



Universidad
Zaragoza

Trabajo de Fin de Grado

Reformado de metanol con vapor de agua
para alimentar con hidrógeno
una pila de combustible tipo PEM:
simulación de un reactor con cinéticas
de reacción

Autor

Nerea García Mateo

Directores

Jaime Soler Herrero

Enrique Romero Pascual

Departamento de Ingeniería Química y Tecnología del Medio
Ambiente
2023

A mi familia, por apoyarme en todos mis logros.

Resumen

Este proyecto tiene por finalidad el diseño preliminar de un reactor de tipo flujo pistón y la selección de un catalizador óptimo para la obtención de hidrógeno a partir del reformado de metanol con vapor de agua, y de esta manera alimentar una pila de combustible. La elección de metanol como reactivo se sustenta en el hecho de que puede ser obtenido a partir de fuentes renovables siendo así un proceso sostenible y el hidrógeno obtenido catalogado como hidrógeno verde.

Para su realización han sido necesarias varias fases. La primera etapa se centró en la búsqueda bibliográfica de diversas cinéticas con diferentes catalizadores para elegir las mejores opciones. Posteriormente, se verificaron y validaron las cinéticas propuestas y finalmente se procedió a la comparación de las diversas cinéticas frente a un caso base mediante el software AspenOne HYSYS®, que sirvió para la realización de la simulación y diseño del proyecto a realizar.

Una vez elegido el catalizador con los mejores resultados, se eligieron las condiciones del reactor con la finalidad de conseguir el máximo rendimiento a hidrógeno con la menor selectividad a CO dado que es considerado perjudicial para un uso posterior en una pila de combustible. Además, se compararon las conversiones obtenidas con la conversión de equilibrio termodinámico. Para ello, se realizó una simulación adicional de la reacción en condiciones de equilibrio mediante AspenOne HYSYS®.

Abstract

The purpose of this project is the preliminary design of a piston flow reactor and the selection of an optimal catalyst to obtain hydrogen from methanol reforming with water vapor, and thus feed a fuel cell. The choice of methanol as a reagent is based on the fact that it can be obtained from renewable sources, thus being a sustainable process and the hydrogen obtained is classified as green hydrogen.

Several stages have been necessary for its realization. The first stage focused on the bibliographic search of different kinetics with different catalysts to choose the best options. Subsequently, the proposed kinetics were verified and validated and finally, the various kinetics were compared with a base case using AspenOne HYSYS® software, which was used to carry out the simulation and design of the project to be carried out.

Once the catalyst with the best results was chosen, the reactor conditions were selected in order to achieve the maximum hydrogen yield with the lowest CO selectivity, since it is considered detrimental for subsequent use in a fuel cell. Furthermore, the obtained conversions were compared with the thermodynamic equilibrium conversion. For this purpose, an additional simulation of the reaction under equilibrium conditions was performed using AspenOne HYSYS®.

ÍNDICE

1	INTRODUCCIÓN	6
2	PLANTEAMIENTO DEL TRABAJO Y FUNDAMENTO TEÓRICO	7
2.1	METANOL COMO MATERIA PRIMA PARA LA OBTENCIÓN DE HIDRÓGENO	7
2.2	FASES DE DESARROLLO DEL PROYECTO	8
2.3	CÁLCULOS	8
3	COMPONENTES DEL SISTEMA	8
3.1	FUENTE DE ALIMENTACIÓN.....	8
3.2	REACTOR.....	9
4	ESTUDIO TERMODINÁMICO DE LA REACCIÓN	9
5	ESTUDIO CINÉTICO DE LA REACCIÓN	11
5.1	Pd/ZnO.....	12
	5.1.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica	12
	5.1.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico	13
5.2	Pd-Zn-Y/CeO ₂	15
	5.2.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica	15
	5.2.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico	17
5.3	CuZrDyAl.....	18
	5.3.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica	18
	5.3.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico	20
5.4	ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS	21
	5.4.1. Conversión vs T ^a	22
	5.4.2. Selectividad a CO vs T ^a	23
	5.4.3. Rendimiento de H ₂ vs T ^a	24
5.5	DISEÑO DEL REACTOR	25
6	CONCLUSIÓN	26
	BIBLIOGRAFÍA	27

1 INTRODUCCIÓN

El hidrógeno es la alternativa más prometedora surgida en los últimos años para sustituir a los emisores de efecto invernadero y también la solución de la mayoría de las necesidades tanto de consumo doméstico como de transporte.

Es un producto muy versátil que puede actuar como materia prima y como almacenamiento de electricidad renovable, aunque este producto consta de diversas desventajas, como su complicada obtención por no encontrarse de manera aislada. Por esta razón, la mejor forma de obtenerlo es mediante electrolisis, pero ello implica una segunda desventaja y es el alto coste que supone este proceso por su masiva necesidad de energía eléctrica. Es entonces un producto con mucho futuro, pero que a día de hoy todavía tiene algunas limitaciones.

A pesar de que la mayoría del hidrógeno proviene¹ del “hidrógeno gris” cuya obtención requiere combustibles fósiles con emisiones contaminantes asociadas, el “hidrógeno azul” está empezando a tenerse consideración en la actualidad ya que, aunque también es producido a partir de fuentes de origen fósil, consta de menos emisiones contaminantes asociadas (ya que es producido a partir de gas natural con captura de CO₂) y finalmente, el “hidrógeno verde” también conocido como “hidrógeno renovable” que es la alternativa 100% sostenible.

El interés por el hidrógeno no ha pasado desapercibido, tanto es así que España ya cuenta desde el 6 de octubre de 2020 con la “Hoja de Ruta del Hidrógeno: una apuesta por el hidrógeno renovable” para conseguir un sistema eléctrico 100% renovable antes de 2050. Además, hay diferentes iniciativas como el “Pacto Verde Europeo” con la aprobación para financiar el desarrollo del hidrógeno renovable, y dentro de este, la “Estrategia Europea del Hidrógeno” que se decanta por el hidrógeno para conseguir la neutralidad de carbono en 2050².

El 22 de enero de 2022 se anunció un acuerdo en el que Alemania se unió al H2Med³, un acueducto que conecta con Portugal, España y Francia para abastecer a la Unión Europea de hidrógeno verde. Esta iniciativa verá la luz en 2030 y es en 2050 cuando se estima que el 20% de toda la energía ya será hidrógeno renovable en Europa.

Sin duda, el hidrógeno es el futuro, y por ello el Ayuntamiento de Zaragoza⁴ ha decidido emprender un nuevo proyecto que tendrá como finalidad transformar la basura no reutilizable en hidrógeno y metanol y de esta manera, eliminar al 100% los residuos. Este proyecto plantea estar en funcionamiento en 2030 y así, Zaragoza se podrá convertir en la primera ciudad del mundo con cero emisiones de residuos.

Debido a que todavía es muy complicada la utilización de hidrógeno como combustible, se propone la utilización de metanol o amoniaco que contienen hidrógeno y que son fácilmente transportables, ya que al ser líquidos presentan una densidad muy elevada.

Es por esta razón por la que se va a buscar un catalizador adecuado, con el fin de optimizar un reactor de tipo flujo pistón capaz de formar hidrógeno a partir del reformado de metanol con vapor de agua y que va a servir para alimentar una pila de combustible tipo PEM con hidrógeno y así, generar una energía capaz de abastecer una vivienda de manera sostenible.

2 PLANTEAMIENTO DEL TRABAJO Y FUNDAMENTO TEÓRICO

2.1 METANOL COMO MATERIA PRIMA PARA LA OBTENCION DE HIDRÓGENO

Ya ha sido comentado anteriormente que la aplicación de este proyecto es estudiar la viabilidad tecnológica para que una vivienda pueda auto abastecerse energéticamente al generar energía con una pila de combustible tipo PEM alimentada por hidrógeno, pero como este producto es complicado de transportar y almacenar, se sugiere utilizar como materia prima metanol para obtener hidrógeno.

El hidrógeno es un combustible que tiene diversas desventajas que implican que sea preferible la formación in situ de hidrógeno a partir de otros combustibles líquidos, como es el caso del metanol. Este tiene una gran facilidad de transporte y almacenaje a presión ambiental, que le permite un rápido uso para la producción de hidrógeno.

En la Tabla 1 se realiza la comparación de combustibles con el factor de movilidad, sabiendo que cuanto mayor sea este factor, mayor será la facilidad de transporte para ese combustible en una tubería. El transporte de hidrógeno por tubería, similar al ya muy conocido transporte de gas natural a través de gasoductos, se está postulando como una vía interesante a medio plazo para llevar hidrógeno a grandes distancias. No obstante, debe vencer algunos inconvenientes como la necesidad de aleaciones de acero especiales para evitar fugas. Mientras tanto, el metanol, al ser líquido, tiene una mayor energía volumétrica, lo cual es una ventaja frente al hidrógeno gas (Tabla 1). Para licuar el hidrógeno se debe gastar una importante cantidad de energía, lo cual supone un gran inconveniente.

TABLA 1⁵. Comparación de la facilidad de transporte entre hidrógeno y metanol

COMBUSTIBLE	ENERGÍA POR UNIDAD DE MASA (J/kg)	ENERGÍA POR UNIDAD DE VOLUMEN (J/m ³)	FACTOR DE MOVILIDAD (Φ_m)
METANOL (líquido)	22,3	18,10	0,23
HIDRÓGENO (líquido)	141,9	10,10	1,00
HIDRÓGENO (gaseoso)	141,9	0,013	1,00

Hoy día, uno de los usos más extendidos del hidrógeno es la transformación en sustancias líquidas fáciles de transportar como metanol, amoniaco (que tiene la ventaja de no crear emisiones de contaminantes a la atmósfera, ya que no tiene la presencia de carbono), octano y líquidos orgánicos.

2.2 FASES DE DESARROLLO DEL PROYECTO

El procedimiento que vamos a llevar a cabo en este proyecto va a constar de las siguientes etapas:

1. Investigación bibliográfica de diversos catalizadores para evaluar cuál es más favorable para el proyecto.
2. Validación y verificación de las diferentes cinéticas seleccionadas.
3. Simulación del sistema con sus diferentes componentes mediante el software AspenOne HYSYS®
4. Elección del mejor catalizador para el reactor seleccionado teniendo en cuenta la conversión de metanol, rendimiento a hidrógeno y selectividad a CO.
5. Estudio termodinámico de la reacción.

2.3 CÁLCULOS

Ha sido necesaria la realización de diversos cálculos para realizar este proyecto. Para empezar, se suponen como caudales molares $F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ entra}$, $F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ sale}$, $F_{\text{CO}_2} \text{ sale}$ y $F_{\text{H}_2} \text{ sale}$.

