



UNIVERSITAT
JAUME·I

Universitat Jaume I

Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales

Grado en Ingeniería Química

DISEÑO DE UN REACTOR DISCONTINUO DE TANQUE AGITADO PARA LA SÍNTESIS DE BUTIRATO DE ETILO

Trabajo Fin de Grado

Autor/a:

Sofía Eugenia Páez-Pumar Brito

Tutor/a:

Ana Gosalbo Nebot

Castellón, septiembre de 2023

Agradecimientos

Deseo expresar mi más profundo agradecimiento, en primer lugar, a mi familia y amigos por su apoyo incondicional a lo largo de mis cuatro años de carrera. Siempre confiaron en mí y me sostuvieron en momentos de incertidumbre y nervios.

También, quiero extender mi gratitud a mi tutora, Ana Gosalbo Nebot, quien dedicó una parte considerable de su tiempo para asistirme en la elaboración de este trabajo y durante mi periodo de prácticas. Su orientación fue fundamental para culminar exitosamente estos años tan significativos para mí. También deseo mencionar a Sergio Mestre, María José Orts, Paco Colomer y Arnaldo Vicente Moreno, quienes siempre estuvieron dispuestos a responder mis dudas y brindarme su apoyo.

No puedo pasar por alto agradecer a todos mis profesores a lo largo de estos años, ya que cada uno de ellos dejó una huella extremadamente positiva en mí y logró transmitirme mucho más que simples conocimientos académicos.

Por otra parte, quiero expresar mi reconocimiento a la empresa Repol, donde realicé mis prácticas, por el constante apoyo y amabilidad que recibí de cada miembro del departamento de I+D. Siempre me proporcionaron facilidades y compartimos momentos inolvidables.

Y finalmente, quiero agradecer a todos mis compañeros de grado, quienes, de una u otra manera, contribuyeron a alcanzar este logro. Tanto en el ámbito académico como en lo personal, cada uno aportó su granito de arena.

0. RESUMEN

Resumen

El propósito de este proyecto consiste en diseñar un reactor capaz de producir 231.262,38 kg de butirato de etilo por carga, el cual tiene diversas aplicaciones en industrias como la alimentaria, donde se utiliza como saborizante artificial en bebidas con sabor a piña o naranja, así como en la industria farmacéutica como disolvente en productos de perfumería y plastificante. Cabe destacar, que el butirato de etilo es un producto químico relativamente económico, lo que amplía aún más su uso.

Para la síntesis de butirato de etilo, se requieren ácido butírico y etanol como reactivos y, además del producto deseado, se obtendrá una pequeña cantidad de agua como subproducto. Dado que se trata de un éster orgánico, se utiliza un catalizador para mejorar la reacción, en este caso, se emplea la resina de intercambio iónico conocida como Amberlyst 15.

El procedimiento se desarrollará de la siguiente manera: en primer lugar, se llevará a cabo la fase de reacción a presión atmosférica, alcanzando un grado de conversión de 0,7. Luego, la resina se separará mediante tamizado, seguido de la recuperación de los reactantes en una columna de rectificación discontinua. Finalmente, se procederá a la eliminación del agua del azeótropo etanol-agua utilizando tamices moleculares. Este proceso se ejecutará de manera secuencial y controlada para obtener los resultados deseados de manera eficiente.

Además de determinar las dimensiones adecuadas del reactor y el agitador, el diseño de este proyecto incluirá una camisa de calefacción que utilizará agua para elevar la temperatura de la mezcla hasta 75°C, así como el diseño de un condensador de serpentín que servirá para refrigerar y condensar los vapores del azeótropo etanol/agua que pueden formarse al estar trabajando con temperaturas cercanas a los 78°C.

Finalmente, este proyecto incluirá un estudio de la viabilidad técnica del diseño, una evaluación del impacto ambiental y la viabilidad económica del mismo.

Resum

El propòsit d'aquest projecte consistix a dissenyar un reactor capacat de produir 231.262,38 kg de butirat d'etil per càrrega, el qual té diverses aplicacions en indústries com l'alimentària, on s'utilitza com a aromatitzant artificial en begudes amb sabor a pinya o taronja, així com en la indústria farmacèutica com a dissolvent en productes de perfumeria i plastificant. Cal destacar que el butirat d'etil és un producte químic relativament econòmic, el que amplia encara més el seu ús.

Per a la síntesi de butirat d'etil, es requereixen àcid butíric i etanol com a reactius i, a més del producte desitjat, s'obtindrà una petita quantitat d'aigua com a subproducte. Donat que es tracta d'un èster orgànic, s'utilitza un catalitzador per millorar la reacció, en aquest cas, s'emplea la resina d'intercanvi iònic coneguda com Amberlyst 15.

El procediment es desenvoluparà de la següent manera: en primer lloc, es durà a terme la fase de reacció a pressió atmosfèrica, assolint un grau de conversió del 0,7. Després, la resina es separarà mitjançant tamitzat, seguit de la recuperació dels reactius en una columna de rectificació discontinua. Finalment, es procedirà a l'eliminació de l'aigua de l'azeòtrop etanol-aigua utilitzant tamisos moleculars. Aquest procés s'executarà de manera seqüencial i controlada per a obtenir els resultats desitjats de manera eficient.

A més de determinar les dimensions adequades del reactor i l'agitador, el disseny d'aquest projecte inclourà una camisa d'escalfament que utilitzarà aigua per elevar la temperatura de la barreja fins a 75°C, així com el disseny d'un condensador de serpenti que servirà per refrigerar i condensar els vapors de l'azeòtrop etanol/aigua que poden formar-se en treballar amb temperatures pròximes als 78°C.

Finalment, aquest projecte inclourà un estudi de la viabilitat tècnica del disseny, una avaluació de l'impacte ambiental i la viabilitat econòmica del mateix.

Summary

The purpose of this project is to design a reactor capable of producing 231,262.38 kg of ethyl butyrate per batch, which has various applications in industries such as the food industry, where it is used as an artificial flavoring in pineapple or orange-flavored beverages, as well as in the pharmaceutical industry as a solvent in perfumery and plasticizer products. It is worth noting that ethyl butyrate is a relatively economical chemical product, further expanding its use.

For the synthesis of ethyl butyrate, butyric acid and ethanol are required as reactants, and in addition to the desired product, a small amount of water will be obtained as a byproduct. Since it is an organic ester, a catalyst is used to enhance the reaction, in this case, the ion-exchange resin known as Amberlyst 15 is employed.

The procedure will be carried out as follows: first, the reaction phase will be conducted at atmospheric pressure, achieving a conversion degree of 0.7. Then, the resin will be separated through sieving, followed by the recovery of the reactants in a discontinuous rectification column. Finally, the removal of water from the ethanol-water azeotrope will be carried out using molecular sieves. This process will be executed sequentially and controlled to efficiently obtain the desired results.

In addition to determining the appropriate dimensions of the reactor and agitator, the design of this project will include a heating jacket that will use water to raise the temperature of the mixture to 75°C, as well as the design of a coil condenser to cool and condense the vapors of the ethanol/water azeotrope that may form when working with temperatures close to 78°C.

Finally, this project will include a technical feasibility study of the design, an assessment of its environmental impact, and its economic viability.

1. ÍNDICE GENERAL

0. Resumen
1. Índice general
2. Memoria
3. Anexos
4. Planos
5. Pliego de condiciones
6. Estado de mediciones
7. Presupuesto

2. MEMORIA

ÍNDICE

1. OBJETO	4
2. ALCANCE	5
3. ANTECEDENTES	7
3.1 El Butirato de Etilo	11
3.2 Síntesis por esterificación: reacción y especies químicas participantes	12
3.3 Consideraciones sobre el diseño del reactor para la esterificación.	14
3.4 Separación de reactantes y productos y reutilización de reactantes.	17
3.5 Secuencia de operación.	21
4. NORMAS Y REFERENCIAS	22
4.1 Disposiciones legales y normas aplicadas	22
4.2 Bibliografía y Webgrafía	23
4.2.1 Bibliografía	23
4.2.2 Webgrafía	24
4.3 Programas empleados	26
5. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS	27
5.1 Abreviaturas generales	27
5.2 Abreviaturas del tanque	28
5.3 Abreviaturas del sistema de agitación	28
5.4 Abreviaturas de las placas deflectoras	29
5.5 Abreviaturas del sistema de calentamiento	29
5.6 Abreviaturas del balance de materia y energía	30
5.7 Abreviaturas del sistema de reflujo	31

6. REQUISITOS DE DISEÑO	32
6.1 Condiciones y características del alimento.....	32
6.2 Condiciones y características de la resina Amberlyst 15	32
7. ANÁLISIS DE SOLUCIONES.....	33
7.1 Elementos del reactor discontinuo de tanque agitado	33
7.1.2 Tipos de tapa en los reactores	35
7.1.3 Sistema de agitación	36
7.1.4 Placas deflectoras	40
7.1.5 Materiales de construcción	40
7.2 Sistema de intercambio de calor	41
7.3. Sistema de reflujo	43
8. RESULTADOS FINALES.....	45
8.1 Diseño del tanque	45
8.2 Diseño de la turbina de palas inclinadas.....	45
8.3 Diseño de las placas deflectoras	46
8.4 Camisa de calentamiento	46
8.5 Balances de materia y energía	47
8.6 Diseño del condensador de serpentín	47
9. PLANIFICACIÓN.....	48
10. ORDEN DE PRIORIDAD DE LOS DOCUMENTOS BÁSICOS.....	49
11. RESUMEN DEL ESTUDIO DE VIABILIDAD ECONÓMICA	50
11.1 Resumen del Presupuesto	50
11.2 Resumen de los ingresos.....	50
11.3 Resumen de los gastos	51
11.2.1 Resumen de gastos directos	51

11.2.2 Resumen gastos indirectos.....	51
11.2.3 Gastos totales	52
11.4 Amortización	52
11.5 Beneficio.....	52
11.5.2 Beneficio neto.....	53
11.6 Flujo de caja.....	53
11.7 Valor Actual Neto (VAN)	53
11.8 Tasa Interna de Rentabilidad (TIR)	53
11.9 Periodo de retorno (PR).....	54
11.10 Resultados.....	54

1. OBJETO

El objeto de este proyecto consiste en diseñar un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado para la síntesis de Butirato de Etilo por la reacción de esterificación, utilizando como materias primas ácido butanoico y etanol.

Se ha seleccionado este compuesto, dado que tiene una amplia gama de aplicaciones en muchos sectores industriales y contribuye a la mejora de la calidad de vida de la sociedad gracias a sus derivados. Además, las reacciones de esterificación entre un ácido y un alcohol presentan características muy similares entre sí y con un mismo sistema de reacción se puede obtener una gran variedad de ésteres valiosos, modificando los compuestos de partida y las condiciones de operación del reactor.

El diseño óptimo del reactor conlleva la selección de una serie de parámetros tales como: el tipo de reactor a utilizar, sus dimensiones, el sistema de agitación y el sistema de calentamiento. Además, el proyecto abarcará la elaboración de los planos del tanque, un estudio del impacto ambiental y un estudio de viabilidad económica, cumpliendo así con el requisito de elaborar un proyecto de carácter profesional, en el ámbito de la asignatura EQ1044 Trabajo Fin de Grado, para obtener el título de Graduado en Ingeniería Química.

2. ALCANCE

En este proyecto se abordará el diseño de un reactor para la síntesis de butirato de etilo, para ser utilizado en una planta multipropósito de fabricación de aromatizantes y saborizantes.

Se procederá únicamente al diseño del reactor y sus sistemas de intercambio de calor, tratando de desarrollar un dispositivo lo más versátil posible. Se seleccionarán las condiciones óptimas de funcionamiento del reactor y las etapas de preparación de materias primas, separación, etc., más apropiadas para desarrollar el producto de forma económicamente rentable, y en lo posible mejorar la seguridad del proceso y disminuir la toxicidad de los compuestos manipulados en la fabricación.

Se estimará que el resto de las infraestructuras, equipamiento (depósitos, bombas, compresores, tamices, columnas de destilación, etc.) y suministros (agua para calefacción o refrigeración, vapor de agua, etc.) que son necesarios para completar el proceso de fabricación del butirato de etilo estarán ya disponibles en la planta y no habrá que diseñarlas o adquirirlas.

Por tanto, el alcance de este proyecto será:

- ✓ Seleccionar la secuencia de operaciones básicas de acondicionamiento de materias primas y separación de productos más adecuada para la obtención de butirato de etilo.
- ✓ Elegir el tipo de reactor más adecuado y las condiciones de operación más apropiadas
- ✓ Diseñar el reactor y el sistema de intercambio de calor
- ✓ Efectuar el análisis económico en función de la inversión realizada únicamente con el reactor (no se incluirá el resto de las infraestructuras, que estarán ya disponibles en planta), incluyendo todos los gastos directos e indirectos asociados al proceso de fabricación, así como los correspondientes a infraestructuras y suministros ya existentes.

El Butirato de Etilo se obtiene a partir de una reacción entre etanol y ácido butírico en un tanque agitado, manteniendo una temperatura de 75 °C.

El Reactor debe cumplir con una serie de requisitos de diseño establecido en los diferentes códigos y normas que regulan la industria, asegurando su funcionamiento óptimo para

obtener el mayor beneficio y el menor coste posible. Estos aspectos serán abordados en detalle en este proyecto.

Además, debido a la naturaleza endotérmica de la reacción, se requerirá seleccionar un sistema de calentamiento para suministrar el calor de reacción a la mezcla, que inicialmente se encuentra a temperatura ambiente.

Será necesario también seleccionar un sistema de agitación que favorezca el correcto calentamiento de la mezcla, así como, que asegure la obtención de un producto homogéneo. El proceso de selección del agitador más adecuado se analizará de forma exhaustiva en este proyecto.

Finalmente se realizarán distintos estudios ambientales y económicos para determinar la viabilidad del diseño de este reactor en un entorno industria real. Estos estudios evaluarán los impactos ambientales del proceso y realizarán un análisis económico para evaluar la rentabilidad del diseño propuesto.

3. ANTECEDENTES

El uso de aditivos en la industria alimentaria es muy antiguo, de hecho, se cree que su origen se remonta al Paleolítico. Al principio se hacía uso de sustancias naturales como vinagre y azafrán, para mejorar ciertos aspectos como la conservación de los alimentos o para conseguir un aspecto más atractivo para su consumo.

Tradicionalmente, los productos relacionados con la alimentación y la higiene se han aromatizado con sabores y olores de flores y frutas naturales, obtenidos por destilación y extracción. La gran demanda actual y el elevado coste de estos aromatizantes y saborizantes naturales, hace tengan que ser sintetizados industrialmente, en lugar de obtenerlos de fuentes naturales.

Los compuestos que proporcionan, en gran parte, su aroma característico a muchas flores y frutos son los ésteres. En la *tabla 2.1* se incluyen algunos de los ésteres y el aroma principal al que contribuyen. Hay que resaltar que el aroma real de las frutas y flores naturales no se debe únicamente a la presencia de un éster, sino de varias sustancias químicas, que incluyen otros ésteres, así como alcoholes y ácidos orgánicos. Por ejemplo, para imitar el sabor de la frambuesa, se requiere una mezcla de nueve ésteres.

Tabla 2.1. Ésteres y el aroma principal al que contribuyen. Fuente: <https://jaespimon.files.wordpress.com/2014/10/los-c3a9steres-sus-olores-y-aplicaciones.pdf>

Fórmula	Nombre común	Aroma
HCOOCH_3	Formiato de metilo	Ron
$\text{HCOOCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	Formiato de isobutilo	Frambuesa
$\text{CH}_3\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	acetato de n-amilo	Plátano
$\text{CH}_3\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	acetato de n-octilo	Naranja
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{COOCH}_2\text{CH}_3$	butirato de etilo	Piña
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$	butirato de butilo	Pino
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{COOCH}_2(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	butirato de pentilo	Durazno

Los ésteres tienen muchos usos industriales, que incluyen disolventes para resina, fabricación de jabones, fabricación de fibras semisintéticas, en cosmética, también como medicamentos anestésicos y antiinflamatorios y por supuesto, como aromatizantes en la fabricación de perfumes y como agentes saborizantes y aromatizantes en las industrias de la confitería y bebidas no alcohólicas.

Los ésteres son moléculas orgánicas derivadas de los ácidos carboxílicos y los alcoholes y, aunque lo ideal sería poder extraerlos a partir de materias primas naturales, la realidad es que en la práctica resulta complejo obtener ésteres derivados de aceite de ballena, cera de carnauba o aceite de jojoba, debido a sus altos costes y la baja disponibilidad en cantidades industriales, así que en la producción industrial se realiza la síntesis química de los ésteres.

Existen distintas rutas para la síntesis industrial de los ésteres, de las cuales aquí se enumeran algunas:

- a) Reacciones entre el *alcohol* y un *cloruro de ácido*, en presencia de un catalizador de carácter básico (dimetilanilina o piridina) que además de catalizar cumple la función de neutralizar el ácido clorhídrico formado en el transcurso de la reacción.



Figura 2. 1. Reacción entre el alcohol y un cloruro de ácido. Fuente: quimicasebas.blogspot.com

- b) Reacciones de *alcoholes con anhídridos de ácidos orgánicos*, que requieren la presencia de catalizadores ácidos, como ácido sulfúrico o de piridina.

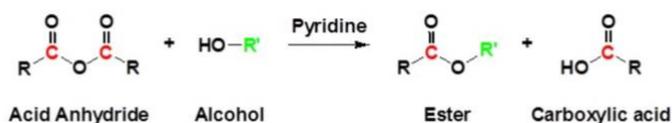


Figura 2. 2. Reacción entre alcoholes y anhídridos de ácidos orgánicos. Fuente: quimicasebas.blogspot.com

- c) Reacciones a partir de *sales de ácidos y haluro de alquilo*. En esta reacción se suele emplear trietilamina como catalizador y conduce a rendimientos muy elevados.



Figura 2. 3. Reacción a partir de sales de ácidos y haluro de alquilo. Fuente: quimicasebas.blogspot.com

d) Reacciones de *alcoholes con ácidos carboxílicos*. Esterificación.

El método más sencillo y habitual para la obtención de ésteres es la reacción entre un alcohol y un ácido carboxílico, en presencia de un catalizador ácido, con formación de agua.

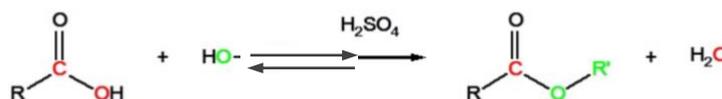


Figura 2. 4. Reacción de alcoholes con ácidos carboxílicos. Fuente: quimicasebas.blogspot.com

La reacción conduce a un equilibrio que puede desplazarse hacia la formación del éster, bien trabajando en exceso de uno de los reactivos, bien eliminando uno de los productos formados, generalmente se elimina el agua por destilación azeotrópica del medio de reacción, sobre todo cuando las especificaciones del proceso requieren la operación equimolar.

Dado que la esterificación es el método de síntesis que se propone en este Trabajo Fin de Grado, se procederá a una descripción más exhaustiva.

La esterificación se lleva a cabo en fase líquida, a una temperatura ligeramente inferior a la de ebullición del alcohol y en presencia de un sistema catalítico. La velocidad de formación del éster depende mucho de cuáles sean el ácido carboxílico y el alcohol que participan en la síntesis. La velocidad de reacción sigue el orden:



y dentro de cada serie, reaccionan más rápido los alcoholes más ligeros que los más pesados. Los compuestos de estructura lineal reaccionan más rápido que los ramificados; la velocidad de esterificación es especialmente lenta si la ramificación está en la posición α .

Los mejores rendimientos en la obtención de ésteres por esta vía se consiguen utilizando catalizadores que pueden ser de varios tipos:

- a) *Catalizadores homogéneos en fase líquida*. Los más utilizados son ácidos minerales fuertes como el sulfúrico y el clorhídrico, aunque presentan algunas desventajas como pueden ser: la alta peligrosidad del ambiente laboral, un medio líquido corrosivo para el reactor, y la dificultad en la separación del catalizador ácido de la

mezcla reactante. Pueden dar lugar también a reacciones paralelas (isomerización, polimerización) y productos secundarios. Estas desventajas se han intentado solventar realizando múltiples investigaciones para sustituir el uso de los catalizadores ácidos homogéneos por catalizadores ácidos sólidos (resinas de intercambio iónico o arcillas, entre otros).

Otros catalizadores homogéneos muy utilizados industrialmente, debido a su naturaleza poco corrosiva, son los ácidos sulfónicos como el benceno sulfónico o p-toluensulfónico. El ácido fosfórico no suele utilizarse, ya que las reacciones son mucho más lentas.

- b) *Resinas ácidas de intercambio iónico.* Presentan algunas ventajas respecto a los catalizadores ácidos homogéneos: eliminan el entorno corrosivo, se eliminan de la reacción en fase líquida por filtración, tienen alta selectividad, permiten su uso prolongado sin generar problemas en su manejo y almacenamiento y los productos obtenidos presentan mayor pureza gracias a la eliminación de reacciones secundarias. Además, existe la posibilidad de utilizarlos en operaciones de lecho fluidizado trabajando en continuo. Sin embargo, presentan el inconveniente de tener un coste elevado.
- c) *Catálisis enzimática.* Las ventajas de las enzimas respecto a los catalizadores convencionales son: alta especificidad y elevados rendimientos (se simplifican los procesos de concentración y purificación del producto), operan en condiciones de temperatura más suaves que los catalizadores convencionales, por lo que el producto presenta mejores propiedades y no sufre degradación en el medio de reacción. Las principales limitaciones en su utilización a nivel industrial es que son relativamente inestables en disolución acuosa (y pierden actividad catalítica), los costes de aislamiento y purificación son altos y la recuperación de la enzima tras la reacción es dificultosa. Para evitar estos inconvenientes, la enzima se utiliza inmovilizada sobre un soporte polimérico.

3.1 El Butirato de Etilo

El butirato de etilo, o de forma sistemática, butanoato de etilo es un éster orgánico que puede obtenerse por esterificación a partir del ácido butírico y el etanol, utilizando un catalizador de los descritos anteriormente.

Este producto tiene múltiples aplicaciones en la industria química, alimentaria y farmacéutica. Principalmente se utiliza como saborizante artificial en alimentos y bebidas, formando parte de muchos aromas como son: la naranja, la piña (principalmente en bebidas alcohólicas), el mango, melocotón, cereza, entre otros. Además, sirve como plastificante en la industria farmacéutica y cosmética y para producir termoplásticos.

Es importante destacar que actualmente se han incrementado los trabajos de investigación en el butirato de etilo porque muchos estudios han concluido que es un anticancerígeno potencial, concretamente como reductor del cáncer de colon. También han sido objeto de estudio sus propiedades en las terapias de hemoglobinopatías y enfermedades gastrointestinales.

Por otro lado, se puede decir que este producto es considerado uno de los productos químicos finos más económicos, lo que aumenta en gran medida su interés por producirlo.

Respecto a las formas de obtención, son numerosas y pueden ser tanto naturales como artificiales.

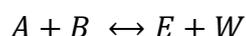
- **Medios de obtención naturales:** el butanoato de etilo se encuentra en forma de éster en los humanos y animales y concretamente se produce por fermentación en el intestino grueso de éstos.
- **Medios de obtención artificiales:** Para convertir un ácido carboxílico en un éster se utiliza principalmente la esterificación.

La esterificación es un método que consiste en sustituir un grupo alcohol (-OH) por un grupo funcional éter (-OR'). Para que el ácido carboxílico experimente directamente la acción nucleofílica se debe aumentar su reactividad introduciendo un catalizador, bien un ácido fuerte en forma de catalizador ácido homogéneo, una resina ácida o una enzima inmovilizada.

En este trabajo se diseñará un reactor para la síntesis de butirato de etilo utilizando como catalizador una resina de intercambio iónico, concretamente la *Amberlyst 15*, ya que según la bibliografía consultada (Singh, N., & Sachan, P. K., 2013), su actividad catalítica es mayor que la de otros catalizadores debido a su elevada superficie y volumen de poros.

3.2 Síntesis por esterificación: reacción y especies químicas participantes

La reacción de esterificación entre el etanol y el ácido butírico se desarrolla con la siguiente estequiometría:



donde *A* representa al ácido butírico, *B* al etanol, *E* al butirato de etilo y *W* al agua. A continuación, se describen las propiedades más importantes de las cuatro especies químicas, así como de la resina *Ambelyst 15*.

Ácido butírico:

El ácido butírico ($C_4H_8O_2$) es un ácido monocarboxílico débil, saturado, de cadena abierta, con un pH entre 5-6. Es un líquido incoloro y con olor fuerte y desagradable, a rancio. Es inflamable, soluble en agua, alcohol y en la mayoría de los disolventes orgánicos. Su peso molecular es de 88 g/mol, tiene una densidad de 964 kg/m³ y el punto de ebullición a presión atmosférica es 163,5°C.

A continuación, se observa en la *figura 2.5* su formulación química:

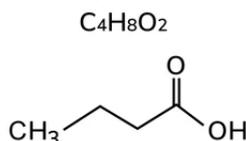


Figura 2.5. Fórmula química del ácido butírico. Fuente: <https://www.shutterstock.com>.

Etanol:

Es un líquido incoloro e inflamable, que se disuelve fácilmente en agua y otros compuestos orgánicos. Su peso molecular es de 46,06 g/mol, tiene una densidad de 789 kg/m³ y un punto de ebullición de 78,4°C. Forma una mezcla azeotrópica con el agua, para una fracción másica de etanol de 0,955, que hierve a 78,2°C.

La presentación es en forma de esferas de tamaño superior a 300 μ m, con estructura macroporosa que permite el acceso de los reactantes en fase líquida o gaseosa a los centros catalíticos H⁺ situados en el interior de la esfera. Las aplicaciones principales son alquilación, esterificación, eterificación, condensación e hidrólisis.

La estructura de la resina Amberlyst 15 se puede observar en la *figura 2.9* y sus principales propiedades se incluyen en la *tabla 2.2.*:



Figura 2.9. Fórmula química Amberlyst 15. Fuente: <https://www.fishersci.pt>.

Tabla 2.2. Propiedades más importantes de la resina Amberlyst 15. Fuente: Singh et al

Propiedad	Valor
Acidez (eq H ⁺ kg ⁻¹)	4,75
Superficie específica (m ² g ⁻¹)	42
Capacidad total de intercambio (eq/kg)	4,70
Volumen de poro (cm ³ g ⁻¹)	0,36
Diámetro medio de poro (Å)	343
Tamaño del grano	
Contenido en finos (<355 μ m)	1.0% máx.
Contenido en gruesos (>1180 μ m)	5.0% máx.
Densidad real (g cm ⁻³)	1,416
Densidad aparente en seco (g cm ⁻³)	0,937
Densidad aparente en húmedo (g cm ⁻³)	1,215
Temperatura máxima de operación (°C)	120

3.3 Consideraciones sobre el diseño del reactor para la esterificación.

Para seleccionar y diseñar el reactor para un proceso químico han de tomarse en consideración los distintos tipos de reactores, y evaluar sus características concretas para decidir cuál es el más apropiado en función de la aplicación y condiciones requeridas.

En primer lugar, los reactores se clasifican por el **modelo de flujo y contacto de la mezcla de reacción**. Los dos modelos ideales son el de mezcla completa (suelen ser reactores de tanque agitado en los que la mezcla en el interior del reactor es perfecta) y el de flujo de

pistón (normalmente en forma de tubo en el que los reactantes avanzan como empujados por un émbolo y no se produce mezcla en el interior del reactor). El modelo de flujo de los reactores reales suele poder describirse como una combinación de estos dos, en los que uno u otro predomina.

La segunda consideración sería el **modo de operación del reactor**: los reactores pueden ser continuos, semicontinuos o discontinuos, dependiendo si la carga del reactor, la reacción química, la descarga del reactor y la limpieza se realizan de forma simultánea o secuencial.

En los *reactores continuos* hay una entrada y una salida continua de materiales y funcionan en estado estacionario, es decir, la composición y las propiedades físicas, tanto en el reactor como en la corriente de producto, no varían con el tiempo. De este tipo son el reactor continuo de tanque agitado (RCTA) y el reactor de flujo de pistón (RFP). Debido a su operación en estado estacionario, los reactores continuos no tienen tiempos muertos de carga, descarga y limpieza, por lo que proporcionan elevadas producciones y requieren poca mano de obra. Sin embargo, son poco versátiles y, por tanto, suelen utilizarse para operaciones a gran escala de un solo producto.

Los *reactores discontinuos* se cargan al inicio y se descargan al final de la operación, y la reacción se lleva a cabo en estado no estacionario, sin entrada ni salida de materiales. Los *reactores semicontinuos* trabajan también en régimen no estacionario y puede haber entrada y/o salida de materiales mientras se lleva a cabo la reacción. En el caso de que el reactor consista en una vasija provista de un agitador y de conducciones para la entrada y salida de los materiales, con un mismo diseño de reactor se puede tener dos formas de operación: si no hay entradas ni salidas se comporta como un reactor discontinuo de tanque agitado (RDTA), y si las hay, opera como un reactor semicontinuo de tanque agitado (RSCTA).

Y, por último, se tiene en cuenta el **modo de operación térmico**. En este apartado, los reactores se clasifican en *adiabáticos* y *no adiabáticos* y estos últimos en *isotermos* y *no isotermos*. Un *reactor adiabático* es aquél que no intercambia energía con el exterior, por lo que la temperatura de la mezcla reactante varía a medida que progresa la reacción química y va liberando o absorbiendo energía. Los *reactores no adiabáticos* tienen dispositivos de intercambio de calor con el exterior (para enfriamiento o calentamiento) y son *isotermos* si

su temperatura permanece constante durante toda la operación, y *no isoterma*, si la temperatura no se mantiene constante.

Considerando la índole de este proyecto, en el que se abordará el diseño de un reactor para sintetizar butirato de etilo en una planta multipropósito de fabricación de aromatizantes y saborizantes, no se tomarán en consideración los reactores continuos para el diseño, debido a su poca versatilidad.

Por el contrario, la versatilidad es una característica muy importante de los reactores discontinuos y semicontinuos, ya que permiten modificar las condiciones de operación para desarrollar diferentes reacciones químicas. Esto ofrece la posibilidad de utilizar el reactor para otros procesos además de la producción de butirato de etilo, sin necesidad de inversiones adicionales en equipos y resulta muy conveniente para su utilización en plantas multipropósito.

Además, estos reactores son ideales para producir pequeñas cantidades de productos, lo que facilita la gestión de la producción, evitando riesgos en la producción a gran escala y permitiendo adaptarse a la demanda. La gran flexibilidad en las condiciones de operación permite ajustar y modificar fácilmente parámetros como la relación de reactivos, temperatura y tiempo de reacción, optimizando así la producción según las necesidades del proceso.

Aunque los reactores discontinuos y semicontinuos pueden tener costes operativos y de mano de obra más elevados por las paradas entre lotes para la carga y la descarga, estos costes son asequibles en comparación con la inversión y los costes de operación de otros reactores.

Teniendo en cuenta estas características de flexibilidad en la producción, capacidad para producir pequeñas cantidades, versatilidad en las reacciones, control de la conversión y la gestión de costes operativos y mano de obra, en este proyecto se diseñará un reactor discontinuo de tanque agitado como mejor opción para producir butirato de etilo (y otras reacciones de esterificación de características similares) en una planta de fabricación multipropósito.

3.4 Separación de reactantes y productos y reutilización de reactantes.

La separación de los reactantes y productos puede efectuarse por destilación discontinua de la mezcla reactante. En la *tabla 2.3* se proporciona la temperatura de ebullición de los componentes del sistema, así como la cantidad de cada uno que se obtendría al final de la reacción para una mezcla de razón molar inicial *ácido butanoico/etanol 1:5* y un grado de conversión de 0,7. Como puede observarse, la diferencia de puntos de ebullición permitirá separar por rectificación el butanoato de etilo de los reactantes no transformados (ácido butanoico y etanol), que serán reutilizados en un nuevo proceso de síntesis.

Antes de proceder a la destilación, dado que la máxima temperatura que soporta la resina es 120°C, hay que separarla del líquido reactante. La separación de la resina puede hacerse físicamente, por tamizado a través de una malla de 150µm, en el proceso de transvase de la mezcla reactante desde el reactor al dispositivo que vaya a utilizarse para la destilación.

Tabla 2.3. Puntos de ebullición de los componentes del sistema y composición de la mezcla reactante a separar por destilación si se parte de un alimento inicial con 5 moles de etanol por mol de ácido butanoico y se alcanza una conversión del 70%. Fuente: elaboración propia.

Componente	c_{j0} (mol/L)	c_j (mol/L)	$m_{\text{componente}}$ (kg/m ³ inicial de mezcla)	T_b a 1 atm (°C)	ΔH_{vap} a T_b (kJ/mol)
Ácido butanoico	2,598	0,779	68,67	163,5	40,45
Etanol	12,990	11,171	513,88	78,4	38,56
Butanoato de etilo	0	1,819	210,95	121,5	35,47
Agua	0	1,819	32,73	100	40,65
Azeótropo	0	13,145	537,72 +8,88(kg agua exceso)	78,2	38,79
Resina	0	0	73	-	-

En la *figura 2.10* se muestran diferentes tipos de destilación: a) destilación simple discontinua, b) simple continua, c) rectificación continua y d) rectificación discontinua. Dado que va a diseñarse un proceso discontinuo de producción, y se va a requerir obtener un producto de elevada pureza, se considera que ***el proceso más adecuado para el presente proyecto es el d) rectificación discontinua.***

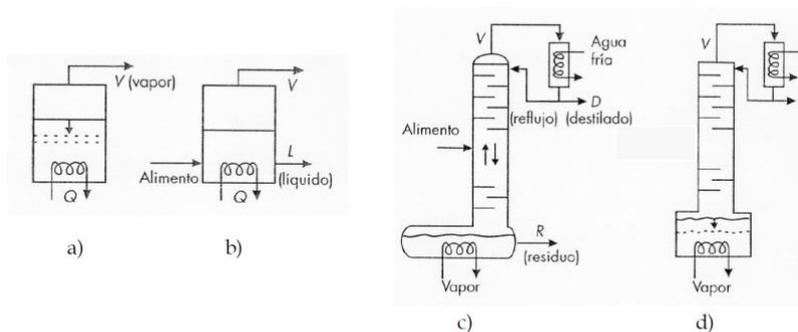


Figura 2.10. Tipos de destilación. Fuente:

<https://www.cartagena99.com/recursos/alumnos/temarios/Guion%20practicass%20Destilacion%20discontinua.pdf>

Los dispositivos de rectificación discontinua suelen consistir en un tanque acumulador, provisto de un hervidor, donde se alimenta la mezcla reactante. En la rectificación discontinua no hay corrientes de entrada (toda la mezcla a destilar se introduce en el tanque al inicio), sino únicamente una corriente de salida, a través de una columna de platos o rellena conectada al tanque, en cuya parte superior hay un condensador y un acumulador del condensado. Parte del condensado se reintroduce a la columna como reflujo, para conseguir un nivel de separación adecuado y el resto se va extrayendo como producto. A medida que la mezcla se va empobreciendo cada vez más en componente volátil, hay que aumentar la relación de reflujo para mantener la calidad de separación o, si se mantiene la relación de reflujo, va empeorando paulatinamente la calidad de separación. El dispositivo se para al alcanzar el grado de separación deseado, en el producto de cabeza o en el producto de cola.

En este caso se fijará una pureza del 98% para el butanoato de etilo. En primer lugar, se extraerá por cabeza de columna la mezcla de etanol y agua, después el butirato de etilo, hasta obtener la pureza fijada y, en el tanque del dispositivo de rectificación, quedará ácido butanoico sin reaccionar (por ser el producto menos volátil) y una pequeña cantidad de butanoato de etilo.

El ácido butanoico del fondo de la columna se recuperará para reutilizarlo en un nuevo ciclo de reacción. Para reutilizar el etanol, será necesario separarlo del agua y tratar de obtener etanol absoluto, ya que la presencia de agua en el medio disminuye la conversión de equilibrio y el rendimiento total del proceso de reacción. Deshidratar el etanol permite reutilizar este reactante, con lo que el proceso es más ecológico y puede ser una buena solución económica puesto que el etanol absoluto es caro.

Para *deshidratar las mezclas etanol/agua*, y conseguir etanol puro existen varias técnicas:

- Destilación por cambio de presión
- Destilación azeotrópica
- Destilación extractiva (con sales, con glicoles, con polímeros y con líquidos iónicos)
- Adsorción con tamices moleculares
- Pervaporación.

Las tres técnicas primeras se basan en modificar las condiciones de operación o la propia mezcla a destilar, a fin de romper o superar el azeótropo. Aunque son tecnologías maduras y bien conocidas, tienen diversos problemas como son el alto consumo energético, la toxicidad de algunos de los solventes o aditivos o la necesidad de eliminarlos después (incluso aunque no sean tóxicos). Por tanto, se han buscado ***soluciones de menor consumo energético y que no requieran de aditivos***, como son la ***adsorción con tamices moleculares y la pervaporación***.

En el trabajo “*Evaluación de técnicas de deshidratación utilizando la simulación*” (Lauzurique-Guerra et al, 2017) se llevó a cabo un estudio de los costes asociados a tres de estas técnicas, introduciendo los diagramas de flujo de los procesos y las condiciones de operación en el programa de simulación de procesos Hysys v3.2. Con el programa se evaluaron los consumos asociados a cada proceso, que se resumen en la *figura 2.11*. También se estudió la rentabilidad de cada tecnología, que se muestra en la *figura 2.12*.

Tal y como se puede observar, el menor consumo de agua y “fuel oil” está determinado por los tamices moleculares. El menor consumo de electricidad viene dado por la pervaporación debido al equipamiento tecnológico reducido. Por otra parte, aunque los parámetros económicos son muy ventajosos para las tres técnicas, los mayores beneficios se obtienen en la adsorción por tamices moleculares, ya que es la técnica con mayor Valor Actual Neto (VAN).

Facilidades auxiliares	Tamices moleculares	Pervaporación	Destilación azeotrópica
Agua de enfriamiento consumida /etanol anhidro producido (m ³ /hL)	0,09	3,56	2,01
Fuel oil consumido/etanol anhidro producido (kg/hL)	0,12	7,76	6,05
Electricidad consumida/etanol anhidro producido (kW/hL)	0,94	0,58	1,11

Figura 2.11. Consumos energéticos. Fuente: Evaluación de técnicas de deshidratación de etanol aplicando la simulación.pdf

Componentes	Tamices moleculares	Pervaporación	Destilación azeotrópica
Valor actual neto (VAN) (\$)	23 594 637,3	8 216 112,6	12 374 017,4
Tasa interna de rendimiento (TIR) (%)	60,9	36,1	49,8
Plazo de recuperación del capital al descontado (PRC) (años)	1,6	2,6	2,0
Retomo sobre la inversión (RSI) (%)	89,1	52,8	72,6
Tasa de rendimiento actualizada (RVAN) (\$/\$)	2,47	1,14	1,86

Figura 2.12. Datos de rentabilidad para cada técnica. Fuente: Evaluación de técnicas de deshidratación de etanol aplicando la simulación.pdf

Teniendo en cuenta, además, que la adsorción con tamices moleculares tiene ventajas como: una alta selectividad, capacidad de adsorción, posibilidad de regeneración y reutilización, amplia aplicabilidad y capacidad de control, se considera que esta técnica es una opción muy eficiente y efectiva para la separación y purificación de productos químicos en diversos procesos de producción. En la *figura 2.13* se incluye el diagrama de flujo utilizado por los autores para la simulación del proceso de eliminación del agua del etanol por adsorción con tamices moleculares. El proceso de separación con tamices moleculares no se diseñará, puesto que se supondrá que la empresa fabricante dispone de él en sus instalaciones, pero los consumos determinados en Lauzurique-Guerra et al se incluirán como costes del proceso en el estudio de viabilidad económica.

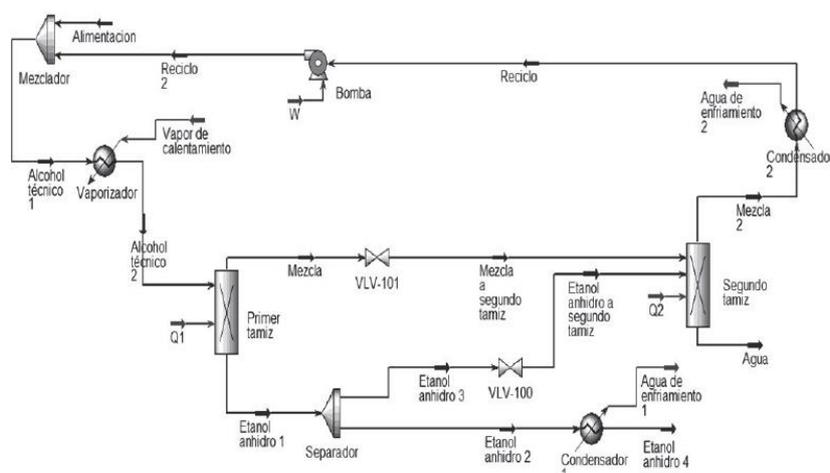


Figura 2.13. Esquema del proceso de adsorción con tamices moleculares para su simulación con el programa comercial Hysys v3.2. Fuente: Lauzurique-Guerra et al.

3.5 Secuencia de operación.

1. *Etapa de reacción:* La reacción se desarrollará a presión atmosférica. Los reactivos, conteniendo 5 moles de etanol por mol de ácido butírico, y la resina Ambelyst 15, se introducen en el reactor a temperatura ambiente y se calientan con agua a (85°C) para obtener una temperatura de operación de (75°C), el agua que se utilizará proviene de otras instalaciones de la planta. La reacción se desarrollará a 75 °C hasta alcanzar una conversión de 0,7.

Al trabajar a una temperatura tan cercana al azeótropo del etanol (78 °C), se implementa un sistema de reflujo para evitar la pérdida de etanol en fase vapor. Este sistema se encarga de enfriar el vapor de etanol y reintroducirlo nuevamente en el proceso. De esta manera, se recupera el etanol y se maximiza la eficiencia del sistema.

2. *Separación de la resina por tamizado* al vaciar el reactor y transvase de la mezcla reactante a un sistema de rectificación discontinua.

3. *Rectificación de la mezcla reactante*, separando secuencialmente una mezcla de etanol/agua, y después el producto (butirato de etilo) mientras el ácido butírico queda en el depósito de la columna de destilación.

4. *Eliminación del agua del azeótropo etanol/agua* por medio de tamices moleculares, para obtener etanol absoluto (exento de agua) y reutilizarlo en el proceso.

4. NORMAS Y REFERENCIAS

4.1 Disposiciones legales y normas aplicadas

Para elaborar este proyecto se han utilizado las normas que se muestran a continuación:

- UNE 157001:2014: Criterios generales para la elaboración formal de los documentos que constituyen un proyecto técnico.
- UNE 82100-13: Magnitudes y unidades.
- UNE-EN ISO 5455:1996: Dibujos técnicos. escalas (ISO 5455:1979).
- UNE 1032:1982: Dibujos técnicos. Principios generales de presentación.
- UNE 9201: Fondos para calderas y depósitos.
- CÓDIGO ASME (American Society Of Mechanical Engineers): Calderas y recipientes a presión.
 - NORMA DIN 28011. Torispherical heads.
 - Real decreto 1627,1997, de 14 de abril, en el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud laboral en los lugares de trabajo.
 - Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad e higiene laboral en los lugares de trabajo.
 - Real Decreto 656/2017, de 23 de junio, por el que se aprueba el reglamento de almacenamiento de productos químicos y sus instrucciones técnicas complementarias.
 - Real Decreto 664/1997, de 12 de mayo, sobre la protección de los trabajadores contra los riesgos relacionados con la exposición a agentes biológicos durante el trabajo.
 - Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
 - Reglamento CLP (Classification, Packaging and Labelling), por el que se regula la clasificación, etiquetado y envasado de sustancias y mezclas químicas en la Unión Europea.
 - Acuerdo ADR, por el que se regula el Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Carretera.

4.2 Bibliografía y Webgrafía

4.2.1 Bibliografía

- [1] Bafhli, H. *Modeling and Simulation of Thermal Transfer in Batch Reactor*. Journal of Applied Sciences, 6 (6), 1327-1331, 2006.
- [2] Edward L. Paul., Victor A. Atiemo-Obeng., Suzanne M. Kresta. *Handbook of industrial mixing*. Science and practice. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, 2004
- [3] Goldberg, I., & Rokem, J.S. *Organic and fatty acid production, microbial*. Encyclopedia of microbiology, 421-442, 2009.
- [4] James R. Couper, W. Roy Penney, James R. Fair, Stanley M. Walas. *Chemical process Equipment. Selection and Design*. Butterworth-Heinemann, Elsevier, Third edition, 2012.
- [5] R.K. Sinnott. *Chemical Engineering Design Principles, Practice and economics of Plants and Process Design*. Butterworth Heinemann, Elsevier, Third edition, 2022.
- [6] Robert W. Serth. *Process Heat Transfer. Principles and applications*. Elsevier Science & Technology Books, 2007.
- [7] Rodriguez-Nogales, J. M., Roura, E., & Contreras, E. *Biosynthesis of ethyl butyrate using immobilized lipase: a statistical approach*. Process Biochemistry 40.1, 63-68, 2005.
- [8] Sadik Kakac, Hongtan Liu. *Heat Exchangers. Selection, Rating and Thermal Design*. CRC Press, 2020.
- [9] Singh, N., & Sachan, P. K. *Kinetic study of catalytic esterification of butyric acid and ethanol over Amberlyst 15*. International Scholarly Research Notices, 2013.
- [10] Xu, Z., & Jiang, L. *Butyric Acid*, Comprehensive biotechnology, 207-215, 2011.
- [11] Yunus A. Cengel, Afshin J. Ghajar. *Heat and Mass Transfer. Fundamentals & Applications*. Mc Graw Hill Education, London 2003.
- [12] D. Q. Kern, *Process Heat Transfer*, McGraw-Hill, London, 1950.

