



# **Universitat Jaume I**

**Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales**

**Grado en Ingeniería Química**

## **Diseño de una planta de producción de un complejo Titanio-Ácido glicólico**

### **Trabajo Final de Grado**

Autora:

Aida Cubertorer Boza

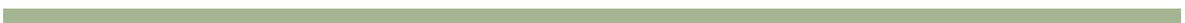
Tutor:

Sergio Mestre Beltrán

Castellón, Octubre 2023



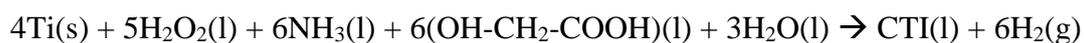
# 0. RESUMEN



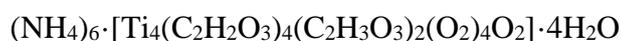


Este proyecto tiene como objetivo el diseño de una planta para la producción de un complejo de titanio-ácido glicólico, con una producción objetivo de 1000kg/mes. Se ha decidido plantear esta planta como un spin-off de la Universitat Jaume I, ubicándola en el Espaitec.

Se pretende producir este complejo con la intención de cubrir la falta de complejos de titanio solubles en agua, evitando el uso de disolventes orgánicos en su producción. La reacción con la que se trabajará es:



Donde CTI es el complejo titanio-ácido glicólico de fórmula:



El diseño del reactor se ha hecho a partir de los datos obtenidos experimentalmente en las prácticas externas, al no existir ningún estudio acerca de la cinética de la reacción todo el diseño se ha basado en las conclusiones obtenidas en dichos experimentos. Además, al tratarse de una reacción bastante problemática, las condiciones de operación seleccionadas son bastante restrictivas por razones de seguridad. Debido a estas circunstancias, se ha decidido introducir el titanio en polvo de forma separada al resto de reactivos de forma que se pueda parar la reacción fácilmente, para ello, se ha implementado un sistema de impulsión neumática que aprovecha la presión de las botellas de nitrógeno comprimido, utilizado como fluido impulsor, para conseguir su objetivo.

Queriendo darle un valor añadido al complejo se ha decidido secarlo hasta obtener un polvo, de ésta forma se facilitará dosificarlo en su aplicación. Para la obtención de dicho polvo, se ha diseñado un sistema de secado que consiste en un primer paso por una columna de rectificación, que elimina la mayor parte del agua residual de la corriente, y un secadero por atomización en el que se elimina el peróxido de hidrógeno, consiguiendo finalmente una humedad residual del 5%.

En este proyecto se incluyen los cálculos realizados para el diseño de los equipos, así como la justificación para la elección de los mismos, un presupuesto estimado para la puesta en marcha de la planta y un estudio de su viabilidad económica.

---

# 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

<b>1. OBJETO</b> .....	<b>5</b>
<b>2. JUSTIFICACIÓN</b> .....	<b>6</b>
<b>3. ALCANCE</b> .....	<b>7</b>
<b>4. ANTECEDENTES</b> .....	<b>8</b>
4.1. COMPLEJOS DE TITANIO TRADICIONALES .....	8
4.2. QUÍMICA VERDE Y POR QUÉ APOSTAR POR ELLA .....	9
4.3. LA REACCIÓN .....	10
4.4. LOS EXPERIMENTOS .....	11
<b>5. NORMAS Y REFERENCIAS</b> .....	<b>15</b>
5.1. DISPOSICIONES LEGALES Y NORMAS APLICADAS.....	15
5.2. BIBLIOGRAFÍA.....	15
5.3. WEBGRAFÍA .....	17
5.3. PROGRAMAS INFORMÁTICOS EMPLEADOS .....	17
<b>6. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS</b> .....	<b>18</b>
<b>7. REQUISITOS DE DISEÑO</b> .....	<b>23</b>
<b>8. ANÁLISIS DE SOLUCIONES</b> .....	<b>24</b>
8.1. EL REACTOR.....	24
8.2. SISTEMA DE IMPULSIÓN NEUMÁTICA.....	25
8.3. SISTEMA DE SECADO .....	27
8.3.1. <i>Procesos auxiliares del sistema de secado</i> .....	27
<b>9. RESULTADOS FINALES</b> .....	<b>29</b>
9.1. REACTOR .....	30
9.2. SISTEMA DE IMPULSIÓN NEUMÁTICA.....	31
9.3. SISTEMA DE SECADO .....	32
9.4. SISTEMAS AUXILIARES AL REACTOR .....	34
9.4.1. <i>Tanque de mezclado</i> .....	34
9.4.1. <i>Aireación del reactor</i> .....	34
9.4.2. <i>Filtrado de la corriente líquida extraída del reactor</i> .....	34
9.5. DISTRIBUCIÓN EN PLANTA Y UBICACIÓN.....	34
<b>10. PLANIFICACIÓN</b> .....	<b>37</b>
<b>11. ORDEN DE PRIORIDAD DE LOS DOCUMENTOS BÁSICOS</b> .....	<b>39</b>
<b>12. VIABILIDAD ECONÓMICA</b> .....	<b>40</b>
12.1. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DEL ESTUDIO ECONÓMICO .....	40

**13. CONCLUSIÓN ..... 41**



## 1. Objeto

El objeto del presente proyecto es el diseño de una planta para la obtención de un complejo de titanio-ácido glicólico, que sea soluble en agua, sin utilizar disolventes orgánicos en su producción. Se pretende producir dicho complejo a partir de una mezcla de peróxido de hidrógeno, amoníaco, ácido glicólico y titanio.

Al ser un proceso novedoso, no hay ningún estudio sobre la reacción utilizada para obtener el compuesto y, por tanto, la disponibilidad de datos es limitada. A partir de los datos teóricos conocidos y, de las conclusiones acerca de la evolución de la reacción obtenidos en las prácticas, se tratará de establecer las condiciones óptimas de operación que permitan trabajar sin riesgo de perder el control de la reacción.

Además, se tratará de implementar en la planta una etapa de secado para transformar el complejo acuoso en polvo y así aportarle un valor añadido.

---

## 2. Justificación

Este trabajo surge del deber de realizar un proyecto de carácter profesional relacionado con algún ámbito de la ingeniería química, para la asignatura EQ1044 "Trabajo final de grado" enmarcada dentro del 4º curso del Grado en Ingeniería Química.

La idea de este proyecto nace de la necesidad de tener un compuesto líquido que facilite la aplicación del titanio para recubrimientos mediante pirolisis de aerosol, con fines decorativos o para superficies catalíticas, y que su síntesis no conlleve el uso de disolventes orgánicos. El uso de estos disolventes suele implicar complicaciones en su almacenamiento y en su manipulación debido a que son muy volátiles. Por ello, en este proyecto se busca implementar una nueva síntesis de complejos de titanio más sostenible, que permita eliminar el uso de disolventes orgánicos siguiendo uno de los principios de la química verde.

---

### 3. Alcance

En el presente proyecto se pretende diseñar una planta para la producción de un complejo titanio-ácido glicólico a partir de una mezcla de peróxido de hidrógeno, amoníaco, ácido glicólico y titanio. Se propone un método alternativo al proceso tradicional de obtención de complejos evitando el uso de disolventes orgánicos.

Teniendo en cuenta los resultados de los experimentos realizados para el estudio de la reacción, se ha considerado esencial mantener el proceso bajo unas condiciones de operación restrictivas. Por ese motivo se ha decidido transportar del polvo de titanio de forma separada a los demás reactivos, ya que en caso de perder el control de la reacción la forma más rápida de pararla sería cortar el suministro de éste.

Además, para darle un valor añadido al complejo obtenido y facilitar su dosificación para su aplicación en esmaltes, se ha decidido transformar el complejo acuoso en un polvo.

Por lo que el alcance del proyecto comprenderá:

- Evaluar las mejores condiciones para la producción del complejo titanio-ácido glicólico.
- El diseño y dimensionamiento del reactor.
- El diseño y dimensionamiento de un sistema de impulsión neumática para el transporte del titanio en polvo hasta el reactor.
- El diseño y dimensionamiento de un sistema de secado para la obtención del producto final en polvo.
- El análisis de la viabilidad económica de la planta.

Debido a la extensión de los cálculos para el diseño y dimensionamiento de los equipos y/o sistemas de la planta, en este proyecto solo se incluye una visión general, sin medidas detalladas, de la distribución en planta y su ubicación. Por esa misma razón no se han incluido cálculos de conducciones y sistemas de impulsión, por lo que no se mencionan las bombas necesarias para la impulsión de líquidos a través de la planta.

---

## 4. Antecedentes

### 4.1. Complejos de titanio tradicionales

Los complejos de titanio suelen consistir en alcóxidos metálicos con forma  $[M(OR)_x]_n$  (dónde M es un metal o metaloide de valencia  $x$ ; R es un alquilo simple, alquilo sustituido, o grupo alqueno; y  $n$  es el grado de asociación molecular), que puede considerarse que se forma a partir del reemplazo del hidrógeno hidroxílico de un alcohol (ROH) por un átomo de un metal o metaloide (*D.C. Bradley et al., 2001*). Esto se debe a que la mayoría de compuestos de elementos de transición externa, como el titanio, sufren una fuerte hidrólisis en contacto con soluciones acuosas lo que dificulta su utilización en aplicaciones industriales.

Esta circunstancia es un problema ya que, la preparación de disoluciones acuosas es indispensable para la síntesis de materiales inorgánicos. En el caso del titanio su óxido ( $TiO_2$ ) es un material muy importante debido a que tiene numerosas aplicaciones, desde pinturas blancas hasta aparatos nano eléctricos. Por ello, desde hace casi un siglo se han investigado y se han desarrollado varios métodos para sintetizar estos compuestos.

En general, la elección del método de síntesis utilizado para la formación de cualquier alcóxido depende de la electronegatividad del elemento de interés. Uno de los métodos empleados en la síntesis de un alcóxido metaloide suele consistir en la reacción de su haluro covalente, generalmente cloruros, con un alcohol apropiado. Otro método aplicable, es la esterificación de sus oxácidos u óxidos con alcoholes. También se emplean reacciones de alcoholólisis o transesterificación de los alcóxidos metal para la obtención de alcóxidos homo- y heterolépticos derivados del mismo metal. En el caso de los complejos de titanio, como el titanio es más electropositivo que los cloruros, no parece darse la sustitución del cloruro por el grupo alcóxido. Por eso se añaden bases como el amoníaco o la piridina, parece ser que la primera vez que se utilizó amoníaco para la obtención de tetra-alcóxidos de titanio fue en 1939.

El problema de estos métodos es que se basan en la utilización de disolventes orgánicos, cuyo uso puede conllevar la emisión de compuestos orgánicos volátiles (COVs) nocivos para el medio ambiente, además, por su carácter volátil pueden suponer un riesgo para el ser humano en su manipulación. Por ello, desde que hace unos años cobrara más presencia el concepto de procesos de “química verde”, se busca ser más respetuoso con el medio ambiente incluso desde la elección de los reactivos que se emplean.

---

## 4.2. Química verde y por qué apostar por ella

La industria química es cada vez más consciente de su responsabilidad con respecto al medio ambiente. Conocida históricamente como la industria más contaminante, es a su vez la que tiene los mejores medios para poner soluciones a aquellas prácticas consideradas nocivas para el medio ambiente. Paul Anastas y John C. Warner formularon los 12 principios en los que se basa la química verde publicados en 1998 en su libro *Green Chemistry: Theory and Practice*.

1. Prevención de la generación de residuos.
2. Diseñar productos seguros.
3. Diseñar la síntesis lo segura posible.
4. Uso de materias primas y energías renovables.
5. Uso de catalizadores.
6. Evitar derivados químicos.
7. Maximizar la estructura atómica.
8. Uso de disolventes y reactivos lo más seguros posible.
9. Diseño de procesos energéticamente eficientes.
10. Fabricar productos biodegradables.
11. Diseño de sistemas de control y análisis en tiempo real.
12. Minimizar el potencial de accidentes.

La química verde busca la mejora ambiental a través de la aplicación de estos principios al diseño de nuevos productos o en proyectos de renovación de procesos ya existentes. Siguiendo este concepto y aplicándolo en la industria se consigue que el uso o la generación de sustancias peligrosas, como los disolventes orgánicos, se reduzca en gran medida o que incluso desaparezca por completo.

---

### 4.3. La reacción

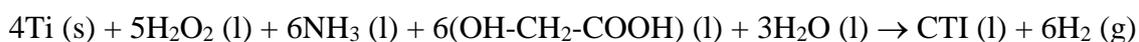
La idea de este proyecto parte de una publicación realizada por Makoto Kobayashi *et al.* (2007), en la que presentaban el estudio de la morfología de nano partículas de rutilo, sintetizadas a partir de un tratamiento hidrotérmal de una solución acuosa de un complejo de glicolato de titanio. Para la obtención de dicho complejo, disolvieron titanio metal en polvo en una disolución de peróxido de hidrógeno (30%) y amoníaco acuoso (28%) y le añadieron el ácido glicólico como complejante.

En esa publicación se menciona que el complejo se mantenía estable incluso al disolverlo en agua, por lo que su utilidad en procesos con uso de soluciones acuosas parece viable. Por esa razón, en este proyecto se busca escalar la forma de obtención de este complejo para su producción industrial. Desgraciadamente en el artículo no se incluía la estequiometría de la reacción mencionada, por lo que, para poder comenzar con el diseño de la planta, se procedió a realizar una búsqueda bibliográfica más profunda.

Se encontró una publicación de Agatino Di Paola *et al.* (2013) en la que se hablaba también de la misma reacción que en el otro artículo y, aunque tampoco mencionaba la estequiometría, sí que incluía la fórmula química del complejo. De ahora en adelante el complejo será mencionado como CTI y su fórmula es:



Como no ha sido posible obtener ningún estudio que analice en profundidad la reacción, a partir de la fórmula química del complejo y de los reactivos que intervienen en la reacción, se ajustó la estequiometría con el fin de poder trabajar con la reacción. La reacción ajustada es la siguiente:



La aparición en la reacción de agua como reactivo, puede asociarse a las disoluciones acuosas del peróxido de hidrógeno y de amoníaco. Además, a partir de la estequiometría, se puede observar que aparte del complejo, en la reacción se genera hidrógeno.

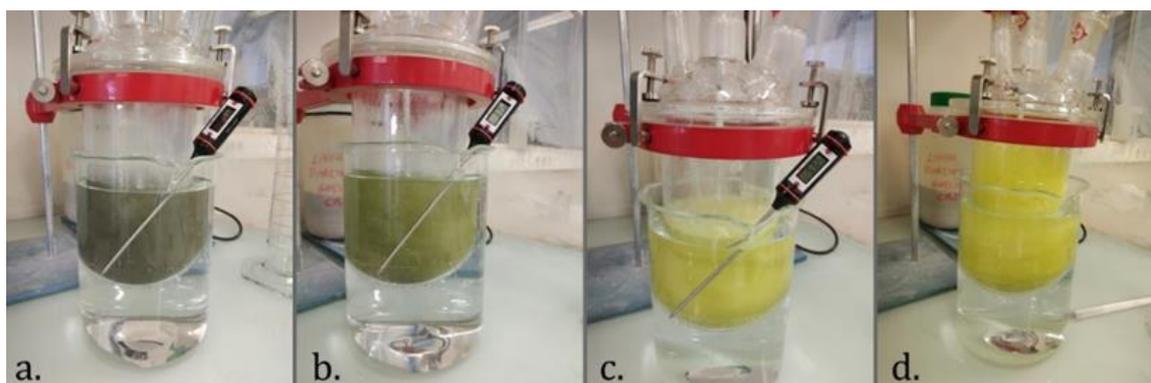
Se debe tener en cuenta que en este proyecto no se ha podido realizar un estudio más completo de la interacción que se produce entre la reacción principal y la paralela, por lo que seguramente la estequiometría de la reacción sea poco precisa. Por esa razón, se ha tenido en cuenta en todo momento que al no conocer en profundidad lo que ocurre, hay que operar con más precaución para evitar en la medida de lo posible situaciones inesperadas.

---

#### 4.4. Los experimentos

La base para el diseño de la planta, son los resultados experimentales extraídos de una serie de experimentos realizados en la estancia en prácticas. El estudio de estos experimentos ha permitido tener una visión general de lo que sucede en la reacción y, ampliar la comprensión de todos los factores que hacen a esta reacción potencialmente peligrosa.

Todos los experimentos se basaron en la reacción ajustada presentada en el apartado anterior, y en los artículos de Makoto Kobayashi *et al.* (2007) y de Agatino Di Paola *et al.* (2013). Se trabajó en exceso de peróxido de hidrógeno (35% w/w) en todos los casos y se variaban las concentraciones de los demás reactivos. En ambos artículos se menciona que una vez se ha formado el complejo, éste toma una tonalidad amarilla viva, lo que se pudo comprobar en el laboratorio. En la Figura M.4.1 se muestra la evolución de la reacción de izquierda a derecha, desde que se añaden los reactivos (mezcla con aspecto grisáceo debido al titanio en polvo), pasando por etapas intermedias donde se ve una mezcla de colores, hasta que finaliza la reacción y solo se puede apreciar el color amarillo del complejo formado.

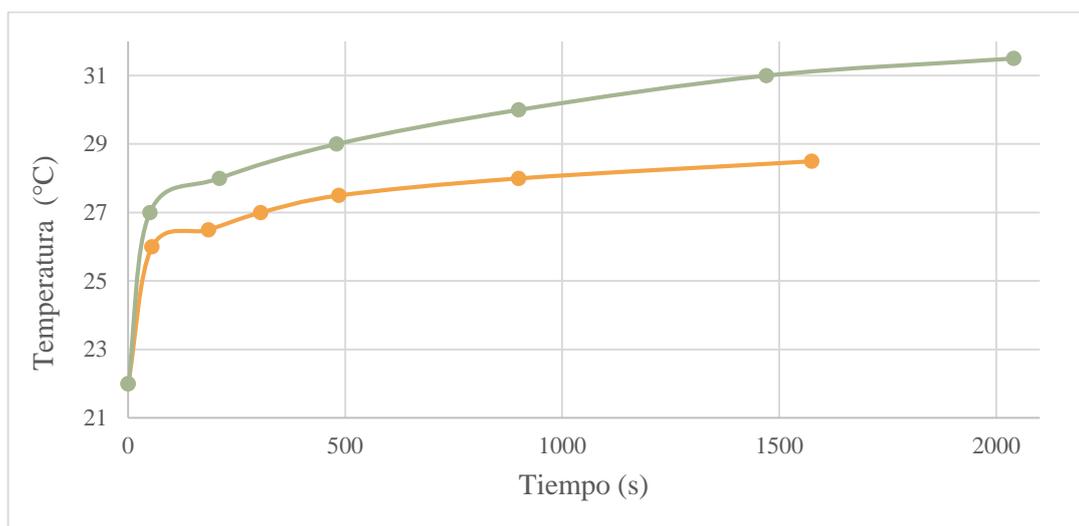


**Figura M.4.1:** Color de la mezcla reactante a lo largo de la reacción. Creación propia.

Se realizaron un total de 4 experimentos con la reacción, uno de los cuales se diseñó en condiciones adiabáticas para observar el comportamiento de la reacción. Para los demás experimentos se utilizó un sistema como el que se muestra en la Figura M.4.1, dónde se utilizó un tampón térmico a fin de obtener datos más exactos del calor liberado durante la reacción.

En todos los experimentos, se pudo observar que se diferenciaban 3 etapas o tramos en el avance de la reacción bastante definidos. Al iniciarse la reacción se producía un primer tramo de aumento de temperatura muy rápido, apenas había transcurrido un minuto desde la mezcla de los reactivos y la temperatura subía entre cuatro y cinco grados. Tras este tramo se producía otro, en el que, durante dos o tres minutos, la temperatura aumentaba a un ritmo

muy pequeño o se mantenía sin variación perceptible; incluso en uno de los experimentos se llegó a observar que la temperatura de la reacción disminuía ligeramente. Finalmente se apreciaba un último tramo de aumento de temperatura, mucho más suave que el primero. Esto se puede observar en la Figura M.4.2, que presenta una gráfica de los datos de temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) frente al tiempo (s) de los dos experimentos de los que se obtuvieron resultados fiables.



**Figura M.4.2:** Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) frente al tiempo (s) de dos de los experimentos.

*Nota:* Cada uno de los colores identifica un experimento distinto, a distintas concentraciones de titanio.  
Creación propia

Analizando el comportamiento de la reacción se puede presumir, teniendo en cuenta que al añadir el titanio en forma de reactivo sólido la reacción tendrá lugar en la interfase sólido-líquido, y por tanto será bastante progresiva, que el primer tramo de aumento de temperatura no se debe a la reacción principal; por eso se produce un segundo tramo de aumento de temperatura, asociado a la reacción del titanio. Por tanto, asumiendo que el titanio en efecto no reacciona en ese primer tramo, se deduce que se produce una reacción paralela entre los demás reactivos, presumiblemente entre el peróxido de hidrógeno y el amoníaco.

Por esa razón, y para sustentar la hipótesis enunciada, se realizó un experimento en el que se comprobó que al mezclar la disolución de peróxido de hidrógeno con la de amoníaco, éstas reaccionaban entre ellas generando calor, siendo destacable que, en los primeros segundos, se producía un incremento de temperatura tan grande como el apreciable en la Figura M.4.2.

Analizando detenidamente los tres tramos que se producen en la reacción y los resultados del experimento realizado por separado, se puede llegar a dos conclusiones:

- El pico de calor inicial se puede asumir que se debe a la reacción paralela del peróxido de hidrógeno con el amoníaco, que se inicia más rápidamente que la reacción principal.
- La reacción principal tarda en iniciarse debido a que el titanio en polvo se compone de pequeñas partículas sólidas, que para empezar a reaccionar necesitan que su superficie se desgaste.

Por otro lado, en los otros dos experimentos, ocurrieron percances relacionados con la pérdida de control de la reacción. En uno de ellos, cuando la mezcla reactante superó aproximadamente los 50°C, se salió fuera de control; la liberación de hidrógeno era tal, que el líquido empezó a borbotear y rebasó el borde del recipiente vertiéndose sobre la mesa del laboratorio, impidiendo la toma de datos de temperatura y tiempo fiables. Pese a que los datos del experimento ya no eran válidos, se pudo observar que al llegar a esa temperatura la generación de hidrógeno se disparaba y el incremento de la temperatura, se producía muy rápidamente.

En el otro experimento, la reacción se produjo sin incidentes. Cuando se percibió que la temperatura de la reacción empezaba a descender, se asumió que se debía a que la reacción había finalizado, ya que había cambiado por completo al color amarillo del complejo y no se percibían restos visibles del titanio, por lo que se añadió agua destilada por precaución al recipiente y se dejó enfriar. Pero, pasado un tiempo, aunque aparentemente ya no quedaba nada en la mezcla que pudiera seguir reaccionando, la reacción se había vuelto a activar sola y acabó rebasando el recipiente.

De estos dos experimentos "fallidos" se puede deducir que, la generación descontrolada de gases puede llegar a ser un problema importante, dependiendo del tipo de reactor que se quiera utilizar, y que, aunque no sean perceptibles al ojo humano, sí pueden quedar restos de titanio en la mezcla reactante y, por tanto, es probable que la reacción que aparentemente ha finalizado pueda reactivarse.

En general, de todos los experimentos se pueden extraer estas conclusiones:

- La reacción tiene aporte de calor de dos fuentes distintas, la reacción paralela y la reacción principal, que afectan al proceso en distintas proporciones a lo largo del tiempo.
-

- Es conveniente mantener controlada la temperatura, para evitar que la reacción supere los 50°C y se descontrole debido a la rápida generación de hidrógeno, lo que en espacios cerrados se traduciría en un aumento de presión que podría conducir a una explosión.
  - Aunque parezca que se ha producido la reacción completamente, si quedan partículas sin reaccionar se puede reactivar la reacción, por tanto, sería recomendable filtrar el producto final para eliminar los posibles restos de titanio y, por tanto, los riesgos asociados.
-

## 5. Normas y referencias

### 5.1. Disposiciones legales y normas aplicadas

En la realización de este proyecto se han tenido presentes las siguientes disposiciones legales:

- REAL DECRETO 1627/1997, del 14 de abril, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud laboral en los lugares de trabajo.

También se han consultado normas de aplicación internacional:

- ISO/IEC 80000 – Sistema Internacional de Unidades. Guía de estilo para el uso de magnitudes físicas, unidades de medida y fórmulas que las involucran y símbolos.

Por último, se han consultado normas de aplicación nacional:

- UNE 157001:2014 – Criterios generales para la elaboración formal de los documentos que constituyen un proyecto técnico.

### 5.2. Bibliografía

Durante la realización de este proyecto se han consultado diferentes fuentes para mejorar la comprensión de algunos procesos o campos. En este apartado se presentan, ordenados alfabéticamente, los distintos libros, artículos y compilaciones consultados.

- ~ Anastas, Office of Pollution Prevention and Toxics Paul T & Warner, Department of Chemistry John C. (2000). *Green Chemistry: Theory and Practice* (Reprint ed.). Oxford, USA: Oxford University Press.
  - ~ Barba Juan, A., & Clausell Terol, C. (2014). *Reactores químicos y bioquímicos*. Castelló de la Plana, España: Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.
  - ~ Bradley, D., Mehrotra, R. C., Rothwell, I., & Singh, A. (2001). *Alkoxo and Aryloxo Derivatives of Metals*. Maarssen, Países Bajos: Elsevier Gezondheidszorg.
  - ~ Brown, T. L., Bursten, B. E., & LeMay, H. E. H. (2012). *Chemistry: The Central Science* (12.a ed.). Upper Saddle River, NJ, Estados Unidos: Prentice Hall.
  - ~ D, B. G., & Robb, L. A. (1950). Diccionario para ingenieros. Books abroad, 24(2), 181. <https://doi.org/10.2307/40089188>
-

- ~ Di Paola, A., Bellardita, M., & Palmisano, L. (2013). *Brookite, the Least Known TiO<sub>2</sub> Photocatalyst*. *Catalysts*, 3(1), 36–73. <https://doi.org/10.3390/catal3010036>
- ~ Emel'yanenko, V. N., Verevkin, S. P., Stepurko, E. N., Roganov, G. N., & Georgieva, M. K. (2010). *Thermodynamic properties of glycolic acid and glycolide*. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 84(8), 1301–1308. <https://doi.org/10.1134/s0036024410080054>
- ~ Green, D. W., & Southard, M. Z. (Eds.). (2018). *PERRY'S CHEMICAL ENGINEERS HANDBOOK* (9th ed.). McGraw-Hill.
- ~ Hatanaka, et al. (1989). *Sterilization method and apparatus therefor*. (U.S. Patent, No. 4,797,255). <https://rb.gy/hp5y0>
- ~ Masters, K. (1976). *Spray Drying*. G. Godwin.
- ~ Klinzing, G. E., Rizk, F., Marcus, R., & Leung, L. S. (2010). *Pneumatic Conveying of Solids: A Theoretical and Practical Approach* (3rd 2010 ed., Vol. 8). Nueva York, USA: Springer.
- ~ Klinzing, G. E. (2018). *A review of pneumatic conveying status, advances and projections*. *Powder Technology*, 333. Published. <https://doi.org/10.1016/j.powtec.2018.04.012>
- ~ Kobayashi, M., Petrykin, V., Kakihana, M., & Tomita, K. (2007). *Morphology Control of Rutile Nanoparticles in a Hydrothermal Synthesis from Water-Soluble Titanium Complex Aqueous Solution*. *Journal of the Ceramic Society of Japan*, 115(1348), 835–839. <https://doi.org/10.2109/jcersj2.115.835>
- ~ Liley, P. E., Reid, R. C., & Buck, E. (1993). Tomo I, Sección 3: Datos físicos y químicos. En McGRAW-HILL/INTERAMERICANA DE MÉXICO, S.A. de C.V. (Ed.), *PERRY. Manual del ingeniero químico* (3rd ed., pp. 175–175). México, México: McGraw Hill.
- ~ Li-Tsung Sheng, Yi-Lun Xiao, Shu-san Hsiau, Chih-Peng Chen, Po-Shen Lin, & Kuo-Kuang Jen. (2020). *A study of pneumatic conveying with high-density AM-using metal powder in a pipe bend*. *International Journal of Mechanical Sciences*, 181, 105763. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105763>
-

- ~ McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriott, P. (1995). Sección 2: Mecánica de fluidos. En *Operaciones Unitarias En Ingeniería Química* (4.a ed., pp. 242–293). Aravaca, Madrid: McGraw-Hill Interamericana.
- ~ Richard, T., Richard C., B., Wallace B., W., Joseph A., S., & Debangsu, B. (2012). *Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes* (Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences) (English Edition) (4.a ed.). Harlow, Reino Unido: Pearson Education.
- ~ Tema 1: *Introducción a los procesos membranarios*. (2016). En R. C. Moliner (Comp.). EQ1039: Operaciones de separación especiales. Universitat Jaume I.
- ~ Sheng, L. T., Xiao, Y. L., Hsiau, S. S., Chen, C. P., Lin, P. S., & Jen, K. K. (2020).

### 5.3. Webgrafía

En este apartado se recoge una lista de los recursos consultados en línea, ordenados alfabéticamente.

- ~ Fundació General de la Universitat Jaume I. Espaitec. (2020, 29 octubre). Espaitec. Recuperado 29 de agosto de 2023, de <https://espaitec.uji.es/>
- ~ Hydrogen Peroxide Heat of Vaporization | USP Technologies. (s. f.). <https://www.h2o2.com/technical-library/physical-chemical-properties/physical-properties/default.aspx?pid=28&name=Heat-of-Vaporization>
- ~ Normas APA – 7ma (séptima) edición. (2022, 14 marzo). Normas APA. <https://normas-apa.org/>

### 5.3. Programas informáticos empleados

Los programas informáticos que se han empleado para la realización del proyecto son los siguientes:

- Microsoft Word 2016
  - Microsoft Excel 2016
  - Microsoft Project 2016
  - AutoCAD 2024
  - Visual Paradigm
-

## 6. Definiciones y abreviaturas

En éste apartado, para facilitar la lectura de la memoria, se introducen o se amplían las definiciones y/o abreviaturas de algunos de los términos utilizados, listadas por orden alfabético:

**Alcóxido:** es un grupo funcional orgánico formado por la desprotonación de un grupo hidroxilo de un alcohol, quedando el oxígeno en carga negativa. Estructuralmente, los alcóxidos son grupos alquilo que están unidos a un oxígeno con carga negativa. Este oxígeno se enlaza muy fácilmente a cationes metálicos.

**Atomización:** propagación de un líquido mediante la expulsión o pulverización de gotas.

**Complejo:** históricamente se ha empleado este término para describir aquel tipo de estructura molecular que suele estar formada por un átomo central (frecuentemente un catión metálico) que se encuentra enlazado a otras entidades moleculares (ligandos) que lo rodean, también conocida como entidad de coordinación.

**Velocidad terminal:** velocidad máxima que puede alcanzar una partícula en el seno de un fluido. Se da en el punto en el que la fuerza descendente de la gravedad se iguala a la suma de la fuerza de arrastre y la flotabilidad de la partícula.

**Velocidad de saltación:** velocidad por debajo de la cual las partículas, transportadas en un sistema de impulsión neumática, pierden suspensión y se depositan en el fondo de las conducciones horizontales.

Además, se incluye unas tablas donde se referencian las abreviaturas utilizadas. En la Tabla M.6.1 se muestran los símbolos del alfabeto empleados en el proyecto, junto a sus unidades de magnitud y su descripción, en orden alfabético.

**Tabla M.6.1:** *Símbolos del alfabeto utilizados en el proyecto.*

Símbolo	Descripción	Unidades
$A_j$	Especie química j	-
$A_k$	Reactivo limitante	-
BB	Beneficio bruto	€/año
BN	Beneficio neto	€/año
$C_{p_j}$	Calor específico del reactivo j	$\text{kJ/kmol } A_j \cdot \text{K}$

Símbolo	Descripción	Unidades
$C_{ps}$	Calor específico del sólido	$\text{kJ/kg s.s.}\cdot\text{K}$
$C_{pv}$	Calor específico del vapor de agua	$\text{kJ/kg}\cdot\text{K}$
$C_{pw}$	Calor específico del agua	$\text{kJ/kg agua}\cdot\text{K}$
$C_D$	Coefficiente de arrastre para fluidos tranquilos e ilimitados	-
$C_s$	Calor húmedo	-
$c_j$	Concentración de reactivo	$\text{kmol/m}^3$
$c$	Velocidad media de las partículas	$\text{m/s}$
$D$	Diámetro	$\text{cm, m}$
$d_p$	Diámetro de partícula	$\mu\text{m, cm, m}$
$FC$	Flujo de caja	$\text{€/año}$
$F_{j0}$	Caudal molar del reactivo $j$ a la entrada del reactor	$\text{kmol/h}$
$F_j$	Caudal molar del reactivo $j$ a la salida del reactor	$\text{kmol/h}$
$Fr$	Número de Froude	-
$Fr^*$	Número de Froude relacionado con la velocidad de las partículas	-
$G_a$	Caudal másico de aire	$\text{kg/h}$
$g$	Aceleración de la gravedad	$\text{m/s}^2$
$H$	Entalpía de una fase gas	$\text{kJ/kg}$
$h$	Entalpía de una fase líquida	$\text{kJ/kg}$
$J$	Parámetro del balance de energía	$\text{K}$
$m_{\text{tot}}$	Caudal másico de entrada	$\text{kg/h}$
$m_s$	Caudal másico de sólidos	$\text{kg/h}$
$m_{ss}$	Caudal de sólido seco	$\text{kg s.s./h}$
$N$	Número de moles	$\text{mol, kmol}$
$n_c$	Velocidad límite del agitador	$\text{rpm}$
$P$	Presión	$\text{atm, Pa}$

Símbolo	Descripción	Unidades
$p_i$	Presión parcial del componente $i$	atm, Pa
$p_s$	Presión de saturación	bar
$p_t$	Presión total	atm, kPa
$p_w$	Presión parcial del vapor de agua	bar, kPa
$Q$	Calor	kJ
$Q_i$	Calor desprendido en el tiempo $i$	kJ
$Q_R$	Calor desprendido por la reacción	kJ
$Q_{TP}$	Calor recogido por el tampón térmico	kJ
$Q_T$	Calor total desprendido	kJ
$Q_v$	Caudal volumétrico	$m^3/h$
$\mathfrak{R}_j$	Velocidad de reacción referida al componente $A_j$	$mol A_j / (m^3 \cdot s)$
$R$	Constante de los gases ideales	$atm \cdot L / mol \cdot K$
$Re$	Número de Reynolds	-
$Re_{pf}$	Número de Reynolds relacionado con la velocidad terminal de una partícula	-
$r$	Velocidad de avance de la reacción	
$T$	Temperatura	$^{\circ}C, K$
$T_a$	Temperatura del aire	$^{\circ}C, K$
$T_{ref}$	Temperatura de referencia	$^{\circ}C, K$
$T_s$	Temperatura del sólido	$^{\circ}C, K$
$t$	Tiempo	s, h
$V$	Volumen	ml, L, $m^3$
$V_t$	Volumen total	$m^3$
$v_g$	Velocidad del gas	m/s
$w_f$	Velocidad de sedimentación de las partículas en una nube	m/s
$w_{f0}$	Velocidad terminal de una partícula sola	m/s

Símbolo	Descripción	Unidades
$w_j$	Fracción másica de la especie j	-
X	Grado de conversión	-
$X_j$	Humedad en base seca referida a la especie j	kg j/kg s.s.
$x_i$	Fracción másica del componente i en la alimentación	
$x_j$	Composición de un líquido (fracción molar o másica)	-
$Y_i$	Humedad absoluta del aire (entrada cámara de secado)	kg H <sub>2</sub> O/kg a.s.
$Y_o$	Humedad absoluta de agua en el aire de salida de la cámara de secado	kg H <sub>2</sub> O/ kg a.s.
$Y_p$	Humedad absoluta de peróxido de en el aire de salida de la cámara de secado	kg H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> / kg a.s.
$y_j$	Composición de un vapor (fracción molar o másica)	-

*Nota:* En aquellos símbolos para los cuales en la columna de unidades aparezca un guion (-) indica que es adimensional.

Por otro lado, en la Tabla M.6.2 se muestran los símbolos del alfabeto griego que aparecen en la memoria, con su descripción y sus unidades, ordenadas alfabéticamente.

**Tabla M.6.2:** Símbolos del alfabeto griego utilizados en el proyecto.

Símbolo	Descripción	Unidades
$\alpha$	Volatilidad	-
$\beta$	Ratio de la velocidad relacionado con la velocidad terminal de las partículas en una nube	-
$\gamma_i$	Coefficiente de actividad del componente i	-
$\Delta H^{\circ}_{fp}$	Entalpía de formación de los productos	kJ/mol
$\Delta H^{\circ}_{fr}$	Entalpía de formación de los reactivos	kJ/mol
$\Delta H_R$	Entalpía de la reacción	kJ/mol
$\Delta L$	Sumatorio de la longitud de todas las conducciones	m
$\Delta p_A$	Pérdida de presión debido a la aceleración	Pa
$\Delta p_b$	Pérdida de presión debido a los codos	Pa

Símbolo	Descripción	Unidades
$\Delta p_G$	Pérdida de presión debido a la gravedad, sólo considerada en los tramos verticales	Pa
$\Delta p_L$	Pérdida de presión debido al aire	Pa
$\Delta z$	Sumatorio de la longitud de las conducciones verticales	m
$\eta$	Viscosidad dinámica	Pa·s
$\Theta_j$	Relación molar en la corriente de entrada	kmol $A_j$ /kmol $A_k$
$\lambda_L$	Coefficiente de resistencia asociado al aire en la conducción	-
$\lambda_z$	Coefficiente de pérdida de presión adicional debida a sólidos fluyendo a través del flujo	-
$\lambda_z^*$	Coefficiente de pérdida de presión debido a impactos y fricciones	-
$\mu$	Ratio de carga de sólidos	-
$\nu$	Viscosidad cinemática	m <sup>2</sup> /s
$\nu_j$	Coefficiente estequiométrico de $A_j$ en la reacción	-
$\nu_P$	Coefficiente estequiométrico de los productos de la reacción	-
$\nu_R$	Coefficiente estequiométrico de los reactivos de la reacción	-
$\rho$	Densidad	g/cm <sup>3</sup>
$\rho^*$	Densidad aparente de la impulsión	

*Nota:* En aquellos símbolos para los cuales en la columna de unidades aparezca un guion (-) indica que es adimensional.

## **7. Requisitos de diseño**

Al tratarse de un producto novedoso se ha planteado empezar con una producción pequeña de cara a su introducción al mercado, se quiere producir 1000 kg/mes. Siendo además un producto de química fina, tampoco se espera una gran demanda debido a que el uso principal del producto será para aplicaciones decorativas en azulejos.

Cómo restricción principal para el diseño del reactor se ha marcado no superar en ningún caso la temperatura de 50 °C, por esa razón, la conversión obtenida finalmente es muy pequeña, por lo que no se llega a obtener la producción inicialmente deseada. Para darle un valor añadido al producto se ha decidido transformarlo en un polvo seco con un máximo de un 5% de contenido en humedad.

## 8. Análisis de soluciones

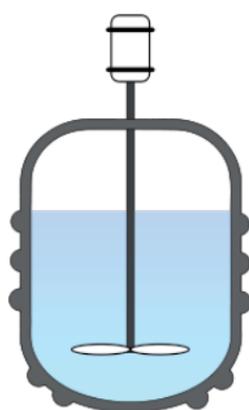
En este apartado se evaluarán las opciones de diseño disponibles para cada uno de los equipos, aquí se analizará su funcionamiento general y las distintas configuraciones disponibles. La selección de cada uno de los equipos se muestra más detalladamente en el documento “Anexos”, en sus respectivos apartados.

Los principales equipos que se requieren para la planta son: el reactor, un sistema de impulsión neumática y el sistema de secado.

### 8.1. El reactor

Según su modo de operación, los reactores se pueden clasificar en discontinuos, semicontinuos y continuos, en función de si las fases de operación se realizan secuencialmente o simultáneamente. También se pueden clasificar en reactores de tanque agitado o reactores de flujo de pistón en función del modelo de flujo y contacto de la mezcla de reacción.

Los reactores discontinuos o semicontinuos trabajan en régimen no estacionario, es decir, la composición y las propiedades físicas de la mezcla reactante varían con el tiempo. Tienen como características positivas la relativa baja inversión inicial y su flexibilidad de operación, por lo que suelen ser utilizados para la fabricación de productos de alto valor añadido, la fabricación de pequeñas cantidades de producto o para investigación de nuevos procesos químicos. El más representativo de los reactores discontinuos es el Reactor Discontinuo de Tanque Agitado (RDTA), mostrado en la Figura M.8.1.

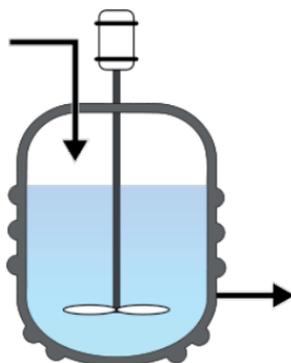


**Figura M.8.1:** Reactor Discontinuo de Tanque Agitado (RDTA).

*Nota:* Tomado de Reactores químicos y bioquímicos (p.10), por A. Barba Juan y C. Clausell Terol, 2014, Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.

