	4,66E+01
Minerales y metales	kg Sb eq	7,50E-02	3,54E-04	7,53E-02	mPt	8,89E+01	4,19E-01	8,93E+01
Total	-	-	-	-	mPt	5,48E+02	-9,70E+00	5,38E+02

Esta vez el resultado casi se acerca al 2% de reducción de impactos ambientales, pero sigue siendo un cambio pequeño. Se puede interpretar por los resultados de la ponderación que el tratamiento de las aguas residuales en los sistemas en general es útil, aunque el cambio relativo sea pequeño y podría haberse despreciado.

4.4.2.2 Sistema 1, 2, 3 y 4. Caracterización

De forma análoga al sistema 1, y a través del inventario de los demás sistemas, se obtiene el resumen de resultados de la caracterización y se reúne en la Tabla 15.

Tabla 15. Todos los sistemas. Caracterización de impactos ambientales

Categoría de impacto ambiental	Unidad	Sistema 1	Sistema 2	Sistema 3	Sistema 4
Cambio climático	kg CO2 eq	7,35E+02	3,67E+03	2,92E+03	3,25E+03
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,35E-03	1,24E-03	2,74E-04	2,42E-04
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	1,81E+02	5,76E+02	4,10E+02	6,30E+02
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	4,19E+00	1,45E+01	9,76E+00	1,37E+01
Materia particulada	disease inc.	7,42E-05	1,73E-04	2,73E-04	3,88E-04
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	4,19E-05	5,85E-05	1,31E-04	2,25E-04
Acidificación	mol H+ eq	1,88E+01	4,31E+01	3,21E+01	3,48E+01
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	1,31E+00	9,71E-01	1,27E+00	2,09E+00
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,11E+01	3,38E+00	1,98E+01	4,14E+01
Uso de suelo	Pt	1,07E+05	1,74E+04	3,37E+05	7,24E+05
Uso de agua	m3 depriv.	7,02E+02	7,71E+02	2,26E+03	1,23E+03
Combustibles fósiles	MJ	1,53E+04	1,08E+05	4,05E+04	3,64E+04
Minerales y metales	kg Sb eq	1,01E-01	8,23E-02	8,14E-02	7,53E-02

Para comenzar el análisis comparativo de estos resultados se va a emplear la Figura 15, donde se representan los datos de los sistemas en columnas apiladas que contienen el porcentaje sobre el total del conjunto de los sistemas por cada categoría de impacto.

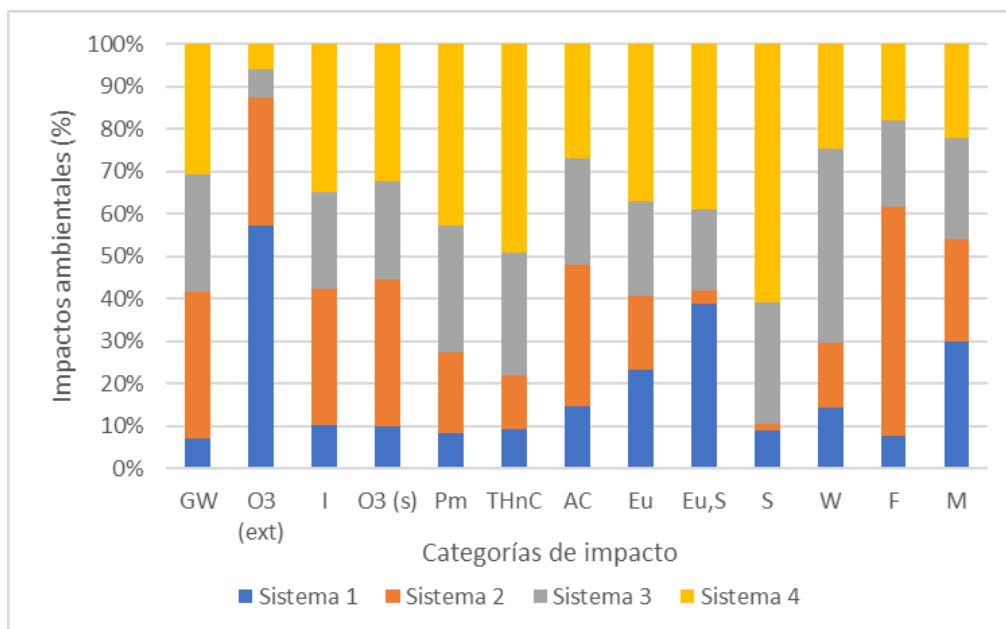


Figura 15. Todos los sistemas. Caracterización de impactos

Se puede observar que en general el sistema 1 resulta peor en las categorías de agotamiento de la capa de ozono estratosférico, se queda a la par que el sistema 4 para la eutrofización marina, y es ligeramente

peor en el consumo de recursos minerales y de metales a los otros sistemas. Precisamente estos impactos son de las categorías más críticas analizadas en el estudio autocomparativo, salvo por el ozono, el cual se desestimó al llegar a la ponderación por ser un impacto menor.

El sistema 2, en cambio, destaca para peor en las categorías del cambio climático y acidificación. También genera una cantidad mayor de impacto ambiental que los demás sistemas para las categorías de formación de ozono a nivel de suelo y acidificación.

Los sistemas 3 y 4 aunque deberían ser muy parecidos porque sus entradas lo son, como se comentó en el inventario, la cantidad de estas materias primas son diferentes, además de que en el sistema 3 se emplea amoniaco y ácido sulfúrico. Sin embargo, los resultados parecen favorecer en general al sistema 3. Esto puede deberse a que el sistema 4 viene a ser un sistema experimental, aun en innovación.