Las fórmulas utilizadas para el cálculo de conversión, selectividad a CO y rendimiento de H₂ son las siguientes:

$$\text{Conversión de metanol} = (F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ entra} - F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ sale}) / (F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ entra})$$

$$\text{Selectividad a CO}_2 = F_{\text{CO}_2} \text{ sale} / (F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ entra} - F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ sale})$$

$$\text{Selectividad a CO} = 1 - \text{Selectividad a CO}_2$$

$$\text{Rendimiento a H}_2 = F_{\text{H}_2} \text{ sale} / 3 (F_{\text{CH}_3\text{OH}} \text{ entra})$$

3 COMPONENTES DEL SISTEMA

3.1 FUENTE DE ALIMENTACIÓN

Si bien el metanol se ha producido hasta hace poco utilizando fuentes de energía y materias primas de origen fósil, emitiendo de este modo altas cantidades de gases de efecto invernadero, los últimos procesos desarrollados han conseguido obtener este combustible mediante fuentes de energía renovables. En este caso, la huella de carbono de su producción es neutral, lo que podría resultar prometedor para su generación a gran escala. No obstante, la investigación hasta la fecha determina que la síntesis a partir de energías renovables es todavía un reto⁶.

El metanol verde se produce utilizando solo fuentes de energía renovables en el proceso y asegurándose de que no se emiten gases nocivos a la atmósfera. Así, el metanol verde es sinónimo de metanol renovable y limpio. Se produce a partir de la gasificación de fuentes sostenibles de biomasa, como restos ganaderos, agrícolas y forestales y residuos urbanos. Además, es necesario saber que el e-metanol se produce a partir de hidrógeno producido con electricidad renovable (lo que llamamos hidrógeno verde) y de dióxido de carbono capturado.

La expansión del metanol verde como combustible alternativo a los de origen fósil resulta especialmente atractiva para la industria marítima ya que, al ser líquido a temperatura ambiente, es

mucho menos costoso de almacenar y transportar que los gaseosos, y posee a su vez la huella de carbono más baja de todos los combustibles líquidos. Este compuesto se puede utilizar, además, tanto en motores de propulsión interna como para alimentar pilas de combustible, aportando flexibilidad en función de las necesidades particulares⁷.

3.2 REACTOR

El tipo de reactor se ha seleccionado teniendo en cuenta que la inmensa mayoría de reacciones industriales en fase gaseosa en presencia de un catalizador sólido se llevan a cabo en reactores tubulares de tipo flujo pistón. Son reactores en forma de tubo largo, con una relación longitud/diámetro claramente superior a 1.

Para comenzar, se necesita conseguir el máximo rendimiento. Para ello, se optimiza el reactor en base a su volumen y al catalizador más conveniente. Se estudian todos los catalizadores seleccionados con las mismas medidas de reactor (de longitud 0.1m y de diámetro 0.5cm). A partir de ahí, se elige el catalizador más favorable y se hace un estudio con el fin de conseguir la máxima conversión.

El esquema del reactor utilizado se presenta en la Figura 1.

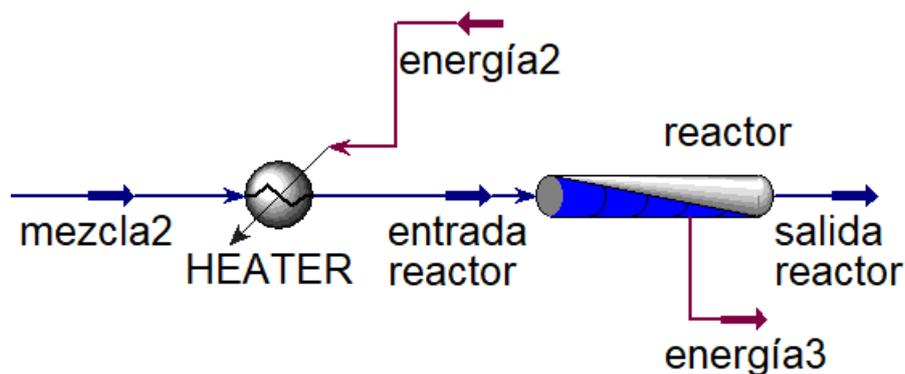


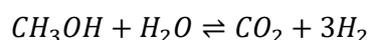
Figura 1. Esquema entrada y salida del reactor

Consta de los siguientes componentes:

- Reactor de reformado de metanol
- Calentador "HEATER" por donde entra la corriente "mezcla 2" formada por la mezcla de metanol y agua, así se calienta y se consigue que esté preparada para poder entrar al reactor.

4 ESTUDIO TERMODINÁMICO DE LA REACCIÓN

Se estudia la termodinámica de la reacción con el fin de conocer el máximo rendimiento de hidrógeno que se puede obtener a las diferentes temperaturas seleccionadas. La reacción a estudiar, el reformado de metanol con vapor de agua, es la siguiente:



Se ha seleccionado el siguiente rango de temperaturas, de 160 a 310°C y con la ayuda del software Aspen HYSYS® se lleva a cabo la simulación con un reactor de equilibrio termodinámico (reactor de Gibbs).

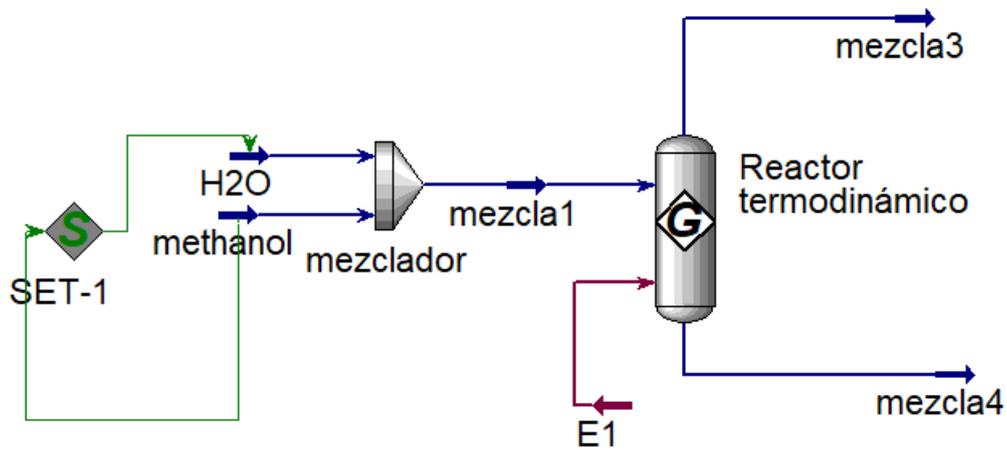


Figura 2. Esquema de Aspen Hysys® del estudio termodinámico de la reacción.

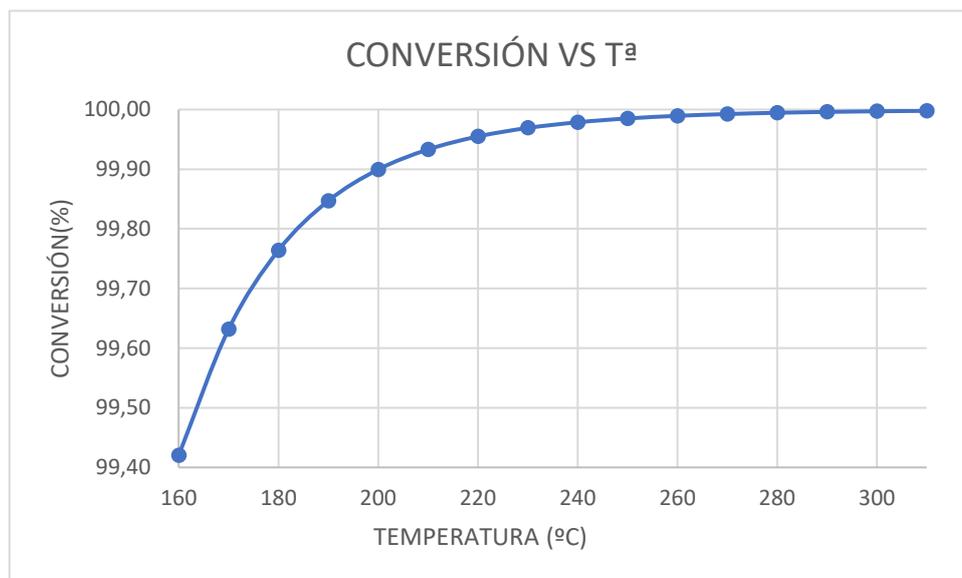


Figura 3. Gráfica del equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio seleccionado.

Se observa que la conversión de metanol en el equilibrio termodinámico va aumentando con la temperatura y supera el 99% en todo el rango de temperatura (160-310°C), por lo que se puede concluir que la reacción está muy desplazada a la formación de productos a cualquier temperatura dentro del rango estudiado, con una conversión prácticamente completa.

5 ESTUDIO CINÉTICO DE LA REACCIÓN

Los estudios catalíticos que se van a comentar a continuación constan de diversas etapas, la primera donde se obtendrán gráficas similares a las dadas en los artículos, realizando para ello los mismos cálculos y posteriormente, se desarrollarán las gráficas con las mismas condiciones que el artículo para poder compararlas con las gráficas que tendrán las condiciones y parámetros del caso base.

Han sido estudiadas tres cinéticas con sus respectivos catalizadores debido a que, aunque se ha trabajado con otras cinéticas, finalmente no han podido ser utilizadas por falta de datos. En la Tabla 2 se muestran estas últimas.

TABLA 2. Cinéticas finalmente descartadas para este estudio.

CATALIZADOR	ECUACIÓN CINÉTICA
Cu/Zn/Al ₂ O ₃ ⁽⁸⁾	$r = k \cdot e^{-Ea1/RT} \cdot p_{CH3OH}^a \cdot p_{H2O}^b \cdot p_{H2}^c p_{CO2}^d$ $r = k \cdot e^{-Ea/RT} \cdot p_{CH3OH}^a \cdot p_{H2}^b \cdot p_{CO2}^c$
COPZr-2 ⁽⁹⁾	$r_{DR} = k_{01} e^{-E_1/RT} p_{MeOH}^{a_1} \cdot p_{H_2O}^{b_1} \left(1 - \frac{p_{CO_2} \cdot p_{H_2}^3}{K_{p,DR} \cdot p_{MeOH} \cdot p_{H_2O}} \right)$ $r_{DE} = k_{02} e^{-E_2/RT} p_{MeOH}^{a_2} \left(1 - \frac{p_{CO} \cdot p_{H_2}^2}{K_{p,DE} \cdot p_{MeOH}} \right)$

En cuanto a las cinéticas que, si han sido utilizadas para el proyecto, hay que tener en cuenta que para poder realizar el estudio cinético de la reacción hay que partir de un caso base para encontrar el catalizador con las mejores características. Estas simulaciones han sido realizadas mediante AspenOne HYSYS® y las condiciones utilizadas que se muestran a continuación en la Tabla 3 son comunes para los tres catalizadores.