[13] Lauzurique-Guerra, Y., Zumalacárregui-de Cárdenas, L., Pérez-Ones, O., & Molinarivero, G. *Evaluación de técnicas de deshidratación de etanol aplicando la simulación*. Dyna, 84.200, 185-192, 2017.

[14] Grau Vilalta, M. D. *Estudio del comportamiento de reactores discontinuos y semicontinuos: modelización y comprobación experimental*. Universitat Politècnica de Catalunya, 1999.

[15] Uyazán, A. M., Gil, I. D., Aguilar, J. L., Rodríguez, G., & Caicedo, L. A. *Deshidratación del etanol Ingeniería e investigación*, 24.3, 49-59, 2004.

[16] Azbel and N.P. Cheremisinoff, *Chemical and Process Design: Vessel Design and Selection*, Butterworths, London, 1982.

[17] A. B. Juan, *Operaciones básicas de transmisión de calor*, Castellón de la plana: Publicacions de la Universitat Jaume I, 2003.

[18] Apuntes EQ1021 *Ingeniería de la Reacción Química*.

[19] Apuntes EQ1030 *Reactores Químicos y Bioquímicos*.

[20] Apuntes EQ1031 *Proyectos de Ingeniería*.

[21] Apuntes EQ1035 *Simulación y Optimización de Procesos*.

[22] Apuntes EQ1037 *Seguridad e Higiene Industrial*.

4.2.2 Webgrafía

[23] Acura, G., & Acura, G. *Tapas toriesféricas para tanques de acero inoxidable: tipos y características*. Grupo Acura, 2023. <https://grupoacura.com/es/blog/tapas-toriesfericas-para-tanques/>

[24] *Aplicaciones de serpentines en un sistema de refrigeración industrial*. (s.f.). <https://blog.froztec.com/aplicaciones-de-serpentines-en-un-sistema-de-refrigeracion-industrial>

- [25] *Bidones y depósitos de plástico Kaiserkraft*. (s.f.). kaiserkraft. https://www.kaiserkraft.es/cajas-de-almacen-recipientes-de-almacen/bidones-depositos-barriles/c/63952-KK/?filterCapacidad%7E%7E=5-300&_its=JTdCJTIdmlkJTlYJTNBJTIyZGZiNjkyOTQtZDI1My0
- [26] *Butanoic acid (CAS 107-92-6)*. (s.f.). Cheméo. <https://www.cheméo.com/cid/41-010-4/Butanoic-acid>
- [27] *Comprar ácido butírico CAS:107-92-6*. (s.f.). Laboratorium Discounter. <https://www.laboratoriumdiscounter.nl/es/acido-butirico-extrapuro.html>
- [28] Danilo. *Formación de esteres a partir de Ácidos carboxílicos*, 2022. [https://unibetas.com/esterificacion-acidoscarboxilicos#:~:text=La%20esterificaci%C3%B3n%20es%20simplemente%20la,%C3%A1cido%20carbox%C3%ADlico%](https://unibetas.com/esterificacion-acidoscarboxilicos#:~:text=La%20esterificaci%C3%B3n%20es%20simplemente%20la,%C3%A1cido%20carbox%C3%ADlico%20)
- [29] Diaz, R. *Ácido butírico: fórmula, propiedades, riesgos y usos*, 2019. : <https://www.lifeder.com/acido-butirico/>
- [30] *España Precios del etanol, 28-agosto-2023*. GlobalPetrolPrices.com. (s.f.). GlobalPetrolPrices.com. https://es.globalpetrolprices.com/Spain/ethanol_prices/
- [31] *Generadores de precios*. Chova. <https://chova.com/generadores-de-precios/>
- [32] *Hélices para agitadores industriales de flujo axial y radial*. autmix. <https://autmix.com/blog/helices-agitadores-axial-radial#:~:text=De%20manera%20general%2C%20el%20tipo,o%20radial%20si%20es%20perpendicular.>
- [33] Noguera, I. B. *Reactores intermitentes o reactores Batch*. Ingeniería Química, 2021. <https://www.ingenieriaquimicareviews.com/2020/10/reactores-intermitentes-batch.html>
- [34] *Product information*. (s.f.). Sanluc BE. <https://sanluc.be/es/m%C3%A1s-sobre-butirato>
- [35] *Resinas de intercambio iónico para purificación de agua*. (s.f.). Condorchem Enviro Solutions. <https://condorchem.com/es/resinas-intercambio-ionico/>

[36] *Resistencia en acero inoxidable para calentamiento de solución química*, 2021. : <https://www.electrosilvania.co/blog/resistencia-en-acero-inoxidable-para-calentamiento-de-solucion-quimica/>

4.3 Programas empleados

- Microsoft Word 2023.
- Microsoft Excel 2023.
- Microsoft Project 2023.
- Scilab 6.1.
- ProsimPlus
- CYPE
- SolidWorks 2022-2023

5. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS

5.1 Abreviaturas generales

Tabla 2.4. Abreviaturas generales. Fuente: elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
A	Amortización	€/año
ASME	American Society of Mechanical Engineers	-
B	Beneficio	€/año
$C_{p, \text{mezcla}}$	Calor específico de la mezcla	J/kg·K
E	Eficiencia de la junta soldada	-
G	Gastos	€/año
I	Ingresos	€/año
I_0	Inversión inicial	€
i_n	Interés nominal	%
IPC	Índice de Precios al Consumo	%
i_r	Interés real	%
k_a	Conductividad del agua	W/m·K
k_{acero}	Conductividad del acero	W/m·K
k_{mezcla}	Conductividad de la mezcla	W/m·K
Nu	Número de Nusselt	-
m_{mezcla}	Cantidad de mezcla	kg
Pr	Número de Prandtl	-
PR	Periodo de retorno	años
RDTA	Reactor Discontinuo de Tanque Agitado	-
Re	Número de Reynolds	-
S	Máxima tensión admisible por el material	(N/mm ²)
TIR	Tasa Interna de Rentabilidad	%
v_a	Velocidad a la que circula el agua	m/s
VAN	Valor Actual Neto	€
μ (T int sup)	Viscosidad a la temperatura interior de la superficie	Pa·s
μ (T media)	Viscosidad a la temperatura media	Pa·s
μ_a	Viscosidad del agua	Pa·s
ρ_a	Densidad del agua	kg/m ³
μ_{mezcla}	Viscosidad de la mezcla	Pa·s
ρ_{mezcla}	Densidad de la mezcla	kg/m ³

5.2 Abreviaturas del tanque

Tabla 2.5 Abreviaturas del tanque. Fuente:elaboración propia

Abreviaturas	Definición	Unidades
D_t	Diámetro del tanque	m^2
e	Espesor del tanque	m
e_c	Espesor de la parte cilíndrica	mm
e_{fondo}	Espesor del fondo semiesférico	mm
e_{tapa}	Espesor de la tapa toriesférica	mm
h	Altura de la parte cilíndrica	m
H	Altura total del tanque	m
h_1	Parte recta de la tapa	m
h_2	Zona donde empieza la curvatura de rebordeo de la tapa	m
h_L	Altura del líquido de la parte semiesférica	m
$h_{líquido}$	Altura del líquido	m
$H_{tapa\ toriesférica}$	Altura total del cabezal toriesférico	m
P_i	Presión de diseño	N/mm^2
P_o	Presión de operación	atm
R	Radio esférico interior	m
r	Radio de rebordeo interior	m
V_t	Volumen total del tanque	m^3
V_u	Volumen útil del tanque	m^3

5.3 Abreviaturas del sistema de agitación

Tabla 2.6. Abreviaturas del sistema de agitación. Fuente:elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
D_a	Diámetro del agitador	m
D_e	Diámetro del eje del agitador	m
d_s	Diámetro mínimo del eje para la tensión de corte permitida	m
d_t	Diámetro mínimo del eje para la tensión de tracción permitida	m
E	Distancia del fondo del tanque al impulsor	m
f_{hi}	Factor de servicio hidráulico	-
L_i	Longitud del eje del agitador	m
L_i	Distancia del agitador a la tapa del tanque	m
$M_{máx}$	Momento de flexión máximo	N/m
N	Velocidad del agitador	rev/s
n_b	Número de palas	-
N_p	Número de potencia	-
N_Q	Número de bombeo	-
P_a	Potencia requerida por el agitador	W
$P_{i,motor}$	Fracciones individuales de potencia del motor	W
P_{motor}	Potencia del motor	W
t	Espesor de las palas del agitador	m
T_Q (máx)	Valor de torque máximo	$N \cdot m$
w	Ancho de la pala	m
α	Ángulo de las palas	-
σ_b	Tensión de las palas	N/m^2
σ_s	Límite de tensión de corte	N/m^2
σ_t	Límite de tensión por tracción	N/m^2

5.4 Abreviaturas de las placas deflectoras

Tabla 2.7. Abreviaturas de las placas deflectoras. Fuente: elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
$d_{\text{tanque-placas deflectoras}}$	Distancia entre las placas deflectoras y el tanque	m
$a_{\text{placas deflectoras}}$	Anchura de las placas deflectoras	m
$L_{\text{placas deflectoras}}$	Longitud de las placas deflectoras	m

5.5 Abreviaturas del sistema de calentamiento

Tabla 2.8. Abreviaturas del sistema de calentamiento. Fuente: elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
ΔT	Incremento de temperatura	-
A_0	Área externa del tanque	m^2
A_{ev}	Área externa de la virola cilíndrica	m^2
A_i	Área interna del tanque	m^2
A_{iv}	Área interna de la virola cilíndrica	m^2
A_m	Área media	m^2
A_{mg}	Área media geométrica	m^2
A_{ml}	Área media logarítmica	m^2
d_0	Diámetro exterior del tanque	m
D_0	Diámetro externo de la camisa	m
d_e	Diámetro de cada entrada	m
D_{eq}	Diámetro equivalente	m
d_i	Diámetro interior del tanque	m
D_i	Diámetro interno de la camisa	m
d_s	Diámetro de la salida	m
E_a	Espacio anular	m
e_c	Espesor de la pared de la camisa	m
h_0	Coficiente individual de transmisión de calor externo	$W/m^2 \cdot K$
h_i	Coficiente individual de transmisión de calor interno	$W/m^2 \cdot K$
q	Calor transferido	W
Q_{va}	Caudal total de agua	m^3/s
Q_{vai}	Caudal de agua para cada entrada	m^3/s
S	Sección de paso	m^2
t	Tiempo de calentamiento	min
U_i	Coficiente global de transmisión de calor interno	$W/m^2 \cdot K$
v_{ae}	Velocidad de agua en cada entrada	m/s
v_{as}	Velocidad de agua en la salida	m/s

5.6 Abreviaturas del balance de materia y energía

Tabla 2.9. Abreviaturas del balance de materia y energía. Fuente: elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
t_R	Tiempo de reacción	min
T_R	Temperatura de reacción	K
c_j	Concentración del componente j	mol/L
N_j	Número de moles del componente j	mol
r	Velocidad de reacción	mol/L·min
v_j	Coefficiente estequiométrico del componente j	-
v_k	Coefficiente estequiométrico del componente clave	-
N_{ko}	Número de moles del componente clave	mol
c_A	Concentración del ácido butírico	mol/L
c_B	Concentración del etanol	mol/L
c_E	Concentración del butirato de etilo	mol/L
c_w	Concentración del agua	mol/L
k	Constante de directa de la reacción	mol/L·min
k'	Constante de indirecta de la reacción	mol/L·min
K_c	Constante de equilibrio	-
X	Grado de conversión	-
F_j	Caudal molar del componente j	mol/min
h_j	Entalpía del componente j	J/mol
F_{jo}	Caudal molar inicial del componente j	mol/min
h_{jo}	Entalpía inicial del componente j	J/mol
Q^*	Calor intercambiado	W
$C_{p,i}$	Calor específico del componente j	J/kg·K
ΔH_k°	Entalpía de reacción	J/mol
$\sum \theta_j \cdot C_{pj}$	Calor específico molar de la mezcla	J/mol·K
J	Pendiente de la recta adiabática	K
T_{fo}	Temperatura del fluido calefactor en la camisa	K
T	Temperatura de reacción	K
N_{A0}	Número inicial de moles de ácido butírico	moles
N_{B0}	Número inicial de moles de etanol	moles
$C_{p,a}$	Calor específico del ácido butírico	J/mol·K
$C_{p,b}$	Calor específico del etanol	J/mol·K
N_{to}	Número de moles iniciales	Mol/L
c_{to}	Concentración inicial	mol/L

5.7 Abreviaturas del sistema de reflujo

Tabla 2.10. Abreviaturas del sistema de reflujo. Fuente: elaboración propia.

Abreviaturas	Definición	Unidades
A_{paso}	Área de paso	m^2
A_s	Área de intercambio del serpentín	m^2
D_{tubo}	Diámetro del tubo	m
DTML	Variación media logarítmica de la temperatura	$^{\circ}\text{C}$
h_s	Altura del serpentín	m
L_{tubo}	Longitud del tubo	m
$m_{\text{agua refrigerante}}$	Caudal másico de agua refrigerante	kg/s
$m_{\text{azeótropo}}$	Caudal másico de azeótropo	kg/s
N_{vueltas}	Número de vueltas del serpentín	-
$Q_{\text{consumido}}$	Calor consumido del azeótropo	J/s
U_s	Coefficiente global de intercambio de calor en el serpentín	$\text{W}/\text{m}^2 \cdot ^{\circ}\text{C}$

6. REQUISITOS DE DISEÑO

6.1 Condiciones y características del alimento

Se considera que el alimento al reactor será de ácido butírico y etanol a 25°C, ambos puros y en fase líquida.

Los dos reactivos se introducen en el tanque, donde serán calentados mediante una camisa calefactora por la que circula agua a 85°C, hasta que la temperatura del interior del reactor alcance los 75 °C. A partir de ese momento, la temperatura del agua de calefacción será de 76°C para mantener la isothermicidad del tanque. La operación se paralizará cuando se alcance un grado de conversión de 0,7.

Además, la separación y recuperación de reactantes se realiza mediante una columna de rectificación discontinua. La mezcla de etanol-agua que se obtiene se trata en tamices moleculares para recuperar etanol absoluto.

Por otro lado, el diseño incluye un condensador de serpentín para refrigerar el azeótropo ya que se está trabajando a temperaturas muy cercanas a 78 °C.

6.2 Condiciones y características de la resina Amberlyst 15

La reacción de esterificación que se lleva a cabo en este proyecto necesita la presencia de un catalizador. En este caso se utiliza la resina de intercambio iónico Amberlyst 15.

Se trata de partículas esféricas de tamaño superior a 300 μm con una estructura macroporosa. Concretamente se utilizan 73,2 kg/m^3 de este catalizador.

7. ANÁLISIS DE SOLUCIONES

El reactor deberá estar provisto de agitación, conducciones de entrada y salida, dispositivos de medida de temperatura, presión y pH, un dispositivo de intercambio de calor (que pueda utilizarse tanto para calentamiento como para enfriamiento) y un serpentín de enfriamiento para reflujo.

En la *figura 2.14* se muestra el esquema del reactor del Butirato de Etilo:

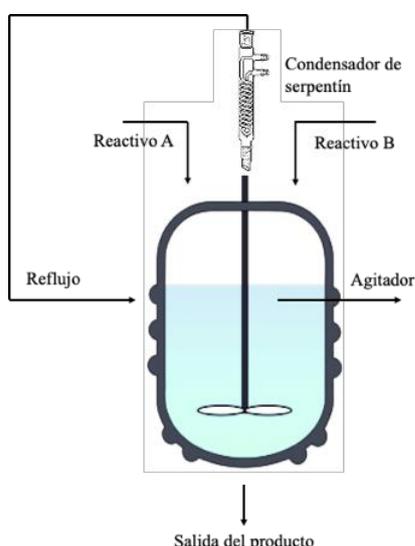


Figura 2.14. Diagrama de flujo para la obtención del Butirato de Etilo. Fuente: Elaboración propia.

Para diseñar el reactor se deben tener en cuenta diferentes factores para conseguir las condiciones óptimas de funcionamiento. Por lo tanto, es necesario establecer distintas alternativas para cada parámetro y, tras llevar a cabo un estudio exhaustivo, decidir cuál es la mejor opción atendiendo a los requerimientos específicos de este proyecto.

7.1 Elementos del reactor discontinuo de tanque agitado

Como se ha mencionado anteriormente, la síntesis del Butirato de Etilo se realiza en un **Reactor Discontinuo de Tanque Agitado**.

Este tipo de reactor es un recipiente que tiene un sistema de agitación para proporcionar a la mezcla la homogeneidad necesaria, además cuenta con un sistema de calentamiento o refrigeración, dependiendo de si la reacción es endotérmica o exotérmica, respectivamente. Incluso, en algunos reactores se combinan ambos sistemas en un mismo reactor.

Por tanto, para el diseño de este reactor se deben conocer diversos parámetros fundamentales, que incluyen el tipo de fondo utilizado, la tapa del reactor, el material de construcción y el sistema de agitación y de calentamiento. Estos componentes desempeñan un papel fundamental para garantizar el funcionamiento y el diseño óptimo y seguro del reactor.

En última instancia, se debe tener en cuenta la presencia de un motor que accionará el agitador. El motor puede ser de tipo eléctrico, impulsado mediante aire a presión, una turbina de vapor o un motor de diésel o de gas. Para conseguir que el agitador tenga la velocidad deseada a partir del motor, se emplea una caja de cambios. La caja de cambios puede tener una reducción de dos o tres etapas, dependiendo de la velocidad de agitación requerida para la mezcla.

A continuación, en la *figura 2.15* se muestra un esquema típico de un tanque agitado:

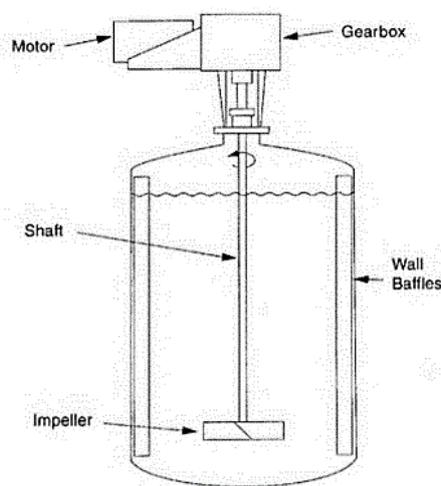


Figura 2.15. Esquema de un tanque agitado. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L. Paul et al.

7.1.2 Tipos de fondo en los reactores

Respecto al fondo del reactor se pueden identificar múltiples tipos, aunque los más comunes son los que se detallan a continuación:

- **Fondo semiesférico:** la gran ventaja de este fondo es su alta resistencia estructural. Además, facilita una transferencia de calor uniforme y promueve que la agitación sea altamente efectiva.

- **Fondo plano:** este es el más común y se considera uno de los fondos más simples utilizados en la industria, generalmente se emplea en reactores de pequeña escala y en aquellos casos donde la mezcla no requiere una agitación intensa.
- **Fondo cónico:** este fondo es altamente beneficioso para fomentar la mezcla y el flujo adecuado dentro del reactor, también hay que tener en cuenta que facilita en gran medida la descarga del contenido una vez ha finalizado la reacción.

En la *figura 2.16*, se pueden observar tanques con estos tres tipos de fondo.



Figura 2.16. De izquierda a derecha: reactor con fondo semiesférico (Fuente: <https://www.rigal-bennett.com>), reactor con fondo plano (Fuente: <https://www.avanti.com.com>) y con fondo cónico. (Fuente: <https://www.rotortanques.com>)

Cabe destacar que la selección del fondo del reactor se basa en diversos factores como son: la capacidad de almacenamiento, la facilidad de mezclado, la facilidad de descarga del producto final, el coste de inversión, entre otros. Esta información se muestra en el *Anexo II*, donde se determina que la mejor opción teniendo en cuenta las necesidades puntuales de este proyecto es el **fondo semiesférico**.

7.1.2 Tipos de tapa en los reactores

El objetivo del uso de tapas en los reactores es garantizar la precisión del sistema, así como contribuir a la seguridad de este. A continuación, se describen los tres tipos de tapas más comunes utilizadas en la industria química:

- **Tapas planas:** son ampliamente utilizadas para finalizar recipientes que operan a presión atmosférica y tienen un diámetro pequeño. Una de sus características principales es

que son muy económicas respecto otro tipo de cabezas y se pueden utilizar incluso en tanques de grandes dimensiones.

- **Tapas torisféricas:** son muy populares en la industria debido a su bajo costo y su capacidad de soportar presiones elevadas. Tienen un radio de corona aproximadamente igual al diámetro del tanque. Además, el rango de dimensiones en el que se fabrican es amplio.

- **Tapas hemisféricas:** son consideradas las cabezas más resistentes y pueden soportar prácticamente el doble de presión que una cabeza torisférica (del mismo espesor). No obstante, el coste de fabricación de las cabezas hemisféricas es significativamente mayor en comparación con las torisféricas.

Cada una de las tapas tiene sus ventajas y desventajas y la elección de una de ellas dependerá en gran medida de la presión de diseño, de los costes de fabricación y los requisitos específicos de aplicación. En el *Anexo II* se detallan estos aspectos y se toma la decisión de elegir una **tapa torisférica**.

7.1.3 Sistema de agitación

Por otro lado, el sistema de agitación más apropiado dependerá de múltiples factores como son: la aplicación del reactor, del tipo de mezcla, el volumen del reactor y las propiedades de la mezcla, (especialmente la viscosidad).

La clasificación de los impulsores se basa principalmente en la viscosidad de la mezcla y consiste en distinguir turbinas para fluidos de baja y media viscosidad e impulsores de baja altura para fluidos de alta viscosidad. Además, los impulsores de turbina se subdividen atendiendo al régimen de funcionamiento (régimen laminar o turbulento), así como a los patrones de flujo (axial o radial).

En la *figura 2.17* se puede observar el flujo radial (a) y el flujo axial (b) en un tanque agitado:

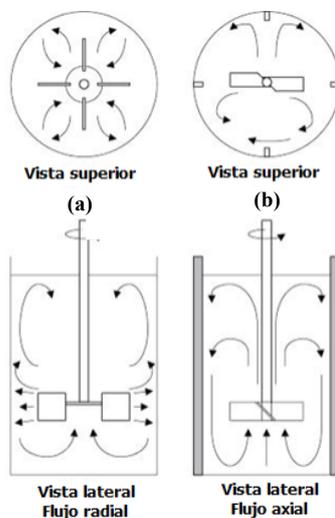


Figura 2.17. Patrones de flujo. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L. Paul et al.

En este proyecto la mezcla que tiene lugar es newtoniana y de baja viscosidad, por lo que se analizarán con mayor detalle los impulsores de media y baja viscosidad.

Existen cuatro tipos de impulsores en función de los patrones de flujo y la cizalladura que generan: flujo axial, flujo radial, impulsores de hidroala e impulsores de alto corte.

- **Los impulsores de flujo axial:** este tipo de impulsor es particularmente eficaz en la mezcla de líquidos, en la suspensión de sólidos y en mezclas con transferencia de calor. Por lo general, estos agitadores están equipados con tres o cuatro palas.

La primera configuración de impulsores de flujo axial fue la hélice marina que se utiliza como mezclador de entrada lateral en tanques grandes o como mezclador de entrada superior en tanques pequeños. Gracias a los avances en la industria, se han desarrollado nuevos agitadores de flujo axial, la turbina de palas inclinadas es un ejemplo de ello. Este tipo de impulsor consiste en un tubo con un número determinado de palas que se pueden orientar en ángulo entre 10 y 90 grados con respecto a la horizontal.

Si bien existen otros agitadores de flujo axial, estos dos son los más ampliamente utilizados en la industria química debido a su eficiencia y versatilidad.

La hélice marina (“*propeller*”) y la turbina de palas inclinadas (*pitched Blade turbine*) se muestran en la *figura 2.18*:

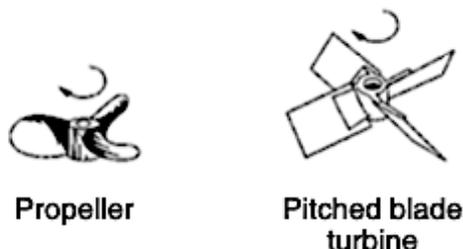


Figura 2.18. Ejemplos de impulsores de flujo axial. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L.Paul et.al.

- **Impulsores de flujo radial:** suelen utilizarse para fluidos de baja y media viscosidad y son altamente eficientes en la dispersión de gas-líquido o líquido-líquido. Estos impulsores pueden tener un diseño de disco como la turbina Rushton o tipo abierto. Además, pueden tener palas planas o curvas.

En el caso de los impulsores radiales con disco se requieren mayores valores de potencia respecto a los impulsores abiertos, aunque generan un flujo radial más uniforme. El uso del disco en el impulsor evita que el gas se eleve por el eje mezclador, lo que permite la adición de un mayor número de palas.

Por otro lado, la turbina Rushton cuenta con seis palas planas, mientras que la de barrido tiene seis palas curvas. La disposición curva de las palas reduce la erosión, ya que evita la acumulación de material en las mismas. Asimismo, el número de potencia es un 20% inferior en comparación con la turbina Rushton.

En la *figura 2.19* se observa el diseño de disco tipo abierto (“Open Flat Blade”) y la turbina Rushton (“Disk Style (Rushton)”):

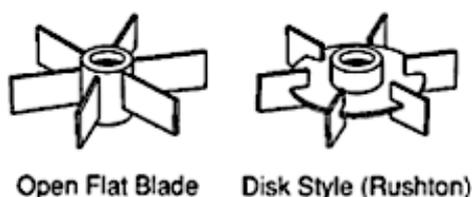


Figura 2.19. Ejemplos de impulsores de flujo radial. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L.Paul et.al.

- **Impulsores de hidroala:** estos impulsores han sido diseñado específicamente para mezclas que requieren un flujo axial pero también un bajo cizallamiento. Estos impulsores están equipados con tres o cuatro cuchillas cónicas con forma curva, las cuales proporcionan

una velocidad uniforme en el área de descarga. Además, necesitan menos energía con respecto a las turbinas de palas inclinadas.

En la *figura 2.20* se observan tres tipos diferentes de estos impulsores:



Figura 2.20: Ejemplos de impulsores de hidroala. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L.Paul et.al.

- **Impulsores de alto cizallamiento:** son adecuados para utilizar velocidades elevadas y se emplean en mezclas de dos fases para añadir una segunda fase (gases, líquidos, sólidos, polvos, etc.) también se utilizan en procesos de molienda o para fabricar emulsiones. Por lo general, se combinan con impulsores de flujo axial para lograr tanto un alto cizallamiento como una mezcla homogénea.

Algunos ejemplos de impulsores de alto cizallamiento se observan en la *figura 2.21*:

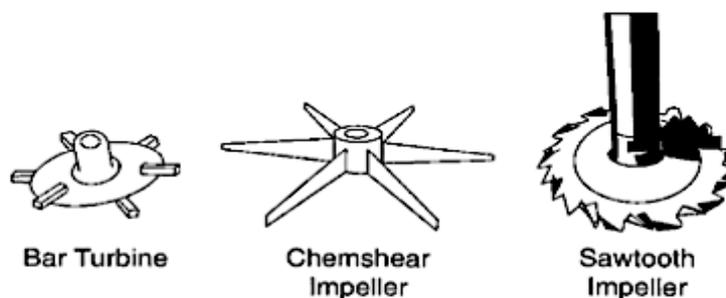


Figura 2.21. Ejemplos de impulsores de alto cizallamiento. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L.Paul et.al.

Teniendo en cuenta que en este caso se necesitará flujo axial, las alternativas para la elección del agitador son:

- Hélice marina.
- Turbina de palas inclinadas.

Atendiendo a los criterios de estos dos agitadores, se escoge la **turbina de palas inclinadas**, tal y como se explica en el *Anexo II*.

7.1.4 Placas deflectoras

Las placas deflectoras se utilizan en los tanques con agitación para mejorar la eficiencia de agitación y la mezcla entre los componentes dentro del tanque. Se trata de unas chapas que se sitúan dentro del reactor en la trayectoria del flujo generado por el sistema de agitación.

Su función principal es dirigir y redirigir el flujo de líquido generado por el agitador, evitando la formación de corrientes de vórtice y promoviendo una mayor dispersión y mezcla de los fluidos. Las placas deflectoras ayudan a romper las corrientes circulares y turbulentas, creando un movimiento más uniforme y controlado del líquido en el tanque. Para el diseño de este reactor se utilizarán cuatro placas deflectoras cuyo diseño se detalla en el *Anexo II*.

7.1.5 Materiales de construcción

En relación con los materiales de construcción de un reactor existen numerosas opciones disponibles. Para seleccionar un material de construcción, se deben tener en cuenta diversas características como son: las propiedades mecánicas, el comportamiento a diversas temperaturas, la resistencia a la corrosión, las propiedades específicas que se requieran y el coste asociado a cada material. Algunos materiales comúnmente utilizados son:

- **Hierro y acero:** el hierro es robusto, pero no resistente a la corrosión, excepto en entornos específicos como el ácido sulfúrico concentrado. Se prefiere el acero inoxidable, con un contenido de cromo superior al 12%, debido a su excelente resistencia a la corrosión, buena resistencia mecánica y térmica
- **Acero inoxidable:** el acero inoxidable es el material por excelencia en los diseños de ingeniería gracias a su gran resistencia a la corrosión. Para aportar esta característica que los define el contenido en cromo debe ser superior al 12% y cuando mayor cantidad de cromo, mayor será la resistencia a la corrosión. Ofrece buena resistencia mecánica y térmica, así como alta durabilidad.
- **Níquel** Ofrece buenas propiedades mecánicas y es utilizado en aleaciones en plantas químicas por su resistencia a la corrosión en entornos agresivos.
- **Aluminio y sus aleaciones:** A pesar de su susceptibilidad a ácidos minerales y álcalis, el aluminio se usa en aplicaciones donde el acero podría causar contaminación, como en la industria textil y alimentaria.

De esta forma se determina que el acero inoxidable es el mejor material para la construcción de este reactor debido a su elevada resistencia a la corrosión de productos químicos, así como su resistencia mecánica.

Dentro de los aceros inoxidables existe una división debido a su microestructura:

- Ferrítico: 13-20 % Cr, <0,1% C, sin níquel.
- Austenítico: 18-20 % Cr, >7 % Ni.
- Martensítico: 10-12 % Cr, 0,2 a 0,4 % C, hasta 2 % Ni.

Siendo la estructura austenítica la deseada para la resistencia a la corrosión. En la industria química, los grados más comunes de acero inoxidable austenítico son AISI 304 y AISI 316.

En el *Anexo II*, se detalla la selección del **AISI 304** como acero inoxidable para la construcción del tanque.

7.2 Sistema de intercambio de calor

En las reacciones endotérmicas, es necesario contar con un sistema de calentamiento que proporcione el calor necesario para que se produzca la reacción. Uno de los métodos más utilizados es la camisa de calentamiento. Sin embargo, un método alternativo que se ha comenzado a introducir es el calentamiento mediante resistencias eléctricas.

La camisa de calentamiento consiste en una capa o doble fondo en el tanque, recubierta con puntos o anillos espiralados que abarcan todo el diámetro del recipiente. Entre la pared del tanque y la pared interior de la camisa, circula un fluido, como agua caliente o vapor de agua, cuya función es absorber el frío y proporcionar calor al interior del tanque. Es importante destacar que el agua nunca entra en contacto con el fluido del tanque.

El objetivo principal de este funcionamiento es intercambiar calor, controlando así la temperatura del fluido contenido en el recipiente. Es importante señalar que este mismo sistema también se utiliza para enfriar una mezcla, funcionando en sentido inverso. De hecho, muchos tanques incorporan ambos circuitos, tanto refrigeración como calefacción.

A continuación, se muestra en la *figura 2.22* un tanque de almacenamiento con una camisa de calentamiento.

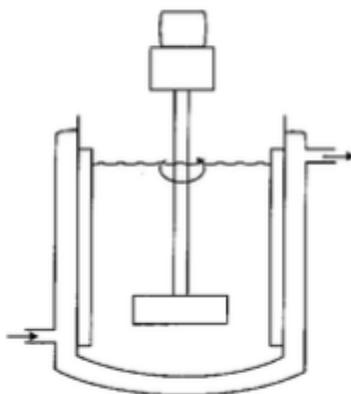


Figura 2.22. Tanque de almacenamiento con una camisa de calentamiento. Fuente: Handbook of industrial mixing. Edward L.Paul et.al.

Por otro lado, las resistencias eléctricas son dispositivos utilizados para calentar mezclas en diferentes procesos industriales. Estas resistencias están diseñadas para convertir la corriente eléctrica en calor, lo que se conoce como efecto Joule.

Cuando se utilizan resistencias eléctricas para calentar un reactor, se instalan estratégicamente dentro del sistema de manera que sean capaces de transferir eficientemente el calor al medio del reactor. Por lo general, se colocan en contacto directo con el fluido que se desea calentar.

Estas resistencias se colocan encapsuladas en tubos de materiales con alta resistencia al calor y buena conductividad eléctrica, algunos ejemplos son el acero inoxidable, las aleaciones de níquel-cromo o de níquel-aluminio.

Las resistencias suelen incluir un sensor que permite controlar de forma precisa la temperatura. Además, es un sistema limpio, con respuesta rápida y que genera calor uniforme en todo el reactor, lo que lo hace altamente beneficioso para una amplia gama de aplicaciones industriales.

En la *figura 2.23* se pueden observar algunas resistencias para inmersión en un reactor.



Figura 2.23. Resistencias para inmersión. Fuente: <https://www.electricfor.es>

La selección del sistema de calentamiento mediante una **camisa de calentamiento/enfriamiento** se detalla en el *Anexo II*.

7.3. Sistema de reflujo

El sistema de reflujo en un reactor consiste en una serie de elementos que se utilizan para recuperar los vapores generados durante un proceso químico. El objetivo principal es evitar la pérdida de los componentes valiosos y mantener el reactor en equilibrio.

El sistema de reflujo se basa en la condensación, donde los vapores generados en la reacción son enfriados y transformados de nuevo en líquidos. El líquido condensado se recoge y se reintroduce en el reactor, lo que permite mantener la concentración de los reactivos en el rango óptimo.

Existen distintos tipos de sistemas de reflujo en la industria y algunos de ellos se explican a continuación:

Condensador: es un equipo que enfría los vapores generados durante la reacción y los convierte en líquidos. Los condensadores pueden ser de tubo y coraza, de serpentín o condensadores de placa.

Intercambiador de calor: el intercambiador de calor es un dispositivo que se utiliza para transferir calor entre dos corrientes de fluido diferentes sin que se mezclen. Un intercambiador de calor se puede usar para enfriar los vapores generados durante la reacción

y condensarlos. El líquido condensado se devuelve al reactor, mientras que el calor es transferido a otro fluido.

Columna de destilación: la columna de destilación permite la separación y recuperación de componentes específicos de vapor generado durante la reacción. Los componentes condensados se devuelven al reactor, mientras los más volátiles se separan y se recolectan en diferentes puntos de la columna.

En este caso, solo se va a formar vapor de etanol/agua, por lo que bastará con introducir un condensador en el reactor.

En el *Anexo II*, se recurre a las características de cada uno de estos condensadores para elegir el **condensador de serpentín** como la opción más adecuada.

8. RESULTADOS FINALES

8.1 Diseño del tanque

Para diseñar el tanque se han realizado distintos cálculos para conocer el volumen total del tanque, la altura total, la altura del líquido, el espesor, entre otros. Dichos cálculos se encuentran detallados en el *Anexo III* y los resultados para los cálculos realizados para diseñar el tanque se muestran en la *tabla 2.11*:

Tabla 2.11. Resultados del diseño del tanque. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Volumen total del tanque (V_t)	2,21 m ³
Volumen útil del tanque (V_u)	1,7 m ³
Diámetro interior del tanque (D_t)	1,5 m
Altura de la parte cilíndrica (h)	0,75 m
Altura total del tanque (H)	1,5 m
Altura del líquido ($h_{\text{líquido}}$)	1,21 m
Presión de operación (P_o)	1 atm
Presión de diseño (P_1)	1,1 atm
Espesor del tanque (e)	0,007 m
Radio esférico interior del cabezal (R)	1,514 m
Radio de rebordeo interior del cabezal (r)	0,1514 m
Parte recta de la tapa (h_1)	0,0245 m
Zona donde empieza la curvatura de rebordeo de la tapa (h_2)	0,289 m
Altura total del cabezal toriesférico ($H_{\text{tapa toriesférica}}$)	0,3135 m

8.2 Diseño de la turbina de palas inclinadas

Como agitador se ha selecciona en el *Anexo III*, una turbina de 4 palas inclinadas a 45°. Los parámetros obtenidos para diseñarla se muestran en la *tabla 2.12*:

Tabla 2.12. Resultados del diseño de la turbina de palas inclinadas. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Diámetro del agitador (D_a)	0,45 m
Ancho de la pala (w)	0,056 m
Distancia del fondo del tanque al impulsor (E)	0,5 m
Velocidad del agitador (N)	4,85 rev/s
Potencia requerida por el agitador (P_a)	2550 W
Potencia del motor (P_{motor})	3000 W
Espesor de las palas del agitador (t)	0,007 m
Longitud del eje del agitador (L_i)	2 m
Diámetro del eje del agitador (D_e)	0,028 m

8.3 Diseño de las placas deflectoras

Los parámetros de diseño obtenidos para cada una de las cuatro placas deflectoras calculados en el *Anexo III* se muestra en la *tabla 2.13*:

Tabla 2.13. Resultados del diseño de las placas deflectoras. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Anchura de las placas deflectoras ($e_{\text{placas deflectoras}}$)	0,125 m
Distancia entre las placas deflectoras y el tanque ($d_{\text{tanque-placas deflectoras}}$)	0,02 m
Longitud de las placas deflectoras ($L_{\text{placas deflectoras}}$)	0,71 m

8.4 Camisa de calentamiento

Para diseñar la camisa de calentamiento se realiza el cálculo de diversos parámetros, tal y como se puede observar en el *Anexo IV*, el resumen de los resultados obtenidos se muestra en la *tabla 2.14*:

Tabla 2.14. Resultados del diseño de la camisa de calentamiento. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Espesor de la pared de la camisa (e_c)	0,007 m
Espacio anular (E_a)	0,02 m
Diámetro interior del tanque (d_i)	1,5 m
Diámetro exterior del tanque (d_o)	1,514 m
Diámetro interno de la camisa (D_i)	1,554 m
Diámetro externo de la camisa (D_o)	1,568 m
Diámetro equivalente (D_{eq})	0,04 m
Área interna del tanque (A_i)	7,0686 m ²
Área externa del tanque (A_o)	7,618 m ²
Área media (A_m)	7,134 m ²
Coefficiente global de transmisión de calor interno (U_i)	1,5946 · T (K) + 0,163
Calor transferido (q)	*Valor que depende de la temperatura
Tiempo de calentamiento (t)	28 minutos
Sección de paso (S)	0,096 m ²
Caudal total de agua (Q_{va})	0,029 m ³ /s
Caudal de agua para cada entrada (Q_{vai})	0,00725 m ³ /s
Velocidad de agua en cada entrada (v_{ae})	1,88 m/s
Diámetro de cada entrada (d_e)	0,07 m
Velocidad de agua en la salida (v_{as})	1,88 m/s
Diámetro de la salida (d_s)	0,14 m

8.5 Balances de materia y energía

Los resultados obtenidos para la integración simultánea de los balances de materia y energía para el grado de conversión final ($X=0,7$) en el *Anexo V*, son los que se muestran en la *tabla 2.15*:

Tabla 2.15. Resultados del balance de materia y energía. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Tiempo de reacción (t_R)	379 min
Temperatura de reacción (T_R)	348,76 K

8.6 Diseño del condensador de serpentín

Para el diseño del condensador de serpentín realizado en el *Anexo VI*, se obtienen los siguientes resultados:

Tabla 2.16. Resultados del diseño del condensador de serpentín. Fuente: elaboración propia.

Parámetro de diseño	Valor obtenido
Calor consumido por el azeótropo ($q_{\text{consumido}}$)	25717,8 J/s
Caudal másico del azeótropo ($m_{\text{azeótropo}}$)	0,0306 kg/s
Caudal másico de agua refrigerante ($m_{\text{agua refrigerante}}$)	0,615 kg/s
Área de intercambio del serpentín (A_s)	1,15 m ²
Variación media logarítmica de la temperatura (DTML)	44,81 °C
Longitud del tubo (L_{tubo})	8 m
Diámetro del tubo (D_{tubo})	0,0511 m
Área de paso (A_{paso})	$2,05 \cdot 10^{-3}$ m ²
Diámetro del serpentín (D_s)	0,6 m
Número de vueltas del serpentín (N_{vueltas})	5 vueltas
Altura del serpentín (h_s)	0,511 m
Coefficiente global de intercambio de calor en el serpentín (U_s)	500 W/m ² ·°C

9. PLANIFICACIÓN

Con el fin de programar las actividades dentro del marco de tiempo establecido y estimar la duración que tendrá el proyecto, se ha elaborado un diagrama de Gantt utilizando el programa Microsoft Project, tal y como se muestra en la *figura 2.24*.

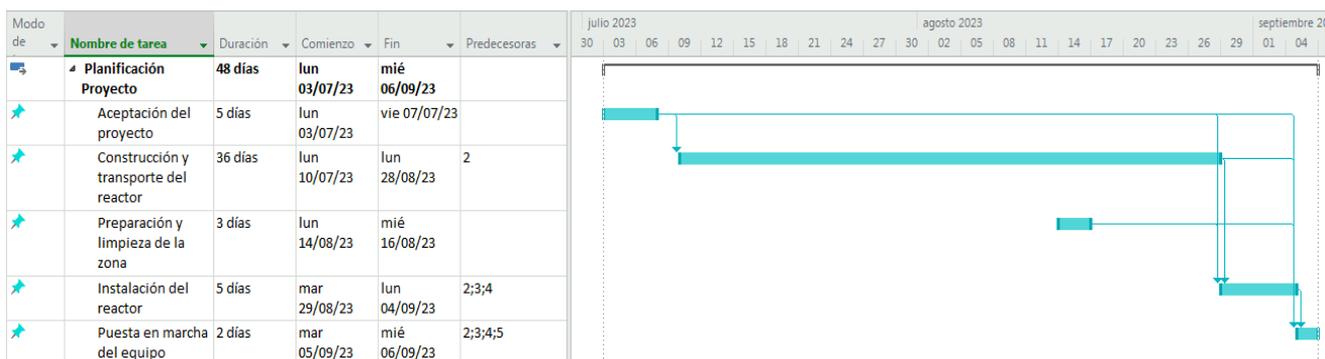


Figura 2.24. Planificación. Fuente: elaboración propia.

Para un análisis más detallado del diagrama de Gantt, se elabora la *tabla 2.17* que se muestra a continuación:

Tabla 2.17. Planificación Fuente: elaboración propia.

Tareas	Duración
Aceptación del proyecto	5
Construcción y transporte del reactor	36
Preparación y limpieza de la zona	3
Instalación del reactor	5
Puesta en marcha del equipo	2

Por tanto, la duración estimada del proyecto será de **48 días laborables, aproximadamente 2 meses**.

10.ORDEN DE PRIORIDAD DE LOS DOCUMENTOS BÁSICOS

La norma UNE 157001:2014, “Criterios generales para la elaboración formal de los documentos que constituyen un proyecto técnico”, establece que el orden de prioridad de los documentos que forman parte de un proyecto técnico es el siguiente:

1. Planos.
2. Pliego de condiciones.
3. Presupuesto.
4. Memoria.

11. RESUMEN DEL ESTUDIO DE VIABILIDAD ECONÓMICA

A continuación, se muestra un resumen del estudio de viabilidad económica que se detalla de forma más exhaustiva en el *Anexo VII: Viabilidad económica*.

11.1 Resumen del Presupuesto

Así pues, en la *tabla 2.18* se muestra en primer lugar el presupuesto del proyecto, cuyos cálculos se detallan en el documento *Presupuesto*.

Tabla 2.18. Resumen del presupuesto. Fuente: elaboración propia.

Concepto	Precio (€)
PEM	199.535,49
20% Gastos generales	39.907,09
6% Beneficio industrial	11.972,13
PEC	251.414,71 €
7% Proyecto y dirección de obra	17.599,03
TOTAL	269.013,74
TOTAL + IVA	325.508,63

De esta forma, la inversión inicial del proyecto será equivalente al presupuesto.