En concreto, el sistema 3 es mejor que el sistema 4 en todas las categorías salvo para el uso de agua, el consumo de combustibles fósiles y de recursos minerales y de metales. Asimismo, el sistema 3 solo encabeza entre todas las categorías la del consumo de combustibles fósiles, teniendo una puntuación intermedia normalmente en casi todo los demás impactos.

De nuevo como para el estudio autocomparativo, para poder comprobar realmente la importancia relativa de cada impacto y evaluar los sistemas es necesario pasar a través de la ponderación.

4.4.2.3 Sistema 1, 2, 3 y 4. Ponderación

De la ponderación de impactos ambientales en los cuatro sistemas se obtienen los resultados recogidos en la Tabla 16.

Tabla 16. Todos los sistemas. Ponderación de impactos ambientales

Categoría de impacto ambiental	Unidad	Sistema 1	Sistema 2	Sistema 3	Sistema 4
Total	mPt	3,21E+02	4,65E+02	4,30E+02	5,38E+02
Cambio climático	mPt	1,91E+01	9,53E+01	7,58E+01	8,46E+01
Ozono (capa protectora)	mPt	2,83E+00	1,46E+00	3,22E-01	2,84E-01
Radiación ionizante	mPt	2,12E+00	6,84E+00	4,87E+00	7,48E+00
Ozono (suelo)	mPt	4,91E+00	1,71E+01	1,15E+01	1,61E+01
Materia particulada	mPt	1,12E+01	2,60E+01	4,11E+01	5,84E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	mPt	3,38E+00	4,69E+00	1,05E+01	1,80E+01
Acidificación	mPt	2,09E+01	4,81E+01	3,58E+01	3,88E+01
Eutrofización, agua dulce	mPt	2,29E+01	1,69E+01	2,20E+01	3,64E+01
Eutrofización, agua marina	mPt	6,22E+01	5,12E+00	3,00E+01	6,27E+01
Uso de suelo	mPt	1,04E+01	1,68E+00	3,26E+01	7,01E+01
Uso de agua	mPt	5,21E+00	5,68E+00	1,68E+01	9,09E+00
Combustibles fósiles	mPt	1,95E+01	1,38E+02	5,19E+01	4,66E+01
Minerales y metales	mPt	1,20E+02	9,77E+01	9,66E+01	8,93E+01

Se puede observar que el sistema 1 es un 45, 34 y 67 % menos impactante que los sistemas 2, 3 y 4 respectivamente. Se pueden excluir del posterior análisis las categorías de formación y agotamiento del

ozono, la radiación ionizante, la toxicidad humana cancerígena y el uso de agua, por no llegar en ninguno de los sistemas al 5% de carga de impacto ambiental. El caso del uso de agua es particular porque si no se hubiese contemplado el tratamiento de esta sí que generaría un impacto superior al 5% para el sistema 3, con un 5,7%; le seguiría el sistema 4 con un 4,5%. Se tratan los datos para representar la Figura 16.

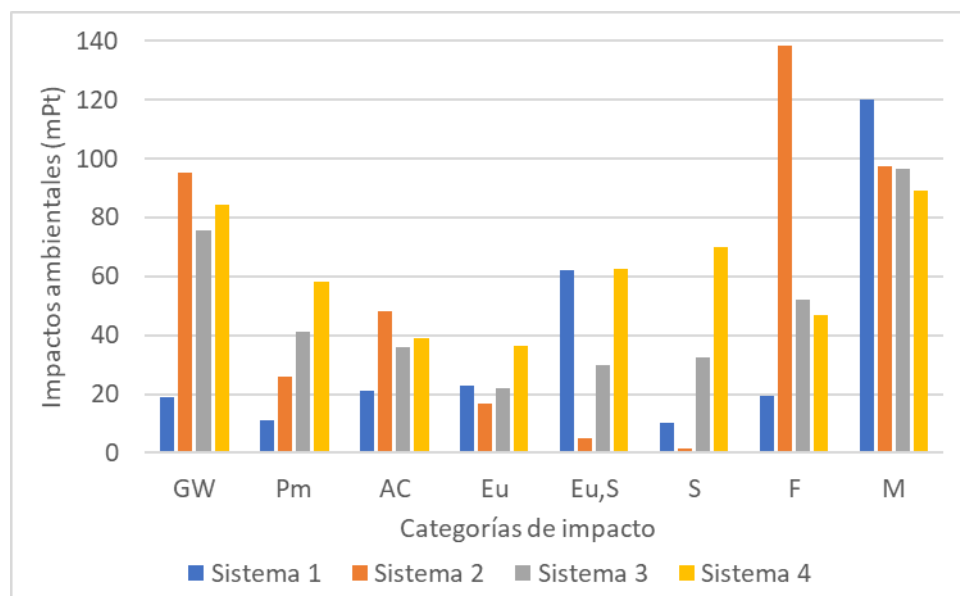


Figura 16. Todos los sistemas. Ponderación de impactos ambientales

Se observa que el sistema 1 es el que presenta generalmente más fortalezas con la ponderación, salvo en la categoría de consumo de recursos minerales y metales, y tiene relativamente un alto impacto también en la eutrofización marina (siendo casi igual al sistema 4). Sin embargo, en su conjunto, como previamente se ha mencionado, resulta ser el sistema que menos impactos genera.

Si se siguiese con un análisis más profundo de la Figura 16 se llegarían a las mismas interpretaciones ya comentadas para la Figura 15, por lo que se evita repetir las, con la salvedad de que en la Figura 16 no se han representado los datos menos importantes en el conjunto.

El estudio comparativo debe seguir con la aplicación de descuentos ambientales, análogo a cómo se hizo para el sistema 1 en la sección 4.4.1.3.