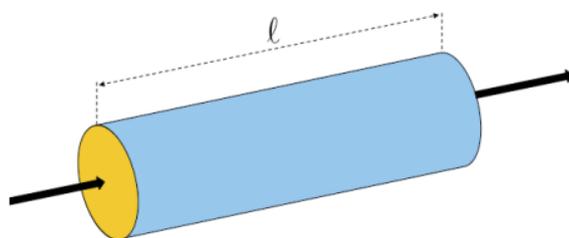
---

Por otro lado, los reactores continuos funcionan en régimen estacionario, donde la composición de la mezcla reactante y sus propiedades físicas no varían con el tiempo en una posición dada. Suelen utilizarse para reacciones a gran escala pese a que la inversión inicial que requieren es bastante elevada, ya que resulta muy sencillo establecer sistemas de control que permiten mantener las condiciones de operación. Los reactores continuos más conocidos son el Reactor Continuo de Tanque Agitado (RCTA) y el Reactor de Flujo de Pistón (RFP), mostrados en la Figura M.8.2 y en la Figura M.8.3 respectivamente.



**Figura M.8.2:** Reactor Continuo de Tanque Agitado (RCTA).

*Nota:* Tomado de Reactores químicos y bioquímicos (p.10), por A. Barba Juan y C. Clausell Terol, 2014, Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.



**Figura M.8.3:** Reactor de Flujo de Pistón (RFP).

*Nota:* Tomado de Reactores químicos y bioquímicos (p.10), por A. Barba Juan y C. Clausell Terol, 2014, Universitat Jaume I. Servei de Comunicació i Publicacions.

## 8.2. Sistema de impulsión neumática

La impulsión neumática consiste en el transporte de polvos secos y partículas sólidas en una corriente gaseosa, pudiendo transportar mediante este sistema prácticamente cualquier material. Los sistemas de impulsión neumática ofrecen muchas ventajas como, por ejemplo, el bajo mantenimiento que requieren o la posibilidad de transportar sólidos sin la generación de nubes de polvo, etc. Aunque también necesitan un mayor consumo de energía.

---

En los sistemas de impulsión neumática se suelen distinguir cuatro zonas de operación, cada una de ellas compuesta por un equipo diferente, dependiendo de la operación que se tenga que realizar.

- **Zona de impulsión:** aquí un equipo provee la energía necesaria para la impulsión del gas. Se utilizan una variedad de ventiladores, compresores y soplantes.
- **Zona de alimentación, mezclado y aceleración:** aquí se introducen los sólidos a la corriente gaseosa mediante un equipo alimentador, como una válvula rotativa o un alimentador tipo venturi. En ese momento se requiere una aceleración, si el espacio lo permite se diseñan tramos de conducción horizontales de una cierta longitud, diseñados para que los sólidos se aceleren asemejando un flujo estacionario.
- **Zona de transporte:** esta zona consiste en las diferentes conducciones que forman el sistema y pueden tener codos y válvulas para dirigir el flujo.
- **Zona de separación sólido-gas:** aquí se separan los sólidos de la corriente gaseosa, en general para sistemas de presión, una caída de presión a través del colector es suficiente para permitir la separación.

La impulsión neumática es un campo muy complejo y aún con mucho recorrido, la dificultad de modelizar el comportamiento de los sólidos durante el transporte lo convierte en una tecnología con muchas vías de investigación. En la bibliografía consultada se han encontrado varias formas de clasificar los sistemas de impulsión neumática además de sus modos de operación, en los que se profundizará en los anexos, como, por ejemplo, según el tipo de equipo de alimentación, según la presión de operación o según la presión del sistema, etc.

Para el caso de estudio solo nos interesa mencionar las dos formas más comunes de clasificación, según si son sistemas de presión positiva o de presión negativa.

- **Sistema de presión positiva:** es el más utilizado ya que es ideal para aplicaciones con múltiples descargas en las que el material se recoge en un único punto y se reparte a varios contenedores.
  - **Sistema de presión negativa:** en general se utilizan para transportar materiales desde varios puntos de alimentación hasta un único punto de recogida. Son mayormente utilizados para la impulsión de materiales tóxicos y peligrosos, además, permite el transporte libre de polvo. Por esa razón su uso es cada vez más extenso en múltiples
-

ramas de la industria, asociado a la creciente necesidad de tener operaciones libres de contaminantes.

En muchos casos se han aunado las ventajas de los dos sistemas y se han diseñado sistemas combinados de presión negativa-positiva. La combinación de los distintos elementos del sistema de impulsión genera configuraciones prácticamente infinitas, permitiendo su adaptación a múltiples situaciones. A modo de ejemplo, mencionar que existen configuraciones de ciclo cerrado en las que el gas utilizado para la impulsión es generalmente distinto del aire, y se recircula para su aprovechamiento de nuevo en el sistema.

### **8.3. Sistema de secado**

Para aportar un valor añadido al producto se ha decidido transformar el complejo acuoso en polvo. En este formato se consigue facilitar la dosificación del producto en su aplicación, ya que se espera que su uso mayoritario sea en la aplicación de recubrimientos.

A fin de conseguir este polvo, se tratará de eliminar los líquidos que acompañan al complejo en la corriente de salida del reactor (agua, peróxido de hidrógeno, amoníaco y ácido glicólico) evitando someterlo a altas temperaturas; el ácido glicólico, responsable de la estabilidad del complejo, se descompone a los 200°C.

Existen varios procesos que permitirían obtener el resultado deseado, pero se nos presentan varios inconvenientes relacionados con los reactivos líquidos mencionados en el párrafo anterior. Al estar formado a partir de ácido glicólico el compuesto es sensible a las altas temperaturas, que provocarían que el ácido se descompusiera desestabilizando el complejo, pero a la vez, al trabajar en exceso de peróxido de hidrógeno, se necesita una alta temperatura para conseguir la evaporación del peróxido y obtener así un polvo con una pureza elevada.

En el Anexo 5 se ha estudiado la viabilidad de dos procesos, la liofilización y el secado por atomización.

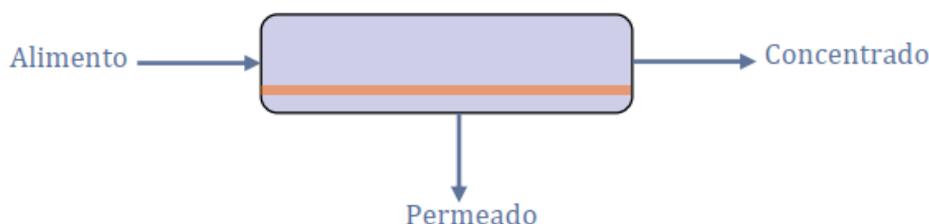
#### **8.3.1. Procesos auxiliares del sistema de secado**

Es posible que, debido a que se trabaja en exceso de peróxido de hidrógeno, un solo paso por el sistema de secado no permita obtener el grado de humedad final deseado. Por ello, se han valorado tres procesos que podrían servir de apoyo al sistema de secado, permitiendo concentrar el producto.

---

### 8.3.1.1. Tecnología de membranas

La tecnología de separación por membranas permite la división de los componentes de una mezcla. Las membranas se caracterizan por dividir la corriente alimentada en dos, permeado y concentrado (Figura M.8.4).



**Figura M.8.4:** Esquema básico de la separación por membranas.

*Nota:* Adaptado de Tema 1: Introducción a los procesos membranarios. (2016). En R. C. Moliner (Comp.). EQ1039: Operaciones de separación especiales. Universitat Jaume I.

Las membranas pueden clasificarse por su naturaleza (biológicas o sintéticas) o por su estructura (simétricas o asimétricas), de éstas, las conocidas como membranas cerámicas (membranas sintéticas inorgánicas) son las que se adecuarían a las condiciones de la corriente que se quiere tratar, al ser una corriente con una alta concentración de peróxido de hidrógeno, las membranas cerámicas serían las únicas capaces de resistir la reactividad del medio.

### 8.3.1.2. Cristalización por enfriamiento

La cristalización por enfriamiento es un proceso que consiste en exponer la mezcla que se desee concentrar a temperaturas lo suficientemente bajas como para que parte del solvente cristalice. De esa forma se genera una capa de hielo que se puede retirar de la mezcla, obteniendo así un líquido concentrado.

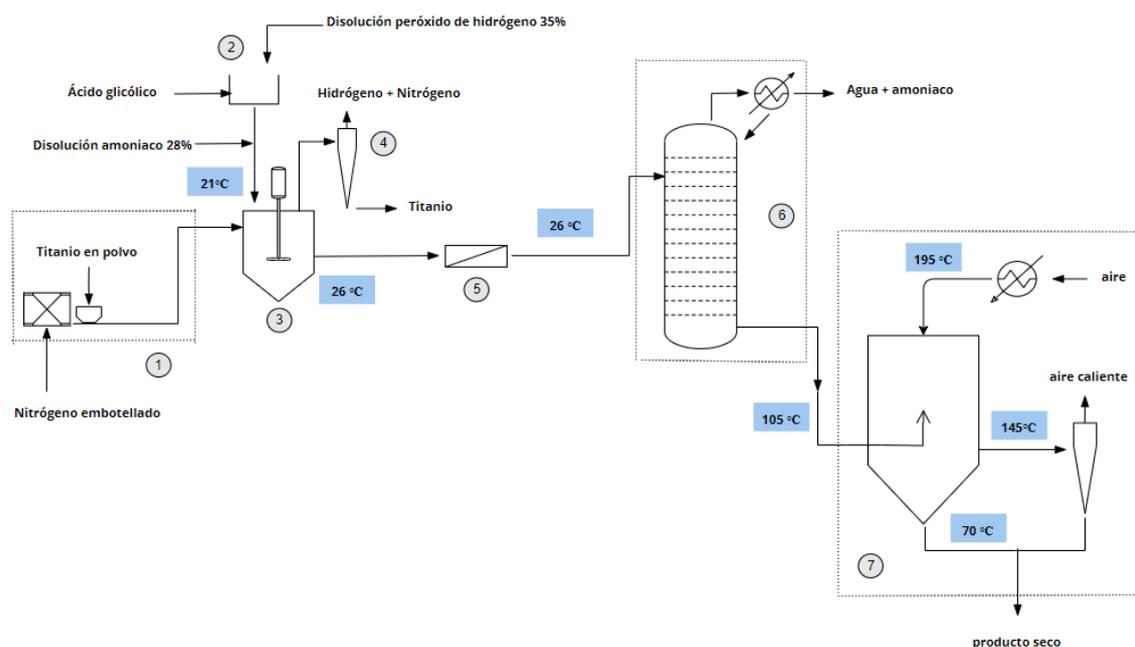
### 8.3.1.3. Columna de rectificación

Añadir un paso de la corriente líquida del complejo por una columna de rectificación, previamente a la operación de secado, permitiría eliminar parte del agua (componente más volátil). De esta manera, la corriente a introducir en el sistema de secado sería menos húmeda y requeriría menos energía para su secado.



## 9. Resultados finales

En este apartado se muestra un resumen de los resultados de los cálculos y las consideraciones de diseño de cada uno de los equipos y/o sistemas de la planta, los detalles de los cálculos se mostrarán en el documento “Anexos” en los apartados Anexo 1 - 6. En la Figura M.9.1 se muestra el diagrama de flujo de la planta, que podrá verse ampliado en el Anexo 2, y en la Tabla M.9.1 se lista la leyenda del diagrama de flujo.



**Figura M.9.1:** Miniatura del diagrama de flujo. Creación propia con Visual Paradigm.

**Tabla M.9.1:** Leyenda del diagrama de flujo.

Nº en el diagrama de flujo	Equipo
1	Sistema de impulsión neumática
2	Tanque de mezcla
3	Reactor RCTA
4	Ciclón (Aireación del reactor)
5	Filtro de malla
6	Columna de rectificación
7	Sistema de secado

## 9.1. Reactor

El reactor elegido ha sido un RCTA que trabajará sin un sistema de refrigeración ya que la temperatura de la reacción no superará los 30°C, quedando muy por debajo de la temperatura crítica a que se dispara la formación de gases.

Para mantener la temperatura de reacción baja y estable, se han calculado las concentraciones de operación para replicar las condiciones del experimento que se llevó a cabo sin ningún incidente. A las concentraciones a las que trabajará el reactor, el grado de conversión conseguido es de  $X=0,19$  y en base a estos datos se han calculado los parámetros del reactor y sus dimensiones.

En la Tabla M.9.2 se muestran las concentraciones de operación, el caudal molar de entrada y el caudal molar de salida del reactor, para todas las especies químicas involucradas en la reacción.

**Tabla M.9.2:** Concentraciones de operación y caudales de entrada y salida del reactor de todas las especies.

Especie	A <sub>j</sub>	c <sub>j</sub> (kmol/m <sup>3</sup> )	F <sub>j0</sub> (kmol/h)	F <sub>j</sub> (kmol/h)
Ti	A <sub>1</sub>	4,730·10 <sup>-2</sup>	6,102·10 <sup>-3</sup>	4,943·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	10,972	1,415	1,414
NH <sub>3</sub>	A <sub>3</sub>	0,838	0,108	0,106
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	7,095·10 <sup>-2</sup>	9,153·10 <sup>-3</sup>	7,414·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	40,491	5,224	5,223
CTI	A <sub>6</sub>	-	-	2,899·10 <sup>-4</sup>
H <sub>2</sub>	A <sub>7</sub>	-	-	1,739·10 <sup>-3</sup>

*Nota:* CTI es la abreviatura utilizada para el complejo de titanio. El hidrógeno y el CTI no tienen datos de concentración y caudal de entrada porque son productos de la reacción.

Por otro lado, en la Tabla M.9.3 se muestran parámetros relacionados con el dimensionamiento del reactor.

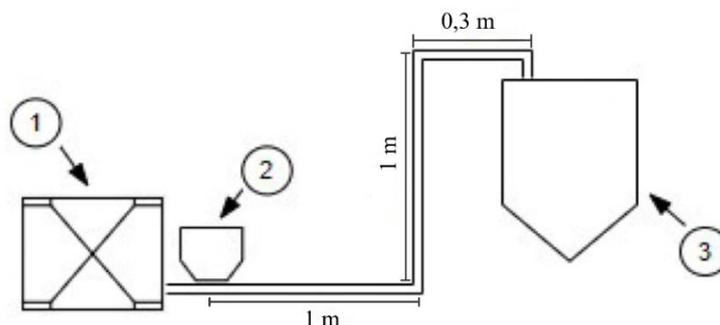
**Tabla M.9.3:** *Parámetros de diseño del reactor.*

Parámetro	Valor	Uds.
$Q_v$	0,129	m <sup>3</sup> /s
V	43	L
D	0,38	m
T	26	°C

Finalmente, para la agitación de la reacción, se ha optado por una turbina de seis palas planas para conseguir una buena agitación y asegurar la prevención de remolinos; la velocidad de giro de la turbina será de 104,51 rpm.

## 9.2. Sistema de impulsión neumática

Para el sistema de impulsión neumática se ha decidido trabajar en fase diluida ya que la cantidad de titanio a transportar es de 0,292 kg/h, además, se utilizará nitrógeno como gas impulsor para evitar que se produzcan chispas por la fricción de las partículas metálicas. El diseño del sistema puede verse en la Figura M.9.2.



**Figura M.9.2:** Esquema del sistema de impulsión neumática, donde: 1. Botellas de nitrógeno, 2. Micro dosificador, 3. Reactor. Creación propia

Se utilizará la presión de las botellas de nitrógeno comprimido (2 bar) como fuerza impulsora conectándolas directamente a la conducción. Para la dosificación del titanio se utilizará un micro dosificador, debido a que el caudal a transportar es muy pequeño.

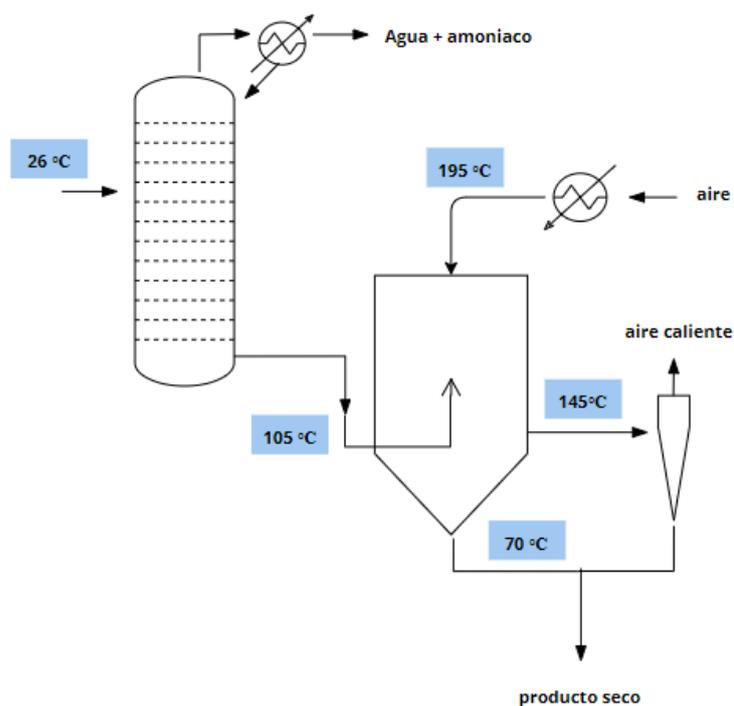
En la Tabla M.9.4 se muestra un resumen de los parámetros de la impulsión.

**Tabla M.9.4:** *Parámetros de la impulsión neumática.*

Parámetro	Unidades	Valor
Diámetro de las conducciones	mm	20
Velocidad del gas	m/s	10
Pérdida de presión total	Pa	233,979
Caudal de gas	m <sup>3</sup> /h	11,31
Ratio de dosificación de sólidos	L/h	0,3

### 9.3. Sistema de secado

El sistema de secado seleccionado es la combinación de una columna de rectificación más un secadero por atomización, en el que se ha decidido operar utilizando un flujo mixto para asegurar que se alcanzará el secado deseado pese a la restricción de temperatura, con calefacción directa del aire mediante un calefactor eléctrico.



**Figura M.9.3:** Esquema del sistema de secado por atomización.

*Nota:* Extraído del diagrama de flujo. Creación propia.

En el esquema también puede apreciarse una columna de rectificación, instalada para eliminar la mayor parte del agua y así concentrar la corriente líquida que llega a la cámara de secado. De esta forma se reduce notablemente la cantidad de energía que se requiere para

secar el complejo y obtener un polvo seco. Dicha columna será de 4 platos y el punto de alimentación estará situado en el segundo plato.

En la Tabla M.9.5 se muestran las características de la corriente extraída por la base de la columna de rectificación, que será la que se introduzca finalmente en la cámara de secado.

**Tabla M.9.5:** Características de la corriente de entrada a la cámara de secado.

Especie química	A <sub>j</sub>	w <sub>j,i</sub>	m <sub>j,i</sub> (kg/h)
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	0,884	46,713
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	1,067·10 <sup>-2</sup>	0,564
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	0,1	5,284
CTI	A <sub>6</sub>	5,355·10 <sup>-3</sup>	0,283

A partir de estas condiciones de producto húmedo a secar se ha conseguido obtener un producto seco con una humedad residual del 5%. En la Tabla M.9.6 se muestran los parámetros más relevantes del secado por atomización.

**Tabla M.9.6:** Parámetros relevantes del sistema de secado por atomización.

Parámetro	Valor
Caudal de aire necesario, G <sub>a</sub>	867,727 kg/h
Humedad residual	5%
Caudal de producto seco	0,298 kg/h
Temperatura de secado, T <sub>a,i</sub>	195°C
Temperatura del producto seco, T <sub>s,o</sub>	70°C
Tiempo de residencia, τ	30 s
Diámetro de la cámara de secado, D <sub>ch</sub>	1,894 m

Al no haber trabajado a temperaturas más elevadas para evitar dañar la integridad del compuesto, ha sido imposible eliminar del producto seco el ácido glicólico que quedaba en la corriente introducida. Al tratarse de una cantidad tan pequeña se puede aceptar y mencionarlo como una impureza en la venta del complejo.

## 9.4. Sistemas auxiliares al reactor

### 9.4.1. Tanque de mezclado

En la Tabla M.9.7 se muestran las características del tanque seleccionado para disolver las perlas de ácido glicólico en el peróxido de hidrógeno.

**Tabla M.9.7:** Características del tanque de mezclado.

Parámetro	Valor
Volumen (L)	130
Diámetro del agitador (mm)	150
Velocidad del agitador (rpm)	220

### 9.4.1. Aireación del reactor

La aireación del reactor se llevará a cabo aprovechando el caudal de nitrógeno introducido por el sistema de impulsión neumática. Con la fuerza de ésta corriente se arrastrará el hidrógeno generado en la reacción y se extraerá por la parte superior del reactor. Como es probable que debido a la fuerza de la corriente de nitrógeno algunas partículas de titanio no caigan al reactor y sean arrastradas fuera de éste, se ha implementado un separador ciclónico para separar dichas partículas de la corriente gaseosa extraída.

### 9.4.2. Filtrado de la corriente líquida extraída del reactor

Como se ha comentado previamente, en las condiciones en las que se lleva a cabo la reacción, queda titanio sin reaccionar en la corriente de salida del reactor. Al quedar otros reactivos sin reaccionar en la corriente es posible que la reacción se reactive por sí misma, ocasionando problemas en el circuito del proceso. Eliminando el reactivo limitante de la corriente nos aseguramos que la reactivación no se produzca y evitamos otros problemas, sobre todo pensando en que queremos someter ésta corriente a altas temperaturas para su secado.

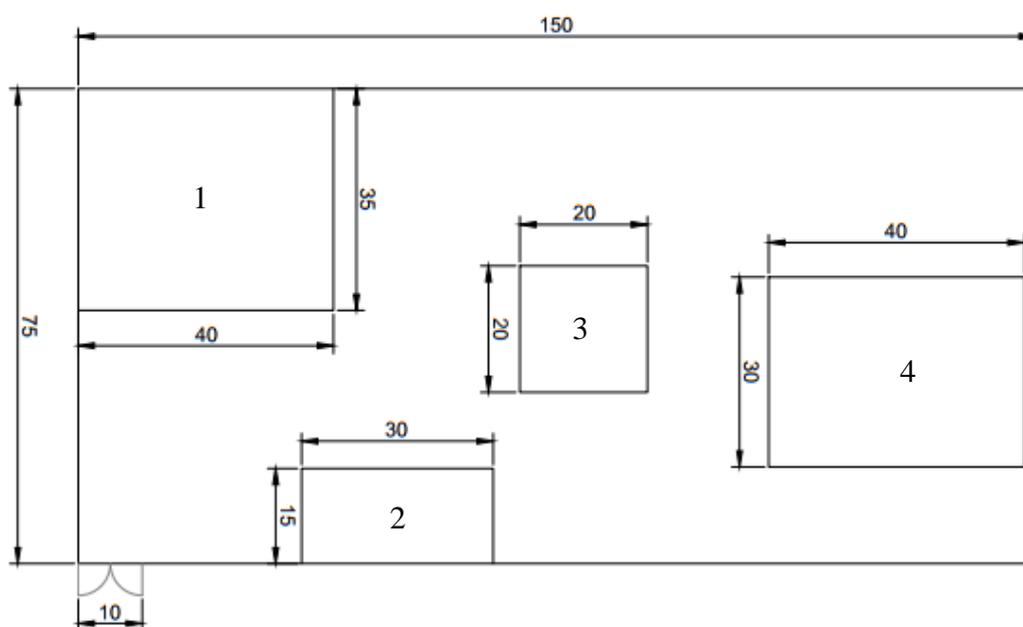
Por esa razón se ha implementado un filtro de malla, que extraerá de la corriente las partículas de titanio sin reaccionar mencionadas, con una capacidad para eliminar partículas de hasta 100  $\mu\text{m}$ .

## 9.5. Distribución en planta y ubicación

Definidos los equipos que se quiere instalar en la planta se puede establecer su distribución en planta, en general se utiliza para esto el método SLP (Systematic Layout

Planning), pero en este caso se han repartido las zonas del proceso en relación a su ubicación en el diagrama de flujo sin utilizar el sistema mencionado. Se han estimado las superficies dedicadas a cada una de las zonas en base a las dimensiones básicas de los equipos, sumando un espacio extra, ya que no se ha calculado el espacio de algunos equipos auxiliares y las conducciones.

En la Figura M.9.4 se puede ver una miniatura de la distribución en planta, obtenida a partir del Plano 2 que se muestra con más amplitud en el documento “Planos”. En esta figura se puede apreciar también que queda mucho espacio libre entre zonas, se ha hecho así teniendo en cuenta que se requerirá espacio para futuras optimizaciones de la planta, como la recuperación de reactivos para su reaprovechamiento en el proceso.



**Figura M.9.4:** *Miniatura de la distribución en planta.*

*Nota:* Donde: 1. Zona de recepción/almacenamiento de reactivos líquidos, 2. Sistema de impulsión neumática, 3. Zona del reactor y sus equipos auxiliares, 4. Sistema de secado.

La planta se ha pensado como un “spin-off” de la Universitat Jaume I, se situará en una de las parcelas vacías del área urbanizada del Espaitec. Son parcelas de gran superficie con una altura máxima construible de hasta 20 m, por lo que se podría construir una nave lo bastante alta para albergar el sistema de secado por atomización sin problemas. En la Figura M.9.5 se muestra una imagen de la ubicación de dichas parcelas, apareciendo remarcada la parcela elegida.



**Figura M.9.5:** Ubicación de la parcela.

La parcela seleccionada tiene una superficie total de  $900 \text{ m}^2$ , además, se ha estimado que la nave industrial a construir tendrá una superficie de  $450 \text{ m}^2$ . La compra de la parcela será por la totalidad de su superficie, para disponer de espacio en caso de necesitar una ampliación de cara al futuro.

## 10. Planificación

Para realizar el proyecto correctamente y en el plazo establecido se tiene que realizar la planificación de todas las tareas que se tienen que llevar a cabo, estimando su duración. Para la estimación de la duración de las actividades y la relación entre ellas se utiliza el diagrama de Gantt, que consiste en realizar un diagrama de barras para visualizar el cronograma del proyecto.

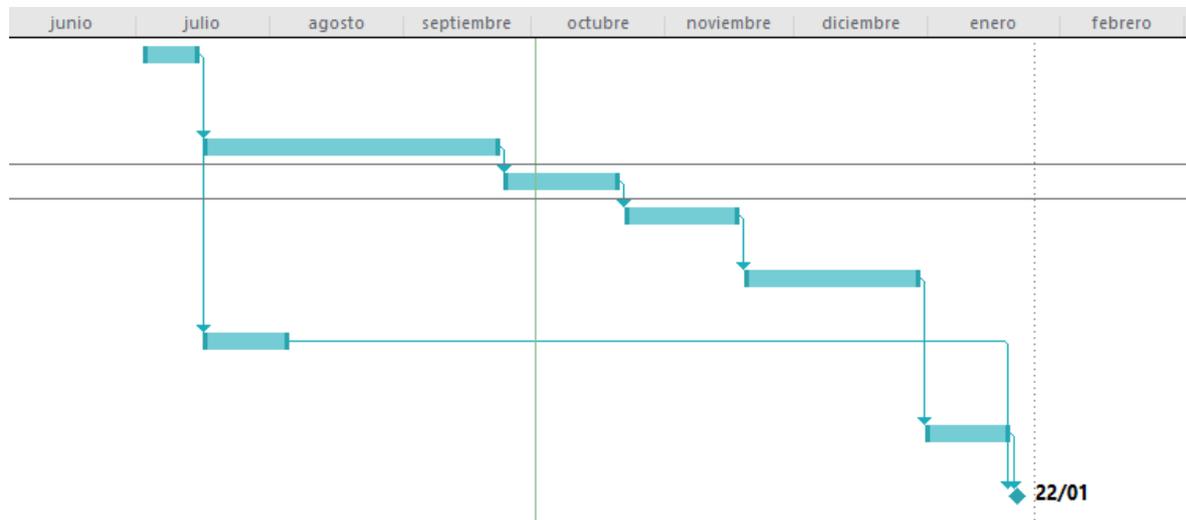
En la Tabla M.10.1 se muestran las actividades previstas, sus duraciones y su relación con las actividades predecesoras.

**Tabla M.10.1:** *Actividades y su duración en el tiempo.*

	Actividad	Duración (días)	Inicio	Fin	Actividad predecesora
A	Compra de la parcela y alquiler de oficina	10	03/07/24	14/07/24	-
B	Obras de construcción de la nave industrial	50	17/07/24	22/09/24	A
C	Compra de equipos	20	25/09/24	20/10/24	B
D	Instalación de equipos	20	23/10/24	17/11/24	C
E	Conexión entre equipos y pruebas	30	20/11/24	29/12/24	D
F	Compra de muebles y adecuación de las oficina	15	17/07/24	04/08/24	A
G	Formación de técnicos	15	01/01/25	19/01/25	E
H	Puesta en marcha	-	22/01/25	-	G;F

Los plazos asignados a cada una de las actividades son duraciones aproximadas, esto se debe a que cabe la posibilidad de que ocurran imprevistos en el desarrollo del proyecto que afecten a su duración. Se prevé que el proyecto tenga una duración de 160 días con jornadas de trabajo de 8h cinco días a la semana, el inicio del proyecto tendría lugar el lunes 3 de julio de 2024 y finalizaría el 22 de enero de 2025, día en el que se iniciaría la puesta en marcha señalando el inicio de la actividad.

En la Figura M.10.1 se muestra el diagrama de Gantt realizado para el cronograma previsto de este proyecto.



**Figura M.10.2:** *Cronograma del proyecto.*

## **11. 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”, tiene por objeto establecer los requisitos formales de carácter general con que deben redactarse los proyectos de productos, obras, edificios, instalaciones y servicios. El desarrollo de los aspectos formales indicados en esta norma depende del tipo de Proyecto de que se trate y de su destino.

Según esta norma el orden de prioridad entre los documentos que constituyen el presente proyecto técnico es el siguiente:

1. Índice General.
  2. Memoria.
  3. Anexos.
  4. Planos.
  5. Pliego de condiciones.
  6. Estado de mediciones.
  7. Presupuesto.
-

## 12. Viabilidad económica

Los cálculos relacionados con la viabilidad económica se muestran todos en el “Anexo 9”. En este apartado se comentarán las conclusiones obtenidas de los resultados de dichos cálculos, mostrados en la Tabla M.12.1.

**Tabla M.12.1:** *Resumen de los resultados de la Viabilidad Económica.*

Concepto	Valor
Valor Actual Neto (VAN)	342.702,79 €
Tasa Interna de Rentabilidad (TIR)	17,79 %
Periodo de Retorno (PR)	0,4477 años

### 12.1. Análisis de los resultados del estudio económico

Como se ha comentado en el alcance, la extensión de este proyecto se ha centrado en el diseño de los equipos principales, por lo que no se ha podido valorar los costes completos de la planta y su explotación, no se han podido incluir las bombas de impulsión ni se ha estudiado la recirculación de reactivos en la planta. Por esa razón, la inversión inicial calculada es menor de la que en realidad sería necesaria y los costes directos de la planta también son mucho menores de lo que se esperaría.

Aun así, los resultados de la viabilidad económica son reseñables. Que el valor del TIR señale que el proyecto será muy rentable a pesar de que no se han contemplado los gastos a pies juntillas y de haber seleccionado un precio bajo de venta para el complejo dentro del posible mercado, podría indicar que se podría de mantener la rentabilidad del proyecto de cara a una optimización. Existiendo la posibilidad de aumentar el precio de venta del complejo esto permitiría asumir los costes de una mejora del proceso con relativa facilidad.

## 13. Conclusión

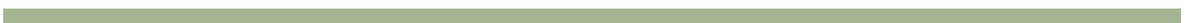
A pesar de que la escasez de información de partida ha limitado mucho las opciones de diseño para los procesos estudiados, se ha conseguido diseñar una secuencia de procesos que permiten la obtención del complejo en forma de polvo. Dado que dichos diseños se han tenido que limitar a su funcionamiento general debido a la limitación en la extensión del proyecto, se insiste en la necesidad de realizar ajustes a este proyecto de cara a su implementación. Un mejor estudio sobre la reacción permitiría el diseño de un reactor y un sistema de refrigeración lo suficientemente refinados, pudiendo operar a mayor temperatura manteniendo la reacción estable, consiguiendo un mayor grado de conversión y, por tanto, se obtendría una mejor producción reduciendo el desperdicio de reactivos. Además, un estudio sobre el comportamiento del complejo y la caracterización de sus propiedades permitirían la optimización del diseño del secadero por atomización; tener un valor exacto y real del calor específico del complejo permitiría realizar un diseño de la cámara de secado más fiable, además, considerando que lo más probable es que el valor del calor específico sea más alto del estimado, el calor necesario para conseguir el secado también aumentará.

Por otro lado, debido a la limitación de la extensión en este proyecto no se ha podido diseñar nada en relación a la recuperación de reactivos, por ello, se quiere valorar las opciones pertinentes siguiendo los principios de química verde expuestos al inicio de la memoria. Se hace indispensable plantear el diseño de un proceso para la recuperación del peróxido de hidrógeno evaporado en la cámara de secado, se trata del reactivo utilizado en exceso y su recirculación al sistema permitiría volver a aprovecharlo en la reacción; para conseguir concentrarlo al porcentaje requerido para su uso en la reacción se podría aprovechar el agua extraída de la columna de rectificación. Además, implicaría un ahorro significativo en compra de materias primas reduciendo los costes de operación. Por otro lado, también podría plantearse la recuperación del amoníaco extraído junto con el agua, pero al ser un caudal tan pequeño el que queda sin reaccionar es posible no merezca la pena la inversión, en ese caso, la instalación de un filtro de carbón activado permitiría su eliminación.

Finalmente, después de desarrollar este proyecto se puede decir que el estudio de este proceso y este complejo tiene mucho trabajo por delante, con unos resultados bastante interesantes para la industria.

---

## 3. ANEXOS





## ÍNDICE

<b>ANEXO 1: DATOS Y CÁLCULOS INICIALES .....</b>	<b>7</b>
1.1. TABLAS DE PROPIEDADES .....	7
1.2. CÁLCULO DE LA ENTALPÍA DE LA REACCIÓN .....	8
1.3. CÁLCULO DEL PORCENTAJE DE MOLES DE NH <sub>3</sub> EN UNA DISOLUCIÓN ACUOSA .....	8
1.4. JUSTIFICACIÓN DEL CALOR ESPECÍFICO DEL COMPLEJO .....	10
1.5. TABLA DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL AGUA .....	11
<b>ANEXO 2: DIAGRAMA DE FLUJO DE LA PLANTA .....</b>	<b>12</b>
<b>ANEXO 3: DISEÑO DEL REACTOR.....</b>	<b>13</b>
3.1. ELECCIÓN DEL REACTOR .....	13
3.1.1. Concentraciones de operación .....	13
3.2. CAUDAL VOLUMÉTRICO.....	15
3.3. BALANCE DE ENERGÍA Y GRADO DE CONVERSIÓN.....	17
3.4. BALANCE DE MATERIA .....	18
3.4.1. El experimento y sus resultados .....	19
3.5. RESOLUCIÓN DEL BALANCE DE MATERIA.....	26
3.6. DIMENSIONES DEL REACTOR.....	27
3.7. TIEMPO DE RESIDENCIA EN EL REACTOR .....	28
3.8. OPCIONES DE AGITACIÓN .....	28
3.8.1. Agitación de la reacción.....	30
3.9. CARACTERIZACIÓN DE LAS CORRIENTES DE ENTRADA Y SALIDA DEL REACTOR .....	34
<b>ANEXO 4: SISTEMA DE IMPULSIÓN NEUMÁTICA.....</b>	<b>36</b>
4.1. MODOS DE OPERACIÓN .....	36
4.2. DISEÑO DEL SISTEMA DE IMPULSIÓN NEUMÁTICA.....	37
4.2.1. Consideraciones iniciales para los cálculos .....	38
4.2.2. Ratio de carga de masa .....	39
4.2.3. Velocidad terminal de una sola partícula .....	40
4.2.4. Velocidad media de las partículas .....	41
4.2.5. Coeficiente de pérdida de presión adicional, $\lambda_z$ .....	41
4.2.6. Estimación de la pérdida de presión .....	43
4.2.7. Válvula de alimentación del polvo .....	48
<b>ANEXO 5: SISTEMA DE SECADO .....</b>	<b>50</b>
5.1. DISCUSIÓN DE OPCIONES .....	50
5.1.1. Liofilización.....	50
5.1.2. Secado por atomización .....	51
5.2. PROCESO DE SECADO SELECCIONADO .....	53
5.3. DISEÑO DEL SISTEMA DE SECADO .....	53

5.3.1. Condiciones iniciales del sistema.....	54
5.3.2. Columna de rectificación .....	56
5.3.4. Balances a la cámara de secado .....	67
5.3.3. Dimensionamiento de la cámara de secado .....	77
5.4. DIAGRAMA FINAL DEL SISTEMA DE SECADO .....	79
<b>ANEXO 6: SISTEMAS AUXILIARES AL REACTOR .....</b>	<b>80</b>
6.1. TANQUE DE MEZCLADO .....	80
6.2. SISTEMA DE AIREACIÓN DEL REACTOR .....	80
6.3. FILTRADO DEL TITANIO PRESENTE EN LA CORRIENTE DE SALIDA DEL REACTOR .....	81
<b>ANEXO 7: CATÁLOGOS DE EQUIPOS .....</b>	<b>82</b>
7.1. REACTOR .....	82
7.2. SISTEMA DE IMPULSIÓN NEUMÁTICA .....	83
7.2.1 Alimentación del polvo.....	83
7.3. SISTEMA DE SECADO.....	83
7.3.1. Columna de rectificación .....	83
7.3.2. Sistema de secado por atomización.....	84
7.4. SISTEMAS AUXILIARES.....	85
7.4.1. Tanque de mezclado .....	85
7.4.2. Ciclón para la recuperación de titanio en la aireación del reactor.....	86
7.4.3. Filtro para eliminar el titanio de la corriente de salida del reactor.....	87
<b>ANEXO 8: FICHAS DE SEGURIDAD DE REACTIVOS .....</b>	<b>89</b>
8.1. TITANIO .....	89
8.2. DISOLUCIÓN DE PERÓXIDO DE HIDRÓGENO AL 35% .....	90
8.3. DISOLUCIÓN DE AMONÍACO AL 28-30% .....	91
8.4. ÁCIDO GLICÓLICO.....	92
8.5. NITRÓGENO .....	93
<b>ANEXO 9: VIABILIDAD ECONÓMICA .....</b>	<b>94</b>
9.1. RESUMEN DEL PRESUPUESTO .....	94
9.2. PRESUPUESTO DE EXPLOTACIÓN .....	95
9.2.1. Gastos directos .....	95
9.2.2. Amortización .....	97
9.2.3. Gastos indirectos.....	97
9.2.4. Ingresos .....	98
9.2.5. Beneficios .....	98
9.2.6. Flujo de caja.....	99
9.7. VALOR ACTUAL NETO (VAN).....	99
9.8. TASA INTERNA DE RENTABILIDAD (TIR).....	99

9.7. PERIODO DE RETORNO (PR) .....	100
9.8. RESULTADOS .....	100



## ANEXO 1: Datos y cálculos iniciales

En este anexo se explicarán los cálculos iniciales realizados, en los que se apoyarán cálculos posteriores para el diseño de la planta. Además, se han resumido en tablas algunas de las propiedades de las especies químicas.

### 1.1. Tablas de propiedades

En la Tabla A.1.1 se muestra un resumen de las propiedades físicas y, en la Tabla A.1.2 se muestran las propiedades termodinámicas utilizadas en los cálculos de las especies químicas.

**Tabla A.1.1:** Resumen de propiedades físicas de las especies químicas.

Especie	Peso molecular, PM (g/mol)	Densidad, $\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	34,02	1,13 (35% w/w)
Ti	47,87	4,50
H <sub>2</sub> O	18,02	1
NH <sub>3</sub>	17,03	0,90
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	76,05	-
CTI	977,31	-

**Tabla A.1.2:** Resumen de propiedades termodinámicas de las especies químicas.

Especie	Calor específico, Cp (J/K·mol)	Entalpía de formación, $\Delta H_f$ (kJ/mol)	Punto de ebullición, Peb (°C)
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	89,098	-187,778	150
H <sub>2</sub> O	75,43	-285,500	100
Ti	25,04	0	-
TiO <sub>2</sub>	-	-938,722	2500
NH <sub>3</sub>	71,30*	-67,200	-33,34
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	91,18	-666,500 ± 0.6	200

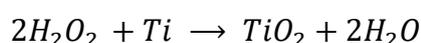
*Nota.* \* El calor específico del amoníaco se ha calculado en el Anexo 1, apartado 1.3. Los guiones que aparecen (-) indican que no se han encontrado esos datos de esas especies.

## 1.2. Cálculo de la entalpía de la reacción

La entalpía de la reacción se calcula restando a las entalpías de formación de los productos las entalpías de formación de los reactivos, teniendo en cuenta la estequiometría de la reacción (ecuación 1).

$$\Delta H_r^\circ = \sum(v_P \cdot \Delta H_{fP}^\circ) - \sum(v_R \cdot \Delta H_{fR}^\circ) \quad (\text{ec.1})$$

Debido a que no hay estudios de la cinética ni de la entalpía de la reacción, no se conoce la entalpía de formación del complejo de titanio. Por eso, se ha hecho una aproximación a partir de la reacción más energética entre los reactivos. En este caso, como la oxidación del titanio es la que tiene la mayor entalpía de reacción, se puede asumir que la mayor parte del calor desprendido será debido a la oxidación del titanio.