11.2 Resumen de los ingresos

Los ingresos de la empresa se calculan en función de la producción y los cálculos están detallados en el *Anexo VII*:

Por tanto, en la *tabla 2.19* se puede observar el resumen de los ingresos obtenidos en la empresa como consecuencia de este proyecto.

Tabla 2.19. Resumen de los ingresos. Fuente: elaboración propia.

Cantidad de butirato de etilo al año (kg)	Precio ud. (€/kg)	Precio al año (€/año)
231.262,38	25,95	6.001.258,76
Ingresos totales		6.001.258,76

11.3 Resumen de los gastos

Los gastos del proyecto se dividen en gastos directos e indirectos y a continuación se describen de forma más detallada:

11.2.1 Resumen de gastos directos

Los gastos directos son aquellos que están directamente relacionados con la producción o los servicios específicos.

Los gastos directos computables a este proyecto son:

- Gastos de materia prima.
- Gastos derivados de la separación de reactantes.
- Gasto de energía eléctrica por calefacción de la mezcla reactante.
- Gastos de reaprovechamiento del etanol.
- Gastos de energía eléctrica consumida por el motor del agitador.
- Gastos de enfriamiento de la mezcla reactante vaporizada con el serpentín.
- Gastos de envasado del producto.

Así, en la *tabla 2.20* se muestra el resumen de los gastos directos del proyecto.

Tabla 2.20. Resumen de los gastos directos. Fuente: elaboración propia.

Elementos	Coste (€/año)
Materia prima.	4.301.160,2
Separación de reactantes	147.556,89
Energía eléctrica por calefacción de la mezcla	5.570,98
Reaprovechamiento del etanol	3.109,95
Energía eléctrica consumida por el motor del agitador	3.474,84
Envasado del producto.	306.675,72
TOTAL	4.767.548,58

11.2.2 Resumen gastos indirectos

Por otro lado, los gastos indirectos son aquellos que no se pueden atribuir directamente a un proyecto pero que son necesarios para el funcionamiento general de la planta.

El resumen de gastos indirectos de este proyecto se muestra en la *tabla 2.21*:

Tabla 2.21. Resumen de los gastos indirectos. Fuente: elaboración propia.

Gastos	Coste (€/año)
Mantenimiento trimestral	2.000
Sueldo de los operario/as	75.600
15 % de gastos generales	1.013.416,85
Total	1.091.016,85

11.2.3 Gastos totales

Los gastos totales del proyecto constituyen la suma de los gastos directos e indirectos y el resultado se puede observar en la *tabla 2.22*:

Tabla 2.22. Resumen de los gastos indirectos. Fuente: elaboración propia.

Gastos	Coste (€/año)
Gastos indirectos	1.091.016,85
Gastos directos	4.767.548,58
Gastos totales	5.858.565,43

11.4 Amortización

Otro factor de suma importancia en la evaluación económica de un proyecto es la amortización. Este parámetro permite conocer el desgaste de los equipos a lo largo del tiempo. En este caso concreto se establece un tiempo de amortización de 10 años, ya que al tratarse de un equipo industrial se renueva antes de que esté obsoleto.

$$\text{Amortización} = \frac{I_0}{\text{tiempo de amortización}} \quad (2.1)$$

$$\text{Amortización} = \frac{325.508,63}{10} = 32.550,86 \text{ €}$$

11.5 Beneficio

El beneficio de una empresa está determinado por dos tipos de beneficios: beneficio bruto y beneficio neto. La explicación y el cálculo de ambos se realizará a continuación.

11.5.1 Beneficio bruto

El beneficio bruto se calcula como la resta entre los ingresos y los gastos totales, que incluyen la amortización. Por tanto, se calcula con la *ecuación 2.2*:

$$B_b = I - G - A \quad (2.2)$$

11.5.2 Beneficio neto

El beneficio neto es la cantidad de dinero que una empresa obtiene una vez que se han restado todos los gastos, incluyendo los impuestos de sociedades. En el caso de las sociedades, estos impuestos se calculan como un 25% del beneficio bruto.

$$B_n = B_b - 0,25 \cdot B_b = 0,75 \cdot B_b \quad (2.3)$$

11.6 Flujo de caja

El flujo de caja analiza los flujos de efectivo que entran y salen de una empresa en un período determinado. Se calcula sumando el beneficio neto y la amortización, como se muestra en la *ecuación 2.4*:

$$FC = B_n + A \quad (2.4)$$

11.7 Valor Actual Neto (VAN)

El VAN determina la viabilidad de una inversión o proyecto. Se calcula considerando el valor temporal del dinero y se utiliza la *ecuación 2.5* para ello:

$$VAN = \sum_{i=1}^n \frac{FC}{\left(1 + \frac{i_r}{100}\right)^n} - I_0 \quad (2.5)$$

11.8 Tasa Interna de Rentabilidad (TIR)

La Tasa Interna de Rentabilidad (TIR) es la tasa de crecimiento anualizada que hace que el valor presente de los flujos de efectivo futuros de un proyecto sea igual a la inversión inicial. Cuanto mayor sea la TIR, mayor será la rentabilidad del proyecto.

El TIR es el interés real que hace que el Valor Actual Neto (VAN) sea igual a cero. Para calcularlo, se realiza un proceso iterativo hasta encontrar la tasa que logra que el VAN sea cero.

11.9 Periodo de retorno (PR)

El periodo de retorno se utiliza para determinar el tiempo necesario para recuperar la inversión. Se calcula con la *ecuación 2.6*:

$$PR = \frac{\sum_{i=1}^n FC}{I_0} \quad (2.6)$$

11.10 Resultados

De esta manera los resultados obtenidos para los valores del VAN, el TIR y el periodo de retorno (que son los parámetros de interés en el estudio de rentabilidad de un proyecto) se muestran en la *tabla 2.23*:

Tabla 2.23. Resultados. Fuente: elaboración propia.

VAN	907.054,96 €
TIR	35,68 %
PR	2,53 años

Con estos resultados se puede concluir que el proyecto es altamente rentable, en base al indicador del VAN, que es sumamente superior a cero. Además, cabe destacar que el TIR es ampliamente superior al interés nominal y el valor del periodo de retorno es razonable, lo que quiere decir que a inversión se recuperará en un periodo de tiempo relativamente corto.

3. ANEXOS

ÍNDICE

1. ANEXO I: DOCUMENTACIÓN DE PARTIDA.....	2
1.1 Cinética de la reacción catalizada por la resina Amberlyst 15.....	2
1.2 Cálculo de la entalpía de reacción.....	7
1.3 Propiedades físicas y termodinámicas de la mezcla reactante	9
2. ANEXO II: SELECCIÓN DE ALTERNATIVAS ÓPTIMAS.....	19
3. ANEXO III: DISEÑO DEL REACTOR.....	27
3.1 Dimensionamiento del reactor.....	27
3.1.1 Dimensiones del tanque.....	27
3.1.2 Dimensionamiento del cabezal toriesférico.....	32
3.2 Diseño del sistema de agitación.....	33
3.3 Diseño de las placas deflectoras	45
4. ANEXO IV: DISEÑO DEL SISTEMA DE CALENTAMIENTO.....	47
5. ANEXO V: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA	65
6. ANEXO VI: DISEÑO DEL CONDENSADOR DE SERPENTÍN.....	74
7. ANEXO VII: VIABILIDAD ECONÓMICA	78
7.3.1 Gastos directos.....	81
7.3.2 Gastos indirectos.....	86
7.3.3 Gastos totales	87
7.5.1 Beneficio bruto	88
7.5.2 Beneficio neto.....	88
8. ANEXO VIII: ESTUDIO DE SEGURIDAD Y SALUD.....	92
9. ANEXO IX: ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL	94

1. ANEXO I: DOCUMENTACIÓN DE PARTIDA

Para realizar los cálculos se deben tener en cuenta una serie de parámetros como son la cinética de la reacción, las propiedades físicas y termodinámicas de las mezclas, entre otras.

1.1 Cinética de la reacción catalizada por la resina Amberlyst 15.

Los datos cinéticos en los que se basa el diseño del reactor en este Trabajo Fin de Grado se han obtenido del artículo de Singh et al. "*Kinetic Study of Catalytic Esterification of Butyric Acid and Ethanol over Amberlyst 15*". En dicho artículo se estudia la influencia, sobre la velocidad de la reacción, de los siguientes parámetros:

- ✓ Cantidad de resina: 24,4, 32,5, 48,8, 56,9, 65,06, 73,2 y 81,4, expresada en g/L.
- ✓ Razón molar de ácido butanoico/etanol: 1:1, 1:5, 1:10 y 1:15.
- ✓ Temperatura de operación: 55, 60, 65, 70 y 75°C. Cabe destacar que el azeótropo formado por el agua y el etanol hierve a 78°C a la presión atmosférica, de manera que 75°C es prácticamente la máxima temperatura que puede alcanzarse en el reactor si no se desea trabajar a alta presión.

Al introducirse un catalizador heterogéneo, como es el caso de Amberlyst 15, la cinética podría modificarse, dependiendo de si la velocidad de reacción está controlada por la reacción química o por las etapas de transferencia de materia (entre el seno de la fase líquida y la superficie de la resina o difusión de reactantes y productos a través de la resina porosa). En el artículo se determina que, si la agitación de la mezcla reactante es suficiente, puede desprejarse el efecto de las etapas de transferencia de materia y la velocidad global viene determinada únicamente por la cinética de la reacción química.

Efecto de la cantidad de catalizador (Amberlyst 15)

Los ensayos se efectuaron con la mezcla reactante de razón molar ácido butírico/etanol 1:10 y a la máxima temperatura ensayada de 75°C. Los resultados se muestran en la *figura 3.1*, con curvas dibujadas (no ajustadas teóricamente) para facilitar la observación de los datos.

Se aprecia que la velocidad de reacción aumenta al aumentar el contenido en resina, hasta que se alcanza el valor de 73,2 g/L, pero los autores no incluyen la curva correspondiente a 81,4 g/L de resina, ya que afirman que los resultados coinciden con los obtenidos para 73,2 g/L. Se observa además que, en todos los casos, la reacción se paraliza para tiempos superiores a 350 minutos, y se alcanza una conversión final que aumenta al incrementarse el contenido en resina, de manera que ésta parece actuar no sólo sobre la velocidad de la reacción sino también sobre el equilibrio.

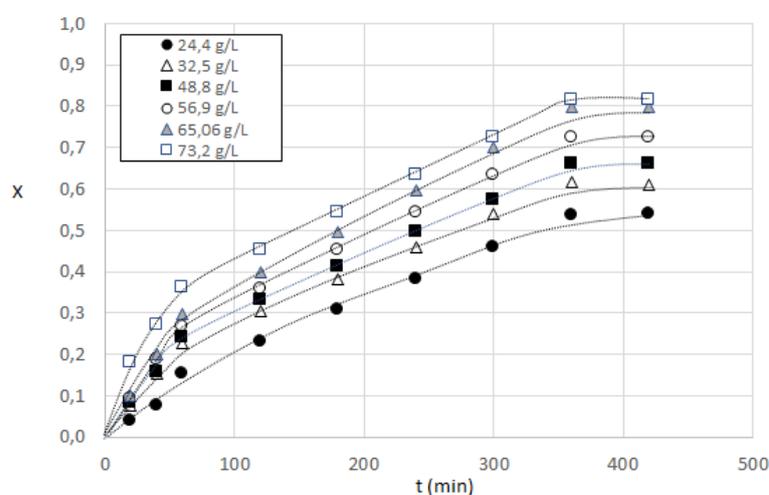


Figura 3.1. Influencia del contenido en Amberlyst 15 sobre la velocidad de la reacción y el grado de conversión final alcanzado. Razón molar ac. butírico/etanol, 1/10, temperatura de operación, 75°C. Fuente: Singh et al.

Efecto de la razón molar ácido butírico:etanol.

En este caso, se mantuvieron constantes la cantidad máxima de catalizador determinada en el apartado anterior (78,2 g/L) y la temperatura de operación (75°C) y se modificó la razón molar entre los reactantes, manteniendo el etanol en proporción estequiométrica o en exceso.

Se observa que la conversión de ácido butírico aumenta a medida que se incrementa el exceso en etanol, y que el valor límite de conversión también aumenta. En todos los casos, como ya se vio en los resultados anteriores, el avance de la reacción prácticamente se paraliza cuando han transcurrido 350 minutos.

En la *figura 3.1* se muestran los resultados correspondientes a las razones molares 1:1, 1:5 y 1:10, junto con curvas que corresponden a la integración del balance de materia al reactor discontinuo del tanque agitado. Dado que las etapas de transferencia de materia no influyen, se ha utilizado como velocidad de reacción la típica para este tipo de reacciones de esterificación, que es reversible de 2º orden en ambos sentidos y de primer orden con respecto a cada reactante:

$$r \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}} \right) = k \left(c_A c_B - \frac{c_E c_W}{K_C} \right) \quad (3.1)$$

En esta expresión, r es la velocidad de reacción (mol/L·min), k , la constante de velocidad de la reacción directa a cada temperatura (L/mol·min), y K_C (adimensional en este caso) la constante de equilibrio a cada temperatura, expresada en función de las concentraciones. Las variables c_A , c_B , c_E y c_W (mol/L) se refieren, respectivamente, a las concentraciones de ácido butírico, etanol, butirato de etilo y agua en cada instante.

Si se plantea el balance molar al ácido butírico en el reactor, considerando un sistema de volumen constante queda:

$$\frac{dc_A}{dt} = -k \left(c_A c_B - \frac{c_E c_W}{K_C} \right) \quad (3.2)$$

Y, sustituyendo en función del grado de conversión en cada instante (X) y del grado de conversión en el equilibrio (X_e), queda:

$$k c_{A0} t = \int_0^X \frac{dX}{\left((1-X)(\theta_B - X) - \frac{X^2(1-X_e)(\theta_B - X_e)}{X_e^2} \right)} \quad (3.3)$$

Donde θ_B es la razón molar de etanol a ácido butanoico (1, 5, 10 o 15, según corresponda). Integrando esta expresión y representando cada valor en función del tiempo se deben obtener líneas rectas que pasen por el origen y cuya pendiente proporcione el valor de $k c_{A0}$. Una vez obtenido el valor de k , puede representarse la función integrada frente a los datos experimentales para comprobar la bondad del ajuste (*Figura 3.2*).

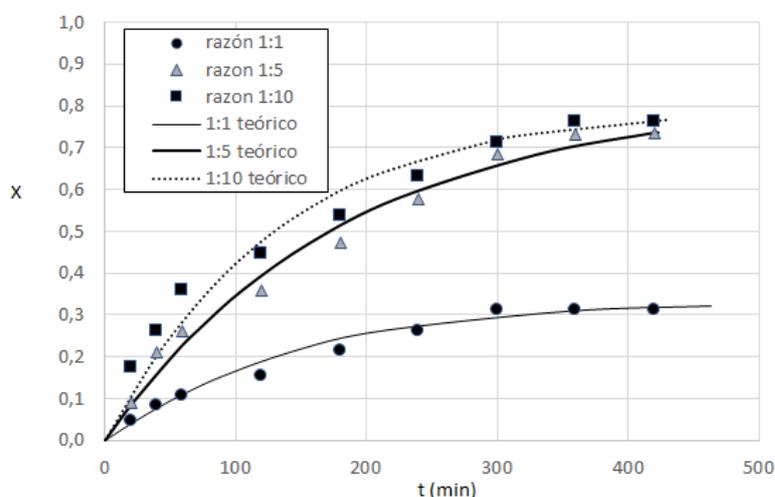


Figura 3.2 . Influencia de la razón molar de ac. butírico/etanol, sobre el progreso de la reacción. Contenido en Amberlyst 15: 73,2 g/L, temperatura de operación, 75°C. Fuente: Singh et al.

Del ajuste a los datos experimentales pueden obtenerse los valores de la constante de velocidad de reacción, el grado de conversión en el equilibrio, X_e y el valor de K_c . En la tabla 3.1 se incluyen estas variables, así como las concentraciones molares de las disoluciones puras de ácido butírico y etanol y las concentraciones iniciales de ambos reactantes (c_{A0} y c_{B0}) que corresponden a cada razón molar. La columna ($c_{E_{max}}$) expresa cuál es la máxima concentración de butirato de etilo que puede obtenerse en cada proceso.

Tabla 3.1. Propiedades de las disoluciones de los reactantes y algunos parámetros cinéticos de interés en esta serie de ensayos. Fuente: elaboración propia.

Reactantes	Densidad ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	Masa molecular ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)		Concentración (mol/L)			
Ácido butanoico	953	88,11		17,10			
Etanol	789	46,08		10,81			
Razón molar	Densidad ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	c_{A0} (mol/L)	c_{B0} (mol/L)	k ($\text{L}/\text{mol}\cdot\text{min}$)	X_e	$C_{E_{max}}$ (mol/L)	K_c ($\text{L}/\text{mol}\cdot\text{min}$)
1:1	889	6,623	6,623	$3,23\cdot 10^{-4}$	0,31	2,05	0,202
1:5	827	2,598	12,990	$3,25\cdot 10^{-4}$	0,81	2,10	0,8241
1:10	810	1,476	14,760	$3,93\cdot 10^{-4}$	0,82	1,21	0,376
1:15	803	1,031	15,469	$3,54\cdot 10^{-4}$	0,85	0,88	0,3404

Como se puede apreciar, la máxima concentración de butirato de etilo se obtiene utilizando la razón molar 1:5, aunque el resultado es muy próximo al que se obtendría con la razón 1:1.

Con gran probabilidad, el óptimo de producción se encuentre para razones molares comprendidas en el intervalo 1:1 a 1:5, pero no se disponen de datos cinéticos directos en esas condiciones, motivo por el cual se realizará el diseño utilizando la mezcla reactante de razón molar 1:5.

Influencia de la temperatura de reacción

Los ensayos para estudiar la influencia de la temperatura se han llevado a cabo con un contenido en resina de 73,2 g/L y una relación ácido butírico/etanol de 1:10. En la *figura 3.3* se representan los puntos experimentales junto con las curvas obtenidas al integrar el balance molar con la cinética reversible de segundo orden (*ecuación 3.3*).

La reacción de esterificación es endotérmica y se observa cómo, al aumentar la temperatura, aumenta tanto la constante de velocidad de la reacción directa como el valor de la conversión en el equilibrio, (X_e).

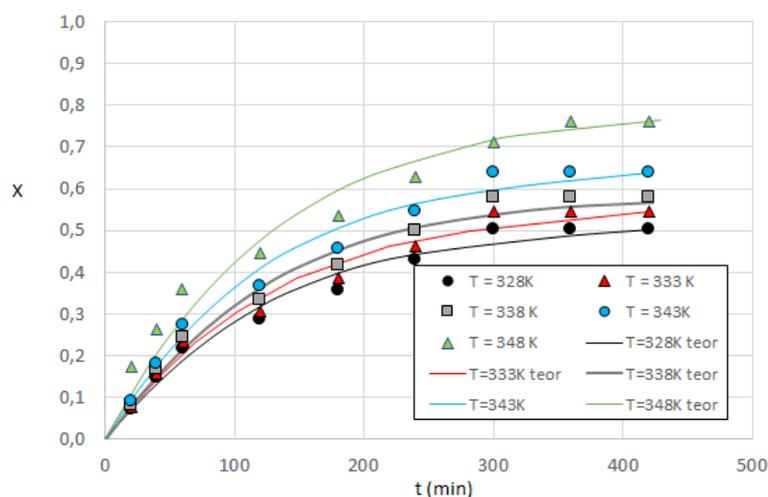


Figura 3.3. Influencia de la temperatura sobre el progreso de la reacción. Contenido en Amberlyst 15: 73,2 g/L, razón molar de ac. butírico/etanol, 1:10. Fuente: Singh et al.

Los parámetros cinéticos obtenidos del ajuste de los datos experimentales se recogen en la *tabla 3.2*.

Tabla 3.2. Parámetros cinéticos. Fuente: elaboración propia.

Temperatura (°C)	c _{A0} (mol/L)	c _{B0} (mol/L)	k (L/mol·min)	X _e	K _c (L/mol·min)
55	1,476	14,76	2,44 · 10 ⁻⁴	0,501	0,053
60	1,476	14,76	2,64 · 10 ⁻⁴	0,544	0,069
65	1,476	14,76	2,86 · 10 ⁻⁴	0,580	0,085
70	1,476	14,76	3,32 · 10 ⁻⁴	0,638	0,120
75	1,476	14,76	3,93 · 10 ⁻⁴	0,820	0,376

Al ajustar los valores de la constante de velocidad de reacción a una expresión tipo Arrhenius, se obtiene la expresión:

$$k_{\text{razón 1:10}} = 0,8466e^{\frac{-2685}{T}} \left(\frac{L}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.4)$$

Dado que el valor de la constante de velocidad de reacción es prácticamente independiente de la razón molar de los reactantes, como se ha visto en el apartado anterior, en el caso de que se utilice la mezcla 1:5, cuyo valor de k a 75°C era $3,25 \cdot 10^{-4} \text{ L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$, la variación de la constante cinética con la temperatura puede aproximarse como:

$$k_{\text{razón 1:5}} = 0,729e^{\frac{-2685}{T}} \left(\frac{L}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.5)$$

Lo mismo ocurre para la expresión de la constante de equilibrio obteniéndose de esta manera las expresiones siguientes:

$$K_{c,\text{razón 1:10}} = 1,25 \cdot 10^{12} e^{\frac{-10165}{T}} \left(\frac{L}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.6)$$

$$K_{c,\text{razón 1:5}} = 3,99 \cdot 10^{12} e^{\frac{-10165}{T}} \left(\frac{L}{\text{mol} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.7)$$

1.2 Cálculo de la entalpía de reacción.

La esterificación es una reacción endotérmica cuyo calor de reacción a 298K puede aproximarse a partir de las entalpías de formación de reactantes y productos, aplicando la *ecuación 3.8*, si se desprecian los efectos de mezcla:

$$\Delta H_k^0 = \Delta H_{f,\text{productos}}^0 - \Delta H_{f,\text{reactivos}}^0 = [\Delta H_{f,E}^0 + \Delta H_{f,W}^0] - [\Delta H_{f,A}^0 + \Delta H_{f,B}^0] \quad (3.8)$$

Las entalpías de formación de los reactivos y los productos se han extraído de la base de datos del programa ProsimPlus y sus valores se muestran a continuación:

$$\Delta H_{f,A}^0 = -534000 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H_{f,B}^0 = -276980 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H_{f,E}^0 = -514632 \text{ J/mol}$$

$$\Delta H_{f,W}^0 = -285830 \text{ J/mol}$$

Con estos valores, se sustituye en la *ecuación 3.8*:

$$\Delta H_{k,298K}^0 = [-514632 - 285830] - [-534000 - 276980] = 10518 \text{ J/mol}$$

La reacción se desarrollará en fase líquida a 75°C y el calor de reacción se irá modificando en función de cómo cambie el calor específico en la reacción. Tomando el valor de C_p de cada especie a 25°C como valor de calor específico medio y despreciando su variación con la temperatura, se tiene que:

$$C_{p,A} = 178,6 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$C_{p,B} = 112,3 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$C_{p,E} = 228,0 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

$$C_{p,W} = 75,3 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$$

La variación de calor específico medio en la reacción es pues,

$$\Delta \bar{C}_p = [228,0 + 75,3] - [178,6 + 112,3] = 12,4 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$$

Y la entalpía de reacción en el intervalo comprendido entre 298 y 348K se puede aproximar como:

$$\Delta H_{k,T}^0 = 10518 + 12,4 (T - 298) \text{ J/mol} \quad (3.8.1)$$

Donde el valor de la temperatura (T) está en K. Este valor calculado se considera suficiente para llevar a cabo el diseño, puesto que cumple con las características de las reacciones de esterificación, que son endotérmicas, con una entalpía de reacción moderada (del orden de 10 a 20 kJ/mol en muchos casos).

1.3 Propiedades físicas y termodinámicas de la mezcla reactante

Las propiedades físicas y termodinámicas de la mezcla son cruciales para diseñar un reactor de manera óptima, sobre todo para estimar los coeficientes de intercambio de calor. El cálculo de las propiedades de los componentes químicos puros no supone un gran esfuerzo, pero la situación se vuelve más compleja al tener que determinar las propiedades termodinámicas de una mezcla, cuya composición cambia a medida que se desarrolla la reacción.

Los programas de simulación cuentan con un módulo que permite calcular estas propiedades, facilitando el trabajo manual. En este caso, se hace uso del ProsimPlus, herramienta que se ha aprendido a utilizar en la asignatura *EQ1035-Simulación y Optimización de Procesos*. Se ha seleccionado el modelo PSRK, ya que gracias a los datos de equilibrio entre el etanol-agua y ácido butírico-agua se ha podido comprobar que se ajusta relativamente bien a la mezcla.

Las propiedades que se han calculado son: *densidad* (kg/m^3), *viscosidad dinámica* ($\text{Pa}\cdot\text{s}$), *calor específico a presión constante* ($\text{J kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) y *conductividad térmica* ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) y el cálculo se ha hecho para la mezcla reactante de razón molar inicial 1:5. Se ha decidido utilizar esta mezcla, por ser la que proporciona mayor concentración final de butirato de etilo de entre todas las estudiadas en el artículo. Es posible que una mezcla intermedia entre 1:1, y 1:5 proporcionase más concentración final, pero se ha desechado utilizarla para el diseño, ya que no se dispone de los datos cinéticos.

El programa proporciona una tabla con el valor de las propiedades termodinámicas seleccionadas, correspondientes a un intervalo de temperatura y concentración establecido. Cada tabla se genera manteniendo fijo el grado de conversión (desde 0 hasta 1) y modificando el valor de temperatura de 17 a 78°C.

A partir de estos valores se busca evaluar, en primer lugar, la influencia del grado de conversión en cada propiedad. Para ello se seleccionan tres temperaturas (290, 320 y 350 K) que abarcan todo el intervalo, se representa cómo varía la propiedad con el grado de

conversión a cada temperatura y si la relación es aceptablemente lineal, se ajustan los datos experimentales a la ecuación de una recta:

$$y = m \cdot X + n$$

donde:

y : valor de cada propiedad (conductividad, densidad, viscosidad y calor específico), a una temperatura (290, 320 o 350 K).

m : valor de la pendiente de la recta que, a su vez, dependerá de la temperatura.

n : ordenada en el origen.

Estos valores de pendiente y ordenada en el origen se representan a su vez frente la temperatura y si siguen una tendencia lineal, se ajustan a una recta y se obtiene la ecuación que permite calcular el valor de la propiedad en función de X y T .

Conductividad:

En la *tabla 3.3*, se muestran los valores de conversión y conductividad para las temperaturas de 290, 320 y 350 K, respectivamente, el resultado de los ajustes lineales respecto al grado de conversión y la ecuación final de ajuste respecto a la conversión y temperatura. En la *figura 3.4* se representa la variación de la conductividad con X a las tres temperaturas y los ajustes lineales y en la *figura 3.5*, la variación de la O.O. y la pendiente de los ajustes lineales con la temperatura.

Tabla 3.3. Valores de conversión y conductividad para tres temperaturas (290, 320 y 350K). Fuente: elaboración propia.

X	Temperatura (K)		
	290 K	320	350
	k (W/m·K)	k (W/m·K)	k (W/m·K)
0	0,163	0,156	0,149
0,1	0,161	0,154	0,147
0,2	0,159	0,152	0,144
0,3	0,157	0,150	0,142
0,4	0,156	0,148	0,141
0,5	0,154	0,147	0,139
0,6	0,153	0,145	0,137
0,7	0,151	0,144	0,136
0,8	0,150	0,142	0,135
0,9	0,149	0,141	0,133
1	0,148	0,140	0,132
Temperatura	Influencia del grado de conversión, $k = f(X)$		
290 K	$k_{290} = 0,1621 - 0,0149 \cdot X$		
320 K	$k_{320} = 0,1551 - 0,0159 \cdot X$		
350K	$k_{350} = 0,148 - 0,0168 \cdot X$		
Influencia del grado de conversión y la temperatura (K), $k = f(X, T)$			
$k \text{ (W/m·K)} = (0,2303 - 2,350 \cdot 10^{-4} \cdot T) - (5,733 \cdot 10^{-3} + 3,167 \cdot 10^{-5} \cdot T) \cdot X$ (3.9)			

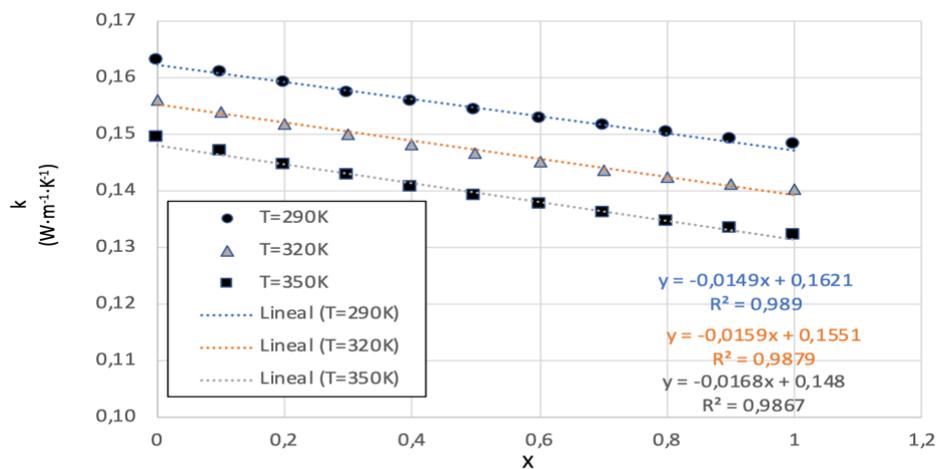


Figura 3.4. Relación grado de conversión y conductividad. Fuente: elaboración propia.

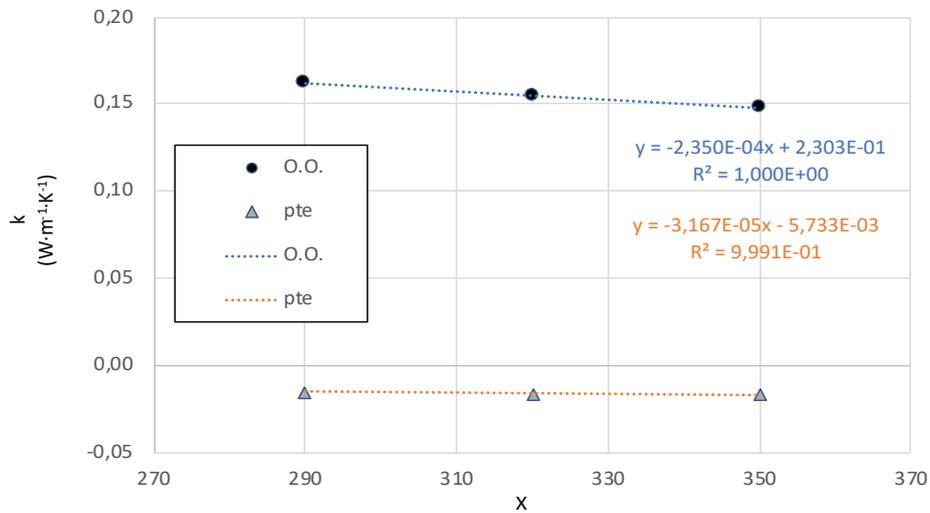


Figura 3.5. Ecuación para el cálculo de la conductividad. Fuente: elaboración propia.

Calor específico:

Del mismo modo, en la *tabla 3.4*, se observan los valores de conversión y calor específico para las temperaturas de 290, 320 y 350 K, respectivamente, el resultado de los ajustes lineales respecto al grado de conversión y la ecuación final de ajuste respecto a la conversión y temperatura. En la *figura 3.6* se representa la variación del calor específico con X a las tres temperaturas y los ajustes lineales y en la *figura 3.7*, la variación de la O.O. y la pendiente de los ajustes lineales con la temperatura.

Tabla 3.4. Valores de conversión y calor específico para tres temperaturas (290, 320 y 350K). Fuente: elaboración propia.

X	Temperatura (K)		
	290 K	320	350
	C_p (J/kg·K)	C_p (J/kg·K)	C_p (J/kg·K)
0	2403,417	2663,935	2921,255
0,1	2400,956	2639,457	2879,630
0,2	2392,617	2611,221	2835,776
0,3	2379,574	2580,007	2790,180
0,4	2362,800	2546,453	2743,286
0,5	2343,061	2511,117	2695,461
0,6	2320,993	2474,441	2647,041
0,7	2297,101	2436,798	2598,292
0,8	2271,792	2398,485	2549,436
0,9	2245,383	2359,755	2500,672
1	2218,155	2320,809	2452,143
Temperatura	Influencia del grado de conversión, $C_p = f(X)$		
290 K	$C_{p,290} = 2426,8 - 192,53 \cdot X$		
320 K	$C_{p,320} = 2678 - 348,28 \cdot X$		
350K	$C_{p,350} = 2928,5 - 472,77 \cdot X$		
Influencia del grado de conversión y la temperatura (K), $C_p = f(X,T)$			
C_p (J/kg·K) = $(2,0333 + 8,3617 \cdot T) + (1156,8 - 4,6707 \cdot T) \cdot X$ (3.10)			

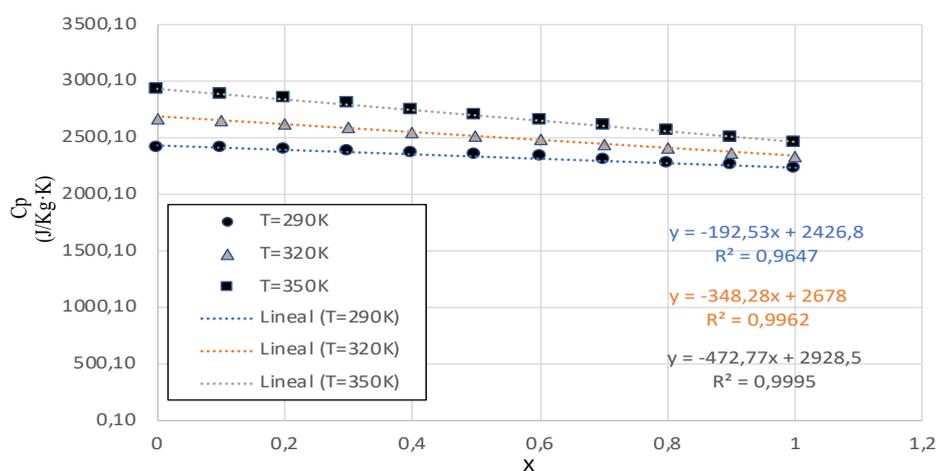


Figura 3.6. Relación grado de conversión y calor específico. Fuente: elaboración propia.

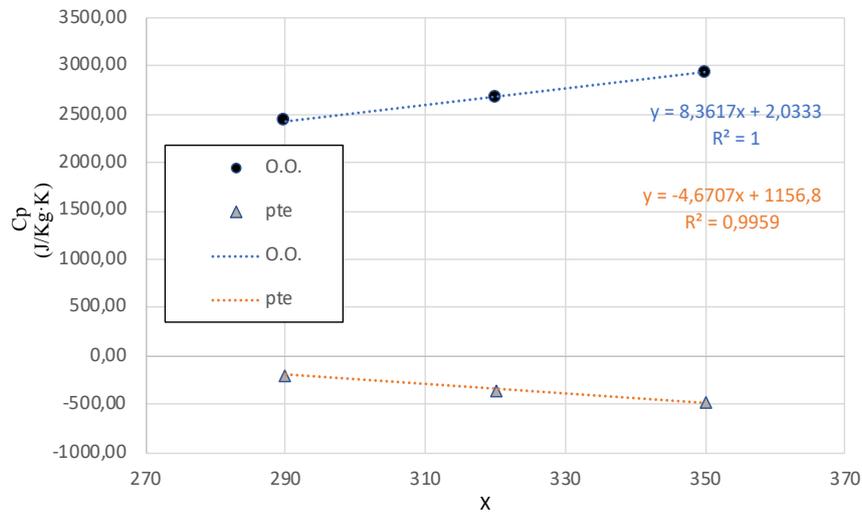


Figura 3.7. Ecuación para el cálculo del calor específico. Fuente: elaboración propia.

Viscosidad:

Así mismo, en la *tabla 3.5*, se observan los valores de conversión y viscosidad para las temperaturas de 290, 320 y 350 K, respectivamente, el resultado de los ajustes lineales respecto al grado de conversión y la ecuación final de ajuste respecto a la conversión y temperatura. En la *figura 3.8* se representa la variación de la viscosidad con X a las tres temperaturas y los ajustes lineales y en la *figura 3.9*, la variación de la O.O. y la pendiente de los ajustes lineales con la temperatura.

Tabla 3.5. Valores de conversión y viscosidad para tres temperaturas (290, 320 y 350K). Fuente: elaboración propia.

X	Temperatura (K)		
	290 K	320	350
	μ (Pa·s)	μ (Pa·s)	μ (Pa·s)
0	1,327E-03	7,742E-04	4,854E-04
0,1	1,273E-03	7,462E-04	4,585E-04
0,2	1,221E-03	7,192E-04	4,585E-04
0,3	1,171E-03	6,931E-04	4,457E-04
0,4	1,124E-03	6,680E-04	4,332E-04
0,5	1,078E-03	6,438E-04	4,210E-04
0,6	1,034E-03	6,205E-04	4,092E-04
0,7	9,924E-04	5,980E-04	3,978E-04
0,8	9,520E-04	5,763E-04	3,866E-04
0,9	9,133E-04	5,555E-04	3,758E-04
1	8,762E-04	5,353E-04	3,652E-04
Temperatura	Influencia del grado de conversión, $\mu = f(X)$		
290 K	$\mu_{290} = 1,312 \cdot 10^{-3} - 4,496 \cdot 10^{-4} X$		
320 K	$\mu_{320} = 7,674 \cdot 10^{-4} - 2,385 \cdot 10^{-4} X$		
350K	$\mu_{350} = 4,792 \cdot 10^{-4} - 1,152 \cdot 10^{-4} X$		
Influencia del grado de conversión y la temperatura (K), $\mu = f(X,T)$			
$\mu (Pa \cdot s) = (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot T) + (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot T) \cdot X$ (3.11)			

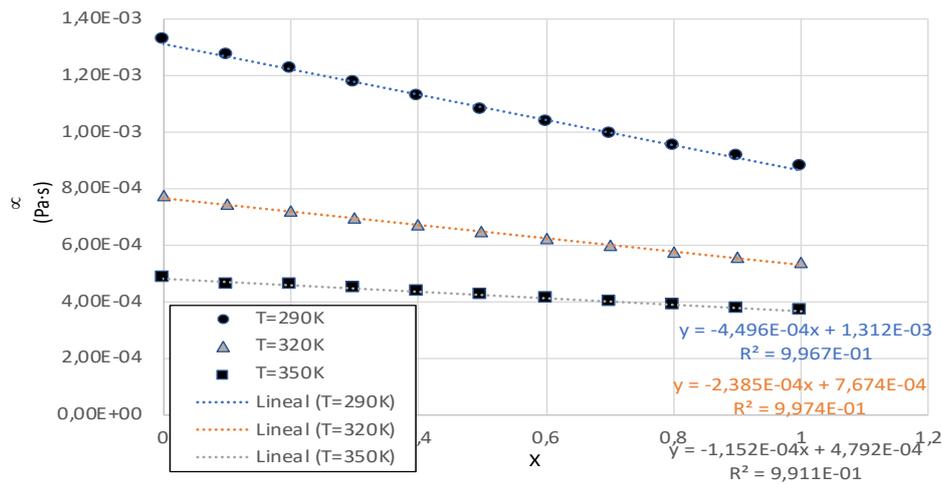


Figura 3.8. Relación grado de conversión y viscosidad. Fuente: elaboración propia.

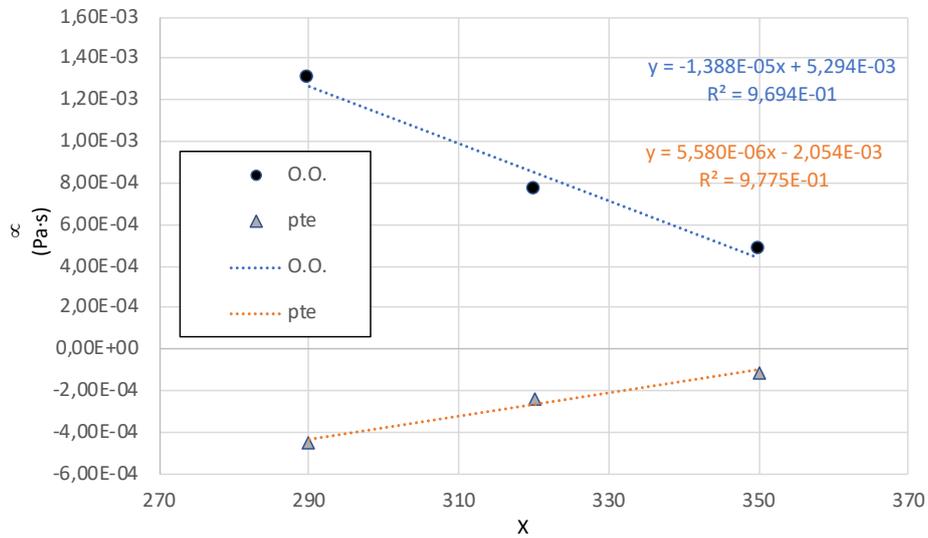


Figura 3.9. Ecuación para el cálculo de la viscosidad. Fuente: elaboración propia.

Densidad:

Finalmente, en la *tabla 3.6*, se observan los valores de conversión y densidad para las temperaturas de 290, 320 y 350 K, respectivamente, el resultado de los ajustes lineales respecto al grado de conversión y la ecuación final de ajuste respecto a la conversión y temperatura. En la *figura 3.10* se representa la variación de la densidad con X a las tres temperaturas y los ajustes lineales y en la *figura 3.11*, la variación de la O.O. y la pendiente de los ajustes lineales con la temperatura.

Tabla 3.6. Valores de conversión y densidad para tres temperaturas (290, 320 y 350K). Fuente: elaboración propia.

X	Temperatura (K)		
	290 K	320	350
	ρ (kg/m ³)	ρ (kg/m ³)	ρ (kg/m ³)
0	833,576	806,445	777,161
0,1	840,77	813,484	784,094
0,2	847,723	820,289	790,8
0,3	854,448	826,871	797,288
0,4	860,955	833,242	803,57
0,5	867,255	839,411	809,655
0,6	873,358	845,388	815,553
0,7	879,273	851,181	821,271
0,8	885,007	856,799	826,818
0,9	890,571	862,25	832,202
1	895,97	867,541	837,43
Temperatura	Influencia del grado de conversión, $\rho = f(X)$		
290 K	$\rho_{290} = 835,12 - 62,28 \cdot X$		
320 K	$\rho_{320} = 807,95 - 60,986 \cdot X$		
350K	$\rho_{350} = 778,632 - 60,162 \cdot X$		
Influencia del grado de conversión y la temperatura (K), $\rho = f(X,T)$			
ρ (kg/m ³) = (-0,9415 + 1108,5·T) + (72,439-0,0353·T) ·X (3.12)			

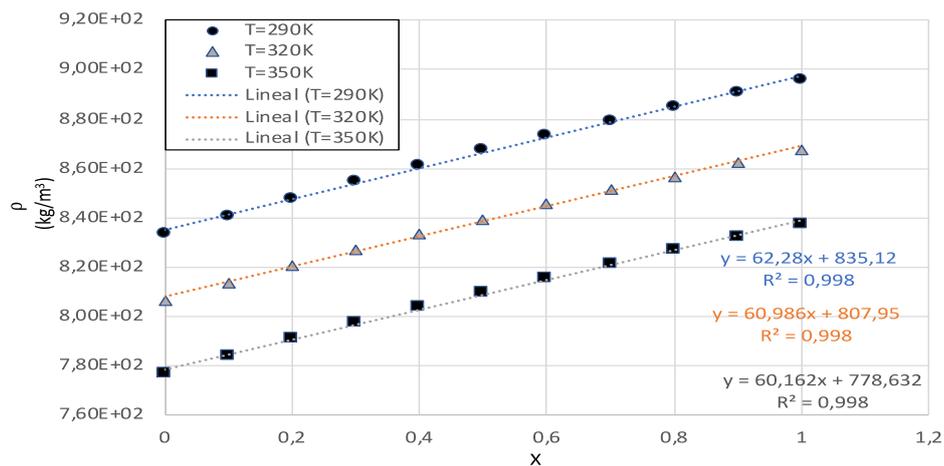


Figura 3.10. Relación grado de conversión y densidad. Fuente: elaboración propia.