TABLA 3. Comparación a las mismas condiciones para todos los catalizadores

Longitud del reactor (m)	0,1
Diámetro del reactor (cm)	0,5
Alimentación de metanol (kg/h)	0,001
Relación molar agua/metanol	1
Rango de temperatura (°C)	160-310

5.1 Pd/ZnO

5.1.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica

Este catalizador corresponde a un estudio publicado¹⁰ que consiste en un estudio cinético, donde el catalizador sigue el mismo mecanismo a lo largo de todo el rango de temperatura (160-310°C). La ecuación cinética es la siguiente:

$$r = k \cdot e^{-Ea/RT} \cdot p_{CH_3OH}^a \cdot p_{H_2O}^b$$

- k= factor pre-exponencial mmol/ (kgcat·s·kPa^{0.803})
- Ea= energía de activación (KJ/mol)
- R= constante molar de los gases (8,314472 J/(mol·K))
- T= temperatura (K)
- p= presión parcial (kPa)
- ÓRDENES PARCIALES: a=0,715 y b=0,088

Las condiciones con las que se ha llevado a cabo esta cinética son las siguientes:

TABLA 4. Condiciones propuestas por el artículo utilizado para el catalizador Pd/ZnO

Longitud del reactor (m)	0,804
Diámetro del reactor (m)	5,08e ⁻⁴
Alimentación de metanol (kg/h)	2,00e ⁻³
Relación molar agua/metanol	1,78
Rango de temperatura (°C)	160-310

La figura 4 expone los resultados obtenidos en AspenOne HYSYS® para las mismas condiciones experimentales estudiadas en la referencia bibliográfica. Al compararla con la figura 5 se puede dar por válida la cinética seleccionada, pues los resultados son similares.

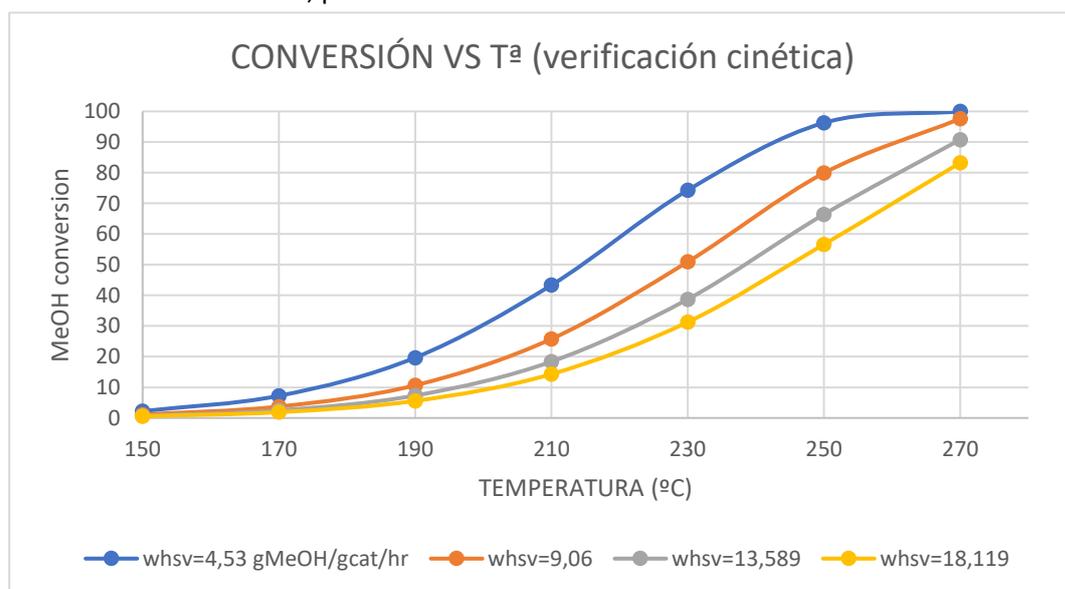


Figura 4. Gráfica de conversión Pd/ZnO obtenida por simulación en el software AspenOne HYSYS® a las diferentes temperaturas bajo las condiciones de validación de cinética del reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

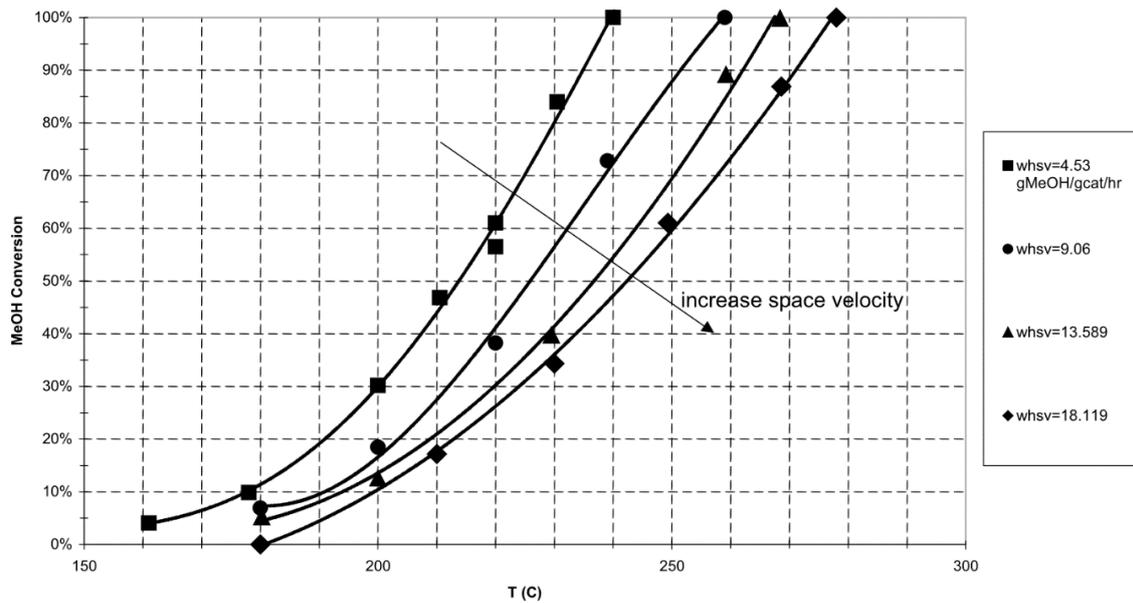


Figura 5. Gráfica adjuntada directamente del artículo donde whsv es la velocidad espacial horaria en peso, peso (moles) de alimentación/peso catalizador/h

5.1.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico

Ahora se va a comparar las cinéticas a partir de las condiciones del artículo y para ello, se van a realizar las siguientes gráficas (figura 6).

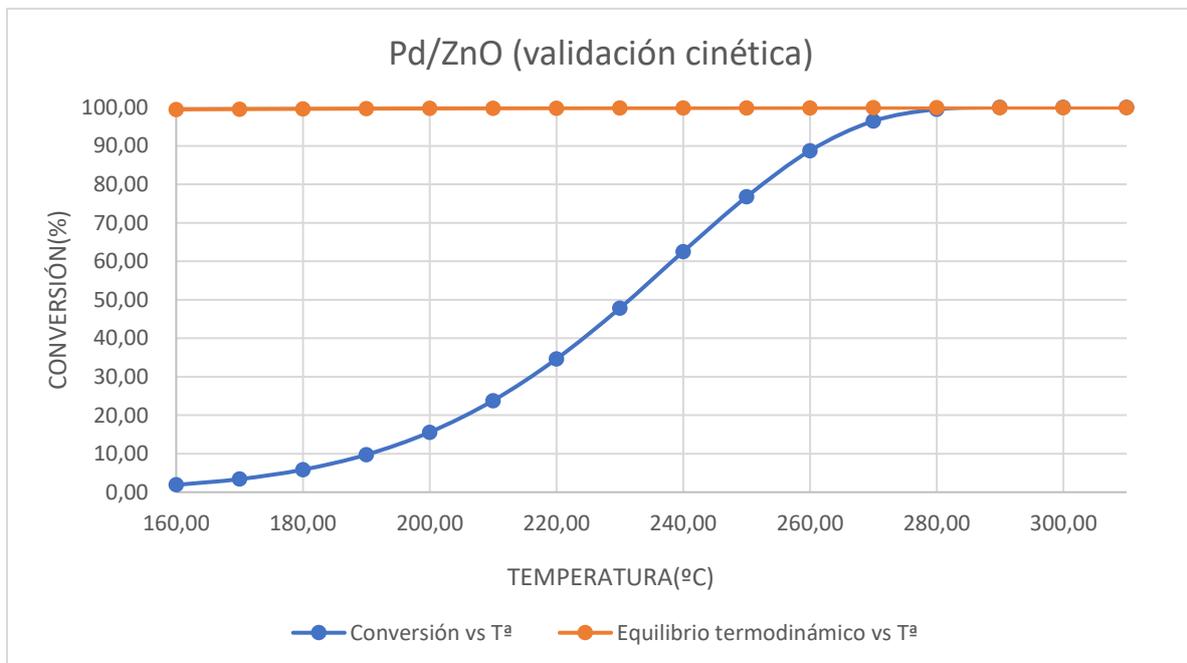


Figura 6. Gráfica de conversión cinética del Pd/ZnO y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo las condiciones de validación de cinética del reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

En cuanto a las condiciones propuestas para validar la cinética se utilizarán las mencionadas anteriormente donde la alimentación de metanol es $2,00 \times 10^{-3} \text{ kg/h}$, este dato se puede obtener partiendo de una cantidad de wshv de 10 gMeOH/gcat/h .

$$10 \text{ gMeOH/gcat/h} \cdot 0,2 \text{ gcat} = 2 \text{ gMeOH/h}$$

$$\frac{2 \text{ gMeOH/h}}{32 \text{ g/mol MeOH}} = 0,0625 \text{ mol MeOH/h}$$

Se observa una conversión muy baja a 160°C , pero con el aumento de la temperatura, también aumenta la conversión, alcanzando su máximo a los 280°C . Finalmente, la conversión es óptima, pero la temperatura a la que sucede es cercana al límite máximo marcado en el rango de temperatura. Esto provocará un aumento en el coste por la necesidad de aportar calor al intentar conseguir la máxima temperatura en el proceso.

Y esta es la gráfica (figura 7) con las condiciones correspondientes al caso base.

