

Simulación y ACV del proceso de reformado acuoso de glicerol para la obtención de hidrógeno

Armando Daquinta Alvarez ¹, Luis Orlando Polanco Vasquez ¹, Jazmín Herrera Dávalos ¹, Juan Carlos Chavarría Hernández ^{1,*}, Manuel Israel Flota Bañuelos ²

¹ Unidad de Energía Renovable, Centro de Investigación Científica de Yucatán, Mérida, Yucatán, México

² Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, Mérida, Yucatán, México

* Autor de correspondencia: ic.ch@cicy.mx; Tel.: (+52 9999300760 ext. 1206)

Energías Renovables. Ponencia Virtual

Recibido: 16 de junio de 2023

Aceptado: 25 de agosto de 2023

Publicado: 23 de noviembre de 2023

Palabras clave: Hidrógeno, Reformado Acuoso de glicerol, ACV.

Introducción. En un contexto global de creciente preocupación por el cambio climático, el hidrógeno se ha posicionado como una fuente de energía renovable prometedora. Su producción a partir de glicerol (subproducto de la industria de biodiesel) u otras moléculas similares, es factible a través de procesos termoquímicos.

El proceso de reformado acuoso de glicerol (RAG) representa una alternativa interesante, pues demanda menor consumo energético que la obtención de hidrógeno a partir del reformado en fase gas (Espinoza-Moreno y col., 2018). Por otra parte, el análisis de ciclo de vida (ACV) del hidrógeno obtenido a partir de diferentes rutas tecnológicas, es un ejercicio necesario para determinar los impactos ambientales y hacer una selección de los procesos más favorables desde el punto de vista tecnológico y ambiental. Se ha realizado el ACV de diferentes tecnologías para la producción de hidrógeno (Mehmeti y col, 2018), pero no a partir del proceso aquí estudiado (RAG), así como tampoco se encontró ningún reporte en la literatura sobre su modelado empleando redes neuronales artificiales (RNAs). El objetivo del proyecto es desarrollar a partir de datos experimentales, un modelo basado en RNAs para simular la reacción de RAG y realizar el ACV para evaluar los impactos del proceso a escala comercial.

Materiales y Métodos. Se sintetizó un catalizador de Ir/La₂O₃, empleando el método de impregnación incipiente. Las pruebas de actividad de RAG se realizaron en un reactor de lecho fijo a 6 condiciones de presión y temperatura, donde cada reacción tuvo una duración de 8 h. Los gases formados se analizaron en equipo ETG MCA100 Syn-P, y los productos líquidos se analizaron mediante CG/EM modelo YL6900GC/MS. Para representar el rendimiento de los gases formados en función de las condiciones de reacción durante el período transitorio experimental, se desarrolló un modelo matemático de RNAs usando como variables de entrada: presión, temperatura, tiempo y % glicerol líquido, y como variables de salida los rendimientos de H₂, CH₄, CO y CO₂. Se probaron diferentes algoritmos de entrenamiento siendo el Bayesian Regularization, con 55 neuronas ocultas, el que ajustó mejor, obteniendo una R² de 0.99. A partir del modelo se aproximó el comportamiento del sistema a un tiempo mayor donde se alcanza un estado estacionario de la reacción, para el cual se calculó el rendimiento de hidrógeno y de los demás productos de reacción obtenidos.

A partir de la información experimental y de la simulación a condiciones de estabilidad, se hicieron los cálculos para el escalamiento del proceso para una capacidad de producción comercial. Se emplearon fichas técnicas de consumo energético de equipos industriales, así como simulaciones del proceso. Posteriormente se usó esta información para alimentar el software SimaPro para aplicar la metodología de ACV del proceso RAG. Se utilizaron los métodos ReCiPe Midpoint y Endpoint. Para el ACV únicamente se consideraron la síntesis del catalizador y la reacción de RAG, sin considerar el transporte de los insumos. La unidad funcional fue 100 Nm³/h por tratarse de una capacidad comercial

baja. Las entradas fueron los insumos para sintetizar el catalizador, la alimentación del RAG (agua y glicerol), y los consumos energéticos, y como salidas el gas de síntesis producido y agua residual.

Resultados.

Se observó el estado transitorio inicial de la reacción hasta casi llegar a la estabilización. Los gases formados fueron, H₂, CH₄, CO y CO₂, siendo el H₂ el producto más abundante. Con el modelo de RNAs se realizó la simulación a 263 °C y 38 bar para maximizar el rendimiento de H₂, y se determinó que se alcanza el estado estacionario a las 7.9 h de reacción, como se muestra en la Figura 1.

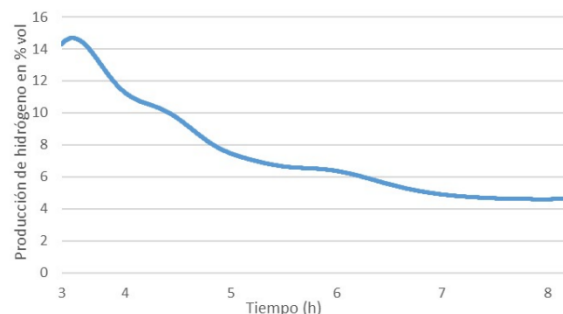


Figura 1. Simulación del rendimiento de H₂ hasta alcanzar el estado estable.

En el escalamiento, se determinó que se requieren 1,740 kg del catalizador para producir 100 Nm³/h de H₂. Mediante el ACV se evaluaron las 18 categorías de impacto indicadas en la Figura 2

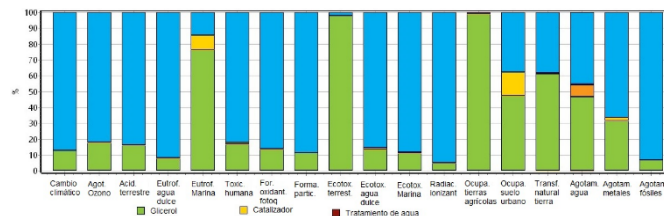


Figura 2. Impactos de la reacción de RAG del método ReCiPe Midpoint.

Conclusiones. La estabilización del sistema se logró a las 7.9 h y el mayor rendimiento de H₂ en estado estable se obtuvo a 263 °C y 38 bar. En el ACV se encontró que el mayor impacto es debido al consumo energético, mientras que la síntesis del catalizador tubo una contribución marginal.

Bibliografía.

- Espinoza-Moreno, F., Balla, P., Shen, W., Chavarría-Hernández, J. C., Ruiz-Gómez, M., & Tlecuitl-Beristain, S. (2018). Ir-based bimetallic catalysts for hydrogen production through glycerol aqueous-phase reforming. *Catalysts*, 8(12), 613. <https://doi.org/10.3390/catal8120613>
- Mehmeti, A., Angelis-Dimakis, A., Arampatzis, G., McPhail, S. J., & Ulgiati, S. (2018). Life cycle assessment and water footprint of hydrogen production methods: from conventional to emerging technologies. *Environments*, 5(2), 24. <https://doi.org/10.3390/environments5020024>