Por tanto, si sustituimos las entalpías de formación de los reactivos y los productos, la entalpía de la reacción es:

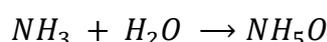
$$\begin{aligned} \Delta H_r^\circ &= [1 \cdot (-938,722) + 2 \cdot (-285,019)] - [2 \cdot (-187,778) + 1 \cdot 0] = \\ &= -1133,204 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

El valor de la entalpía de reacción calculado es más pequeño de lo esperado debido seguramente a que, en el cálculo, no se ha podido considerar la reacción paralela entre el amoníaco y el peróxido de hidrógeno; se ha comprobado experimentalmente que la reacción paralela ejerce una gran influencia sobre la reacción principal.

## 1.3. Cálculo del porcentaje de moles de NH<sub>3</sub> en una disolución acuosa

Este cálculo se ha realizado para justificar el valor del calor específico del amoníaco utilizado, ya que, dependiendo del porcentaje de moles de NH<sub>3</sub> en disolución y de la temperatura, éste cambia, como se indica en la Tabla A.1.3 realizada a partir de una ya existente.

Para este cálculo se han utilizado los datos del fabricante del amoníaco que se encontraba en el laboratorio del ITC, es decir, un amoníaco a un 28% en peso y un volumen total de 1L. Según la ficha técnica, el amoníaco en disolución acuosa toma la forma de:



**Tabla A.1.3:** Calor específico de las disoluciones de amoniaco en función de la temperatura y del % de moles.

% moles de NH <sub>3</sub>	Calor específico, cal./g·°C			
	2.4 °C	20.6 °C	41 °C	61 °C
0	1,010	1,000	0,995	1,000
10,5	0,980	0,995	1,060	1,020
20,9	0,960	0,990	1,030	
31,2	0,956	1,000		
41,4	0,985			

Nota: Adaptado de “PERRY. Manual del ingeniero químico”, de Liley, P. E., Reid, R. C., & Buck, E., 1993, p. 175, México, México: McGraw Hill.

El porcentaje de moles de amoniaco en la disolución puede calcularse a partir de la ecuación 2.

$$\% \text{ moles } NH_3 = \frac{\text{mol } NH_3}{\text{moles totales}} \cdot 100 = \frac{\text{mol } NH_3}{\text{mol } NH_3 + \text{mol } H_2O} \cdot 100 \quad (\text{ec.2})$$

A partir del volumen de la botella de la disolución de amoniaco, si lo multiplicamos por su densidad obtenemos los gramos totales de disolución.

$$1 \text{ L} \cdot \frac{0,9 \text{ g}}{\text{cm}^3} \cdot \frac{1 \text{ cm}^3}{0,001 \text{ L}} = 900 \text{ g disolución}$$

Con el porcentaje en peso pasamos de gramos de disolución a gramos de amoniaco y, dividiendo por el peso molecular del amoniaco, pasamos los gramos a moles:

$$900 \text{ g disolución} \cdot 0,28 \frac{\text{g } NH_3}{\text{g disolucion}} = 252 \text{ g } NH_3$$

$$252 \text{ g } NH_3 \cdot \frac{\text{mol } NH_3}{17,031 \text{ g } NH_3} = 14,79 \text{ mol } NH_3$$

Por otro lado, los gramos de agua se pueden obtener restando los gramos de amoniaco a los gramos totales de disolución. Dividiendo los gramos de agua entre su peso molecular se obtienen los moles de agua que hay en la disolución.

$$900 \text{ g disolución} - 252 \text{ g } NH_3 = 648 \text{ g } H_2O \cdot \frac{\text{mol } H_2O}{18,015 \text{ g } H_2O} = 35,97 \text{ mol } H_2O$$

Finalmente sustituyendo los moles de agua y los moles de amoníaco en la ecuación 1 se obtiene el porcentaje de moles de amoníaco en la disolución:

$$\% \text{ moles } NH_3 = \frac{14,79 \text{ mol } NH_3}{14,79 \text{ mol } NH_3 + 35,97 \text{ mol } H_2O} \cdot 100 = 29,14\%$$

Por tanto, con aproximadamente un 29% de moles de amoníaco en la disolución y tomando como referencia una temperatura en condiciones estándar ( $T=25^\circ\text{C}$ ), según la Tabla A.1.3, el calor específico de la disolución de amoníaco se podría considerar igual a 1 cal./g. $^\circ\text{C}$ .

#### **1.4. Justificación del calor específico del complejo**

Para los cálculos del balance de energía del sistema de secado es necesario la utilización del calor específico del sólido, que, en este caso corresponde con el complejo de titanio-ácido glicólico. Al no disponer de ese dato sobre el complejo ni haber podido realizar experimentos para determinar su valor de forma experimental, lo que se ha hecho es realizar una investigación de los valores de calor específico de otros complejos con un peso molecular parecido.

Se han investigado complejos de elementos de la misma línea de la tabla periódica que el titanio, como boro o níquel, y se han comparado los valores del calor específico de dichos complejos. El intervalo de los valores abarca desde los 700 kJ/kg. $^\circ\text{C}$  hasta los 950 kJ/kg. $^\circ\text{C}$ , por lo que para evitar estar en ninguno de los extremos se ha decidido emplear un valor de 800 kJ/kg. $^\circ\text{C}$  como valor para el calor específico del complejo.

Recalcar que sólo se han comparado los valores de tres complejos, ninguno de ellos de titanio, debido a que la información disponible es limitada. Por ello, sabemos que el valor escogido para los cálculos una estimación que se puede aproximar a la realidad por lo que supone un buen punto de partida.

### 1.5. Tabla de propiedades termodinámicas del agua

En la Figura A.1.1 se muestra una imagen de la tabla de propiedades termodinámicas del agua utilizada en los cálculos relativos al sistema de secado (Anexo 5).

**Thermodynamic Properties of Saturated Water and Steam**

**Table 1. Temperature Table**

*Symbols:*  $t$  temperature, °C.  
 $p$  saturation pressure, bars.  
 $v$  specific volume, cm<sup>3</sup>/g.  
 $h$  specific enthalpy, J/g.  
*Subscripts:*  $f$  saturated liquid.  
 $fg$  evaporation from saturated liquid to saturated vapour.  
 $g$  saturated vapour.

$t$	$p$	$v_f$	$v_g$	$h_f$	$h_{fg}$	$h_g$
0	-0.06107	1.0002	206288	-0.04	2500.8	2500.8
0.01	-0.06112	1.0002	206146	0.00	2500.8	2500.8
2	-0.07054	1.0001	179907	+8.39	2496.0	2496.0
4	-0.08129	1.0001	157258	16.80	2491.3	2491.3
6	-0.09346	1.0001	137768	25.21	2486.6	2486.6
8	-0.10721	1.0002	120956	33.61	2481.9	2481.9
10	-0.12271	1.0003	106422	42.00	2477.2	2477.2
12	-0.14015	1.0006	93829	50.38	2472.5	2472.5
14	-0.15974	1.0008	82894	58.75	2467.8	2467.8
16	-0.18170	1.0011	73380	67.13	2463.1	2463.1
18	-0.20626	1.0014	65084	75.49	2458.4	2458.4
20	-0.23368	1.0018	57836	83.86	2453.7	2453.7
22	-0.26424	1.0023	51491	92.23	2449.0	2449.0
24	-0.29824	1.0028	45925	100.59	2444.2	2444.2
26	-0.33600	1.0033	41034	108.95	2439.5	2439.5
28	-0.37785	1.0038	36727	117.31	2434.8	2434.8
30	-0.42418	1.0044	32929	125.67	2430.0	2430.0
32	-0.47536	1.0050	29573	134.03	2425.3	2425.3
34	-0.53182	1.0057	26601	142.38	2420.5	2420.5
36	-0.59401	1.0064	23967	150.74	2415.8	2415.8
38	-0.66240	1.0071	21628	159.09	2411.0	2411.0
40	-0.73750	1.0079	19546	167.45	2406.2	2406.2
42	-0.81984	1.0087	17691	175.81	2401.4	2401.4
44	-0.90999	1.0095	16035	184.17	2396.6	2396.6
46	-1.00855	1.0103	14556	192.53	2391.8	2391.8
48	-1.11615	1.0112	13232	200.90	2387.0	2387.0
50	-1.23347	1.0121	12045	209.26	2382.2	2382.2
52	-1.3612	1.0130	10979	217.62	2377.3	2377.3
54	-1.5001	1.0140	10021	225.99	2372.5	2372.5
56	-1.6510	1.0150	9157.8	234.35	2367.7	2367.7
58	-1.8146	1.0160	8379.9	242.72	2362.8	2362.8
60	-1.9919	1.0171	7677.6	251.09	2357.9	2357.9
62	-2.1817	1.0182	7042.8	259.46	2353.0	2353.0
64	-2.3940	1.0193	6468.2	267.83	2348.1	2348.1
66	-2.6148	1.0205	5947.3	276.21	2343.2	2343.2
68	-2.8561	1.0216	5474.7	284.59	2338.2	2338.2
70	-3.1160	1.0228	5045.3	292.97	2333.3	2333.3
72	-3.3957	1.0240	4654.7	301.35	2328.3	2328.3
74	-3.6962	1.0252	4299.1	309.74	2323.3	2323.3
76	-4.0189	1.0264	3974.8	318.12	2318.3	2318.3
78	-4.3650	1.0277	3678.8	326.52	2313.3	2313.3
80	-4.7359	1.0290	3408.3	334.91	2308.3	2308.3
82	-5.1328	1.0303	3160.9	343.31	2303.2	2303.2
84	-5.5573	1.0317	2934.3	351.71	2298.1	2298.1
86	-6.0107	1.0331	2726.6	360.11	2293.0	2293.0
88	-6.4948	1.0345	2536.0	368.52	2287.9	2287.9
90	-7.0109	1.0359	2360.9	376.94	2282.8	2282.8
92	-7.5608	1.0374	2199.9	385.36	2277.6	2277.6
94	-8.1461	1.0388	2051.8	393.78	2272.4	2272.4
96	-8.7686	1.0404	1915.2	402.20	2267.2	2267.2
98	-9.4301	1.0419	1789.3	410.63	2262.0	2262.0
100	-1.01325	1.0435	1673.0	419.06	2256.7	2256.7
105	1.2080	1.0474	1419.4	440.17	2243.5	2243.5
110	1.4326	1.0515	1210.1	461.32	2230.0	2230.0
115	1.6905	1.0558	1036.5	482.50	2216.4	2216.4
120	1.9853	1.0603	891.71	503.7	2202.5	2202.5
125	2.3209	1.0649	770.43	525.0	2188.5	2188.5
130	2.7012	1.0697	668.32	546.3	2174.2	2174.2
135	3.1305	1.0747	582.00	567.7	2159.7	2159.7
140	3.6136	1.0798	508.66	589.1	2144.8	2144.8
145	4.1549	1.0851	446.12	610.6	2129.8	2129.8
150	4.7597	1.0906	392.57	632.2	2114.4	2114.4
155	5.4331	1.0962	346.55	653.8	2098.7	2098.7
160	6.1805	1.1021	306.85	675.5	2082.7	2082.7
165	7.0076	1.1081	272.48	697.3	2066.3	2066.3
170	7.9203	1.1144	242.62	719.1	2049.6	2049.6
175	8.9247	1.1208	216.60	741.1	2032.4	2032.4
180	10.0271	1.1275	193.85	763.1	2014.9	2014.9
185	11.2340	1.1344	173.90	785.3	1997.0	1997.0
190	12.5523	1.1415	156.35	807.5	1978.6	1978.6
195	13.9888	1.1489	140.88	829.9	1959.8	1959.8
200	15.5506	1.1565	127.19	852.4	1940.4	1940.4
205	17.245	1.1644	115.05	875.0	1920.6	1920.6
210	19.080	1.1726	104.27	897.7	1900.2	1900.2
215	21.063	1.1812	94.65	920.6	1879.3	1879.3
220	23.201	1.1900	86.06	943.7	1857.8	1857.8
225	25.504	1.1992	78.37	966.9	1835.6	1835.6
230	27.979	1.2087	71.47	990.3	1812.9	1812.9
235	30.635	1.2187	65.27	1013.8	1789.5	1789.5
240	33.480	1.2291	59.67	1037.6	1765.5	1765.5
245	36.524	1.2399	54.62	1061.6	1740.7	1740.7
250	39.776	1.2512	50.06	1085.8	1715.1	1715.1
255	43.245	1.2631	45.91	1110.2	1688.7	1688.7
260	46.940	1.2755	42.15	1134.9	1661.5	1661.5
265	50.872	1.2884	38.72	1159.9	1633.3	1633.3
270	55.051	1.3023	35.60	1185.2	1604.2	1604.2
275	59.487	1.3164	32.74	1210.8	1574.0	1574.0
280	64.192	1.3321	30.13	1236.8	1542.8	1542.8
285	69.175	1.3481	27.74	1263.1	1510.3	1510.3
290	74.449	1.3655	25.54	1289.9	1476.4	1476.4
295	80.025	1.3839	23.51	1317.1	1441.2	1441.2
300	85.917	1.4036	21.64	1344.9	1404.3	1404.3
305	92.14	1.4247	19.92	1373.2	1365.8	1365.8
310	98.70	1.4475	18.32	1402.1	1325.2	1325.2
315	105.61	1.4722	16.83	1431.7	1282.4	1282.4
320	112.90	1.4992	15.45	1462.2	1237.5	1237.5
325	120.57	1.5289	14.17	1493.5	1190.0	1190.0
330	128.65	1.5620	12.97	1526.0	1139.5	1139.5
335	137.14	1.5980	11.84	1559.7	1085.5	1085.5
340	146.08	1.6390	10.78	1594.8	1027.2	1027.2
345	155.48	1.686	9.771	1631.8	963.6	963.6
350	165.37	1.741	8.805	1671.2	893.0	893.0
355	175.77	1.807	7.869	1713.9	813.1	813.1
360	186.74	1.894	6.943	1761.5	719.6	719.6
365	198.30	2.014	5.995	1817.5	613.4	613.4
370	210.52	2.225	4.932	1892.4	438.4	438.4
374.15	221.2	3.17	3.17	2004	0	2004

Figura A.1.1: Tabla de propiedades termodinámicas del agua.

La tabla se ha obtenido de los apuntes de la asignatura EQ1028- Operaciones de Separación II.

## ANEXO 2: Diagrama de flujo de la planta

La Figura A.2.1 muestra una ampliación del diagrama de flujo mostrado en la memoria para su mejor visualización.

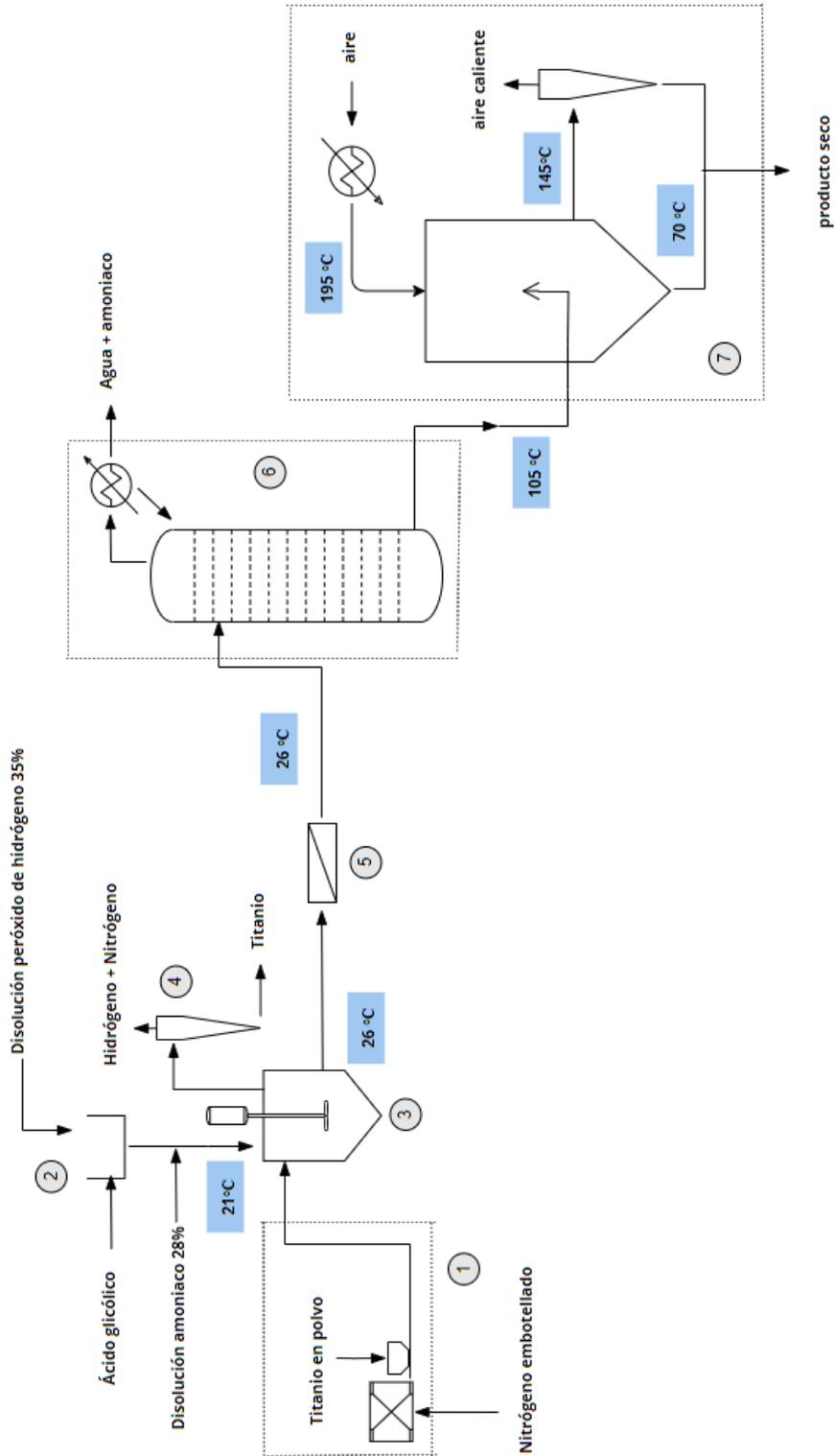


Figura A.2.1: Diagrama de flujo de la planta.

## **ANEXO 3: Diseño del reactor**

En este anexo se muestran todos los cálculos relacionados con el reactor y su dimensionamiento, se han realizado con el objetivo de producir 1000 kg de complejo mensuales.

### **3.1. Elección del reactor**

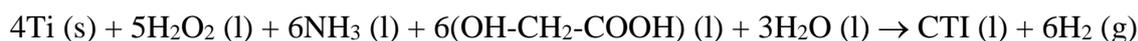
A priori, de los tres reactores descritos en el análisis de soluciones de la memoria, el reactor ideal para producir un producto de química fina con una demanda relativamente baja, sería un RDTA, pero al querer implementar una etapa de secado para la obtención del complejo en forma de polvo, habiendo seleccionado el secadero por atomización para conseguirlo, un reactor que operara en continuo sería preferible.

De los dos reactores continuos mencionados en la memoria, el reactor RFP sería la opción preferible ya que, su forma, un tubo cilíndrico hueco, permite un control muy fino de la refrigeración porque se puede encamisar toda su superficie; se podría operar a altas concentraciones de reactivos, manteniendo la reacción por debajo de la temperatura a la que se dispara la generación de hidrógeno. Sin embargo, precisamente por la naturaleza de la reacción, para poder trabajar a concentraciones elevadas de reactivos, sería necesario diseñar un sistema robusto de refrigeración, lo cual no es posible dado que no poseemos un conocimiento profundo de la reacción, como se ha mencionado previamente. Por ello, se ha descartado este reactor por ser inviable el cálculo de sus ecuaciones de diseño con los datos disponibles.

Por tanto, la única opción viable de las tres barajadas es el reactor RCTA. Para mayor seguridad y dada la imposibilidad de implementar un sistema de refrigeración con seguridad, el diseño del reactor se hará a partir de los datos de uno de los dos experimentos de los que se obtuvieron datos fiables; el experimento a menor concentración de titanio, que no superaba los 30°C. De esta forma, se mantendría la reacción por debajo de la temperatura a la que se ha comprobado que la generación de gases podría suponer un peligro para la operación.

#### **3.1.1. Concentraciones de operación**

Las concentraciones de operación se han fijado a partir de las cantidades empleadas en el experimento mencionado anteriormente. Para realizar dicho experimento se trabajó en condiciones adiabáticas y en base a la reacción ajustada:



Donde, CTI es el complejo de titanio producido, de fórmula química:



En el experimento se emplearon 100 mL de peróxido de hidrógeno (35% w/w), 6 mL de amoníaco (28% - 30%), 0,24 g de titanio y, a partir de la relación estequiométrica, se calculó la cantidad de ácido glicólico necesaria. Por otro lado, el agua que interviene en la reacción se obtiene directamente de las disoluciones de amoníaco y peróxido de hidrógeno.

El volumen total de disolución utilizada en el experimento es:

$$V_t = V_{dis.H_2O_2} + V_{dis.NH_3} = 100 + 6 = 106 \text{ mL} = 1,06 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$$

Para calcular las concentraciones se tiene que dividir la cantidad de moles de cada reactivo entre el volumen total de líquido. A continuación, se detallan los cálculos empleados para obtener las distintas concentraciones de cada uno de los reactivos.

Empezando por el peróxido de hidrógeno, se debe tener en cuenta que se trataba de una disolución al 35% en peso, por lo que para obtener el número de moles de peróxido presentes tendríamos que:

$$100 \text{ mL dis. H}_2\text{O}_2 \cdot 1,13 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 113 \text{ g dis. H}_2\text{O}_2$$

$$113 \text{ g dis. H}_2\text{O}_2 \cdot \frac{35 \text{ g H}_2\text{O}_2}{100 \text{ g dis. H}_2\text{O}_2} = 39,55 \text{ g H}_2\text{O}_2 \cdot \frac{\text{mol H}_2\text{O}_2}{34,02 \text{ g H}_2\text{O}_2} = 1,163 \text{ mol H}_2\text{O}_2$$

$$N_{\text{H}_2\text{O}_2} = 1,163 \cdot 10^{-3} \text{ kmol H}_2\text{O}_2$$

En el caso del amoníaco, al tratarse de una disolución al 28% en peso, tendríamos que:

$$6 \text{ mL dis. NH}_3 \cdot 0,9 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3} = 5,4 \text{ g dis. NH}_3$$

$$5,4 \text{ g dis. NH}_3 \cdot \frac{28 \text{ g NH}_3}{100 \text{ g dis. NH}_3} = 1,512 \text{ g NH}_3 \cdot \frac{\text{mol NH}_3}{17,03 \text{ g NH}_3} = 8,879 \cdot 10^{-2} \text{ mol NH}_3$$

$$N_{\text{NH}_3} = 8,879 \cdot 10^{-5} \text{ kmol NH}_3$$

Por tanto, tendríamos que la cantidad de agua presente en la mezcla es la suma del agua presente en la disolución de peróxido de hidrógeno y la presente en la disolución de amoníaco.

$$m_{H_2O} = (113 - 39,55) + (5,4 - 1,512) = 77,338 \text{ g } H_2O$$

$$77,338 \text{ g } H_2O \cdot \frac{\text{mol } H_2O}{18,02 \text{ g } H_2O} = 4,292 \text{ mol } H_2O$$

$$N_{H_2O} = 4,292 \cdot 10^{-3} \text{ kmol } H_2O$$

Como se añadieron 0,24 g de titanio, a partir de su peso molecular, se obtiene que había presentes  $5,014 \cdot 10^{-6}$  kmol de titanio. Según la relación estequiométrica entre el titanio y el ácido glicólico, para reaccionar con dicha cantidad de titanio hacen falta  $7,521 \cdot 10^{-6}$  kmol de ácido glicólico.

Finalmente, mediante la ecuación 3, se puede calcular la concentración de reactivo en el volumen total de disolución. Como ejemplo, se muestra el cálculo de la concentración de peróxido de hidrógeno.

$$c_j = \frac{N_j}{V_t} \quad (\text{kmol}/\text{m}^3) \quad (\text{ec.3})$$

$$c_{H_2O_2} = \frac{N_{H_2O_2}}{V_t} = \frac{1,163 \cdot 10^{-3}}{1,06 \cdot 10^{-4}} = 10,972 \text{ kmol } H_2O_2/\text{m}^3$$

En la Tabla A.3.1 se presentan, a modo de resumen, los resultados del cálculo de las concentraciones de reactivos. En la tabla también aparece una columna denominada  $A_j$  que distingue mediante un subíndice numérico los reactivos, en el caso del titanio también se le puede asociar el subíndice k, que indica que es el reactivo limitante.

**Tabla A.3.1:** Resumen del cálculo de las concentraciones de operación.

Especie química	$A_j$	$N_j$ (kmol)	$c_j$ (kmol/m <sup>3</sup> )
Ti	$A_1=A_k$	$5,014 \cdot 10^{-6}$	$4,730 \cdot 10^{-2}$
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	$A_2$	$1,163 \cdot 10^{-3}$	10,972
NH <sub>3</sub>	$A_3$	$8,879 \cdot 10^{-5}$	0,838
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	$A_4$	$7,521 \cdot 10^{-6}$	$7,095 \cdot 10^{-2}$
H <sub>2</sub> O	$A_5$	$4,292 \cdot 10^{-3}$	40,491

### 3.2. Caudal volumétrico

Con el fin de resolver más adelante el balance de materia al reactor, que permitirá calcular su volumen, es necesario conocer previamente el caudal volumétrico de entrada al reactor.

$$Q_V = \frac{F_j}{c_j} m^3/h \quad (\text{ec.4})$$

Para el cálculo del caudal se partirá de los 1000 kg de complejo mensuales que se desea producir, este dato nos permitirá relacionar la cantidad de producto que deseamos obtener con la cantidad de reactivos que deberemos introducir en el reactor para conseguir dicha producción. Teniendo en cuenta que se pretende diseñar un reactor que opere en modo continuo, la producción se mantendría las 24 horas del día, los 7 días de la semana dando por tanto un caudal molar ( $F_j$ ) de:

$$1000 \frac{kg \text{ CTI}}{mes} \cdot \frac{1 \text{ mes}}{4 \text{ semanas}} \cdot \frac{1 \text{ semana}}{7 \text{ días}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{24 \text{ h}} = 1,488 \frac{kg \text{ CTI}}{h}$$

$$1,488 \frac{kg \text{ CTI}}{h} \cdot \frac{1 \text{ kmol CTI}}{977.31 \text{ kg CTI}} = 1,523 \cdot 10^{-3} \frac{kmol \text{ CTI}}{h}$$

Si tomamos como base de cálculo 1 hora, tendremos que en una hora se producen 1,523 moles de CTI y, según la estequiometría, por cada mol producido de CTI se consumen 4 moles de titanio. A partir de esta relación obtenemos que en una hora se consumirán teóricamente 6,092 moles de titanio. Como obtener el caudal volumétrico a partir de un reactivo sólido no tiene mucho sentido físico, se ha decidido calcular la cantidad de peróxido de hidrógeno (reactivo líquido en exceso) que reacciona con esos moles de titanio.

En el experimento, para  $5,014 \cdot 10^{-3}$  moles de titanio se necesitaban (según la estequiometría de la reacción)  $6,268 \cdot 10^{-3}$  moles de peróxido, pero se introdujeron en la mezcla 1,163 mol para trabajar en exceso. Mediante una regla de tres, podemos calcular los moles a introducir en el reactor para conseguir la misma proporción de exceso de peróxido que en el experimento.

$$\frac{6,092 \text{ mol Ti}}{5,014 \cdot 10^{-3} \text{ mol Ti}} = \frac{x}{1,163 \text{ mol H}_2\text{O}_2} \rightarrow x = 1413,043 \text{ mol H}_2\text{O}_2$$

Por tanto, se necesitarán 1,413 kmol de peróxido de hidrógeno a la hora para operar en exceso de peróxido de hidrógeno en el reactor. Sustituyendo este dato y el valor de la concentración de operación para el peróxido de hidrógeno en la ecuación 4 tenemos que:

$$Q_V = \frac{1,413}{10,972} = 0,1288 \approx 0,129 \text{ m}^3/h$$

### 3.3. Balance de energía y grado de conversión

Otro dato necesario para la resolución del balance de materia es el grado de conversión ( $X$ ), que puede calcularse a partir del balance de energía. La ecuación del balance de energía más habitual en un RCTA con una reacción química es:

$$T - T_0 - J \cdot X = Q \quad (\text{ec.5})$$

En este caso es, además, un reactor sin intercambiador de calor y suponemos que bien aislado, por lo trabajaríamos con un reactor adiabático para el cual el parámetro  $Q$ , sería nulo.

$$T - T_0 - J \cdot X = 0 \quad (\text{ec.6})$$

De esta forma, se obtiene que  $X$  es una función lineal de  $T$ .

$$X = \frac{-T_0}{J} + \frac{1}{J} \cdot T \quad (\text{ec.7})$$

Reordenando la ecuación 7, el grado de conversión quedaría como:

$$X = \frac{T - T_0}{J} \quad (\text{ec.8})$$

El parámetro  $J$  se define mediante la ecuación 9.

$$J = \frac{-\Delta H_k^\circ}{\sum \theta_j C p_j} \quad (\text{ec.9})$$

Para calcular el término del denominador de la ecuación 9, se emplea la ecuación 10:

$$\sum \theta_j C p_j = \sum \frac{N_{j0}}{N_{k0}} \cdot C p_j \quad (\text{kJ/kmol } A_k \cdot K) \quad (\text{ec.10})$$

$$\begin{aligned} \sum \theta_j C p_j &= \frac{N_{10}}{N_{k0}} \cdot C p_1 + \frac{N_{20}}{N_{k0}} \cdot C p_2 + \frac{N_{30}}{N_{k0}} \cdot C p_3 + \frac{N_{40}}{N_{k0}} \cdot C p_4 + \frac{N_{50}}{N_{k0}} \cdot C p_5 = \\ &= 1 \cdot (25,04) + \frac{1,163 \cdot 10^{-3}}{5,014 \cdot 10^{-6}} \cdot (89,098) + \frac{8,879 \cdot 10^{-5}}{5,014 \cdot 10^{-6}} \cdot (71,30) + \frac{7,521 \cdot 10^{-6}}{5,014 \cdot 10^{-6}} \\ &\quad \cdot (91,18) + \frac{7,521 \cdot 10^{-6}}{5,014 \cdot 10^{-6}} \cdot (91,18) = \\ &= 86.659,099 \text{ kJ/kmol } A_k \cdot K = 86,659 \text{ kJ/mol } A_k \cdot K \end{aligned}$$

Por tanto, el parámetro  $J$  sería:

$$J = \frac{1133,204}{86,659} = 13,077 \text{ K}$$

Y el balance de energía (ecuación 8) quedaría como:

$$X = \frac{T - T_0}{13,077}$$

Finalmente, si sustituimos la temperatura inicial y la final de la reacción, 23,5°C y 26°C respectivamente, obtenidas a partir de los datos del experimento, podemos calcular el grado de conversión teórico:

$$X = \frac{299 - 296,5}{13,077} = 0,1912 \approx 0,19$$

Aunque la temperatura inicial de la mezcla era de 21°C, como se puede ver en las tablas que recogen los datos del experimento en el siguiente apartado, se ha tomado como temperatura inicial los 23,5°C porque es el punto en el que presumimos que realmente empieza a producirse la reacción de formación del complejo; es la temperatura a la que se estabiliza temporalmente la reacción después del primer escalón de temperatura, que en principio se corresponde con una reacción inicial entre el amoníaco y el peróxido, y por tanto, no formaría parte del calor desprendido en la reacción de formación del complejo.

### 3.4. Balance de materia

El balance de materia general para cualquier sistema tiene la estructura:

$$\text{Entrada} - \text{salida} + \text{Generación} = \text{Acumulación}$$

Como el reactor a diseñar es un RCTA, que tiene como característica el operar de manera continua, los caudales de salida y de entrada son iguales. Por eso en este caso el término de la acumulación es nulo.

$$\text{Salida} - \text{Entrada} = \text{Generación}$$

De esta forma, el balance de materia se puede describir como:

$$F_j - F_{j0} = \mathfrak{R}_j \cdot V \quad (\text{ec.11})$$

$\mathfrak{R}_j$  se define como:

$$\mathfrak{R}_j = \frac{dc_j}{dt} = v_j \cdot r \quad (\text{ec.12})$$

Por lo que finalmente tomará la forma de la ecuación 13:

$$F_j - F_{j0} = \frac{dc_j}{dt} \cdot V \quad (\text{ec.13})$$

El problema en la resolución de esta ecuación viene dado por lo comentado en la memoria, no hay estudios sobre la cinética de la reacción por lo que no hay establecida una ecuación para la velocidad de reacción ( $r$ ). A fin de poder realizar el cálculo del balance, se ha tratado de obtener una ecuación experimental para el avance de la reacción a partir de los datos obtenidos en un experimento.

### 3.4.1. El experimento y sus resultados

En este experimento se decidió reducir la escala para ver mejor lo que sucedía en la reacción debido a que, en los otros experimentos realizados no se apreciaba bien el avance de la reacción, también se decidió añadir un tampón térmico para ser capaces de recoger datos sobre el calor de la reacción de forma más precisa. Se utilizaron las cantidades de reactivos mencionadas en el cálculo de las concentraciones de operación.

En la Tabla A.3.2 se muestran los valores experimentales obtenidos de tiempo y temperatura de la reacción y del tampón térmico. La columna de datos referida como temperatura cristal, hace referencia a la temperatura del agua del tampón trasladada a la medida de un termómetro de cristal. Esta columna se hace necesaria porque se utilizaron dos termómetros distintos para tomar la temperatura de la mezcla reactante (termómetro de cristal) y la temperatura del tampón térmico (termómetro de metal), y entre las medidas que toma uno y otro hay  $0,5^{\circ}\text{C}$  de diferencia. Al existir esta diferencia, se necesita trasladar los datos de un termómetro a otro para poder comparar las temperaturas, se igualan las escalas.

**Tabla A.3.2:** Datos experimentales de tiempo y temperatura de la mezcla reactante y del tampón térmico.

Mezcla reactante		Tampón térmico		
Tiempo(s)	Temperatura( $^{\circ}\text{C}$ )	Tiempo(s)	Temperatura( $^{\circ}\text{C}$ )	Temperatura Cristal( $^{\circ}\text{C}$ )
0	21,0	0	22,0	21,5
20	25,0	570	22,5	22,0
180	24,0	720	22,7	22,2
570	23,5	930	22,9	22,4
990	23,5	990	23,0	22,5
2760	24,0	1260	23,3	22,8
5070	25,0	1500	23,4	22,9

Mezcla reactante		Tampón térmico		
Tiempo(s)	Temperatura(°C)	Tiempo(s)	Temperatura(°C)	Temperatura Cristal(°C)
9270	26,0	1620	23,5	23,0
		1890	23,6	23,1
		1980	23,7	23,2
		2220	23,8	23,3
		2280	24,0	23,5
		2760	24,4	23,9
		3840	24,8	24,3
		4050	24,9	24,4
		4230	25,0	24,5
		4410	25,1	24,6
		4500	25,2	24,7
		4680	25,3	24,8
		4950	25,4	24,9
		5280	25,5	25,0
		5460	25,6	25,1
		5670	25,7	25,2
		6120	25,8	25,3
		6660	25,9	25,4
		7800	26,1	25,6
		8970	26,2	25,7
		9780	26,4	25,9
		9870	26,5	26,0

Para facilitar los cálculos, se han tomado los datos de tiempo y temperatura de la mezcla reactante, y se ha buscado en los datos del tampón térmico valores de tiempo que fueran idénticos a los de la reacción. Algunos de los datos de tiempo sí que coincidían entre la mezcla reactante y el tampón térmico, pero otros no, por ello, como se conocen los valores

de tiempo de la mezcla reactante, se ha realizado una interpolación en las temperaturas del tampón térmico para esos valores de tiempo. Se eligió interpolar los datos del tampón térmico, porque es el sistema del que se tienen más datos y permitía una interpolación más fiable.

Con la interpolación se consigue trabajar con la misma cantidad de datos para la mezcla reactante y para el tampón térmico, lo que facilitará los cálculos de la cinética de la reacción. En la Tabla A.3.3 se muestran los datos después de la interpolación, apareciendo con el fondo de color anaranjado los valores obtenidos en la interpolación.

**Tabla A.3.3:** Datos de tiempo y temperatura después de la interpolación.

Mezcla reactante		Tampón térmico		
Tiempo(s)	Temperatura(°C)	Tiempo(s)	Temperatura(°C)	Temperatura Cristal(°C)
0	21,0	0	22,000	21,500
20	25,0	20	22,018	21,518
180	24,0	180	22,158	21,658
570	23,5	570	22,500	22,000
990	23,5	990	23,000	22,500
2760	24,0	2760	24,400	23,900
5070	25,0	5070	25,436	24,936
9270	26,0	9270	26,274	25,774

A partir de los datos de tiempo y temperatura de la tabla anterior se ha calculado el calor (Q) de la mezcla reactante (Tabla A.3.4) y el calor recogido por el tampón (Tabla A.3.5), mediante la ecuación 14. La columna de la derecha de ambas tablas contiene el cálculo del calor total acumulado en función del tiempo para la mezcla reactante ( $Q_R$ ) y para el tampón térmico ( $Q_T$ ).

$$Q = C_p \cdot m \cdot \Delta T \quad (\text{ec.14})$$

**Tabla A.3.4:** Datos de tiempo, temperatura y valores del calor desprendido calculado para la reacción.

Tiempo (s)	Temperatura (°C)	Q (J)	Q (kJ)	Q <sub>R</sub> (kJ)
0	21,0	0	0	0
20	25,0	1496,846	1,497	0,513
180	24,0	-374,211	-0,374	0,385
570	23,5	-187,105	-0,187	0,321
990	23,5	0	0	0,321
2760	24,0	187,106	0,187	0,385
5070	25,0	374,212	0,374	0,513
9270	26,0	374,212	0,374	0,642

**Tabla A.3.5:** Datos de tiempo y temperatura, y valores del calor recogido calculados para el tampón térmico.

Tiempo (s)	Temperatura (°C)	Q (J)	Q (kJ)	Q <sub>TP</sub> (kJ)
0	21.500	0	0	0
20	21.518	37.931	0.038	0.038
180	21.658	303.448	0.303	0.341
570	22.000	739.655	0.740	1.081
990	22.500	1081.035	1.081	2.162
2760	23.900	3026.897	3.027	5.189
5070	24.936	2240.690	2.241	7.430
9270	25.774	1811.188	1.811	9.241

Sumando los calores acumulados de la reacción y del tampón térmico se puede calcular el calor total desprendido a lo largo del experimento. En la Tabla A.3.6 se muestran los valores de los calores acumulados junto con el calor total desprendido en función del tiempo.

**Tabla A.3.6:** Calores acumulados de la reacción y del tampón junto al calor total desprendido en función del tiempo.

Tiempo (s)	Q <sub>R</sub> (kJ)	Q <sub>TP</sub> (kJ)	Q <sub>T</sub> (kJ)
0	0	0	0
20	0,513	0,038	0,551
180	0,385	0,341	0,726
570	0,321	1,081	1,401
990	0,321	2,162	2,483
2760	0,385	5,189	5,574
5070	0,513	7,430	7,943
9270	0,642	9,241	9,882

Además, sabiendo que el primer aporte de calor es el correspondiente al de la reacción paralela entre el amoniaco y el peróxido de hidrógeno, éste se puede descontar, restándosele a todos los valores del calor total, para así obtener el calor liberado solo por la reacción para cada valor de tiempo. En la Tabla A.3.7 se muestran el calor total como referencia para compararlo con el calor de la reacción (Q<sub>R</sub>) en función del tiempo.