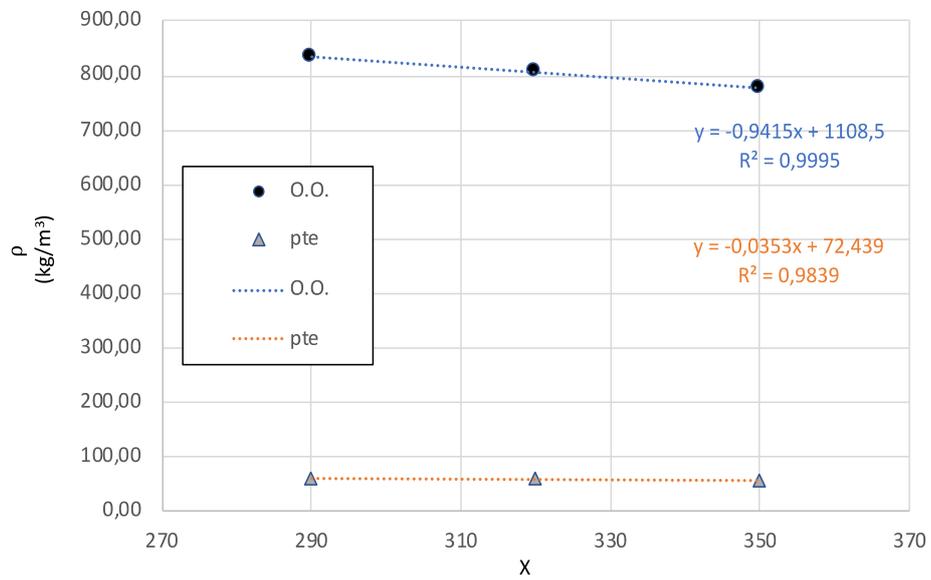


Figura 3.11. Ecuación para el cálculo de la densidad. Fuente: elaboración propia

2. ANEXO II: SELECCIÓN DE ALTERNATIVAS ÓPTIMAS

En primer lugar, es necesario explicar cómo se han elegido cada uno de los elementos que conforman el Reactor, desde su fondo hasta su sistema de calentamiento, en función de las ventajas y desventajas que presentan cada una de las diferentes alternativas, seleccionando, por tanto, la solución que mejor se ajusta a las condiciones de funcionamiento particulares de este proyecto.

2.1 Selección del tipo de fondo

Debido a que el reactor es un tanque discontinuo de tanque agitado, será necesario diseñar el fondo del tanque en función de una serie de características.

Para obtener la solución óptima en base a los requerimientos que necesita el reactor, se realiza una decisión multicriterio. El orden en función de la importancia de las propiedades que se debe tener en cuenta son las siguientes:

- Facilidad de mezclado.
- Facilidad de descarga del producto.
- Facilidad de construcción.

La *tabla 3.7* presenta una serie de valores otorgados por el personal encargado del diseño, basándose en la información proporcionada en por Azbel and Cheremisinoff (1982):

Tabla 3.7. Valores de decisión multicriterio para cada tipo de fondo. Fuente: elaboración propia.

	Semiesférico	Plano	Cónico
Mezclado	9	5	3
Descarga del producto	7	6	8
Facilidad de construcción	5	7	3

En la *tabla 3.8* se ordenan estas características de izquierda a derecha por importancia, siendo la facilidad de mezclado el parámetro más importante y la facilidad de construcción el menos importante.

Tabla 3.8. Criterio de prioridad para las características de los fondos. Fuente: elaboración propia.

	Mezclado	Descarga del producto	Facilidad de construcción
Mezclado	1	5	9
Descarga del producto	1/5	1	7
Facilidad de construcción	1/9	1/7	1

Se calcula el peso de cada característica:

$$w_{\text{mezclado}} = (1 \cdot 5 \cdot 9)^{1/3} = 3,557$$

$$w_{\text{descarga del producto}} = \left(\frac{1}{5} \cdot 1 \cdot 7\right)^{1/3} = 1,119$$

$$w_{\text{facilidad de construcción}} = \left(\frac{1}{9} \cdot \frac{1}{7} \cdot 1\right)^{1/3} = 0,251$$

$$w_{\text{total}} = \sum w_i = 3,557 + 1,119 + 0,251 = 4,927$$

Estos valores se dividen por el peso total:

$$W_{\text{mezclado}} = \frac{w_{\text{mezclado}}}{w_{\text{total}}} = \frac{3,557}{4,927} = 0,722$$

$$W_{\text{descarga del producto}} = \frac{w_{\text{descarga del producto}}}{w_{\text{total}}} = \frac{1,119}{4,927} = 0,227$$

$$W_{\text{facilidad de construcción}} = \frac{w_{\text{facilidad de construcción}}}{w_{\text{total}}} = \frac{0,251}{4,927} = 0,0509$$

Estos valores se multiplican por los de la *tabla 3.7* y se suman, el valor más alto dará lugar al tipo de fondo que se diseñará.

Fondo semiesférico:

$$9 \cdot 0,722 = 6,498$$

$$7 \cdot 0,227 = 1,589$$

$$5 \cdot 0,0509 = 0,2545$$

$$\text{suma} = 6,498 + 1,589 + 0,2545 = 8,3415$$

Fondo plano:

$$5 \cdot 0,722 = 3,61$$

$$6 \cdot 0,227 = 1,362$$

$$7 \cdot 0,0509 = 0,3563$$

$$\text{suma} = 3,61 + 1,362 + 0,3563 = 5,3283$$

Fondo cónico:

$$3 \cdot 0,722 = 2,166$$

$$8 \cdot 0,227 = 1,816$$

$$3 \cdot 0,0509 = 0,1527$$

$$\text{suma} = 2,166 + 1,816 + 0,1527 = 4,1347$$

De esta forma se observa que el valor más alto es para el fondo semiesférico, por lo que esta será la alternativa óptima.

2.2 Selección del tipo de cabezal

Para seleccionar el tipo de cabezal del reactor se recurre a la bibliografía, donde Towler et al (2022) establece que para tanques que trabajen a una presión inferior a 15 bar, la opción más favorable es la de cabezas toriesféricas. Para presiones superiores a 10 bar se debe comparar el coste con los cabezales elipsoidales.

En este caso la presión de operación es de 1 atmósfera, lo que equivale aproximadamente a 1,01325 bar.

De esta forma, el tipo de cabezal que se utilizará en el Reactor Discontinuo de Tanque Agitado para sintetizar el Butirato de Etilo será **toriesférico**.

2.3 Elección del material de construcción del reactor

Existen diversos materiales para construir los equipos de la planta química como pueden ser el níquel, el aluminio y sus aleaciones, el hierro o el acero inoxidable.

Con el fin de prevenir la corrosión en los equipos, el acero inoxidable se considera el material más comúnmente utilizado. Para mejorar las propiedades de este material, se introduce níquel y se garantiza que la cantidad de cromo sea superior al 12%.

Hay múltiples clasificaciones de acero inoxidable basadas en su microestructura, y a continuación se describe el contenido de cada uno de ellos:

- **Ferrítico:** 13-20 % Cr, <0,1% C, sin níquel.
- **Austenítico:** 18-20 % Cr, >7 % Ni.
- **Martensítico:** 10-12 % Cr, 0,2 a 0,4 % C, hasta 2 % Ni.

En la industria química los tipos de acero inoxidable más utilizados son el AISI 304 y el AISI 316, debido a su excelente resistencia a la corrosión en una amplia gama de entornos.

Aunque el AISI 316 es más resistente a la corrosión que el AISI 304, este último se utiliza ampliamente en la industria debido a su composición de níquel y cromo que lo convierten en un acero austenítico estable. Por tanto, ya que la mezcla no proporciona una excesiva corrosión, el **acero inoxidable 304** será el tipo preferido para el diseño del reactor.

La elección del AISI 304 se basa en su disponibilidad, menor coste y su capacidad adecuada para resistir la corrosión. Cumple con los requisitos necesarios para garantizar la durabilidad y resistencia del equipo en las condiciones específicas.

Además, es importante determinar dos parámetros que serán fundamentales para cálculos posteriores: la tensión máxima admisible y la eficiencia de la junta soldada.

En la *figura 3.12* se muestran valores típicos para la tensión máxima admisible en función de la temperatura, según el código ASME BPV Sec. VIII D.1. El reactor trabaja a 75°C, lo que equivale a 167 °F, por lo tanto, se selecciona en la *figura 3.12* el valor de tensión máxima para el acero inoxidable 304 a dicha temperatura.

Material	Grade	Min Tensile Strength (ksi)	Min Yield Strength (ksi)	Maximum Temperature (°F)	Maximum Allowable Stress at Temperature °F (ksi = 1000 psi)				
					100	300	500	700	900
Carbon steel	A285 Gr A	45	24	900	12.9	12.9	12.9	11.5	5.9
Killed carbon Steel	A515 Gr 60	60	32	1000	17.1	17.1	17.1	14.3	5.9
Low alloy steel 1¼ Cr, ½ Mo, Si	A387 Gr 22	60	30	1200	17.1	16.6	16.6	16.6	13.6
Stainless steel 13 Cr	410	65	30	1200	18.6	17.8	17.2	16.2	12.3
Stainless steel 18 Cr, 8 Ni	304	75	30	1500	20.0	15.0	12.9	11.7	10.8
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Cb	347	75	30	1500	20.0	17.1	15.0	13.8	13.4
Stainless steel 18 Cr, 10 Ni, Ti	321	75	30	1500	20.0	16.5	14.3	13.0	12.3
Stainless steel 16 Cr, 12 Ni, 2 Mo	316	75	30	1500	20.0	15.6	13.3	12.1	11.5

Note:
 1. The stress values for type 304 stainless steel are not the same as those given for stainless steel 304L in [Table 7.8](#)
 2. 1 ksi = 1000 psi = 6.8948 N/mm²

Figura 3.12. Valor de tensión máxima del acero inoxidable. Fuente: Chemical Engineering Design.

Como la temperatura de 167 °F está entre 100 y 300 °F se realiza una interpolación, determinando que el valor de tensión admisible será: $18,3 \cdot 10^3$ psi.

Para pasar de psi a N/mm²:

$$18,325 \cdot 10^3 \text{ psi} = \frac{6,8948}{1000} = 126,347 \text{ N/mm}^2$$

De esta manera, el valor máximo de extensión admisible es de **126,347 N/mm²**.

Por otro lado, se debe tener en cuenta que todos los tanques están formados por fondos, cabezales o accesorios que están unidos por soldaduras. Un valor fundamental es la eficiencia de la junta soldada, ya que servirá para calcular el espesor más adelante.

En la *figura 3.13* se muestran los valores máximos permitidos para la eficiencia de las juntas.

Joint Description	Joint Category	Degree of Radiographic Examination		
		Full	Spot	None
Double-welded butt joint or equivalent	A, B, C, D	1.0	0.85	0.70
Single-welded butt joint with backing strip	A, B, C, D	0.9	0.8	0.65
Single-welded butt joint without backing strip	A, B, C	NA	NA	0.60
Double full fillet lap joint	A, B, C	NA	NA	0.55
Single full fillet lap joint with plug welds	B, C	NA	NA	0.50
Single full fillet lap joint without plug welds	A, B	NA	NA	0.45

Figura 3.13. Valores máximos permitidos para la eficiencia de las juntas. Fuente: Chemical Engineering Design.

El diseño y la selección de las juntas de soldadura se determina siguiendo el código ASME BPV sec. VIII D.1- Parte UW-Requisitos para los recipientes a presión fabricados por soldadura.

Este código establece que para tanques con presión atmosférica se utilizan las juntas de solape, aunque éstas no son muy comunes en otros recipientes a presión. Existen tres tipos: unión de solape con doble filete completo, unión de solape con filete completo simple y soldaduras por tapón y unión de solape con filete completo sin soldaduras por tapón.

Se elige la unión de solape con filete completo simple y soldaduras por tapón ya que en este caso se utilizan dos filetes de soldadura completa a lo largo de la superposición entre las piezas y lo que proporciona mayor resistencia y estabilidad a la unión.

Por tanto, eligiendo en la *figura 3.13* el valor correspondiente, se determina que el valor para la eficiencia de las juntas es de 0,55.

2.4 Selección del tipo de impulsor para el sistema de agitación

Se encuentran disponibles diversos tipos de agitadores para su implementación en todo tipo de reactores, y su elección adecuada depende de las propiedades físicas de la mezcla, así como del funcionamiento del proceso.

A la hora de seleccionar el sistema de agitación, se consideran tres características fundamentales.

- El tipo de mezcla.
- La capacidad del recipiente.
- Las propiedades del fluido (especialmente la viscosidad).

Como se ha mencionado en el documento de la *Memoria*, la viscosidad de la mezcla y la dirección de flujo son dos parámetros fundamentales en este apartado.

Atendiendo a las especificaciones de Edwar L. Paul et al. (2003), para las mezclas con transferencia de calor el flujo de estas debe ser axial, de este modo, se debe elegir entre dos tipos de agitadores en función de sus características.

Uno de los tipos más antiguos de agitadores es la hélice marina, la cual es muy pesada debido a su fabricación por fundición. Por otro lado, existe el impulsor de palas inclinadas, que es considerablemente más ligero que la hélice y cuenta con un sistema que permite la mezcla de la reacción tanto en flujo axial como radial, lo que lo convierte en un impulsor de flujo mixto. Además, resulta sumamente útil para mezclas de viscosidad media y baja.

A continuación, en la *figura 3.14* se observa la turbina de palas inclinadas (a) y la hélice (b):

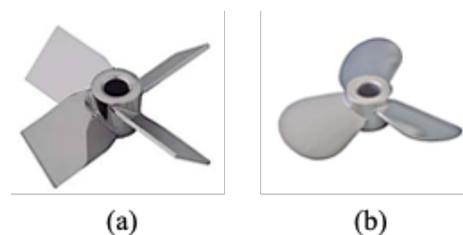


Figura 3.14. Turbina de palas inclinadas y hélice. Fuente: <https://www.inoxpa.com>

Atendiendo a las especificaciones que se han explicado en el párrafo anterior se elige la **turbina de palas inclinadas** como sistema de agitación, teniendo en cuenta que la disposición más común es la de 4 palas inclinadas a 45°.

2.5 Selección del sistema de reflujo

Como se ha comentado en el documento de la *Memoria*, existen diferentes tipos de condensadores que son utilizados como sistema de reflujo en una industria química. En este proyecto concreto se elige un condensador de serpentín.

Esta elección se debe principalmente a las siguientes razones:

- **Eficiencia en la transferencia de calor:** la estructura de serpentín proporciona un área de intercambio de calor muy favorable que facilita una transferencia eficiente entre el calor del fluido que se condensa.
- **Resistencia a la corrosión:** para el serpentín se utilizan materiales como el acero inoxidable o el cobre que aportan una gran resistencia a la corrosión.
- **Compacto y liviano:** en comparación a otros tipos de condensadores, los serpentines destacan por ser compactos y livianos. Esto los convierte en la elección ideal para los diseños ligeros y que necesitan espacios limitados.
- **Facilidad de limpieza y mantenimiento:** los serpentines tienen una estructura lisa y accesible que facilita la limpieza de los sedimentos que se puedan acumular con el tiempo.
- **Coste:** el diseño compacto, la alta transferencia de calor y la facilidad de fabricación que presentan estos condensadores derivan en costes de producción más bajos.

Gracias a estas ventajas, se elige por heurística como sistema de reflujo un **condensador de serpentín**.

3. ANEXO III: DISEÑO DEL REACTOR

3.1 Dimensionamiento del reactor

Para dimensionar el reactor, en primer lugar, se realizarán los cálculos de diseño del tanque (incluyendo el fondo), seguidamente se calcularán las dimensiones del cabezal toriesférico utilizado y finalmente se diseña el sistema de agitación.

3.1.1 Dimensiones del tanque

Para dimensionar los parámetros del reactor se deben fijar 3 características: el diámetro del reactor que será de 1,5 metros, la presión de operación que es igual a 1 atm y el volumen de producción que es equivalente a 1,7 m³, se debe tener en cuenta que a este valor hay que añadirle un factor de seguridad del 30% para determinar el volumen del tanque.

De esta manera, el volumen del tanque será determinado por la *ecuación 3.13*:

$$V_{\text{tanque}} = V_u + 0,3 \cdot V_t \quad (3.13)$$

Sustituyendo el valor del volumen útil:

$$V_{\text{tanque}} = 1,7 + 1,7 \cdot 0,3$$

$$V_{\text{tanque}} = 2,21 \text{ m}^3$$

A continuación, en la *figura 3.15* se muestra un esquema que permitirá desarrollar los parámetros de diseño.

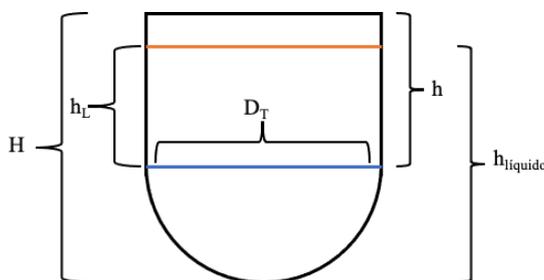


Figura 3.15. Esquema del reactor. Fuente: elaboración propia.

Como el reactor es cilíndrico y el fondo es semiesférico, el volumen será la suma de ambos volúmenes, tal y como se muestra en la *ecuación 3.14*:

$$V_t = \pi \cdot r_t^2 \cdot h + \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r_t^3 \quad (3.14)$$

Todos los parámetros son conocidos, por lo que, bastará con despejar h, que es la altura de la parte cilíndrica:

$$h = \frac{V_t - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r_t^3}{\pi \cdot r_t^2} \quad (m) \quad (3.14.1)$$

$$V_{\text{tanque}} = 2,21 \text{ m}^3$$

$$r_t = 0,75 \text{ m}$$

Sustituyendo estos valores:

$$h = \frac{2,21 - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot 0,75^3}{\pi \cdot 0,75^2}$$

$$h = 0,75 \text{ m}$$

De esta forma, la altura total del cuerpo será la suma del radio del tanque y la altura de la parte cilíndrica, como se observa en la *ecuación 3.15*:

$$H = h + r_t \quad (m) \quad (3.15)$$

$$H = 0,75 + 0,75$$

$$H = 1,5 \text{ m}$$

Tal y como indica la bibliografía para requisitos de diseño de reactores el valor de la altura del tanque y el diámetro coinciden.

Otro parámetro que se debe determinar es la altura del líquido dentro del tanque. Teniendo en cuenta que la producción de la mezcla será de $1,7 \text{ m}^3$, la altura del líquido será la altura de la parte semiesférica más la altura de la parte cilíndrica.

Para determinar la altura de la parte semiesférica se usa la *ecuación 3.16*:

$$V_u = \pi \cdot r_t^2 \cdot h_L + \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r_t^3 \quad (m^3) \quad (3.16)$$

Despejando:

$$h_L = \frac{V_u - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r_t^3}{\pi \cdot r_t^2} \quad (m) \quad (3.16.1)$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$h_L = \frac{2,7 - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot 0,75^3}{\pi \cdot 0,75^2}$$

$$h_L = 0,462 \text{ m}$$

Seguidamente se calcula la altura del líquido con la *ecuación 3.17*:

$$h_{\text{líquido}} = r_t + h_L \quad (m) \quad (3.17)$$

Sustituyendo:

$$h_{\text{líquido}} = 0,75 + 0,462$$

$$h_{\text{líquido}} = 1,21 \text{ m}$$

Por otro lado, se debe determinar el espesor, para lo que es necesario conocer la presión de diseño, esta presión se toma como un 10% por encima de la presión de operación, tal y como se muestra en la *ecuación 3.18*:

$$P_i = 1,1 \cdot P_o \quad (atm) \quad (3.18)$$

Siendo $P_o = 1 \text{ atm}$:

$$P_i = 1,1 \cdot 1 = 1,1 \text{ atm} = 0,1114 \text{ N/mm}^2$$

Para calcular el espesor se utilizan tres ecuaciones, una para la parte cilíndrica, una para el fondo y otra distinta para la tapa.

Parte cilíndrica:

El espesor de la parte cilíndrica se determina con la *ecuación 3.19*, especificada por el código ASME BPV (Sec. VIII D.1 Parte UG-27):

$$e_c = \frac{P_i \cdot D_t}{2SE - 1,2 \cdot P_i} \quad (m) \quad (3.19)$$

Donde:

P_i : presión interna (N/mm^2).

D_t : diámetro del tanque (m).

S: máxima tensión admisible por el material (N/mm^2).

E: Eficiencia de la junta soldada.

La máxima tensión admisible y la eficiencia de la junta soldada se determinan de las *figuras 3.12 y 3.13* del punto 2.3 *Elección del material, del Anexo II*.

Sabiendo entonces que:

$P_i = 0,1114 \text{ MPa}$.

$D_t = 1,5 \text{ m}$.

$S = 126,347 \text{ N/mm}^2$.

$E = 0,55$.

Se sustituye en la *ecuación 3.19*:

$$e_c = \frac{0,1114 \cdot 1,5}{2 \cdot 126,347 \cdot 0,55 - 1,2 \cdot 0,1114}$$

$$e_c = 0,001203 \text{ m} = 1,203 \text{ mm}$$

El espesor de la parte cilíndrica será de **1,203 mm**.

Fondo semiesférico:

Para calcular el espesor del fondo semiesférico, se utiliza la *ecuación 3.20*, determinada para el esférico, dividida entre dos:

$$e_{\text{fondo}} = \frac{P_i \cdot r_t}{2SE - 0,2 \cdot P_i} \quad (m) \quad (3.20)$$

$$e_{\text{fondo}} = \frac{0,1114 \cdot 0,75}{2 \cdot 126,347 \cdot 0,55 - 0,2 \cdot 0,1114}$$

$$e_{\text{fondo}} = 0,000601 \text{ m} = 0,601 \text{ mm}$$

Por tanto, espesor del fondo semiesférico es de **0,601 mm**.

Tapa torisférica:

Finalmente, para el espesor de la tapa del tanque, de geometría torisférica:

$$e_{tapa} = \frac{0,885 \cdot P_i \cdot R_c}{SE - 0,1 \cdot P_i} \quad (m) \quad (3.21)$$

Donde R_c es el diámetro del tanque. De esta forma, se sustituye:

$$e_{tapa} = \frac{0,885 \cdot 0,1114 \cdot 1,5}{126,347 \cdot 0,55 - 0,1 \cdot 0,1114}$$

$$e_{tapa} = 0,002128 \text{ m} = 2,128 \text{ mm}$$

El espesor para la tapa será de **2,128 mm**.

El código ASME BPV (Sec. VIII D.1 Parte UG), establece que el espesor mínimo para el cuerpo y los cabezales, sin tener en cuenta el sobreespesor por corrosión, debe ser de 1,5 mm. Sin embargo, se establece que el espesor de las paredes de los tanques, teniendo en cuenta un sobreespesor de 2mm no debe ser inferior a los valores que se muestran en la *figura 3.16*:

Vessel Diameter (m)	Minimum Thickness (mm)
1	5
1 to 2	7
2 to 2.5	9
2.5 to 3.0	10
3.0 to 3.5	12

Figura 3.16. Valores de espesor mínimo. Fuente: Chemical Engineering Design.

De esta forma, el espesor del tanque para un tanque con un diámetro de 1,5 mm debe ser de **7mm**.

Tuberías de entrada y salida de reactante

Para la entrada de reactantes se suponen dos tuberías con un diámetro de 0,1 m para cada una.

En el caso de la salida se determina una tubería con un diámetro también de 0,1 m.

Además, se supone para los dos casos una velocidad del fluido de 0,5 m/s, pudiendo calcular de esta manera el caudal de entrada y salida.

Teniendo en cuenta que el parámetro a regular será el caudal, se establecerá para el mismo un valor máximo de 2 L/s (aunque realizando los cálculos respectivos el valor sea más alto). Este valor es razonable porque permite obtener un tiempo de carga y descarga de 28,3 minutos.

3.1.2 Dimensionamiento del cabezal toriesférico

Además, es necesario diseñar el cabezal toriesférico, para lo que se deben calcular sus dimensiones:

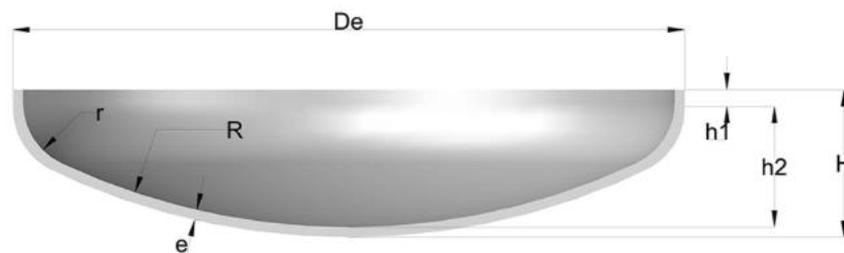


Figura 3.17. Cabezal toriesférico. Fuente: <http://www.hwhead.com>

A partir de la *figura 3.17*, se pueden establecer las siguientes relaciones según la norma DIN 28011:

Para calcular el radio esférico interior, se utiliza la *ecuación 3.22*:

$$R = D_e = D_t + 2 \cdot e \quad (m) \quad (3.22)$$

Al sustituir:

$$R = 1,5 + 2 \cdot 0,007 = 1,514 \text{ m}$$

Se calcula también el radio de rebordeo interior con la *ecuación 3.23*:

$$r = 0,1 \cdot R \quad (m) \quad (3.23)$$

Se sustituyen los valores y se obtiene el valor requerido:

$$r = 0,1 \cdot 1,514 = 0,1514 \text{ m}$$

Además, se debe calcular la parte recta de la tapa mediante la *ecuación 3.24*:

$$h_1 = 3,5 \cdot e \text{ (m)} \quad (3.24)$$

De este modo, sustituyendo los valores de la ecuación:

$$h_1 = 3,5 \cdot 0,007 = 0,0245 \text{ m}$$

La zona donde empieza la curvatura de rebordeo de la tapa se puede hallar usando la *ecuación 3.25*:

$$h_2 = 0,1935 \cdot D_e - 0,455 \cdot e \text{ (m)} \quad (3.25)$$

Así pues, el valor de h_2 será:

$$h_2 = 0,1935 \cdot 1,514 - 0,455 \cdot 0,007 = 0,289 \text{ m}$$

Finalmente se calcula la altura total del cabezal torisférico sumando las otras dos alturas, tal y como se muestra en la *ecuación 3.26*:

$$H_{\text{tapa torisférica}} = h_1 + h_2 \text{ (m)} \quad (3.26)$$

$$H_{\text{tapa torisférica}} = 0,0245 + 0,289 = 0,3135 \text{ m}$$

Los parámetros que intervienen en las ecuaciones anteriormente nombradas son:

R: radio esférico interior (m).

D_e : diámetro exterior (m).

D_t : diámetro del tanque (m).

e: espesor del tanque (m)

r: radio de rebordeo interior (m).

h_1 : parte recta de la tapa (m).

h_2 : zona donde empieza la curvatura de rebordeo de la tapa (m).

$H_{\text{tapa torisférica}}$: altura total de la tapa (m).

3.2 Diseño del sistema de agitación

En este apartado se calculan las dimensiones de la turbina de palas inclinadas.

Dimensiones del agitador:

En primer lugar, para calcular el diámetro del impulsor se utiliza la *figura 3.18*:

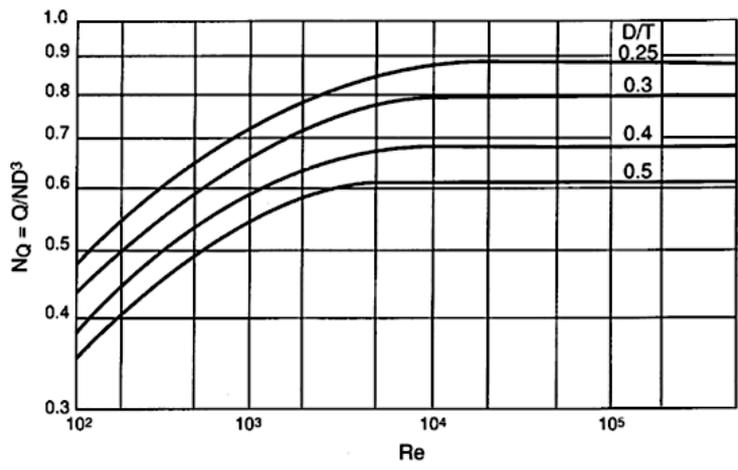


Figura 3.18. Relación número de bombeo y diámetro del agitador. Fuente: Chemical Process Equipment.

Tal y como se puede observar se debe conocer el número de bombeo (N_Q), para ello se hará uso de la figura 3.19, donde se selecciona el valor correspondiente a una turbina de palas inclinadas.

Impeller Type	N_Q
Propeller	0.4–0.6
Pitched blade turbine	0.79
Hydrofoil impellers	0.55–0.73
Retreat curve blade	0.3
Flat-blade turbine	0.7
Disk flat-blade turbine (Rushton)	0.72
Hollow-blade turbine (Smith)	0.76

Figura 3.19. Valores del número de bombeo en función del tipo de agitador. Fuente: Chemical Process Equipment.

En este caso, se determina que el número de bombeo para una turbina de palas inclinadas es de 0,79. Con este valor y teniendo en cuenta que el régimen de funcionamiento será turbulento (altos valores del Reynolds) se pueden buscar en la figura 3.20 cuál será la relación entre diámetro del impulsor (D) y el diámetro del tanque (T).

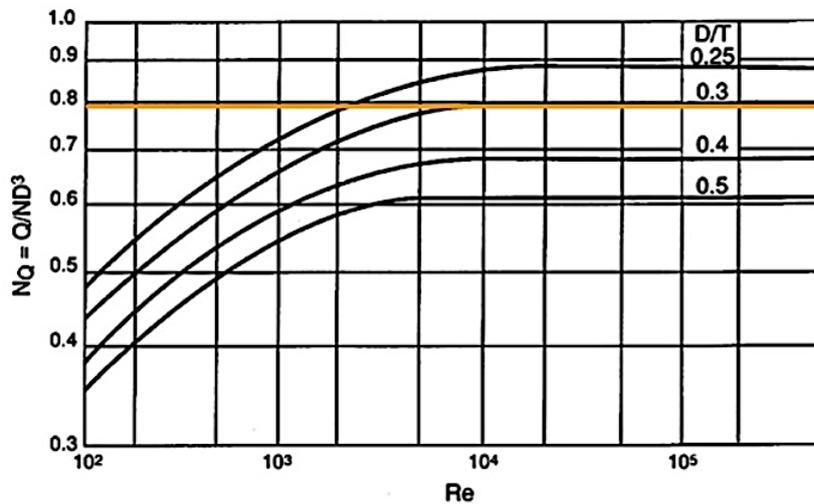


Figura 3.20. Selección de la relación entre el diámetro del agitador y el diámetro del tanque. Fuente: Chemical Process Equipment.

De esta forma se determina que la relación es $D_a/D_t=0,3$ y se puede calcular el diámetro de la turbina, sabiendo que el diámetro del tanque es de 1,5 metros, usando la ecuación 3.27:

$$\frac{D_a}{D_t} = 0,3 \quad (3.27)$$

Despejando el diámetro del agitador:

$$D_a = 0,3 \cdot D_t \quad (3.27.1)$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$D_a = 0,3 \cdot 1,5$$

$$D_a = 0,45 \text{ m}$$

Por otro lado, el ancho de las palas se puede hallar mediante la figura 3.21. Donde se selecciona la curva 6 (la correspondiente al impulsor de palas inclinadas "Pitched Blade") para determinar la relación entre el ancho de las palas y el diámetro de la turbina

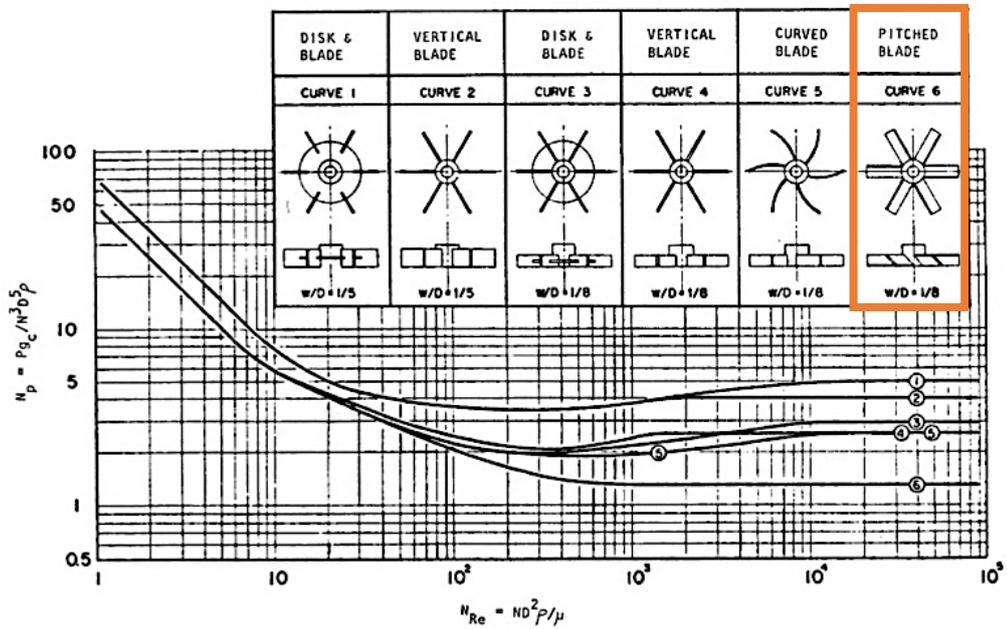


Figura 3.21. Selección de la relación entre el ancho de las palas y el diámetro del agitador. Fuente: Chemical Process Equipment.

Conociendo que la relación es de 1/8, se calcula el ancho de las palas con la ecuación 3.28:

$$\frac{w}{D_a} = \frac{1}{8} \quad (3.28)$$

Reordenando la ecuación:

$$w = \frac{1}{8} \cdot D_a \quad (m) \quad (3.28.1)$$

Sustituyendo:

$$w = \frac{1}{8} \cdot 0,45$$

$$w = 0,056 \text{ m}$$

Así pues, el valor del diámetro del agitador será de **0,45 m** y el ancho de las palas de **0,056 m**.

Para configurar completamente el sistema de agitación del tanque se debe determinar la distancia del agitador al fondo del tanque. Con la relación de la figura 3.22 se puede calcular este parámetro.

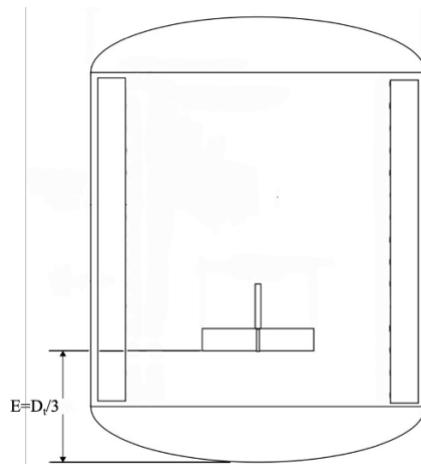


Figura 3.22. Relación distancia del agitador al fondo del tanque y el diámetro del tanque. Fuente: Handbook of industrial mixing.

Por tanto, la distancia del agitador al fondo del tanque se determina con la ecuación 3.29:

$$E = \frac{D_t}{3} \quad (m) \quad (3.29)$$

Sustituyendo:

$$E = \frac{1,5}{3} = 0,5 \text{ m}$$

El último paso para diseñar el agitador es determinar el espesor de las palas, para ello se utiliza la ecuación 3.30:

$$t = 0,981 \left\{ \frac{P_{motor}}{N \cdot n_b} \cdot \frac{f_L \left(\frac{D}{2} \right) - \frac{D_e}{2}}{\sin \alpha \left[f_L \left(\frac{D}{2} \right) \right] \cdot W \cdot \sigma_b} \right\}^{1/2} \quad (m) \quad (3.30)$$

Donde:

P: potencia del motor (W), 3000 W.

N: velocidad del agitador (rev/s), vale 4,85.

n_b : número de palas, en este caso 4.

f_L : fuerza efectiva, que para una turbina típica de palas inclinadas equivale a 0,8.

D_a : diámetro del agitador (m), 0,45.

d_e : diámetro del eje agitador (m), 0,0256.

W: ancho de las palas, 0,056 m.

σ_b : tensión de las palas (N/m²), equivale a $80 \cdot 10^6$ (figura 3.23)

α : el ángulo de las palas, que en este caso es de 45°.

Material	Shaft Design Tensile Stress		Shaft Design Shear Stress		Blade Design Stress	
	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶
Carbon steel	9 000	62.1	5400	37.2	10 900	75.2
Stainless steel 304	9 600	66.2	5800	40.0	11 600	80.0
Stainless steel 304L	8 400	57.9	5100	35.2	10 200	70.3
Stainless steel 316	10 000	68.9	6000	41.4	12 100	83.4
Stainless steel 316L	8 700	60.0	5200	35.9	10 500	72.4
Hastelloy C	13 200	91.0	7900	54.5	15 900	109.6
Hastelloy B	14 300	98.6	8600	59.3	17 200	118.6
Monel 400	9 200	63.4	5500	37.9	11 100	76.5
Inconel 600	10 300	71.0	6200	42.7	12 400	85.5
Nickel 200	7 300	50.3	4400	30.3	8 800	60.7
Carpenter 20	11 100	76.5	6600	45.5	13 300	91.7

Figura 3.23. Valor de la tensión de las palas. Fuente: Handbook of industrial mixing.

Sustituyendo todos los valores en la ecuación 3.30, se determina el espesor de las palas.

$$t = 0,981 \left\{ \frac{P_{motor}}{N \cdot n_b} \cdot \frac{f_L \left(\frac{D}{2} \right) - \frac{D_s}{2}}{\sin \alpha \left[f_L \left(\frac{D}{2} \right) \right] \cdot W \cdot \sigma_b} \right\}^{1/2} = 0,981 \left\{ \frac{3000}{4,85 \cdot 4} \cdot \frac{0,8 \cdot \left(\frac{0,45}{2} \right) - \frac{0,0256}{2}}{\sin(45) \left[0,8 \left(\frac{0,45}{2} \right) \right] \cdot 0,056 \cdot 80 \cdot 10^6} \right\}^{1/2}$$

$$= 0,00661 \text{ m} \approx 7 \text{ mm}$$

De esta manera, el espesor de las palas será de **7 mm**.

Cálculo de la potencia del agitador y del motor:

Además, también es necesario calcular la potencia requerida por el agitador y la velocidad de giro para tener todas sus características:

Teniendo en cuenta que los valores de viscosidad y densidad se calculan para una temperatura media entre 25 y 75 °C, (que es el rango de interés), la temperatura será de 50 °C.

Por tanto, para calcular el valor de la densidad de la mezcla a 50 °C, se utilizará la ecuación 3.12:

$$\rho = (72,439 - 0,0353 \cdot T(K)) \cdot X + (1108,5 - 0,9415 \cdot T(K)) \quad (\text{kg/m}^3) \quad (3.12)$$

Sustituyendo la temperatura:

$$\rho = (72,439 - 0,0353 \cdot 323) \cdot 0,09 + (1108,5 - 0,9415 \cdot 323) = 809,889 \text{ kg/m}^3$$

Por otro lado, la viscosidad de la mezcla se halla con la *ecuación 3.11*:

$$\begin{aligned} \mu = & (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot T \text{ (K)}) \cdot X \\ & + (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot T \text{ (K)}) \text{ (Pa} \cdot \text{s)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Al sustituir la temperatura:

$$\begin{aligned} \mu = & (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot 323) \cdot 0,09 + (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot 323) \\ = & 7,881 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s} \end{aligned}$$

Así pues, primeramente, se determina el número de potencia del agitador (N_p) que viene dado por la *ecuación 3.31*:

$$N_p = \text{número de potencia} = \frac{P_a}{d_a^5 \cdot N^3 \cdot \rho} \left(\frac{\text{kW}}{\text{m}^3} \right) \quad (3.31)$$

La potencia de entrada que se utiliza será de aproximadamente 1,5 kW/m³ (agitación media) tal y como se indica para mezclas líquido-líquido en la *figura 3.24*:

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Figura 3.24. Valores de potencia de entrada. Fuente: Chemical Engineering Design.

De esta manera, se puede calcular P_a con la *ecuación 3.32*:

$$P_a = P_i \cdot V_{\text{líquido}} \cdot 1000 \text{ (W)} \quad (3.32)$$

Sustituyendo:

$$P_a = 1,5 \cdot 1,7 \cdot 1000$$

$$P_a = 2550 \text{ W}$$

Además, teniendo en cuenta que la eficiencia del motor es de 85%, se determina la potencia necesaria:

$$P_{motor} = \frac{2550}{0,85} = 3000 \text{ W}$$

Seguidamente, usando la *figura 3.25* se puede determinar el número de potencia, que será aproximadamente de 1,5 para altos valores del Reynolds, usando la curva 6.

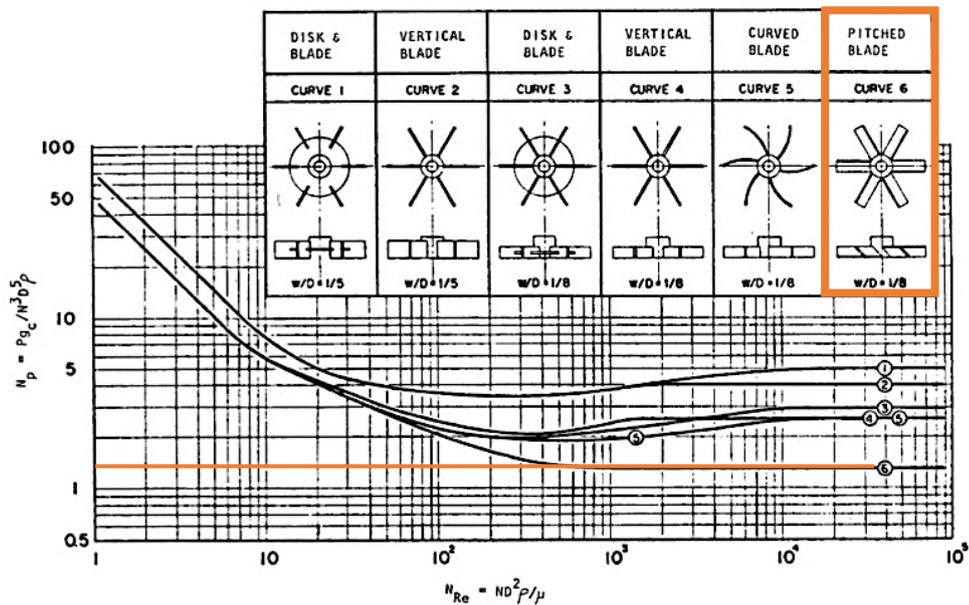


Figura 3.25. Determinación del número de potencia. Fuente: Chemical Process Equipment.

Por tanto, despejando la velocidad de giro de la turbina (N) de la *ecuación 3.31*:

$$1,5 = \frac{2550}{0,45^5 \cdot N^3 \cdot 809,889}$$

$$N = \sqrt[3]{\frac{2550}{0,45^5 \cdot 809,889 \cdot 1,5}}$$

$$N = 4,85 \frac{rev}{s} \approx 290,72 \text{ rpm}$$

Así mismo, con todos los valores se puede calcular el Reynolds con la *ecuación 3.33*:

$$Re = \frac{D^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu} \quad (3.33)$$

Al sustituir:

$$Re = \frac{0,45^2 \cdot 4,85 \cdot 809,889}{7,881 \cdot 10^{-4}}$$

$$Re = 1,00928 \cdot 10^6$$

Con este valor de Reynolds, se puede comprobar que efectivamente el valor para el número de potencia es de 1,5, por lo que la suposición sería válida.

Dimensionamiento del eje del agitador:

Otro parámetro de suma importancia en el sistema de agitación es el eje del agitador. Para dimensionarlo se debe determinar la longitud, el diámetro y el espesor del eje del agitador.

Conociendo el diámetro del tanque, la altura de la tapa toriesférica, la altura del serpentín (calculada en el *Anexo V*) y la distancia del agitador al fondo del tanque, se puede calcular la longitud del eje del agitador, tal y como se muestra en la *ecuación 3.34*:

$$L_i = D_t + H_{tapa\ toriesférica} + h_s - E \quad (m) \quad (3.34)$$

Así, sustituyendo:

$$L_i = 1,5 + 0,3135 + 0,6 - 0,5 = 1,91 \text{ m}$$

De esta forma, se establecerá una longitud de **2 m** para tener suficiente espacio para acoplar el reductor de velocidades en el eje del agitador.

Por otro lado, para calcular el diámetro del eje de agitación se debe calcular tanto el diámetro mínimo del eje para la tensión de corte permitida, determinado por la *ecuación 3.35* como el diámetro mínimo para la tensión de tracción permitida con la *ecuación 3.36*:

El diámetro mínimo del eje para la tensión de corte permitida:

$$d_s = \left(\frac{16 \sqrt{T_{Q(máx)}^2 + M_{máx}^2}}{\pi \cdot \sigma_s} \right)^{1/3} \quad (m) \quad (3.35)$$

El diámetro mínimo del eje para la tensión de tracción permitida:

$$d_t = \left(\frac{16(M_{m\acute{a}x} + \sqrt{T_{Q(m\acute{a}x)}^2 + M_{m\acute{a}x}^2})}{\pi \cdot \sigma_t} \right)^{1/3} \quad (m) \quad (3.36)$$

Donde:

T_Q (máx.) (N·m): valor de torque máximo.