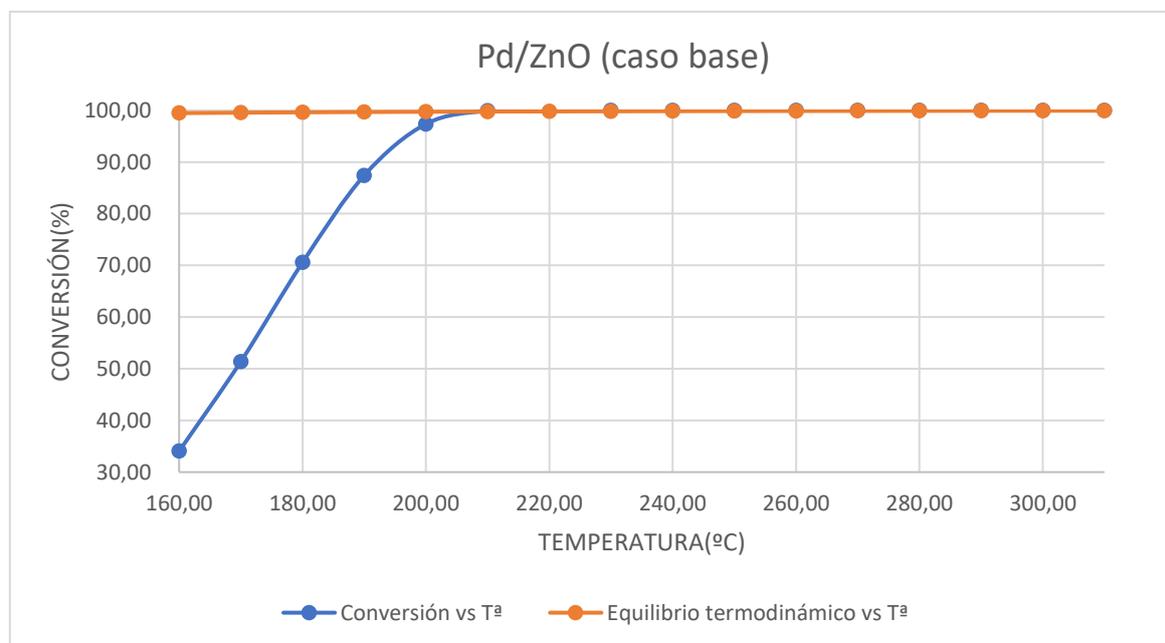


Figura 7. Gráfica de conversión Pd/ZnO y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo las condiciones de caso base de reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

Los resultados obtenidos en el caso base muestran que la conversión máxima se alcanza a bajas temperaturas ($200\text{-}220^\circ\text{C}$), por ello se puede concluir que la conversión es óptima y no implicará un coste significativo ya que no será necesario mantener una elevada temperatura de operación para realizar el proceso. Claramente se observa que las condiciones de operación del caso base son mejores que las condiciones de validación de la cinética. La cantidad de catalizador respecto del flujo de alimentación es más favorable en el caso base.

5.2 Pd-Zn-Y/CeO₂

5.2.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica

Este catalizador, que consiste en paladio y zinc sobre un soporte de cerio y promovido con itrio, sigue la siguiente cinética obtenida del artículo publicado¹¹:

$$r = k \cdot e^{-Ea/RT} \cdot p_{CH_3OH}^a \cdot p_{H_2O}^b \cdot p_{H_2}^{-c} \cdot p_{CO_2}^{-d} \cdot p_{CO}^{-e}$$

- k= factor pre-exponencial (mol·gPd⁻¹·s⁻¹)
- Ea= energía de activación (J/mol)
- R= constante molar de los gases (8,314472 J/(mol·K))
- T= temperatura (K)
- p= presión parcial (kPa)
- ÓRDENES PARCIALES: a=0,54, b=0,1, c=0,4, d=0,13 y e=0,075.

Las condiciones seleccionadas por el artículo son las siguientes:

TABLA 5. Condiciones propuestas por el artículo utilizado para el catalizador Pd-Zn-Y/CeO₂

Longitud del reactor (m)	0,2298
Diámetro del reactor (m)	1,25e ⁻²
Alimentación de metanol (kg/h)	23,335
Relación molar metanol/agua	0,88:1
Rango de temperatura (°C)	160-310

Para demostrar la verificación de la cinética expuesta, se observan las siguientes gráficas:

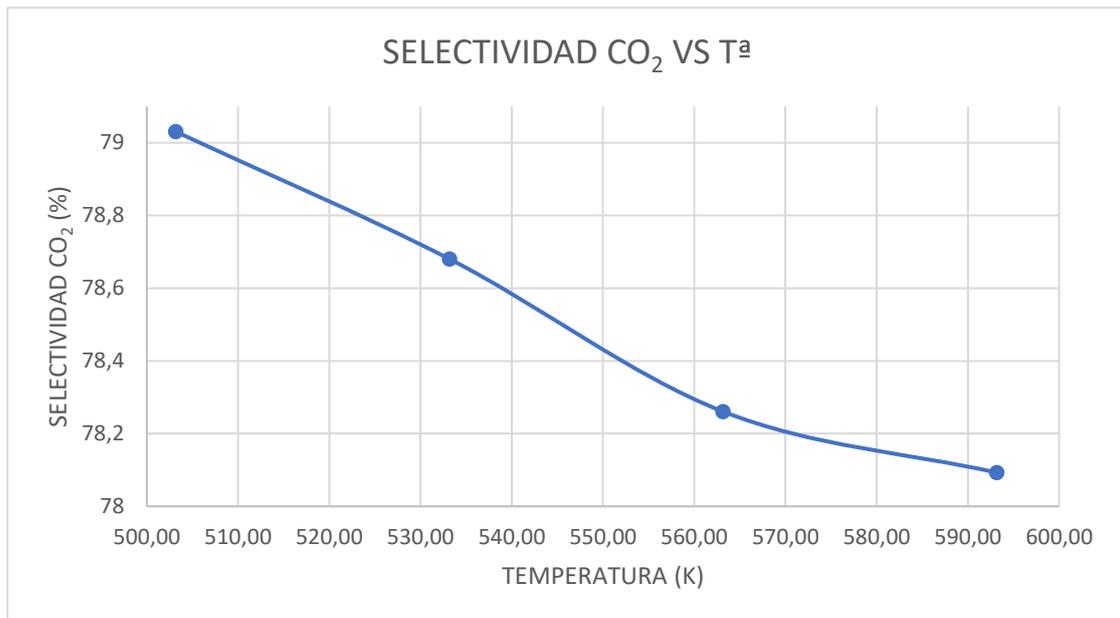


Figura 8. Gráfica de selectividad de CO₂ del Pd-Zn-Y/CeO₂ obtenida por simulación en el software AspenOne HYSYS® a las diferentes temperaturas bajo las condiciones de validación de cinética del reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

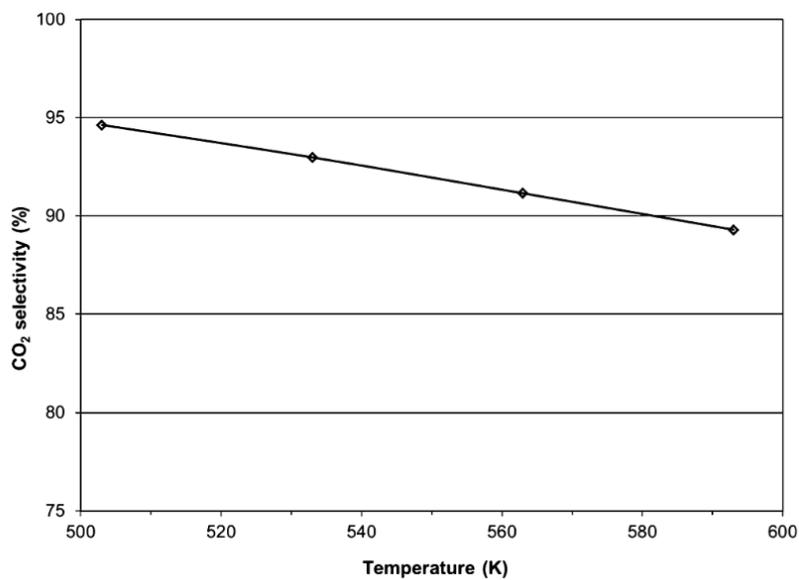


Figura 9. Gráfica adjuntada directamente del artículo.

Si se compara la figura 8 con la figura 9, se puede comprobar que, a pesar de que ambas tienen pendiente descendente, los resultados no son exactamente iguales. Pero se puede considerar validada la cinética, ya que la conversión obtenida con el software AspenOne HYSYS® es muy baja, como se indica en el artículo, del orden de 2-4% de conversión.

5.2.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico

Ahora se comparan los resultados de la cinética a partir de las condiciones del artículo y de las condiciones de equilibrio termodinámico.

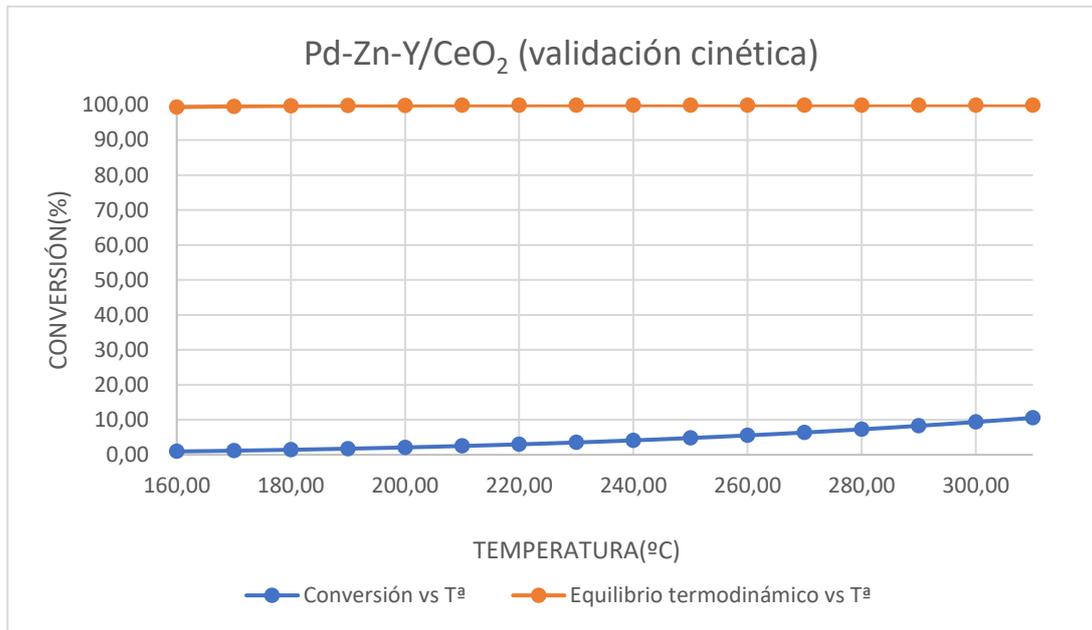


Figura 10. Gráfica de conversión cinética del Pd-Zn-Y/CeO₂ y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo las condiciones de validación de cinética del reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

Se observa claramente que el catalizador utilizado con estas condiciones no es una buena elección debido a que no se alcanza en ningún momento la conversión óptima, pero si concuerda con la conversión expuesta en el artículo, donde se menciona que, a pesar de las altas temperaturas, la conversión será baja.

Posteriormente se puede observar la gráfica correspondiente a la conversión vs Tª del catalizador Pd-Zn-Y/CeO₂ con las condiciones del caso base y comparándolo con las condiciones del equilibrio termodinámico.

Estas condiciones ya han sido mencionadas en el apartado 5.1. y como ya se ha comentado, se van a utilizar las mismas para los tres catalizadores.

Y esta es la gráfica (figura 11) con las condiciones correspondientes al caso base.