**Tabla A.3.7:** Calor total desprendido junto al calor correspondiente a la reacción en función del tiempo.

Tiempo (s)	Q <sub>T</sub> (kJ)	Q <sub>R</sub> (kJ)
0	0	-
20	0,551	0
180	0,726	0,175
570	1,401	0,851
990	2,483	1,932
2760	5,574	5,023
5070	7,943	7,392
9270	9,882	9,331

A partir del calor desprendido por la reacción, si asumimos que éste se debe solo a la reacción del titanio, podemos relacionar la desaparición de los moles de titanio con el calor generado.

$$\frac{N_{Ti}}{N_{Ti,0}} \approx \frac{Q_{Tr}-Q_i}{Q_{Tr}} \quad (\text{ec.15})$$

Como el grado de conversión es por definición la cantidad de reactivo que se convierte en producto, se puede expresar como la variación en la concentración de reactivo limitante (ecuación 16), que en este caso sería el titanio.

$$X = \frac{c_{k0}-c_k}{c_{k0}} \quad (\text{ec.16})$$

Si reagrupamos la ecuación, podemos ver que:

$$X = 1 - \left( \frac{c_k}{c_{k0}} \right) = 1 - \frac{N_{Ti}}{N_{Ti,0}}$$

Por lo que se puede relacionar el grado de conversión con la desaparición de moles de titanio y, por tanto, con el calor generado en el proceso (ecuación 17).

$$X = 1 - \left( \frac{Q_{Tr}-Q_i}{Q_{Tr}} \right) \quad (\text{ec.17})$$

Si derivamos la ecuación 16 respecto al tiempo obtendríamos la ecuación 18:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{dc_k}{dt} \cdot \frac{-1}{c_{k0}} \quad (\text{ec.18})$$

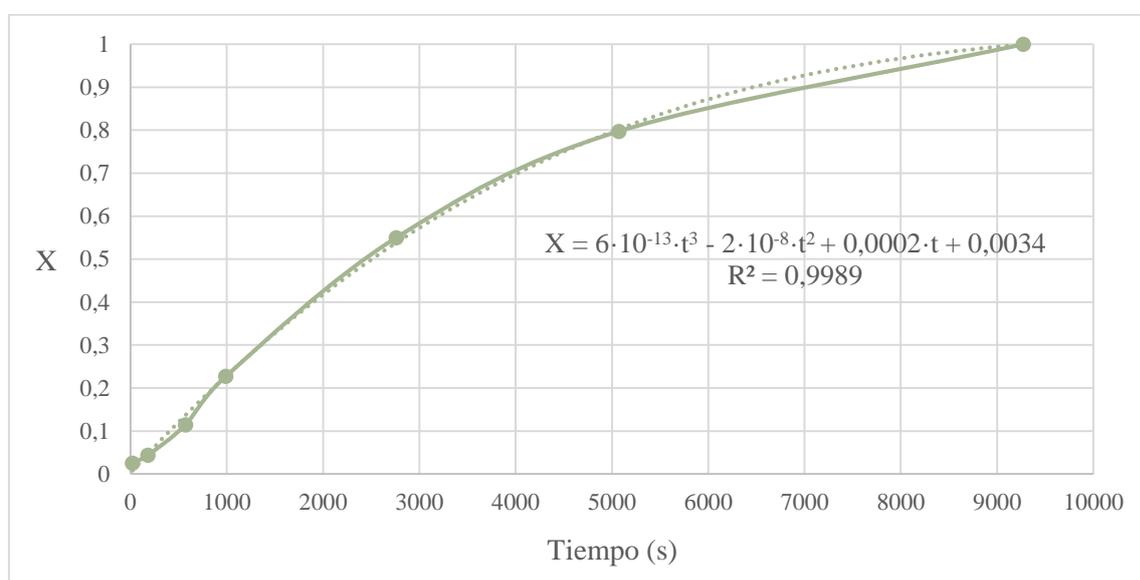
De esta forma, queda relacionada la velocidad de desaparición de titanio,  $\mathfrak{R}_j = dc_k/dt$ , con la conversión en función del tiempo, que podemos calcular a partir de los valores del calor desprendido por la reacción a partir de la ecuación 15. En la Tabla A.3.8 se muestran los valores calculados con la ecuación 15 junto con los valores de tiempo y el calor de la reacción.

**Tabla A.3.8:** Valores de la conversión en función del calor desprendido y el tiempo.

Tiempo (s)	Q <sub>R</sub> (kJ)	Qt-Qi/Qt	X
20	0	0,9743	0,0256
180	0,175	0,9560	0,0439
570	0,851	0,8855	0,1144
990	1,932	0,7726	0,2273

Tiempo (s)	Q <sub>R</sub> (kJ)	Q <sub>t</sub> -Q <sub>i</sub> /Q <sub>t</sub>	X
2760	5,023	0,4498	0,5501
5070	7,392	0,2025	0,7974
9270	9,331	0	1

A partir de los valores de esta tabla se puede obtener una representación gráfica en función del tiempo, que si ajustamos mediante una línea de tendencia polinómica de tercer grado nos permite obtener una ecuación que relaciona el grado de conversión en función del tiempo en segundos. La Figura A.3.1 muestra esta representación.



**Figura A.3.1:** Gráfica del grado de conversión frente al tiempo. Creación propia.

La ecuación que relaciona el grado de conversión con el tiempo es:

$$X = 6 \cdot 10^{-13} \cdot t^3 - 2 \cdot 10^{-8} \cdot t^2 + 0,0002 \cdot t + 0,0034 \quad (\text{ec.19})$$

Si derivamos la ecuación 18 para obtener la derivada del grado de conversión en función del tiempo tendríamos:

$$\frac{dX}{dt} = 18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002 \quad (\text{ec.20})$$

Sustituyendo la ecuación 19 en la ecuación 17 y reordenando los valores, obtenemos una ecuación que representa la velocidad de reacción.

$$18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002 = \frac{dc_k}{dt} \cdot \frac{1}{-c_{k0}}$$

$$\frac{dc_k}{dt} = -c_{k0} \cdot [18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002] \quad (\text{ec.21})$$

Finalmente sustituyendo la ecuación 21 en la ecuación 13, obtenemos la ecuación final del balance de materia.

$$F_j - F_{j0} = -c_{k0} \cdot [18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002] \cdot V \quad (\text{ec.22})$$

Donde:

t = tiempo (s).

V = volumen (m<sup>3</sup>).

F<sub>j</sub> = Caudal molar de salida (kmol/s).

F<sub>j0</sub> = Caudal molar de entrada al reactor (kmol/s).

### 3.5. Resolución del balance de materia

Para calcular el volumen del reactor se debe resolver la ecuación del balance de materia para el reactivo principal, el titanio, para ello hay que calcular el caudal molar de entrada de titanio al reactor (ecuación 23) y el caudal molar a la salida del reactor, (ecuación 24) en kmol/s.

$$F_{j0} = c_{j0} \cdot Q_v \quad (\text{kmol/h}) \quad (\text{ec.23})$$

$$F_{10} = c_{10} \cdot Q_v = 4,73 \cdot 10^{-2} \cdot 0,129 = 6,102 \cdot 10^{-3} \frac{\text{kmol}}{\text{h}} = 1,695 \cdot 10^{-6} \frac{\text{kmol}}{\text{s}}$$

En general la ecuación para el cálculo del caudal molar a la salida del reactor, una vez ya se ha producido la reacción, es la siguiente:

$$F_j = F_{j0} - F_{k0} \cdot \frac{v_j}{v_k} \cdot X \quad (\text{kmol/h}) \quad (\text{ec.24})$$

Teniendo en cuenta que el titanio es el reactivo limitante, obtenemos que:

$$F_1 = F_{10} - F_{10} \cdot \frac{v_1}{v_1} \cdot X = F_{10} \cdot (1 - X)$$

Por lo que sustituyendo los datos:

$$F_1 = 1,695 \cdot 10^{-6} (1 - 0,19) = 1,373 \cdot 10^{-6} \text{ kmol/s}$$

Sustituyendo los datos en la ecuación del balance de materia, ecuación 22, y despejando el volumen:

$$F_1 - F_{10} = -c_{10} \cdot [18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002] \cdot V$$

$$V = \frac{F_1 - F_{10}}{-c_{10} \cdot [18 \cdot 10^{-13} \cdot t^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot t + 0,0002]}$$

$$V = \frac{1,373 \cdot 10^{-6} - 1,695 \cdot 10^{-6}}{-4,730 \cdot 10^{-2} \cdot [18 \cdot 10^{-13} \cdot (1037,24)^2 - 4 \cdot 10^{-8} \cdot 1037,24 + 0,0002]}$$

Por lo tanto, al resolver obtenemos que el volumen del reactor es:

$$V = 4,29 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 = 42,9 \text{ L}$$

### 3.6. Dimensiones del reactor

Para el diseño del reactor se ha tenido en cuenta la heurística descrita por Richard Turton et al. en el libro *Analysis, Synthesis, and design of Chemical Processes*. En dicho libro, destacan que lo más seguido para el diseño de los reactores es que la altura del líquido en el interior tenga el mismo valor que su diámetro (ecuación 25).

$$h = D \quad (\text{ec.25})$$

Además, a partir de la ecuación del volumen de un cilindro (ecuación 26) podemos relacionar el volumen del tanque con su altura y con su radio.

$$V = \pi \cdot h \cdot r^2 = \pi \cdot D \cdot r^2 \quad (\text{ec.26})$$

Como el diámetro es dos veces el radio, la ecuación quedaría así:

$$V = \pi \cdot 2r \cdot r^2 \rightarrow V = \pi \cdot 2 \cdot r^3 \quad (\text{ec.27})$$

Teniendo en cuenta que el valor del volumen, en  $\text{m}^3$ , se ha calculado en el apartado anterior a partir del balance de materia, podemos sustituirlo en la ecuación y de esa forma obtener el valor del radio.

$$4,29 \cdot 10^{-2} = \pi \cdot 2 \cdot r^3 \rightarrow r = 0,1897 \approx 0,19 \text{ m}$$

Finalmente, a partir del radio se calcula el diámetro:

$$D = 2 \cdot r = 2 \cdot 0,19 = 0,38 \text{ m}$$

También se precisa que el fondo del tanque sea redondeado para evitar las zonas de flujo estancado; en las zonas en las que se estanca el flujo pueden acumularse las partículas de titanio y quedar sin reaccionar parte del reactivo alimentado. Además, al ser un tanque redondeado, con que su altura sea ligeramente mayor que su diámetro, quedaría un espacio suficiente para albergar el hidrógeno generado.

### 3.7. Tiempo de residencia en el reactor

El tiempo de residencia del volumen de reacción en el reactor se puede calcular a partir del caudal volumétrico, que es por definición volumen partido tiempo:

$$Q_v = \frac{V}{t} \text{ m}^3/\text{h} \quad (\text{ec.28})$$

Como ya se ha calculado el caudal volumétrico a partir del volumen de producción deseada y el volumen del reactor, sólo hace falta sustituir datos.

$$0,129 = \frac{4,29 \cdot 10^{-2}}{t} \rightarrow t = 0,33 \text{ h} = 1197,21 \text{ s}$$

Mediante la ecuación 19, que relaciona el grado de conversión con el tiempo, podemos verificar que conseguiremos el grado de conversión fijado.

$$X = 0,19 = 6 \cdot 10^{-13} \cdot t^3 - 2 \cdot 10^{-8} \cdot t^2 + 0,0002 \cdot t + 0,0034$$

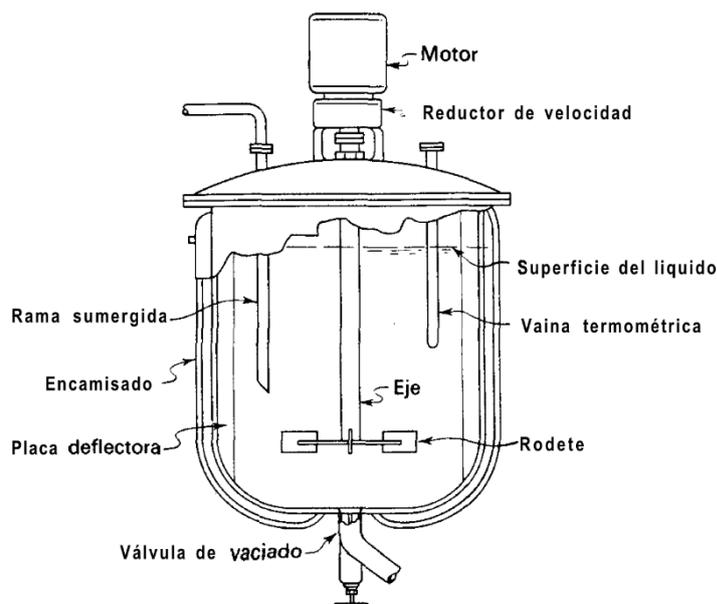
$$t = 1037,24 \text{ s}$$

Comparando ambos datos de tiempo podemos afirmar que la reacción tendrá tiempo suficiente para llegar al grado de conversión calculado, por lo que podemos validar los valores del caudal volumétrico y del volumen del reactor.

### 3.8. Opciones de agitación

Una buena agitación asegurará que los reactivos se mezclen completamente dentro del tanque, favoreciendo la reacción entre ellos y maximizando la obtención del producto deseado. También evitaría que las partículas de titanio se depositaran en el fondo del reactor, promoviendo que circulen por toda la mezcla reactante. Hay que tener en cuenta que la presencia de dichas partículas limita los sistemas de agitación que se puedan emplear en este proyecto.

Generalmente, se utiliza un diseño estandarizado como el que aparece en la Figura A.3.2 en la que se indican las diferentes partes que constituyen el agitador. El rodete, instalado sobre un eje suspendido y accionado por un motor, genera un modelo de flujo en el sistema promoviendo que el líquido circule a través del tanque. Es frecuente que el motor que acciona el rodete se encuentre acoplado al eje a través de un reductor de velocidad. Además, es común que incorpore accesorios como serpentines, encamisados, placas deflectoras y vainas para termómetros u otros instrumentos de medida.



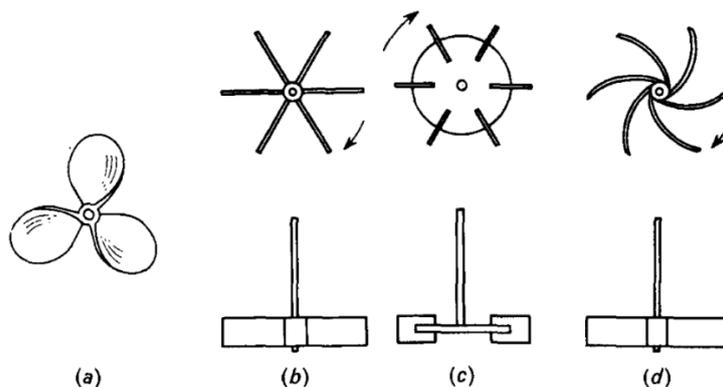
**Figura A.3.2:** Tanque típico de un proceso con agitación.

*Nota:* Tomado de *Operaciones unitarias en ingeniería química* (p.243), por W. L. McCabe, J. C. Smith, y P. Harriott, 1995, McGraw-Hill Interamericana.

Los rodetes pueden dividirse en dos clases, los que generan corrientes paralelas al eje del rodete (rodetes de flujo axial) y los que generan corrientes en dirección tangencial o radial (rodetes de flujo radial). Los tres tipos principales de rodetes son las palas, las hélices y las turbinas (Figura A.3.3), con estos tres se resuelven aproximadamente el 95% de los problemas de agitación de líquidos.

- **Palas:** es frecuente el uso de agitadores de dos y cuatro palas que giran sobre un eje vertical a bajas o moderadas velocidades (entre 20 y 150 rpm), impulsando el líquido radial y tangencialmente. A velocidades bajas generan una agitación suave por sí mismas, pero a velocidades más elevadas se hace necesaria la instalación de planas deflectoras en el tanque ya que si no apenas se produce mezcla.
- **Hélices:** Son eficaces en tanques muy grandes, pero raramente superan las 18 pulgadas de diámetro, independientemente del tamaño del tanque. En tanques profundos suelen instalarse dos o más hélices sobre el mismo eje dirigiendo el flujo en la misma dirección. Generan flujos axiales y de alta velocidad, las pequeñas suelen girar a velocidades entre 1150 y 1750 rpm y las grandes entre 400 y 800 rpm.
- **Turbinas:** Son eficaces en un amplio intervalo de viscosidades y sus placas pueden ser rectas o curvas, inclinadas o verticales. Cuando el líquido posee baja viscosidad las turbinas generan fuertes corrientes, destruyendo las bolsas de fluido estancado.

Las principales corrientes que generan son radiales y tangenciales. Éstas últimas, inducen la formación de vórtices y remolinos que pueden ser destruidos mediante placas deflectoras para que la agitación sea más eficaz.



**Figura A.3.3:** Rodetes de mezcla. (a) hélice marina de tres palas; (b) turbina abierta de palas rectas; (c) turbina de disco con palas; (d) turbina abierta de palas curvas.

*Nota:* Tomado de *Operaciones unitarias en ingeniería química* (p.245), por W. L. McCabe, J. C. Smith, y P. Harriott, 1995, McGraw-Hill Interamericana.

Para este caso se ha estimado que lo más oportuno sería la utilización de una turbina de seis palas planas para conseguir una buena agitación y, además, asegurar la prevención de remolinos. Se ha descartado la implementación de placas deflectoras, incompatibles por la presencia en la mezcla de las partículas de titanio.

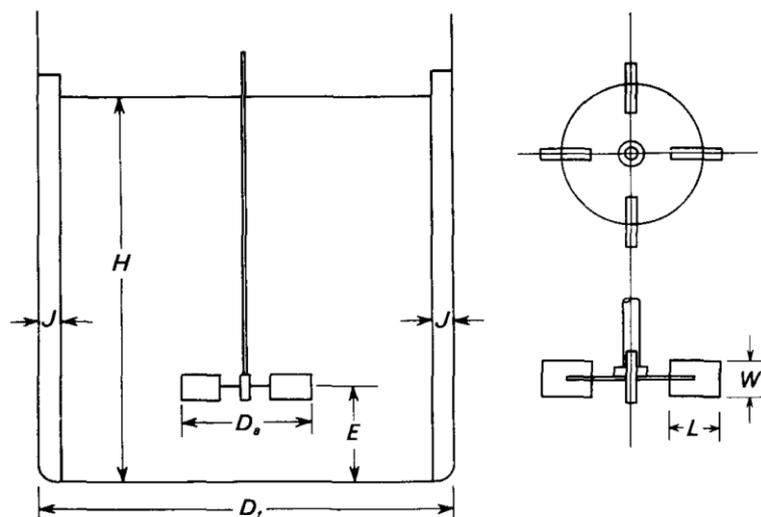
### 3.8.1. Agitación de la reacción

En líneas generales, para el diseño de los problemas ordinarios de agitación (McCabe et al., 1995) se utiliza como punto de partida un agitador de turbina como el que se muestra en la Figura A.3.5.

Las proporciones descritas por McCabe (1995) para los agitadores de turbina son:

$$\frac{D_a}{D_t} = \frac{1}{3} \quad \frac{H}{D_t} = 1 \quad \frac{J}{D_t} = \frac{1}{12}$$

$$\frac{E}{D_a} = 1 \quad \frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} \quad \frac{L}{D_a} = \frac{1}{4}$$



**Figura A.3.5:** Medidas de un agitador de turbina.

Nota: Tomado de *Operaciones unitarias en ingeniería química* (p.251), por W. L. McCabe, J. C. Smith, y P. Harriott, 1995, McGraw-Hill Interamericana.

Como se ha elegido un agitador de turbina con 6 palas planas y sin deflectores, las proporciones que nos interesa calcular son:

$$\frac{D_a}{D_t} = \frac{1}{3} \rightarrow D_a = \frac{D_t}{3} = \frac{0,38}{3} = 0,12667 \approx 0,13 \text{ m}$$

$$\frac{E}{D_a} = 1 \rightarrow E = D_a = 0,13 \text{ m}$$

$$\frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} \rightarrow W = \frac{D_a}{5} = \frac{0,13}{5} = 0,026 \text{ m}$$

$$\frac{L}{D_a} = \frac{1}{4} \rightarrow L = \frac{D_a}{4} = \frac{0,13}{4} = 0,0325 \text{ m}$$

En nuestro sistema, el objetivo principal de la agitación es la suspensión de las partículas de titanio en la mezcla reactante. Se pretende asegurar que las partículas de titanio estén en contacto con la mezcla reactante el mayor tiempo posible, consiguiendo así que la superficie de contacto sea mayor y que reaccione con más facilidad.

Como la reacción se lleva a cabo en exceso de peróxido de hidrógeno y éste se suministra en forma de disolución al 35% en peso, la mezcla reactante está compuesta aproximadamente por un 80% de agua. Al considerarse que los demás elementos líquidos de la mezcla reactante están en una proporción pequeña comparada con el agua, su influencia

en las propiedades de la mezcla reactante es mínima. Por ello, para simplificar los cálculos, se han considerado sólo las propiedades del agua.

Mediante la ecuación 28 se ha calculado la velocidad a la que debería girar el rodete (rpm) para conseguir la suspensión de las partículas.

$$n_c \cdot D_a^{0,85} = S \cdot \varphi^{0,1} \cdot D_p^{0,2} \cdot \left(g \cdot \frac{\Delta\rho}{\rho}\right)^{0,45} \cdot B^{0,13} \quad (\text{ec.28})$$

Donde:

$n_c$  = velocidad crítica del agitador.

$D_a$  = diámetro del agitador.

$\varphi$  = viscosidad cinemática.

$D_p$  = diámetro de partícula.

$g$  = aceleración de la gravedad = 981 cm/s<sup>2</sup>.

$\Delta\rho$  = diferencia de densidad.

$\rho$  = densidad del fluido.

$B$  = 100 · peso de sólido/ peso de líquido.

$S$  = constante.

El parámetro B se calcula a partir del porcentaje (en peso) de sólido en la disolución. Sabiendo que el volumen del reactor es de  $4,3 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3$  y que queremos mantener una concentración de titanio de  $4,73 \cdot 10^{-2} \text{ kmol/m}^3$ , tenemos que en total habrá  $97,136 \cdot 10^{-3} \text{ kg}$  de titanio en polvo dentro del reactor. El porcentaje de peso en sólido se puede calcular como:

$$\frac{\text{masa sólido}}{\text{masa disolución}} \cdot 100 = \frac{97,136 \cdot 10^{-3} \text{ kg}}{4,29 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3 \cdot 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}} \cdot 100 = 0,226$$

$$B = 100 \cdot \frac{0,226}{1 - 0,226} = 29,2$$

La viscosidad cinemática ( $\varphi$ ), que en este caso será la del agua, se puede obtener a partir de la tabla de propiedades físicas del agua recogidas por McCabe en *Operaciones unitarias en ingeniería química* (1995). En dicha tabla se muestran entre otras propiedades, una columna con datos de la viscosidad dinámica ( $\mu$ ) y otra con la densidad ( $\rho$ ) del agua en función de la temperatura. A partir de los datos de ambas columnas interpolando para una

temperatura de 26°C y mediante la relación entre ambas propiedades (ecuación 29) podremos calcular la viscosidad cinemática del agua.

$$\varphi = \mu/\rho \quad (\text{ec.29})$$

De la interpolación:

$$\mu = 0,8754 \text{ cps} = 8,754 \cdot 10^{-4} \frac{\text{Pa}}{\text{s}} = \frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{s}}$$

$$\rho = 996,79 \text{ kg/m}^3$$

Por lo que la viscosidad cinemática será:

$$\varphi = \frac{8,754 \cdot 10^{-4}}{996,79} = 8,782 \cdot 10^{-7} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} = 8,782 \cdot 10^{-3} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$$

Por otro lado, el diámetro de partícula viene dado por la ficha técnica del polvo de titanio con el que queremos trabajar y tiene un valor de 150 micras. Finalmente, la constante S puede obtenerse a partir de la Tabla A.3.9.

**Tabla A.3.9:** Constante S de la ecuación 28 para la velocidad crítica del agitador.

Tipo de rodete	D <sub>t</sub> /D <sub>a</sub>	D <sub>t</sub> /E	S
<b>Turbina de seis palas</b>	2	4	4.1
D <sub>a</sub> /W = 5	3	4	7.5
N <sub>P</sub> = 6.2	4	4	11.5
<b>Agitador de dos palas</b>	2	4	4.8
D <sub>a</sub> /W = 5	3	4	8
N <sub>P</sub> = 6.2	4	4	12.5
<b>Hélice de tres palas</b>	3	4	6.5
N <sub>P</sub> = 0.5	4	4	8.5
	4	2.5	9.5

*Nota:* Adaptada de *Operaciones unitarias en ingeniería química* (p.276), por W. L. McCabe, J. C. Smith, y P. Harriott, 1995, McGraw-Hill Interamericana.

Como el agitador que tenemos es una turbina de seis palas con una relación D<sub>a</sub>/W =5 y la relación D<sub>t</sub>/D<sub>a</sub> =3, tomamos S =7.5.

Entonces, a partir de la ecuación 26:

$$n_c = \frac{7,5}{(13)^{0,85}} \cdot (8,782 \cdot 10^{-3})^{0,1} \cdot (0,015)^{0,2} \cdot \left(981 \cdot \frac{(4,5 - 1)}{1}\right)^{0,45} \cdot (29,2)^{0,13} =$$

$$= 1,735 \text{ r/s} = 104,1 \text{ rpm}$$

Como factor de seguridad, se aplica un 10% más a la velocidad crítica de agitación, por lo que  $n_c = 114,51 \text{ rpm}$ .

### 3.9. Caracterización de las corrientes de entrada y salida del reactor

Para calcular los caudales molares de entrada al tanque se multiplica la concentración de los reactivos deseada en el tanque por el caudal volumétrico. En la Tabla A.3.10 se recogen los caudales molares de cada uno de los reactivos, calculadas mediante la ecuación 24.

$$F_{20} = c_{20} \cdot Q_v = 10,972 \cdot 0,129 = 1,415 \text{ kmol/h}$$

**Tabla A.3.10:** Caudales molares de los reactivos a la entrada del reactor.

Especie	A <sub>j</sub>	F <sub>j0</sub> (kmol/h)
Ti	A <sub>1</sub>	6,102·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	1,415
NH <sub>3</sub>	A <sub>3</sub>	0,108
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	9,153·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	5,224

Del mismo modo, para caracterizar la corriente de salida del reactor hay que calcular la cantidad de productos formados y la cantidad de reactivos sin reaccionar dentro de dicha corriente. Como es un RCTA y no hay acumulación, el caudal volumétrico de entrada al reactor es el mismo que el de salida ( $Q_v = 0,129 \text{ m}^3/\text{h}$ ). A modo de ejemplo se muestra el cálculo del caudal molar de peróxido de hidrógeno a partir de la ecuación 23, que representa el avance de la reacción.

$$F_2 = F_{20} - F_{k0} \cdot \frac{\nu_2}{\nu_k} \cdot X = 1,415 - 6,102 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{-5}{-4} \cdot 0,19 = 1,414 \text{ kmol/h}$$

En la Tabla A.3.11 se resumen los valores de los caudales molares de reactivos y productos presentes en la corriente de salida del reactor.

**Tabla A.3.11:** Caudales molares de los reactivos en la salida del reactor.

Especie	A <sub>j</sub>	F <sub>j</sub> (kmol/h)
Ti	A <sub>1</sub>	4,943·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	1,414
NH <sub>3</sub>	A <sub>3</sub>	0,106
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	7,414·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	5,223
CTI	A <sub>6</sub>	2,899·10 <sup>-4</sup>
H <sub>2</sub>	A <sub>7</sub>	1,739·10 <sup>-3</sup>

*Nota:* CTI es la abreviatura utilizada para el complejo de titanio.

El hidrógeno producido se ha incluido en la tabla, pero no estará presente en la corriente líquida de salida del reactor porque se evacuará por la parte superior a medida que se vaya produciendo. El método para evacuar el hidrógeno se explica en el Anexo 6.

## **ANEXO 4: Sistema de impulsión neumática**

Cómo se ha mencionado, se ha optado por no transportar el titanio hasta el reactor suspendido en uno de los reactivos líquidos porque es más seguro para la operación del reactor. En caso de perder el control de la reacción, al dosificar el titanio de forma separada al resto de reactivos, se podría cortar rápidamente el avance de la reacción.

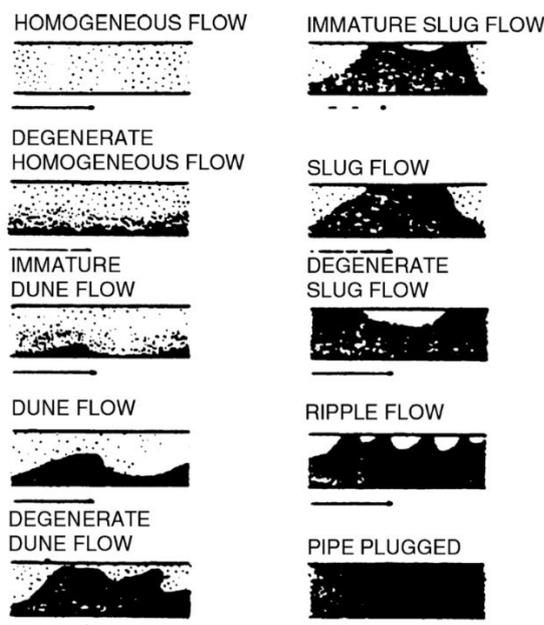
### **4.1. Modos de operación**

Hay dos modos principales de operar en impulsión neumática, en fase diluida o en fase densa. Cada fase se categoriza por simplicidad en función de la ratio de flujo de masa ( $\mu$ ), definida como la relación entre la masa de sólidos ( $m_s$ ) y la masa de aire impulsor ( $m_f$ ). De acuerdo con esta relación se clasifican como sistemas de fase diluida aquellos con una ratio de flujo de masa entre 0 y 15, y por encima de este último se considera sistema de fase densa.

A grandes rasgos, la impulsión neumática en fase diluida emplea grandes volúmenes de gas a alta velocidad para transportar los sólidos como partículas discretas; es, además, la más estudiada de las dos y la que en general más se utiliza. En fase densa se trabaja por debajo de la velocidad de saltación en flujo horizontal. Los patrones de flujo de los sólidos pueden variar, desde un flujo constante en el que los sólidos se compactan y se mueven como un conjunto, hasta un flujo en el que los sólidos se mueven formando una especie de dunas.

La variedad de los patrones del flujo viene dada por la gran cantidad de variables que tienen influencia sobre él, desde las características del sólido o la rugosidad de la tubería hasta la velocidad del gas y la longitud de la conducción. En la Figura A.4.1 se pueden apreciar los distintos patrones de flujo que pueden llegar a aparecer en una conducción horizontal.

Operar en fase diluida parece la mejor opción para el sistema que se quiere diseñar. Esto se debe a que el operar en fase diluida para impulsar una pequeña cantidad de sólidos, como es el caso, se conseguiría tener un patrón de flujo homogéneo casi constante. El flujo homogéneo permitiría alimentar al reactor cantidades de sólido controladas, de forma que no se introduciría un cúmulo grande de sólidos que pudiera propiciar la pérdida de control de la reacción.



**Figura A.4.1:** Patrones de flujo que pueden llegar a aparecer en una conducción horizontal.

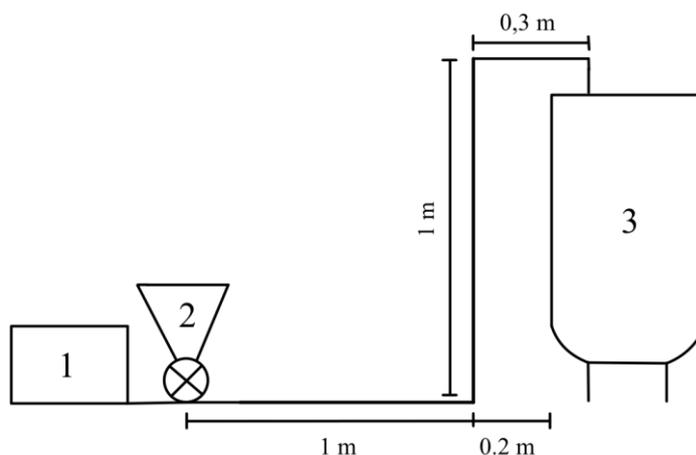
*Nota:* Tomado de *Pneumatic Conveying of Solids: A Theoretical and Practical Approach* (p.20) por Klinzing, G. E., Rizk, F., Marcus, R., & Leung, L. S., 2010, Springer.

## 4.2. Diseño del sistema de impulsión neumática

El sistema de impulsión neumática se ha diseñado para el transporte del titanio desde el depósito hasta el reactor, mediante fase diluida. Se ha evitado transportarlo junto con alguno de los otros reactivos líquidos en aras de la seguridad del proceso, pues al llegar al reactor de forma independiente, permite poder cortar su suministro en caso de pérdida de control de la reacción.

Para el transporte, en lugar de aire se ha planteado el uso de nitrógeno como impulsor, que mantendrá el titanio estanco en su transporte, evitando así que en caso de que el polvo produzca chispas éstas produzcan llama. Además, el nitrógeno utilizado para el transporte permitirá diluir el hidrógeno emitido en la reacción y ayudará a impulsarlo fuera del tanque.

La alimentación de gas al sistema se hará a través de botellas de nitrógeno, a 2 bar, conectadas a la entrada del sistema de impulsión; para introducir el sólido en el sistema se ha planteado que el polvo de titanio se almacene en una tolva y desde ella, mediante una válvula, pase a la zona de impulsión. En la Figura A.4.2 se muestra un boceto inicial del sistema de impulsión neumática planteado.



**Figura A.4.2:** Boceto inicial del sistema de impulsión neumática.

*Nota:* 1. Botellas de nitrógeno, 2. Tolva unida a una válvula de alimentación, 3. Reactor. Creación propia.

#### 4.2.1. Consideraciones iniciales para los cálculos

En este sistema de impulsión neumática se busca transportar titanio hasta el reactor de forma que se mantenga constante su concentración en el interior. Según los cálculos iniciales, para mantener constante la concentración dentro del reactor hay que alimentar  $6,102 \cdot 10^{-3}$  kmol/h de titanio, que corresponde a un caudal másico de sólido ( $m_s$ ) de 0,292 kg/h. Al ser un caudal de sólidos tan pequeño, se ha planteado la utilización de conducciones de 20 mm de diámetro para transportar el titanio.

Basándonos en el estudio de un sistema de impulsión neumática de polvos realizado por Li-Tsung Sheng *et al.* en 2020, en el que también utilizaban nitrógeno para impulsar un polvo con propiedades parecidas al que queremos transportar, se ha decidido utilizar la misma velocidad del gas en el interior de las conducciones que ellos, 10 m/s.

Por otro lado, el sistema trabajará a presión positiva aprovechando la presión de las botellas de nitrógeno para introducir el gas de impulsión en el sistema a la presión que se calcule necesaria. Para facilitar los cálculos se ha asumido que las partículas tienen forma esférica.

Los cálculos relacionados con el sistema de impulsión neumática se han hecho a partir de los principios mencionados por Klinzing en su libro *Pneumatic Conveying of Solids: A Theoretical and Practical Approach* publicado en 2010.

En la Tabla A.4.1 se muestra un resumen de las propiedades de los parámetros utilizados.

**Tabla A.4.1:** *Parámetros utilizados en el sistema de impulsión neumática.*

Propiedades	Valores
<b>Parámetros de las partículas</b>	
Material	Titanio
Densidad, $\rho_p$ (kg/m <sup>3</sup> )	4507
Diámetro, $d_p$ ( $\mu$ m)	150
<b>Parámetros del flujo</b>	
Gas	Nitrógeno
Densidad del gas a 26°C, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1,128
Viscosidad dinámica, $\eta$ (Pa·s)	$1,8 \cdot 10^{-5}$
Velocidad del gas, $v$ (m/s)	10

Muchos de los parámetros utilizados para los cálculos se obtienen de manera experimental, pero en este caso no se ha tenido la oportunidad de realizar pruebas experimentales. A partir del libro mencionado y de otros artículos se ha tratado de calcular u obtener los parámetros necesarios de forma teórica con la mayor precisión posible.

#### 4.2.2. Ratio de carga de masa

Un dato clave para los cálculos de impulsión neumática es la ratio de carga de sólidos ( $\mu$ ), que relaciona la masa de sólidos ( $m_s$ , kg/h) que se introduce en el sistema con la masa de aire que hay para impulsarla ( $m_f$ , kg/h).

$$\mu = \frac{m_s}{m_f} \quad (\text{ec.30})$$

Es un dato que se suele obtener de forma experimental, pero en este caso no se han podido hacer pruebas experimentales para el sistema de impulsión neumática. Por eso, no se tiene este dato y, por tanto, en principio no se puede calcular la masa de aire necesaria. Debido a esto se ha hecho una búsqueda bibliográfica en busca de datos que pudieran orientar los cálculos teóricos. Pese a que no se han obtenido ejemplos de sistemas de impulsión neumática para polvo de titanio, sí se ha obtenido a partir de un artículo, un valor para la velocidad del gas que podría funcionar en este sistema (Li-Tsung Sheng *et al.*, 2020). Por tanto, como se ha comentado en las consideraciones, la velocidad del nitrógeno se ha fijado en 10 m/s.

Para evitar que haya confusión con la viscosidad cinemática en cálculos posteriores, pues ambos parámetros coinciden en alguna ecuación y tienen abreviaturas muy similares, la abreviatura de la velocidad del gas en los cálculos pasará a ser  $v_g$ .

A partir de ésta, se puede obtener la masa del gas mediante la ecuación 31.

$$v_g = \frac{m_f}{A \cdot \rho \cdot (3600)} = \frac{m_f \cdot 4}{\pi \cdot D^2 \cdot \rho \cdot (3600)} \quad (\text{ec.31})$$

Despejando  $m_f$  y sustituyendo los datos conocidos:

$$m_f = \frac{10 \cdot (3600) \cdot \pi \cdot (0,02)^2 \cdot 1,128}{4} \rightarrow m_f = 12,757 \text{ kg/h}$$

Por tanto:

$$\mu = \frac{m_s}{m_f} = \frac{0,292}{12,757} = 2,289 \cdot 10^{-2}$$

La densidad del gas utilizada es la correspondiente al punto de descarga. Pasando el caudal másico de gas a caudal volumétrico tendríamos que se impulsan 11,31 m<sup>3</sup>/h de nitrógeno.

#### 4.2.3. Velocidad terminal de una sola partícula

Teniendo en cuenta que se ha asumido que las partículas son esféricas, se puede calcular la velocidad terminal  $w_{f0}$  (o velocidad de caída libre) de una sola esfera, considerando en una ecuación las fuerzas de arrastre, de flotabilidad y gravitacionales. Klinzing *et al.* comentan que el proceso de cálculo conlleva obtener la velocidad terminal con una de las ecuaciones que presentan en el libro, en función del régimen de operación (régimen de Stokes, intermedio, de Newton o supercrítico), para después comprobar si se ha elegido bien la ecuación a partir del número de Reynolds.

El primer intento de cálculo se hizo utilizando la ecuación para el régimen de Newton, que resultó ser incorrecto ya que el número de Reynolds estaba por debajo del valor mínimo necesario para considerar este régimen.

La siguiente ecuación que se probó es la del régimen intermedio. El valor del número de Reynolds para este régimen debe estar entre:

$$0,2 < Re_{pf} < 500$$

La ecuación para calcular la velocidad terminal en el régimen intermedio es la siguiente:

$$w_{f0} = \frac{0.153 \cdot g^{0.71} \cdot d_p^{1.14} \cdot (\rho_p - \rho)^{0.71}}{\rho^{0.29} \cdot \eta^{0.43}} \quad (\text{ec.32})$$

Una vez calculada la velocidad terminal se comprobará mediante la ecuación 33 si el número de Reynolds está efectivamente entre los valores para los que la ecuación 32 es válida.

$$Re_{pf} = \frac{\rho \cdot w_{f0} \cdot d}{\eta} \quad (\text{ec.33})$$

Sustituyendo y calculando:

$$w_{f0} = \frac{0,153 \cdot (9,81)^{0,71} \cdot (0,00015)^{1,14} \cdot (4507 - 1,128)^{0,71}}{(1,128)^{0,29} \cdot (1,8 \cdot 10^{-5})^{0,43}} = 1,689 \approx 1,69 \text{ m/s}$$

$$Re_{pf} = \frac{1,128 \cdot 1,69 \cdot 0,00015}{1,8 \cdot 10^{-5}} = 15,886$$

Como el  $Re_{pf}$  entra dentro del rango de validez para la ecuación de la velocidad terminal en régimen intermedio, podemos dar por válido el valor obtenido.

#### 4.2.4. Velocidad media de las partículas

Para calcular la velocidad media de las partículas,  $c$ , se ha utilizado la correlación entre la velocidad del gas y la de las partículas,  $c/v_g$ , descrita por Hinkle en 1954, que tiene en cuenta el tamaño de partícula ( $d_p$ , mm) y su densidad ( $\rho_p$ , kg/m<sup>3</sup>).

$$c/v_g = 1 - 0,008 \cdot (d_p)^{0,3} \cdot (\rho_p)^{0,5} \quad (\text{ec.34})$$

$$c/v_g = 1 - 0,008 \cdot (0,15)^{0,3} \cdot (4507)^{0,5} = 0,696$$

Como  $v_g = 10$  m/s:

$$c = v_g \cdot 0,696 = 10 \cdot 0,696 \rightarrow c = 6,96 \text{ m/s}$$

#### 4.2.5. Coeficiente de pérdida de presión adicional, $\lambda_z$

Para el cálculo posterior de la pérdida de presión debido a la presencia de sólidos,  $\Delta p_z$ , es necesario conocer el coeficiente de pérdida de presión adicional  $\lambda_z$ . Normalmente ese coeficiente se obtiene de manera experimental, pero como se ha mencionado anteriormente no se ha realizado experimentación para este sistema.

Como hay ecuaciones teóricas que permiten un cálculo del valor aproximado del coeficiente, se utilizarán para poder dimensionar el sistema. El coeficiente de pérdida de presión adicional se puede calcular mediante la ecuación 35.

$$\lambda_z = \lambda_z^* \cdot \frac{c}{v_g} + \frac{2 \cdot \beta}{c/v_g \cdot Fr^2} \quad (\text{ec.35})$$

Donde:

$\lambda_z^*$  = coeficiente de pérdida de presión debido a impactos y fricciones.

$c$  = velocidad media de las partículas

$\beta$  = Ratio de la velocidad relacionado con la velocidad terminal de las partículas en una nube.

$Fr$  = Número de Froude.