4.4.2.4 Sistema 3. Efecto de los productos evitados

El sistema 3 proporciona sulfato de amonio de coproducto. De la misma forma que se hizo para el sistema 1 y el 2,3-BDO, se puede realizar la suposición de que producir el sulfato de amonio a través del sistema 3 evitaría que la industria química tenga que producirlo de otra forma. Se va a considerar, por lo tanto, una disminución a la carga de impactos ambientales en función de la cantidad de sulfato de amonio producido. Los resultados obtenidos serían los recogidos en la Tabla 17.

Tabla 17. Caracterización y ponderación. Sistema 3 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados

Categoría de impacto	Caracterización de impactos ambientales				Ponderación de impactos ambientales			
	Unidad	Total bruto	Sulfato de amonio	Total neto	Unidad	Total bruto	Sulfato de amonio	Total neto
Cambio climático	kg CO2 eq	2,92E+03	-1,08E+03	1,83E+03	mPt	7,58E+01	-2,82E+01	4,76E+01
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,74E-04	-1,22E-04	1,52E-04	mPt	3,22E-01	-1,43E-01	1,78E-01
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	4,10E+02	-4,02E+01	3,70E+02	mPt	4,87E+00	-4,78E-01	4,40E+00
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	9,76E+00	-2,44E+00	7,31E+00	mPt	1,15E+01	-2,88E+00	8,61E+00
Materia particulada	disease inc.	2,73E-04	-5,29E-05	2,20E-04	mPt	4,11E+01	-7,96E+00	3,31E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	1,31E-04	-6,07E-05	7,03E-05	mPt	1,05E+01	-4,86E+00	5,63E+00
Acidificación	mol H+ eq	3,21E+01	-1,07E+01	2,14E+01	mPt	3,58E+01	-1,20E+01	2,39E+01
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	1,27E+00	-3,28E-01	9,38E-01	mPt	2,20E+01	-5,71E+00	1,63E+01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	1,98E+01	-5,73E-01	1,93E+01	mPt	3,00E+01	-8,68E-01	2,92E+01
Uso de suelo	Pt	3,37E+05	-2,81E+03	3,34E+05	mPt	3,26E+01	-2,73E-01	3,23E+01
Uso de agua	m3 depriv.	2,26E+03	-5,82E+02	1,68E+03	mPt	1,68E+01	-4,32E+00	1,25E+01
Combustibles fósiles	MJ	4,05E+04	-1,65E+04	2,40E+04	mPt	5,19E+01	-2,11E+01	3,07E+01
Minerales y metales	kg Sb eq	8,14E-02	-2,60E-02	5,54E-02	mPt	9,66E+01	-1,27E+02	-3,09E+01
Total	-	-	-	-	mPt	4,30E+02	-2,16E+02	2,14E+02

Se puede observar que se reducen en un 50 % los impactos asociados si se tiene en cuenta el sulfato de amonio como coproducto. Asimismo, cuantitativamente la reducción más importante se da en el consumo de recursos minerales y metales, y de hecho vuelve ese impacto negativo en el balance neto. Además, originalmente era la categoría más perjudicada de todo el sistema, puesto que tenía la mayor carga de impacto ambiental previo al descuento, por lo que este enfoque favorece mucho al sistema.

Para seguir analizando los resultados de la caracterización se representa la Figura 17.

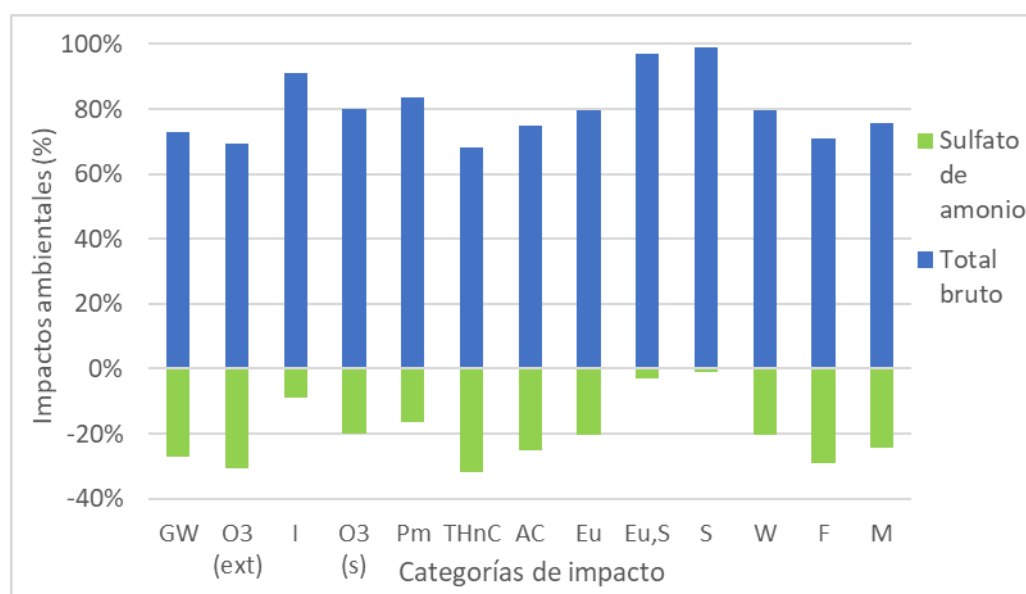


Figura 17. Sistema 3. Caracterización sobre el 100% de cada categoría con descuento de carga de impactos ambientales

Se puede observar que el efecto de del producto evitado es aproximadamente entre un 20 y un 30% de forma habitual para cada categoría, siendo muy inferior para la radiación, la eutrofización marina o el uso de suelo, y muy superior para el consumo de recursos minerales y de metales, como ya se ha comentado. Estos descuentos son en general mucho menores a los vistos para el sistema 1.

Se pasa a analizar la ponderación de impactos ambientales en la Figura 18, donde se han escogido las primeras cinco categorías de impacto ambiental que presentan los mayores valores absolutos.