$M_{m\acute{a}x}$ (N/m): momento de flexión máximo.

σ_s (N/m²): Límite de tensión de corte.

σ_t (N/m²): Límite de tracción.

El torque se calcula con la *ecuación 3.37*:

$$T_{Q(m\acute{a}x)} = \frac{P}{2 \cdot \pi \cdot N} \quad (N \cdot m) \quad (3.37)$$

Siendo:

P (W): potencia del motor, que equivale a 3000 W.

N: velocidad del agitador (rev/s), que equivale a 4,85 rev/s.

Sustituyendo:

$$T_{Q(m\acute{a}x)} = \frac{3000}{2 \cdot \pi \cdot 4,85} = 98,446 \text{ N} \cdot \text{m}$$

Para calcular el momento de flexión se utiliza la *ecuación 3.38*:

$$M_{m\acute{a}x} = \sum_{i=1}^n \frac{0,048 \cdot P_{i,motor} \cdot L_i \cdot f_{hi}}{N \cdot D_a} \quad (N \cdot m) \quad (3.38)$$

Donde:

L_i : distancia del agitador a la tapa del tanque (m), que equivale a 2 m.

N: velocidad del agitador (rev/s).

D_a : diámetro del agitador (m), equivale a 0,45 m.

f_{hi} : factor de servicio hidráulico.

$P_{i, motor}$: fracciones individuales de potencia del motor para cada agitador, en este caso corresponde directamente a la potencia del motor porque solo hay un agitador (W).

El factor de servicio hidráulico está relacionado con el tipo de agitador y las condiciones de operación del proceso. En la *figura 3.26*, se muestran los valores típicos para este parámetro.

Condition	High Efficiency Impeller	45° Pitched Four-Blade Impeller
Standard	1.5	1.0
Significant time at the liquid level	2.5–3.5	2.0–3.0
Operation in boiling systems	2.0–3.0	1.5–2.5
Operation in gas sparged systems	2.5–3.5	2.0–3.0
Large volume solid additions	3.0–5.0	3.0–5.0
Impacting of large solids	5.0–7.0	5.0–7.0
Startup in settled solids	5.0–7.0	5.0–7.0
Operation in a flow stream	1.5–7.0	1.0–7.0

Figura 3.26. Valores del factor de servicio hidráulico. Fuente: Handbook of industrial mixing.

Se eligen las condiciones “standard” para la turbina de palas inclinadas, obteniendo un valor de 1.

Sustituyendo en la ecuación 3.38:

$$M_{\max} = \sum_{i=1}^n \frac{0,048 \cdot 3000 \cdot 2 \cdot 1}{4,85 \cdot 0,45} = 131,96 \text{ N} \cdot \text{m}$$

Finalmente, el límite de tensión de corte, para el acero AISI 304, se determina mediante la figura 3.27:

Material	Shaft Design Tensile Stress		Shaft Design Shear Stress		Blade Design Stress	
	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶
Carbon steel	9 000	62.1	5400	37.2	10 900	75.2
Stainless steel 304	9 600	66.2	5800	40.0	11 600	80.0
Stainless steel 304L	8 400	57.9	5100	35.2	10 200	70.3
Stainless steel 316	10 000	68.9	6000	41.4	12 100	83.4
Stainless steel 316L	8 700	60.0	5200	35.9	10 500	72.4
Hastelloy C	13 200	91.0	7900	54.5	15 900	109.6
Hastelloy B	14 300	98.6	8600	59.3	17 200	118.6
Monel 400	9 200	63.4	5500	37.9	11 100	76.5
Inconel 600	10 300	71.0	6200	42.7	12 400	85.5
Nickel 200	7 300	50.3	4400	30.3	8 800	60.7
Carpenter 20	11 100	76.5	6600	45.5	13 300	91.7

Figura 3.27. Valor del límite de tensión de corte. Fuente: Handbook of industrial mixing.

De esta forma, se determina un valor de $40 \cdot 10^6 \text{ N/m}^2$.

Así, sustituyendo todos los valores, se puede calcular el diámetro del eje para la tensión de corte con la *ecuación 3.35*:

$$d_s = \left(\frac{16 \sqrt{T_{Q(máx)}^2 + M_{máx}^2}}{\pi \cdot \sigma_s} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{16 \sqrt{98,446^2 + 131,96^2}}{\pi \cdot 40 \cdot 10^6} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$d_s = 0,027 \text{ m}$$

Para calcular el diámetro mínimo del eje para la tensión de tracción permitida, se debe determinar de la *figura 3.28* el valor de tensión de tracción:

Material	Shaft Design Tensile Stress		Shaft Design Shear Stress		Blade Design Stress	
	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶	[psi]	{N/m ² } × 10 ⁶
Carbon steel	9 000	62.1	5400	37.2	10 900	75.2
Stainless steel 304	9 600	66.2	5800	40.0	11 600	80.0
Stainless steel 304L	8 400	57.9	5100	35.2	10 200	70.3
Stainless steel 316	10 000	68.9	6000	41.4	12 100	83.4
Stainless steel 316L	8 700	60.0	5200	35.9	10 500	72.4
Hastelloy C	13 200	91.0	7900	54.5	15 900	109.6
Hastelloy B	14 300	98.6	8600	59.3	17 200	118.6
Monel 400	9 200	63.4	5500	37.9	11 100	76.5
Inconel 600	10 300	71.0	6200	42.7	12 400	85.5
Nickel 200	7 300	50.3	4400	30.3	8 800	60.7
Carpenter 20	11 100	76.5	6600	45.5	13 300	91.7

Figura 3.28. Valor de la tensión de tracción permitida. Fuente: Handbook of industrial mixing.

Así, se obtiene un valor de $66,2 \cdot 10^6 \text{ N/m}^2$.

Por tanto, sustituyendo en la *ecuación 3.36*:

$$d_t = \left(\frac{16 \left(M_{máx} + \sqrt{T_{Q(máx)}^2 + M_{máx}^2} \right)}{\pi \cdot \sigma_t} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{16 \left(131,96 + \sqrt{98,446^2 + 131,96^2} \right)}{\pi \cdot 66,2 \cdot 10^6} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$d_t = 0,028 \text{ m}$$

Para definir el diámetro del eje, se elige el valor mayor entre d_s y d_t , por tanto, el diámetro del eje del agitador será de **0,028 m**.

3.3 Diseño de las placas deflectoras

Los deflectores de pared son un factor muy importante que se utiliza en los tanques de agitación que operan en régimen turbulento.

La geometría recomendada por Edwar L. Paul et al. (2003) para el dimensionamiento de las placas deflectoras se muestra en la *figura 3.29*:

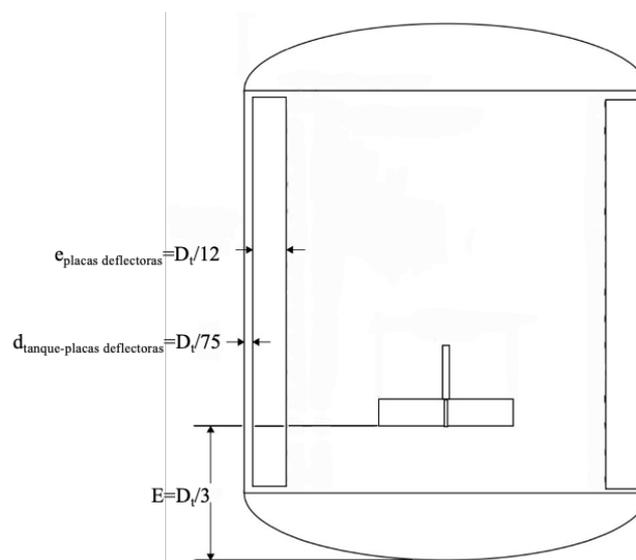


Figura 3.29. Dimensionamiento de las placas deflectoras. Fuente: Handbook of industrial mixing.

De esta forma, se puede determinar el ancho de las placas deflectoras con la relación expresada en la *ecuación 3.39*:

$$a_{\text{placas deflectoras}} = \frac{D_t}{12} \quad (m) \quad (3.39)$$

Sustituyendo el diámetro del tanque:

$$a_{\text{placas deflectoras}} = \frac{1,5}{12} = 0,125 \text{ m}$$

Por otro lado, el espacio que habrá entre las placas deflectoras y el tanque se determina con la *ecuación 3.40*:

$$d_{\text{tanque-placas deflectoras}} = \frac{D_t}{75} \quad (m) \quad (3.40)$$

Conociendo el valor del diámetro del tanque:

$$d_{\text{tanque-placas deflectoras}} = \frac{1,5}{75} = 0,02 \text{ m}$$

Por tanto, conociendo el espacio que hay entre las placas deflectoras y el tanque, y la altura del mismo, se puede determinar la longitud de las placas deflectoras, con la *ecuación 3.41*:

$$L_{\text{placas deflectoras}} = h - 2 \cdot d_{\text{tanque-placas deflectoras}} \quad (3.41)$$

Sustituyendo:

$$L_{\text{placas deflectoras}} = 0,75 - 2 \cdot 0,02 = 0,71 \text{ m}$$

En resumen, la anchura de las placas deflectoras será de **0,125 m**, la distancia entre las placas deflectoras y el tanque equivale a **0,02 m** y finalmente, la longitud de las placas deflectoras es de **0,71 m** y el espesor será igual al del tanque, **7 mm**.

4. ANEXO IV: DISEÑO DEL SISTEMA DE CALENTAMIENTO

En el siguiente anexo se detallan los cálculos realizados para diseñar el sistema de calentamiento. La camisa utilizada para calentar la mezcla emplea agua como fluido de circulación a una temperatura de 85°C.

El objetivo principal de este sistema es conseguir que la mezcla alcance una temperatura de 75 °C en un periodo de tiempo razonable, considerando un reactor con una capacidad de producción de 1,7 m³.

A través del balance de energía en estado no estacionario que se muestra en la *ecuación 3.42*, se puede determinar el tiempo de calentamiento:

$$dq = m_{mezcla} \cdot C_{p,mezcla} \cdot \frac{dT}{dt} = U_i \cdot A_i \cdot \Delta T \quad (3.42)$$

De esta forma, despejando el diferencial del tiempo se obtiene la *ecuación 3.42.1* con el siguiente aspecto:

$$\int_0^t dt = \int_{298}^{348} m_{mezcla} \cdot C_{p,mezcla} \frac{dT}{U_i \cdot A_i \cdot \Delta T} \quad (3.42.1)$$

Por tanto, para resolver el balance y obtener el tiempo de calentamiento, será necesario determinar el coeficiente global de transmisión de calor (U_i) referido al área interna mediante la *ecuación 3.43*.

$$\frac{1}{U_i} = \frac{1}{h_0} \cdot \frac{A_i}{A_0} + \frac{e}{k_{acero}} \cdot \frac{A_i}{A_m} + \frac{1}{h_i} \left(\frac{m^2 \cdot K}{W} \right) \quad (3.43)$$

Donde:

k_{acero} : conductividad del acero (W/m·K).

e : espesor del tanque (m).

A_m : área media (m).

A_i : área interna del tanque (m).

A_0 : área externa del tanque (m).

h_0 : coeficiente individual de transmisión de calor referido al área externa (W/m²·K).

h_i : coeficiente individual de transmisión de calor referido al área interna (W/m²·K).

Tal y como se puede observar, el coeficiente global de transferencia de calor depende de los coeficientes individuales de transmisión de calor referidos al área interna (h_i) y externa (h_o) del tanque, que a su vez dependerán de las propiedades físicas del acero y la mezcla de etanol y ácido butírico.

4.1 Cálculo del coeficiente individual de transmisión de calor del fluido que circula por la camisa, agua (área externa del tanque).

En este apartado hay que destacar que por el interior de la camisa circula agua a 85°C continuamente, por lo que el coeficiente es constante.

Para obtener el coeficiente individual de transmisión de calor del agua que circula por la camisa se debe recurrir al número Nusselt, que se representa por la *ecuación 3.44*:

$$Nu = \frac{h_o \cdot D_{eq}}{k_a} \quad (3.44)$$

Despejando el coeficiente individual referido al área externa:

$$h_o = \frac{Nu \cdot k_a}{D_{eq}} \left(\frac{W}{m^2 \cdot K} \right) \quad (3.44.1)$$

Siendo:

k_a : conductividad del agua (W/m·K).

D_{eq} : diámetro equivalente que corresponde al espacio por el que circula el agua.

En primer lugar, se explica el cálculo del diámetro equivalente mediante la *ecuación 3.45*:

$$D_{eq} = \frac{4 \cdot \text{sección de paso}}{\text{perímetro mojado}} = \frac{4 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot (D_i^2 - d_o^2)\right)}{\pi \cdot (D_i + d_o)} = \frac{(D_i + d_o) \cdot (D_i - d_o)}{(D_i + d_o)} \quad (3.45)$$

$$= D_i - d_o \quad (m)$$

Donde:

D_i : diámetro interno de la camisa.

d_o : diámetro externo del tanque.

A continuación, se calcula el diámetro interno de la camisa y el diámetro externo del tanque, para ello se recurre a la *figura 3.30*:

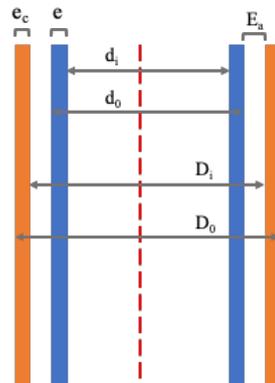


Figura 3.30. Esquema para el cálculo del diámetro de equilibrio. Fuente: elaboración propia.

Siendo:

e_c : espesor de la pared de la camisa, será del mismo valor que la pared del tanque (m).

e : espesor de la pared del tanque (m).

E_a : espacio anular por donde circula el agua (m).

d_i : diámetro interior del tanque (equivale al diámetro del tanque) (m).

d_o : diámetro externo del tanque (m).

D_i : diámetro interno de la camisa (m).

D_o : diámetro externo de la camisa (m).

Existen una serie de valores conocidos que se han especificado en apartados anteriores, y son los siguientes:

$$e=e_c=7 \text{ mm.}$$

$$d_i=1,5 \text{ m}$$

$$E_a= 2 \text{ cm.}$$

Para calcular el diámetro externo del tanque se utiliza la ecuación 3.46:

$$d_o = d_i + 2 \cdot e \quad (m) \quad (3.46)$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$d_o = 1,5 + 2 \cdot 0,007 = 1,514 \text{ m}$$

Por otro lado, el cálculo del diámetro interno y externo de la camisa se hace mediante las ecuaciones 3.47 y 3.48, respectivamente.

$$D_i = d_0 + 2 \cdot E_a \quad (m) \quad (3.47)$$

Sustituyendo:

$$D_i = 1,514 + 2 \cdot 0,02 = 1,554 \text{ m}$$

$$D_0 = D_i + 2 \cdot e_c \quad (m) \quad (3.48)$$

$$D_0 = 1,554 + 2 \cdot 0,007 = 1,568 \text{ m}$$

De esta forma sustituyendo en la *ecuación 3.45* se obtiene el diámetro equivalente:

$$D_{eq} = D_i - d_0 = 1,554 - 1,514 = 0,04 \text{ m}$$

Para calcular el Nusselt existen numerosas ecuaciones disponibles. En este caso particular, se utiliza la ecuación de Dittus-Boelter (*ecuación 3.49*), que es la adecuada para fluidos con una viscosidad similar o inferior a la del agua. Dado que el fluido utilizado es agua, esta ecuación es la correcta para realizar los cálculos necesarios.

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^n \quad (3.49)$$

Donde:

Re: número de Reynolds.

n: constante determinada por la bibliografía, en la que se establece que para fluidos que se enfrían se utiliza un valor de 0,3.

Por tanto, para calcular el Nusselt se deben calcular previamente el Reynolds, *ecuación 3.50* y el Prandtl, *ecuación 3.51*:

$$Re = \frac{v_a \cdot D_{eq} \cdot \rho_a}{\mu_a} \quad (3.50)$$

Siendo:

v_a : velocidad a la que circula el agua (m/s).

D_{eq} : el diámetro de equilibrio (0,04) (m).

ρ_a : densidad del agua a 85 °C (968,62) (kg/m³)

μ_a : viscosidad del agua a 85°C (3,34·10⁻⁴) (Pa·s)

En aplicaciones donde los fluidos circulan a través de la coraza, se encuentra comúnmente un rango de velocidades entre 0,3-1 m/s. En este caso, se considera que el espacio por donde

circula el agua es similar al caso en el que los fluidos fluyen por la coraza. Por tanto, se supone una velocidad de 0,3 m/s.

$$Re = \frac{0,3 \cdot 0,04 \cdot 968,62}{3,34 \cdot 10^{-4}} = 3,48 \cdot 10^4 > 10^4 \rightarrow \text{Régimen turbulento}$$

Para el número Prandtl, se procede de la siguiente manera:

$$Pr = \frac{C_{pa} \cdot \mu_a}{k_a} \quad (3.51)$$

Donde:

C_{pa} : calor específico del agua a 85°C. (4200) (J/kg·K).

k_a : conductividad del agua a 85°C (0,675) (W/m²·K).

Sustituyendo en la *ecuación 3.51*:

$$Pr = \frac{4200 \cdot 3,34 \cdot 10^{-4}}{0,675} = 2,078$$

Finalmente, con estos valores se puede proceder al cálculo del Nusselt sustituyendo en la *ecuación 3.49*:

$$Nu = 0,023 \cdot (3,48 \cdot 10^4)^{0,8} \cdot 2,078^{0,3} = 123,11$$

De esta forma se obtiene el coeficiente individual de transmisión de calor del área externa utilizando la *ecuación 3.44.1*:

$$h_0 = \frac{123,114 \cdot 0,675}{0,04} = 2077,55 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$$

4.2 Coeficiente individual de transmisión de calor del fluido del interior del tanque (área interna)

Para obtener el coeficiente individual de transmisión de calor del fluido del interior del tanque se tiene que llevar a cabo un proceso iterativo porque no es constante, y no se conoce la temperatura interna de la pared para cada valor de temperatura en el interior del tanque.

Al igual que en el caso anterior también se debe partir del valor del número Nusselt, tal y como se muestra en la *ecuación 3.52*:

$$Nu = \frac{h_i \cdot d_i}{k_{mezcla}} \quad (3.52)$$

$$h_i = \frac{Nu \cdot k_{mezcla}}{d_i} \left(\frac{W}{m^2 \cdot K} \right) \quad (3.52.1)$$

Para obtener el número Nusselt se utiliza la *ecuación 3.53*, que es la establecida en (A. Kayode Coker, 2015) para tanques con agitación:

$$Nu = a \cdot Re^b \cdot Pr^c \cdot \left(\frac{\mu(T_{media})}{\mu(T_{int sup})} \right)^d \quad (3.53)$$

Siendo:

Re: Reynolds.

Pr: Número de Prandtl.

$\mu(T_{media})$: Viscosidad a la temperatura media (Pa·s).

$\mu(T_{int sup})$: Viscosidad a la temperatura interior de la superficie (Pa·s).

Las constantes a, b, c y d dependen del tipo de impulsor, en este caso, para una turbina de 4 palas inclinadas a 45°C. Estos valores se establecen en (A. Kayode Coker, 2015) y son los siguientes:

a: 0,54

b: 0,67

c: 0,25

d: 0,14

Hay que tener en cuenta que (A. Kayode Coker, 2015), además, indica que el valor de h_i obtenido se debe dividir entre 1,3.

De esta forma sustituyendo los valores de a,b,c y d en la *ecuación 3.53*, se obtiene:

$$Nu = 0,54 \cdot Re^{0,67} \cdot Pr^{0,25} \cdot \left(\frac{\mu(T_{media})}{\mu(T_{int sup})} \right)^{0,14} \quad (3.53.1)$$

Y la *ecuación 3.52.1* para el coeficiente individual de transmisión de calor, se modifica convirtiéndose en la *ecuación 3.52.2*:

$$h_i = \frac{Nu \cdot k_{mezcla}}{d_i \cdot 1,3} \left(\frac{W}{m^2 \cdot K} \right) \quad (3.52.2)$$

Además, tal y como muestra la *ecuación 3.43* para calcular el coeficiente global de transmisión de calor es necesario conocer el área media. Este procedimiento se hará mediante la *ecuación 3.54*:

$$A_m = A_{ml} + A_{mg} \quad (m^2) \quad (3.54)$$

Donde A_{ml} se puede calcular con la *ecuación 3.55* y A_{mg} con la *ecuación 3.56*:

$$A_{ml} = \frac{A_{ev} - A_{iv}}{\ln \left(\frac{A_{ev}}{A_{iv}} \right)} = \frac{[2 \cdot \pi \cdot (r_t + 2 \cdot e) \cdot h] - [2 \cdot \pi \cdot r_t \cdot h]}{\ln \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot (r_t + 2 \cdot e) \cdot h}{2 \cdot \pi \cdot r_t \cdot h} \right)} \quad (m^2) \quad (3.55)$$

Sustituyendo:

$$A_{ml} = \frac{[2 \cdot \pi \cdot (0,75 + 2 \cdot 0,007) \cdot 0,75] - [2 \cdot \pi \cdot 0,75 \cdot 0,75]}{\ln \left(\frac{2 \cdot \pi \cdot (0,75 + 2 \cdot 0,007) \cdot 0,75}{2 \cdot \pi \cdot 0,75 \cdot 0,75} \right)} = 3,567 \, m^2$$

Para calcular A_{mg}

$$A_{mg} = 2 \cdot \pi \cdot \left(\frac{d_o}{2} \cdot \frac{d_i}{2} \right) \quad (m^2) \quad (3.56)$$

$$A_{mg} = 2 \cdot \pi \cdot \left(\frac{1,514}{2} \cdot \frac{1,5}{2} \right) = 3,567 \, m^2$$

Por tanto, el área media será:

$$A_m = 3,5672 + 3,5673 = 7,134 \, m^2$$

Por otro lado, será necesario realizar el cálculo del área interna y externa utilizando las *ecuaciones 3.57* y *3.58*, respectivamente:

$$A_i = 2 \cdot \pi \cdot r_{ti} \cdot h + 2 \cdot \pi \cdot r_{ti}^2 \quad (m^2) \quad (3.57)$$

$$A_o = 2 \cdot \pi \cdot r_{to} \cdot h + 2 \cdot \pi \cdot r_{to}^2 \quad (m^2) \quad (3.58)$$

Sustituyendo en ambos casos:

$$A_i = 2 \cdot \pi \cdot 0,75 \cdot 0,75 + 2 \cdot \pi \cdot 0,75^2 = 7,0686 \, m^2$$

$$A_0 = 2 \cdot \pi \cdot 0,757 \cdot 0,75 + 2 \cdot \pi \cdot 0,757^2 = 7,168 \text{ m}^2$$

Por tanto, para resolver el proceso iterativo se procederá de la siguiente forma

1. Se harán los cálculos para un intervalo entre 25 y 75 °C (25 °C, 35°C, 45°C, 55°C, 65°C y 75°C) que es la temperatura de funcionamiento que se ha establecido. Por otro lado, la suposición de la temperatura de la pared interior del tanque empezará por 85°C, (que es el valor al que se encuentra el agua de la camisa).
2. Se calcula la temperatura media mediante una media aritmética entre la temperatura de la mezcla y la temperatura de la pared interior del tanque supuesta, tal y como se muestra en la *ecuación 3.59*:

$$T_{media} = \frac{T_{mezcla} + T_{int sup}}{2} \text{ (}^\circ\text{C)} \quad (3.59)$$

3. Se calcula la viscosidad de la temperatura media y de la temperatura de la pared interna con la *ecuación 3.11*, determinada en el *Anexo I*.

$$\begin{aligned} \mu = & (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot T \text{ (K)}) \cdot X \\ & + (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot T \text{ (K)}) \text{ (Pa} \cdot \text{s)} \end{aligned} \quad (3.11)$$

4. Se obtiene el valor del Reynolds con la *ecuación 3.60*:

$$Re = \frac{D_a^2 \cdot N \cdot \rho_{mezcla}}{\mu(T media)} \quad (3.60)$$

El diámetro del agitador (D_a) y la velocidad de agitación (N) se han determinado en el *Anexo III* y su valor es de 0,45 m y 4, 85 rev/s, respectivamente. La viscosidad de la mezcla es la obtenida en el paso 3 y dependerá de la temperatura. La densidad de la mezcla; se determina con la *ecuación 3.12*:

$$\rho = (72,439 - 0,0353 \cdot T \text{ (K)}) \cdot X + (1108,5 - 0,9415 \cdot T \text{ (K)}) \text{ (Kg/m}^3\text{)} \quad (3.12)$$

5. Se calcula el número Prandtl para la temperatura media de la mezcla con la *ecuación 3.61*:

$$Pr = \frac{C_{p,mezcla} \cdot \mu(T media)}{k_{mezcla}} \quad (3.61)$$

La conductividad de la mezcla y el calor específico se calcula con la *ecuación 3.9* y la *ecuación 3.10*, respectivamente, determinadas en el documento de *Memoria*:

$$k = (-5,733 \cdot 10^{-3} - 3,167 \cdot 10^{-5} \cdot T (K)) \cdot X + (0,2303 - 2,350 \cdot 10^{-4} \cdot T(K)) \quad (W/mK) \quad (3.9)$$

$$C_p = (1156,753 - 4,671 \cdot T (K)) \cdot X + (2,0333 + 8,3617 \cdot T(K)) \quad (J/Kg \cdot K) \quad (3.10)$$

6. El Nusselt depende del cociente de viscosidades que se calcula con la *ecuación 3.62*:

$$\frac{\mu(T \text{ media})}{\mu(T \text{ int sup})} \quad (3.62)$$

7. Se calcula el Nusselt utilizando la *ecuación 3.53.1*:

$$Nu = 0,54 \cdot Re^{0,67} \cdot Pr^{0,25} \cdot \left(\frac{\mu (T \text{ media})}{\mu (T \text{ int sup})} \right)^{0,14} \quad (3.53.1)$$

8. Con el número Nusselt se puede calcular el valor del coeficiente individual de transmisión de calor respecto al área interna con la *ecuación 3.52.2*:

$$h_i = \frac{Nu \cdot k_{mezcla}}{d_i \cdot 1,3} \quad \left(\frac{W}{m^2 \cdot K} \right) \quad (3.52.2)$$

9. Como ya se conocen todos los parámetros necesarios para calcular el coeficiente global de la *ecuación 3.43*, se procede a ello:

$$\frac{1}{U_i} = \frac{1}{h_e} \cdot \frac{A_i}{A_0} + \frac{e}{k_{acero}} \cdot \frac{A_i}{A_m} + \frac{1}{h_i} \quad \left(\frac{K \cdot m^2}{W} \right) \quad (3.43)$$

10. Con la *ecuación 3.63* se obtiene el calor transferido del agua a la mezcla de etanol y ácido butírico:

$$q = U_i \cdot A_i \cdot \Delta T \quad (W) \quad (3.63)$$

Como la temperatura del agua es de 85°C, ese valor será constante, modificando la *ecuación 3.56*, obteniendo la *ecuación 3.63.1*:

$$q = U_i \cdot A_i \cdot (85 - T_{mezcla}) \quad (W) \quad (3.63.1)$$

11. Se puede expresar el calor transferido al agua en función de los coeficientes individuales de transmisión de calor, obteniendo de esta forma la *ecuación 3.63.2* y *3.63.3*:

$$q = h_i \cdot A_i \cdot (T_{int} - T_{mezcla}) \quad (W) \quad (3.63.2)$$

$$q = h_0 \cdot A_0 \cdot (85 - T_{ext}) \text{ (W)} \quad (3.63.3)$$

Mediante la ley de Fourier se obtiene la *ecuación 3.63.4*:

$$q = \frac{k_{acero}}{e} \cdot A_m \cdot (T_{ext} - T_{int}) \text{ (W)} \quad (3.63.4)$$

Donde T_{ext} es la temperatura de la pared exterior del tanque y T_{int} de la pared interior.

De la *ecuación 3.63.4* se despeja el incremento de temperaturas:

$$\Delta T = \frac{q \cdot e}{k_{acero} \cdot A_m} \quad (3.64)$$

12. Se calcula la temperatura de la pared exterior del tanque despejando de la *ecuación 2.59.3*, obteniendo la *ecuación 3.65*:

$$T_{ext} = \frac{h_0 \cdot A_0 \cdot 85 - q}{h_0 \cdot A_0} \text{ (°C)} \quad (3.65)$$

13. A partir de la *ecuación 3.66* y el valor de T_{ext} , se calcula la temperatura de la pared interior del tanque, con la *ecuación 3.66.1*:

$$\Delta T = T_{ext} - T_{int} \quad (3.66)$$

$$T_{int} = T_{ext} - \Delta T \text{ (°C)} \quad (3.66.1)$$

Este valor de temperatura de la pared interior del tanque se utiliza como valor supuesto de partida para comenzar la siguiente iteración, realizando los mismos pasos descritos sucesivamente hasta que la temperatura interior de la pared del tanque supuesta y calculada coincidan. Este paso se debe realizar para cada temperatura de la mezcla desde los 25°C hasta los 75°C.

Los resultados obtenidos realizando este procedimiento se muestran en la *tabla 3.9*:

Tabla 3.9. Resultados para el procedimiento iterativo. Fuente: elaboración propia.

T mezcla (°C)	T int sup (°C)	T media (°C)	μ (t media) (Pa·s)	μ (t int sup) (Pa·s)	Da	N (rev/s)	ρ mezcla (Kg/m ³)	Re	Cp mezcla (J/Kg·K)	K mezcla (W/m·K)	Pr	μ (t media)/ μ (t int sup)	Nu	hi (W/m ² ·K)	1/U _i	U _i (W/m ² ·K)	q (W)	ΔT pared	T _{ext} (°C)	T _{int} (°C)
25	85,00	55,00	7,21E-04	3,20E-04	0,45	4,85	833,51	1135028,19	2472,65	0,16	11,22	2,25	12624,14	1028,74	1,87E-03	533,36	226206,64	13,70	69,81	56,11
25	56,11	40,55	9,14E-04	7,06E-04	0,45	4,85	833,51	895163,66	2472,65	0,16	14,23	1,29	10572,20	861,53	2,06E-03	484,60	205525,17	12,45	71,20	58,75
25	58,75	41,87	8,97E-04	6,71E-04	0,45	4,85	833,51	912796,58	2472,65	0,16	13,95	1,34	10706,73	872,49	2,05E-03	488,05	206988,15	12,54	71,10	58,56
25	58,56	41,78	8,98E-04	6,74E-04	0,45	4,85	833,51	911525,23	2472,65	0,16	13,97	1,33	10696,98	871,69	2,05E-03	487,80	206882,66	12,53	71,11	58,58
25	58,58	41,79	8,98E-04	6,73E-04	0,45	4,85	833,51	911620,29	2472,65	0,16	13,97	1,33	10697,71	871,75	2,05E-03	487,82	206890,55	12,53	71,11	58,57
25	58,58	41,79	8,98E-04	6,73E-04	0,45	4,85	833,51	911613,50	2472,65	0,16	13,97	1,33	10697,66	871,75	2,05E-03	487,81	206889,98	12,53	71,11	58,57
25	58,58	41,79	8,98E-04	6,73E-04	0,45	4,85	833,51	911613,50	2472,65	0,16	13,97	1,33	10697,66	871,75	2,05E-03	487,81	206889,98	12,53	71,11	58,57
35	85,00	60,00	6,54E-04	3,20E-04	0,45	4,85	824,06	1236876,99	2552,06	0,16	10,67	2,05	13025,38	1045,55	1,86E-03	537,84	190089,98	11,51	72,23	60,72
35	60,72	47,86	8,17E-04	6,45E-04	0,45	4,85	824,06	990935,26	2552,06	0,16	13,32	1,27	11097,43	890,79	2,03E-03	493,72	174495,53	10,57	73,28	62,71
35	62,71	48,86	8,03E-04	6,18E-04	0,45	4,85	824,06	1007361,25	2552,06	0,16	13,10	1,30	11214,68	900,20	2,01E-03	496,60	175512,59	10,63	73,21	62,58
35	62,58	48,79	8,04E-04	6,20E-04	0,45	4,85	824,06	1006280,50	2552,06	0,16	13,11	1,30	11206,93	899,58	2,01E-03	496,41	175445,70	10,63	73,22	62,59
35	62,59	48,80	8,04E-04	6,20E-04	0,45	4,85	824,06	1006347,46	2552,06	0,16	13,11	1,30	11207,41	899,62	2,01E-03	496,42	175449,84	10,63	73,22	62,59
35	62,59	48,80	8,04E-04	6,20E-04	0,45	4,85	824,06	1006347,46	2552,06	0,16	13,11	1,30	11207,41	899,62	2,01E-03	496,42	175449,84	10,63	73,22	62,59
45	85,00	65,00	5,87E-04	3,20E-04	0,45	4,85	814,61	1361919,73	2631,48	0,15	10,03	1,84	13475,29	1065,22	1,84E-03	543,00	153530,93	9,30	74,69	65,39
45	65,39	55,20	7,19E-04	5,82E-04	0,45	4,85	814,61	1113326,80	2631,48	0,15	12,27	1,23	11711,61	925,81	1,98E-03	504,29	142585,37	8,64	75,42	66,79
45	66,79	55,89	7,09E-04	5,64E-04	0,45	4,85	814,61	1128005,17	2631,48	0,15	12,11	1,26	11808,49	933,46	1,97E-03	506,56	143225,45	8,67	75,38	66,71
45	66,71	55,85	7,10E-04	5,65E-04	0,45	4,85	814,61	1127133,53	2631,48	0,15	12,12	1,26	11802,72	933,01	1,97E-03	506,42	143187,47	8,67	75,38	66,71
45	66,71	55,86	7,10E-04	5,65E-04	0,45	4,85	814,61	1127186,64	2631,48	0,15	12,12	1,26	11803,08	933,04	1,97E-03	506,43	143189,78	8,67	75,38	66,71
45	66,71	55,86	7,10E-04	5,65E-04	0,45	4,85	814,61	1127186,64	2631,48	0,15	12,12	1,26	11803,08	933,04	1,97E-03	506,43	143189,78	8,67	75,38	66,71
55	85,00	70,00	5,21E-04	3,20E-04	0,45	4,85	805,17	1519097,37	2710,89	0,15	9,30	1,63	13988,15	1088,70	1,82E-03	549,04	116428,20	7,05	77,18	70,13
55	70,13	62,56	6,20E-04	5,19E-04	0,45	4,85	805,17	1275388,61	2710,89	0,15	11,07	1,20	12447,80	968,82	1,94E-03	516,79	109589,25	6,64	77,64	71,00
55	71,00	63,00	6,14E-04	5,07E-04	0,45	4,85	805,17	1287528,47	2710,89	0,15	10,97	1,21	12520,75	974,50	1,93E-03	518,40	109930,92	6,66	77,62	70,96
55	70,96	62,98	6,14E-04	5,08E-04	0,45	4,85	805,17	1286911,79	2710,89	0,15	10,98	1,21	12517,04	974,21	1,93E-03	518,32	109913,58	6,66	77,62	70,96
55	70,96	62,98	6,14E-04	5,08E-04	0,45	4,85	805,17	1286939,81	2710,89	0,15	10,98	1,21	12517,21	974,22	1,93E-03	518,32	109914,37	6,66	77,62	70,96
55	70,96	62,98	6,14E-04	5,08E-04	0,45	4,85	805,17	1286939,81	2710,89	0,15	10,98	1,21	12517,21	974,22	1,93E-03	518,32	109914,37	6,66	77,62	70,96
65	85,00	75,00	4,54E-04	3,20E-04	0,45	4,85	795,72	1722623,92	2790,30	0,15	8,47	1,42	14584,80	1117,35	1,80E-03	556,23	78635,56	4,76	79,72	74,96
65	74,96	69,98	5,21E-04	4,54E-04	0,45	4,85	795,72	1500425,93	2790,30	0,15	9,73	1,15	13359,34	1023,47	1,88E-03	531,94	75201,51	4,55	79,95	75,39
65	75,40	70,20	5,18E-04	4,48E-04	0,45	4,85	795,72	1508932,95	2790,30	0,15	9,67	1,16	13404,91	1026,96	1,88E-03	532,88	75334,60	4,56	79,94	75,38
65	75,38	70,19	5,18E-04	4,49E-04	0,45	4,85	795,72	1508601,72	2790,30	0,15	9,68	1,15	13403,13	1026,82	1,88E-03	532,85	75329,42	4,56	79,94	75,38
65	75,38	70,19	5,18E-04	4,49E-04	0,45	4,85	795,72	1508621,20	2790,30	0,15	9,68	1,15	13403,24	1026,83	1,88E-03	532,85	75329,72	4,56	79,94	75,38
65	75,38	70,19	5,18E-04	4,49E-04	0,45	4,85	795,72	1508621,20	2790,30	0,15	9,68	1,15	13403,24	1026,83	1,88E-03	532,85	75329,72	4,56	79,94	75,38
75	85,00	80,00	3,87E-04	3,20E-04	0,45	4,85	786,27	1996546,08	2869,72	0,15	7,55	1,21	15297,20	1153,27	1,77E-03	564,99	39936,98	2,42	82,32	79,90
75	79,90	77,45	4,21E-04	3,88E-04	0,45	4,85	786,27	1834695,64	2869,72	0,15	8,22	1,08	14540,35	1096,21	1,82E-03	550,94	38943,90	2,36	82,38	80,03
75	80,03	77,51	4,20E-04	3,86E-04	0,45	4,85	786,27	1838406,08	2869,72	0,15	8,20	1,09	14557,52	1097,51	1,81E-03	551,27	38966,99	2,36	82,38	80,02
75	80,02	77,51	4,20E-04	3,86E-04	0,45	4,85	786,27	1838318,25	2869,72	0,15	8,20	1,09	14557,11	1097,47	1,81E-03	551,26	38966,44	2,36	82,38	80,02
75	80,02	77,51	4,20E-04	3,86E-04	0,45	4,85	786,27	1838318,25	2869,72	0,15	8,20	1,09	14557,11	1097,47	1,81E-03	551,26	38966,44	2,36	82,38	80,02

Ejemplo para una temperatura de mezcla de 25 °C y una temperatura de la pared interior del tanque de 85°C:

1. Cálculo de la temperatura media

$$T_{media} = \frac{T_{mezcla} + T_{int sup}}{2} \quad (^\circ\text{C}) \quad (3.59)$$

$$T_{media} = \frac{25 + 85}{2} = 55 \text{ } ^\circ\text{C}$$

2. Cálculo de la viscosidad a la temperatura media y la temperatura de la pared interna con la ecuación 3.11:

$$\mu(T media) = (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot 328) \cdot 0,09 + (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot 328)$$

$$\mu(T media) = 7,212 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

$$\mu(T int sup) = (-2,054 \cdot 10^{-3} + 5,580 \cdot 10^{-6} \cdot 358) \cdot 0,09 + (5,294 \cdot 10^{-3} - 1,388 \cdot 10^{-5} \cdot 358)$$

$$\mu(T int sup) = 3,199 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

3. Cálculo del Reynolds

$$Re = \frac{D_a^2 \cdot N \cdot \rho_{mezcla}}{\mu(T media)} \quad (3.60)$$

$$\rho = (72,439 - 0,0353 \cdot T(K)) \cdot X + (1108,5 - 0,9415 \cdot T(K)) \quad (\text{Kg}/\text{m}^3) \quad (3.12)$$

$$\rho_{mezcla} = 833,506 \text{ Kg}/\text{m}^3$$

$$Re = \frac{0,45^2 \cdot 4,85 \cdot 833,506}{7,212 \cdot 10^{-4}} = 1135062,507$$

4. Cálculo del número Prandtl para la temperatura media de la mezcla

$$Pr = \frac{C_{p,mezcla} \cdot \mu(T media)}{k_{mezcla}} \quad (3.61)$$

$$k = (-5,733 \cdot 10^{-3} - 3,167 \cdot 10^{-5} \cdot T(K)) \cdot X + (0,2303 - 2,350 \cdot 10^{-4} \cdot T(K)) \quad (\text{W}/\text{mK}) \quad (3.9)$$

$$k = (-5,733 \cdot 10^{-3} - 3,167 \cdot 10^{-5} \cdot 298) \cdot 0,09 + (0,2303 - 2,350 \cdot 10^{-4} \cdot 298) \quad (\text{W}/\text{mK})$$

$$k = 0,159 \text{ W}/\text{m}^2\text{K}$$

$$C_p = (1156,753 - 4,671 \cdot 298) \cdot 0,09 + (2,0333 + 8,3617 \cdot 298) \quad (J/KgK)$$

$$C_p = 2472,651 J/KgK$$

$$Pr = \frac{2472,651 \cdot 7,212 \cdot 10^{-4}}{0,159} = 11,216$$

5. Cálculo del cociente de viscosidades:

$$\frac{\mu(T \text{ media})}{\mu(T \text{ int sup})} \quad (3.62)$$

$$\frac{\mu(T \text{ media})}{\mu(T \text{ int sup})} = \frac{7,212 \cdot 10^{-4}}{3,199 \cdot 10^{-4}} = 2,254$$

6. Cálculo del Nusselt

$$Nu = 0,54 \cdot Re^{0,67} \cdot Pr^{0,25} \cdot \left(\frac{\mu(T \text{ media})}{\mu(T \text{ int sup})} \right)^{0,14} \quad (3.53.1)$$

$$Nu = 0,54 \cdot 1135062,507^{0,67} \cdot 11,216^{0,25} \cdot (2,254)^{0,14} = 12622,055$$

7. Cálculo del coeficiente individual de transmisión de calor respecto al área interna

$$h_i = \frac{Nu \cdot k_{mezcla}}{d_i \cdot 1,3} \left(\frac{W}{m^2 \cdot K} \right) \quad (3.52.2)$$

$$h_i = \frac{12622,055 \cdot 0,159}{1,5 \cdot 1,3} = 1029,183 \quad (W/m^2K)$$

8. Cálculo del coeficiente global

$$\frac{1}{U_i} = \frac{1}{h_e} \cdot \frac{A_i}{A_0} + \frac{e}{k_{acero}} \cdot \frac{A_i}{A_m} + \frac{1}{h_i} \left(\frac{K \cdot m^2}{W} \right) \quad (3.43)$$

$$\frac{1}{U_i} = \frac{1}{2077,55} \cdot \frac{7,0686}{7,167} + \frac{0,007}{16,2} \cdot \frac{7,0686}{7,134} + \frac{1}{1029,183} = 1,87 \cdot 10^{-3}$$

$$U_i = \frac{1}{1,991 \cdot 10^{-3}} = 533,47 \quad (W/m^2K)$$

9. Cálculo del calor transferido del agua a la mezcla de etanol y ácido butírico:

$$q = U_i \cdot A_i \cdot \Delta T \quad (W) \quad (3.63)$$

$$q = U_i \cdot A_i \cdot (85 - T_{mezcla}) \quad (W) \quad (3.63.1)$$

$$q = 533,47 \cdot 7,0686 \cdot (85 - 25) = 212998,689 \quad (W)$$

10. Cálculo del incremento de temperaturas

$$\Delta T = \frac{q \cdot e}{k_{acero} \cdot A_m} \quad (3.64)$$

$$\Delta T = \frac{0,007}{16,2 \cdot 7,134} = 12,901$$

11. Cálculo de la temperatura de la pared exterior del tanque

$$T_{ext} = \frac{h_0 \cdot A_0 \cdot 85 - q}{h_0 \cdot A_0} \quad (3.65)$$

$$T_{ext} = \frac{1667,729 \cdot 7,167 \cdot 85 - 212998,689}{1667,729 \cdot 7,167} = 67,179 \text{ } ^\circ\text{C}$$

12. Cálculo de la temperatura interior del tanque

$$\Delta T = T_{ext} - T_{int} \quad (3.66)$$

$$T_{int} = T_{ext} - \Delta T \quad (3.66.1)$$

$$T_{int} = 67,179 - 12,901 = 54,278^\circ\text{C}$$

Con los valores del coeficiente global de transmisión de calor para cada temperatura de la mezcla, se elabora la *tabla 3.10*:

Tabla 3.10. Resultados obtenidos para el coeficiente global de transmisión de calor. Fuente: elaboración propia.