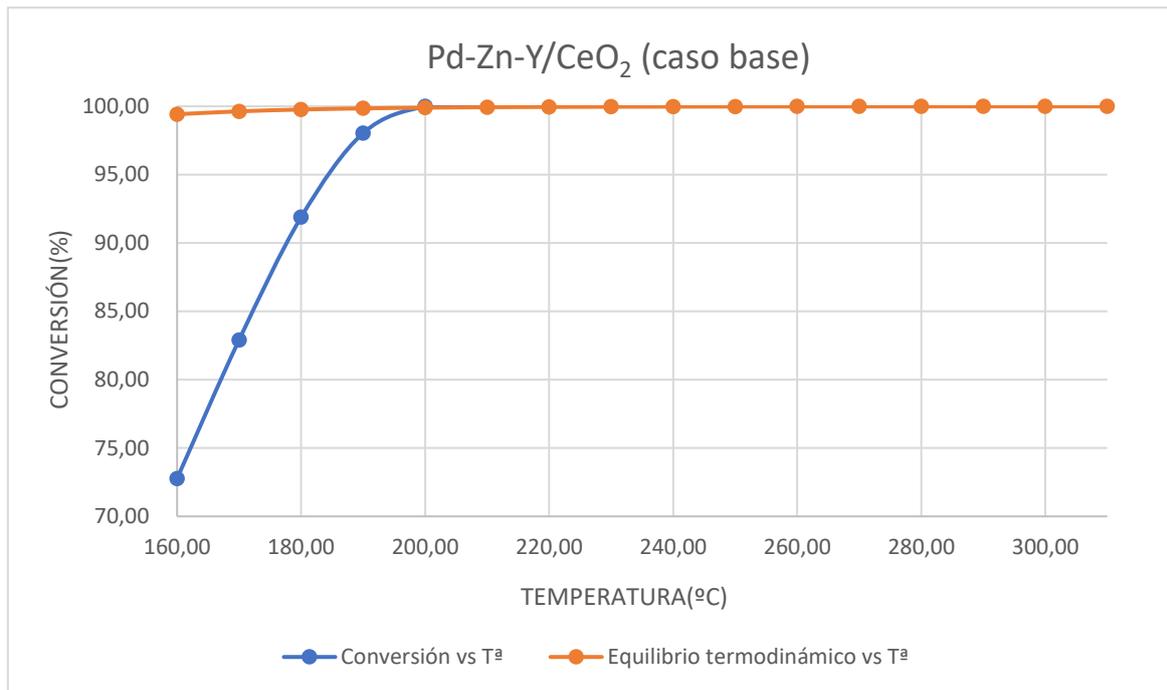


Figura 11. Gráfica de conversión Pd-Zn-Y/CeO₂ y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo las condiciones de caso base de reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

Es en el caso base de este catalizador donde se comprueba que tanto la conversión óptima como la temperatura a la que se alcanza esta conversión (200°C) son válidas, de esta manera no se requiere un gran aporte de calor para obtener la máxima conversión.

5.3 CuZrDyAl

5.3.1. Validación de la cinética seleccionada en la búsqueda bibliográfica

Este catalizador está formado por una mezcla de CuO, ZrO₂, Dy₂O₃ y Al₂O₃ y consta de la siguiente cinética que fue publicada por el artículo¹²:

$$r = k \cdot p_{CH_3OH}^a \cdot p_{H_2O}^b \cdot p_{H_2}^c \cdot p_{CO_2}^d$$

- k= factor pre-exponencial (mol·kgcat⁻¹·s⁻¹)
- Ea= energía de activación (kJ/mol)
- R= constante molar de los gases (8,314472 J/(mol·K))
- T= temperatura (K)
- p= presión parcial (kPa)
- ÓRDENES PARCIALES: a=0,42 y b=0,99.

Y las condiciones mencionadas en el artículo son:

TABLA 6. Condiciones propuestas por el artículo utilizado para el catalizador CuZrDyAl

Longitud del reactor (m)	$3,00e^3$
Diámetro del reactor (m)	$7,25e^3$
Alimentación de metanol (kg/h)	$5,71e^4$
Relación molar agua/metanol	1,5
Rango de temperatura (°C)	160-310

Similar a los catalizadores anteriores en este caso también es necesario modificar la gráfica de verificación de la cinética para poder compararla con la gráfica dada en el artículo:

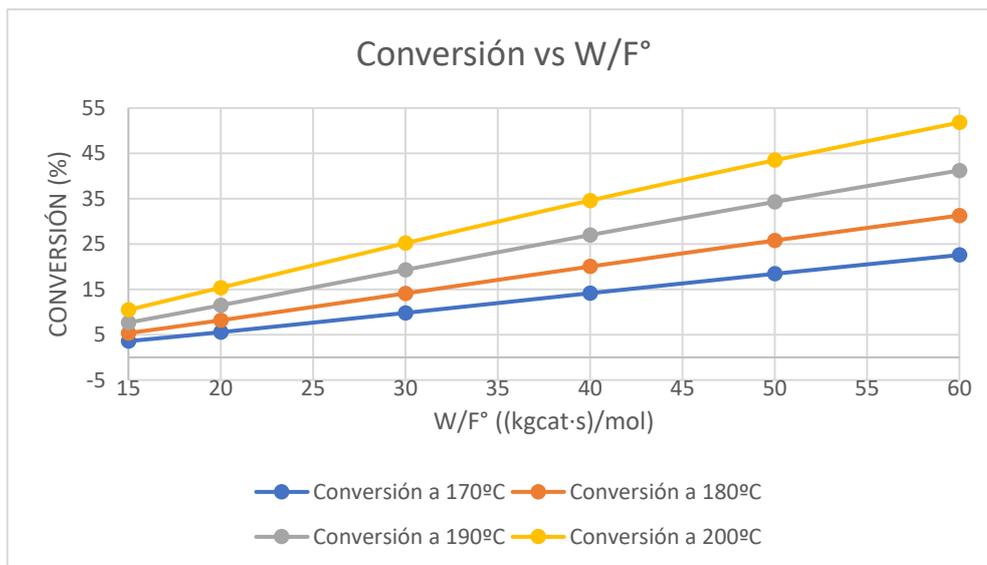


Figura 12. Gráfica de conversión del CuZrDyAl obtenida por simulación en el software AspenOne HYSYS® a las diferentes temperaturas bajo las condiciones de validación de cinética del reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

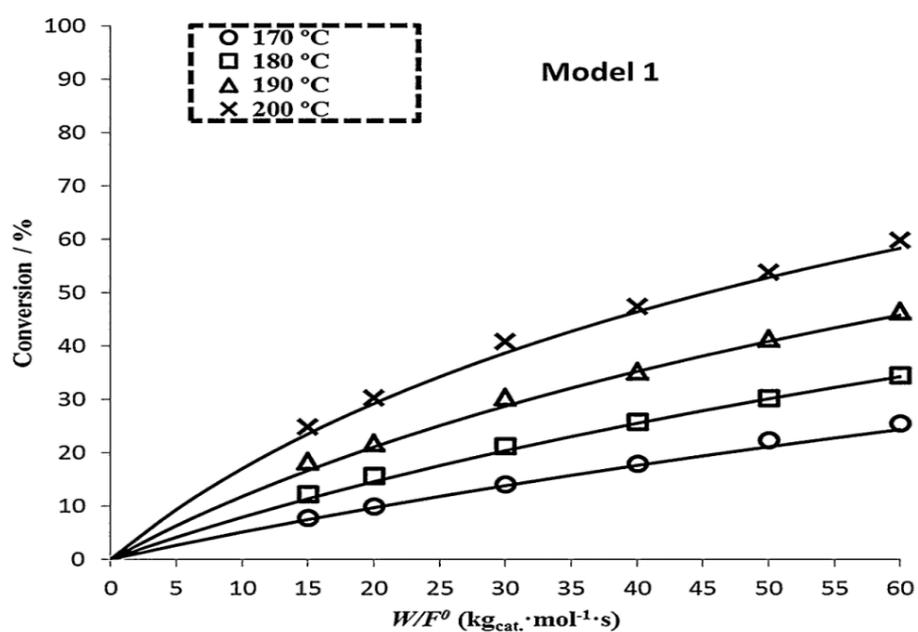


Figura 13. Gráfica adjuntada directamente del artículo.

Observando tanto la figura 12 como la figura 13, se comprueba que los resultados son prácticamente iguales. Por lo tanto, se puede considerar que la cinética está validada para su uso en este trabajo.

5.3.2. Comparación tanto de la validación de la cinética como del caso base con el equilibrio termodinámico

Ahora se van a comparar las cinéticas a partir de las condiciones del artículo y de las condiciones de equilibrio termodinámico (figura 14).

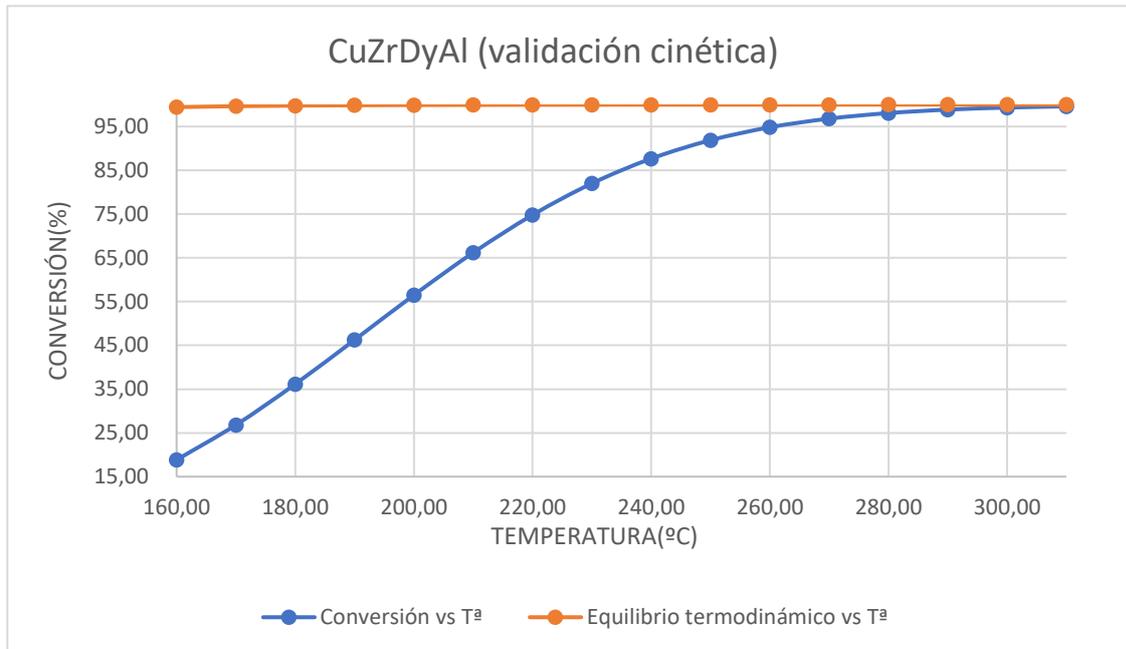


Figura 14. Gráfica de conversión de CuZrDyAl y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo condiciones de verificación cinética de reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

Se puede observar que la conversión óptima se alcanza a altas temperaturas, prácticamente al final del límite máximo del rango de temperatura seleccionado.