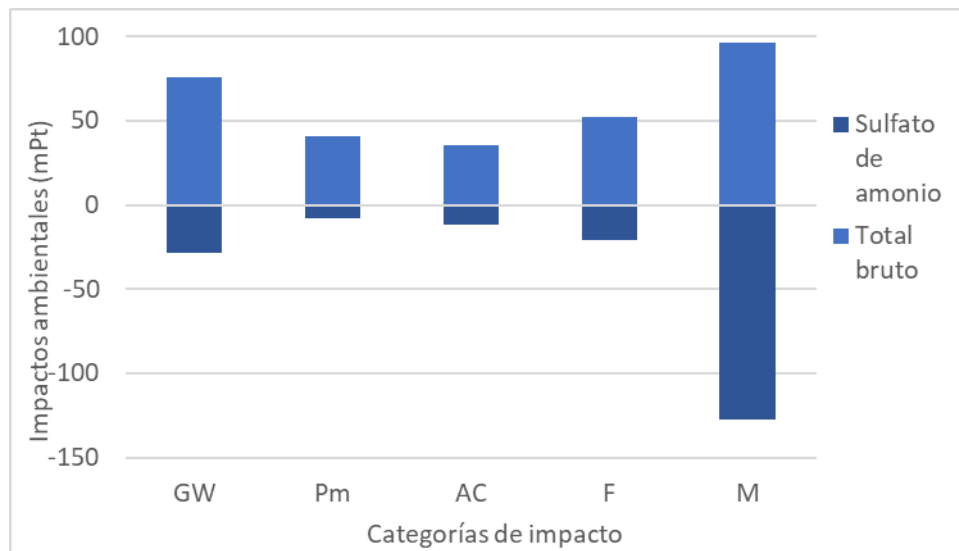


Figura 18. Sistema 3. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales

Los mayores descuentos se aplican en el cambio climático, la formación de partículas, la acidificación, y el consumo de recursos fósiles y de minerales y metales. Por lo tanto, este sistema al proporcionar sulfato de amonio asegura un menor impacto ambiental, sobre todo en origen por la menor extracción de los recursos para materias primas, además de un menor consumo de energía, con menores impactos asociados de partículas y acidificación.

4.4.2.5 Sistema 4. Efecto de los productos evitados.

De forma análoga a los sistemas 1 y 3, se dispone también de un coproducto en el sistema 4 con el que se puede descontar la carga de impacto ambiental, se obtiene bio-etanol. El resumen de estos resultados se recoge en la Tabla 18.

Tabla 18. Caracterización y ponderación. Sistema 4 antes y después de aplicar el efecto de los productos evitados

Categoría de impacto	Caracterización de impactos ambientales				Ponderación de impactos ambientales			
	Unidad	Total bruto	Etanol	Total neto	Unidad	Total bruto	Etanol	Total neto
Cambio climático	kg CO2 eq	3,25E+03	-2,30E+03	9,49E+02	mPt	8,46E+01	-5,99E+01	2,47E+01
Ozono (capa protectora)	kg CFC11 eq	2,42E-04	-2,26E-04	1,55E-05	mPt	2,84E-01	-2,66E-01	1,82E-02
Radiación ionizante	kBq U-235 eq	6,30E+02	-1,17E+02	5,13E+02	mPt	7,48E+00	-1,39E+00	6,09E+00
Ozono (suelo)	kg NMVOC eq	1,37E+01	-7,04E+00	6,67E+00	mPt	1,61E+01	-8,29E+00	7,85E+00
Materia particulada	disease inc.	3,88E-04	-1,71E-04	2,17E-04	mPt	5,84E+01	-2,58E+01	3,26E+01
Toxicidad humana, no cancerígena	CTUh	2,25E-04	-7,29E-05	1,52E-04	mPt	1,80E+01	-5,84E+00	1,21E+01
Acidificación	mol H+ eq	3,48E+01	-2,65E+01	8,28E+00	mPt	3,88E+01	-2,96E+01	9,24E+00
Eutrofización, agua dulce	kg P eq	2,09E+00	-1,23E+00	8,59E-01	mPt	3,64E+01	-2,14E+01	1,50E+01
Eutrofización, agua marina	kg N eq	4,14E+01	-1,51E+01	2,63E+01	mPt	6,27E+01	-2,29E+01	3,99E+01
Uso de suelo	Pt	7,24E+05	-2,11E+05	5,13E+05	mPt	7,01E+01	-2,04E+01	4,97E+01
Uso de agua	m3 depriv.	1,23E+03	-4,98E+03	-3,76E+03	mPt	9,09E+00	-3,70E+01	-2,79E+01
Combustibles fósiles	MJ	3,64E+04	-2,69E+04	9,55E+03	mPt	4,66E+01	-3,44E+01	1,22E+01
Minerales y metales	kg Sb eq	7,53E-02	-9,49E-03	6,58E-02	mPt	8,93E+01	-1,13E+01	7,81E+01
Total	-	-	-	-	mPt	5,38E+02	-2,78E+02	2,60E+02

Si se aplica el descuento de impactos ambientales a este sistema se obtiene una reducción de los impactos de un 48%. Se tratan los datos de la caracterización para representar la Figura 19.