El parámetro  $\beta$  puede calcularse mediante la ecuación 36.

$$\beta = \frac{w_f}{v_g} \quad (\text{ec.36})$$

Donde  $w_f$  es la velocidad de asentamiento de las partículas en una nube. En este caso, para facilitar los cálculos, se asume que esa velocidad es igual de la velocidad terminal de una sola partícula. Asumimos esto bajo la consideración de que el flujo de partículas a transportar es muy pequeño y se espera que haya poca interacción entre ellas.

$$w_f = w_{f0} = 1,69 \text{ m/s}$$

Por tanto, sustituyendo en la ecuación 36:

$$\beta = \frac{1,69}{10} = 0,169$$

Por otro lado, el número de Froude relaciona las fuerzas de inercia y las fuerzas de gravedad y se puede calcular mediante la ecuación 37, donde  $D$  es el diámetro de la conducción en metros.

$$Fr = \frac{v_g}{(D \cdot g)^{1/2}} \quad (\text{ec.37})$$

$$Fr = \frac{10}{(0,02 \cdot 9,81)^{1/2}} = 22.58$$

Finalmente, para resolver la ecuación 32 falta por calcular el coeficiente de pérdida de presión debido a impactos y fricciones,  $\lambda_z^*$ . Para ello se puede utilizar la ecuación 38, despejada de la ecuación del equilibrio de fuerzas en una nube de partículas.

$$\lambda_z^* = \left[ \frac{c_D}{c_{Df}} \cdot \left( \frac{v_g - c}{w_f} \right)^2 - \beta \right] \cdot \frac{2}{Fr^2} \quad (\text{ec.38})$$

Para la resolución de esta ecuación se ha trabajado con una suposición sobre los coeficientes de arrastre  $C_D$  y  $C_{Df}$ . Se ha considerado que ambos están en un rango en el que son independientes del número de Reynolds relacionado con el diámetro de partícula  $Re_p$ , por lo que la ratio  $C_D/C_{Df}$  es igual a uno.

Además, en esta ecuación se tiene en cuenta el número de Froude, relacionado con la velocidad de las partículas, que se calcula a partir de la ecuación 39.

$$Fr^* = \frac{c}{(D \cdot g)^{1/2}} \quad (\text{ec.39})$$

$$Fr^* = \frac{6,69}{(0,02 \cdot 9,81)^{1/2}} = 15,1$$

Por lo que ahora se puede calcular la ecuación 36.

$$\lambda_z^* = \left[ \left( \frac{10 - 6,69}{1,69} \right)^2 - 0,169 \right] \cdot \frac{2}{(15,1)^2} = 3,217 \cdot 10^{-2}$$

Resolviendo la ecuación 33:

$$\lambda_z = 3,217 \cdot 10^{-2} \cdot 0,696 + \frac{2 \cdot 0,169}{0,696 \cdot 22,58^2} = 2,334 \cdot 10^{-2}$$

#### 4.2.6. Estimación de la pérdida de presión

Para operar correctamente, es importante conocer la pérdida de presión que se produce en la impulsión o transporte de los sólidos. El cálculo de la pérdida de presión se puede hacer mediante la ecuación 40, que permite obtener un resultado para condiciones de operación óptimas, pese a que teóricamente, no se ha podido obtener todavía una correlación para predecir la pérdida de presión en mezclas sólido-gas en conducciones.

$$\Delta p = \Delta p_L + \Delta p_A + \Delta p_Z + \Delta p_G + \Delta p_b \quad (\text{ec.40})$$

Donde:

$\Delta p_L$  = pérdida de presión debido al gas limpio.

$\Delta p_A$  = pérdida de presión debido a la aceleración.

$\Delta p_Z$  = pérdida de presión debido a los sólidos en secciones horizontales y verticales.

$\Delta p_G$  = pérdida de presión en la elevación debido a la gravedad, sólo considerada en los tramos verticales.

$\Delta p_b$  = pérdida de presión debido a los codos.

A continuación, se procederá a calcular los términos de la ecuación 38, para los cuales, se ha asumido que la presión a la salida del sistema será igual a la atmosférica para facilitar los cálculos ya que, pese a que el tanque tendrá tapa, habrá una salida de gases por la parte superior.

**a) Cálculo de la pérdida de presión debido al gas limpio,  $\Delta p_L$**

Es la pérdida de presión ocasionada por el gas limpio, en este caso nitrógeno, que fluye a través de las conducciones, es decir, que no lleva partículas. Para calcular esta pérdida de presión Klinzing (2010) recomienda la ecuación de Prandlt, ecuación 41.

$$\Delta p_L = \lambda_L \cdot \frac{\rho}{2} \cdot (v_g)^2 \cdot \frac{\Delta L}{D} \quad (\text{ec.41})$$

Donde  $\lambda_L$  es el factor de resistencia asociado al aire en la conducción.

Las condiciones en el punto de descarga en este caso son las condiciones de operación del reactor, es decir 26°C y 1 atm, por lo que la densidad el nitrógeno gas será la indicada en la Tabla A.4.1, 1,128 kg/m<sup>3</sup>.

El factor de resistencia asociado al aire en la conducción, no es constante y depende del flujo de aire como una función del número de Reynolds. Se calcula mediante la ecuación 42, conocida como la ecuación de Blasius, que se puede utilizar para números de Reynolds hasta  $Re = 8 \cdot 10^4$ .

$$\lambda_L = 0,316 / Re^{0,25} \quad (\text{ec.42})$$

Aquí aparece el número de Reynolds, que se puede calcular en este caso con la ecuación 43.

$$Re = v_g \cdot D / \nu \quad (\text{ec.43})$$

Donde en el denominador aparece la viscosidad cinemática del fluido, que se calcula con la ecuación 44.

$$\nu = \eta / \rho \quad (\text{ec.44})$$

Resolviendo la ecuación 44 se pueden resolver las ecuaciones 43 y 42:

$$\nu = \eta / \rho = \frac{1,8 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}}{1,128 \text{ kg/m}^3} = 1,596 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$Re = \frac{10 \text{ m/s} \cdot 0,02 \text{ m}}{1,596 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}} = 12531,328$$

$$\lambda_L = \frac{0,316}{(12531,328)^{0,25}} = 0,0299$$

También aparece en la ecuación 39 el sumatorio de la longitud, que en este caso se suma todo el recorrido independientemente de que los tramos sean verticales u horizontales.

$$\Delta L = 1 \text{ m} + 1 \text{ m} + 0,3 \text{ m} = 2,3 \text{ m}$$

Finalmente, sustituyendo los datos calculados en la ecuación 38 obtendremos la pérdida de presión debido al aire.

$$\Delta p_L = 2,334 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{1,128}{2} \cdot (10)^2 \cdot \frac{2,3}{0,02} = 151,383 \text{ Pa}$$

**b) Cálculo de la pérdida de presión debido a la aceleración,  $\Delta p_A$**

En el cálculo de la pérdida de presión debido a la aceleración hay que tener en cuenta tipos, la que se pierde debido a la aceleración del gas ( $\Delta p_A$  gas) y la que se pierde debido a la aceleración de los sólidos ( $\Delta p_A$  sólidos). En la ecuación 45, utilizada para el cálculo de la pérdida de presión debido a la aceleración, aparecen definidos ambos términos.

$$\Delta p_A = \Delta p_A \text{ gas} + \Delta p_A \text{ sólidos} = \frac{\rho \cdot (v_g)^2}{2} + (\mu \cdot v_g \cdot \rho \cdot c) \quad (\text{ec.45})$$

Sustituyendo los datos:

$$\Delta p_A = \frac{1,128 \cdot 10^2}{2} + (2,341 \cdot 10^{-2} \cdot 10 \cdot 1,128 \cdot 6,96) = 58,238 \text{ Pa}$$

**c) Cálculo de la pérdida de presión debido a los sólidos,  $\Delta p_z$**

La ecuación de la pérdida de presión debido a la presencia de sólidos es:

$$\Delta p_z = \mu \cdot \lambda_z \cdot \frac{\rho}{2} \cdot (v_g)^2 \cdot \frac{\Delta L}{D} \quad (\text{ec.46})$$

Para la pérdida de presión debido a la presencia de sólidos en la conducción, es común considerar que es distinta para tramos de conducción horizontal (h) y vertical (v). En este caso, dada la falta de experimentación determinar los datos para la pérdida de presión en la conducción vertical y que es que la distancia total a recorrer es poca, se considerará que el coeficiente adicional de pérdida de presión debido a los sólidos es igual en ambos tipos de conducciones,  $\lambda_{zh} = \lambda_{zv}$ . Por dar mayor seguridad a los cálculos, el coeficiente

utilizado será  $\lambda_{zh}$ , calculado en el Anexo 4.1.4, ya que en la práctica en coeficiente en conducciones horizontales es mayor que en conducciones verticales.

Por tanto, sustituyendo los datos en la ecuación 46:

$$\Delta p_z = 2,341 \cdot 10^{-2} \cdot 2,334 \cdot 10^{-2} \cdot \frac{1,128}{2} \cdot 10^2 \cdot \frac{2,3}{0,02} = 3,544 \text{ Pa}$$

**d)** Cálculo de la pérdida de presión en la elevación debido a la gravedad,  $\Delta p_G$

Esta pérdida de presión solo se considera en los tramos verticales del sistema y se puede calcular mediante la ecuación 47.

$$\Delta p_G = \rho^* \cdot g \cdot \Delta Z \quad (\text{ec.47})$$

Donde:

$\rho^*$  = es la densidad aparente de impulsión.

$\Delta Z$  = sumatorio de la longitud de las conducciones verticales.

La densidad aparente de impulsión se puede calcular mediante la ecuación 48.

$$\rho^* = \frac{\mu \cdot \rho}{c/v_g} \quad (\text{ec.48})$$

$$\rho^* = \frac{2,341 \cdot 10^{-2} \cdot 1,128}{0,696} = 3,794 \cdot 10^{-2} \text{ kg/m}^3$$

$\Delta Z = 1 \text{ m}$ , ya que solo hay una conducción vertical.

Por lo que, sustituyendo en la ecuación 47:

$$\Delta p_G = 3,794 \cdot 10^{-2} \cdot 9,81 \cdot 1 = 0,372 \text{ Pa}$$

**e)** Cálculo de la pérdida de presión debido a los codos,  $\Delta p_b$

La pérdida de presión debido a los codos se puede calcular mediante la ecuación 49:

$$\frac{\Delta p_b}{\Delta p_{z \text{ codos}}} = 210 \cdot \left( \frac{2 \cdot R_b}{D} \right)^{-1.15} \quad (\text{ec.49})$$

Donde:

$R_b$  = radio del codo.

$\Delta p_{z \text{ codos}}$  = pérdida de presión debido a la presencia de sólidos en el codo.

El radio del codo depende del tipo de codo empleado, si es un codo estándar de 90°  $R_b$  es 1.0 veces el diámetro nominal de la conducción. Si se trata de un codo de radio largo el radio del codo sería 1,5 veces el diámetro nominal de la conducción.

Según un estudio comparando el transporte en ambos tipos de codos realizado por Marcus, Hilbert y Klinzing, comentado en *Pneumatic Conveying of Solids: A Theoretical and Practical Approach*, publicado por Klinzing en 2010, se vio que para el transporte de partículas finas los codos rectos de 90° tenían en general una menor pérdida de presión que los codos de radio largo. Por eso, para esta instalación se ha optado por utilizar codos rectos de 90° en las dos intersecciones existentes.

Tenemos entonces que:

$$R_b = 1,0 \cdot D = 0,02 \text{ m}$$

Por otro lado, la pérdida de presión debido a la presencia de sólidos en el codo se calcula como:

$$\Delta p_{z \text{ codos}} = \Delta p_z \cdot \Delta L_{eq} \quad (\text{ec.50})$$

Donde:

$\Delta p_z$  = es la pérdida de presión calculada en el apartado c) dividida entre los metros totales de conducciones, Pa/m.

$\Delta L_{eq}$  = es la longitud equivalente del codo.

La longitud equivalente del codo se calcula mediante la ecuación 51.

$$\Delta L_{eq} = \frac{2 \cdot \pi \cdot R_b}{4} \quad (\text{ec.51})$$

$$\Delta L_{eq} = \frac{2 \cdot \pi \cdot 0,02}{4} = 0,031 \text{ m}$$

Sustituyendo en la ecuación 50:

$$\Delta p_{z \text{ codos}} = \frac{5,343}{2,3} \cdot 0,031 = 7,2 \cdot 10^{-2} \text{ Pa}$$

Por lo que la pérdida de presión en los codos será:

$$\frac{\Delta p_b}{7,2 \cdot 10^{-2}} = 210 \cdot \left( \frac{2 \cdot 0,02}{0,02} \right)^{-1,15}$$

$$\Delta p_b = 6,814 \text{ Pa}$$

Como hay tres codos en el recorrido, hay que multiplicar por tres la pérdida de presión en los codos. Por tanto, la pérdida total de presión debido a los tres codos es:

$$\Delta p_b = 20,442 Pa$$

#### f) Cálculo de la pérdida de presión total

Sustituyendo todos los datos calculados en la ecuación 37, tenemos que la pérdida de presión total es:

$$\Delta p = 151,383 + 58,238 + 3,544 + 0,372 + 20,442 = 233,979 Pa$$

Por tanto, la presión en el punto de alimento ( $p_1$ ) será la presión en el punto de descarga ( $p_0$ ) más la pérdida de presión total. La presión en el punto de descarga, el interior del reactor, se toma como atmosférica al estar conectado al exterior por el sistema de aireación.

$$p_1 = p_0 + \Delta p = 101325 Pa + 233,979 Pa = 101,559 kPa \approx 1 bar$$

Ésta presión se podrá suministrar sin problema con la conexión de las botellas de nitrógeno comprimido a la conducción.

Los sistemas de impulsión validan los diámetros de tubería comparando el número de Froude mínimo ( $Fr_{min}$ ), obtenido normalmente mediante experimentación, con el  $Fr$  calculado teniendo en cuenta la pérdida de presión; si  $Fr < Fr_{min}$  el sistema no puede operar. En este caso, al no tener referencias experimentales de la instalación, no tenemos el valor de  $Fr_{min}$  por lo que asumiremos que, aun teniendo en cuenta la pérdida de presión, el diámetro seleccionado sigue siendo válido.

#### 4.2.7. Válvula de alimentación del polvo

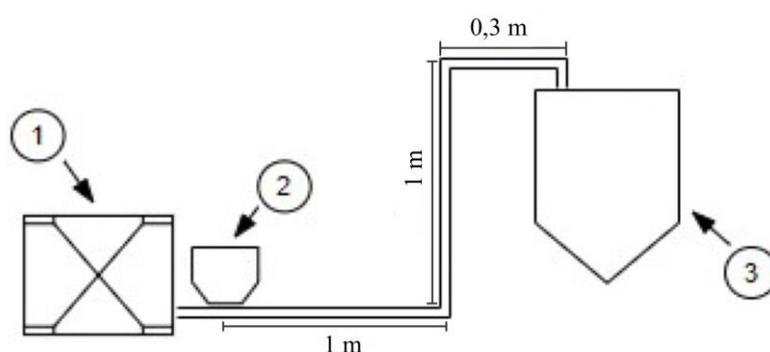
En un primer planteamiento se había elegido para la alimentación una válvula rotativa ya que, a una velocidad de giro adecuada, permite una dosificación controlada del polvo. Sin embargo, al hacer una búsqueda de las válvulas comercializadas, ha resultado imposible encontrar ninguna válvula adecuada a nuestro sistema; todas las válvulas rotativas consultadas tenían una velocidad de giro mínima que introducía al sistema un caudal de sólidos mayor del que se requiere en este proyecto. Por ello, se ha buscado una alternativa para la dosificación en equipos, como los micro dosificadores, utilizados en la industria farmacéutica.

Los litros de volumen de sólido a transportar se pueden calcular multiplicando el caudal másico de sólido por su densidad aparente vibrada, que es de  $0,94 \text{ g/cm}^3$ .

$$\frac{0,292 \text{ kg/h} \cdot 1000}{0,94 \text{ g/cm}^3} = 310,638 \text{ cm}^3/\text{h} = 0,311 \text{ L/h}$$

El micro dosificador seleccionado deberá tener una ratio de descarga mínima de  $0,3 \text{ L/h}$  para asegurar la dosificación necesaria al reactor.

Por tanto, el esquema final de la instalación será el representado en la Figura A.4.3 donde se han sustituido la tolva y la válvula de alimentación por un micro dosificador.



**Figura A.4.3:** Esquema final del sistema de impulsión neumática.

*Nota:* 1. Bloque de botellas de nitrógeno, 2. Micro dosificador, 3. Reactor. Creación propia.

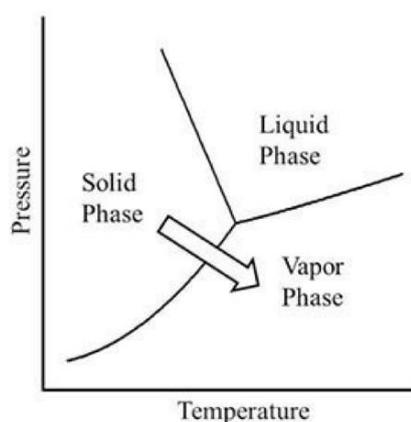
## ANEXO 5: Sistema de secado

### 5.1. Discusión de opciones

#### 5.1.1. Liofilización

La liofilización es una operación en la que se congela el material alimentado al equipo para después sublimarlo directamente a vapor (Green & Southard, 2018), de esta forma se consigue un secado suave mediante el cual se pueden preservar los materiales sensibles al calor. Es por esto último por lo que es una tecnología ampliamente utilizada en el sector alimentario y en el sector farmacéutico. A modo ilustrativo en la Figura A.5.1 se muestra el diagrama de fases.

Se opera usualmente generando un valor elevado de vacío, reduciendo así las temperaturas de ebullición, para sublimar aquellas sustancias que se desean eliminar más fácilmente. También se puede conseguir el secado a presión atmosférica si se trabaja con un aire muy deshumidificado, aunque esta opción no siempre es posible.



**Figura A.5.1:** Diagrama de fases de la liofilización.

*Nota:* Tomado de PERRY'S CHEMICAL ENGINEERS HANDBOOK (9th ed.) (Capítulo 12, FIG. 12-111) editado por Green, D. W., & Southard, M. Z., 2018, McGraw-Hill.

En general, es una tecnología empleada para productos con un alto valor, donde se pueda justificar su aplicación para mejorar la calidad del producto notablemente. Esto se debe a que es una tecnología bastante costosa tanto en la adquisición del equipo necesario como durante la explotación del mismo.

### 5.1.2. Secado por atomización

La última alternativa estudiada para el secado del complejo de titanio es el secado por atomización, que consiste en cuatro etapas:

- Atomización del alimento.
- Contacto entre las gotas producidas y el aire de secado.
- Secado de las gotas.
- Separación del producto seco del aire.

Por un lado, la homogeneidad del spray, conseguida a partir de la atomización, y el alto porcentaje de humedad evaporada, permiten que la temperatura del producto seco sea mucho más baja que la del aire que sale de la cámara de secado. Para conseguir la atomización se utilizan atomizadores rotatorios, boquillas a presión y boquillas de dos fluidos.

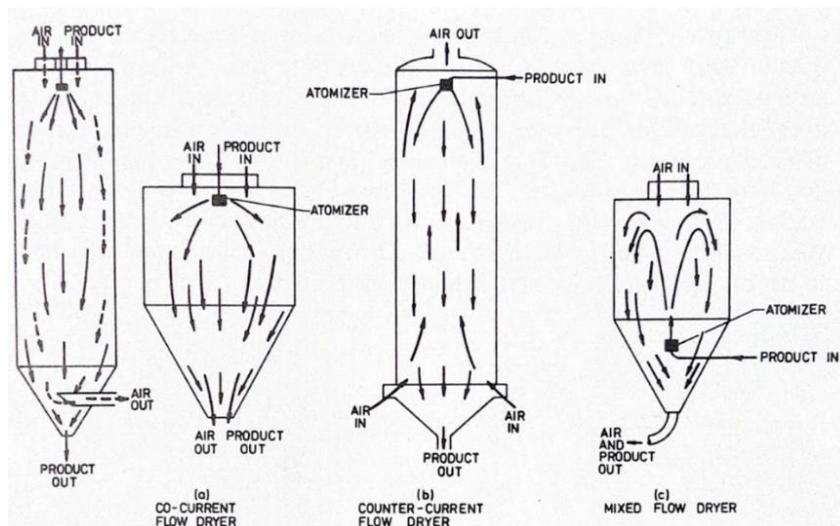
- **Atomizadores rotatorios:** como las ruedas o discos planos, aprovechan la energía centrífuga. El alimento se introduce por la parte central y fluye hacia el exterior. El líquido se extiende hacia el exterior de la superficie de la rueda o disco, que gira a gran velocidad, generando una película fina que al llegar a la periferia se desintegra rápidamente en pequeñas gotas.
- **Boquillas a presión:** el alimento se introduce en la boquilla a presión, a causa de esta presión el alimento sale por el orificio boquilla convertido en una fina película que al ser inestable provoca su desintegración en pequeñas gotas.
- **Boquillas neumáticas (dos fluidos):** se hace impactar una corriente del alimento líquido con una corriente de gas a gran velocidad, de esa forma se generan grandes fuerzas de fricción que provocan la desintegración del líquido en gotas.

La configuración de la zona de atomización se verá influida por el caudal a secar y por las características del producto seco final que se quieran obtener, como por ejemplo el tamaño de partícula.

Por otro lado, para el diseño de la cámara de secado es muy importante tener en cuenta la forma en la que se pretende poner en contacto el fluido atomizado con el aire de secado, determinado por la posición del atomizador dentro de la cámara en relación a la entrada de aire caliente. En la Figura A.5.2 se muestra un ejemplo de las formas de contacto del producto húmedo con el aire de secado, las cuales son: en paralelo, a contracorriente o

en flujo mixto. El tamaño de partícula deseado, la morfología de la partícula y la temperatura a la que se puede someter el producto, condicionan el método de introducción del aire caliente en la cámara y el diseño de ésta.

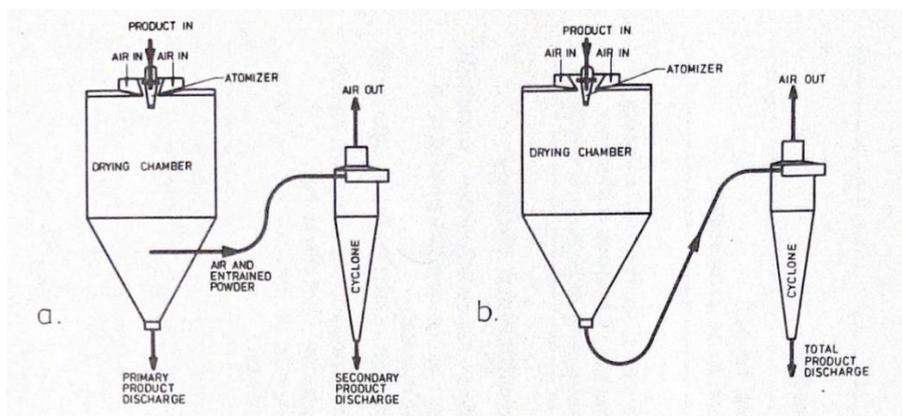
El tiempo de residencia de las gotas en la cámara se obtiene a partir del diseño de la cámara de secado y el flujo de aire que se introduce en ésta. Cualquier cambio en la morfología de la partícula y, por tanto, en las características del polvo seco, están profundamente relacionados con la velocidad de secado.



**Figura A.5.2:** Flujo del producto y el aire dentro de la cámara de secado del secado por atomización.

*Nota:* Tomado de Spray Drying (p. 29), por K. Masters, 1976, editado por G. Godwin.

Finalmente, la separación del polvo seco y el aire se produce al completarse la fase de secado, ilustrado en la Figura A.5.3.



**Figura A.5.3:** Puntos de descarga de producto en las cámaras de secado por atomización.

*Nota:* Tomado de Spray Drying Handbook (p. 33), por K. Masters, 1976, editado por G. Godwin.

En el primer sistema (Figura A.5.3a) se produce una separación primaria en la base de la cámara de secado y una separación secundaria gracias a un equipo de separación, usualmente un ciclón. Durante el secado la mayor parte del polvo ya seco cae al fondo de la cámara, que se suele diseñar con forma cónica para facilitar la recogida de producto, en este caso se produce una primera descarga en este punto. Debido a que el aire de secado al salir de la cámara arrastra una pequeña parte del polvo, se debe instalar un sistema de separación secundario como un ciclón, un filtro de mangas o un precipitador electrostático. La elección de uno u otro depende de la carga de polvo seco arrastrado por el aire y del grado de eficiencia deseado. En el segundo sistema, mostrado en la Figura A.5.3b, la descarga del polvo seco se produce únicamente en el sistema de separación.

Por último, el secado por atomización puede diseñarse como un proceso de ciclo abierto, ciclo cerrado o ciclo semi-cerrado, también existen otras disposiciones del proceso, pero se utilizan en contextos muy específicos alejados del objetivo de este proyecto.

## **5.2. Proceso de secado seleccionado**

Para el diseño final del sistema de secado nos hemos decantado por el secado por atomización. La decisión se ha tomado al comparar los costes esperados de cada proceso, sabiendo que todas las opciones barajadas son operaciones con un coste elevado. Además, se ha valorado que el secado por atomización es un proceso que opera en modo continuo.

La liofilización se ha descartado porque es una operación con dos pasos y ambos requieren mucha energía y, por tanto, tienen un elevado coste. Aplicándolo a nuestro proceso, para llegar a congelar el peróxido de hidrógeno haría falta una gran cantidad de energía, ya que su temperatura de congelación es aproximadamente  $-40^{\circ}\text{C}$  para disoluciones al 70%. Esto elevaría notablemente los costes de operación, a los que hay que añadir los costes de sublimar la disolución congelada. Si además sumamos el coste de los equipos utilizados, el coste total del proceso de liofilización se dispara.

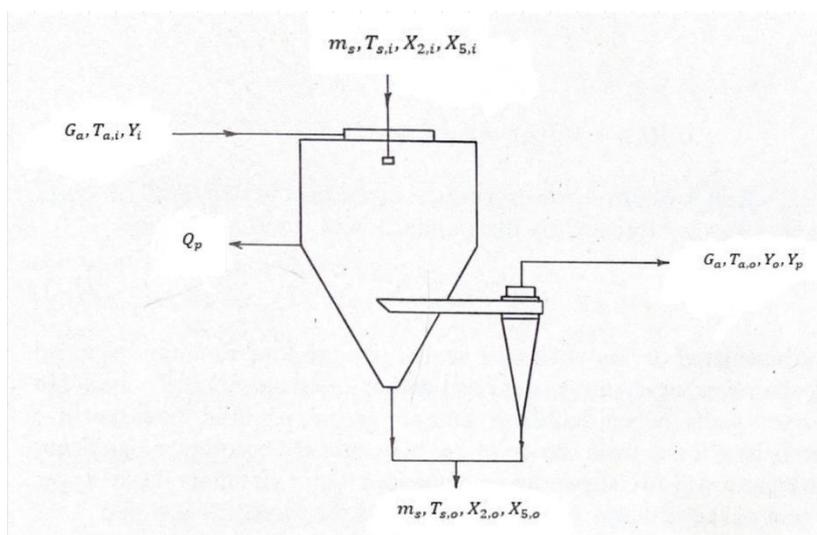
En el secado por atomización, solo influiría el coste de calentar el aire a una temperatura requerida, por lo que, aunque sumemos el coste de los equipos utilizados, éste proceso sería presumiblemente menos costoso en su totalidad que el de liofilización.

## **5.3. Diseño del sistema de secado**

Para el sistema de secado por atomización se ha planteado una cámara de secado con flujo mixto y calefacción directa de aire mediante un calentador eléctrico, éstos se utilizan comúnmente en laboratorios y plantas piloto ya que ofrecen un control preciso de la

temperatura. Además, se ha optado por la recuperación del polvo que pueda arrastrar el aire de salida utilizando un ciclón.

En la Figura A.5.1 se muestra como referencia un esquema de un secadero por atomización similar al elegido, aunque en esta imagen el flujo es paralelo.



**Figura A.5.1:** Esquema de un secadero por atomización.

Nota: Tomado de Spray Drying Handbook (p. 95), por K. Masters, 1976, editado por G. Godwin.

El objetivo principal de esta etapa es la de reducir el contenido de humedad del producto final a un 5%, eliminando la mayor parte de peróxido y de agua y obteniendo un polvo. Para los cálculos se han utilizado los subíndices “i” y “o” para denominar las propiedades de entrada y salida al sistema, respectivamente.

No se ha tenido en cuenta el calor perdido a través de las paredes de la cámara de secado ya que, para los cálculos, se ha trabajado con la hipótesis de que no hay pérdida de calor ni retención de polvo en las paredes de la cámara de secado. Se ha hecho así porque lo que se busca es comprobar si se puede conseguir el grado de secado deseado sin ahondar profundamente en el diseño del secadero por atomización, por esa misma razón, no se incluyen los cálculos de calefacción del aire de entrada a la cámara, ni el dimensionamiento del ciclón de recuperación de polvo.

### 5.3.1. Condiciones iniciales del sistema

En la Tabla A.5.1 aparece caracterizada la corriente de entrada al sistema de secado, que proviene directamente del reactor, aquí se muestran los caudales molares ( $F_{j,i}$ ) y los caudales másicos de entrada ( $m_{j,i}$ ), calculados con la ecuación 52, de cada una de las especies químicas. También se muestran las fracciones másicas, calculadas con la ecuación 53.

$$m_{j,i} = F_{j,i} \cdot PM_j \quad \text{kg/h} \quad (\text{ec.52})$$

$$w_{j,i} = \frac{m_{j,i}}{m_{tot,i}} \quad (\text{ec.53})$$

Donde  $m_{tot,i}$  hace referencia al caudal másico total de entrada a la cámara de secado, calculado a partir de la ecuación 54.

$$m_{tot,i} = \Delta m_{j,i} \quad \text{kg/h} \quad (\text{ec.54})$$

$$m_{tot,i} = m_{2,i} + m_{3,i} + m_{4,i} + m_{5,i} + m_{6,i} = 146,311 \quad \text{kg/h}$$

**Tabla A.5.1:** Propiedades de la corriente de entrada al secado por atomización.

Especie química	A <sub>j</sub>	F <sub>j,i</sub> (kmol/h)	m <sub>j,i</sub> (kg/h)	w <sub>j,i</sub>
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	1,414	48,104	0,328
NH <sub>3</sub>	A <sub>3</sub>	0,106	1,805	1,234·10 <sup>-2</sup>
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	7,414·10 <sup>-3</sup>	0,564	3,855·10 <sup>-3</sup>
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	5,223	94,119	0,643
CTI	A <sub>6</sub>	2,899·10 <sup>-4</sup>	0,283	1,161·10 <sup>-2</sup>

*Nota:* Donde CTI identifica al complejo de titanio.

Analizando la corriente de entrada al atomizador, se puede ver que la suma de las fracciones másicas del agua y el peróxido es de 0,971, es decir aproximadamente el 97% del caudal de entrada total; al ser un porcentaje tan elevado se puede considerar, para simplificar los cálculos, que la corriente está formada exclusivamente por dichas especies. Por tanto, no se tendrán en cuenta los caudales de amoníaco y de ácido glicólico y sólo trabajaremos con datos del agua, el peróxido y el complejo.

Por otro lado, consideraremos que no habrá ninguna fuga o retención de producto o aire en la cámara, por lo que:

$$\text{Entrada} = \text{salida}$$

Con estos datos se hizo una primera iteración en los cálculos obteniendo que el caudal de aire necesario para obtener el secado deseado era de aproximadamente 16200 kg/h; Una cifra bastante elevada teniendo en cuenta la cantidad de producto obtenido. Por esa razón se ha decidido introducir una torre de rectificación a fin de eliminar la mayor parte del agua y así, concentrar la corriente introducida en la cámara de secado.

La torre de rectificación parece la alternativa más fácil de implantar de las tres mencionadas en la memoria. Al ser el agua más volátil que el peróxido debería conseguirse una buena separación, concentrando la corriente que se enviará a la cámara de secado.

A continuación, se detallan los cálculos de la torre de rectificación y los cálculos de la nueva iteración a la cámara de secado. Manifestar que el procedimiento mostrado en esta segunda iteración es el mismo que se siguió con la primera.

### 5.3.2. Columna de rectificación

Los cálculos de este apartado se han hecho de forma manual siguiendo un método gráfico en lugar de utilizar el programa de simulación de procesos “ProSimPlus”, porque no ha sido posible hacerlo, debido a que el programa no dispone de ningún modelo termodinámico que se adecue a nuestra mezcla de componentes. Se hicieron varias pruebas con varios de los modelos termodinámicos incluidos en el programa, pero los resultados que proporcionaban carecían de sentido físico.

En este apartado se han seguido las explicaciones del método gráfico McCabe-Thiele descritas por M<sup>a</sup> Dolores Rodrigo Carbonell en el libro *Operaciones de separación por transferencia de materia y transmisión de calor (N35)* publicado en 2011. También se han seguido las explicaciones del libro para el cálculo de la volatilidad relativa media y para construir el diagrama de equilibrio a partir de ella.

Como se ha mencionado anteriormente, aproximadamente un 97% del caudal a tratar corresponde al agua y al peróxido de hidrógeno, por lo que en el proceso de destilación solo se tendrán en cuenta éstos.

#### 5.3.2.1. Volatilidad relativa media y diagrama de equilibrio

La volatilidad de los componentes a separar tiene un alto impacto en el equilibrio ya que nos indica si se podrán separar fácilmente por destilación. Para comprobar que, efectivamente, podemos separar por destilación el agua del peróxido de hidrógeno se ha calculado la volatilidad relativa del agua (A) con respecto al peróxido (P).

Para ello, partimos de la volatilidad absoluta de un componente, que se define como el cociente entre la presión parcial del componente en fase gas ( $p_A$ ) y su fracción en fase líquida ( $x_A$ ).

$$\alpha_A = \frac{p_A}{x_A} \quad (\text{ec.55})$$

Al tratarse de una mezcla binaria y teniendo en cuenta la definición de la presión parcial de un componente en una mezcla (ecuación 56), obtenemos la ecuación 57.

$$p_A = x_A \cdot \gamma_A \cdot p_A^0 \quad (\text{ec.56})$$

Donde  $\gamma_A$  es el coeficiente de actividad del componente.

$$\alpha_A = \frac{x_A \cdot \gamma_A \cdot p_A^0}{x_A} = \gamma_A \cdot p_A^0 \quad (\text{ec.57})$$

Pero si además podemos admitir que la fase líquida de nuestra mezcla se comporta de forma ideal ( $\gamma_i = 1$ ), la ecuación 57 se reduce a la ecuación de la volatilidad para componentes puros (ecuación 58).

$$p_A = p_A^0 \quad (\text{ec.58})$$

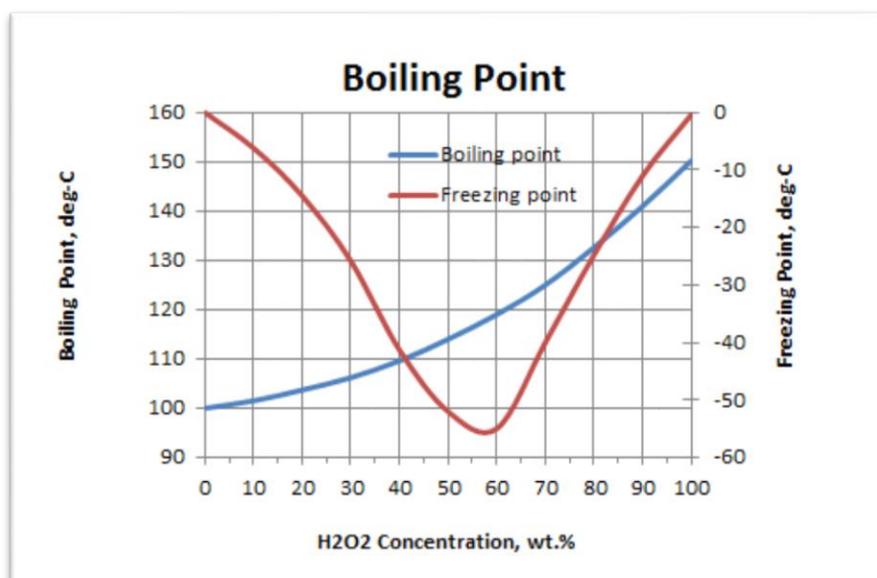
La volatilidad relativa del componente A (agua) respecto al componente P (peróxido de hidrógeno) se define como el cociente entre las volatilidades absolutas de cada uno de los componentes (ecuación 59), pero asumiendo que se comporta de forma ideal, obtendríamos que la volatilidad relativa puede entenderse como la ecuación 60.

$$\alpha_{AP} = \frac{\gamma_A \cdot p_A^0}{\gamma_P \cdot p_P^0} \quad (\text{ec.59})$$

$$\alpha_{AP} = \frac{p_A^0}{p_P^0} \quad (\text{ec.60})$$

Hay casos de sistemas binarios en los que la volatilidad relativa, que al asumir que nos encontramos en el caso ideal sólo depende de la temperatura, se mantiene relativamente constante en el intervalo que abarca el diagrama de equilibrio. En estos casos es correcto utilizar la volatilidad relativa media ( $\alpha_m$ ), calculada a partir de la media geométrica de los valores de la volatilidad de las etapas de cabeza y cola de la columna.

Por tanto, el intervalo de temperaturas para el que se calculará la media geométrica será el situado entre la temperatura de condensación del destilado y la temperatura de ebullición de la mezcla. La temperatura de ebullición de la mezcla, una disolución al 32,8% en peso de peróxido de hidrógeno, se ha obtenido a partir de la Figura A.5.2 siendo  $T=105^\circ\text{C}$ ; el agua empieza a condensar cuando su temperatura es inferior a  $100^\circ\text{C}$  y para ampliar el intervalo de valores para el cálculo, se ha tomado  $T=90^\circ\text{C}$  como la temperatura de condensación.



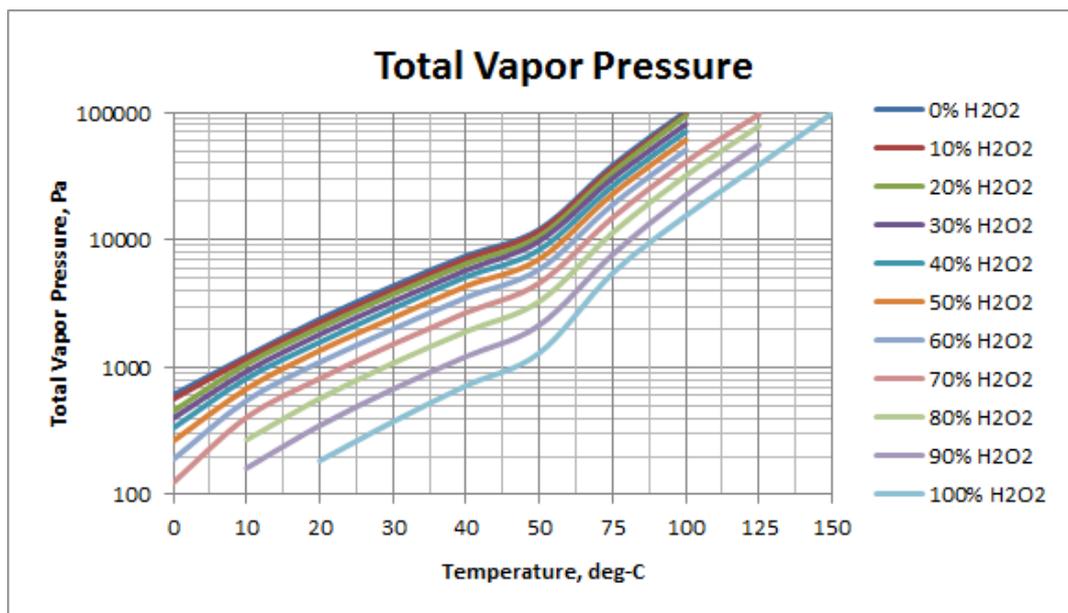
**Figura A.5.2:** Puntos de ebullición y congelación en función de la concentración de peróxido de hidrógeno disoluciones peróxido-agua.

*Nota:* Tomado de la librería técnica de la página web de USP Technologies.

A partir de ese intervalo, tomando escalones entre ambas temperaturas, se han obtenido las presiones de vapor de los componentes puros para calcular la volatilidad relativa para cada una de las temperaturas. Todos los datos se muestran en la Tabla A.5.2, habiendo obtenido las presiones de vapor del peróxido de hidrógeno a partir de la Figura A.5.3, entrando con cada una de las temperaturas hasta la línea de 100% peróxido y obteniendo la respectiva presión, y las presiones de vapor de agua de sus tablas de vapor (mostradas en el Anexo 1).

**Tabla A.5.2:** Volatilidades relativas y presiones de vapor en un intervalo de temperaturas.

T (°C)	P <sub>v</sub> agua (Pa)	P <sub>v</sub> peróxido (Pa)	$\alpha_{AP}$
90	70109	11000	6,374
92	75608	12000	6,301
94	81461	13000	6,266
96	87686	14000	6,263
98	94301	15000	6,287
100	101325	16000	6,333
105	120800	19000	6,358



**Figura A.5.3:** Presión total de vapor en función de la temperatura para mezclas a diferentes concentraciones de peróxido de hidrógeno.