Por último, se modifican las condiciones para poder realizar la simulación del catalizador CuZrDyAl en el software AspenOne HYSYS® del caso base planteado anteriormente.

Y esta es la gráfica (figura 15) con las condiciones correspondientes al caso base con las condiciones mencionadas en el apartado 5.1. que como se ha comentado anteriormente son comunes para los tres catalizadores.

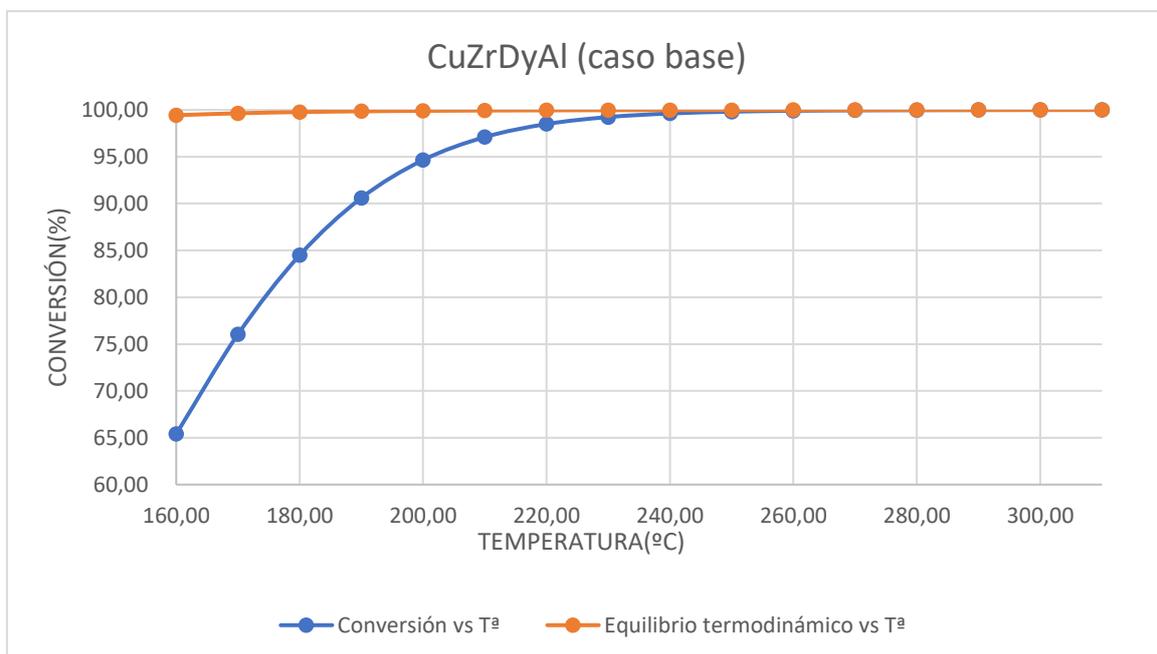


Figura 15. Gráfica de conversión de CuZrDyAl y de equilibrio termodinámico a las diferentes temperaturas del estudio bajo las condiciones de caso base de reactor. [ver anexo B para cálculos detallados].

En este caso base observamos que la conversión óptima se alcanza a menor temperatura (240°C) que, usando las condiciones expuestas en el artículo, esto mismo sucedía al utilizar el catalizador Pd/ZnO. La relación peso de catalizador/flujo de alimentación es algo más favorable en las condiciones del caso base.

5.4 ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

Para poder comparar los tres catalizadores se debe anotar a qué temperatura se alcanza la conversión mínima de 99%:

TABLA 7. Temperaturas óptimas a las que se alcanza la conversión mínima especificada (99%) de los diferentes catalizadores empleados a partir de las condiciones del caso base.

CATALIZADOR	TEMPERATURA (°C)	CONVERSIÓN (%)
Pd/ZnO	210	99,91
Pd-Zn-Y/CeO ₂	200	99,99
CuZrDyAl	230	99,24

Los resultados obtenidos en esta tabla demuestran que el mejor catalizador para nuestro estudio es Pd-Zn-Y/CeO₂, ya que, aunque la conversión, al utilizar las condiciones dictadas por el artículo para validar la cinética, es muy pequeña, vemos que usando las condiciones del caso base, la conversión óptima es alcanzada a la menor temperatura respecto al resto de catalizadores.

En todo caso, se puede apreciar que las diferencias entre los tres catalizadores son pequeñas y que cualquiera de ellos podría ser empleado en un reactor industrial de reformado catalítico de metanol con vapor de agua.

Es posible realizar otras gráficas para saber cuál es el catalizador más favorable, como es el caso del siguiente apartado. Dado que el único producto que tiene hidrógeno es el H_2 , la selectividad a hidrógeno será muy próxima a 1. Por esta razón, el rendimiento a hidrógeno debería salir muy similar a la conversión, y va a ser el parámetro más importante a tener en cuenta. En cuanto a la selectividad a CO, debería obtenerse poco CO a bajas temperaturas (debido a que el producto principal y, por lo tanto, con el que más selectividad se debería obtener es CO_2). En conclusión, cuanto mayor rendimiento H_2 y menor selectividad a CO, más favorable será el catalizador.

5.4.1. Conversión vs T^a

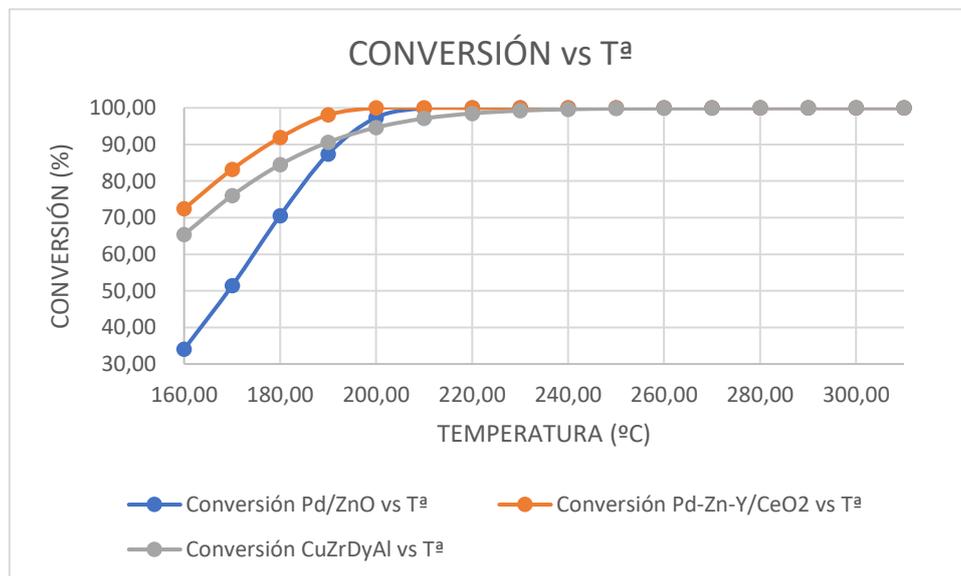


Figura 16. Gráfica de conversión de metanol de los tres catalizadores a las distintas temperaturas del estudio bajo las condiciones del caso base [ver anexo B para cálculos detallados].

Esta gráfica sirve para comparar la conversión vs T^a de los distintos catalizadores y para visualizar la Tabla 7 que ha sido mostrada anteriormente, en este caso, se observa que la conversión más baja respecto a la temperatura ocurre utilizando el catalizador Pd/ZnO, y como ya ha sido comentado anteriormente, se ve que la conversión mínima especificada (99%) se obtiene a la menor temperatura posible con el catalizador Pd-Zn-Y/CeO₂. Por lo tanto, este es el catalizador más óptimo hasta el momento.

5.4.2. Selectividad a CO vs Tª

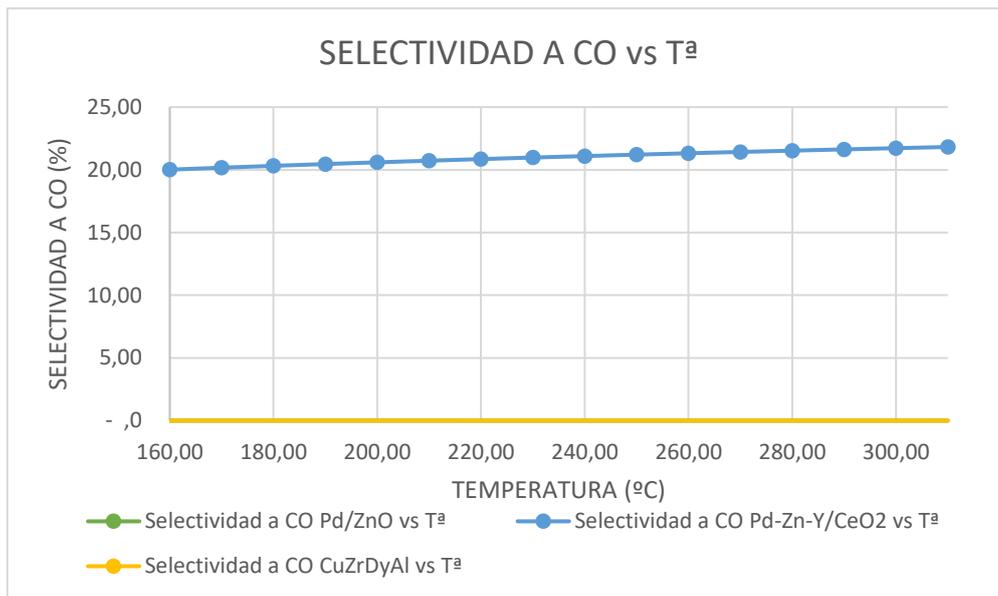


Figura 17. Gráfica de selectividad a CO de los tres catalizadores a las distintas temperaturas del estudio bajo las condiciones del caso base [ver anexo B para cálculos detallados].

Como ya se ha comentado anteriormente, el catalizador más favorable será el que menor selectividad a CO y mayor rendimiento a H₂ tenga, teniendo en cuenta también la conversión que debería obtenerse prácticamente igual que el rendimiento a H₂.

En cuanto a la selectividad a CO, se observa que es mínima para los catalizadores CuZrDyAl y Pd/ZnO, pero se va a realizar la última gráfica de rendimiento H₂ vs Tª para determinar cuál será el catalizador más favorable en este proyecto.

Por último, los resultados obtenidos para estos dos catalizadores (CuZrDyAl y Pd/ZnO) son muy próximos a cero, y por esta razón, no se ve bien en la figura 17 adjuntada.