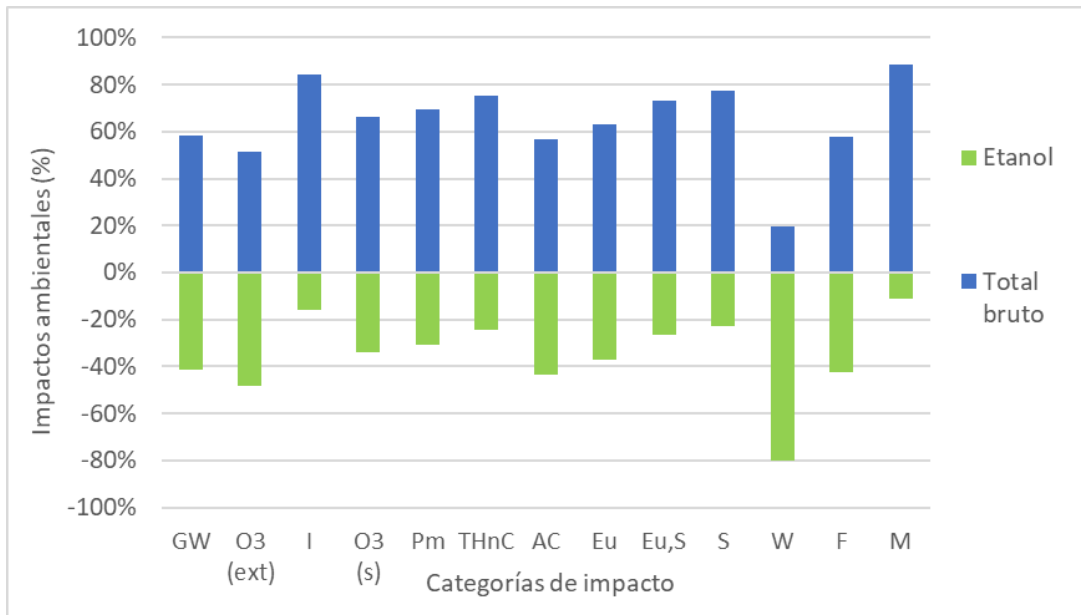


Figura 19. Sistema 4. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales

Se observa que se obtienen un efecto de entre el 20 y 40 % en la mayoría de las categorías. Esta vez los descuentos de cargas están muchos más repartidos también de cara a la ponderación, por lo que no se puede discriminar tanto entre las categorías de impacto y deben seguir representándose hasta ocho categorías ambientales. Se representan los datos de ponderación en la Figura 20.

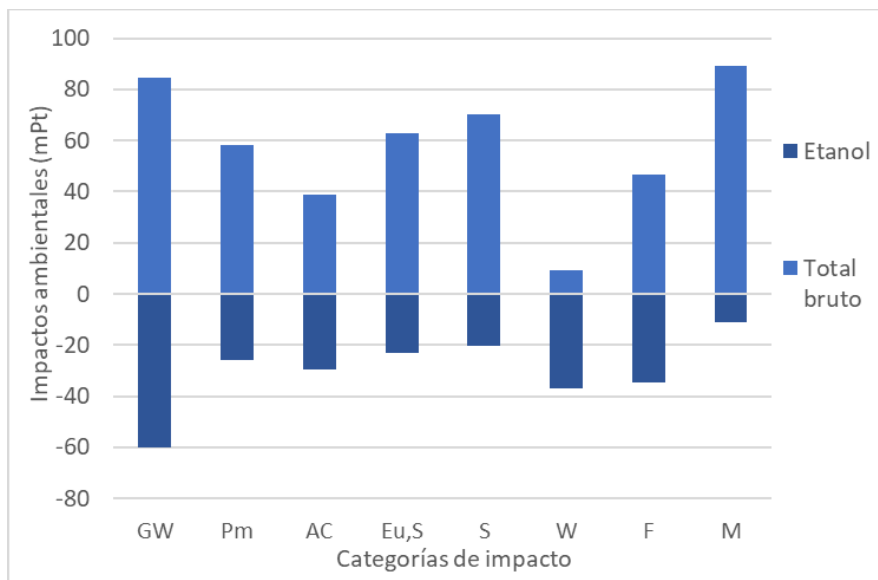


Figura 20. Sistema 4. Ponderación con descuento de carga de impactos ambientales

Salvo para el uso del agua, todos los demás efectos del coproducto evitado se quedan por debajo de compensar el valor bruto de cada categoría. Lo más enriquecedor habría sido que se redujese más la categoría de consumo de recursos minerales y de metales, seguido del uso de suelo y eutrofización marina, porque su valor neto acaba siendo el superior entre las categorías.

4.4.2.6 Sistemas 1, 3 y 4. Comparación después de aplicar descuentos de impactos.

Se van a comparar los resultados de aplicar la metodología de los descuentos de carga ambiental a los sistemas 1, 3 y 4. Los resultados representados para la caracterización en la Figura 21 son los valores totales neto que se recogen en las Tablas 12, Tabla 17 y Tabla 18.

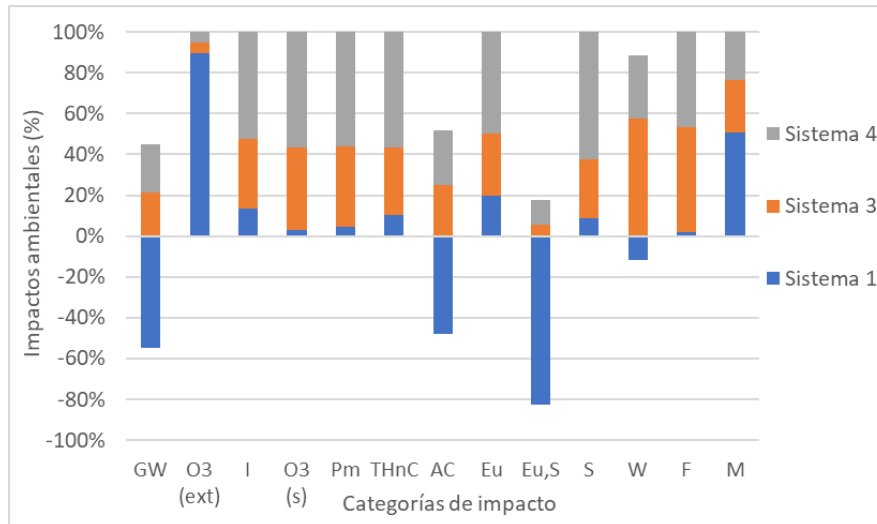


Figura 21. Caracterización sistemas 1, 3 y 4. Aplicación de descuentos de carga ambiental

Se observa que el sistema 1 solo pierde frente a los sistemas 3 y 4 en las categorías de agotamiento de la capa de ozono estratosférico, y consumo de recursos minerales y de metales. Se representan los datos obtenidos de la ponderación en la Figura 22, donde solo se recogen los impactos de las cinco categorías de impacto ambiental más representativas por tener los mayores valores absolutos.

