



EL PROYECTO INSILICO ABORDA EL DISEÑO COMPUTACIONAL DE CATALIZADORES BIMETÁLICOS GUIADOS POR APRENDIZAJE AUTOMÁTICO CON APLICACIÓN A LA EPOXIDACIÓN DIRECTA DE PROPILENO Y A LA GENERACIÓN DE HIDRÓGENO VERDE

OBJETIVO

En un mundo donde la sostenibilidad y la eficiencia energética son de máxima importancia, REPSOL S.A. está comprometida con el desarrollo de las fuentes de energía renovables y de reducción de emisiones contaminantes mediante el uso de tecnologías avanzadas. En el proyecto INSILICO, cofinanciado por CDTI y FEDER, se pretende no solo abordar estos desafíos globales sino también colocar a REPSOL S.A. a la vanguardia de la tecnología industrial mediante el desarrollo de catalizadores eficientes y sostenibles.

El proyecto está enfocado a una apuesta por el uso de nuevas metodologías basadas en para abordar dos procesos críticos:

- **Producción de hidrógeno verde**

Pese a que hay tecnologías muy avanzadas para la producción de hidrógeno a partir de la electrólisis del agua, todavía quedan muchos retos por abordar para que la tecnología gane eficiencia escala industrial e impacto ambiental. Entre otros retos, se encuentra el desarrollo de catalizadores y membranas para utilizar agua no desionizada como materia prima en la generación de hidrógeno llegando al extremo de usar directamente agua de mar.

- **Epoxidación directa de propileno.**

Existen reacciones químicas que requieren de nuevos catalizadores para alcanzar un sistema más eficiente de producción, es el caso de la producción de óxido de propileno. Actualmente, las rutas comerciales de obtención tienen productos secundarios carentes de un alto valor añadido y baja eficiencia. Por este motivo, es necesario optar por una vía de oxidación directa; sin embargo, actualmente no existen catalizadores que permitan conseguir altos rendimientos y eficiencias de este proceso.



REPSOL S.A. en su afán de mejorar la eficiencia de los procesos industriales y propiciar la creación de nuevas vías de obtención de distintos productos, se ha propuesto como objetivo del presente proyecto, desarrollar nuevos diseños de catalizadores bimetalicos guiados por técnicas de machine learning acompañados por una validación en laboratorio. Mediante algoritmos de aprendizaje automático, se busca predecir y modelar el comportamiento de los catalizadores, acelerando el desarrollo de soluciones.

LUGAR DE EJECUCIÓN: Repsol Technology Lab, P.º de Extremadura, Km 18, 28935 Móstoles (Madrid).

PLAZO DE EJECUCIÓN: 12/09/2022 – 09/04/2024

PRESUPUESTO: 1.048.555,00 €

COFINANCIACIÓN: FEDER y CDTI



UNIÓN EUROPEA



Una manera de hacer Europa