5.4.3. Rendimiento de H₂ vs T^a

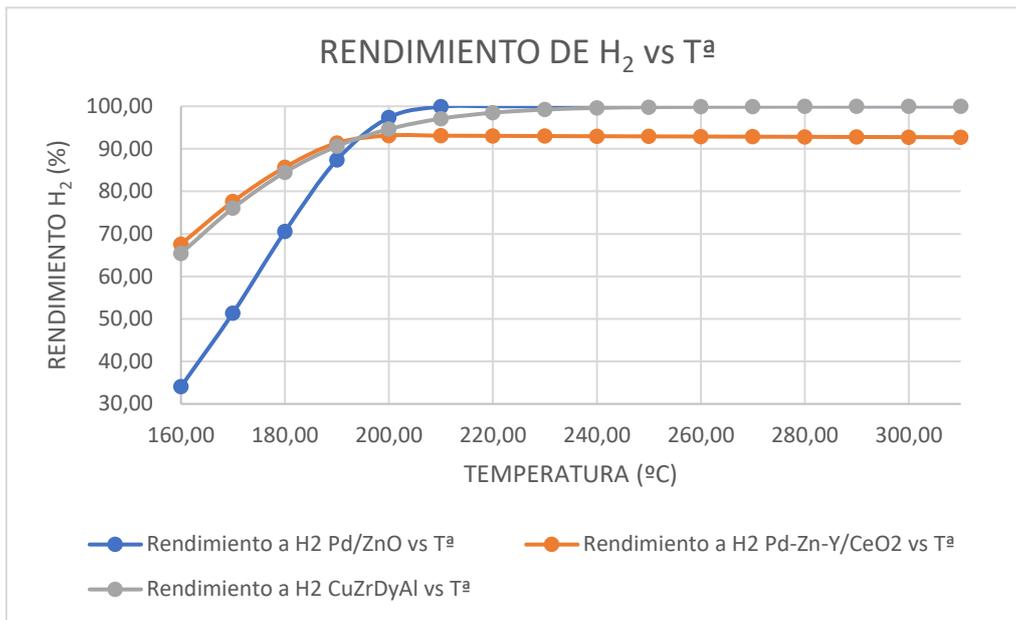


Figura 18. Gráfica de rendimiento de H₂ de los tres catalizadores a las distintas temperaturas del estudio bajo las condiciones del caso base [ver anexo B para cálculos detallados].

Se observa que los datos obtenidos son prácticamente iguales a los de conversión vs T^a.

Después de realizar estas tres gráficas para los tres catalizadores, se puede comprobar que, aunque el catalizador Pd-Zn-Y/CeO₂ no es altamente favorable en cuanto a selectividad a CO vs T^a, es el más favorable tanto en las gráficas de conversión vs T^a como en rendimiento a H₂ vs T^a a temperaturas bajas. Es importante recalcar que cuanto más baja sea la temperatura de reacción menor gasto energético se necesitará, puesto que la reacción es endotérmica. Por lo tanto, como ya ha sido comentado anteriormente, el catalizador utilizado en este proyecto será Pd-Zn-Y/CeO₂.

5.5 DISEÑO DEL REACTOR

Uno de los objetivos del proyecto es diseñar un reactor y estas son las dimensiones propuestas anteriormente:

Longitud del reactor (m)	0,1
Diámetro del reactor (cm)	0,5
Volumen (m ³)	1,96·e ⁻⁶

Con este volumen de reactor y con una temperatura de 200°C (temperatura a la que se alcanza la conversión mínima requerida), se consigue una producción de hidrógeno de 0,043 kmoles/h y 0,774 kg/h para el catalizador seleccionado (Pd-Zn-Y/CeO₂).

Usando la referencia del trabajo fin de grado de un compañero¹³ se obtiene 1kWh con 66,2 gH₂/h que alimentaba la pila de combustible tipo PEM, entonces:

$$66,2g/h \rightarrow 1kWh$$

$$774 g/h \rightarrow x$$

$$x = 11,69 kWh$$

Por tanto, con este reactor y una alimentación suficiente de biometanol, se podría conseguir producir hidrógeno suficiente para alimentar una pila tipo PEM para producir más de 11kW de potencia eléctrica.

6 CONCLUSIÓN

Todavía queda mucha investigación para cambiar los sistemas de generación de energía por otros más sostenibles, pero este proyecto implica un paso más en el desarrollo de nuevas tecnologías centradas en un uso sostenible de los recursos para que el progreso sea compatible con el respeto al medio ambiente.

Para empezar, conseguir un catalizador que tenga la capacidad de reducir costes sin alterar rendimiento y conversión, es un paso fundamental en el proyecto que se ha seguido. Y una vez que se consigue el catalizador adecuado, es necesario seleccionar muy bien las condiciones de operación a utilizar.

Así, el reactor diseñado tiene una producción de H_2 de 0,774 kg/h, que permite producir electricidad en una pila de tipo PEM con una potencia de 11.69 kWh.

Además, el hidrógeno es fundamental si queremos fomentar un medio ambiente sostenible, debido a que es un combustible que puede ser obtenido a partir de fuentes totalmente renovables. Por esta razón, hay que apostar por él y en este proyecto se utiliza el biometanol para ello. Aunque este último combustible es un alcohol contaminante, puesto que tiene carbono en su constitución, se obtiene a partir de biomasa, que es totalmente renovable.

A día de hoy, el sistema que se ha llevado a cabo todavía tiene muchas limitaciones y desventajas, pero tiene las características necesarias para ser un proyecto medioambientalmente sostenible, que es el objetivo principal que se ha buscado.

BIBLIOGRAFÍA

- (1) *Ventajas e inconvenientes del hidrógeno como combustible alternativo*. [www.nationalgeographic.com.es. https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/ventajas-e-inconvenientes-hidrogeno-como-combustible-alternativo_14897](https://www.nationalgeographic.com.es/ciencia/ventajas-e-inconvenientes-hidrogeno-como-combustible-alternativo_14897) (consultado 2023-08-29).
- (2) *Hoja_de_ruta_del_hidrogeno.Pdf*. https://energia.gob.es/es-es/Novedades/Documents/hoja_de_ruta_del_hidrogeno.pdf (consultado 2023-08-29).
- (3) *Agencias. Alemania se sumará al H2Med junto a España, Francia y Portugal*. [elconfidencial.com. https://www.elconfidencial.com/economia/2023-01-22/alemania-h2med-espana-francia-portugal_3562079/](https://www.elconfidencial.com/economia/2023-01-22/alemania-h2med-espana-francia-portugal_3562079/) (consultado 2023-08-29).
- (4) *Zaragoza será “Ciudad Residuos Cero” en 2030*. <https://hidrogeno-verde.es/zaragoza-residuos-cero/> (consultado 2023-08-29).
- (5) *Energética del hidrógeno. Contexto, Estado Actual y Perspectivas de Futuro*. Universidad de Sevilla. Badía, C. F.-B. 2.5 Comparación entre las distintas alternativas.
- (6) *La obtención de metanol a partir de renovables es aún un desafío | RETEMA*. <https://www.retema.es/actualidad/la-obtencion-de-metanol-partir-de-renovables-es-aun-un-desafio> (consultado 2023-08-29).
- (7) *Metanol verde: el combustible para acelerar la transición energética del transporte marítimo - Iberdrola*. <https://www.iberdrola.com/conocenos/nuestra-actividad/hidrogeno-verde/metanol-verde> (consultado 2023-08-29).
- (8) Zhang F., Shi Y., Yang L. and Du X. Kinetics for hydrogen production by methanol steam reforming in fluidized bed reactor. *Science Bulletin*, **2016**, *61*, 401-405. <https://login.cuarzo.unizar.es:9443/login?url=https://www.sciencedirect.com%2fscience%2farticle%2fpii%2fS2095927316301797> (consultado 2023-08-30).
- (9) Li Y., Lin W., Yu L., Hao Z. and Mai R. Kinetics of methanol steam reforming over COPZr-2. *Journal of Natural Gas Chemistry*. **2008**, *17*, 171-174. <https://login.cuarzo.unizar.es:9443/login?url=https://www.sciencedirect.com%2fscience%2farticle%2fpii%2fS1003995308600468> (consultado 2023-08-30).
- (10) Cao C., Xia G., Holladay J., Jones E. and Wang J., Kinetic studies of methanol steam reforming over Pd/ZnO catalyst using a microchannel reactor. *Applied Catalysis A: General*. **2004**, *262*, 19-29. <https://login.cuarzo.unizar.es:9443/login?url=https://www.sciencedirect.com%2fscience%2farticle%2fpii%2fS0926860X03010032> (consultado 2023-08-29).
- (11) Ilinich, O. M.; Liu, Y.; Waterman, E. M.; Farrauto, R. J. Kinetics of Methanol Steam Reforming with a Pd–Zn–Y/CeO₂ Catalyst under Realistic Operating Conditions of a Portable Reformer in Fuel Cell Applications. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2013**, *52* (2), 638–644. <https://doi.org/10.1021/ie301606w>.
- (12) Silva, H.; Mateos-Pedrero, C.; Ribeirinha, P.; Boaventura, M.; Mendes, A. Low-Temperature Methanol Steam Reforming Kinetics over a Novel CuZrDyAl Catalyst. *React. Kinet. Mech. Catal.* **2015**, *115* (1), 321–339. <https://doi.org/10.1007/s11144-015-0846-z>.
- (13) Trabajo fin de grado Raúl Ciércoles. TAZ-TFG-2022-2913.Pdf. <https://zagan.unizar.es/record/125189/files/TAZ-TFG-2022-2913.pdf> (consultado 2023-09-02).

ANEXOS

ANEXO A

VALIDACIÓN DE CINÉTICAS

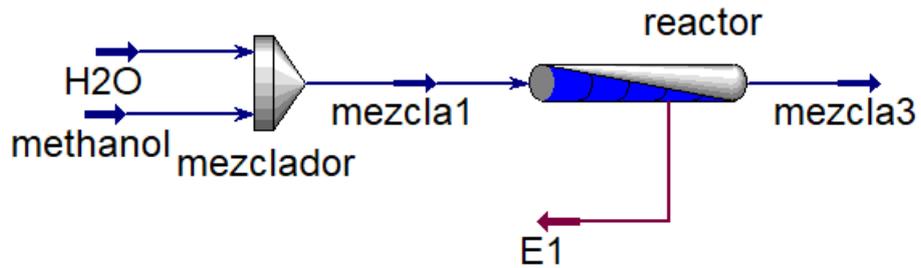


FIGURA A.1. Esquema de la simulación realizada con Aspen HYSYS para validar la cinética del reformado con vapor de metanol sobre catalizador de Pd/ZnO utilizando un reactor de microcanal

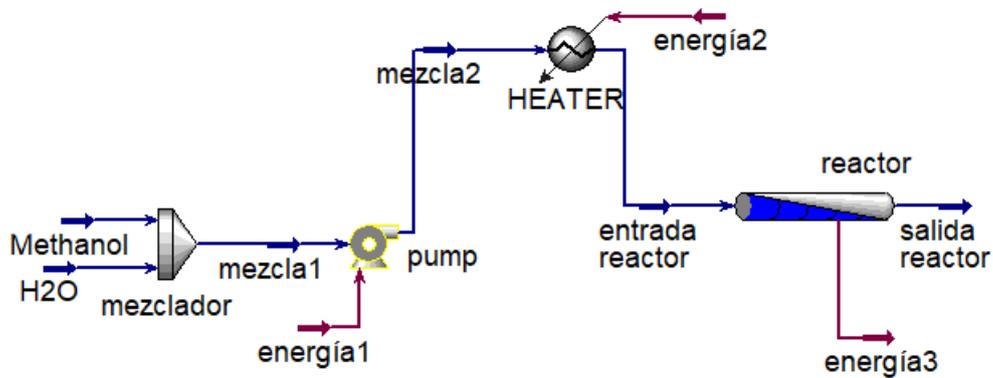


FIGURA A.2. Simulación realizada con Aspen HYSYS para validar la cinética del reformado de vapor de metanol con un catalizador Pd-Zn-Y/CeO2 bajo condiciones operativas realistas de un reformador portátil en aplicaciones de pilas de combustible.