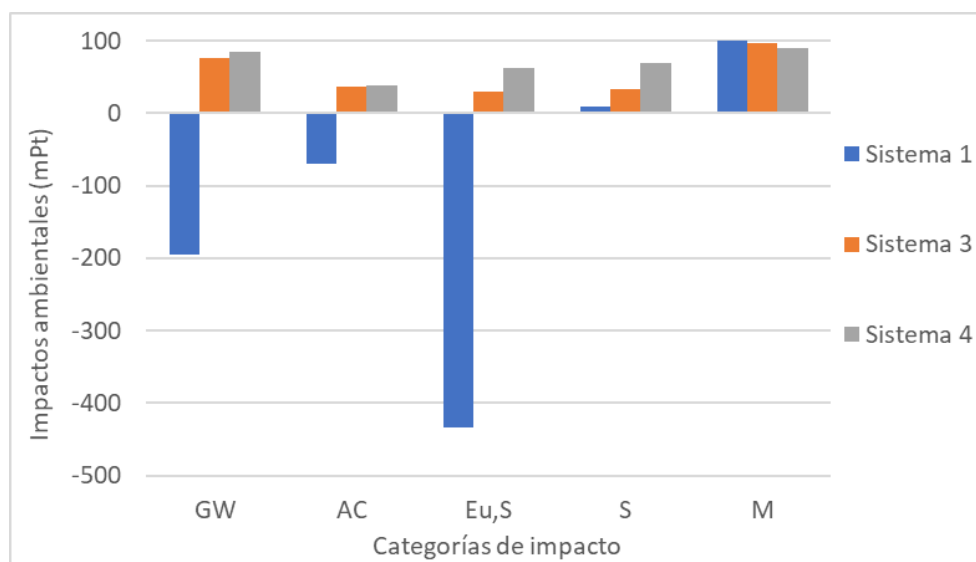


Figura 22. Ponderación sistemas 1, 3 y 4. Aplicación de descuentos de carga ambiental

Se puede observar que no solo el sistema 1 se encuentra en ventaja en el cómputo global de las categorías, sino que en la única categoría donde es peor (consumo de recursos minerales y de metales),

lo es por poco. Los sistemas 3 y 4 no adquieren un valor total neto negativo mientras que el sistema 1 sí. El sistema 1 es por tanto el sistema que más puede favorecer al medio ambiente acorde a estos resultados, sustituyendo la forma de fabricar su coproducto, el 2,3-butanodiol.

4.4.3 Sistemas 1, 2, 3 y 4. Interpretación de los resultados.

Los resultados brutos obtenidos del estudio comparativo entre los sistemas 1, 2, 3 y 4 demuestran que el sistema 1 es el que posee una mayor fortaleza al ser el mejor en el cómputo global, seguido del sistema 3 (por un 34%), el 2 (45%) y en peor lugar el 4 (con un 67% peor). Todos los sistemas presentan el consumo de recursos minerales y de metales como categoría de impacto más relevante a tener que disminuir, excepto para el sistema 2 que sería la de consumo de combustibles fósiles, pero siguiéndole también la de los minerales y metales.

Estos resultados se derivan de tener en cuenta también la entrada de la fábrica de industria química, pero se comentó que este subsistema no debería tenerse en cuenta al ser común en todos los sistemas e intrínseco a la industria. Si se ignora la fábrica se llega a la conclusión de que para el sistema 1 realmente las categorías más relevantes a disminuir son la eutrofización marina y el consumo de minerales y metales respectivamente, análisis ya comentado en el estudio autocomparativo.

En cuanto al sistema 2 y 3 las categorías de cambio climático y consumo de combustibles fósiles serían las más impactantes, aunque para el sistema 2 es superior la categoría de los combustibles fósiles y para el 3 la del cambio climático. Esto puede deberse principalmente a ser sistemas que contemplan procesos más convencionales y menos innovadores, consumiendo bastantes recursos y teniendo gastos importantes de servicios auxiliares.

Asimismo, para el sistema 4 se tiene como categoría de impacto principal el cambio climático, seguido del uso de suelo. El sistema 4 es el ejemplo de que una nueva tecnología puede empezar consumiendo mucho más y siendo peor que una tecnología anterior (sistema 3) antes de desarrollarse del todo. De hecho, es un sistema que promete avances porque al contrario que su contraparte más convencional, este prescinde de emplear ácido sulfúrico y amoníaco. Sin embargo, actualmente acaba necesitando el doble de entrada de grano de sorgo, lo que posiblemente haya aumentado esa categoría del uso de suelo. Además, consume también una mayor cantidad de gas natural y el doble de agua, de electricidad y de diésel.

Por otro lado, el sistema 1 pasa a ser incluso negativo en término de impactos ambientales si se aplica el descuento de cargas de impacto ambiental, le seguiría el sistema 3, después el 4 y finalmente el 2. Aplicando los descuentos queda en constancia que los procesos fermentativos pueden ser bastante favorecedores por los coproductos que pueden conseguirse en un mismo proceso, y que se evitan de tener que ser fabricados por otros procesos más impactantes.