T_{mezcla} (K)	U_i (W/m²·K)
298	487,82
308	496,42
318	506,43
328	518,32
338	532,85
348	551,26

A partir de la *tabla 3.10* se realiza una gráfica en la que se representa el coeficiente global de calor frente a la temperatura, tal y como se observa en la *figura 3.31*:

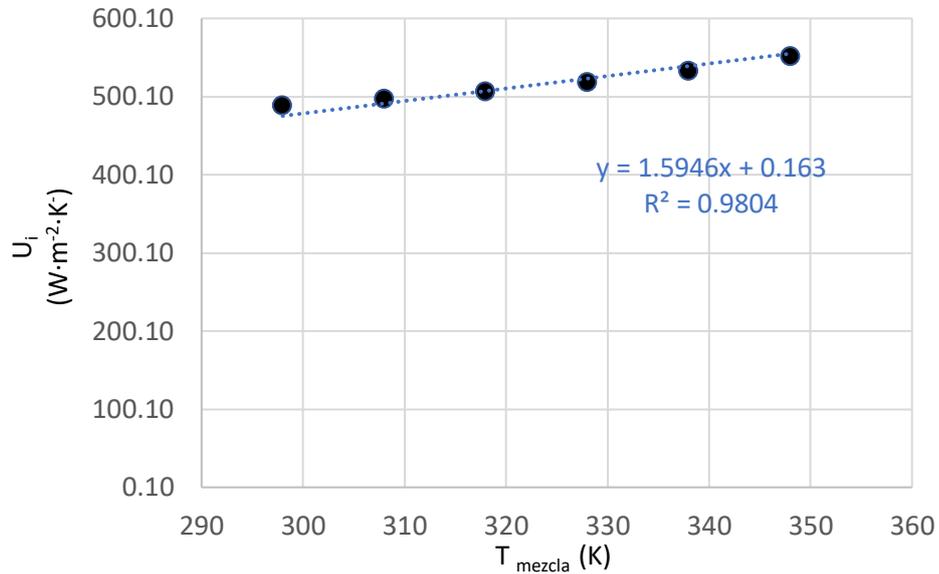


Figura 3. 31. Variación del coeficiente global de transmisión de calor con la temperatura. Fuente: elaboración propia.

A partir de este gráfico de regresión se obtiene una *ecuación 3.67* que relaciona el coeficiente global de transmisión de calor con la temperatura:

$$U_i = 1,5946 \cdot T (K) + 0,163 \quad (W/m^2K) \quad (3.67)$$

Finalmente, esta ecuación se sustituye dentro de la *ecuación 3.42.1*, permitiendo el cálculo del tiempo que tardará la mezcla en alcanzar los 75°C:

$$\int_0^t dt = m_{mezcla} \cdot C_{p,mezcla} \cdot \int_{298}^{348} \frac{dT}{U_i \cdot A_i \cdot \Delta T} \quad (3.42.1)$$

El calor específico de la mezcla a 75 °C, se determina con la *ecuación 3.10*:

$$C_p = (1156,753 - 4,671 \cdot 348) \cdot 0,09 + (2,0333 + 8,3617 \cdot 348) \quad (J/KgK)$$

$$C_p = 2869,717J/kgK$$

La cantidad de mezcla se calcula mediante la *ecuación 3.68*:

$$m_{mezcla} = V_{\acute{u}til} \cdot \rho_{mezcla} \quad (Kg) \quad (3.68)$$

La densidad de la mezcla se determina usando la *ecuación 3.12*:

$$\rho = (72,439 - 0,0353 \cdot 348) \cdot 0,09 + (1108,5 - 0,9415 \cdot 348) \quad (Kg/m^3)$$

$$\rho_{mezcla} = 786,272 \text{ Kg/m}^3$$

Sustituyendo en (3.68) se obtiene la cantidad de mezcla:

$$m_{mezcla} = 1,7 \cdot 786,272 = 1336,662 \text{ kg}$$

Sustituyendo todos los valores en la ecuación 3.42.1:

$$t = 1336,662 \cdot 2869,717 \cdot \int_{298}^{348} \frac{dT}{(1,5946 \cdot T + 0,163) \cdot 7,0686 \cdot (358 - T)}$$

Introduciendo la integral en la calculadora, se obtiene el tiempo en segundos:

$$t = 1850,09 \text{ segundos} \approx 31 \text{ minutos}$$

Por tanto, para que la mezcla de ácido butírico y etanol pase de su temperatura inicial, 25°C a 75°C, se necesitará un tiempo de **31 minutos**, sin considerar pérdidas de calor al exterior.

Cálculo de la entrada y la salida de agua de la camisa de calentamiento:

Con el fin de garantizar un proceso de calentamiento óptimo, se plantea el uso de agua caliente a una temperatura de 85 °C. El agua ingresa en la camisa de calentamiento a través de cuatro entradas ubicadas en la parte superior del tanque, y posteriormente saldrá por una única salida situada en el fondo del tanque.

El diseño de las entradas y la salida implica determinar tanto el diámetro de estas aberturas como el caudal de agua que fluirá a través de ellas. Para calcular el caudal total de agua que ingresará a la camisa de calentamiento (Q_{va}), se utiliza la velocidad de circulación del agua en dicha camisa.

En este caso, se establece que la velocidad del agua será de 0,3 m/s. Este valor es comúnmente utilizado para la circulación de agua en la coraza de intercambiadores de calor. Se considera que el espacio de la camisa tiene características similares a la coraza en términos de flujo de agua.

Es importante destacar que, para obtener valores precisos del diámetro y el caudal, es necesario realizar cálculos más detallados teniendo en cuenta factores adicionales como las propiedades hidráulicas del sistema y las pérdidas de presión. Estos cálculos específicos se

realizan utilizando ecuaciones y metodologías adecuadas para el diseño y la evaluación de sistemas de flujo de fluidos en ingeniería.

El caudal de agua se puede calcular con la *ecuación 3.69*:

$$Q_{va} = v_a \cdot S \quad (3.69)$$

Donde S es la sección de paso del agua, que se calcula con la *ecuación 3.70*:

$$S = \frac{\pi}{4} \cdot (D_i^2 - d_o^2) \quad (3.70)$$

$$S = \frac{\pi}{4} \cdot (1,554^2 - 1,514^2) = 0,096 \text{ m}^2$$

Siendo:

d_o : diámetro externo del tanque (m).

D_i : diámetro interno de la camisa (m).

Por tanto,

$$Q_{va} = 0,3 \cdot 0,096 = 0,029 \text{ m}^3/\text{s}$$

Como el caudal de agua se divide en cuatro entradas, el caudal que accederá a la camisa por cada una de ellas se calcula con la *ecuación 3.71*:

$$Q_{va1} = Q_{va2} = Q_{va3} = Q_{va4} = Q_{vai} = \frac{Q_{va}}{4} \quad (3.71)$$

$$Q_{va1} = Q_{va2} = Q_{va3} = Q_{va4} = Q_{vai} = \frac{0,029}{4} = 0,00725 \text{ m}^3/\text{s}$$

Para determinar el diámetro en la entrada se supondrá una velocidad de agua de 2 m/s, siendo esta la más común en procesos industriales. Así, se desarrolla la *ecuación 3.72*:

$$v_{ae} = \frac{Q_{vai}}{\frac{\pi}{4} \cdot d_e^2} \quad (3.72)$$

Despejando el diámetro de las entradas, se obtiene la *ecuación 3.73*:

$$d_e = \sqrt{\frac{Q_{vai}}{\frac{\pi}{4} v_{ae}}} \quad (3.73)$$

$$d_e = \sqrt{\frac{0,00725}{\frac{\pi}{4} \cdot 2}} = 0,068 \text{ m}$$

Estableciendo un diámetro de 0,07 m, se recalcula la velocidad del agua en las entradas:

$$v_{ae} = \frac{0,00725}{\frac{\pi}{4} \cdot 0,07^2} = 1,88 \text{ m/s}$$

Del mismo modo se procede para la salida, teniendo en cuenta que solo hay una, el caudal de agua será de 0,029 m³/s, así se calcula el diámetro de salida con la *ecuación 3.74*:

$$d_s = \sqrt{\frac{Q_{va}}{\frac{\pi}{4} v_{as}}} \quad (3.74)$$
$$d_s = \sqrt{\frac{0,029}{\frac{\pi}{4} \cdot 2}} = 0,136 \text{ m}$$

Por tanto, si se considera un diámetro de 0,14 m, se puede recalcular la velocidad de salida del agua:

$$v_{as} = \frac{0,029}{\frac{\pi}{4} \cdot 0,14^2} = 1,88 \text{ m/s}$$

5. ANEXO V: BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

5.1 Balance de materia

El balance de materia para un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado viene dado por la *ecuación 3.75*:

$$S - E + A = G \quad (3.75)$$

Sabiendo que no hay entrada ni salida, la *ecuación 3.75* se modifica así:

$$\frac{d(c_j \cdot V)}{dt} = v_j \cdot r \cdot V \quad (3.75.1)$$

Conociendo que $c_j \cdot V$ es igual al número de moles:

$$\frac{d(N_j)}{dt} = v_j \cdot r \cdot V \quad (3.75.2)$$

Escribiendo dN_j como $dN_j = N_{k0} \cdot \frac{v_j}{(-v_k)} \cdot dX$, se llega a la *ecuación 3.75.3*:

$$\frac{N_{k0} \cdot \frac{v_j}{(-v_k)} \cdot dX}{dt} = v_j \cdot r \cdot V \quad (3.75.3)$$

Reescribiendo la *ecuación 3.75.3*:

$$N_{k0} \cdot \frac{v_j}{(-v_k)} \cdot dX = dt \cdot (v_j \cdot r \cdot V) \quad (3.75.4)$$

Despejando dt :

$$N_{k0} \cdot \frac{v_j}{(-v_k)} \cdot \frac{dX}{(v_j \cdot r \cdot V)} = dt \quad (3.75.5)$$

Simplificando se llega a la ecuación general del balance de materia representada por la *ecuación 3.75.6*:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{(-v_k) \cdot r}{c_{k0}} \quad (3.75.6)$$

Siendo:

c_{k0} : concentración del componente clave (mol/L).

v_k : coeficiente estequiométrico del componente clave.

r : la velocidad de reacción (mol/L·min).

El valor de la concentración que se utilizará para el ácido butírico será de 2,598 mol/L y la del etanol de 12,99 mol/L, tal y como se establece en (Singh, N., & Sachan, P. K., 2013). De esta forma, se puede determinar que el componente clave será el ácido butírico, que es el que se encuentra en menor proporción.

Si se tiene en cuenta que la reacción que tiene lugar para la producción del butirato de etilo es la siguiente:



Donde:

A: ácido butírico.

B: etanol.

E: butirato de etilo.

W: agua.

Se puede determinar la velocidad de reacción tal y como se muestra en la *ecuación 3.76*:

$$r = k \cdot c_A \cdot c_B - k' \cdot c_E \cdot c_W \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.76)$$

En la bibliografía no se tiene una ecuación para determinar la constante indirecta, k' , por lo que se tendrá que recurrir a la constante de equilibrio. La relación entre la constante de equilibrio y las constantes directa e indirecta es la que se observa en la *ecuación 3.77*:

$$K_c = \frac{k}{k'} \quad (3.77)$$

Despejando k' :

$$k' = \frac{k}{K_c} \quad (3.78)$$

La ecuación de Arrhenius para cada constante se saca de la bibliografía (Singh, N., & Sachan, P. K., 2013) tal y como se ha explicado en el Anexo I y se muestra en la *ecuación 3.5* para la constante directa y en la *ecuación 3.7* para la indirecta:

$$k = 0,729e^{-\frac{2685}{T}} \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.5)$$

$$K_c = 3,99 \cdot 10^{12} \cdot e^{-\frac{10165}{T}} \quad (3.7)$$

Con estos valores se puede determinar la velocidad de reacción, modificando la *ecuación 3.76*:

$$r = 0,729e^{-\frac{2685}{T}} \cdot c_A \cdot c_B - \frac{0,729e^{-\frac{2685}{T}}}{3,99 \cdot 10^{12} e^{-\frac{10165}{T}}} \cdot c_E \cdot c_W \quad \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.76.1)$$

Además, relacionando todas las concentraciones con su grado de conversión se desarrolla la velocidad de reacción adecuada para introducirla en el balance de materia:

$$c_A = c_{A0} (1-X).$$

$$c_B = c_{A0} (5-X)$$

$$c_E = c_W = c_{A0} \cdot X$$

Sustituyendo en la *ecuación 3.76.1*:

$$r = 0,729e^{-\frac{2685}{T}} \cdot c_{A0}^2 \cdot (1-X) \cdot (5-X) - \frac{0,729e^{-\frac{2685}{T}}}{3,99 \cdot 10^{12} e^{-\frac{10165}{T}}} \cdot c_{A0}^2 \cdot X^2 \quad \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} \cdot \text{min}} \right) \quad (3.76.2)$$

Con la concentración del ácido butírico y la ecuación de la velocidad en la *ecuación 3.75.6*, se puede obtener el balance de materia:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{0,729e^{-\frac{2685}{T}} \cdot 2,598^2 \cdot (1-X) \cdot (5-X) - \frac{0,729e^{-\frac{2685}{T}}}{3,99 \cdot 10^{12} e^{-\frac{10165}{T}}} \cdot 2,598^2 \cdot X^2}{2,598} \quad (3.75.7)$$

Simplificando:

$$\frac{dX}{dt} = 0,729e^{-\frac{2685}{T}} \cdot 2,598 \cdot (1-X) \cdot (5-X) - 1,83 \cdot 10^{-13} \cdot e^{-\frac{7480}{T}} \cdot 2,598 \cdot X^2 \quad (3.75.8)$$

Reescribiendo:

$$\frac{dX}{dt} = 1,894e^{-\frac{2685}{T}} \cdot (1 - X) \cdot (5 - X) - 4,754 \cdot 10^{-13} \cdot e^{\frac{7480}{T}} \cdot X^2 \quad (3.75.9)$$

Esta será la expresión final para el balance de materia.

5.2 Balance de energía

El balance de energía en un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado viene dado por la *ecuación 3.79*:

$$\sum_{j=1}^s F_j \cdot h_j - \sum_{j=1}^s F_{j0} \cdot h_{j0} + \frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^s N_j \cdot h_j \right) = Q^* \quad (3.79)$$

El Reactor discontinuo no funciona en régimen estacionario, pero no hay corrientes de entrada ni de salida, por lo que la *ecuación 3.79* queda así:

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^s N_j \cdot h_j \right) = Q^* \quad (3.79.1)$$

Separando el diferencial:

$$\sum_{j=1}^s N_j \frac{dh_j}{dt} + \sum_{j=1}^s \frac{dN_j}{dt} h_j = Q^* \quad (3.79.2)$$

Para introducir el grado de conversión en esta ecuación, se escribe N_j en función del mismo:

$$N_j = N_{j0} - N_{k0} \cdot \frac{v_j}{v_k} \cdot X \quad \text{y} \quad dN_j = N_{k0} \cdot \frac{v_j}{(-v_k)} \cdot dX$$

$$\sum_{j=1}^s N_{j0} \frac{dh_j}{dt} + N_{k0} \cdot X \cdot \frac{\sum_{j=1}^s v_j \cdot \frac{dh_j}{dt}}{(-v_k)} + N_{k0} \cdot \frac{dX}{dt} \cdot \sum_{j=1}^s \frac{v_j \cdot h_j}{(-v_k)} = Q^* \quad (3.79.3)$$

Suponiendo que la entalpía de reacción no cambia con el tiempo y teniendo en cuenta la definición de la entalpía de un componente químico:

$$\frac{dT}{dt} \cdot \sum_{j=1}^s N_{j0} \cdot \bar{c}_{pj} + N_{k0} \cdot \Delta H_k^0 \frac{dX}{dt} = Q^* \quad (3.79.4)$$

Sabiendo la definición de J:

$$\frac{dT}{dt} - J \cdot \frac{dX}{dt} = \frac{Q^*}{N_{k0} \cdot \sum_{j=1}^s \theta_j \cdot \bar{c}_{pj}} \quad (3.79.5)$$

Llamando $\frac{Q^*}{N_{k0} \cdot \sum_{j=1}^s \theta_j \cdot \bar{c}_{pj}} = Q'$

$$\frac{dT}{dt} - J \cdot \frac{dX}{dt} = Q' \quad (3.79.6)$$

Finalmente, si se expresa de la forma $\frac{dT}{dt}$:

$$\frac{dT}{dt} = J \cdot \frac{dX}{dt} + Q' \quad (3.79.7)$$

Sabiendo que Q' está determinado por la *ecuación 3.80* y dX/dt es el balance de materia, se modifica la *ecuación 3.79.7*:

$$Q' = \frac{U \cdot A \cdot 60 \cdot (T_{f0} - T)}{N_{k0} \cdot \sum \theta_j \cdot C_{pj}} \quad (3.80)$$

$$\frac{dT}{dt} = J \cdot \frac{(-v_k) \cdot r}{c_{k0}} + \frac{U \cdot A \cdot 60 \cdot (T_{f0} - T)}{N_{k0} \cdot \sum \theta_j \cdot C_{pj}} \quad (3.79.8)$$

Para calcular $\sum \theta_j \cdot C_{pj}$ se utiliza la *ecuación 3.81*:

$$\sum \theta_j \cdot C_{pj} = \frac{N_{A0}}{N_{A0}} \cdot c_{p,A} + \frac{N_{B0}}{N_{A0}} \cdot c_{p,B} \quad \left(\frac{J}{mol \cdot K} \right) \quad (3.81)$$

Donde:

N_{A0} : número de moles iniciales de ácido butírico (mol).

N_{B0} : número de moles iniciales de etanol (mol).

$C_{p,a}$: calor específico del ácido butírico (J/mol·K), vale 178,6 J/mol·K.

$C_{p,B}$: Calor específico del etanol (J/mol·K), equivale a 112,3 J/mol·K.

El número de moles se determina a partir de la concentración con la *ecuación 3.82*:

$$N_{t0} = c_{t0} \cdot V \quad (mol) \quad (3.82)$$

Sabiendo que el volumen es de 1700 litros y conociendo la concentración de cada reactivo, se calcula el número de moles para ambos:

$$N_{A0} = 2,598 \cdot 1700 = 4416,6 \text{ moles}$$

$$N_{B0} = 12,99 \cdot 1700 = 22083 \text{ moles}$$

Sustituyendo en la *ecuación 3.81*, se calcula $\sum \theta_j \cdot C_{pj}$:

$$\sum \theta_j \cdot C_{pj} = \frac{4416,6}{4416,6} \cdot 178,6 + \frac{22083}{4416,6} \cdot 112,3 = 740,1 \frac{J}{mol \cdot K}$$

Por otro lado, se debe calcular J con la *ecuación 3.83*:

$$J = \frac{-\Delta H_k^0}{\sum \theta_j \cdot C_{pj}} \quad (K) \quad (3.83)$$

Sabiendo que la entalpía de reacción viene expresada por la *ecuación 3.8.1*, sustituyendo, se determina J:

$$J = \frac{-10518 - 12,4 (T - 298)}{740,1}$$

Con estos resultados y los obtenidos en el *Anexo IV* para el coeficiente global y el área de intercambio, se puede sustituir en la *ecuación 3.79.8* del balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} = & \left(\frac{-10518 - 12,4 (T - 298)}{740,1} \right) \cdot \left(1,894e^{-\frac{2685}{T}} \cdot (1 - X) \cdot (5 - X) - 4,754 \cdot 10^{-13} \cdot e^{\frac{7480}{T}} \cdot X^2 \right) \\ & + \frac{(1,5946 \cdot T + 0,163) \cdot 60 \cdot 7,0686 \cdot (T_{f0} - T)}{4416,6 \cdot 740,1} \end{aligned} \quad (3.79.9)$$

5.3 Resolución simultánea de los balances de materia y energía:

El balance de materia y el de energía se deben resolver de forma simultánea. Para ello, se ha utilizado el programa Scilab, que se aprendió a utilizar en la asignatura *EQ1030-Reactores Químicos y Bioquímicos*, con las ecuaciones:

Balance de materia:

$$\frac{dX}{dt} = 1,894e^{-\frac{2685}{T}} \cdot (1 - X) \cdot (5 - X) - 4,754 \cdot 10^{-13} \cdot e^{\frac{7480}{T}} \cdot X^2 \quad (3.75.9)$$

Balance de energía:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} = & \left(\frac{-10518 - 12,4 (T - 298)}{740,1} \right) \cdot \left(1,894e^{-\frac{2685}{T}} \cdot (1 - X) \cdot (5 - X) - 4,754 \cdot 10^{-13} \cdot e^{\frac{7480}{T}} \cdot X^2 \right) \\ & + \frac{(1,5946 \cdot T + 0,163) \cdot 60 \cdot 7,0686 \cdot (T_{f0} - T)}{4416,6 \cdot 740,1} \end{aligned} \quad (3.79.9)$$

La integración se ha llevado a cabo en dos tramos:

1. **Tramo de precalentamiento de la mezcla reactante**, en el cual la temperatura del fluido calefactor en la camisa, T_{f0} , se establece en 358K (85°C) para conseguir que la mezcla reactante alcance 348 K (75°C) en un tiempo razonable. Para esta integración, se ha partido de las condiciones iniciales $t_0 = 0$, $X_0 = 0$ y $T_0 = 298$ K y se ha llegado a los siguientes valores finales: $t = 28$ min, $X = 0,078$ y $T = 348$ K. Como puede comprobarse, durante el periodo de calefacción, ya hay un cierto progreso de la reacción química.
2. **Tramo de reacción**. Las reacciones de esterificación tienen una entalpía de reacción moderada que permite mantenerlas en condiciones próximas a la isothermicidad, disminuyendo el suministro de calor de la camisa. En este caso, y debido que se trabaja a temperatura muy próxima a la de ebullición del etanol, la temperatura del agua de la camisa se disminuirá a 349 K (76°C). Para esta segunda integración, T_{f0} toma el valor de 349K y las condiciones iniciales han sido $t_0 = 28$, $X_0 = 0,078$ y $T_0 = 348$ K. El tiempo total de operación, correspondiente a cuando se alcanza una conversión de 0,7 ha sido de 379 min y la temperatura final del reactor, de 348,76 K.

Los resultados obtenidos se muestran en la *tabla 3.11* y en la *figura 3.32*, se representa cómo varía el grado de conversión con el tiempo transcurrido desde el llenado del reactor (etapas de precalentamiento + reacción):

Tabla 3.11. Variación de la conversión y la temperatura con el tiempo, obtenida por integración simultánea de los balances de materia y energía. Fuente: elaboración propia.

t(min)	X	T _R (K)
0,00	0,00	298,00
21,00	0,05	342,95
34,00	0,10	348,07
48,00	0,15	348,19
63,00	0,20	348,26
79,00	0,25	348,32
97,00	0,30	348,38
116,00	0,35	348,43
138,00	0,40	348,48
162,00	0,45	348,53
190,00	0,50	348,58
222,00	0,55	348,62
262,00	0,60	348,67
311,00	0,65	348,72
379,00	0,70	348,76

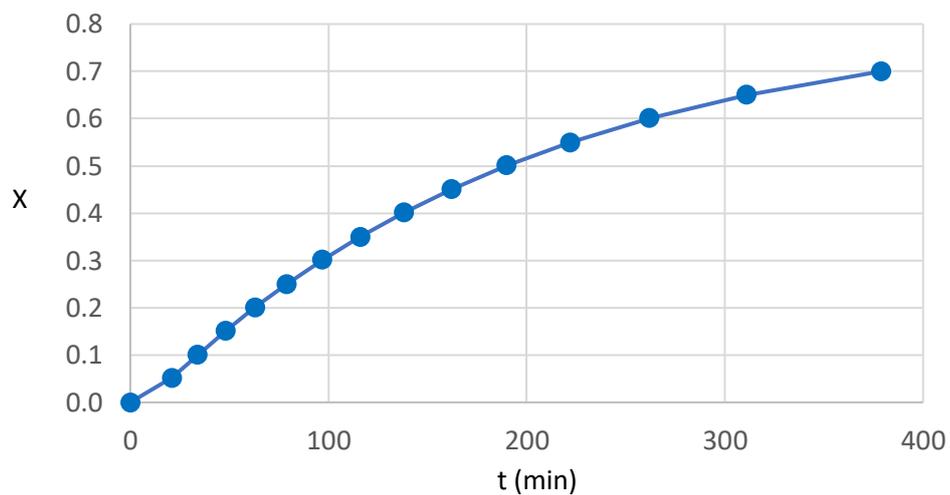


Figura 3. 32. Evolución del grado de conversión con el tiempo de precalentamiento y reacción con. Fuente: elaboración propia.

Por tanto, para el grado de conversión final ($X_f=0,7$) el tiempo de reacción es de **379 minutos** (6,32 horas) y la temperatura **348,76 K**.

6. ANEXO VI: DISEÑO DEL CONDENSADOR DE SERPENTÍN

A pesar de que la temperatura máxima de operación se ha fijado en 75°C, existe la posibilidad de que en algún momento se alcance una temperatura de 78,4°C, lo que generaría la formación del azeótropo. Es por ello por lo que se ha decidido implementar un serpentín como reflujo, para enfriar la corriente y reintroducirla al reactor.

Para realizar los cálculos, se supone que se llega a la temperatura en la que se genera el azeótropo, 78,4 °C. De esta forma, se puede calcular el calor consumido con la *ecuación 3.84*:

$$q_{consumido} = A_i \cdot U_i \cdot (T_{agua\ de\ calentamiento} - T_{interna\ del\ reactor}) \quad (J/s) \quad (3.84)$$

Siendo:

$q_{consumido}$: el calor consumido en la vaporización (J/s)

A_i : área interior del tanque (m²), que equivale a 7,0686 m².

U_i : el coeficiente global de intercambio de calor referido al área interna (W/m²·K), se utilizará el obtenido para 75°C en el *Anexo IV*, ya que se ha observado de que no varía de forma significativa para un incremento de 3 grados de temperatura, este valor es de 551,26 W/m²·K.

$T_{agua\ de\ calentamiento}$: la temperatura del agua de la camisa, en este caso será de 85°C.

$T_{interna\ del\ reactor}$: la temperatura a la que se encuentra el reactor, en este caso se supone que se llega a la temperatura de ebullición del azeótropo, 78,4°C.

Por tanto, sustituyendo los valores en la *ecuación 3.84* se puede encontrar el calor que puede proporcionar la camisa de calefacción y se emplearía en vaporizar el azeótropo:

$$q_{consumido} = 7,0686 \cdot 551,26 \cdot (358 - 351,4) = 25717,8 J/s$$

A partir de este valor, se puede calcular el caudal de vaporización del etanol haciendo uso de la *ecuación 3.85*:

$$q_{consumido} = m_{azeótropo} \cdot \Delta H_{vap}^0 \quad (J/s) \quad (3.85)$$

Donde:

$Q_{consumido}$: calor que proporciona la camisa cuando la mezcla reactante está a 78,4 °C (kJ/s).

$m_{azeótropo}$: caudal másico del vapor de etanol (kg/s).

ΔH_{vap}^0 : la entalpía de evaporación del etanol, que equivale a 841 (kJ/kg).

De esta forma, despejando y sustituyendo en la *ecuación 3.86*, se obtiene el caudal másico del azeótropo:

$$m_{\text{azeotrópo}} = \frac{q_{\text{producido}}}{\Delta H_{\text{vap}}^0} \quad (\text{kg/s}) \quad (3.86)$$

$$m_{\text{azeotrópo}} = \frac{25717,8 \cdot 10^{-3}}{841} = 0,0306 \text{ kg/s}$$

Además, se calcula el caudal de agua que circula en el serpentín con la *ecuación 3.87*:

$$q_{\text{consumido}} = \Delta T_{\text{agua refrigerante}} \cdot C_{p,\text{agua refrigerante}} \cdot m_{\text{agua refrigerante}} \quad (\text{J/s}) \quad (3.87)$$

Despejando el caudal de agua refrigerante:

$$m_{\text{agua refrigerante}} = \frac{q_{\text{consumido}}}{\Delta T_{\text{agua refrigerante}} \cdot C_{p,\text{agua refrigerante}}} \quad (\text{kg/s}) \quad (3.88)$$

Sustituyendo:

$$m_{\text{agua refrigerante}} = \frac{25717,8}{(35 - 25) \cdot 4180} = 0,615 \text{ kg/s}$$

Por otro lado, se debe calcular el área de intercambio del serpentín usando la *ecuación 3.89*:

$$A_s = \frac{q_{\text{consumido}}}{U_s \cdot DTML} \quad (\text{m}^2) \quad (3.89)$$

Las variables que participan son:

A_s : el área de intercambio en el serpentín (m^2).

U_s : el coeficiente global de transmisión de calor del serpentín ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$)

$DTML$: variación media logarítmica de la temperatura ($^{\circ}\text{C}$).

Para determinar el coeficiente global de transmisión de calor en el serpentín, se recurre a (R.K. Sinnott, 1983). En esta bibliografía se establecen los valores típicos de este parámetro para un serpentín, eligiendo un valor de $500 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot ^{\circ}\text{C}$.

Por otro lado, el $DTML$ se puede calcular con la *ecuación 3.90*:

$$DTML = \frac{(T - T_s) - (T - T_e)}{\ln\left(\frac{(T - T_s)}{(T - T_e)}\right)} \quad (^{\circ}\text{C}) \quad (3.90)$$

Donde:

T: temperatura a la que se debe mantener el tanque, 75°C.

T_s: temperatura de salida en el serpentín, 35°C.

T_e: temperatura de entrada en el serpentín, 25°C.

Sustituyendo:

$$DTML = \frac{(75 - 35) - (75 - 25)}{\ln\left(\frac{(75 - 35)}{(75 - 25)}\right)} = 44,81 \text{ °C}$$

Con todos estos valores se puede sustituir en la *ecuación 3.89* y calcular el área del serpentín:

$$A_s = \frac{25717,8}{500 \cdot 44,81} = 1,15 \text{ m}^2$$

A partir del área del serpentín también se puede conocer la longitud del tubo con la *ecuación 3.91*:

$$L_{tubo} = \frac{A_s}{\pi \cdot D_{tubo}} \text{ (m)} \quad (3.91)$$

Siendo D_{tubo} el diámetro del tubo.

Para calcular el diámetro del serpentín se tiene que conocer el área de paso que se calcula con la *ecuación 3.92*:

$$A_{paso} = \frac{m_{agua\ refrigerante}}{\rho_{agua} \cdot v} \text{ (m}^2\text{)} \quad (3.92)$$

Donde:

ρ_{agua} : densidad del agua, que son 1000 kg/m³

v_a: la velocidad típica de circulación del agua, que en este caso se supone de 0,3 m/s (igual que para el cálculo de la camisa).

El caudal de agua refrigerante se ha calculado anteriormente y vale: 0,615 kg/s.

Sustituyendo:

$$A_{paso} = \frac{0,615}{\frac{1000}{0,3}} = 2,05 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

Para calcular el diámetro del tubo se hace uso de la *ecuación 3.93*:

$$D_{tubo} = \sqrt{\frac{A_{paso} \cdot 4}{\pi}} \quad (m) \quad (3.93)$$

$$D_{tubo} = \sqrt{\frac{2.05 \cdot 10^{-3} \cdot 4}{\pi}} = 0,0511 \text{ m}$$

Ahora con estos datos, se calcula la longitud del serpentín, sustituyendo en la *ecuación 3.91*:

$$L_{tubo} = \frac{1,15}{\pi \cdot 0,0511} = 7.16 \approx 8 \text{ m}$$

Finalmente, suponiendo que el diámetro de las vueltas del serpentín es de 0,6 m (razonable teniendo en cuenta que el diámetro del agitador es de 0,45 m), se puede calcular el número de vueltas con la *ecuación 3.94*:

$$N_{vueltas} = \frac{L_{tubo}}{\pi \cdot D_{vuelta}} \quad (3.94)$$

$$N_{vueltas} = \frac{8}{\pi \cdot 0,6} = 4.24 \approx 5 \text{ vueltas}$$

Finalmente, suponiendo una distancia entre cada vuelta del doble del diámetro del serpentín, se puede obtener la altura de este si se utiliza la *ecuación 3.95*:

$$h_s = N_{vueltas} \cdot distancia_{vuelta} \quad (3.95)$$

$$h_s = 5 \cdot 2 \cdot 0,0511 = 0,511 \text{ m}$$

7. ANEXO VII: VIABILIDAD ECONÓMICA

El estudio de viabilidad económica de un proyecto es un análisis exhaustivo que evalúa la viabilidad financiera y económica de llevar a cabo una determinada actividad. Su objetivo principal es determinar si el proyecto es económicamente viable y rentable.

Es importante tener en cuenta que el valor del dinero varía con el tiempo, por tanto, para determinar su valor para cada año, se utiliza la *ecuación 3.96*:

$$C_n = C_o \cdot \left(1 + \frac{IPC}{100}\right)^a \quad (3.96)$$

Donde:

C_n : valor del dinero para tiempo n .

C_o : valor del dinero para tiempo inicial.

a : número de años.

IPC: Índice de precios al consumo.

Cabe destacar que el valor del IPC depende a su vez de otros dos parámetros: el interés nominal (i_n) y el interés real (i_r). Los valores utilizados se muestran a continuación:

IPC=2,6 %

Interés nominal (i_n)=3,35%

Interés real (i_r): $i_n - IPC = 0,75\%$

Es importante considerar que actualmente el Índice de Precios al Consumidor (IPC) tiene unos valores muy fluctuantes, principalmente debido a la crisis derivada de la guerra de Ucrania, esto conlleva a que una estimación a futuro sea poco realista, por lo que, el valor utilizado en este proyecto es el correspondiente a la tasa anual en agosto de 2023.

7.1 Inversión inicial

La inversión inicial del proyecto se corresponde con el presupuesto total estipulado en el documento *Presupuesto*, que es de **325.508,63 €**.

7.2 Ingresos

Los ingresos de la empresa se calculan en función de la producción.

Para calcular la producción de butirato de etilo es necesario determinar la duración total del ciclo de reacción.

- **Fases de llenado y vaciado:** considerando una velocidad máxima de llenado y vaciado de 2 L/s, se ha tenido un tiempo total de 28,3 minutos.
- **Fase simultánea de calentamiento y reacción:** en el *Anexo V: Balance de materia y energía* se ha determinado que el tiempo necesario para alcanzar un grado de conversión de 0,7 es de 379 minutos.

De este modo, el tiempo total (t_{total}) serían 407,3 minutos o 6,79 horas.

La producción se calcula con la *ecuación 3.97*:

$$Producción = \frac{V_{reactantes} \cdot C_{A0} \cdot X}{t_{total}} \quad (3.97)$$

Así pues, es necesario calcular el volumen de reactantes:

$$V_{útil} = V_{reactantes} + V_{resina} \quad (3.98)$$

Teniendo en cuenta que el volumen de la resina se puede calcular dividiendo la cantidad a utilizar (73,2 kg/m³) y su densidad:

$$1,7 = V_{reactantes} \cdot \left(1 + \frac{73,2}{937}\right)$$

Así, despejando el volumen de reactantes:

$$V_{reactantes} = \frac{1,7}{\left(1 + \frac{73,2}{937}\right)}$$

$$V_{reactantes} = 1,5768 \text{ m}^3$$

Por tanto, la producción será:

$$Producción = \frac{1,5768 \cdot 2,598 \cdot 0,7}{6,79} = 0,42 \text{ kmol/h}$$

Para calcular la cantidad de butirato de etilo que se obtendrá de cada carga, primero se calcula la producción de butirato de etilo con la *ecuación 3.99*:

$$P_{butirato\ de\ etilo} = Producción \cdot PM_{Butirato\ de\ etilo} \quad (3.99)$$

De este modo:

$$P_{butirato\ de\ etilo} = 0,42 \cdot 116,08 = 49,02\ kg/h$$

Ahora, sabiendo que el tiempo que se necesita para realizar una carga es de 6,79 horas:

$$P_{butirato\ de\ etilo\ para\ una\ carga} = P_{butirato\ de\ etilo} \cdot t_{total} \quad (3.100)$$

$$P_{butirato\ de\ etilo\ para\ una\ carga} = 49,02 \cdot 6,79 = 332,85\ kg/carga$$

Para este tiempo, el número de cargas máximas son 3 diarias. Sin embargo, debido al posible solapamiento con otros procesos de producción que necesitarán utilizar el equipamiento de la planta, para realizar el estudio económico se considera que se efectuarán dos cargas al día. De esta forma, teniendo en cuenta que el reactor permanece parado dos semanas por mantenimiento se harán 702 cargas al año, por tanto, la producción de butirato de etilo será de 233.660,7 kg/año. Sin embargo, solo se venden 231.262,38 kg/año debido a que en cada producción hay un 1% de pérdidas y a la extracción de dos muestras de 50 mL. Una de las muestras de 50 mL es llevada al laboratorio de Calidad para validar la producción y la otra se almacena en la empresa por si hay alguna queja de algún cliente.

Se puede determinar en la *tabla 3.12* los ingresos obtenidos:

Tabla 3.12. Ingresos obtenidos. Fuente: elaboración propia.

Cantidad de butirato de etilo al año (kg)	Precio ud. (€/kg)	Precio al año (€/año)
231.262,38	25,95	6.001.258,76
Ingresos totales		6.001.258,76

Por tanto, los ingresos para el primer año serán **6.001.258,76 €/año**.

7.3 Gastos

Los gastos de una empresa se dividen en gastos directos e indirectos y cada uno de ellos se explica a continuación.

7.3.1 Gastos directos

Los gastos directos son aquellos costes que se atribuyen directamente a un proyecto o actividad específica. Estos gastos están directamente relacionados con la producción o la ejecución de bienes o servicios específicos.

Los costes que se consideran directos para este proyecto son:

- Gastos de materia prima.
- Gastos derivados de la separación de reactantes.
- Gasto de energía eléctrica por calefacción de la mezcla reactante.
- Gastos de reaprovechamiento del etanol.
- Gastos de energía eléctrica consumida por el motor del agitador.
- Gastos de enfriamiento de la mezcla reactante vaporizada con el serpentín.
- Gastos de envasado del producto.

Cabe destacar que los gastos de enfriamiento de la mezcla reactante se despreciarán respecto a todos los demás, debido a que se trabajará siempre en condiciones en las que se evitará esta vaporización.

Gastos de materia prima

Para la producción de butirato de etilo se consumen 252,35 kg de ácido butírico por cada carga lo que equivale a 177.142,68 kg/año. Del mismo modo, se consume de etanol 132,08 kg/carga, que son 92.718,09 kg/año.

Además, se necesitarán 73,2 kg /m³ de resina Amberlyst 15. Suponiendo una tasa de reposición del 5%, el consumo será de 4.045,31 kg/año.

De esta forma se puede establecer la cantidad de materia prima al año y el precio en la *tabla 3.13*:

Tabla 3.13. Cantidad de materia prima. Fuente: elaboración propia.

Materia prima	Cantidad de materia prima al año (kg/año)	Precio unitario (€/kg)	Precio total (€/año)
Ácido butírico	177.142,68	20,2	3.578.282,14
Etanol	92.718,09	2,43	225.304,93
Resina Amberlyst 15	4.045,31	123,00	497.573,13
TOTAL			4.301.160,2

Gastos derivados de la separación de reactantes

Los costes de separación se estiman suponiendo que se utiliza una columna de rectificación discontinua. En estas condiciones pueden utilizarse razones de reflujo de 5 o 6 para conseguir una buena separación. En una primera aproximación, se calcula la energía necesaria para elevar la temperatura de los componentes de la mezcla reactante desde 348 K hasta su temperatura de ebullición, así como, la energía requerida para vaporizarlos, y este resultado se multiplicará por (1+R), donde se considerará que R es la razón de reflujo y tendrá un valor de 5.

$$Q_{cal\ react} = M_j \cdot C_p \cdot (T_b - T_0) \quad (3.101)$$

$$Q_{vap\ react} = \Delta H^\circ_{vap} \cdot N_j \quad (3.102)$$

Para estos cálculos se utiliza el máximo valor de calor específico que se encuentra en la *tabla 3.4*, siendo este de un valor de 2921,255 J/kg·K. Respecto a la entalpía de evaporación, se utilizan los valores de la *tabla 2.3 del documento Memoria*.

En la *tabla 3.14* se puede observar la composición del interior del reactor al final del ciclo, así como la energía de calentamiento y de vaporización.

Tabla 3.14. Composición del interior del reactor al final del ciclo, energía de calentamiento y vaporización. Fuente: elaboración propia.

Parámetro	N _j (kmol)	Q _{cal react} (kJ)	Q _{vap react} (kJ)
Ácido butírico	1,23	27,98·10 ³	49,75·10 ³
Etanol	17,62	7,59·10 ³	679,43·10 ³
Butirato de etilo	2,87	44,77·10 ³	116,67·10 ³
Agua	2,87	0,48·10 ³	111,33·10 ³

Por tanto, para calcular el consumo de energía eléctrica en una carga:

$$C_{E.E \text{ separación de reactantes}} (kWh) = \frac{6 \cdot (\sum Q_{\text{calentamiento reactantes}} + \sum Q_{\text{vaporización reactantes}})}{3600} \quad (3.103)$$

Así pues, se obtienen 1730 kWh/carga, lo que equivale a 1.214.460 kWh/año. Teniendo en cuenta que el precio medio de la energía eléctrica es de aproximadamente 0,1215 €/kWh, se tiene que el consumo de energía eléctrica derivado de la separación de reactantes es de **147.557 €/año**.

Gasto de energía eléctrica por calefacción de la mezcla reactante

Para este gasto se ha efectuado una aproximación suponiendo, la suma de dos contribuciones: el calor necesario para calentar la mezcla reactante hasta la temperatura de reacción y el calor que es necesario aportar para compensar el calor absorbido por la reacción de esterificación, que es endotérmica. Además, se incluirá una estimación de las pérdidas de calor por radiación y convección, suponiendo que serán del 5% del total.

De esta manera, el calor que ha de suministrarse a la mezcla reactante se calcula mediante la *ecuación 3.104*:

$$Q_{\text{suministrado}} (J) = (Q_{\text{para calentar la mezcla reactante}} + Q_{\text{para compensar la entalpía de reacción}}) \cdot 1,05 \quad (3.104)$$

Así pues,

$$Q_{\text{para calentar la mezcla reactante}} (J) = \int_{298}^{348} C_p (T) \cdot \rho \cdot V \quad (3.105)$$

Conociendo la variación del calor específico con la temperatura y el grado de conversión (suponiendo en este caso un valor de $X=0$), que se muestra en la *ecuación 3.10*:

$$Q_{\text{para calentar la mezcla reactante}} = \int_{298}^{348} (2,0333 + 8,3617 \cdot T) \cdot 833,57 \cdot 1,7 = 192 \cdot 10^6 J$$

Por otro lado, se calcula el calor aportado para compensar la entalpía de reacción:

$$Q_{\text{para compensar la entalpía de reacción}} = \Delta H^{\circ}_{k,T} \cdot V_{\text{reactantes}} \cdot N_k \cdot X \quad (3.106)$$

$$\begin{aligned} Q_{\text{para compensar la entalpía de reacción}} &= (10518 + 12,4 \cdot (T - 298)) \cdot 1,5768 \cdot 2,598 \cdot 10^3 \cdot 0,7 \\ &= 31,94 \cdot 10^6 \text{ J} \end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación 3.103 se obtienen $235,137 \cdot 10^6 \text{ J}$ lo que equivale a 65,32 kWh.

Siendo por tanto el gasto de **5.570,98 €/año**.

Gastos de reaprovechamiento del etanol

Se considerará que el azeótropo llegará a los tamices moleculares, proveniente de la columna de rectificación, en forma de vapor a su temperatura de ebullición. Para calcular el coste de obtener etanol absoluto, se deben calcular los gastos asociados al proceso de tamices moleculares, utilizando los consumos de la figura 2.11 del documento *Memoria*.

De esta forma se tiene:

- Para el agua de enfriamiento, un consumo de 0,09 m³ / hL etanol anhidro.
- Para el “Fuel oil”, un consumo de 0,12 kg/ hL etanol anhidro.
- Para los gastos de electricidad, un consumo de 0,94 kWh / hL etanol anhidro.

Teniendo en cuenta que en cada carga se producen 20,49 kmol de azeótropo, que contienen 17,62 kmol de etanol, (lo que equivale a 10,3 hL de etanol), se obtiene:

- **Consumo de agua de enfriamiento:** 650,75 m³ de agua / año.
- **Consumo de “Fuel oil”:** 867,67 kg / año.
- **Consumo de electricidad:** 6.796,76 kWh / año.

En la tabla 3.15 se muestra un resumen del consumo total correspondiente a este capítulo:

Tabla 3.15. Consumo total del reaprovechamiento del etanol. Fuente: elaboración propia.

Parámetro	Consumo anual	Precio unitario	Precio total (€/año)
Agua de enfriamiento	650,75 m ³ /año	1,91 €/m ³	1.242,94
“Fuel oil”	867,67 kg/año	1,2 €/kg	1.041,20
Electricidad	6.796,76 kWh	0,1215 €/kWh	825,81
TOTAL			3.109,95

Gastos de energía eléctrica consumida por el motor del agitador

En este caso se debe tener en cuenta la potencia del motor de agitación, que es de 3 kW. Por tanto, sabiendo que el motor está en funcionamiento 9.533,16 horas el gasto eléctrico anual es de **3.474,84 €/año**.

Gastos de envasado del producto

En una producción se obtienen 378,66 litros de butirato de etilo, que se deben transportar mediante bidones con características de seguridad especiales para el envasado de sustancias químicas, tal y como se establece en el reglamento CLP (Classification, Labelling and Packaging), de aplicación obligatoria en la Unión Europea.

Como el producto se vende como materia prima para otras industrias, la producción total diaria (2 cargas) se introduce en un depósito de 750 litros.

De este modo, para la venta se utilizan depósitos UNITECH homologados con ADR (el Acuerdo Europeo sobre Transporte Internacional de Mercancías Peligrosas por Carretera).