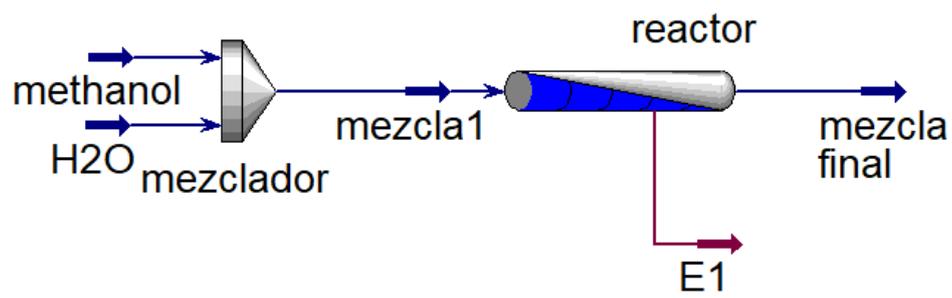


FIGURA A.3. Simulación realizada con Aspen HYSYS para validar la cinética del reformado con vapor de metanol a baja temperatura sobre un nuevo catalizador CuZrDyAl

ANEXO B

CÁLCULOS DE LAS REACCIONES

TABLA B-1. Pd/ZnO (datos de la gráfica modificada para comparar con la gráfica del artículo)

Temperatura (°C)	Conversión (%) a 4,53 gmetanol/gcat/h	Conversión (%) a 9,06 gmetanol/gcat/h	Conversión (%) a 13,589 gmetanol/gcat/h	Conversión (%) a 18,119 gmetanol/gcat/h
150	2,236854998	1,128773236	0,75502923	0,567370951
170	7,231788229	3,725446476	2,509875137	1,892950698
190	19,6835935	10,66032923	7,317013288	5,572572581
210	43,33763942	25,77826317	18,39183979	14,31010611
230	74,29157648	50,93042236	38,72066128	31,27461696
250	96,26890652	79,88451029	66,42521434	56,64610035
270	100	97,60184603	90,80645289	83,22742957

TABLA B-2. Pd-Zn-Y/CeO₂ (datos de la gráfica modificada para comparar con la gráfica del artículo)

Temperatura(°C)	TEMPERATURA (K)	1000/T (K)	LN CONVERSIÓN
160,00	433,15	2,31	-6,954964305
170,00	443,15	2,26	-6,74231667
180,00	453,15	2,21	-6,539172467
190,00	463,15	2,16	-6,34493575
200,00	473,15	2,11	-6,15906245
210,00	483,15	2,07	-5,981055018
220,00	493,15	2,03	-5,810457721
230,00	503,15	1,99	-5,646858242
240,00	513,15	1,95	-5,489855208
250,00	523,15	1,91	-5,339112538
260,00	533,15	1,88	-5,194298949
270,00	543,15	1,84	-5,055114186
280,00	553,15	1,81	-4,921280971
290,00	563,15	1,78	-4,792542963
300,00	573,15	1,74	-4,668662922
310,00	583,15	1,71	-4,549421215

TABLA B-3. CuZrDyAl (datos de la gráfica modificada para comparar con la gráfica del artículo)

W/F° ((kgcat·s)/mol)	Conversión (%) a 170°C	Conversión (%) a 180°C	Conversión (%) a 190°C	Conversión (%) a 200°C
15	2,236854998	1,128773236	0,75502923	0,567370951
20	7,231788229	3,725446476	2,509875137	1,892950698
30	19,6835935	10,66032923	7,317013288	5,572572581
40	43,33763942	25,77826317	18,39183979	14,31010611
50	74,29157648	50,93042236	38,72066128	31,27461696
60	96,26890652	79,88451029	66,42521434	56,64610035

TABLA B-4. Pd/ZnO (verificación cinética)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador Pd/ZnO	Conversión de equilibrio (%)
160,00	1,89	99,46
170,00	3,39	99,55
180,00	5,85	99,61
190,00	9,74	99,67
200,00	15,58	99,72
210,00	23,79	99,75
220,00	34,63	99,79
230,00	47,80	99,81
240,00	62,50	99,84
250,00	76,74	99,86
260,00	88,72	99,87
270,00	96,41	99,89
280,00	99,50	99,90
290,00	99,99	99,91
300,00	100,00	99,92
310,00	100,00	99,93

TABLA B-5. Pd/ZnO (caso base)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador Pd/ZnO	Conversión de equilibrio (%)
160,00	34,05	99,46
170,00	51,38	99,55
180,00	70,55	99,61
190,00	87,40	99,67
200,00	97,35	99,72
210,00	99,91	99,75
220,00	100,00	99,79
230,00	100,00	99,81
240,00	100,00	99,84
250,00	100,00	99,86
260,00	100,00	99,87
270,00	100,00	99,89
280,00	100,00	99,90
290,00	100,00	99,91
300,00	100,00	99,92
310,00	100,00	99,93

TABLA B-6. Pd-Zn-Y/CeO₂ (verificación cinética)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador Pd-Zn-Y/CeO ₂	Conversión de equilibrio (%)
160,00	0,95	99,42
170,00	1,18	99,63
180,00	1,45	99,76
190,00	1,76	99,85
200,00	2,11	99,90
210,00	2,53	99,93
220,00	3,00	99,95
230,00	3,53	99,97
240,00	4,13	99,98
250,00	4,80	99,99
260,00	5,55	99,99
270,00	6,38	99,99
280,00	7,29	99,99
290,00	8,29	100,00
300,00	9,38	100,00
310,00	10,57	100,00

TABLA B-7. Pd-Zn-Y/CeO₂ (caso base)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador Pd-Zn-Y/CeO ₂	Conversión de equilibrio (%)
160,00	72,78	99,42
170,00	82,91	99,63
180,00	91,89	99,76
190,00	98,04	99,85
200,00	99,99	99,90
210,00	100,00	99,93
220,00	100,00	99,95
230,00	100,00	99,97
240,00	100,00	99,98
250,00	100,00	99,99
260,00	100,00	99,99
270,00	100,00	99,99
280,00	100,00	99,99
290,00	100,00	100,00
300,00	100,00	100,00
310,00	100,00	100,00

TABLA B-8. CuZrDyAl (verificación cinética)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador CuZrDyAl	Conversión de equilibrio (%)
160,00	18,84	99,43
170,00	26,83	99,64
180,00	36,15	99,77
190,00	46,26	99,85
200,00	56,49	99,90
210,00	66,18	99,93
220,00	74,79	99,96
230,00	81,99	99,97
240,00	87,66	99,98
250,00	91,86	99,99
260,00	94,82	99,99
270,00	96,80	99,99
280,00	98,07	99,99
290,00	98,85	100,00
300,00	99,33	100,00
310,00	99,61	100,00

TABLA B-9. CuZrDyAl (caso base)

Temperatura(°C)	Conversión obtenida usando la cinética con catalizador CuZrDyAl	Conversión de equilibrio (%)
160,00	65,40	99,43
170,00	76,04	99,64
180,00	84,49	99,77
190,00	90,61	99,85
200,00	94,65	99,90
210,00	97,10	99,93
220,00	98,49	99,96
230,00	99,24	99,97
240,00	99,62	99,98
250,00	99,81	99,99
260,00	99,91	99,99
270,00	99,95	99,99
280,00	99,98	99,99
290,00	99,99	100,00
300,00	100,00	100,00
310,00	100,00	100,00

TABLA B-10. Pd/ZnO. Comparación de la conversión CH₃OH, rendimiento H₂ y selectividad a CO a las diferentes temperaturas y con las condiciones del caso base.

TEMPERATURA (°C)	CONVERSION METANOL (%)	SELECTIVIDAD A CO (%)	RENDIMIENTO H2 (%)
160,00	34,05	0,00	34,05
170,00	51,38	0,00	51,38
180,00	70,55	0,00	70,55
190,00	87,40	0,00	87,40
200,00	97,35	0,00	97,35
210,00	99,91	0,00	99,91
220,00	100,00	0,00	100,00
230,00	100,00	0,00	100,00
240,00	100,00	0,00	100,00
250,00	100,00	0,00	100,00
260,00	100,00	0,00	100,00
270,00	100,00	0,00	100,00
280,00	100,00	0,00	100,00
290,00	100,00	0,00	100,00
300,00	100,00	0,00	100,00
310,00	100,00	0,00	100,00

TABLA B-11. Pd-Zn-Y/CeO₂. Comparación de la conversión CH₃OH, rendimiento H₂ y selectividad a CO a las diferentes temperaturas y con las condiciones del caso base.

TEMPERATURA (°C)	CONVERSION METANOL (%)	SELECTIVIDAD A CO (%)	RENDIMIENTO H2 (%)
160,00	72,43	20,01	67,59
170,00	83,20	20,17	77,60
180,00	91,89	20,32	85,67
190,00	98,06	20,46	91,38
200,00	100,00	20,59	93,13
210,00	100,00	20,72	93,09
220,00	100,00	20,85	93,05
230,00	100,00	20,98	93,01
240,00	100,00	21,09	92,97
250,00	100,00	21,21	92,93
260,00	100,00	21,32	92,89
270,00	100,00	21,42	92,86
280,00	100,00	21,53	92,82
290,00	100,00	21,63	92,79
300,00	100,00	21,72	92,76
310,00	100,00	21,82	92,73

TABLA B-12. CuZrDyAl. Comparación de la conversión CH₃OH, rendimiento H₂ y selectividad a CO a las diferentes temperaturas y con las condiciones del caso base.

TEMPERATURA (°C)	CONVERSION METANOL (%)	SELECTIVIDAD A CO (%)	RENDIMIENTO H2 (%)
160,00	65,40	0,00	65,40
170,00	76,04	0,00	76,04
180,00	84,49	0,00	84,49
190,00	90,61	0,00	90,61
200,00	94,65	0,00	94,65
210,00	97,10	0,00	97,10
220,00	98,49	0,00	98,49
230,00	99,23	0,00	99,24
240,00	99,62	0,00	99,62
250,00	99,81	0,00	99,81
260,00	99,91	0,00	99,91
270,00	99,95	0,00	99,95
280,00	99,98	0,00	99,98
290,00	99,99	0,00	99,99
300,00	100,00	0,00	100,00
310,00	100,00	0,00	100,00