Nota: Tomado de la librería técnica de la página web de USP Technologies.

Observando los datos obtenidos de la volatilidad, se puede asumir que efectivamente se mantienen bastante constantes en el tramo estudiado, por tanto, se procederá al cálculo de la media geométrica teniendo en cuenta que la cantidad de datos es N=7.

$$\alpha_{mAP} = \sqrt[7]{6,374 \cdot 6,301 \cdot \dots \cdot 6,358} = 6,312$$

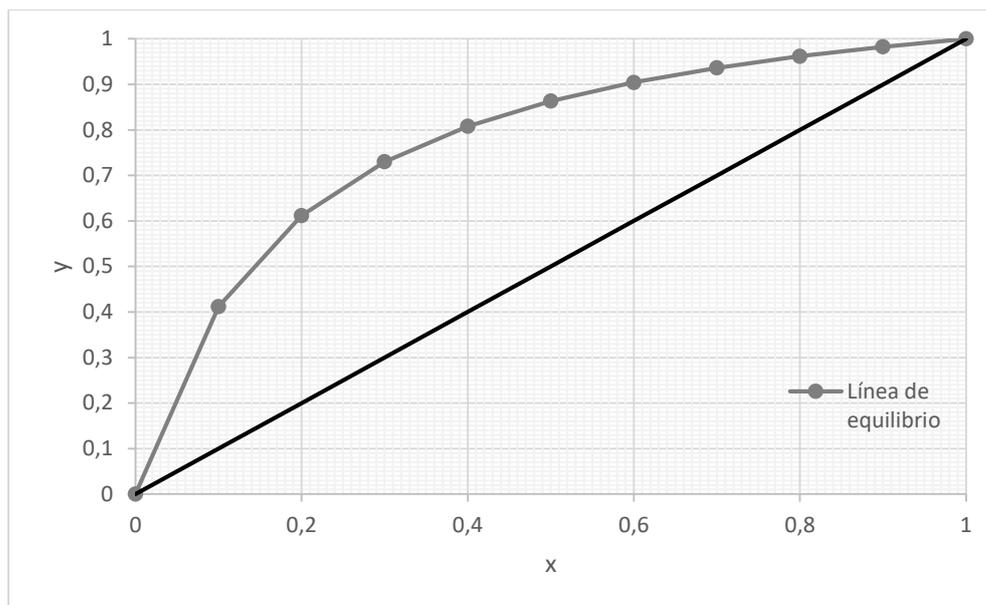
Para obtener la ecuación para construir el diagrama de equilibrio partimos de la ecuación facilitada en el libro (ecuación 61), en la que ya se relaciona la fracción en la fase gas del componente más volátil ( $y_A$ ) con la volatilidad relativa media y la fracción de este componente en el líquido ( $x_A$ ).

$$y_A = \frac{\alpha_{mAP} \cdot x_A}{1 + x_A(\alpha_{mAP} - 1)} \tag{ec.61}$$

A partir de esta ecuación se han dado valores a  $x_A$  para obtener valores de  $y_A$ , los datos se muestran en la Tabla A.5.3, y a partir de estos datos se ha construido el diagrama de equilibrio, mostrado en la Figura A.5.4.

**Tabla A.5.2:** Datos de la línea de equilibrio.

$x_A$	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1
$y_A$	0	0,412	0,612	0,730	0,807	0,863	0,905	0,936	0,962	0,982	1



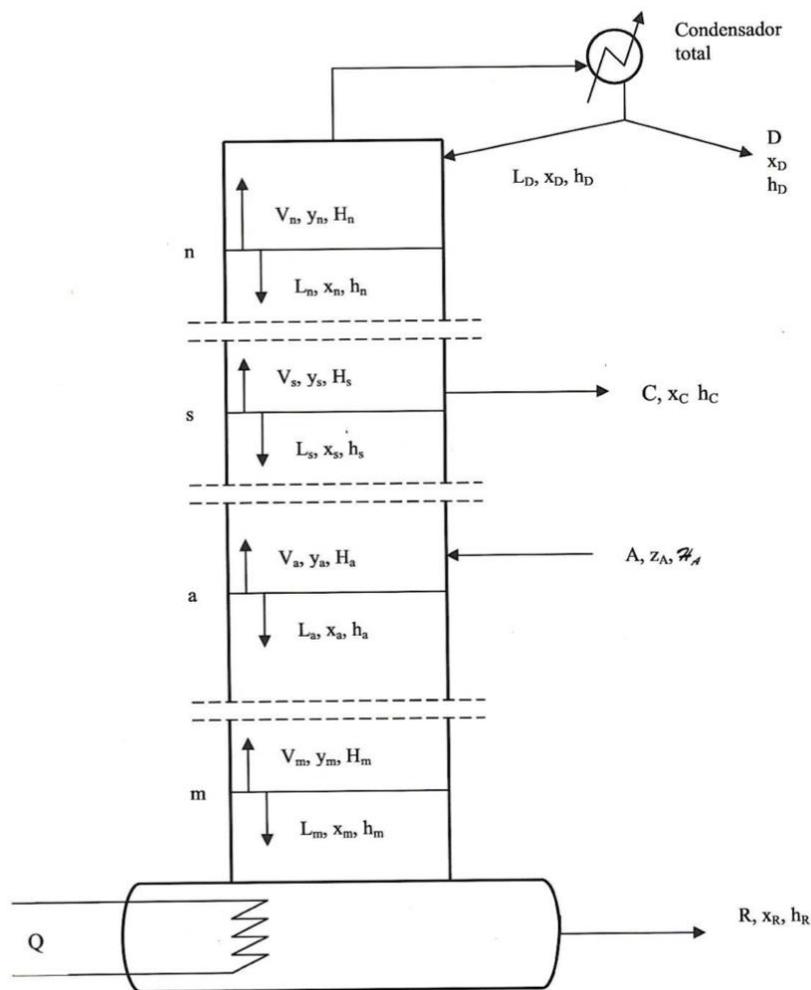
**Figura A.5.4:** Diagrama de equilibrio. Creación propia.

### 5.3.2.2. Método gráfico McCabe-Thiele

A partir del diagrama de equilibrio obtenido se puede empezar a desarrollar el método gráfico McCabe-Thiele. En la Figura A.5.5 se muestra el esquema de una columna de rectificación de platos a modo de referencia.

La nomenclatura específica de la columna que nos interesa para los cálculos en este método es la siguiente:

- $A$  = Caudal másico de alimento.
- $R$  = Caudal másico de residuo.
- $D$  = Caudal másico de destilado.
- $L_D$  = Caudal de reflujo.
- $L_D/D$  = Razón de reflujo.
- $y_j$  = Composición de un vapor (fracción molar o másica)
- $x_i$  = Composición de un líquido (fracción molar másica).
- $z_A$  = Composición del alimento.
- $H_j$  = Entalpía de un vapor.
- $h_j$  = Entalpía de un líquido.
- $\mathcal{H}_A$  = Entalpía del alimento.



**Figura A.5.5:** Esquema de una columna de rectificación de platos.

*Nota:* Tomado de *Operaciones de separación por transferencia de materia y transmisión de calor (N35)*, Tema 7 (p.1), publicado en 2011.

En este método se admite que los caudales de vapor y de líquido se mantienen constantes a lo largo de toda la columna. El primer paso sería la resolución de los balances de materia (ecuaciones 62 y 63) para conocer el valor de los caudales de destilado y de residuo.

$$A = R + D \quad (\text{ec.62})$$

$$A \cdot z_A = R \cdot x_R + D \cdot x_D \quad (\text{ec.63})$$

Todas las composiciones que aparecen en las ecuaciones de destilación hacen referencia al componente más volátil, que en este caso es el agua. Las variables conocidas en los balances son el caudal de alimento ( $A = m_{\text{tot},i} = 146,311 \text{ kg/h}$ ) y las composiciones del

alimento ( $x_A = 0,643$ ), del residuo ( $x_R = 0,1$ ) y del destilado ( $x_D = 0,95$ ), estas dos últimas fijadas en función de la composición final que se desee.

Sustituyendo los datos en la ecuación 62 obtenemos:

$$146,311 = R + D \quad \rightarrow \quad R = 146,311 - D \quad (\text{ec.64})$$

Sustituyendo los datos en la ecuación 63 y sustituyendo R por la ecuación 64, obtenemos:

$$146,311 \cdot 0,643 = (146,311 - D) \cdot 0,1 + D \cdot 0,95$$

$$94,078 = 14,631 - 0,1 \cdot D + 0,95 \cdot D$$

$$94,078 - 14,631 = 0,85 \cdot D$$

$$D = \frac{79,447}{0,85} = 93,467 \text{ kg/h}$$

Sustituyendo D en la ecuación 64:

$$R = 146,311 - 93,467 = 52,844 \text{ kg/h}$$

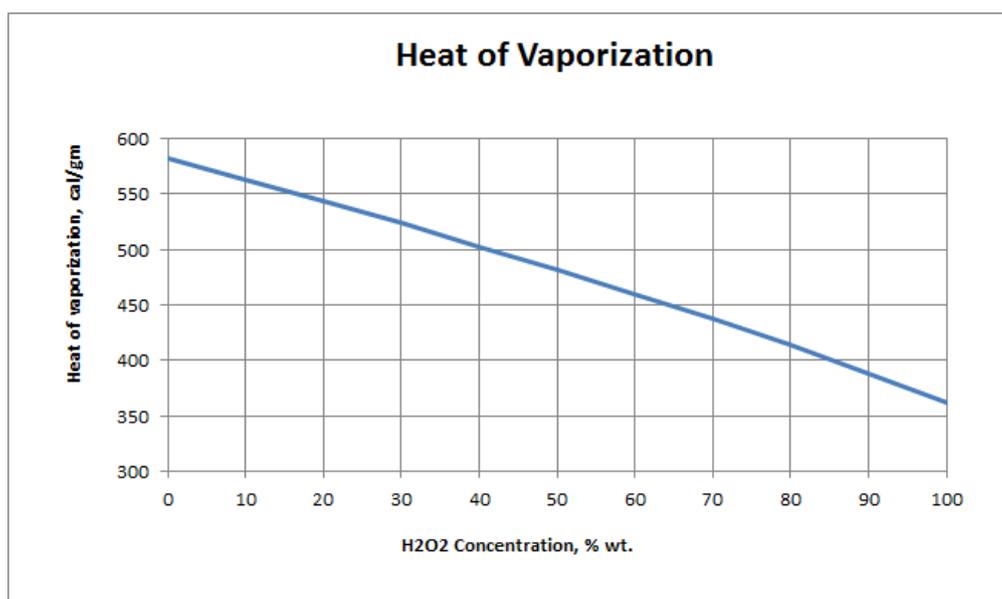
El segundo paso sería dibujar el diagrama de equilibrio, ya mostrado anteriormente en la Figura A.5.4 y situar sobre la diagonal los valores de  $x_R$ ,  $x_D$  y  $z_A$ , estos puntos se muestran situados en el diagrama en la Figura A.5.7 de verde, azul y amarillo respectivamente.

El tercer paso sería calcular el valor de “q” y trazar la “recta q” en el diagrama, esta recta marca el punto de intersección entre la recta operativa de enriquecimiento y la de agotamiento. El valor de “q” se determina mediante la ecuación 65.

$$q = \frac{H_a - \mathcal{H}_A}{H_a - h_a} \quad (\text{ec.65})$$

Donde el denominador representa el calor latente molar de vaporización de la mezcla, obtenido a partir de la Figura A.5.6. Se ha entrado a partir de una concentración del 32% de peróxido, para el cual el valor del calor latente de vaporización es aproximadamente de 520 cal/g.

$$H_a - h_a = 525 \text{ cal/g} = 2177,136 \text{ kJ/kg}$$



**Figura A.5.6:** Calor de latente de vaporización de una disolución agua-peróxido en función de su concentración.

*Nota:* Tomado de la librería técnica de la página web de USP Technologies.

Por otro lado, el numerador de la ecuación 65 representa el calor necesario para vaporizar 1 mol de alimento. Según los apuntes consultados de la asignatura EQ1022- *Transferencia de materia y operaciones de separación I*, el numerador se puede expresar como:

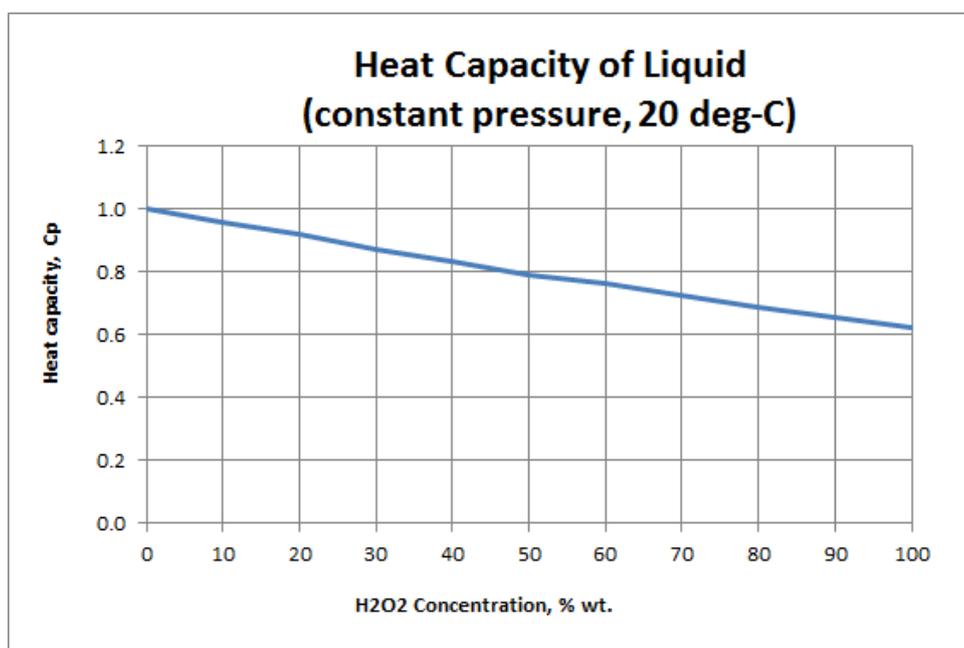
$$H_a - \mathcal{H}_A = (H_a - h_a) + (h_a - \mathcal{H}_A) = (H_a - h_a) + C_{p_{liq}} \cdot (T_{eb} - T_A) \quad (\text{ec.66})$$

Donde:

- $(H_a - h_a)$  = Calor latente de vaporización.
- $C_{p_{liq}}$  = Calor específico medio de las mezclas líquidas.
- $T_{eb}$  = Temperatura de ebullición de la mezcla.
- $T_A$  = Temperatura del alimento.

El valor del calor específico medio de las mezclas líquidas se ha obtenido a partir de la Figura A.5.7, se ha entrado a partir de una concentración del 32% de peróxido obteniendo un valor del calor específico de 0,84 cal/g·°C.

$$C_{p_{liq}} = 0,84 \frac{\text{cal}}{\text{g} \cdot ^\circ\text{C}} = 3,517 \frac{\text{kJ}}{\text{kg} \cdot ^\circ\text{C}}$$



**Figura A.5.7:** Capacidad calorífica de la mezcla líquida agua-peróxido en función de su concentración.

*Nota:* Tomado de la librería técnica de la página web de USP Technologies.

Sustituyendo los datos en la ecuación 66:

$$H_a - \mathcal{H}_A = 2175,6 + 3,517 \cdot (105 - 26) = 2451,443 \text{ kJ/kg}$$

Por tanto, sustituyendo los valores del numerador y el denominador en la ecuación 65 obtenemos:

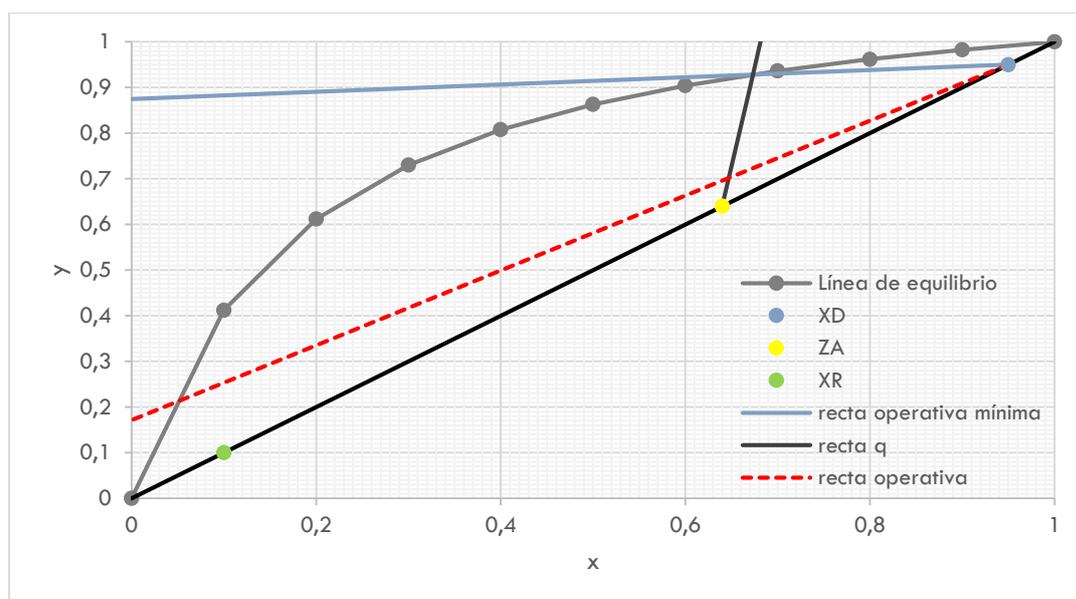
$$q = \frac{2451,443}{2173,6} = 1,1278 \approx 1,13$$

Teniendo el valor de “q” podemos utilizar la ecuación 67 para obtener valores de los puntos por los que pasa la “recta q” (mostrados en la Tabla A.5.3). La pendiente de esta recta se muestra en la ecuación 68. En la Figura A.5.8 se puede ver dibujada sobre la línea de equilibrio la “recta q”, en gris oscuro, teniendo como origen el punto (z<sub>A</sub>, z<sub>A</sub>).

$$y = x \cdot \left( \frac{q}{q-1} \right) - \frac{z_A}{q-1} \tag{ec.67}$$

**Tabla A.5.3:** Valores de la “recta q”.

<b>x</b>	0,64	0,65	0,66	0,67	0,68	0,69	0,7
<b>y</b>	0,64	0,727	0,814	0,901	0,988	1,075	1,162



**Figura A.5.8:** Obtención de la recta operativa mínima y la recta operativa sobre el diagrama de equilibrio y la recta q. Creación propia.

En nuestro caso el cuarto paso consiste en calcular la razón de reflujo mínimo para poder calcular la razón de reflujo de operación, para ello, primero debemos situar la recta operativa mínima, mostrada en la Figura A.5.7 en azul.

La recta operativa mínima se obtiene trazando una recta desde el punto  $(x_D, x_D)$  y haciéndola pasar por el punto en el que la “recta q” corta la curva de equilibrio. A partir del valor de la “y” de ese punto y de la ecuación de la pendiente de esa recta (ecuación 68) se puede calcular la razón de reflujo mínima.

$$y_{min} = \frac{x_D}{\left(\frac{L_D}{D}\right)_{min} + 1} \quad (\text{ec.68})$$

Según la Figura A.5.7,  $y_{min}=0,875$ , por tanto, sustituimos en la ecuación 68:

$$0,875 = \frac{0,95}{\left(\frac{L_D}{D}\right)_{min} + 1}$$

De esta forma obtenemos que el valor de la razón de reflujo mínimo es:

$$\left(\frac{L_D}{D}\right)_{min} = 0,0857$$

Según el libro, el valor óptimo de la razón de reflujo oscila entre 1,5-2 veces el valor de la razón mínima. En este caso nos hemos decantado por utilizar el valor más alto de la horquilla porque la razón mínima es muy pequeña, por lo que:

$$\left. \frac{L_D}{D} \right|_{op} = 2 \cdot \left. \frac{L_D}{D} \right|_{min}$$

De esta forma,

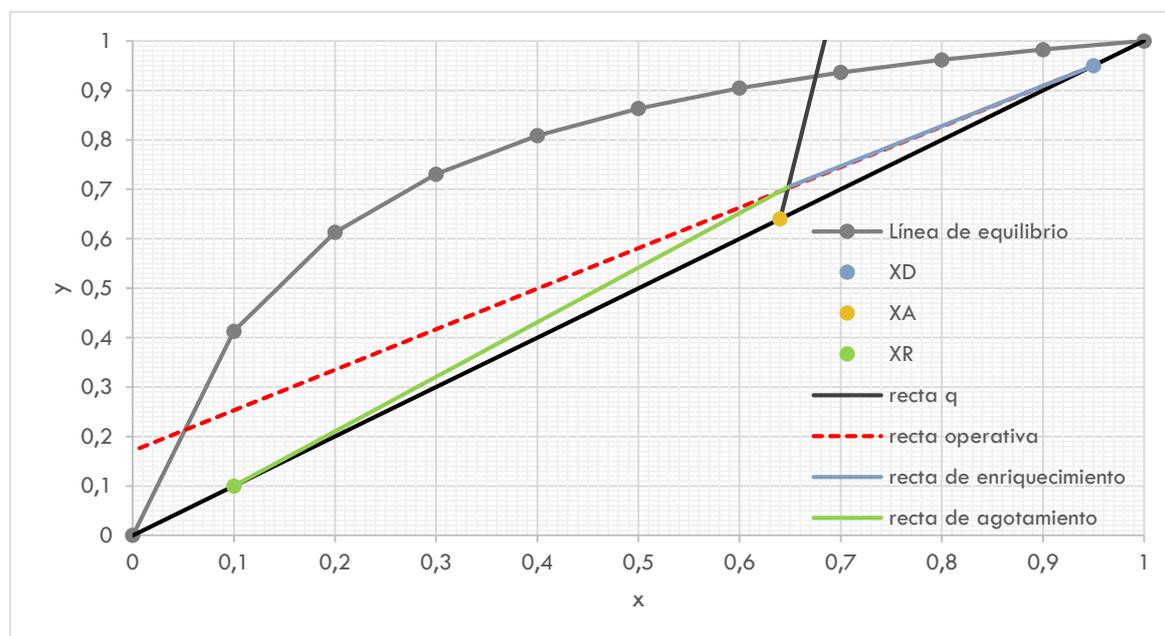
$$\left. \frac{L_D}{D} \right|_{op} = 2 \cdot 0,0857 = 0,1714$$

Por tanto,

$$\frac{L_D}{D} = 0,1714 \quad \rightarrow \quad L_D = 0,1714 \cdot 93,467 = 16,02 \text{ kg/h}$$

El quinto paso del proceso sería dibujar en el diagrama las rectas operativas de enriquecimiento y agotamiento. En este caso, como en la Figura A.5.7 ya habíamos trazado la recta operativa, ahora solo hay que trazar sobre ella otra recta desde el punto  $(x_D, x_D)$  hasta el lugar en el que la recta operativa intersecta con la “recta q”. Ésta será la recta operativa de enriquecimiento, mostrada en la Figura A.5.8 en color azul.

Para ubicar la recta operativa de agotamiento basta con situar su inicio en el punto  $(x_R, x_R)$  y trazar una línea hasta el punto en el que la “recta q” coincide con la recta operativa. En la Figura A.5.9 se muestra la recta operativa de agotamiento en color verde.

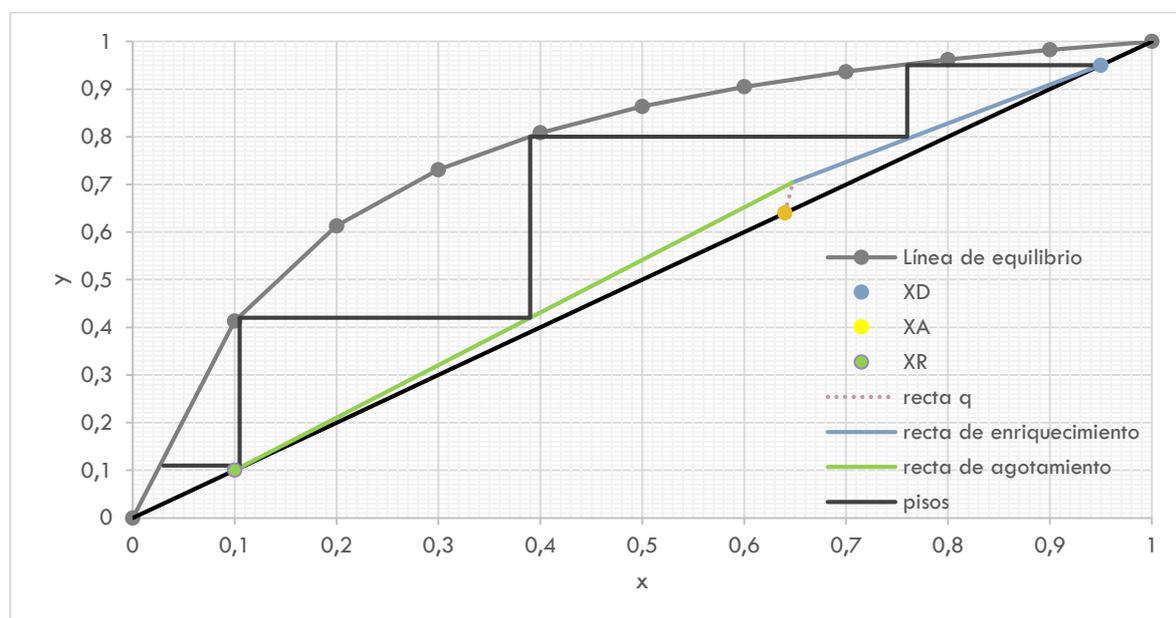


**Figura A.5.9:** Obtención de las rectas de enriquecimiento y agotamiento. Creación propia.

Llegados a este punto, sólo resta el último paso del proceso que consiste en obtener los pisos necesarios para la columna. Para ello se traza una primera línea horizontal desde el punto  $(x_D, x_D)$  hasta el equilibrio, en el punto en el que se cruza la horizontal con el equilibrio

se traza una vertical hacia la recta operativa de enriquecimiento. Desde el nuevo punto en la operativa de enriquecimiento se repite otra vez el trazado de líneas y se hace tantas veces como sea necesario hasta llegar a una última línea vertical que quede por debajo del punto ( $x_R, x_R$ ). Cada una de las esquinas de los escalones dibujados situada sobre el equilibrio representa un plato, y el escalón en el que se pasa de la operativa de enriquecimiento a la de agotamiento, es el plato ideal para colocar la alimentación a la columna.

De esta forma se obtienen de forma gráfica los platos teóricos necesarios para obtener un destilado y un residuo a las concentraciones deseadas. En la Figura A.5.10 se muestra el resultado del proceso descrito y en ella se puede apreciar que para este caso se han obtenido un total de 4 platos, siendo el segundo el plato de alimentación.



**Figura A.5.10:** Obtención de los pisos de la columna. Creación propia.

### 5.3.4. Balances a la cámara de secado

Después de pasar por el proceso de destilación la corriente líquida, extraída por la cola de la torre de destilación, contiene principalmente una elevada concentración de peróxido de hidrógeno, algo de agua y el complejo.

Suponemos que el amoniaco presente en la corriente antes del proceso de destilación, se ha evaporado y ha sido arrastrado por la cabeza de la columna junto con el agua, ya que su temperatura de ebullición es de  $-33,34^{\circ}\text{C}$ . Por otro lado, suponemos que los restos de ácido glicólico, también presentes antes del proceso de destilación, permanecen inalterados y serían arrastrados por la corriente líquida extraída por la cola del proceso, el rango de

temperaturas utilizado no debería afectar de ningún modo a su integridad porque el ácido glicólico empieza a descomponerse a partir de 200°C.

Por tanto, el caudal másico total de entrada a la cámara de secado es igual al caudal másico de residuo extraído de la torre de destilación, por lo que:

$$m_{tot,i} = R = 52,844 \text{ kg/h}$$

Como sabemos que la corriente de residuo de la torre de destilación tenía una fracción másica de 0,1 de agua, con este dato podemos calcular la masa de agua en esa corriente y a partir de ahí, caracterizar el resto de especies presentes en la corriente.

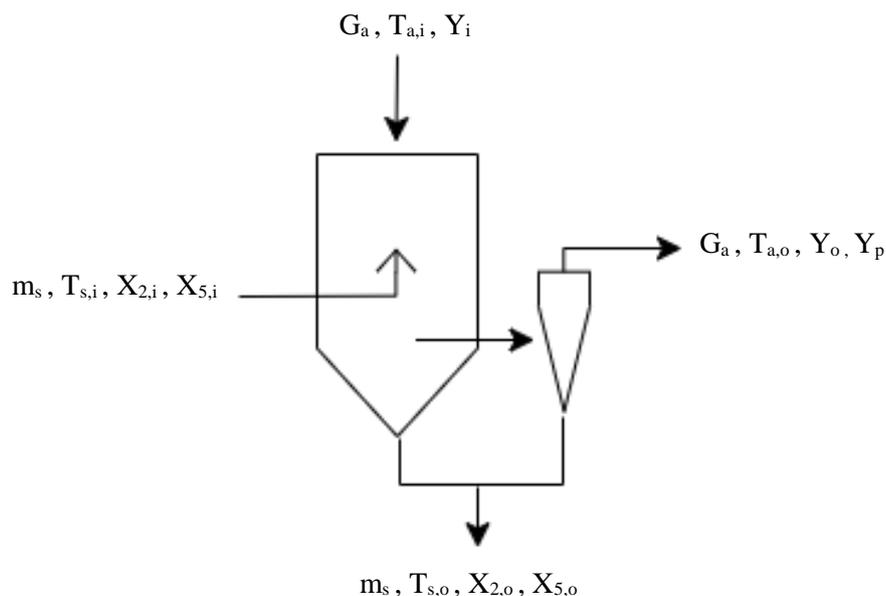
En la Tabla A.5.4 se muestran las características de la corriente extraída de la cola de la torre de destilación, que se alimentará a la cámara de secado.

**Tabla A.5.4:** Caracterización de la corriente de entrada a la cámara de secado.

Especie química	A <sub>j</sub>	w <sub>j</sub>	m <sub>j,i</sub> (kg/h)
H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	A <sub>2</sub>	0,884	46,713
OH-CH <sub>2</sub> -COOH	A <sub>4</sub>	1,067·10 <sup>-2</sup>	0,564
H <sub>2</sub> O	A <sub>5</sub>	0,1	5,284
CTI	A <sub>6</sub>	5,355·10 <sup>-3</sup>	0,283

Ahora, sólo el peróxido de hidrógeno representa el 88% de la corriente, si le sumamos el agua, entre los dos suponen más del 98% del total. En estas circunstancias parece correcto asumir que las especies que realmente influirán en los balances de materia y de energía serán solo el peróxido, el agua y el complejo. El amoníaco ya no aparece en la tabla porque si se tiene en cuenta su temperatura de ebullición lo más factible es que se evapore en la columna y acabe arrastrado por el agua evaporada.

En la Figura A.5.11 se muestra un diagrama de la cámara de secado sus corrientes, indicando las variables relevantes para los balances.



**Figura A.5.11:** Diagrama de la cámara de secado y sus corrientes. Creación propia.

Donde:

$m_s$  = caudal másico de sólido seco (kg s.s./h)

$G_a$  = caudal másico de aire seco (kg a.s./h)

$Q_p$  = Calor perdido (kJ/h)

$T_{s,i}$  = Temperatura del sólido a la entrada (K)

$T_{s,o}$  = Temperatura del sólido a la salida (K)

$T_{a,i}$  = Temperatura del aire a la entrada (K)

$T_{a,o}$  = Temperatura del aire a la salida (K)

$X_{2,i}$  = Humedad en base seca de peróxido en el alimento (kg  $H_2O_2$ /kg s.s.)

$X_{2,o}$  = Humedad en base seca de peróxido en el producto (kg  $H_2O_2$ /kg s.s.)

$X_{5,i}$  = Humedad en base seca de agua en el alimento (kg  $H_2O$ /kg s.s.)

$X_{5,o}$  = Humedad en base seca de agua en el producto (kg  $H_2O$ /kg s.s.)

$Y_i$  = Humedad absoluta del aire de entrada referida al agua (kg  $H_2O$ /kg a.s.)

$Y_o$  = Humedad absoluta del aire de salida referida al agua (kg  $H_2O$ /kg a.s.)

$Y_p$  = Humedad absoluta del aire de salida referida al peróxido (kg  $H_2O_2$ /kg a.s.)

#### 5.3.4.1. Balance de materia a la cámara de secado

Para los balances a la cámara de secado, en lugar de trabajar con fracciones másicas o molares, se emplea la humedad en base seca (ecuación 69).

$$X_{j,i} = \frac{m_{j,i}}{m_{ss}} \text{ kg/kgss} \quad (\text{ec.69})$$

Donde  $m_{ss}$  es caudal másico de sólido seco, es decir, el caudal másico de complejo.

$$m_{ss} = 0,283 \text{ kgss/h}$$

Como queremos eliminar tanto el agua como el peróxido, necesitamos la humedad en base seca para el peróxido ( $X_{2,i}$ ) y para el agua ( $X_{5,i}$ ). Por tanto:

$$X_{2,i} = \frac{m_{2,i}}{m_{ss}} = \frac{46,713 \text{ kgH}_2\text{O}_2/\text{h}}{0,283 \text{ kgss/h}} = 165,064 \text{ kgH}_2\text{O}_2/\text{kgss}$$

$$X_{5,i} = \frac{m_{5,i}}{m_{ss}} = \frac{5,254 \text{ kgH}_2\text{O/h}}{0,283 \text{ kgss/h}} = 18,565 \text{ kgH}_2\text{O/kgss}$$

Por otro lado, la humedad deseada en el producto seco es de un 5%, por lo que la humedad total en el caudal de producto será:

$$\text{Humedad en el producto seco} = \frac{5}{95} = 5,263 \cdot 10^{-2} \text{ kg/kgss}$$

Sabemos que, en este caso, la humedad en el producto seco será la suma de las humedades en base seca del peróxido y del agua a la salida de la cámara de secado (ecuación 70).

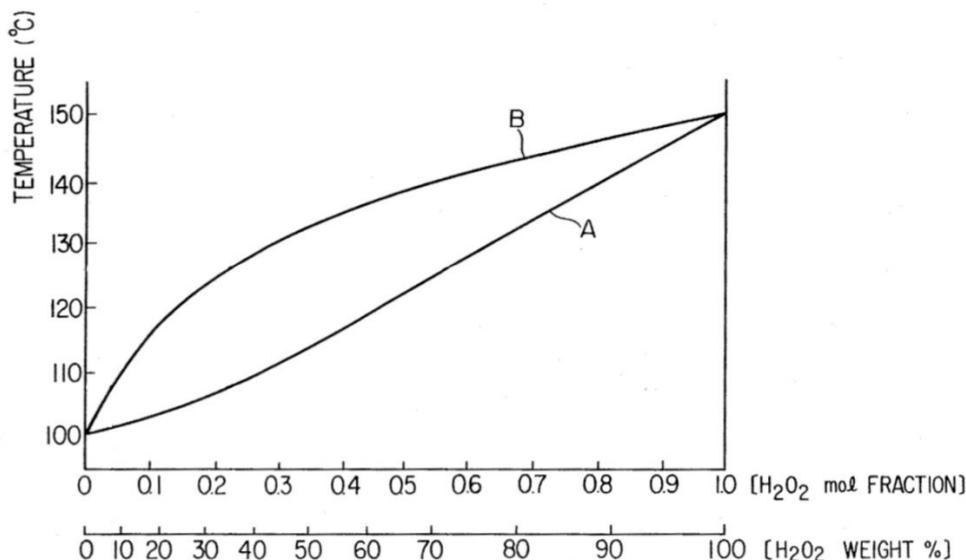
$$5,263 \cdot 10^{-2} = X_{2,o} + X_{5,o} \quad (\text{ec.70})$$

Como se ha asumido que en el proceso de secado solo intervienen el peróxido y el agua, a partir del diagrama de equilibrio liquido-vapor para dicha mezcla (Figura A.5.12) podemos obtener la composición del líquido y del vapor a una determinada temperatura.

De esta forma, si entramos con la fracción másica del peróxido en el caudal de entrada (89,5%) obtenemos que, quedándonos justo por debajo de la línea de vapor del diagrama, la concentración de peróxido en el líquido a 145°C sería del 95% en peso.

Ahora sabemos que la humedad total en base seca del producto a la salida es un 95% peróxido de hidrógeno, por lo que podemos calcular la humedad en base seca de peróxido a la salida multiplicando la fracción másica del peróxido a la salida por el caudal de humedad total.

$$X_{2,o} = 0,95 \cdot 5,263 \cdot 10^{-2} = 4,999 \cdot 10^{-2} \text{ kgH}_2\text{O}_2/\text{kgss}$$



**Figura A.5.12:** Diagrama T-xy para disoluciones de peróxido de hidrógeno en agua.

Nota: Tomado de la patente No. 4,797,255 de Hatanaka, et al. (1989).

Sustituyendo este dato en la ecuación 70, podemos calcular la humedad en base seca de agua a la salida.

$$5,263 \cdot 10^{-2} = 4,999 \cdot 10^{-2} + X_{5,o}$$

$$X_{5,o} = 5,263 \cdot 10^{-2} - 4,999 \cdot 10^{-2} = 0,264 \cdot 10^{-2} \text{ kgH}_2\text{O/kgss}$$

El caudal de producto seco será la suma del caudal de sólido más la humedad a la salida.

$$P = m_{ss} \cdot (1 + X_{2,o} + X_{5,o}) = 0,283 \cdot (1 + 4,999 \cdot 10^{-2} + 0,264 \cdot 10^{-2}) = 0,298 \text{ kg/h}$$

Por otro lado, también es necesario conocer la humedad que aporta el aire de entrada a la cámara de secado. A partir de la ecuación 71 se puede calcular la humedad absoluta del aire a la entrada.

$$Y_i = 0,622 \cdot \frac{P_w}{(P_t - P_w)} \quad (\text{ec.71})$$

Donde  $P_t$  es la presión total (en kPa), que, al tomarse antes de la entrada al compresor es de 1 atmósfera, y  $P_w$  es la presión parcial del vapor de agua. La presión parcial del vapor de agua se puede obtener a partir de la humedad relativa (ecuación 72).

$$\varphi = \frac{P_w}{P_s(T_a)} \quad (\text{ec.72})$$

El valor de la humedad relativa ( $\phi$ ) se ha tomado, a partir de los históricos meteorológicos, como el peor dato de ésta que se puede dar en Castellón, siendo, por tanto, de un 90% a una temperatura del aire ( $T_a$ ) de 20°C. Por otro lado, la presión de saturación ( $P_s$ ), se puede obtener a partir de las tablas de vapor de agua (Anexo 1.5) para la temperatura mencionada.

Sustituyendo estos datos en la ecuación 72 podemos despejar la presión parcial de vapor:

$$\text{Tablas de vapor } (T_a = 20^\circ\text{C}) \rightarrow P_s = 0,023368 \text{ bar}$$

$$0,9 = \frac{P_w}{0,023368} \rightarrow P_w = 0,9 \cdot 0,023368 = 0,0210312 \text{ bar} = 2,103 \text{ kPa}$$

Por lo que, sustituyendo en la ecuación 71 obtenemos que la humedad absoluta del aire a la entrada es de:

$$Y_i = 0,622 \cdot \frac{2,103}{(101,325 - 2,103)} = 1,32 \cdot 10^{-2} \text{ kg agua/kg aire}$$

Finalmente, en lugar de un balance global de materia, se ha creído más práctico realizar un balance de materia al agua y otro al peróxido, ecuaciones 73 y 74 respectivamente.

$$m_{ss} \cdot (X_{5,i} - X_{5,o}) = G_a \cdot (Y_o - Y_i) \quad (\text{ec.73})$$

$$m_{ss} \cdot (X_{2,i} - X_{2,o}) = G_a \cdot Y_p \quad (\text{ec.74})$$

Donde  $Y_o$  es la humedad absoluta de agua en el aire e  $Y_p$  es la humedad absoluta de peróxido en el aire, ambas a la salida de la cámara de secado.

Sustituyendo en los balances de materia los datos conocidos y despejando el caudal de aire ( $G_a$ ) obtenemos las ecuaciones 75 y 76, que más adelante nos permitirán resolver el balance de energía.

$$0,283 \cdot (18,565 - 0,264 \cdot 10^{-2}) = G_a \cdot (Y_o - 1,32 \cdot 10^{-2})$$

$$5,284 = G_a \cdot Y_o - G_a \cdot 1,32 \cdot 10^{-2}$$

$$G_a \cdot Y_o = 5,284 - G_a \cdot 1,32 \cdot 10^{-2} \quad (\text{ec.75})$$

$$0,283 \cdot (165,064 - 4,999 \cdot 10^{-2}) = G_a \cdot Y_p$$

$$G_a \cdot Y_p = 47,555 \quad (\text{ec.76})$$

### 5.3.4.2. Balance de energía

A partir del balance de energía podemos calcular la cantidad de energía intercambiada en el sistema. En la ecuación del balance de energía en un atomizador (ecuación 77) se tienen en cuenta las entalpías de todos los flujos, entrantes y salientes, asignando  $h$  a la entalpía de la fase líquida y  $H$  a la entalpía de la fase gas.

$$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}} + G_a \cdot H_{a_i} = m_{ss} \cdot h_{m_{ss,o}} + G_a \cdot H_{a_o} \quad (\text{ec.77})$$

Donde:

$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}}$  = entalpía del alimento (kJ).