El precio de los bidones de 750 litros es de **870 €/ud.**

En la *figura 3.33* se muestran los bidones UNITECH:



Figura 3.33. Bidón UNITECH. Fuente: <https://www.conterol.es>

Además, para guardar las muestras se utilizarán dos envases de 50 mL, cuyo precio será de **0,93 €/ud.**

En la *figura 3.34*, se pueden observar los frascos utilizados.



Figura 3.34. Envases de 50 mL. Fuente: <https://www.botellas-y-tarros.es>.

En la *tabla 3.16* se muestra un resumen del gasto de envases:

Tabla 3.16. Resumen del gasto de envases. Fuente: elaboración propia.

Envases	Precio unitario (€/ud.)	Precio total (€/año)
351 bidones de 750 L	870	305.370,00
1404 frascos de 50 mL	0,93	1.305,72
TOTAL		306.675,72

Por tanto, el precio de los envases para un año se establecerá en **306.675,72 €/año**.

En la *tabla 3.17* se muestra un resumen de los gastos directos que tendrá el reactor:

Tabla 3.17. Gastos directos. Fuente: elaboración propia.

Elementos	Coste (€/año)
Materia prima.	4.301.160,2
Separación de reactantes	147.556,89
Energía eléctrica por calefacción de la mezcla	5.570,98
Reaprovechamiento del etanol	3.109,95
Energía eléctrica consumida por el motor del agitador	3.474,84
Envasado del producto.	306.675,72
TOTAL	4.767.548,58

7.3.2 Gastos indirectos

Los gastos indirectos son los costes operativos que no se pueden atribuir directamente a un producto específico, proyecto o actividad particular. Son gastos necesarios para el funcionamiento general de una empresa y no pueden ser identificados fácilmente con un producto en particular.

En este apartado se detallan diferentes gastos, como son los siguientes:

- El mantenimiento del reactor se realizará cada trimestre y tiene un precio de 500€, por lo que el gasto anual será de **2.000 €/año**.
- Considerando que la planta trabaja las 24 horas, se necesitarán 3 operarios para trabajar por la mañana, la tarde y la noche. El salario mensual de cada operario será de 3.600 € brutos/mes, de los cuales la mitad serán imputables a este proyecto considerando que pueden dedicar la mitad de su tiempo a otros procesos que se estén realizando en la fábrica. Así pues, el coste anual referido al personal, imputable a este proyecto, será de: **75.600 €/año**.
- Finalmente, se considerará que el 15% de los ingresos obtenidos de este reactor se utilizará para cubrir gastos generales de la empresa como son: la electricidad consumida por la empresa, sueldos de los trabajadores de otras áreas o gastos de agua corriente.

Por tanto, en la *tabla 3.18* se muestra el total de los gastos indirectos.

Tabla 3.18. Gastos indirectos. Fuente: elaboración propia.

Gastos	Coste (€/año)
Mantenimiento trimestral	2.000
Sueldo de los operario/as	75.600
15 % de los ingresos obtenidos	1.013.416,85
Total	1.091.016,85

7.3.3 Gastos totales

Los gastos totales serán la suma de los gastos directos e indirectos. En la *tabla 3.19* se observa un resumen de los gastos directos e indirectos y los totales.

Tabla 3.19. Gastos totales. Fuente: elaboración propia.

Gastos	Coste (€/año)
Gastos indirectos	1.091.016,85
Gastos directos	4.767.548,58
Gastos totales	5.858.565,43

7.4 Amortización

La amortización consiste en registrar y reconocer el desgaste, deterioro o consumo de un activo a lo largo del tiempo. Se puede obtener a partir del cociente entre la inversión inicial y el número de años para amortizar el equipo.

Para conocer el tiempo de amortización se recurre a la Agencia Tributaria donde se presentan diversas tablas que indican el tiempo de amortización máximo para diferentes elementos. Para la maquinaria en instalaciones industriales se establece un periodo máximo de amortización de 18 años. En este caso, al tratarse de un reactor se establece una amortización de 10 años, ya que gracias a las nuevas tecnologías los equipos son renovados antes de que estén obsoletos.

Por tanto, la amortización para el primer año se calcula mediante la *ecuación 2.1*:

$$\text{Amortización} = \frac{I_0}{\text{tiempo de amortización}} \quad (2.1)$$

$$\text{Amortización} = \frac{325.508,63}{10} = 32.550,86 \text{ €}$$

7.5 Beneficio

El beneficio de una empresa está determinado por dos tipos de beneficios: beneficio bruto y beneficio neto. La explicación y el cálculo de ambos se realizará a continuación.

7.5.1 Beneficio bruto

El beneficio bruto es la diferencia entre los ingresos y los gastos totales (incluyendo la amortización). Por tanto, se calcula con la *ecuación 2.2*:

$$B_b = I - G - A \quad (2.2)$$

7.5.2 Beneficio neto

El beneficio neto es la cantidad de dinero que una empresa deduce después de deducir todos los gastos. De esta forma, será lo que quede una vez se descuentan los impuestos de

sociedades al beneficio bruto. Para sociedades, los impuestos se consideran un 25% del beneficio bruto.

$$B_n = B_b - 0,25 \cdot B_b = 0,75 \cdot B_b \quad (2.3)$$

7.6 Flujo de caja

El flujo de caja evalúa los movimientos de dinero que ingresan y salen de una empresa durante un periodo de tiempo. Es la suma del beneficio neto y la amortización, tal y como se observa en la *ecuación 2.4*:

$$FC = B_N + A \quad (2.4)$$

7.7 Valor Actual Neto (VAN)

El VAN determina la viabilidad de una inversión o proyecto. Se calcula considerando el valor temporal del dinero y se utiliza la *ecuación 2.5* para ello:

$$VAN = \sum_{i=1}^n \frac{FC}{\left(1 + \frac{i_r}{100}\right)^n} - I_0 \quad (2.5)$$

7.8 Tasa Interna de Rentabilidad (TIR)

La Tasa Interna de Rentabilidad representa la tasa de crecimiento anualizada que iguala el valor presente de los flujos efectivos futuros de un proyecto con la inversión inicial. Cuanto mayor es su valor, la rentabilidad del proyecto es mayor.

El TIR es el valor del interés real que hace que el VAN sea cero. Por tanto, para determinarlo se hace un proceso iterativo hasta obtener el valor que permite que el VAN sea cero.

7.9 Periodo de retorno (PR)

El periodo de retorno se utiliza para determinar el tiempo necesario para recuperar la inversión. Se calcula con la *ecuación 2.6*:

$$PR = \frac{\sum_{i=1}^n FC}{I_0} \quad (2.6)$$

7.10 Resumen y resultados

Como los beneficios brutos y netos y el flujo de caja dependen del tiempo, se realiza la *tabla 3.20* donde se observan los resultados para todos los cálculos descritos anteriormente:

Tabla 3. 20. Resultados viabilidad económica. Fuente: elaboración propia.

Año	Gastos	Ingresos	Amortizaciones	Bb	Bn	FC	$FC/(1+i_r/100)^n - I_0$
1	$5,86 \cdot 10^6$	$6,00 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,10 \cdot 10^5$	$8,26 \cdot 10^4$	$1,15 \cdot 10^5$	$1,14 \cdot 10^5$
2	$6,01 \cdot 10^6$	$6,16 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,14 \cdot 10^5$	$8,54 \cdot 10^4$	$1,18 \cdot 10^5$	$1,16 \cdot 10^5$
3	$6,17 \cdot 10^6$	$6,32 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,18 \cdot 10^5$	$8,82 \cdot 10^4$	$1,21 \cdot 10^5$	$1,18 \cdot 10^5$
4	$6,33 \cdot 10^6$	$6,48 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,22 \cdot 10^5$	$9,12 \cdot 10^4$	$1,24 \cdot 10^5$	$1,20 \cdot 10^5$
5	$6,49 \cdot 10^6$	$6,65 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,26 \cdot 10^5$	$9,42 \cdot 10^4$	$1,27 \cdot 10^5$	$1,22 \cdot 10^5$
6	$6,66 \cdot 10^6$	$6,82 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,30 \cdot 10^5$	$9,73 \cdot 10^4$	$1,30 \cdot 10^5$	$1,24 \cdot 10^5$
7	$6,83 \cdot 10^6$	$7,00 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,34 \cdot 10^5$	$1,00 \cdot 10^5$	$1,33 \cdot 10^5$	$1,26 \cdot 10^5$
8	$7,01 \cdot 10^6$	$7,18 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,38 \cdot 10^5$	$1,04 \cdot 10^5$	$1,36 \cdot 10^5$	$1,28 \cdot 10^5$
9	$7,19 \cdot 10^6$	$7,37 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,43 \cdot 10^5$	$1,07 \cdot 10^5$	$1,40 \cdot 10^5$	$1,30 \cdot 10^5$
10	$7,38 \cdot 10^6$	$7,56 \cdot 10^6$	$3,26 \cdot 10^4$	$1,47 \cdot 10^5$	$1,10 \cdot 10^5$	$1,43 \cdot 10^5$	$1,33 \cdot 10^5$

Además, para calcular el TIR se realiza un procedimiento iterativo, ya que es el valor que se obtiene cuando el VAN es cero. En este caso el parámetro que varía es el interés real y los resultados obtenidos en este caso para la *ecuación 2.5* se muestran en la *tabla 3.21*:

Tabla 3. 21. Valores para calcular el TIR. Fuente: elaboración propia.

Año	$FC/(1+i_r/100)^n - I_0$
1	$8,49 \cdot 10^4$
2	$6,41 \cdot 10^4$
3	$4,84 \cdot 10^4$
4	$3,65 \cdot 10^4$
5	$2,76 \cdot 10^4$
6	$2,08 \cdot 10^4$
7	$1,57 \cdot 10^4$
8	$1,19 \cdot 10^4$
9	$8,96 \cdot 10^3$
10	$6,76 \cdot 10^3$

En la *tabla 3.22* se muestra de forma más resumida los valores obtenidos para el VAN, el TIR y el PR:

Tabla 3.22. Valores del VAN, TIR y PR. Fuente: elaboración propia.

VAN	907.054,96 €
TIR	35,68 %
PR	2,53 años

8. ANEXO VIII: ESTUDIO DE SEGURIDAD Y SALUD

El Estudio de Seguridad y Salud se lleva a cabo en proyectos que cuenten con las siguientes características:

- Presupuesto (PEC) > 450.000 €.
- Duración estimada mayor a 30 días laborables y mano de obra superior a 20 trabajadores.
- Volumen de mano de obra estimada (suma de los días de trabajo del total de los trabajadores en la obra) superior a 500 días.
- Obras de túneles, galerías, conducciones subterráneas y presas.

Para aquellos proyectos que no estén incluidos en los cuatro casos nombrados anteriormente (tal y como ocurre con este proyecto), se realiza un Estudio Básico de Seguridad y Salud.

8.1 Descripción del proyecto

Se pretende desarrollar un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado para obtener butirato de etilo, que trabaja a 75°C y cuenta con una camisa de agua a 85°C.

El material utilizado para la construcción de este tipo de reactor se trata de acero inoxidable, para disminuir al mínimo los riesgos por corrosión.

Además, el reactor cuenta con un agitador de 4 palas inclinadas a 45°, para obtener una mezcla suficientemente homogénea.

8.2 Riesgos

En primer lugar, debido a las elevadas temperaturas de trabajo uno de los mayores riesgos asociados al funcionamiento del reactor es la posibilidad de quemaduras en los operarios.

Por otra parte, durante las labores de limpieza y preparación del área para la instalación del reactor, existe el riesgo de accidentes como caída de objetos, el riesgo de golpes con herramientas o desprendimiento de objetos. Además, se debe tener en cuenta la posible exposición a niveles de ruido elevados, lo que puede tener impactos negativos en la salud auditiva de los trabajadores.

Finalmente, es esencial prestar especial atención a las soldaduras del reactor, ya que, al tratarse de un recipiente a presión, es crucial asegurarse de que no haya riesgo de fallos en la integridad estructural del reactor.

El diseño y operación del reactor se deben considerar medidas de seguridad para prevenir accidentes en los trabajadores, así como asegurar la calidad y resistencia de la estructura del reactor. La protección de los operarios y la integridad del equipo son factores esenciales para evitar riesgos y garantizar un entorno de trabajo seguro.

8.3 Medidas de prevención

Las medidas de prevención más efectivas en cualquier planta química son el uso de EPI's por parte de los trabajadores. A continuación, en la *tabla 3.23* se describen algunos de estos equipos de protección y se determina para qué se deben utilizar.

Tabla 3.23. Uso de EPI's. Fuente: elaboración propia.

EPI's	Puesta en marcha del reactor	Limpieza y preparación del área	Comprobación de la estructura del reactor
Mascarilla	Sí	Sí	No
Guantes	Sí	Sí	Sí
Zapatos de seguridad	Sí	Sí	Sí
Tapones	Sí	Sí	Sí
Gafas	Sí	Sí	Sí
Casco	Sí	Sí	Sí
Ropa ignífuga y reflectante	Sí	Sí	Sí

9. ANEXO IX: ESTUDIO DE IMPACTO AMBIENTAL

El Estudio de Impacto Ambiental es un informe técnico que debe ser preparado por el encargado de un proyecto de Ingeniería, para evaluar los efectos de este en el entorno natural y humano. Además, permite tomar las medidas de prevención adecuadas para prevenir o minimizar los posibles efectos del proyecto sobre el medioambiente.

La Ley 21/2013, de 9 de diciembre, de evaluación ambiental, regula los proyectos que deben someterse a la evaluación de impacto ambiental.

Este proyecto consiste en desarrollar un reactor para sintetizar butirato de etilo, lo cual implica la reacción entre ácido butírico y etanol.

Es importante destacar que el etanol no consumido en la reacción puede ser liberado a la atmósfera en forma de vapor, lo que contribuye a un aumento significativo en las emisiones de efecto invernadero y al calentamiento global.

Por otro lado, los líquidos que se generen por la producción del Butanoato de Etilo, las aguas pluviales, el agua derivada de los sistemas contra incendio, aguas utilizadas para las labores de limpieza, deben ser correctamente gestionadas para evitar impactos negativos sobre el medioambiente.

Además de los aspectos ambientales mencionados, se debe tener en cuenta que la implementación de este proyecto requiere la adecuación de la zona, lo que fomentará la producción de distintos tipos de residuos. Es de suma importancia gestionar estos residuos para reducir su impacto en el entorno.

En resumen, la síntesis de butirato de etilo implica consideraciones ambientales relacionadas con la emisión de etanol y la generación de residuos. Es necesario tomar las medidas adecuadas para eliminar o mitigar estos efectos y de esta forma conseguir que el proceso sea más sostenible, tanto en el diseño como en la operación del reactor.

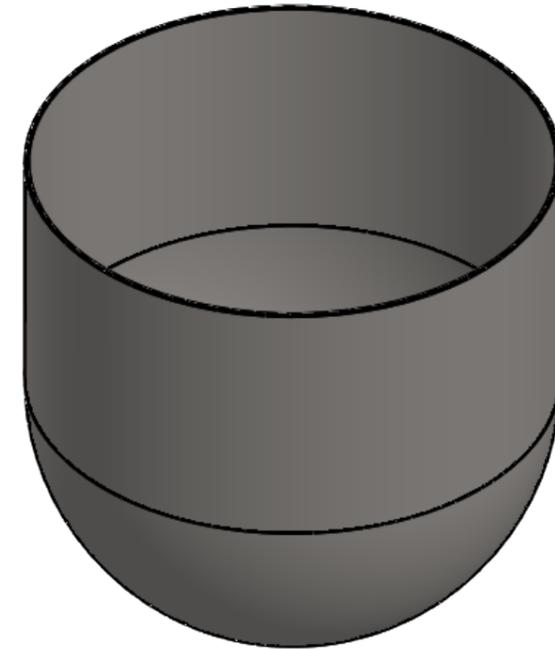
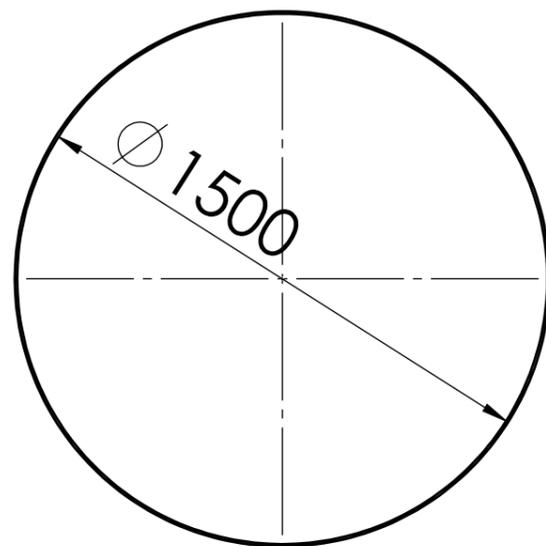
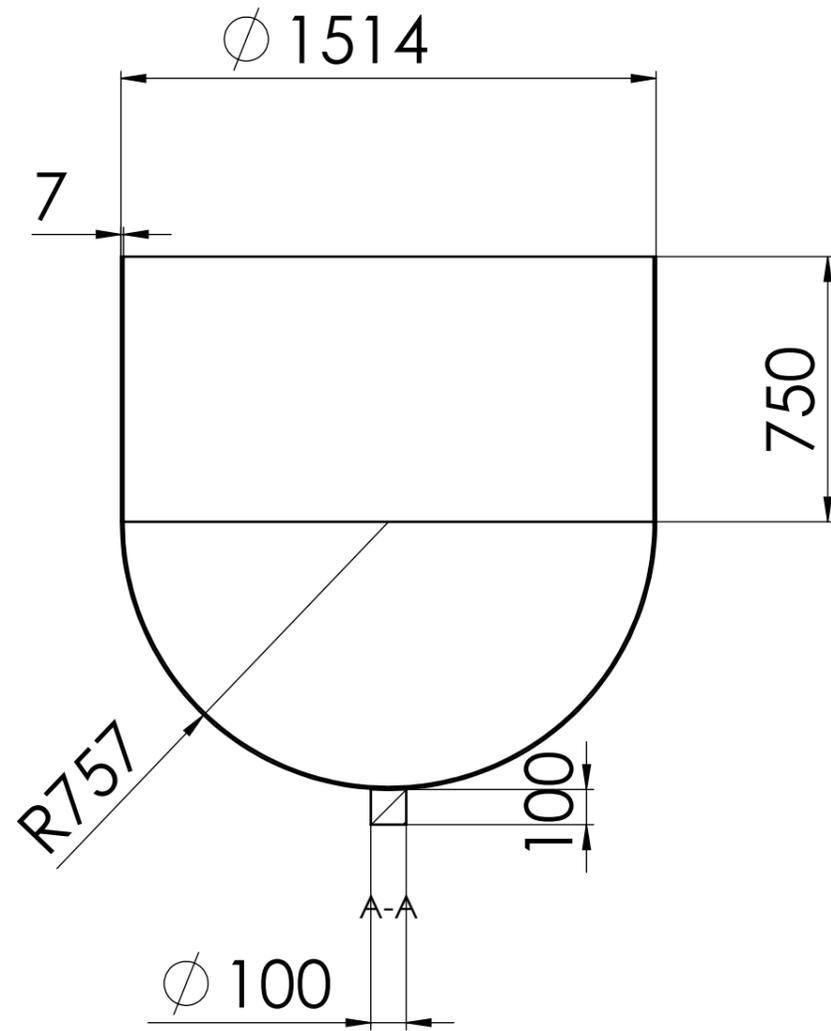
Las acciones que se deben tomar se describen a continuación:

- Para reducir la emisión del etanol a la atmosfera se instala un reflujo que reintroduce los restos de materia prima de nuevo en el reactor.
- Las aguas residuales generadas serán gestionadas por el sistema de tratamiento de efluentes ya existentes en la planta.
- Los residuos obtenidos en la instalación del reactor se deben gestionar mediante la instalación de puntos limpios en la empresa y con el uso de ecoparques. Además, se debe intentar en la medida de lo posible reciclar y reutilizar los residuos generados para otras aplicaciones en la empresa, para enviar la menor cantidad posible a los vertederos.

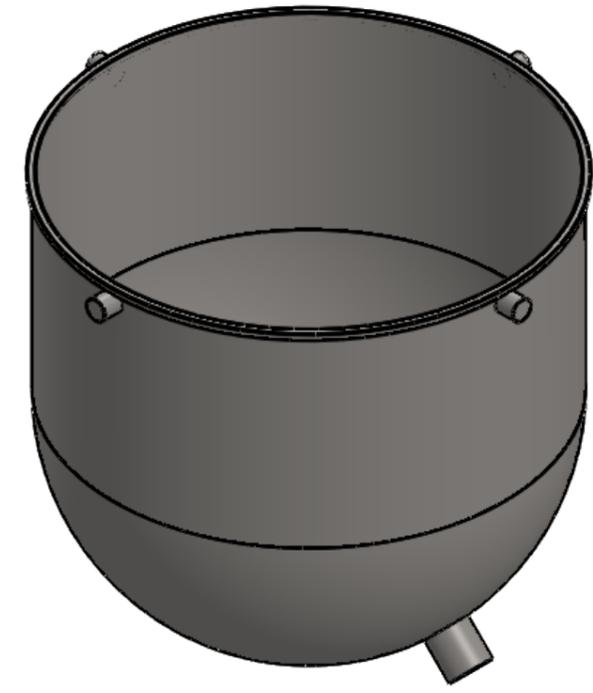
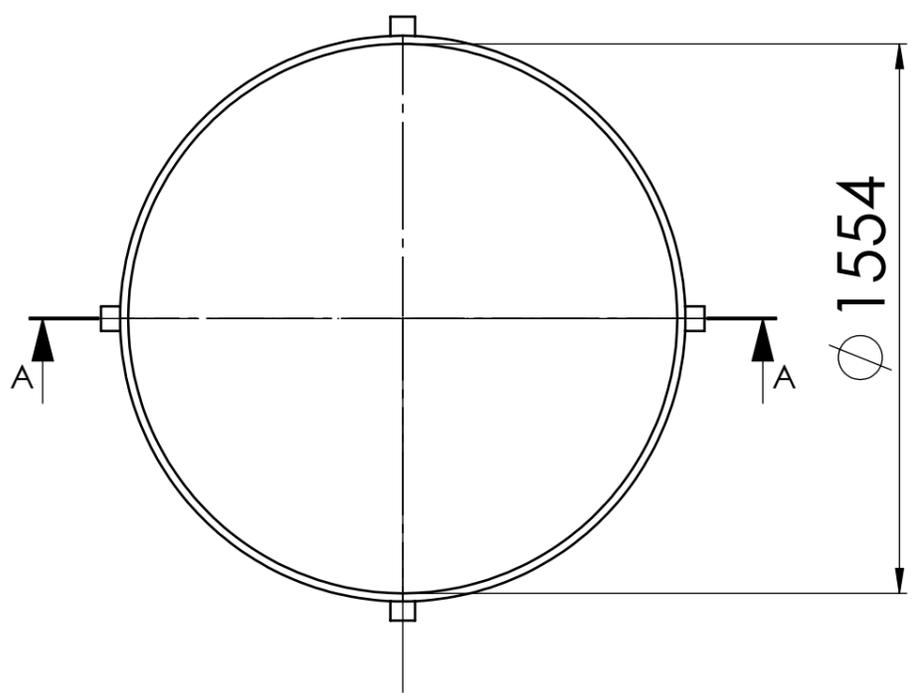
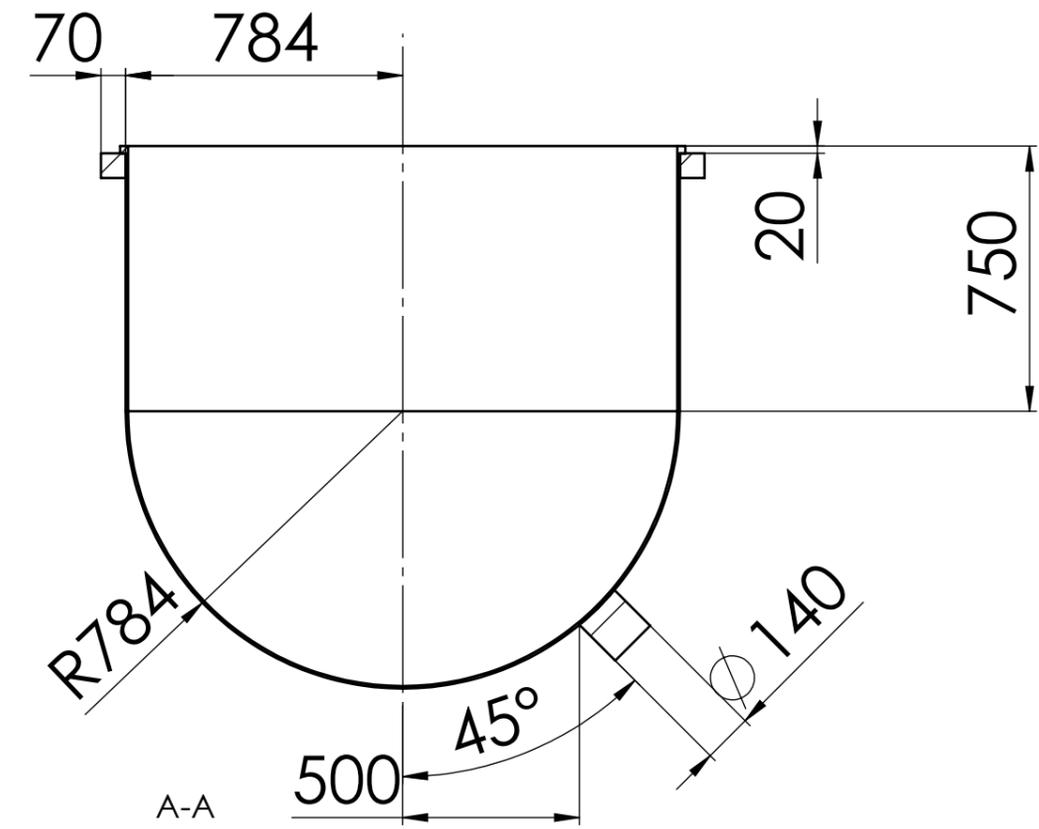
4. PLANOS

ÍNDICE

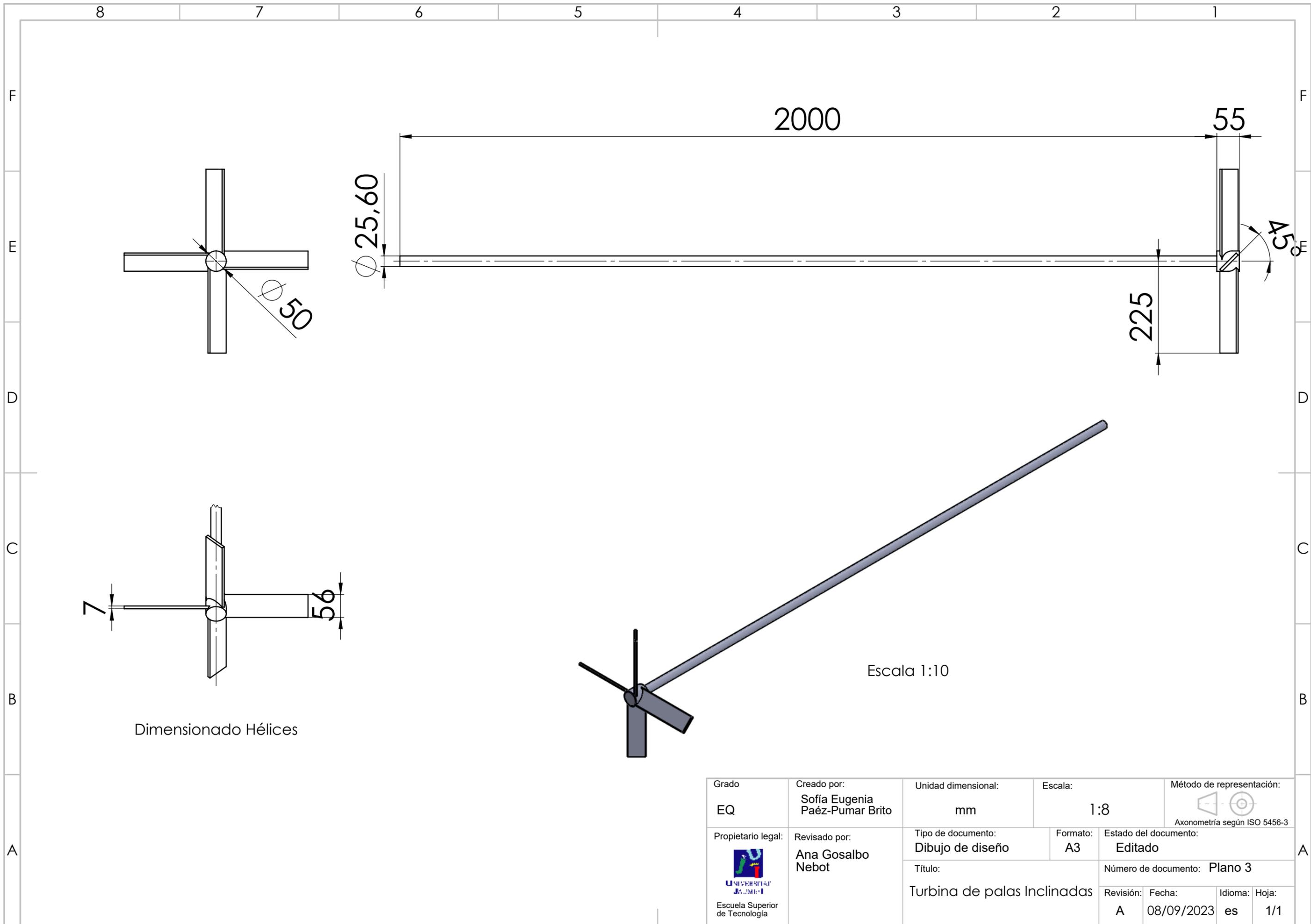
1. Tanque	2
2. Camisa de calentamiento	3
3. Agitador de palas inclinadas	4
4. Tapa toriesférica	5
5. Condensador de serpentín	6
6. Reactor Discontinuo de Tanque Agitado	7



Grado EQ	Creado por: Sofia Eugenia Páez-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:20	Método de representación:  Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Gosalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Tanque	Número de documento: Plano 1	
		Revisión: A	Fecha: 08/09/2023	Idioma: Hoja: es 1/1



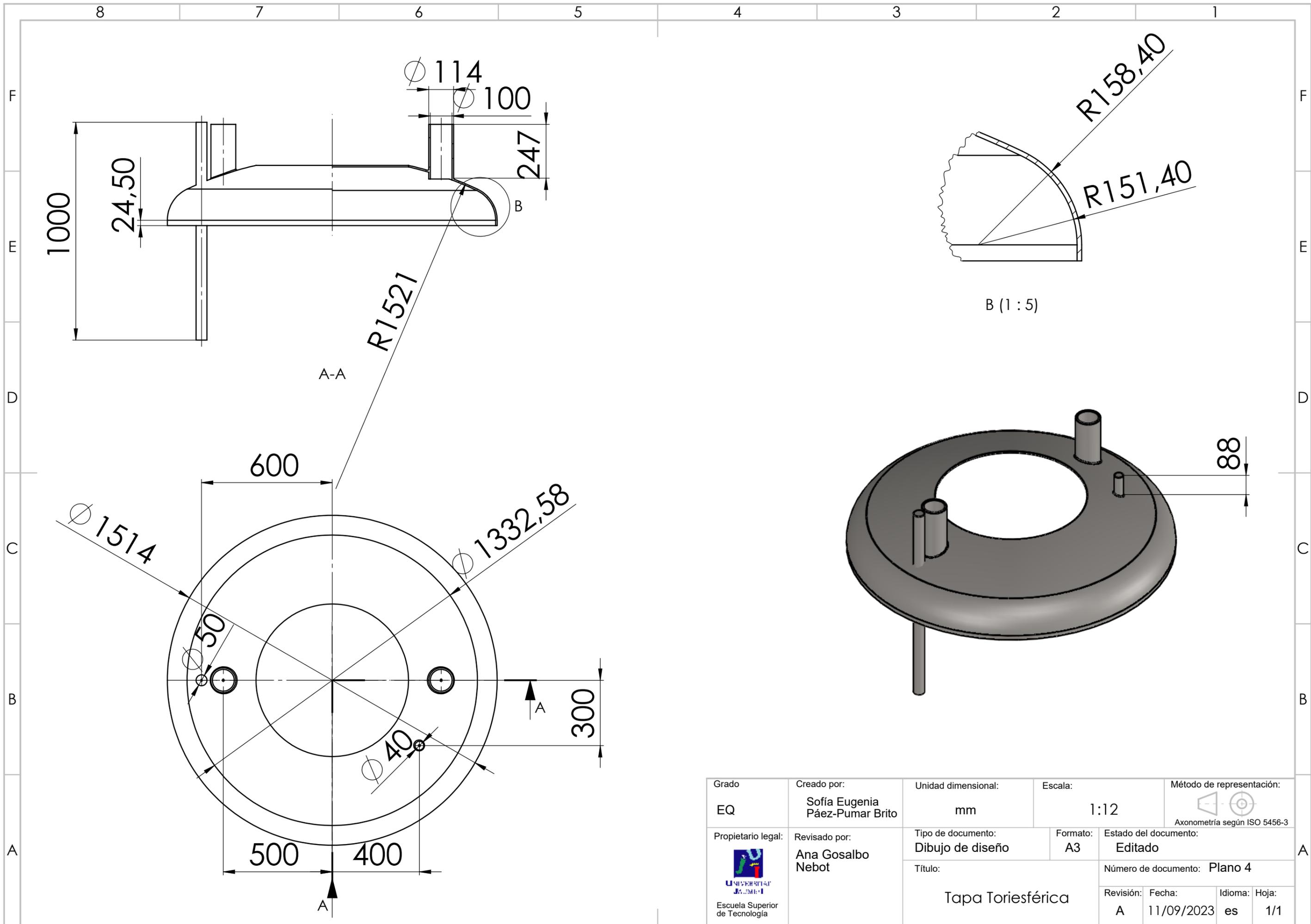
Grado EQ	Creado por: Sofia Eugenia Páez-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:20	Método de representación:  Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Gosalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Camisa de calentamiento	Número de documento: Plano 2	
		Revisión: A	Fecha: 08/09/2023	Idioma: Hoja: es 1/1



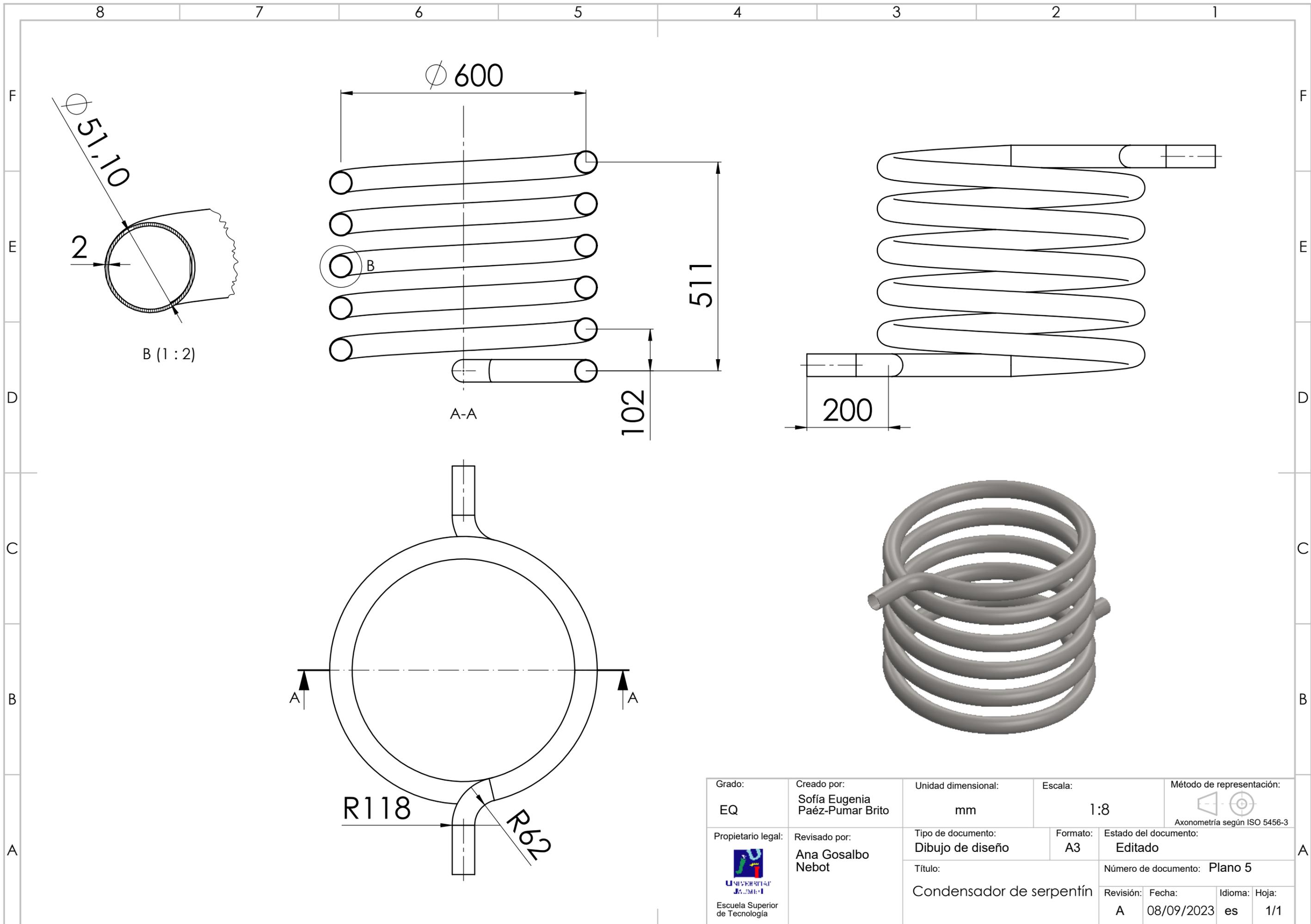
Dimensionado Hélices

Escala 1:10

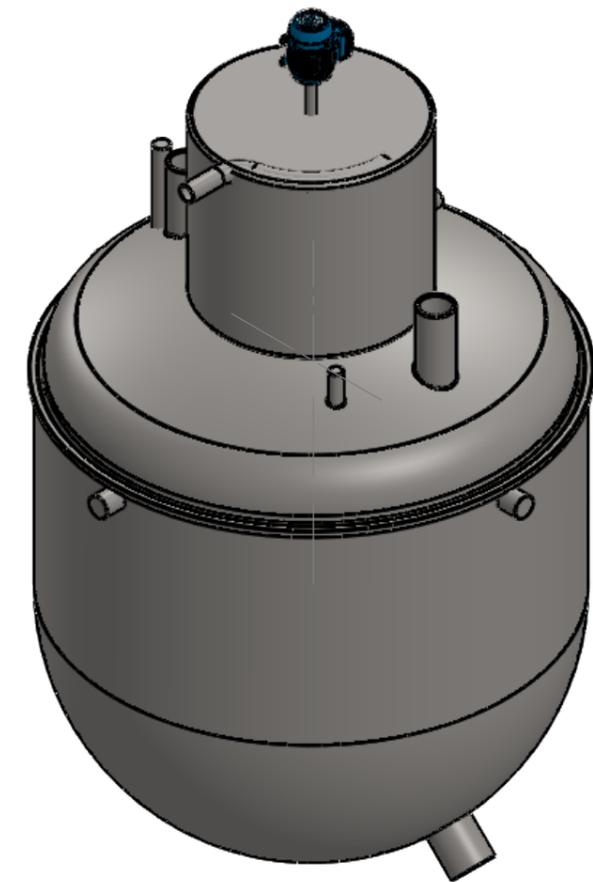
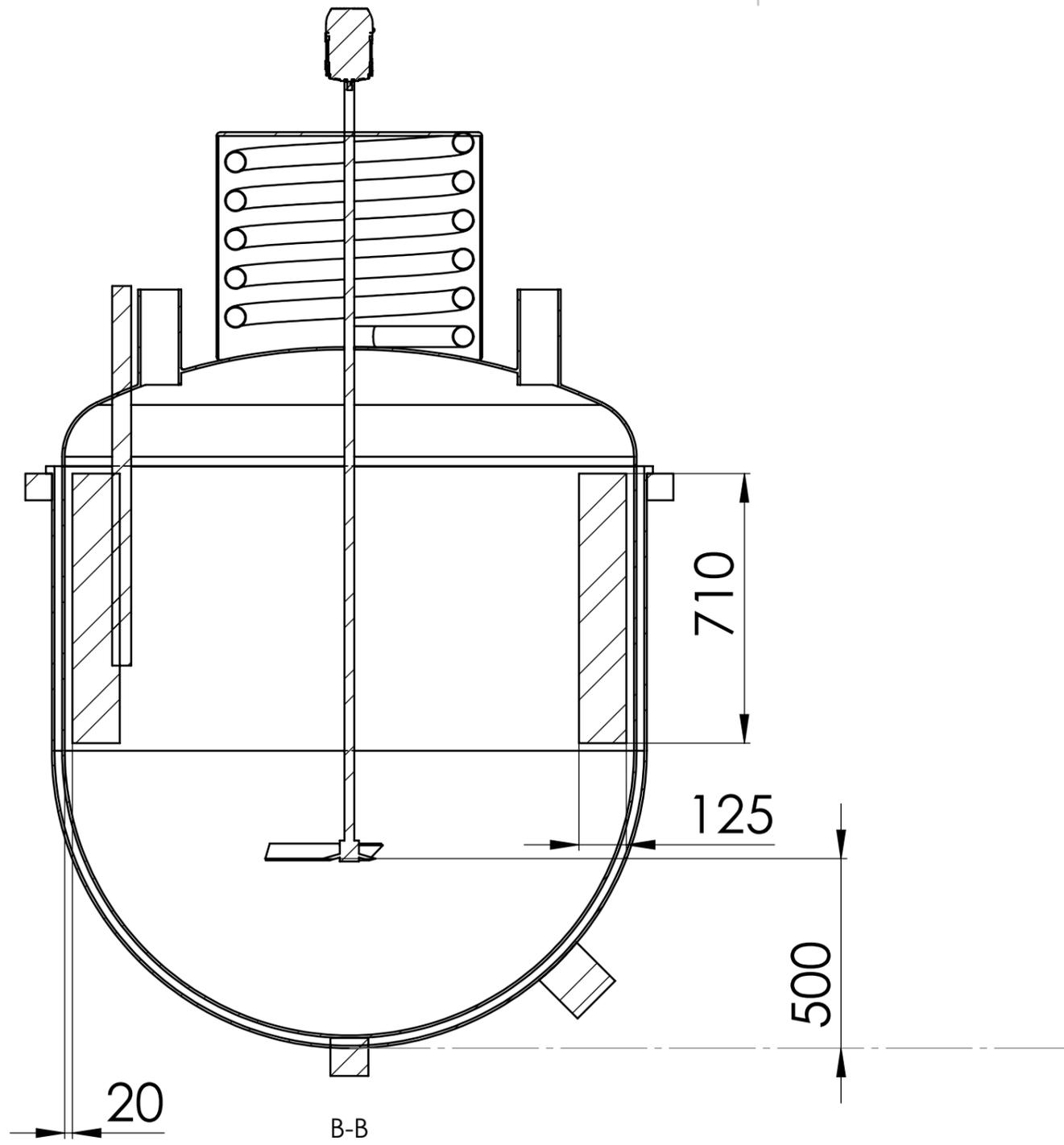
Grado EQ	Creado por: Sofía Eugenia Paéz-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:8	Método de representación:  Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Gosalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Turbina de palas Inclínadas		Número de documento: Plano 3
		Fecha: 08/09/2023		Idioma: Hoja: es 1/1



Grado EQ	Creado por: Sofía Eugenia Páez-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:12	Método de representación: Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Gosalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Tapa Toriesférica		Número de documento: Plano 4
		Revisión: A	Fecha: 11/09/2023	Idioma: Hoja: es 1/1



Grado: EQ	Creado por: Sofía Eugenia Paéz-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:8	Método de representación:  Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Gosalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Condensador de serpentín		Número de documento: Plano 5
		Revisión: A	Fecha: 08/09/2023	Idioma: Hoja: es 1/1



Grado EQ	Creado por: Sofia Eugenia Páez-Pumar Brito	Unidad dimensional: mm	Escala: 1:15	Método de representación:  Axonometría según ISO 5456-3
Propietario legal:  Escuela Superior de Tecnología	Revisado por: Ana Golzalbo Nebot	Tipo de documento: Dibujo de diseño	Formato: A3	Estado del documento: Editado
		Título: Reactor Discontinuo de Tanque Agitado	Número de documento: Plano 6	
		Revisión: A	Fecha: 08/09/2023	Idioma: Hoja: es 1/1

5. PLIEGO DE CONDICIONES

ÍNDICE

1.	DISPOSICIONES GENERALES.	4
1.1	Objetivo del pliego de condiciones	4
1.2	Contrato de obra	4
2.	DISPOSICIONES FACULTATIVAS	6
2.1	Definición, atribuciones y obligaciones de los agentes intervinientes	6
2.1.1	Promotor:	6
2.1.2	Proyectista:	7
2.1.3	El constructor:.....	7
2.1.4	El director de obra:	8
2.1.5	Director de la ejecución de la obra:	9
2.1.6	Las entidades y los laboratorios de control de calidad de la edificación:.....	10
2.1.7	Los suministradores de productos	11
2.1.8	Los propietarios y los usuarios	12
3.	DISPOSICIONES ECONÓMICAS	13
3.1	Contrato de obra	13
3.2	Criterio general	14
3.3	Fianzas	14

3.3.1	Ejecución de trabajos con cargo a la fianza.....	14
3.3.2	Devolución de las fianzas	14
3.3.3	Devolución de la fianza en el caso de efectuarse recepciones parciales	15
3.4	Precios	15
3.4.1	Precio básico	15
3.4.2	Presupuesto de Ejecución del Material (PEM).....	15
3.4.3	Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC)	16
3.4.4	Presupuesto total.....	16
3.4.5	Reclamación de aumento de precios	16
3.4.6	Formas tradicionales de medir o de aplicar los precios.....	16
3.4.7	Revisión de los precios contratados.....	16
3.4.8	Acopio de materiales	17
3.5	Valoración y abono de los trabajos.....	17
3.5.1	Forma y plazos de abono de las obras	17
3.5.2	Relaciones valoradas y certificaciones	18
3.6	Indemnizaciones Mutuas	19
3.6.1	Indemnización por retraso del plazo de terminación de las obras	19
3.6.2	Demora de los pagos por parte del promotor	19
3.7	Plazos de ejecución.....	19

3.8	Liquidación económica de las obras.....	19
3.9	Liquidación final de la obra.....	20
4.	DISPOSICIONES LEGALES.....	21
4.1	Reconocimiento de marcas registrada.....	21
4.2	Derechos de autor.....	21
5.	DISPOSICIONES TÉCNICAS DE LOS EQUIPOS.....	22
5.1	Especificaciones para el motor del sistema de agitación.....	22
5.2	Especificaciones para los materiales de acero.....	24
5.3	Especificaciones de la soldadura.....	25
5.4	Especificaciones para la instalación de la maquinaria.....	26

1. DISPOSICIONES GENERALES.

1.1 Objetivo del pliego de condiciones

El pliego de condiciones del proyecto es un documento de vital importancia para la implementación práctica del proyecto desde la perspectiva legal y contractual. Su objetivo principal es establecer las normas que regulan los derechos, responsabilidades, obligaciones y garantías mutuas entre el promotor del proyecto y el contratista encargado de llevarlo a cabo. Este documento es un componente de suma importancia del contrato que ambas partes suscriben. Proporciona pautas claras sobre cómo llevar a cabo los trabajos y ayuda a evitar disputas innecesarias y que incrementan el coste del proyecto al facilitar la toma rápida y eficaz de las decisiones.