Aunque, una ventaja del sistema 1 y del sistema 2 es que pueden quedarse en anhídrido succínico si para algún determinado proceso industrial se prefiere la versión anhídrido en vez de la versión hidratada del succínico como ácido. Mientras que los sistemas puramente fermentativos, sistemas 3 y 4, aumentarían sus cargas de impacto ambiental al tener que descomponer el ácido succínico a alta temperatura para dar el anhídrido.

En vista a los resultados obtenidos y ser comparados los cuatro sistemas entre sí, puede interpretarse que el sistema 1 tiene como principal ventaja ser una combinación de un sistema fermentativo, desde donde se adquiere el coproducto y el bio-furfural, y procesos sucesivos de reacciones químicas para obtener el anhídrido maleico y el succínico. En comparación a los otros sistemas, el primer proceso fermentativo y la primera reacción hacia el maleico permiten disminuir impactos en cuestión de recursos fósiles necesarios para conseguir el propio maleico, y la reacción hacia el succínico es precisamente con condiciones suaves que no elevan demasiado el uso de recursos auxiliares con sus impactos asociados.

Sin embargo, el sistema 1, pese a ser mejor aparentemente a los otros tres sistemas, no es perfecto, se deben seguir recomendando aplicar las posibles mejoras que se listaron en la sección 4.4.1.4. Por tanto, el sistema 1 es el que se propone como el más factible al que se le debe invertir en recursos para la obtención de anhídrido o ácido succínico.

5 Conclusiones

Se han cumplido los objetivos principales del TFG. Se ha seguido la metodología del análisis de ciclo de vida para desarrollar dos estudios, uno autocomparativo para analizar un proceso de fabricación de ácido succínico en profundidad y otro comparativo donde se han evaluado el anterior más otros tres procesos diferentes. Las principales conclusiones en base a la interpretación de resultados son:

- Los resultados favorecedores del sistema 1 frente a los otros sistemas se deben a ser el único proceso que combina las ventajas de conseguir la materia prima vía origen biológico, y de obtener el producto final con una reacción que no necesita condiciones de operación severas.
- Los sistemas fermentativos tienen generalmente como ventajas un menor consumo de recursos fósiles, y por tanto un menor impacto de la categoría cambio climático, frente a los petroquímicos.
- Los sistemas fermentativos tienen generalmente como desventajas una mayor eutrofización y uso de suelo. Comparten con los petroquímicos la acidificación debido al uso de los fertilizantes.
- Los impactos sobre el agotamiento de la capa de ozono o su formación a nivel de suelo, la radiación ionizante generada, o el uso del agua no son representativos para ningún sistema.
- Todos los sistemas han presentado un importante consumo de recursos minerales y de metales por la entrada del inventario de la fábrica de industria química.

Se han conseguido los siguientes hitos:

- Se han definido las limitaciones del ACV de cara a la evaluación de los impactos ambientales. Asimismo, se han estipulado los límites de los sistemas y se han representado con diagramas.

- Se ha seleccionado para desarrollar el ACV el método recomendado por la Comisión Europea: el *Environmental Footprint* (EF). Además, se ha utilizado el software informático SimaPro el cual utiliza ecoinvent, la mayor base de datos y más extendida.

- Se ha identificado al sistema 1 como el mejor sistema entre los cuatro estudiados, el cual ha sido más desarrollado en el estudio autocomparativo, además de volver a contemplarse en el comparativo.

- En ambos estudios para todos los sistemas se ha evaluado de forma sistemática la caracterización y la ponderación de los impactos ambientales y el efecto de los productos evitados en estos.

- Se han realizado recomendaciones para que el sistema 1 pueda ser menos impactante para el medio ambiente. Estas recomendaciones contemplan:

- Investigar catalizadores para la reacción que produce anhídrido maleico a partir de bio-furfural.
- Desarrollar nuevas tecnologías en agricultura o mayor investigación y aprobación de más OGM.
- Aprovechar una mayor energía de los residuos de la biomasa y de las posteriores cenizas de la valoración energética.

6 Bibliografía.

- [1] United Nations Environment Programme, “Water Pollution by Plastics and Microplastics: A Review of Technical Solutions from Source to Sea,” 2020. Accessed: Dec. 01, 2022. [Online]. Available: <https://wedocs.unep.org/xmlui/handle/20.500.11822/34424>
- [2] United Nations Development Programme, “Informe sobre Desarrollo Humano 2020: La próxima frontera – El desarrollo humano y el Antropoceno,” United Nations, Jun. 2021. doi: 10.18356/9789210055185.
- [3] Kirk-Othmer, *Encyclopedia of Chemical Technology*, 4th ed., vol. 22. 1998.
- [4] J. M. Pinazo, M. E. Domine, V. Parvulescu, and F. Petru, “Sustainability metrics for succinic acid production: A comparison between biomass-based and petrochemical routes,” *Catalysis Today, Elsevier*, vol. 239, pp. 17–24, 2015, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cattod.2014.05.035>.
- [5] H. Song and S. Y. Lee, “Production of succinic acid by bacterial fermentation,” *Enzyme Microb Technol*, vol. 39, no. 3, pp. 352–361, Jul. 2006, doi: 10.1016/j.enzmictec.2005.11.043.
- [6] Y. Feng, H. Yin, A. Wang, T. Xie, and T. Jiang, “Selective hydrogenation of maleic anhydride to succinic anhydride catalyzed by metallic nickel catalysts,” *Appl Catal A Gen*, vol. 425–426, pp. 205–212, May 2012, doi: 10.1016/j.apcata.2012.03.023.
- [7] A. de Galdo Dapena, “Diseño y optimización de una planta de producción de anhídrido succínico mediante hidrogenación de anhídrido maleico,” Universidad Rey Juan Carlos, 2023.
- [8] Manuel Pulido García, “Los beneficios del cálculo de la Huella de Carbono.” Accessed: Dec. 01, 2022. [Online]. Available: <https://www.pulgarma.es/los-beneficios-del-calculo-de-la-huella-de-carbono/>
- [9] Jefatura del Estado, *Ley 27/2014, del Impuesto sobre Sociedades*. 2014. Accessed: Dec. 01, 2022. [Online]. Available: <https://www.boe.es/buscar/act.php?id=BOE-A-2014-12328>
- [10] M. Finkbeiner, A. Inaba, R. B. H. Tan, K. Christiansen, and H. J. Klüppel, “The new international standards for life cycle assessment: ISO 14040 and ISO 14044,” *International Journal of Life Cycle Assessment*, vol. 11, no. 2, 2006, doi: 10.1065/lca2006.02.002.
- [11] Asociación española de Normalización y Certificación [AENOR], “UNE-EN ISO 14040:2006 Gestión ambiental Análisis del ciclo de vida Principios y marco de referencia.” Accessed: Dec.