$G_a \cdot H_{a_i}$  = entalpía del aire que entra al sistema (kJ).

$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,o}}$  = entalpía del sólido seco (kJ).

$G_a \cdot H_{a_o}$  = entalpía del aire de salida (kJ).

Aclarar que, salvo la temperatura de la corriente de aire de salida, que se ha obtenido a partir del diagrama de la Figura A.5.10 como 145°C, se han fijado las temperaturas de la corriente de entrada de aire y la de salida de producto. Como se ha comentado antes, trabajar por encima de los 200°C no es posible si queremos evitar la descomposición del ácido glicólico, por esa razón la temperatura del aire que entra a la cámara de secado se ha fijado en 195°C. Por otro lado, se ha decidido que la temperatura del producto a la salida será de 70°C siguiendo alguno de los ejemplos del *Spry Drying Handbook*.

A continuación, se procederá a calcular cada uno de los términos del balance de energía siguiendo el orden de aparición en el balance.

La entalpía del alimento es la suma de la entalpía de los sólidos secos más la entalpía del líquido (entalpía del agua contenida más la entalpía del peróxido contenido), representado en la ecuación 78.

$$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}} = m_{ss} \cdot C_{p_s} \cdot (T_{s,i} - T_0) + m_{ss} \cdot X_{5,i} \cdot C_{p_5} \cdot (T_{s,i} - T_0) + m_{ss} \cdot X_{2,i} \cdot C_{p_2} \cdot (T_{s,i} - T_0) \quad (\text{ec.78})$$

Donde:

$C_{p_s}$  = calor específico del sólido (800 kJ/kg·K).

$C_{p_5}$  = calor específico del agua (4,18 kJ/kg·K).

$C_{p_2}$  = calor específico del peróxido de hidrógeno (2,596 kJ/kg·K).

$T_{s,i}$  = temperatura del alimento (105°C = 378 K).

$T_0$  = temperatura de referencia (273 K).

El calor específico del peróxido de hidrógeno se ha obtenido a partir de la Figura A.6.5 para una disolución al 100% en peróxido.

Reorganizando términos:

$$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}} = m_{ss} \cdot [Cp_s + X_{5,i} \cdot Cp_5 + X_{2,i} \cdot Cp_2] \cdot (T_{s,i} - T_0)$$

Sustituyendo los datos:

$$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}} = 0,283 \cdot [800 + 18,565 \cdot 4,18 + 165,064 \cdot 2,596] \cdot (378 - 273)$$

$$m_{ss} \cdot h_{m_{ss,i}} = 38810,995 \text{ (kJ)}$$

La entalpía del aire que entra al sistema de secado es igual a la suma de la entalpía del aire seco, la entalpía del vapor de agua que entra con el aire y la energía requerida para la evaporación. La ecuación para la entalpía del aire a la entrada es:

$$G_a \cdot H_{a,i} = G_a \cdot [Cp_a \cdot (T_{a,i} - T_{ref}) + Y_i \cdot C_v \cdot (T_{a,i} - T_{ref}) + Y_i \cdot \lambda_o] \quad (\text{ec.79})$$

Donde:

$Cp_a$  = calor específico del aire seco (1,022 kJ/kg·K).

$C_v$  = calor específico del vapor de agua (2,01 kJ/kg·K).

$\lambda_o$  = calor latente de vaporización del agua (2260 kJ/kg).

$T_{a,i}$  = temperatura del aire de entrada (468K).

$T_0$  = temperatura de referencia (273 K).

$Y_i$  = Humedad absoluta del aire (kg agua/kg aire seco).

Sustituyendo los datos conocidos:

$$G_a \cdot H_{a,i} = G_a \cdot [1,022 \cdot (468 - 273) + (1,32 \cdot 10^{-2}) \cdot 2,01 \cdot (468 - 273) + (1,32 \cdot 10^{-2}) \cdot 2260]$$

Al no conocer el caudal de aire de entrada, la ecuación queda en función de  $G_a$ .

$$G_a \cdot H_{a,i} = 234,296 \cdot G_a \text{ kJ} \quad (\text{ec.80})$$

La entalpía de la corriente de producto que sale del sistema corresponde a la suma de la entalpía del solido seco, la entalpía del agua restante y la entalpía del peróxido que queda (ecuación 81).

$$m_{SS} \cdot h_{m_{SS,o}} = m_{SS} \cdot Cp_s \cdot (T_{s,o} - T_0) + m_{SS} \cdot X_{5,o} \cdot Cp_5 \cdot (T_{s,o} - T_0) + m_{SS} \cdot X_{2,o} \cdot Cp_2 \cdot (T_{s,o} - T_0) \quad (\text{ec.81})$$

Reagrupando términos:

$$m_{SS} \cdot h_{m_{SS,o}} = m_{SS} \cdot [Cp_s + X_{5,o} \cdot Cp_5 + X_{2,o} \cdot Cp_2] \cdot (T_{s,o} - T_0)$$

Donde:

$Cp_s$  = calor específico del sólido (800 kJ/kg·K).

$Cp_5$  = calor específico del agua (4,18 kJ/kg·K).

$Cp_2$  = calor específico del peróxido (2,596 kJ/kg·K).

$T_{s,o}$  = temperatura del producto (70°C = 343K).

$T_0$  = temperatura de referencia (273 K).

Resolviendo:

$$m_{SS} \cdot h_{m_{SS,o}} = 0,283 \cdot [800 + (0,264 \cdot 10^{-2}) \cdot 4,18 + (4,999 \cdot 10^{-2}) \cdot 2,596] \cdot (343 - 273)$$

$$m_{SS} \cdot h_{m_{SS,o}} = 15850,789 \text{ kJ}$$

La corriente de aire extraída de la cámara es la suma de la entalpía del aire seco, la entalpía del agua evaporada y la entalpía del peróxido evaporado (ecuación 82).

$$G_a \cdot H_{a,o} = G_a \cdot [Cp_a \cdot (T_{a,o} - T_{ref}) + Y_o \cdot C_v \cdot (T_{a,o} - T_{ref}) + Y_o \cdot \lambda_o + Y_p \cdot Cp_2 \cdot (T_{a,o} - T_{ref}) + Y_p \cdot \lambda_p] \quad (\text{ec.82})$$

Donde:

$Cp_a$  = calor específico del aire seco (1,0216 kJ/kg·K)

$C_v$  = calor específico del vapor de agua (2,01 kJ/kg·K)

$Cp_2$  = calor específico del peróxido (2,596 kJ/kg·K)

$\lambda_o$  = calor latente de vaporización del agua (2260 kJ/kg)

$\lambda_p$  = calor latente de vaporización del peróxido (2009,664 kJ/kg)

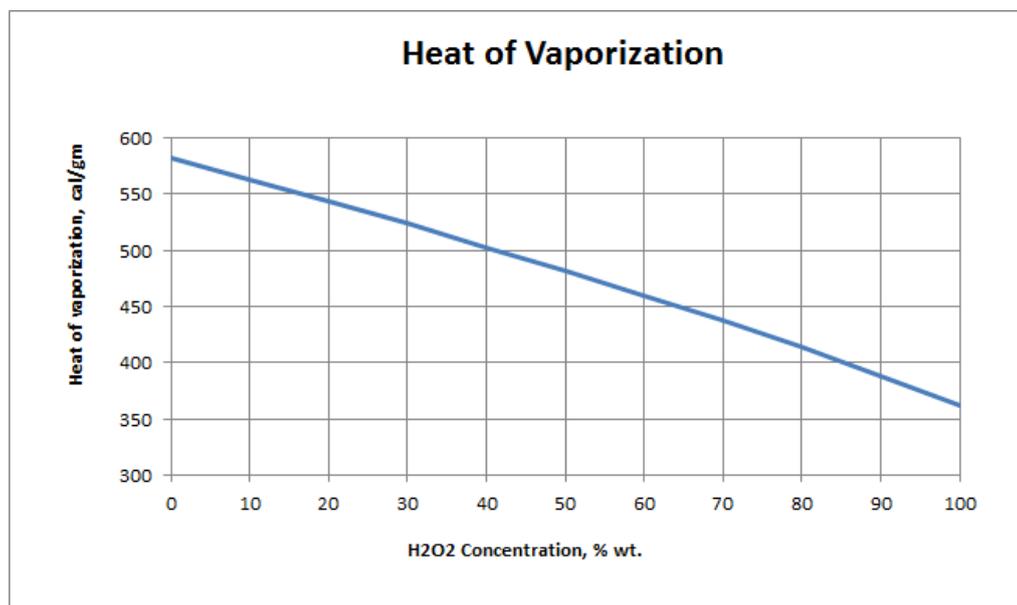
$T_{a,o}$  = temperatura del aire de salida (418K)

$T_0$  = temperatura de referencia (273 K)

$Y_i$  = Humedad absoluta del aire (kg agua/kg aire seco)

Para el calor latente de vaporización del peróxido de hidrógeno se ha consultado la tabla mostrada en la Figura A.5.13 (*Hydrogen Peroxide Heat of Vaporization | USP*)

Technologies, s. f.). En esta figura se indica que para una disolución al 47% el calor latente de vaporización es de aproximadamente 480 cal/g, que equivalen a 2009,664 kJ/kg.



**Figura A.5.13:** Calor latente de vaporización del peróxido de hidrógeno en función de la concentración de la disolución.

Nota: Tomado de la librería técnica de la página web de USP Technologies.

Sustituyendo los datos conocidos:

$$G_a \cdot H_{a,o} = G_a \cdot [1,0216 \cdot (418 - 273) + Y_o \cdot 2,01 \cdot (418 - 273) + Y_o \cdot 2260 + Y_p \cdot 2,596 \cdot (418 - 273) + Y_p \cdot 2009,664]$$

Al no conocer el caudal de aire ni las humedades absolutas a la salida, la ecuación quedará en función de esas incógnitas.

$$G_a \cdot H_{a,o} = 148,132 \cdot G_a + 291,45 \cdot G_a Y_o + 2260 \cdot G_a Y_o + 376,42 \cdot G_a Y_p + 2009,664 \cdot G_a Y_p$$

Reagrupando:

$$G_a \cdot H_{a,o} = 148,132 \cdot G_a + 2551,45 \cdot G_a Y_o + 2386,084 \cdot G_a Y_p$$

Sustituyendo todos los términos calculados en el balance de energía (ecuación 77):

$$\begin{aligned} 38810,995 + 234,296 \cdot G_a &= 15850,789 + 148,132 \cdot G_a + 2551,45 \cdot G_a Y_o + 2386,084 \cdot G_a Y_p \\ 22960,206 + 86,164 \cdot G_a &= 2551,45 \cdot G_a Y_o + 2386,084 \cdot G_a Y_p \end{aligned}$$

Si recordamos, en los balances de materia calculados anteriormente se han obtenido los valores de los términos  $G_a \cdot Y_o$  y  $G_a \cdot Y_p$ , ecuaciones 75 y 76 respectivamente. Por tanto, si sustituimos las ecuaciones mencionadas obtenemos:

$$22960,206 + 86,164 \cdot G_a = 2551,45 \cdot (5,284 - G_a \cdot 1,32 \cdot 10^{-2}) + 2386,084 \cdot 47,555$$

Finalmente, si resolvemos la ecuación obtendremos el caudal de aire requerido:

$$22960,206 + 86,164 \cdot G_a = 13481,862 - 33,68 \cdot G_a + 113470,225$$

$$119,844 \cdot G_a = 103991,881$$

$$G_a = 867,727 \text{ kg/h}$$

### 5.3.3. Dimensionamiento de la cámara de secado

Para dimensionar la cámara de secado se han seguido los consejos del Spray Drying Handbook para fijar los requisitos de la cámara. En primer lugar, aconseja seleccionar el tiempo de residencia adecuado, situando tres posibles intervalos:

- Tiempo de residencia corto (10-15s): para productos de partículas finas no sensibles al calor, fáciles de secar.
- Tiempo de residencia medio (25-35s): para productos con partículas finas a algo gruesas, sensibles al calor o resistentes al calor y para obtención de bajos contenidos de humedad residual.
- Tiempo de residencia largo (40s o más): para productos gruesos, para temperaturas de operación bajas con materiales sensibles al calor y para obtención de bajos niveles de humedad residual.

En este caso, al no tener como objetivo un tamaño de partícula específico, un tiempo de residencia medio sería el ideal, de esta forma aseguramos secar bien el producto sin someterlo a altas temperaturas. El tiempo de residencia se puede calcular a partir de la ecuación 83 como el volumen de la cámara ( $m^3$ ) partido el caudal de aire ( $m^3/s$ ).

$$\tau = \frac{V}{G_a} \quad (\text{ec.83})$$

Para las cámaras de secado con una base cónica y una altura cilíndrica (con un cono de ángulo de  $60^\circ$ ) el volumen puede expresarse según la ecuación 84, obtenida del libro Spray Drying Handbook.

$$V = 0,7854 \cdot (D_{ch})^2 \cdot (h' + 0,2886 \cdot D_{ch}) \quad (\text{ec.84})$$

Donde:

- $D_{ch}$  = Diámetro de la cámara de secado (m)
- $h'$  = Altura cilíndrica de la cámara de secado (m)

El siguiente paso sería seleccionar un diámetro de cámara y con la ecuación 84 obtener la altura cilíndrica de la cámara para después normalizarlo a los estándares de ratio H:D (altura cilíndrica/diámetro) recomendados por el libro. En este caso se han realizado los cálculos para tres valores del tiempo de residencia para así comparar los datos obtenidos. En la Tabla A.5.5 se muestran las ratios sugeridos en función del tipo de circulación dentro de la cámara y del tipo de atomizador.

La ratio que nos interesa a nosotros es la indicada para el flujo mixto con atomizador a presión. Como se ha mencionado anteriormente, esta disposición garantizará una mejor exposición del atomizado en la cámara de secado y, por tanto, presumiblemente el calor penetrará mejor dentro de la partícula a medida que ésta se vaya secando.

**Tabla A.5.5:** *Ratios (H:D) de la cámara de secado en función de sus especificaciones.*

Combinación cámara de secado/ atomizador	Ratio H:D
A corriente / atomizador rotatorio	0,6:1 a 1:1
A corriente / atomizadora presión	3:1 a 4:1
A contra corriente / atomizador a presión	3:1 a 5:1
Flujo mixto / atomizador a presión	1:1 a 1,5:1

En la Tabla A.5.6 se recogen los datos obtenidos en el cálculo del diámetro para las dos horquillas del rango de ratio H:D.

**Tabla A.5.6:** *Resultados de los cálculos para la obtención del diámetro de la cámara de secado.*

Ratio	$\tau$ (s)	V (m <sup>3</sup> )	D (m)	$h'$ (m)	Ratio	$\tau$ (s)	V (m <sup>3</sup> )	D (m)	$h'$ (m)
	25	5,725	1,597	2,396		25	5,725		1,782
1,5:1	30	6,870	1,698	2,547	1:1	30	6,870		1,894
	35	8,015	1,787	2,68		35	8,015		1,994

A la vista de los resultados obtenidos para las dimensiones de la cámara de secado, sería preferible aquel modelo de secadero que sea compatible con los datos obtenidos para la ratio 1:1 y 30s de tiempo de residencia. Parece ser la mejor opción, dado que no hay

posibilidad de estudiar la mejor configuración con experimentación, para que las dimensiones de la cámara se mantengan reducidas sin comprometer el grado de secado y evitando exponer las partículas a un posible degradado por exceso de calor.

A continuación, se muestra un ejemplo del cálculo realizado para obtener los datos de la Tabla A.5.6 con la ratio 1,5:1.

$$30 = \frac{V}{0,229} \rightarrow V = 6,87 \text{ m}^3$$

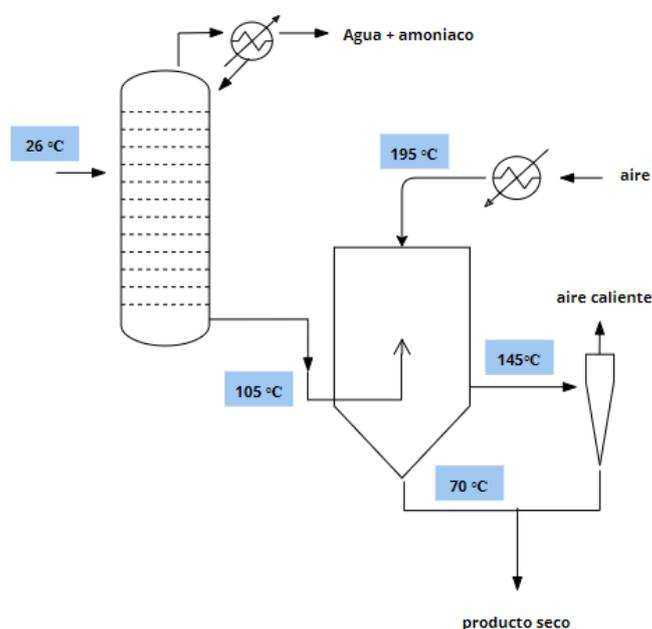
$$h' = 1,5 \cdot D_{ch}$$

$$6,87 = 0,7854 \cdot (D_{ch})^2 \cdot (1,5 \cdot D_{ch} + 0,2886 \cdot D_{ch}) \rightarrow D_{ch} = 1,698 \text{ m}$$

$$h' = 1,5 \cdot 1,698 = 2,547 \text{ m}$$

#### 5.4. Diagrama final del sistema de secado

En resumen, el sistema de secado constará de una columna de rectificación y un secadero por atomización. En la Figura A.5.14 se muestra cómo sería finalmente el diagrama del sistema de secado.



**Figura A.5.14:** Diagrama del sistema de secado.

*Nota:* Recortado del diagrama de flujo. Creación propia.

## ANEXO 6: Sistemas auxiliares al reactor

En este apartado se desglosan los cálculos para los sistemas auxiliares al reactor y se justifica su uso, implementados para ofrecer mayor seguridad durante la operación de la planta.

### 6.1. Tanque de mezclado

El tanque de mezclado es necesario para disolver las perlas de ácido glicólico en el peróxido de hidrógeno previamente a su adición al reactor, de esa forma facilitará la reacción de la mezcla. En la Figura A.6.1 se muestra un esquema de la zona de alimentación de reactivos líquidos al reactor, éste no es más que una ilustración.



**Figura A.6.1:** Diagrama zona de alimentación de reactivos líquidos.

*Nota:* 1. Tanque de mezclado, 2. Reactor. Creación propia con Visual Paradigm.

Como se aprecia en la imagen, el amoníaco se añade a la corriente de entrada al reactor justo al final del tramo de alimentación. Sabiendo que el caudal de operación es  $Q_v=0,129 \text{ m}^3/\text{h}$  y si le restamos el caudal de disolución de amoníaco, obtendríamos el caudal de peróxido a suministrar.

$$Q_{\text{peróxido}} = Q_v - Q_{\text{amoníaco}} = 0,129 - 7,298 \cdot 10^{-3} = 0,122 \text{ m}^3/\text{h}$$

Al ser un tanque destinado solo a mezclar dos reactivos y siendo uno de ellos un sólido, bastará con que el volumen del tanque soporte el caudal volumétrico de peróxido.

### 6.2. Sistema de aireación del reactor

En la reacción se genera hidrógeno y si su concentración aumentara demasiado dentro del reactor podría existir riesgo de explosiones, recordemos que el reactor está tapado. Aprovechando la corriente gaseosa introducida por el sistema de impulsión neumática al reactor, que se tiene que extraer también, se puede utilizar su fuerza para extraer por la parte superior del reactor el hidrógeno generado. También se debe tener en cuenta que es posible algunas de las partículas de titanio impulsadas dentro del reactor se vean arrastradas junto con el hidrógeno.

Por esa razón, añadir una conexión a un ciclón por la parte superior del reactor para recoger aquellas partículas arrastradas, parece una buena opción ya que se conseguiría recuperar las partículas de titanio posiblemente arrastradas a la vez que extraemos el hidrógeno.

Según lo calculado el Anexo 3, se generan  $1,739 \cdot 10^{-3}$  kmol/h de hidrógeno durante la reacción. Mediante la ecuación de los gases ideales, ecuación 85, podemos calcular el volumen que ocuparía a la temperatura de la reacción ( $T = 26^\circ\text{C}$ ) el hidrógeno generado en una hora.

$$P \cdot V = n \cdot R \cdot T \quad (\text{ec.85})$$

Dónde:

$$P = P_{\text{atm}} = 1 \text{ atm}$$

$$n = 1,739 \cdot 10^{-3} \text{ kmol} = 1,739 \text{ mol}$$

$$R = 0,082 \text{ atm} \cdot \text{L/mol} \cdot \text{K}$$

$$T = 26^\circ\text{C} = 299 \text{ K}$$

Sustituyendo los datos en la ecuación, obtenemos el volumen de hidrógeno producido en una hora.

$$1 \cdot V = 1,739 \cdot 0,082 \cdot 299 \rightarrow V = 42,637 \text{ L} \approx 0,043 \text{ m}^3$$

Por tanto, el caudal de hidrógeno producido es de  $0,043 \text{ m}^3/\text{h}$ . Al ser una cantidad tan pequeña en comparación con el caudal de nitrógeno ( $11,31 \text{ m}^3/\text{h}$ ) el arrastre debería producirse fácilmente.

### 6.3. Filtrado del titanio presente en la corriente de salida del reactor

Como se comentaba en la memoria, de las conclusiones obtenidas de los resultados de los experimentos se extrae que, al quedar titanio sin reaccionar en la corriente de salida del reactor, la reactivación de la reacción no se puede descartar. Además, al enviar esta corriente a un proceso de secado donde será calentada para evaporar los reactivos en exceso, es posible que se favorezca dicha reactivación.

Es por eso que se ha planteado la instalación de un sistema de filtrado para retener y retirar el titanio sin reaccionar de la corriente antes de que llegue al sistema de secado, eliminando el riesgo de reactivación.

## ANEXO 7: Catálogos de equipos

En este apartado no aparecen cálculos para las conducciones y las bombas de impulsión debido a que por la extensión del trabajo no ha sido posible incluirlos.

### 7.1. Reactor

El reactor que buscamos para el proceso debe tener un volumen de 42,9 L, con tapa y tener un agitador que funcione a 241 rpm. De todas las opciones vistas, los únicos que cumplen con este volumen son los reactores de vidrio; el volumen mínimo de los tanques de acero inoxidable, consultados en varios suministradores, era de 50L. Debido a la dificultad para encontrar un tanque del volumen deseado, se ha seleccionado un modelo de 43 L, que, pese a ser ligeramente más grande, no supondrá ningún problema, el nivel del líquido se mantendrá más o menos al mismo nivel y se conseguirá algo más de espacio para los gases.

En la Figura A.7.1 puede verse la imagen de un reactor RCTA de muestra.



**Figura A.7.1:** Reactor RCTA de vidrio.

*Nota:* Obtenido de TEFIC BIOTECH CO.

En la Tabla A.7.1 se muestran algunos de los datos técnicos del reactor seleccionado.

**Tabla A.7.1:** Datos técnicos del reactor de RCTA modelo TF-30L.

Parámetro	Valor
Marca	TEFIC
Modelo	TF-43L
Fuerza del motor (W)	140

Parámetro	Valor
Velocidad de rotación (rpm)	50-600
Dimensiones (mm)	700 x 500 x 2200
Precio (€)	2500

*Nota:* Obtenido de TEFIC BIOTECH CO.

## 7.2. Sistema de impulsión neumática

### 7.2.1 Alimentación del polvo

De los equipos necesarios para la impulsión neumática, el utilizado para la alimentación del polvo es un micro dosificador. El seleccionado es el dosificador con la menor ratio de dosificación de los que fabrican, su material de construcción es acero inoxidable y la empresa ofrece darle un tratamiento de dureza según la abrasividad del producto.



**Figura A.7.2:** *Micro dosificador.*

*Nota:* Obtenido de Boreas Consulting.

El modelo es el MDS-250 de la empresa Boreas Consulting, su ratio de dosificación es de 0,1-27 L/h, su potencia es de 0,06 kWh y su precio son 800 €.

## 7.3. Sistema de secado

### 7.3.1. Columna de rectificación

La columna de rectificación de este proyecto deberá tener 4 platos, pero al no haber podido dedicarle más espacio a la columna, la elección del mejor tipo de platos y el dimensionamiento de la misma se encargará a la empresa Bachiller. Son una empresa con mucho bagaje en el diseño de columnas y ofrecen columnas con diámetros desde 200 mm hasta 7500 mm, alturas máximas de hasta 50000 mm y con espesores desde 3 mm hasta 50 mm.

En la Figura A.7.3 se muestra una imagen de una de las columnas de Bachiller, es una de las columnas grandes que ofrecen a sus clientes y no corresponde con la que sería

instalada en este proceso; se incluye para ilustración ya que la empresa no tenía imágenes disponibles de columnas más pequeñas.

Se ha estimado que el coste total del encargo de la columna, teniendo en cuenta que no será una columna muy grande al sólo necesitar 4 platos, será de 25000 €.



**Figura A.7.3:** Columna de rectificación.

Nota: Obtenido de la página de Bachiller.

### 7.3.2. Sistema de secado por atomización

El secadero a utilizar debe tener un diámetro entre 1,894 y 1,994 para garantizar el que el tiempo de residencia de las gotas en el secadero será el adecuado, según lo calculado en el Anexo 5. En la Tabla A.7.2 se muestran las características del modelo seleccionado.

**Tabla A.7.2:** Características del secadero por atomización modelo SD2000.

Parámetros	Valor
Temperatura interior máxima (°C)	250
Caudal de aire máximo (kg/h)	1400
Diámetro de la cámara de secado (m)	2
Espacio requerido (m)	4,9 x 5,1 x 6,3
Altura libre recomendada (m)	7,4

Parámetros	Valor
Partes en contacto con el producto	AISI 316
Superficies externas	AISI 304
Peso neto (kg)	3000
Precio (€)	35000

Nota: Obtenido de *Small scale spray dryers - SiccaDania*, 2023.

En la Figura A.7.4 se muestra un secadero por atomización de la marca SiccaDania, esta marca fabrica secaderos que ya incluyen el ciclón.



**Figura A.7.4:** *Secadero por atomización con ciclón.*

Nota: Obtenido de *Small scale spray dryers - SiccaDania*, 2023.

## 7.4. Sistemas auxiliares

### 7.4.1. Tanque de mezclado

El tanque de mezclado debe ser capaz de soportar el caudal de peróxido de hidrógeno que se tiene que alimentar al reactor, por tanto, debe tener mínimo un volumen de 122L. En la Tabla A.7.3 se muestran las características del tanque mezclador elegido y en la Figura A.7.5 se muestra una imagen.

**Tabla A.7.3:** *Características del tanque de mezclado.*

Parámetro	Valor
-----------	-------

Marca	911Metallurgist
Volumen (L)	130
Diámetro del agitador (mm)	150
Velocidad del agitador (rpm)	220
Potencia (W)	1100
Precio (€)	1500



**Figura A.7.5:** *Tanque de mezclado.*

*Nota:* Obtenido de 911Metallurgist.

#### **7.4.2. Ciclón para la recuperación de titanio en la aireación del reactor**

El ciclón que se busca para la aireación del reactor debe ser capaz de evacuar el caudal de nitrógeno introducido en el reactor por el sistema de impulsión, al ser un caudal relativamente pequeño ( $11,31 \text{ m}^3/\text{h}$ ) se ha considerado que el modelo más pequeño que ofrece la empresa KMEX INGEOSA será suficiente. En la Figura A.7.4 se muestra la imagen de un separador ciclónico.



**Figura A.7.4:** *Separador ciclónico.*

Nota: Obtenido de KMEX INGESOA.

El modelo seleccionado es el CAE-300 de la empresa mencionada y su precio es de 500€.

### 7.4.3. Filtro para eliminar el titanio de la corriente de salida del reactor

Teniendo en cuenta que el tamaño de la partícula de titanio a la entrada del reactor es de 150 micras y que al reaccionar se degradan las capas externas de la partícula, se ha estimado que con un filtro capaz de retener partículas de hasta 100  $\mu\text{m}$  se conseguirá retirar el titanio sin reaccionar. La filtración deberá llevarse a cabo con un filtro de malla de acero inoxidable debido a la presencia de peróxido de hidrógeno en el caudal a tratar. En la Tabla A.7.4 se muestran las características del filtro seleccionado.

**Tabla A.7.4:** *Características del filtro.*

Característica	Valor
Marca	RETECNO S.L.
Modelo	MULTIPUR/65
$Q_{\text{máx}}$	22 m <sup>3</sup> /h
Filtración	100 $\mu\text{m}$
Material de la malla	Acero inoxidable
Precio	400 €

Ésta marca ofrece este tipo de filtros dos sistemas de limpieza, manual y automática, en la Figura A.7.5 se muestra una imagen del filtro con cada una de las opciones.



**Figura A.7.5:** *Filtro de malla.*

*Nota:* A la izquierda el filtro con el sistema de limpieza manual y a la derecha con el sistema de limpieza automático.

## ANEXO 8: Fichas de seguridad de reactivos

Las fichas técnicas mostradas en las figuras de este anexo se han obtenido a través de páginas oficiales de empresas privadas. Debajo de cada figura se referencia el enlace directo a la ficha para, de desearse, poder consultarla completa.

### 8.1. Titanio

La Figura A.8.1 muestra la primera página de la ficha técnica del titanio.



www.sigmaaldrich.com

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD** Versión 8.9  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006 Fecha de revisión 18.08.2023  
Fecha de impresión 05.09.2023

**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

**1.1 Identificadores del producto**  
Nombre del producto : Titanio polvo fino 98+

Referencia : 1.12379  
Artículo número : 112379  
Marca : Millipore  
REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior  
No. CAS : 7440-32-6

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconejados**  
Usos identificados : Catalizador, Producción química

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**  
Compañía : Merck Life Science S.L.  
Calle Maria de Molina 40  
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977  
Fax : +34 916 619 642  
E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

**1.4 Teléfono de emergencia**  
Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)  
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

**SECCIÓN 2. Identificación de los peligros**

**2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**  
**Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**  
Sólidos inflamables (Categoría 1), H228  
Para el texto íntegro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

Millipore- 1.12379

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Página 1 de 12



Figura A.8.1: Ficha técnica del titanio.

El enlace a la ficha técnica completa es:

<https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/sds/mm/1.12379>

## 8.2. Disolución de peróxido de hidrógeno al 35%

La Figura A.8.2 muestra la primera página de la ficha técnica del peróxido de hidrógeno.

**SAFC.** www.sigmaaldrich.com

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD** Versión 8.7  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006 Fecha de revisión 21.09.2022  
Fecha de impresión 01.09.2023

---

**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

**1.1 Identificadores del producto**  
Nombre del producto : Hidrogeno peroxido 35 %

Referencia : 1.08600  
Artículo número : 108600  
Marca : Millipore  
REACH No. : Este producto es una mezcla. Número de registro REACH véase sección 3.

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
Usos identificados : Producción y análisis farmacéuticos

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**  
Compañía : Merck Life Science S.L.  
Calle Maria de Molina 40  
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977  
Fax : +34 916 619 642  
E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

**1.4 Teléfono de emergencia**  
Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)  
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

---

**SECCIÓN 2. Identificación de los peligros**

**2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**  
**Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**  
Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4), H302  
Irritación cutáneas (Categoría 2), H315  
Lesiones oculares graves (Categoría 1), H318  
Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), Sistema respiratorio, H335  
Peligro a largo plazo (crónico) para el medio ambiente acuático (Categoría 3), H412  
Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

**2.2 Elementos de la etiqueta**  
**Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Millipore- 1.08600 Página 1 de 21

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada **MERCK**

**Figura A.8.2:** Ficha técnica de la disolución de peróxido de hidrógeno.

El enlace a la ficha técnica completa es:

<https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/sds/mm/1.08600>

### 8.3. Disolución de amoníaco al 28-30%

La Figura A.8.3 muestra la primera página de la ficha técnica del amoníaco.



www.sigmaaldrich.com

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD** Versión 8.5  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006 Fecha de revisión 16.02.2023  
Fecha de impresión 01.09.2023

**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

**1.1 Identificadores del producto**  
Nombre del producto : AMONIACO EN SOLUCION 28-30% P.A.  
EMSURE® ACS,REAG. PH EUR

Referencia : 1.05423  
Artículo número : 105423  
Marca : Millipore  
REACH No. : Este producto es una mezcla. Número de registro REACH véase sección 3.

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
Usos identificados : Análisis químico, Producción química

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**  
Compañía : Merck Life Science S.L.  
Calle Maria de Molina 40  
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977  
Fax : +34 916 619 642  
E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

**1.4 Teléfono de emergencia**  
Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)  
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

**SECCIÓN 2. Identificación de los peligros**

**2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**  
**Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**  
Corrosión cutáneas (Categoría 1), H314  
Lesiones oculares graves (Categoría 1), H318  
Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), Sistema respiratorio, H335  
Peligro a corto plazo (agudo) para el medio ambiente acuático (Categoría 1), H400  
Peligro a largo plazo (crónico) para el medio ambiente acuático (Categoría 2), H411  
Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

**2.2 Elementos de la etiqueta**  
**Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Millipore- 1.05423

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Página 1 de 27



Figura A.8.3: Ficha técnica de la disolución de amoníaco.

El enlace a la ficha técnica completa es:

<https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/sds/mm/1.05423>

## 8.4. Ácido glicólico

La Figura A.8.4 muestra la primera página de la ficha técnica del ácido glicólico.



www.sigmaaldrich.com

**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**  
de acuerdo el Reglamento (CE) No. 1907/2006

Versión 6.4  
Fecha de revisión 17.03.2023  
Fecha de impresión 05.08.2023

**SECCIÓN 1. Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**

**1.1 Identificadores del producto**  
Nombre del producto : **Ácido glicólico**

Referencia : 124737  
Marca : Sigma-Aldrich  
REACH No. : Un número de registro no está disponible para esta sustancia, ya que la sustancia o sus usos están exentos del registro, el tonelaje anual no requiere registro o dicho registro está previsto para una fecha posterior  
No. CAS : 79-14-1

**1.2 Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados**  
Usos identificados : Reactivos para laboratorio, Fabricación de sustancias

**1.3 Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**  
Compañía : Merck Life Science S.L.  
Calle Maria de Molina 40  
E-28006 MADRID

Teléfono : +34 916 619 977  
Fax : +34 916 619 642  
E-mail de contacto : serviciotecnico@merckgroup.com

**1.4 Teléfono de emergencia**  
Teléfono de Urgencia : 900-868538 (CHEMTREC España)  
+(34)-931768545 (CHEMTREC internacional)

**SECCIÓN 2. Identificación de los peligros**

**2.1 Clasificación de la sustancia o de la mezcla**  
**Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**  
Toxicidad aguda, Inhalación (Categoría 4), H332  
Corrosión cutáneas (Sub-categoría 1B), H314  
Lesiones oculares graves (Categoría 1), H318  
Para el texto integro de las Declaraciones-H mencionadas en esta sección, véase la Sección 16.

**2.2 Elementos de la etiqueta**  
**Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008**

Sigma-Aldrich- 124737

The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the US and Canada

Página 1 de 19



**Figura A.8.4:** *Ficha técnica del ácido glicólico.*

El enlace a la ficha técnica completa es:

<https://www.sigmaaldrich.com/ES/es/sds/sial/124737>

## 8.5. Nitrógeno

La Figura A.8.5 muestra la primera página de la ficha técnica del nitrógeno.

**Air Liquide**

**NITRÓGENO / N<sub>2</sub>**

*Air Liquide suministra Nitrógeno en toda Europa, según las necesidades de sus Clientes, en líquido, botellas o mediante plantas de producción on-site*

Enciclopedia de los Gases de Air Liquide. Páginas: 1019 - 1052

**Aplicaciones**

- Atmósfera protectora (tratamientos térmicos,...)
- Agente inertizante
- Agente presurizante
- Aplicaciones criogénicas

**Information sobre el transporte**

**Botellas de gas comprimido**

Denominación oficial	Nitrógeno, comprimido
UN-Nr	1066
ADR/RID	Clase 2
	Código de Clasificación 1A

**Gases refrigerados**

Denominación oficial	Nitrógeno, líquido refrigerado
UN-Nr	1977
ADR/RID	Clase 2
	Código de Clasificación 3A

**Propiedades Físicas**

Peso molecular	28,01 g/mol
Densidad relativa:	
Densidad relativa, gas	0,97 (aire=1)
Densidad relativa, líquido	0,8 (agua=1)
Color	incolore
Olor	inodoro
Número CAS	7727-37-9

**Propiedades**

**Identificación de riesgos:** en altas concentraciones puede causar asfixia

**Rango de inflamabilidad:** no es inflamable

**Protección personal:** Asegurar una ventilación adecuada

**Botellas**

**Grifo**  
ITC EP-6 Tipo C - IS 21,7 x 1,814 derechas

**Color ojiva:**  
negro (RAL 9005)

**Ficha de Datos de Seguridad**

Gas comprimido : 089A-1  
Acceso: <https://industrial.airliquide.es>

Gas refrigerado : 089B-1  
Acceso: [http://fds.airliquide.es/SDS/SDS\\_files/ES/089B-1.pdf](http://fds.airliquide.es/SDS/SDS_files/ES/089B-1.pdf)

Esta ficha está cubierta por el texto que se encuentra en la última página del documento

Page 1 / 3

es:ES-NITRÓGENO 02-02-2023 v1.3 // Photo Credit: X. Renaud

**Figura A.8.5:** Ficha técnica del nitrógeno.

El enlace a la ficha técnica completa es:

[https://mygas.airliquide.es/files/0b12f5a6d80b89cb25a0cfa417cce6c5aab2abb7\\_NITR%C3%93GENO\\_es\\_ES\\_v1.3.pdf](https://mygas.airliquide.es/files/0b12f5a6d80b89cb25a0cfa417cce6c5aab2abb7_NITR%C3%93GENO_es_ES_v1.3.pdf)

## ANEXO 9: Viabilidad económica

En el estudio de viabilidad económica se pretende estimar el coste total de los recursos necesarios para realizar el proyecto y el coste total de operación. Así mismo, se incluyen los indicadores económicos que se utilizarán para evaluar si la implementación del proyecto es viable.

### 9.1. Resumen del presupuesto

Aquí se presenta un resumen las partes principales que conforman el presupuesto, detallado con más amplitud en el documento “Presupuesto”. En la Tabla A.9.1 se recogen los valores las partidas de presupuestarias consideradas en el Presupuesto de Ejecución de Material (PEM), siendo su suma el valor total del PEM.

**Tabla A.9.1:** *Presupuesto de Ejecución de Material.*

Partida presupuestaria	Coste (€)
Reactor	4.900,00
Impulsión neumática	832,50
Sistema de secado	60.000,00
Mano de obra	9.859,88
Parcela y obra	163.800,00
<b>TOTAL PEM</b>	<b>239.392,38</b>

En segundo lugar, se calcula el Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC) es la suma del PEM, los Gastos Generales, que suponen un 13% del PEM, y el Beneficio Industrial, siendo éste último un 6% del PEM. En la Tabla A.9.2 se recoge el PEC.

**Tabla A.9.2:** *Presupuesto de Ejecución por Contrata.*

	Coste (€)
PEM	239.392,38
Gastos industriales	31.121,01
Beneficio Industrial	14.363,55
<b>TOTAL PEC</b>	<b>284.876,93</b>

A partir del valor total del PEC, sumándole el valor de los impuestos aplicables (IVA 21%) se obtiene el presupuesto total, que equivale a la inversión inicial. En la Tabla A.9.3 se muestra un resumen de los valores.

**Tabla A.9.3:** Resumen del presupuesto del proyecto.

	Coste (€)
PEC	284.876,93
IVA (21%)	59.824,16
<b>TOTAL</b>	<b>344.701,09</b>

El presupuesto total del proyecto *Diseño de una planta para la producción de un complejo Titanio-Ácido glicólico* asciende a TRESCIENTOS CUARENTA Y CUATRO MIL SETECIENTOS UN EUROS CON NUEVE CÉNTIMOS.

## 9.2. Presupuesto de explotación

En el presupuesto de la explotación se calculan los gastos directos, los gastos indirectos y los ingresos. Como el valor del dinero varía con el tiempo se debe actualizar a su valor en cada año según el Índice de Precios de Consumo (IPC), para ello se utiliza la ecuación 86.

$$Valor_n = Valor_0 \cdot (1 + IPC)^{n-1} \quad (\text{ec.86})$$

Los indicadores económicos, actualizados a agosto de 2023, utilizados para los cálculos son:

- Índice de Precios al Consumo (IPC) = 2,6%
- Interés nominal (In) = 4,673%

$$In = euribor + diferencial aplicado por el banco = 4,073 + 0,6$$

- Interés real = In – IPC = 4,673 – 2,6 = 2,073%

### 9.2.1. Gastos directos

Los gastos directos son aquellos que están directamente relacionados con la producción. En este proyecto se tendrán en cuenta los gastos derivados del consumo de reactivos y del nitrógeno utilizado en la impulsión neumática, recogidos en la Tabla A.9.4.

Como gasto directo también se tiene en cuenta el consumo eléctrico producido por el funcionamiento de los equipos, mostrado en la Tabla A.9.5. Como no se ha podido calcular la potencia requerida de algunos equipos (la columna de rectificación y el secadero por

atomización) se ha hecho una estimación en base a las potencias requeridas por equipos de características similares, por ello, los consumos eléctricos obtenidos para estos equipos son estimados. De esta forma, se puede calcular el coste aproximado del consumo energético de la planta.