1.2 Contrato de obra

El contrato de obra en el ámbito de la Ingeniería es el acuerdo legal existente entre dos partes, el promotor o el cliente y el contratista. En este documento se exponen los términos y condiciones para llevar a cabo las labores de construcción, renovación, o ampliación, relacionadas con el proyecto.

A su vez, el contrato de obra establece los derechos, obligaciones y las responsabilidades de cada una de las partes. Además, se establecen las disposiciones relacionadas con las garantías, seguros, resolución de disputas y otros aspectos legales que pueden surgir durante la ejecución del proyecto.

La documentación que debe contener el contrato de obra y su jerarquía de prelación se describe a continuación:

1. Condiciones fijadas en el propio documento de contrato de obra.
2. El pliego de condiciones.

3. La documentación del proyecto (memoria, anexos, planos, mediciones y presupuestos).

Esta jerarquía se establece para garantizar una ejecución coherente y precisa de la obra, evitando posibles desacuerdos y asegurando que todas las obligaciones financieras y técnicas para ambas partes sean claras.

2. DISPOSICIONES FACULTATIVAS

2.1 Definición, atribuciones y obligaciones de los agentes intervinientes

En España las atribuciones de los distintos agentes que intervienen en la edificación están regulada por la Ley 38/1999, de 5 de noviembre de Ordenación de la Edificación (LOE).

La asignación establecida por la LOE en materia de responsabilidades y atribuciones específicas a cada agente de la edificación se describe a continuación:

2.1.1 Promotor:

El promotor de una obra es la persona, entidad o empresa que impulsa y finanza, con recursos propios o ajenos el proyecto de edificación. Se encarga de concebir la idea inicial de la obra y tomar la decisión de llevarla a cabo. Además, debe asumir la responsabilidad de coordinar y gestionar todas las actividades necesarias para llevar a cabo el proyecto de forma exitosa.

Las principales obligaciones del promotor de un proyecto según la Ley de Ordenación de la Edificación son las siguientes:

- a) Ostentar sobre el solar la titularidad de un derecho que le faculte para construir en él.
- b) Facilitar la documentación e información previa necesaria para la redacción del proyecto, así como autorizar al director de obra las posteriores modificaciones de este.
- c) Gestionar y obtener las respectivas licencias y autorizaciones administrativas, así como suscribir el acta de recepción de la obra.
- d) Suscribir los seguros previstos en el artículo 19 de la LOE.
- e) Entregar al adquirente, en su caso, la documentación de obra ejecutada, o cualquier otro documento exigible por las Administraciones competentes.

En este caso el promotor del proyecto sería la comisión académica del título, quienes han solicitado la elaboración del Trabajo Final de Grado.

2.1.2 Proyectista:

El proyectista es el profesional designado por el promotor para redactar el proyecto siguiendo las regulaciones técnicas y urbanísticas aplicables.

Las principales obligaciones del proyectista se describen a continuación:

- a) Estar en posesión de la titulación académica y profesional habilitante de arquitecto, arquitecto técnico, ingeniero o ingeniero técnico, según corresponda, y cumplir las condiciones exigibles para el ejercicio de la profesión. En caso de personas jurídicas, designar al técnico redactor del proyecto que tenga la titulación profesional habilitante.
- b) Redactar el proyecto con sujeción a la normativa vigente y a lo que se haya establecido en el contrato y entregarlo, con los visados que en su caso fueran preceptivos.
- c) Acordar, en su caso, con el promotor la contratación de colaboraciones parciales.

2.1.3 El constructor:

El constructor es la persona o entidad que, a través de un contrato con el promotor, se compromete a llevar a cabo, utilizando recursos humanos y materiales propios o externos, la construcción total o parcial de una obra, siguiendo las especificaciones del proyecto y contrato.

Las obligaciones del constructor son las siguientes:

- a) Ejecutar la obra con sujeción al proyecto, a la legislación aplicable y a las instrucciones del director de obra y del director de la ejecución de la obra, a fin de alcanzar la calidad exigida en el proyecto.
- b) Tener la titulación o capacitación profesional que habilita para el cumplimiento de las condiciones exigibles para actuar como constructor.
- c) Designar al jefe de obra que asumirá la representación técnica del constructor en la obra y que por su titulación o experiencia deberá tener la capacitación adecuada de acuerdo con las características y la complejidad de la obra.
- d) Asignar a la obra los medios humanos y materiales que su importancia requiera.
- e) Formalizar las subcontrataciones de determinadas partes o instalaciones de la obra dentro de los límites establecidos en el contrato.
- f) Firmar el acta de replanteo o de comienzo y el acta de recepción de la obra.
- g) Facilitar al director de obra los datos necesarios para la elaboración de la documentación de la obra ejecutada.
- h) Suscribir las garantías previstas en el artículo 19.

2.1.4 El director de obra:

El director de obra es una persona que forma parte del equipo de dirección facultativa y se encarga de supervisar el progreso de la construcción en términos técnicos, estéticos, urbanísticos y medioambientales. Su responsabilidad es asegurar que la obra se desarrolle de acuerdo con el proyecto definido, la licencia de construcción, las autorizaciones requeridas y las condiciones establecidas en el contrato, con el objetivo de garantizar que cumple con el propósito previsto.

Las obligaciones del director de obra son las siguientes:

- a) Estar en posesión de la titulación académica y profesional habilitante de arquitecto, arquitecto técnico, ingeniero o ingeniero técnico, según corresponda y cumplir las

- condiciones exigibles para el ejercicio de la profesión. En caso de personas jurídicas, designar al técnico director de obra que tenga la titulación profesional habilitante.
- b) Verificar el replanteo y la adecuación de la cimentación y de la estructura proyectadas a las características geotécnicas del terreno.
 - c) Resolver las contingencias que se produzcan en la obra y consignar en el Libro de Órdenes y Asistencias las instrucciones precisas para la correcta interpretación del proyecto.
 - d) Elaborar, el requerimiento del promotor o con su conformidad, eventuales modificaciones del proyecto, que vengan exigidas por la marcha de la obra siempre que las mismas se adapten a las disposiciones normativas contempladas y observadas en la redacción del proyecto.
 - e) Suscribir el acta de replanteo o de comienzo de obra y el certificado final de obra, así como conformar las certificaciones parciales y la liquidación final de las unidades de obra ejecutadas, con los visados que en su caso fueran preceptivos.
 - f) Elaborar y suscribir la documentación de la obra ejecutada para entregarla al promotor, con los visados que en su caso fueran preceptivos.

2.1.5 Director de la ejecución de la obra:

El director de la ejecución de la obra es una persona que, dentro del equipo de dirección facultativa, desempeña el rol de supervisar técnicamente la realización física de la construcción y controlar tanto cualitativa como cuantitativamente la construcción y la calidad de lo construido.

Las obligaciones del director de la ejecución de la obra son las siguientes:

- a) Estar en posesión de la titulación académica y profesional habilitante y cumplir las condiciones exigibles para el ejercicio de la profesión. En caso de personas jurídicas, designar al técnico director de la ejecución de la obra que tenga la titulación profesional.
-

- b) Verificar la recepción en obra de los productos de construcción, ordenando la realización de ensayos y pruebas precisas.
- c) Dirigir la ejecución material de la obra comprobando los replanteos, los materiales, la correcta ejecución y disposición de los elementos constructivos y de las instalaciones, de acuerdo con el proyecto y con las instrucciones del director de obra.
- d) Consignar en el Libro de Órdenes y Asistencias las instrucciones precisas.
- e) Suscribir el acta de replanteo o de comienzo de obra y el certificado final de obra, así como elaborar y suscribir las certificaciones parciales y la liquidación final de las unidades de obra ejecutadas.
- f) Colaborar con los restantes agentes en la elaboración de la documentación de la obra ejecutada, aportando los resultados del control realizado.

2.1.6 Las entidades y los laboratorios de control de calidad de la edificación:

Las entidades de control de calidad de la edificación son organizaciones capacitadas para brindar asistencia técnica en la verificación de la calidad del proyecto, los materiales y la ejecución de la obra y sus instalaciones, de acuerdo con el proyecto y la norma aplicable. Para operar en todo el territorio español, solo se requerirá presentar una declaración responsable ante el organismo competente de la Comunidad Autónoma donde tengan su domicilio social o profesional, declarando el cumplimiento de los requisitos técnicos establecidos reglamentariamente.

Los laboratorios de ensayos para el control de calidad de la edificación son entidades capacitadas para ofrecer asistencia técnica mediante la realización de pruebas o ensayos de servicio de los materiales, sistemas o instalaciones de una obra de edificación. Para operar en todo el territorio español, se requerirá presentar una declaración responsable por cada uno de sus establecimientos físicos desde los cuales brinden sus servicios, declarando el cumplimiento de los requisitos técnicos establecidos reglamentariamente, ante los organismos competentes de la correspondiente Comunidad Autónoma.

Son obligaciones de las entidades y los laboratorios de control de calidad de la edificación las siguientes:

- a) Prestar asistencia técnica y entregar los resultados de su actividad al agente autor del encargo y, en todo caso, al responsable técnico de la recepción y aceptación de los resultados de la asistencia, ya sea el director de la ejecución de las obras, o el agente que corresponda en las fases de proyecto, la ejecución de las obras y la vida útil del edificio.
- b) Justificar que tienen implantado un sistema de gestión de la calidad que define los procedimientos y métodos de ensayo o inspección que utiliza en su actividad y que cuentan con capacidad, personal, medios y equipos adecuados.

2.1.7 Los suministradores de productos

Los suministradores de productos son aquellos que se encargan de fabricar, almacenar, importar o vender productos de construcción.

Las obligaciones de los suministradores de productos son:

- a) Realizar las entregas de los productos de acuerdo con las especificaciones del pedido, respondiendo de su origen, identidad y calidad, así como del cumplimiento de las exigencias que, en su caso, establezca la normativa técnica aplicable.
- b) Facilitar, cuando proceda, las instrucciones de uso y mantenimiento de los productos suministrados, así como las garantías de calidad correspondientes, para su inclusión en la documentación de la obra ejecutada.

2.1.8 Los propietarios y los usuarios

a) Son obligaciones de los propietarios conservar en buen estado la edificación mediante un adecuado uso y mantenimiento, así como recibir, conservar y transmitir la documentación de la obra ejecutada y los seguros y garantías con que ésta cuenta.

b) Son obligaciones de los usuarios, sean o no propietarios, la utilización adecuada de los edificios o de parte de estos de conformidad con las instrucciones de uso y mantenimiento, contenidas en la documentación de la obra ejecutada.

3. DISPOSICIONES ECONÓMICAS

Las disposiciones económicas de un proyecto son las medidas y aspectos relacionados con el ámbito financiero y económico del proyecto. Incluyen aspectos como la estimación de costos, presupuesto, financiación, inversiones, entre otros.

3.1 Contrato de obra

Un contrato de obra es un acuerdo legal entre dos partes, generalmente un promotor (cliente) y un contratista (constructor), en el que se establecen los términos y condiciones para llevar a cabo la ejecución de una obra o proyecto específico.

El contrato de obra debe anticipar las posibles interpretaciones y discrepancias que puedan surgir entre las partes, además de asegurar que la Dirección Facultativa pueda efectivamente coordinar, dirigir y controlar la obra. Por lo tanto, es recomendable que se especifiquen y aclaren de manera precisa los siguientes puntos como mínimo:

- Documentos para aportar por el Contratista.
- Condiciones de ocupación del solar e inicio de las obras.
- Determinación de los gastos de enganches y consumos.
- Responsabilidades y obligaciones del Contratista: Legislación laboral.
- Responsabilidades y obligaciones del Promotor.
- Presupuesto del Contratista.
- Revisión de precios (en su caso).
- Forma de pago: Certificaciones.
- Plazos de ejecución: Planning.
- Retraso de la obra: Penalizaciones.
- Recepción de la obra: Provisional y definitiva.
- Litigio entre las partes.

3.2 Criterio general

Todos los agentes involucrados en el proceso de construcción, tal y como se definen en la Ley 38/1999 de Ordenación de la Edificación (LOE), tienen el derecho de recibir de manera oportuna las cantidades adeudadas por su desempeño adecuado, de acuerdo con las condiciones establecidas en el contrato. Además, se puede exigir entre ellos garantías adecuadas para asegurar el cumplimiento diligente de sus obligaciones de pago.

3.3 Fianzas

El contratista presentará una fianza con arreglo al procedimiento que se estipule en el contrato de obra:

3.3.1 *Ejecución de trabajos con cargo a la fianza*

Si el contratista se negase a hacer por su cuenta los trabajos precisos para ultimar la obra en las condiciones contratadas, el director de obra, en nombre y representación del Promotor, los ordenará ejecutar a un tercero, o podrá realizarlos directamente por administración, abonando su importe con la fianza depositada, sin perjuicio de las acciones a que tenga derecho el Promotor, en el caso de que el importe de la fianza no bastase para cubrir el importe de los gastos efectuados en las unidades de obra que no fuesen de recibo.

3.3.2 *Devolución de las fianzas*

La fianza recibida será devuelta al Contratista en un plazo establecido en el contrato de obra, una vez firmada el Acta de Recepción Definitiva de la obra. El promotor podrá exigir que el contratista le acredite la liquidación y finiquito de sus deudas causadas por la ejecución de la obra, tales como salarios, suministros y subcontratos.

3.3.3 Devolución de la fianza en el caso de efectuarse recepciones parciales

Si el promotor, con la conformidad del director de obra, accediera a hacer recepciones parciales, tendrá derecho el contratista a que se le devuelva la parte proporcional de la fianza.

3.4 Precios

El objetivo principal de la elaboración del presupuesto es anticipar el coste del proceso de construir la obra. Se descompondrá el presupuesto en unidades de obra, componente menor que se contrata y certifica por separado, y a partir de esos precios, se calcula el presupuesto.

3.4.1 Precio básico

Es el precio por unidad (Ud., m, kg, etc.) de un material dispuesto a pie de obra, (incluido su transporte a obra, descarga en obra, embalajes, etc.) o el precio por hora de la maquinaria y de la mano de obra.

3.4.2 Presupuesto de Ejecución del Material (PEM)

Es el resultado de la suma de los precios unitarios de las diferentes unidades de obra que la componen.

Se denomina Presupuesto de Ejecución Material al resultado obtenido por la suma de los productos del número de cada unidad de obra por su precio unitario y de las partidas alzadas. Es decir, el coste de la obra sin incluir los gastos generales, el beneficio industrial y el impuesto sobre el valor añadido.

3.4.3 Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC)

El Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC) es el resultado de la suma del PEM, los gastos generales (20%) y el beneficio industrial (6%).

3.4.4 Presupuesto total

El Presupuesto Total es el resultado de la suma del PEC, el IVA (21%) y los honorarios por la redacción del proyecto (3,5%).

3.4.5 Reclamación de aumento de precios

Si el contratista, antes de la firma del contrato de obra, no hubiese hecho la reclamación u observación oportuna, no podrá bajo ningún pretexto de error u omisión reclamar aumento de los precios fijados en el cuadro correspondiente del presupuesto que sirva de base para la ejecución de las obras.

3.4.6 Formas tradicionales de medir o de aplicar los precios

En ningún caso podrá alegar el Contratista los usos y costumbres locales respecto de la aplicación de los precios o de la forma de medir las unidades de obra ejecutadas. Se estará a lo previsto en el Presupuesto y en el criterio de medición en obra recogido en el Pliego.

3.4.7 Revisión de los precios contratados

El presupuesto presentado por el contratista se entiende que es cerrado, por lo que no se aplicará revisión de precios.

Solo se procederá a efectuar revisión de precios cuando haya quedado explícitamente determinado en el contrato de obra entre el promotor y el contratista.

3.4.8 Acopio de materiales

El contratista queda obligado a ejecutar los acopios de materiales o aparatos de obra que el promotor ordene por escrito. Los materiales acopiados, una vez abonados por el propietario, son de la exclusiva propiedad de este, siendo el contratista responsable de su guarda y conservación.

3.5 Valoración y abono de los trabajos

3.5.1 Forma y plazos de abono de las obras

Se realizará por certificaciones de obra y se recogerán las condiciones en el contrato de obra establecido entre las partes que intervienen (promotor y contratista) que, en definitiva, es el que tiene validez.

Los pagos se efectuarán por el promotor en los plazos previamente establecidos en el contrato de obra, y su importe corresponderá precisamente al de las certificaciones de la obra conformadas por el director de ejecución de la obra, en virtud de las cuales se verifican aquellos.

El director de ejecución de la obra realizará, en la forma y condiciones que establezca el criterio de medición en obra incorporado en las Prescripciones en cuanto a la ejecución por unidad de obra, la medición de las unidades de obra ejecutadas durante el periodo de tiempo anterior, pudiendo el contratista presenciar la realización de tales mediciones.

Para las obras o partes de obra que, por sus dimensiones y características, hayan de quedar posterior y definitivamente ocultas, el contratista está obligado a avisar al director de ejecución de la Obra con la suficiente antelación, a fin de que este pueda realizar las correspondientes mediciones y toma de datos, levantando los planos que las definan, cuya conformidad suscribirá el Contratista.

A falta de aviso anticipado, cuya existencia corresponde probar al contratista, queda éste obligado a aceptar las decisiones del promotor sobre el particular.

3.5.2 Relaciones valoradas y certificaciones

En los plazos fijados en el contrato de obra entre el promotor y el contratista, este último formulará una relación valorada de las obras ejecutadas durante las fechas previstas, según la medición practicada por el director de ejecución de la obra.

Las certificaciones de obra serán el resultado de aplicar, a la cantidad de obra realmente ejecutada, los precios contratados de las unidades de obra. Sin embargo, los excesos de obra realizada en unidades, tales como excavaciones y hormigones, que sean imputables al Contratista, no serán objeto de certificación alguna.

Los pagos se efectuarán por el promotor en los plazos previamente establecidos, y su importe corresponderá al de las certificaciones de obra, conformadas por la Dirección Facultativa. Tendrán el carácter de documento y entregas a buena cuenta, sujetas a las rectificaciones y variaciones que se deriven de la Liquidación Final, no suponiendo tampoco dichas certificaciones parciales la aceptación, la aprobación, ni la recepción de las obras que comprenden.

Las relaciones valoradas contendrán solamente la obra ejecutada en el plazo a que la valoración se refiere. Si la Dirección Facultativa lo exigiera, las certificaciones se extenderán a origen.

3.6 Indemnizaciones Mutuas

3.6.1 Indemnización por retraso del plazo de terminación de las obras

Si, por causas imputables al Contratista, las obras sufrieran un retraso en su finalización con relación al plazo de ejecución previsto, el Promotor podrá imponer al Contratista, con cargo a la última certificación, las penalizaciones establecidas en el contrato, que nunca serán inferiores al perjuicio que pudiera causar el retraso de la obra.

3.6.2 Demora de los pagos por parte del promotor

Se regulará en el contrato de obra las condiciones a cumplir por parte de ambos.

3.7 Plazos de ejecución

En el contrato de obra deberán figurar los plazos de ejecución y entregas, tanto totales como parciales. Además, será conveniente adjuntar al respectivo contrato un “*Planning*” de la ejecución de la obra donde figuren de forma gráfica y detallada la duración de las distintas partidas de obra que deberán conformar las partes contratantes.

3.8 Liquidación económica de las obras

Simultáneamente al libramiento de la última certificación, se procederá al otorgamiento del Acta de Liquidación Económica de las obras, que deberán firmar el promotor y el contratista. En este acto se dará por terminada la obra y se entregarán, en su caso, las llaves, los correspondientes boletines debidamente cumplimentados de acuerdo con la normativa vigente, así como los proyectos técnicos y permisos de las instalaciones contratadas.

Dicha Acta de Liquidación Económica servirá de Acta de Recepción Provisional de las obras, para lo cual será conformada por el promotor, el contratista, el director de obra y el

director de ejecución de la obra, quedando desde dicho momento la conservación y custodia de estas a cargo del promotor.

La citada recepción de las obras, provisional y definitiva, queda regulada según se describe en las disposiciones generales del presente pliego.

3.9 Liquidación final de la obra

Entre el promotor y contratista, la liquidación de la obra deberá hacerse de acuerdo con las certificaciones conformadas por la dirección de obra. Si la liquidación se realizara sin el visto bueno de la dirección de obra, esta solo mediará en caso de desavenencia o desacuerdo, en el recurso ante los tribunales.

4. DISPOSICIONES LEGALES

4.1 Reconocimiento de marcas registrada

El autor de este proyecto, así como su promotor, reconocen las marcas registradas que han aparecido a lo largo del desarrollo y ejecución, además de los derechos de autor recogidos en la bibliografía consultada y citada en el mismo.

4.2 Derechos de autor

Los derechos de autor de este proyecto serán los estipulados por la legislación y reglamentación vigente en el momento del comienzo del proyecto, a excepción de posibles correcciones legales resultantes de los recursos legales que se hayan interpuesto contra las mencionadas leyes y reglamentos.

5. DISPOSICIONES TÉCNICAS DE LOS EQUIPOS

El objeto del presente documento, denominado Pliego de Condiciones Técnicas Particulares, es especificar los requisitos técnicos básicos del proyecto “Diseño de un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado para la síntesis del Butirato de Etilo”.

En este documento se proporcionan una serie de instrucciones para ejecutar la obra, en el cual se detallan, como mínimo las condiciones técnicas relacionadas con los materiales y la maquinaria, así como, los detalles de ejecución.

Las calidades de los materiales y de los equipos serán acordes con las normas correspondientes que estén publicadas, las cuales complementarán esta sección del pliego.

Se dará preferencia a los materiales que cuenten con un Documento de Idoneidad Técnica emitido por organismos técnicos reconocidos, el cual respalde sus calidades.

El constructor o contratista tienen la obligación de comunicar a los suministradores de los productos las calidades requeridas para los diferentes materiales. Se recomienda solicitar la aprobación del director de ejecución de la obra y de las entidades y laboratorios encargados del control de calidad antes de utilizar dichos materiales.

5.1 Especificaciones para el motor del sistema de agitación

Para garantizar la seguridad y el correcto funcionamiento de los motores, se deben seguir las siguientes pautas:

1. Los motores deben instalarse de manera que sea imposible acceder a sus partes móviles, evitando así posibles accidentes. Además, es fundamental que los motores no entren en contacto con materiales fácilmente inflamables, y su ubicación debe ser tal que no pueda provocar su ignición.

2. Los conductores de conexión que suministran energía a un solo motor deben tener una capacidad de corriente dimensionada al 125 % de la corriente nominal a plena carga del motor. En el caso de conductores que alimentan a varios motores, la capacidad de corriente debe ser igual o superior a la suma del 125 % de la corriente nominal a plena carga del motor de mayor potencia, más la corriente nominal a plena carga de los demás motores.
3. Los motores deben contar con protección contra cortocircuitos y sobrecargas en todas sus fases. Es importante destacar que la protección contra sobrecargas debe ser capaz de cubrir el riesgo de falta de tensión en una de las fases en el caso de motores trifásicos.
4. Para evitar accidentes o daños al motor, es necesario protegerlos contra la falta de tensión mediante un dispositivo de corte automático de la alimentación. Esto es especialmente relevante cuando el restablecimiento de la tensión podría resultar en un arranque espontáneo del motor, de acuerdo con lo establecido en la norma UNE 20.460-4-45.
5. Los motores deben tener limitada la intensidad absorbida durante el arranque, especialmente cuando su uso pueda afectar negativamente a la instalación o causar perturbaciones inaceptables en el funcionamiento de otros equipos o sistemas.
6. La elección del número de polos del motor debe basarse en la velocidad de rotación requerida para la máquina accionada.
7. Los motores deben cumplir con las dimensiones, formas constructivas y asignación de potencia recomendadas por las normas europeas IEC, así como por las normas UNE, DIN y VDE. En particular, las normas UNE específicas para motores son la 20.107, 20.108, 20.111, 20.112, 20.113, 20.121, 20.122 y 20.324.
8. El diámetro y la longitud del eje, las dimensiones de las chavetas y la altura del eje sobre la base deben ajustarse a las recomendaciones establecidas por la norma IEC.

5.2 Especificaciones para los materiales de acero

Con el fin de garantizar la calidad y la integridad de los productos de acero, se deben tener en cuenta las siguientes consideraciones:

- **Condiciones de suministro:**
 - Los aceros deben ser transportados de manera segura para evitar deformaciones permanentes y daños superficiales. Los componentes deben ser protegidos en los puntos de sujeción durante el izado.
 - Los componentes prefabricados deben ser almacenados por encima del suelo y sin contacto directo con él. Se debe evitar la acumulación de agua y mantener los componentes limpios para prevenir deformaciones permanentes.
- **Recepción y control:**
 - Para productos planos de los tipos S235, S275 y S355 de grado JR, el estado de suministro queda a elección del fabricante, a menos que se acuerde lo contrario. Si se solicita inspección y ensayo, se deben especificar el tipo de inspección, ensayos y el documento correspondiente.
 - Para productos largos de los mismos tipos de grado, el estado de suministro también queda a elección del fabricante, a menos que se acuerde lo contrario. Se deben realizar ensayos para verificar las propiedades y características según la normativa aplicable.
- **Conservación, almacenamiento y manipulación:**
 - Si los materiales han sido almacenados por un período prolongado o en condiciones que puedan haberlos deteriorado, deben ser inspeccionados antes de su uso para asegurarse de que cumplen con las normas correspondientes.
 - En el caso de aceros resistentes a la corrosión atmosférica, puede ser necesario realizar un chorreo ligero antes de su uso para garantizar una superficie uniforme para la exposición a la intemperie.

- Los materiales deben ser almacenados según las instrucciones del fabricante, cuando estén disponibles.
- **Recomendaciones para su uso en obra:**
 - El material no debe ser utilizado si ha superado la vida útil especificada por el fabricante mientras estuvo en almacenamiento.
 - Es importante seguir estas pautas para asegurar la calidad y el rendimiento adecuado de los productos de acero utilizados en el proyecto.

5.3 Especificaciones de la soldadura

Antes de proceder a la soldadura, el director de obra deberá realizar un control para asegurar la correcta elección de electrodos y soldadores calificados. A continuación, se detallan los requisitos de soldadura que el constructor deberá cumplir y presentar en una memoria:

- Las uniones se realizarán utilizando el método de arco eléctrico.
- Los materiales de aportación utilizados en la soldadura deberán tener características mecánicas superiores a las del material base. Deberán cumplir con lo establecido en la norma UNE-EN ISO 14555:1999.
- Antes de soldar, se deberán limpiar los bordes de las juntas y asegurarse de que estén secos.
- Una vez finalizada la fabricación, se deberá verificar la fijación entre componentes que estén interconectados en interfaces de conexión múltiples. Esto se puede realizar utilizando plantillas dimensionales o mediante la fijación conjunta de los componentes.
- Los defectos no deben ser cubiertos por soldaduras posteriores. Deben ser eliminados en cada pasada antes de proceder a la siguiente.
- Las reparaciones de soldadura deben seguir una especificación de procedimiento de soldeo.

- Durante las correcciones de distorsiones de soldeo mediante la aplicación local de calor, se debe controlar la temperatura máxima del acero y el proceso de enfriamiento.
- Se prohíbe cualquier tipo de enfriamiento anormal o excesivamente rápido de las soldaduras. Se deberán tomar las precauciones necesarias para evitarlo.

Estas medidas son necesarias para garantizar la calidad y la integridad de las soldaduras realizadas, así como para prevenir posibles fallos o deformaciones.

5.4 Especificaciones para la instalación de la maquinaria

Todas las partes de la maquinaria que entran en contacto con los elementos a tratar deben estar fabricadas con material inalterable, con una superficie lisa y fácil de limpiar. Del mismo modo, el exterior de la maquinaria debe estar esmaltado o cubierto con un material inalterable, sin ángulos entrantes que dificulten una limpieza exhaustiva.

Los elementos móviles de la maquinaria deben contar con los dispositivos de protección necesarios para garantizar la seguridad del operador. Si una máquina, bajo condiciones de trabajo normales, no alcanza el rendimiento garantizado a pesar de contar con la fuerza de acondicionamiento adecuada y ser utilizada según las instrucciones, se debe informar al vendedor para que comunique las deficiencias y realice las modificaciones necesarias. Si estas deficiencias no se corrigen en un plazo de un mes, el vendedor se hará responsable de retirar la maquinaria y devolver el importe pagado o suministrar, a elección del cliente, otra máquina que funcione correctamente.

Los costos de transporte, embalaje, derechos de aduana, riesgos, seguros e impuestos hasta que la maquinaria llegue a su lugar de instalación correrán a cargo del vendedor. El montaje será responsabilidad del vendedor, pero el cliente deberá proporcionar las escaleras, la instalación eléctrica, las herramientas y los materiales de albañilería, carpintería y cerrajería

necesarios para el montaje, así como personal auxiliar para ayudar al especializado enviado por el proveedor.

El plazo de entrega acordado entre el cliente y el vendedor no podrá ser extendido, a menos que haya causas de fuerza mayor, como huelgas, cierres patronales, movilización militar, guerra o revolución. Si el retraso es atribuible al vendedor, el cliente tendrá derecho a un descuento del 1% por cada semana de retraso como compensación por los perjuicios sufridos.

Será responsabilidad del vendedor suministrar los equipos y herramientas necesarios para realizar las pruebas de las máquinas y llevar a cabo las verificaciones necesarias. Los gastos asociados a estas pruebas correrán a cargo del vendedor.

En cada máquina o conjunto de máquinas se establecerá una fecha de prueba con el fin de realizar la aceptación provisional, que tendrá una garantía mínima de un año, durante el cual su funcionamiento debe ser perfecto. La empresa proveedora se compromete a reemplazar, a su cargo, las piezas que presenten daños debido a una construcción o instalación defectuosa, así como a corregir, a su cargo, cualquier anomalía o irregularidad en el funcionamiento que impida su uso normal.

6. ESTADO DE MEDICIONES

ÍNDICE

1. ESTADO DE MEDICIONES.....	2
1.1 Partida 1: Elementos de acero inoxidable AISI 304.....	2
1.2 Partida 2: Sistema de agitación.....	3
1.3 Partida 3: Recubrimiento del reactor	4
1.4 Partida 4: Elementos adicionales del reactor	4
1.5 Partida 5: Soldadura.....	4

1. ESTADO DE MEDICIONES

En el contexto de un proyecto de ingeniería, el estado de mediciones es el proceso de evaluar y registrar las mediciones realizadas durante la ejecución del proyecto. Por tanto, implica una recolección de datos precisos y confiables, utilizando instrumentos de medición adecuados.

El objetivo principal del estado de mediciones es que el proyecto se esté desarrollando de acuerdo con los estándares establecidos y que los resultados sean consistentes con las expectativas.

Además, este documento se utiliza como punto de partida para elaborar el presupuesto del proyecto. Constará de una partida para los elementos de acero inoxidable, otra para el sistema de agitación y una última para las especificaciones de soldadura.

1.1 Partida 1: Elementos de acero inoxidable AISI 304

Los elementos de acero inoxidable en este proyecto son numerosos, ya que todo el reactor está hecho de este material, y, además, el condensador de serpentín también. Los materiales necesarios se describen a continuación:

En primer lugar, las medidas necesarias para construir la virola del tanque serán de 4713 de largo por 750 mm de ancho y para la virola del doble fondo 5090 de largo por 750 mm de ancho. Las placas de acero inoxidable estándar no cuentan con estas dimensiones tan específicas, por lo que se deberá comprar una chapa de 5000 de largo por 750 mm y otra de 6000 por 750 mm y se cortarán para que tengan las medidas adecuadas.

Por otro lado, el cabezal toriesférico y el fondo semiesférico serán diseñados a medida por una empresa que se dedica a la fabricación de fondos y tapas para depósitos.

Además, el tanque cuenta con cuatro deflectores que se realizan con chapas de acero inoxidable de 800 mm por 200 mm, para cumplir con las medidas de 710 mm de largo y 125 mm de ancho que tienen los deflectores.

Finalmente, se debe incluir la entrada y la salida del tanque y el serpentín.

En la *tabla 6.1* se muestran todos los valores necesarios.

Tabla 6.1. Elementos de acero inoxidable. Fuente: elaboración propia.

Elementos de acero inoxidable AISI 304	Unidades
Chapa de acero inoxidable AISI 304 5000x750x7 mm	1
Chapa de acero inoxidable AISI 304 6000x750x7 mm	1
Chapa de acero inoxidable AISI 304 710x125x7 mm	4
Fondo semiesférico Ø1500x7 mm de espesor	1
Fondo semiesférico Ø1620x7mm de espesor	1
Cabezal toriesférico	1
Entradas de reactantes Ø100 mm	2
Salida de reactantes Ø100 mm	1
Entradas de la camisa Ø120 mm	4
Salida de la camisa Ø240 mm	1
Serpentín	1

1.2 Partida 2: Sistema de agitación

El sistema de agitación será hecho a medida por una empresa que se dedica a ello.

En la *tabla 6.2* se muestran todos los detalles necesarios para el sistema de agitación:

Tabla 6.2. Elementos del sistema de agitación. Fuente: elaboración propia.

Elementos del sistema de agitación	Unidades
Sistema de agitación completo	1

1.3 Partida 3: Recubrimiento del reactor

El reactor estará equipado con una capa de aislamiento de lana de vidrio de 10 centímetros de espesor, así como una cubierta externa de aluminio para proporcionar una protección adicional contra el calor y el desgaste.

1.4 Partida 4: Elementos adicionales del reactor

Cabe destacar que el reactor contará con un conjunto de avanzados medidores de presión, temperatura y pH, que permitirán un monitoreo preciso y continuo de las condiciones dentro del reactor, garantizado así un control óptimo del proceso. Estos dispositivos permiten recopilar datos que serán cruciales para la seguridad y el funcionamiento eficiente del reactor.

1.5 Partida 5: Soldadura

La estructura del tanque se construye soldando dos chapas con el fondo conformado. Por tanto, se debe contratar un servicio de soldadura a jornada completa. En la *tabla 6.3* se muestra el servicio:

Tabla 6.3. Soldadura. Fuente: elaboración propia.

Soldadura	Horas de servicio
Unión de solape con doble filete completo	8

7. PRESUPUESTO

ÍNDICE

1. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN DE MATERIAL (PEM).....	2
2. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (PEC).....	5
3. PRESUPUESTO TOTAL	6
4. RESUMEN DEL PRESUPUESTO.....	7

1. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN DE MATERIAL (PEM)

El Presupuesto de Ejecución de Material representa la estimación de los costes asociados a los materiales necesarios para llevar a cabo la ejecución de una obra o proyecto específico.

El coste del reactor se estima haciendo uso del capítulo 7 del libro “*Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design*” (R.K. Sinnott, 1983). Para ello en primera estancia se utiliza la *ecuación 7.1*, que establece una correlación para un reactor de tanque agitado con su respectiva camisa de calentamiento y serpentín.

$$C_e(\text{€}) = a + b \cdot S^n \quad (7.1)$$

Donde:

C_e : coste del equipo comprado en U.S.A. Bases de la costa del Golfo, enero de 2010.

a, b: constantes de coste.

S: tamaño del parámetro (m^3)

n: exponente para el tipo de equipo.

En *figura 7.1* se muestran los datos utilizados para hacer esta estimación:

Reactors	Units for size,S		a	b	n	
Jacketed, agitated	volume, m^3	0.5	100	61,500	32,500	0.8
Jacketed, agitated, glass lined	volume, m^3	0.5	25	12,800	88,200	0.4
Tanks						
Floating roof	capacity, m^3	100	10,000	113,000	3250	0.65
Cone roof	capacity, m^3	10	4000	5800	1600	0.7

Figura. 7.1. Índices para el coste de los equipos. Fuente: elaboración propia.

Sustituyendo en la *ecuación 7.1*:

$$C_e(\text{€}) = 61500 + 32500 \cdot 2,21^{0,8} = 122.791,07 \text{ €} \quad (7.1)$$

Los factores dados en la *figura 7.1* son para plantas construidas con acero de carbono. Por ello es necesario introducir un factor para los costes del material. En la *figura 7.2* se muestran los distintos valores para cada material.

Material	f_m
Carbon steel	1.0
Aluminum and bronze	1.07
Cast steel	1.1
304 stainless steel	1.3
316 stainless steel	1.3
321 stainless steel	1.5
Hastelloy C	1.55
Monel	1.65
Nickel and Inconel	1.7

Figura.7.2. Valores para cada material. Fuente: elaboración propia.

Como el material que se utiliza para la construcción del reactor es el acero inoxidable AISI 304, el factor que se utilizará será de 1,3. Por tanto:

$$C(\text{€}) = 122.791,07 \cdot 1,3 = 159.628,39 \text{ €} \quad (7.1)$$

Finalmente, será necesario realizar un ajuste del precio, ya que el coste que se ha estimado es para el año 2010. En la *figura 7.3* se pueden observar los distintos índices en función del año.

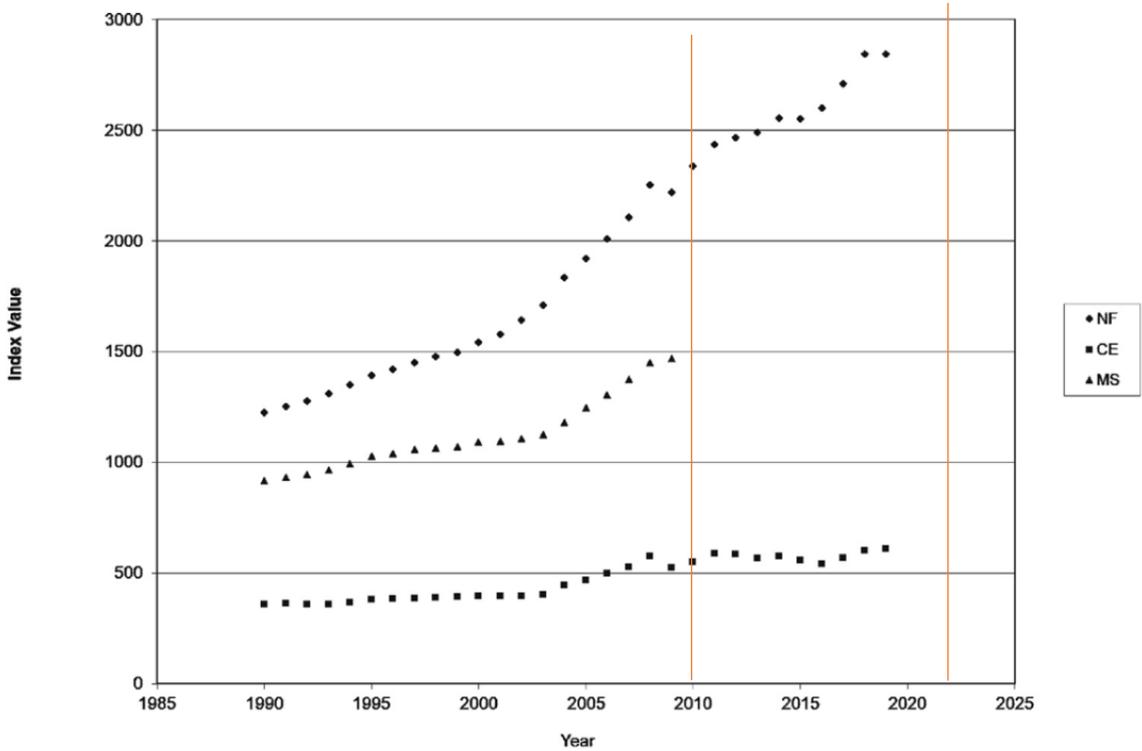


Figura.7.3. Índices en función del año. Fuente: elaboración propia.

Para estudiar el coste actual del equipo se utiliza el índice NF ya que es el que lidera los datos de la gráfica, obteniéndose un valor de 2400 para el 2010 y para el 2023 aunque no haya dato, se asume un índice de 3000, ya que la tendencia de la curva es en sentido de aumento y más teniendo en cuenta la inflación derivada de la guerra de Ucrania. De esta forma, con la ecuación 7.2 se puede obtener una aproximación del coste actual del reactor.

$$\text{Coste año 2023 (€)} = \text{coste año 2010} \cdot \frac{\text{coste índice año 2023}}{\text{coste índice año 2010}} \quad (7.1)$$

$$\text{Coste año 2023 (€)} = 159.628,39 \cdot \frac{3000}{2400} = 199.535,49 \text{ €}$$

De esta forma, el valor del PEM será de **199.535,49 €**.

2. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (PEC)

El Presupuesto de Ejecución por Contrata es la estimación de los costes asociados a los trabajos de ejecución que serán realizados por una empresa contratista específica. Se calcula como la suma entre el Presupuesto de Ejecución de Material (PEM) más un 20% de gastos generales y el 6% del beneficio industrial. El PEC se muestra en la *tabla 7.1*:

Tabla 7.1. Presupuesto de Ejecución por Contrata. Fuente: elaboración propia.

Concepto	Precio (€)
Presupuesto de Ejecución de Material (PEM)	199.535,49
20% gastos generales	39.907,09
6% Beneficio industrial	11.972,13
Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC)	251.414,71 €

3. PRESUPUESTO TOTAL

El Presupuesto Total se calcula considerando un 7% del proyecto de dirección y obra sobre el PEC y el 21% de IVA (Impuesto sobre el Valor Añadido), tal y como se muestra en la *tabla 7.2*:

Tabla 7.2. Presupuesto total. Fuente: elaboración propia.

Concepto	Precio (€)
Total Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC)	251.414,71
7% Proyecto y dirección de obra	17.599,03
TOTAL	269.013,74
TOTAL +21% IVA	325.508,63

El presupuesto total del proyecto “*Diseño de un Reactor Discontinuo de Tanque Agitado para la síntesis de Butirato de Etilo*” asciende a **trescientos veinticinco mil quinientos ocho con sesenta y tres céntimos**.

4. RESUMEN DEL PRESUPUESTO

En la *tabla 7.3* se muestra un resumen del presupuesto del proyecto:

Tabla 7.3. Resumen del presupuesto. Fuente: elaboración propia.

Concepto	Precio (€)
PEM	199.535,49
20% Gastos generales	39.907,09
6% Beneficio industrial	11.972,13
PEC	251.414,71 €
7% Proyecto y dirección de obra	17.599,03
TOTAL	269.013,74
TOTAL + IVA	325.508,63