- 01, 2022. [Online]. Available: <https://www.une.org/encuentra-tu-norma/busca-tu-norma/norma?c=N0038060>
- [12] R. Cucciniello, D. Cespi, M. Riccardi, E. Neri, F. Passarini, and F. M. Pulselli, "Maleic anhydride from bio-based 1-butanol and furfural: a life cycle assessment at the pilot scale," *Green Chemistry (Royal Society of Chemistry)*, vol. 25, pp. 5922–5935, 2023.
- [13] Joint Research Centre, "Recommendations for Life Cycle Impact Assessment in the European context - based on existing environmental impact assessment models and factors," *ILCD handbook International Reference Life Cycle Data System*, 2011.
- [14] "European Platform on LCA | EPLCA," European Commission. Accessed: Jan. 07, 2024. [Online]. Available: <https://eplca.jrc.ec.europa.eu/LCDN/developerEF.xhtml>
- [15] M. Goedkoop, M. Oele, J. Leijting, T. Ponsioen, and E. Meijer, *Introduction to LCA with SimaPro*. 2016.
- [16] B. R. Tiwari *et al.*, "Life Cycle Assessment of Microbial 2,3-Butanediol Production from Brewer's Spent Grain Modeled on Pinch Technology," *ACS Sustain Chem Eng*, vol. 11, no. 22, pp. 8271–8280, Jun. 2023, doi: 10.1021/acssuschemeng.3c00616.

7 ANEXOS.

7.1 Anexo I. Entradas del inventario

Se ha desarrollado la Tabla 19, donde para cada entrada del inventario se ha detallado qué se ha trasladado a la herramienta SimaPro. De esta forma se asegura que el estudio es reproducible y repetible.

Tabla 19. Entradas del inventario. Equivalencia entre la entrada listada y la entrada en el software utilizado, SimaPro

Entrada en el ACV	Entrada en SimaPro	Sistema
Anhídrido maleico (benceno)	Maleic anhydride {GLO} market for maleic anhydride Cut-off, U ²	1
Anhídrido maleico (butano)	Maleic anhydride {GLO} market for maleic anhydride Cut-off, U ²	1
Anhídrido acético	Acetic anhydride {GLO} market for acetic anhydride Cut-off, U	1
Hidrógeno	Hydrogen, gaseous {GLO} market for hydrogen, gaseous Cut-off, U	1, 2
Agua	Tap water {Europe without Switzerland} market for Cut-off, U	1, 2, 3, 4
Agua subterránea	Tap water {Europe without Switzerland} tap water production, underground water without treatment Cut-off, U	3, 4
Electricidad	Electricity, medium voltage {ES} market for Cut-off, U	1, 2, 3, 4
Vapor de calefacción	Heat, from steam, in chemical industry {Rer} market for heat, from steam, in chemical industry Cut-off, U	1
Nitrógeno	Nitrogen, liquid {RER} market for Cut-off, U	2
Diesel	Diesel, low-sulfur {Europe without Switzerland} market for Cut-off, U	3, 4
Gas natural	Natural gas, high pressure {ES} market for Cut-off, U	2, 3, 4
Catalizador níquel Raney: Aluminio	Aluminium, primary, ingot {RoW} market for Cut-off, U	1
Catalizador níquel Raney: Níquel	Nickel, class 1 {GLO} market for nickel, class 1 Cut-off, U	1
Catalizador níquel Raney: fabricación	Metal working, average for aluminium product manufacturing {GLO} market for Cut-off, U	1
Catalizador: Paladio	Palladium {GLO} market for Cut-off, U	2
Grano de sorgo	Sorghum grain, at farm {FR} Economic, U	3, 4
Ácido sulfúrico	Sulfuric acid {RER} market for sulfuric acid Cut-off, U	3
Amoniaco	Ammonia, anhydrous, liquid {RER} market for ammonia, anhydrous, liquid Cut-off, U	3
Salida en el ACV	Salida en SimaPro	Sistema
Sulfato de amonio	Ammonium sulfate, as 100% (NH ₄) ₂ SO ₄ (NPK 21-0-0), at plant {RER} Economic, U	3
Etanol	Ethanol from maize, at processing {US} Economic, U ³	4
Aguas residuales	Wastewater, average {Europe without Switzerland} market for wastewater, average Cut-off, U	3, 4
Fábrica industria química	Chemical factory, organics {RER} construction Cut-off, U	1, 2, 3, 4

Nota 2. Se utilizó como base la entrada de SimaPro indicada, pero eliminando al maleico obtenido por benceno en el caso del butano, y viceversa

Nota 3. Se utilizó como base la entrada de SimaPro indicada, pero eliminando la salida de los granos secos de destilería

En esta tabla no figuran aquellas entradas cuyos impactos ambientales se han obtenido por medio de la literatura científica, puesto que dichas entradas han sido ya adecuadamente referenciadas en el propio estudio.