**Tabla A.9.4:** *Gastos de materias primas.*

Materia prima	Unidad	Precio	Consumo anual	Precio (€/año)
Titanio	kg	1.568,00 €/kg	2557,920 kg	4.010.818,56
Ácido glicólico	kg	164,17 €/kg	6096,960 kg	1.000.937,92
Disolución Peróxido de hidrógeno 35%	m <sup>3</sup>	1.750,00 €/m <sup>3</sup>	1066,092 m <sup>3</sup>	1.865.661,00
Disolución Amoniaco 28%	m <sup>3</sup>	5.950,00 €/m <sup>3</sup>	63,927 m <sup>3</sup>	380.365,65
Nitrógeno	m <sup>3</sup>	61,99 €/m <sup>3</sup>	99075,600 m <sup>3</sup>	6.141.969,44
<b>TOTAL</b>			<b>22.408.185,58 €/año</b>	

**Tabla A.9.5:** *Consumo energético de los equipos.*

Equipo	Potencia (kWh)	Consumo (kwh/año)	Precio (€/kWh)	Coste (€/año)
Agitador del reactor	0,14	1226,4	0,2846	349,03
Micro dosificador	0,06	525,6	0,2846	149,59
Tanque de mezclado	1,10	9636,0	0,2846	2.742,41
Columna de rectificación	250	2190000,0	0,2846	623.274,00
Secadero por atomización	315	2759400,0	0,2846	785.325,24
<b>TOTAL</b>			<b>1.409.097,86 €/año</b>	

Por último, se ha decidido vender el complejo en frascos de cristal para darle un acabado más elegante al producto por lo que se debe tener en cuenta el coste de dichos frascos, se venden a un precio de 52,86 € 10 unidades de 50 mL. Si asumimos que la densidad aparente del complejo tendrá un valor parecido a la del titanio en polvo (0,94 g/cm<sup>3</sup>) y lo multiplicamos por el caudal másico de polvo obtenido (0,298 kg/h), tendríamos un caudal

de aproximadamente 317 mL/h a embotellar. Por tanto, calculando la cantidad de frascos al año que serán necesarios para abarcar a la producción (55543 frascos) obtenemos que su coste anual asciende a un valor de 293.600,30 €.

Finalmente, los gastos directos totales ascienden a un valor de 23.817.283,44 €/año.

### 9.2.2. Amortización

La amortización se define como la pérdida de valor de un bien físico con el paso del tiempo y, al calcularse sobre los equipos destinados a la producción, ésta se puede considerar un gasto directo. Se puede calcular como el cociente entre la inversión inicial ( $I_0$ ) y el número de años que se requieren para amortizar la inversión ( $H$ ). Se ha considerado un horizonte de 10 años para el cálculo.

$$\text{Amortización} = \frac{I_0}{H} \quad (\text{ec.87})$$

Sustituyendo los datos obtenemos el valor de la amortización.

$$\text{Amortización} = \frac{344.701,09}{10} = 34.470,11 \text{ €/año}$$

### 9.2.3. Gastos indirectos

Los gastos indirectos son aquellos que no tienen relación directa con la producción, como el coste del personal.

Al operar en continuo se han establecido 3 turnos de trabajo, por lo que el personal necesario para la planta se prevé que será de 1 gerente con dedicación exclusiva para supervisar el trabajo y, además, 2 operarios por turno. Por otro lado, se contará con un comercial encargado de la distribución del producto.

También se cuentan como gastos indirectos los generados por el alquiler de oficinas en el edificio Espaitec 2. La página del Espaitec ofrece una calculadora que, a partir de la vinculación con el espacio, el tipo de empresa y el espacio requerido, te muestra el valor de su alquiler. En este caso, indicando que somos una grow-up porque superamos los 0,2 millones de presupuesto, que queremos una vinculación física, que necesitamos 30 m<sup>2</sup> de espacio y que somos una spin-off de la Universitat Jaume I, la calculadora nos indica que el alquiler tendría un precio de 496,75 €/mes, que corresponde a un gasto de 5.961,00 €/año.

En la Tabla A.9.6 se muestran los salarios netos de cada empleado y los salarios brutos, teniendo en cuenta que las cotizaciones a la seguridad social son un 30% de media. Los salarios se percibirán en 14 pagas al año.

**Tabla A.9.6:** *Coste del personal.*

<b>Cargo</b>	<b>Unidades</b>	<b>Salario bruto (€/año)</b>	<b>Salario neto (€/año)</b>	<b>Coste total (€/año)</b>
Gerente	1	3.900,00	3.000,00	54.600,00
Técnico	6	2.340,00	1.800,00	196.560,00
Comercial	1	2.600,00	2.000,00	36.400,00
<b>TOTAL</b>				<b>287.560,00 €/año</b>

#### 9.2.4. Ingresos

Los ingresos de éste proyecto proceden únicamente de la venta del complejo producido. Para asignarle un valor de venta al complejo se han buscado como referencia los valores de venta de otros complejos de titanio, que oscilaban entre los 95 € y los 156 € por 10 g. En este caso, al no poder contemplar todos los costes reales del proceso, se ha seleccionado un precio de venta cercano al valor más bajo de la horquilla. Por tanto, el valor de venta asignado será de 92,60 €/g, más que suficiente para cubrir el coste de producción. En la Tabla A.9.7 se muestran los resultados de los ingresos.

**Tabla A.9.7:** *Valor de los ingresos.*

<b>Elemento</b>	<b>Producción (kg/h)</b>	<b>Producción (kg/año)</b>	<b>Precio (€/kg)</b>	<b>Venta anual (€/año)</b>
CTI	0,298	2610,48	9.260,00	24.173.044,80
<b>TOTAL</b>				<b>24.173.044,80 €/año</b>

#### 9.2.5. Beneficios

La obtención de beneficios es el objetivo principal de todas las empresas y éstos forman parte del estudio de viabilidad económica haciendo distinción entre dos tipos de beneficios, brutos y netos.

##### 9.3.5.1. Beneficio bruto

Los beneficios brutos (BB) son la diferencia entre los ingresos de la empresa y los gastos totales, gastos directos e indirectos, sin tener en cuenta los impuestos y la amortización.

$$\text{Beneficio bruto} = \text{Ingresos} - \text{Gastos} \quad (\text{ec.88})$$

Por tanto, el beneficio bruto se calcula como:

$$\text{Beneficio bruto} = 24.173.044,80 - (23.817.283,44 + 287.560,00 + 5.961,00)$$

$$\text{Beneficio bruto} = 62.240,36 \text{ €/año}$$

### 9.3.5.2. Beneficio neto

El beneficio neto (BN) se obtiene restando al beneficio bruto la amortización y los impuestos, para los que el tipo impositivo es del 25%, que es el que se aplica a las sociedades.

$$\text{Beneficio neto} = \text{Beneficio bruto} - \text{Amortización} - \text{Impuestos} \quad (\text{ec.89})$$

Por tanto, el beneficio neto se calcula como:

$$\text{Beneficio neto} = 62.240,36 - 34.470,11 - 0,25 \cdot 62.240,36$$

$$\text{Beneficio neto} = 12.210,16 \text{ €/año}$$

### 9.2.6. Flujo de caja

El flujo de caja (FC) está formado por los flujos económicos de entrada y salida anuales de una empresa, efectivos en un periodo dado.

$$\text{FC} = \text{Beneficio neto} + \text{Amortización} \quad (\text{ec.90})$$

Por tanto, el flujo de caja se calcula como:

$$\text{FC} = 12.210,16 + 34.470,11$$

$$\text{FC} = 46.680,27 \text{ €/año}$$

### 9.7. Valor Actual Neto (VAN)

El valor actual neto (VAN) es un indicador de la rentabilidad del proyecto. Se pueden dar tres situaciones distintas:

- VAN < 0: indica que el proyecto no es rentable en el periodo de tiempo establecido.
- VAN = 0: indica que el proyecto no genera ganancias, pero tampoco pérdidas.
- VAN > 0: indica que el proyecto es rentable.

Para calcular el VAN se utiliza la ecuación 91.

$$\text{VAN} = -I_0 + \sum_{n=1}^{n=10} \frac{\text{FC}}{(1+i_r)^n} \quad (\text{ec.91})$$

### 9.8. Tasa Interna de Rentabilidad (TIR)

La tasa interna de rentabilidad (TIR) es la tasa de interés o rentabilidad que ofrece una inversión. Se puede definir como el porcentaje de beneficio o pérdida que tendrá una

inversión para las cantidades que no se hayan retirado del proyecto. Los proyectos que interesa realizar son aquellos con un TIR superior al interés nominal, a mayor valor del TIR más viable será el proyecto.

El TIR se puede calcular mediante la ecuación 92, que es la ecuación del VAN haciendo que éste tenga un valor de 0.

$$0 = -I_0 + \sum_{n=1}^{n=10} \frac{FC}{(1+i_r)^n} \quad (\text{ec.92})$$

### 9.7. Periodo de Retorno (PR)

El periodo de retorno (PR) es el tiempo aproximado que se tardará en recuperar la inversión inicial del proyecto. Se puede calcular mediante la ecuación 93.

$$PR = \frac{I_0}{FC_{medio}} \quad (\text{ec.93})$$

### 9.8. Resultados

En la Figura A.9.1 se muestra una imagen del desarrollo del cálculo de la viabilidad en un horizonte de 10 años, realizado con el programa Excel.

Año	Gastos	Amortización	Ingresos	BB	BN	FC	(1+ir)^n	FCn/(1+ir)^n
1	24.110.804,44 €	34.470,11 €	24.173.044,80 €	62.240,36 €	12.210,16 €	46.680,27 €	1	46680,27
2	24.737.685,36 €	35.366,33 €	24.801.543,96 €	63.858,61 €	12.527,63 €	47.893,96 €	1,02073	46921,27891
3	26.040.767,67 €	37.229,29 €	26.107.990,09 €	67.222,43 €	13.187,53 €	50.416,82 €	1,04188973	48389,78397
4	28.125.215,92 €	40.209,33 €	28.197.819,20 €	72.603,28 €	14.243,13 €	54.452,46 €	1,06348811	51201,75963
5	31.166.304,42 €	44.557,03 €	31.246.758,06 €	80.453,64 €	15.783,20 €	60.340,23 €	1,08553422	55585,74751
6	35.434.157,58 €	50.658,59 €	35.525.628,39 €	91.470,81 €	17.944,52 €	68.603,10 €	1,10803734	61914,07302
7	41.333.889,76 €	59.093,16 €	41.440.590,31 €	106.700,55 €	20.932,25 €	80.025,42 €	1,13100695	70755,90017
8	49.469.532,05 €	70.724,32 €	49.597.234,20 €	127.702,15 €	25.052,29 €	95.776,61 €	1,15445273	82962,78198
9	60.745.860,50 €	86.845,56 €	60.902.671,70 €	156.811,20 €	30.762,84 €	117.608,40 €	1,17838453	99804,77359
10	76.531.977,55 €	109.414,25 €	76.729.539,52 €	197.561,96 €	38.757,22 €	148.171,47 €	1,20281244	123187,5113

**Figura A.9.1:** Cálculos en un horizonte de 10 años. Creación propia.

A partir de los resultados mostrados en la tabla se pueden calcular mediante las ecuaciones 91, 92 y 93 los índices VAN, TIR y PR, respectivamente. En la Tabla A.9.8 se muestran los resultados de éstos cálculos.

**Tabla A.9.8:** Resultados de los índices calculados.

VAN (€)	TIR (%)	PR (años)
342.702,79	17,79	0,4477

## 4. PLANOS

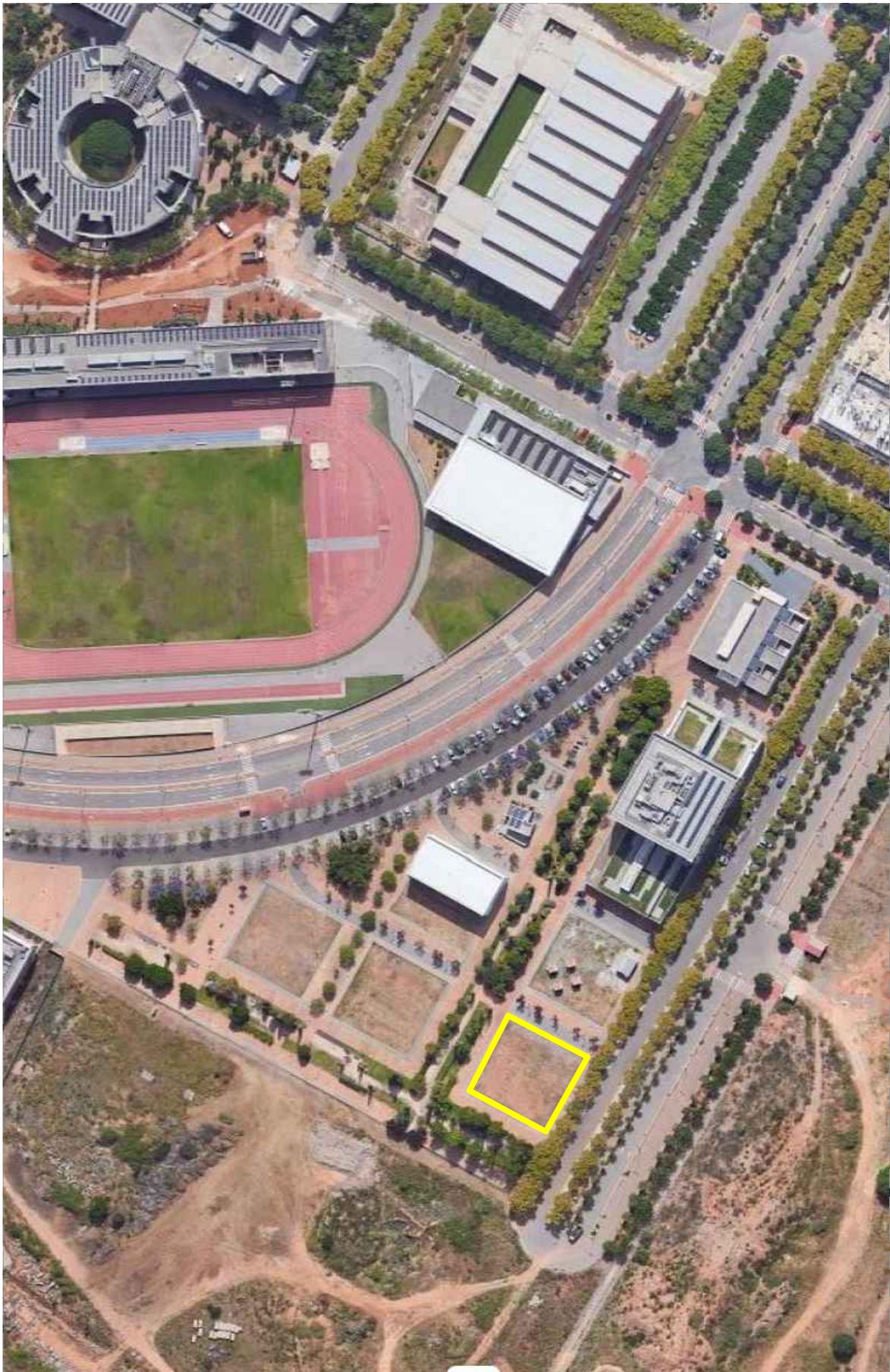


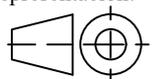
## ÍNDICE

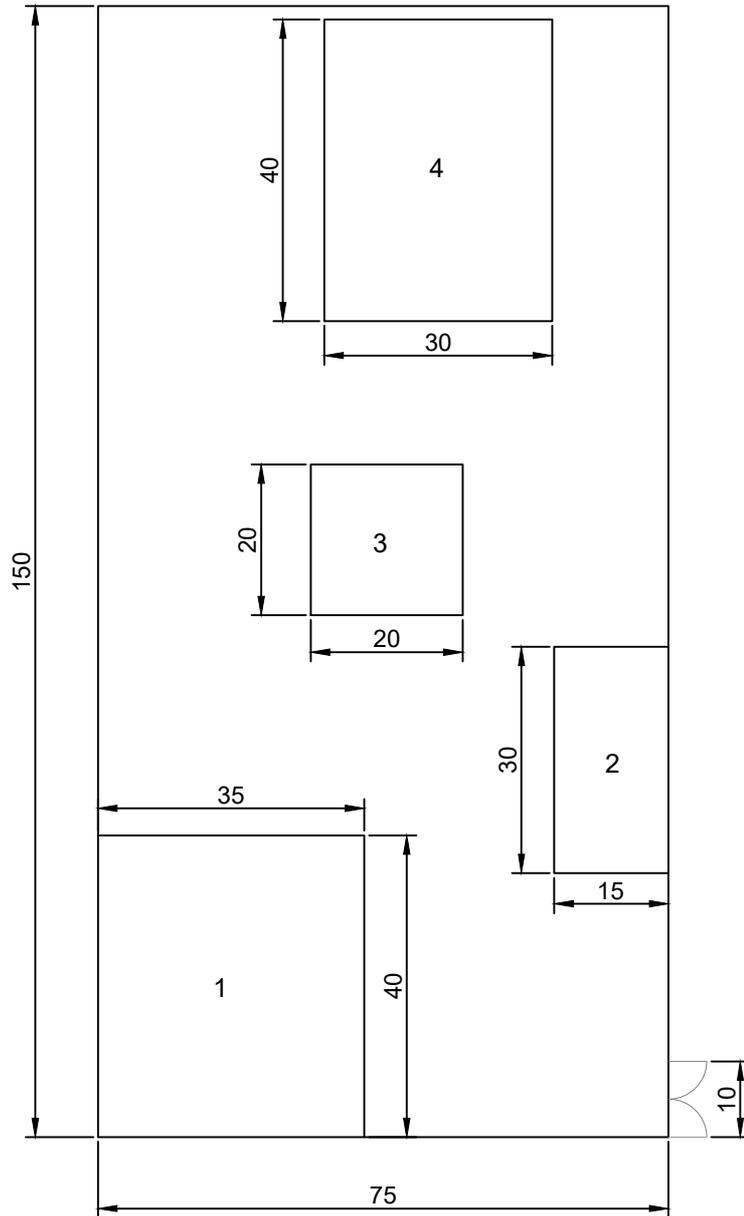
**1. PLANO 1: Ubicación de la parcela**

**2. PLANO 2: Distribución en planta**



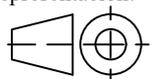


Departamento <b>INGENIERÍA QUÍMICA</b>	Proyecto Diseño de una planta para la producción de un complejo Titanio-Ácido glicólico		Escala: S/N	Unidad: m
	Autor/a: Aida Cubertorer Boza		Fecha edición: 21/08/2023	
	Tipo de documento: Plano de emplazamiento	Nº de plano: 1	Idioma: Español Formato: A4	
	Título del plano: Ubicación de la parcela de la planta		Método de representación: 	



#### Leyenda

1. Zona de recepción/almacenamiento de reactivos líquidos .
2. Sistema de impulsión neumática.
3. Zona del reactor y sus equipos auxiliares.
4. Sistema de secado.

Departamento INGENIERÍA QUÍMICA	Proyecto Diseño de una planta para la producción de un complejo Titanio-Ácido glicólico	Escala: 1:200	Unidad: mm
	Autor/a: Aida Cubertorer Boza		Fecha edición: 21/08/2023
	Tipo de documento: Plano de la instalación		Nº de plano: 2
	Título del plano: Distribución en planta por zonas		Idioma: Español
			Formato: A4
		Método de representación: 	

# 5. PLIEGO DE CONDICIONES



## ÍNDICE

<b>1. DEFINICIÓN Y ALCANCE DEL PLIEGO DE CONDICIONES.....</b>	<b>5</b>
<b>2. DISPOSICIONES DE CARÁCTER GENERAL .....</b>	<b>5</b>
2.1. CONTRATO DE OBRA .....	5
2.2. DOCUMENTACIÓN DEL CONTRATO DE OBRA.....	5
2.3. FORMALIZACIÓN DEL CONTRATO DE OBRA .....	6
2.4. JURISDICCIÓN COMPETENTE .....	6
2.5. EJECUCIÓN DE LAS OBRAS Y RESPONSABILIDAD DEL CONTRATISTA.....	6
2.6. ACCIDENTES DE TRABAJO .....	6
2.7. DAÑOS Y PERJUICIOS A TERCEROS.....	7
2.8. COPIA DE DOCUMENTOS .....	7
2.9. CAUSAS DE RESCISIÓN DEL CONTRATO DE OBRA .....	7
2.10. EFECTOS DE LA RESCISIÓN DEL CONTRATO DE OBRA .....	8
<b>3. DISPOSICIONES FACULTATIVAS .....</b>	<b>9</b>
3.1. EL PROMOTOR.....	9
3.2. EL PROYECTISTA .....	10
3.3. EL CONSTRUCTOR O CONTRATISTA .....	10
3.4. EL DIRECTOR DE LA OBRA .....	12
3.5. EL DIRECTOR DE LA EJECUCIÓN DE LA OBRA.....	13
3.6. LOS SUMINISTRADORES DE PRODUCTOS.....	13
<b>4. DISPOSICIONES ECONÓMICAS .....</b>	<b>15</b>
4.1. CONTRATO DE OBRA .....	15
4.2. FINANZAS .....	15
4.2.1. EJECUCIÓN DE TRABAJOS CON CARGO A LA FIANZA.....	16
4.2.2. DEVOLUCIÓN DE LA FIANZA.....	16
4.2.3. DEVOLUCIÓN DE LA FIANZA EN CASO DE EFECTUARSE RECEPCIONES PARCIALES..	16
4.3. PRECIOS .....	16
4.3.1. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN DE MATERIAL (PEM).....	16
4.3.2. RECLAMACIÓN DE AUMENTO DE PRECIOS .....	16
4.3.3. REVISIÓN DE LOS PRECIOS CONTRATADOS.....	17
4.3.4. ACOPIO DE MATERIALES .....	17
4.4. VALORACIÓN Y ABONO DE LOS TRABAJOS.....	17
4.4.1. FORMA Y PLAZOS DE ABONO DE LAS OBRAS.....	17
4.4.2. RELACIONES VALORADAS Y CERTIFICACIONES.....	17
4.5. INDEMNIZACIONES MUTUAS .....	18
4.5.1. INDEMNIZACIÓN POR RETRASO DEL PLAZO DE TERMINACIÓN DE LAS OBRAS.....	18

4.5.2. DEMORA DE LOS PAGOS POR PARTE DEL PROMOTOR .....	18
4.6. PLAZOS DE EJECUCIÓN: PLANIFICACIÓN DE LA OBRA.....	18
4.7. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA DE LAS OBRAS .....	18
4.8. LIQUIDACIÓN FINAL DE LA OBRA .....	19
<b>5. DISPOSICIONES LEGALES.....</b>	<b>20</b>
5.1. RECONOCIMIENTO DE MARCAS REGISTRADAS .....	20
5.2. DERECHOS DE AUTOR .....	20
<b>6. DISPOSICIONES TÉCNICAS PARTICULARES DEL PROYECTO .....</b>	<b>21</b>
6.1. ESPECIFICACIONES DE LA INSTALACIÓN ELÉCTRICA.....	21
6.2. ESPECIFICACIONES DE LA INSTALACIÓN DE FONTANERÍA .....	21
6.3. INSTALACIÓN DE LA MAQUINARIA.....	22

## **1. DEFINICIÓN Y ALCANCE DEL PLIEGO DE CONDICIONES**

El objeto del presente documento es fijar las condiciones técnicas mínimas que debe cumplir la planta de producción de un complejo titanio-ácido glicólico, concretando los requisitos de durabilidad, fiabilidad y seguridad. Además, el ámbito de aplicación se extiende a todos los sistemas mecánicos, hidráulicos y eléctricos que forman parte de esta planta.

En determinados supuestos se podrían adoptar, dada la propia naturaleza del pliego de condiciones, soluciones diferentes a las exigidas en este documento siempre que quede suficientemente justificada su necesidad y que no impliquen una disminución de las exigencias mínimas de la calidad especificadas en el mismo.

## **2. DISPOSICIONES DE CARÁCTER GENERAL**

### **2.1. CONTRATO DE OBRA**

El contrato de obra se puede definir como aquel en cuya virtud una persona (el contratista) se obliga a ejecutar una obra en beneficio de otra, que habrá de pagar a un precio concreto. En general en este tipo de contratos (de carácter temporal) el beneficio obtenido por el contratista no es el servicio proporcionado por el contratado, sino el resultado final.

En este proyecto se contempla este contrato para la realización de obras menores en el proceso de instalación de la maquinaria si se requirieran ya que, no será necesaria la construcción de la nave industrial. El director de obra ofrece la documentación necesaria para la realización del contrato de obra.

### **2.2. DOCUMENTACIÓN DEL CONTRATO DE OBRA**

El contrato de obra está integrado por los siguientes documentos, relacionados entre ellos por orden de prelación atendiendo al valor de sus especificaciones, en caso de posibles interpretaciones, omisiones o contradicciones:

- Las condiciones fijadas en el contrato de obra.
- El presente Pliego de condiciones.
- La documentación gráfica y escrita del proyecto: planos generales y de detalle, memorias, anejos, mediciones y presupuesto.

En el caso de interpretación, prevalecerán las especificaciones literales sobre las gráficas y las cotas sobre las medidas a escala tomadas de los planos.

### **2.3. FORMALIZACIÓN DEL CONTRATO DE OBRA**

Los contratos en general se formalizarán mediante documento privado, que podrá elevarse a escritura pública a petición de cualquiera de las partes.

Antes de la formalización del contrato de obra, el contratista dará también su conformidad con la firma al pie del Pliego de Condiciones, los Planos, Cuadro de Precios y Presupuesto General. Todos los gastos que ocasione la extensión del documento en que se consigne el contratista serán a cuenta del adjudicatario.

### **2.4. JURISDICCIÓN COMPETENTE**

En caso de no llegar a un acuerdo cuando surjan diferencias entre las partes implicadas, ambas quedan obligadas a someter a discusión todas las cuestiones derivadas de su contrato a las Autoridades y Tribunales Administrativos con arreglo a la legislación vigente, renunciando al derecho común y al fuero de su domicilio, siendo competente la jurisdicción de Castelló de la Plana.

### **2.5. EJECUCIÓN DE LAS OBRAS Y RESPONSABILIDAD DEL CONTRATISTA**

Las obras se ejecutarán con estricta sujeción al proyecto que sirve de base al contrato y conforme a las instrucciones que la Dirección Facultativa de las obras diere al contratista.

El contratista es el responsable de la ejecución de las obras y de todos los imprevistos que puedan advertirse en la construcción durante el desarrollo de las obras y hasta que se cumpla el plazo de garantía, en las condiciones establecidas en el contrato y en los documentos que componen el proyecto.

En consecuencia, quedará obligado a la demolición y reconstrucción de todas las unidades de obra con deficiencias o mal ejecutadas, sin que pueda servir de excusa el hecho de que la Dirección Facultativa haya examinado y reconocido la construcción durante sus visitas de obra, ni que hayan sido abonadas en liquidaciones parciales.

### **2.6. ACCIDENTES DE TRABAJO**

Es de obligado cumplimiento el “Real Decreto 1627/1997. Disposiciones mínimas de seguridad y de salud en las obras de construcción” y demás legislación vigente que, tanto directa como indirectamente, inciden sobre la planificación de la seguridad y salud en el trabajo de la construcción, conservación y mantenimiento de edificios.

## 2.7. DAÑOS Y PERJUICIOS A TERCEROS

El contratista será responsable de todos los accidentes que, por inexperiencia o descuido, sobrevinieran tanto en la edificación donde se efectúen las obras como en las colindantes o contiguas. Es por ello que el abono de las indemnizaciones a quien corresponda y cuando a ello hubiere lugar, y de todos los daños y perjuicios que puedan ocasionarse o causarse en las operaciones de la ejecución de las obras, es responsabilidad del contratista.

Asimismo, será responsable de los daños y perjuicios directos o indirectos que puedan ocasionar frente a terceros como consecuencia de la obra, tanto en ella como en sus alrededores, incluso los que se produzcan por omisión o negligencia del personal a su cargo, así como los que se deriven de los subcontratistas e industriales que intervengan en la obra.

El contratista es el responsable de mantener vigente durante la ejecución de los trabajos una póliza frente a terceros, en la modalidad de “Todo riesgo al derribo y la construcción”, suscrita por una compañía aseguradora con la suficiente solvencia para la cobertura de los trabajos contratados. Dicha póliza será aportada y ratificada por el promotor, no pudiendo ser cancelada mientras no se firme el Acta de Recepción Provisional de la obra.

## 2.8. COPIA DE DOCUMENTOS

El contratista, a su costa, tiene derecho a sacar copias de los documentos integrantes del proyecto.

## 2.9. CAUSAS DE RESCISIÓN DEL CONTRATO DE OBRA

Se considerarán causas suficientes de rescisión del contrato:

- La muerte o incapacitación del contratista.
- La quiebra del contratista.
- Las alteraciones del contrato por las causas siguientes:
  - a. La modificación del proyecto en forma tal que suponga alteraciones fundamentales del mismo a juicio del director de obra y siempre que la variación del Presupuesto de Ejecución de Material, como consecuencia de estas modificaciones, represente una desviación mayor del 20%.
  - b. Las modificaciones de unidades de obra, siempre que representen variaciones en más o menos del 40% del proyecto original, o más de un 50% de unidades de obra del proyecto reformado.
- La suspensión de la obra comenzada, siempre que el plazo de suspensión haya excedido de un año y en todo caso, siempre que por causas ajenas al contratista no

se dé el comienzo a la obra adjudicada dentro de tres meses a partir de la adjudicación. En este caso, la devolución de la fianza será automática.

- La suspensión de la iniciación de las obras por plazo superior a cuatro meses.
- Que el contratista no comience los trabajos dentro del plazo señalado en el contrato.
- La demora injustificada en la comprobación del replanteo.
- La suspensión de las obras por plazo superior a ocho meses por parte del promotor.
- El incumplimiento de las condiciones del contrato cuando implique descuido o mala fe, con perjuicio de los intereses de las obras.
- El vencimiento del plazo de ejecución de la obra.
- El desistimiento o el abandono de la obra sin causas justificadas.

## 2.10. EFECTOS DE LA RESCISIÓN DEL CONTRATO DE OBRA

La resolución del contrato conlleva la comprobación, medición y liquidación de las obras realizadas con arreglo al proyecto, fijando los saldos pertinentes a favor o en contra del contratista.

Si se demorase injustificadamente la comprobación del replanteo, dando lugar a la resolución del contrato, el contratista sólo tendrá derecho por todos los conceptos a una indemnización equivalente al 2% del precio de la adjudicación, excluidos los impuestos.

En el supuesto de desistimiento antes de la iniciación de las obras, o de suspensión de la iniciación de las mismas por parte del promotor por un plazo superior a cuatro meses, el contratista tendrá derecho a percibir por todos los conceptos una indemnización del 3% del precio de la adjudicación, excluidos los impuestos.

Una vez iniciada la ejecución de las obras, o de suspensión de las obras iniciadas por un plazo superior a ocho meses, el contratista tendrá derecho por todos los conceptos al 6% del precio de la adjudicación del contrato de las obras dejadas de realizar en concepto de beneficio industrial, excluidos los impuestos.

### 3. DISPOSICIONES FACULTATIVAS

Las disposiciones facultativas regulan los derechos y las obligaciones de las partes que integran la ejecución del proyecto, el promotor o titular del proyecto, el contratista y la dirección facultativa (el director de obra y el director de la ejecución de la obra).

Las atribuciones de los distintos agentes intervinientes en la edificación son las reguladas por la "Ley 38/1999. Ley de Ordenación de la Edificación".

#### 3.1. EL PROMOTOR

Es la persona física o jurídica, pública o privada, que individual o colectivamente decide, impulsa, programa y financia con recursos propios o ajenos, las obras de edificación para sí o para su posterior enajenación, entrega o cesión a terceros bajo cualquier título. Además, asume la iniciativa de todo el proceso de la edificación, impulsando la gestión necesaria para llevar a cabo la obra proyectada y, se hace cargo de todos los costes necesarios.

Según la legislación vigente, a la figura del promotor se equipararán también las de gestor de sociedades cooperativas, comunidades de propietarios u otras análogas, que asumen la gestión económica de la edificación.

Para este proyecto podría considerarse como promotor, los entes físicos que han solicitado la realización del mismo, tratándose éste de un trabajo de final de grado.

Las obligaciones que debe atender el promotor son las siguientes:

- Ostentar sobre la propiedad, la titularidad de un permiso que le faculte para construir en él.
- Facilitar la documentación e información previa necesaria para la redacción del proyecto, así como autorizar al director de la obra las posteriores modificaciones del mismo.
- Elegir y contratar a los distintos agentes, con la titulación y capacitación profesional necesaria, que garanticen el cumplimiento de las condiciones legalmente exigibles para realizar en su globalidad y llevar a buen término el objeto de lo promovido, en los plazos estipulados y en las condiciones de calidad exigibles mediante el cumplimiento de los requisitos básicos estipulados.
- Gestionar y obtener las preceptivas licencias y autorizaciones administrativas, así como suscribir el acta de recepción de la obra.

- Designar al coordinador de seguridad y salud para el proyecto y la ejecución de la obra.
- Suscribir los seguros previstos en la LOE, que cubran los daños materiales que ocasionen en el edificio, el incumplimiento de las condiciones de habitabilidad en tres años o que afecten a la seguridad estructural en el plazo de diez años.
- Entregar al adquiriente y usuario inicial, en su caso, la documentación de la obra ejecutada, o cualquier otro documento que sea exigible por las administraciones competentes.

### 3.2. EL PROYECTISTA

Es el agente que, por encargo del promotor y con sujeción a la normativa técnica correspondiente, redacta el proyecto.

Las obligaciones que debe atender el proyectista son las siguientes:

- Redactar el proyecto por encargo del promotor, con sujeción a la normativa técnica en vigor y conteniendo la documentación necesaria tanto para poder tramitar la licencia de obras (proyecto básico) como para ser interpretada y poder ejecutar totalmente la obra, entregando al promotor las copias autorizadas correspondientes, debidamente visadas por su colegio profesional.
- Acordar con el promotor la contratación de colaboraciones parciales de otros técnicos profesionales.
- Ostentar la propiedad intelectual de su trabajo, tanto de la documentación escrita como de los cálculos de cualquier tipo, así como de los planos contenidos en la totalidad del proyecto y cualquiera de sus documentos complementarios.

### 3.3. EL CONSTRUCTOR O CONTRATISTA

Es el agente que asume contractualmente ante el promotor, el compromiso de ejecutar con medios humanos y materiales, propios o ajenos, las obras o parte de las mismas con sujeción al Proyecto y al Contrato de obra.

Cabe hacer especial mención de que la ley señala como responsable explícito de los vicios o defectos constructivos al contratista general de la obra, sin perjuicio del derecho de repetición de éste hacia los subcontratistas.

Las obligaciones que debe atender el constructor o contratista son las siguientes:

- 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.
- Tener la titulación o capacitación profesional que habilita para el cumplimiento de las condiciones legalmente exigibles.
- 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.
- Asignar a la obra los medios humanos y materiales que se requieran.
- Organizar los trabajos de construcción para cumplir con los plazos previstos, de acuerdo al correspondiente Plan de Obra, efectuando las instalaciones provisionales y disponiendo de los medios auxiliares necesarios.
- Elaborar el plan de seguridad y salud en el trabajo en el que se analicen, estudien y ejecuten las medidas preventivas, velando por el cumplimiento y por la observancia de la normativa vigente en materia de seguridad y salud en el trabajo.
- Atender las indicaciones y cumplir con las instrucciones del coordinador en materia de seguridad y salud durante la ejecución de la obra y, en su caso, de la dirección facultativa.
- Formalizar las subcontrataciones de determinadas partes o instalaciones de la obra dentro de los límites establecidos en el contrato.
- Firmar el acta de replanteo o comienzo y el acta de recepción de la obra.
- Asegurar la idoneidad de todos y cada uno de los materiales utilizados y de los elementos constructivos, comprobando los preparados en obra y rechazando, por iniciativa propia o por prescripción del director, los suministros de material que no cuenten con las garantías, documentación mínima exigible o documentos de idoneidad requeridos por las normas de aplicación.
- Custodiar los libros de órdenes y seguimiento de la obra, así como de los de seguridad y salud y el del control de calidad.
- Facilitar al director de la obra o arquitecto técnico, con antelación suficiente, los datos necesarios para la elaboración de la documentación final de la obra ejecutada.
- Preparar las certificaciones parciales de obra y la propuesta de liquidación final.
- Poner a disposición del director de ejecución material de la obra los medios auxiliares y personal necesario para efectuar las pruebas pertinentes para el Control de Calidad.

- Suscribir con el promotor las actas de recepción provisional y definitiva.
- Suscribir las garantías por daños que se señalan en la “Ley 38/1999.Ley de Ordenación de la Edificación” y que, en función de su naturaleza, alcanzan periodos de 1 año (daños por defectos de terminación o acabado de las obras), 3 años (daños por defectos o vicios de elementos constructivos o de instalaciones que afecten a la habitabilidad) o 10 años (daños en cimentación o estructura que comprometan directamente la resistencia mecánica y la estabilidad del edificio).

### 3.4. EL DIRECTOR DE LA OBRA

Es el agente que, formando parte de la dirección facultativa, dirige el desarrollo de la obra en los aspectos técnicos, estéticos, urbanísticos y medioambientales, de conformidad con el proyecto que la define, la licencia de edificación y demás autorizaciones perceptivas, y las condiciones del contrato, con el objeto de asegurar su adecuación al fin propuesto.

Las obligaciones que debe atender el director de la obra son las siguientes:

- Poseer la titulación académica y profesional habilitante de arquitecto, arquitecto técnico, ingeniero o ingeniero técnico, según corresponda, así como el cumplimiento de las condiciones exigibles para el ejercicio de la profesión.
- Dirigir la obra coordinándola con el Proyecto de Ejecución, facilitando la interpretación técnica, económica y estética a los agentes intervinientes en el proceso constructivo.
- Asistir a las obras, a fin de resolver las contingencias que se produzcan para asegurar la correcta interpretación y ejecución del proyecto, así como impartir las soluciones aclaratorias que fueran necesarias.
- Informar al promotor de las posibles modificaciones del proyecto, que vengan exigidas por razones técnicas o normativas.
- Coordinar la intervención en obra de otros técnicos.
- Dar conformidad a las certificaciones parciales de obra y liquidación final.
- Firmar el acta de replanteo o comienzo y el certificado final de obra.
- Preparar con el contratista la documentación gráfica y escrita del proyecto ejecutado, incorporando las modificaciones efectuadas.
- Se adjuntará, el acta de recepción final; la relación identificativa de los agentes que han intervenido durante el proceso de edificación y las instrucciones de uso y mantenimiento del edificio y sus instalaciones.

### 3.5. EL DIRECTOR DE LA EJECUCIÓN DE LA OBRA

Es el agente que, formando parte de la dirección facultativa, asume la función técnica de dirigir la ejecución material de la obra y de controlar cualitativa y cuantitativamente la construcción y calidad de lo edificado. Para ello es requisito indispensable el estudio y análisis previo del proyecto de ejecución una vez redactado por el director de obra, procediendo a solicitarle, con antelación al inicio de las obras, todas aquellas aclaraciones, subsanaciones o documentos complementarios que, dentro de su competencia y atribuciones legales, estimase necesarios para poder dirigir de manera solvente la ejecución de las mismas.

Las obligaciones que debe atender el director de la ejecución de la obra son las siguientes:

- Estar en posesión de la titulación académica y profesional habilitante y cumplir las condiciones exigibles para el ejercicio de la profesión.
- Redactar el documento de estudio y análisis del proyecto para elaborar los programas de organización y desarrollo de la obra.
- Elaborar y suscribir el proyecto de control de calidad de la edificación, desarrollando lo especificado en el proyecto de ejecución.
- Redactar el estudio de los sistemas adecuados a los riesgos del trabajo en la realización de la obra y aprobar el Estudio de Seguridad y Salud para la aplicación del mismo.
- Efectuar el replanteo de la obra y preparar el acta correspondiente.
- Comprobación de las instalaciones provisionales, medios auxiliares y medidas de seguridad y salud en el trabajo, controlando la correcta ejecución.
- Consignar en el libro de órdenes y asistencias las instrucciones precisas que se considere oportuno reseñar para la correcta ejecución material de las obras.
- Verificar la recepción a pie de obra, de todos los productos de construcción, ordenando la realización de ensayos y pruebas precisas.

### 3.6. LOS SUMINISTRADORES DE PRODUCTOS

Se consideran suministradores de productos los fabricantes, almacenistas, importadores o vendedores de productos de construcción. Son los encargados de 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.

Asimismo, facilitan 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.

## 4. DISPOSICIONES ECONÓMICAS

Las disposiciones económicas fijan el marco de relaciones económicas para el abono y recepción de la obra. Tienen carácter subsidiario respecto al contrato de obra establecido entre las partes intervinientes, promotor y contratista.

### 4.1. CONTRATO DE OBRA

A la Dirección Facultativa (director de obra y director de ejecución de la obra) se le facilitará una copia del contrato de obra, para poder certificar los términos pactados.

El contrato de obra deberá prever las posibles interpretaciones y discrepancias que pudieran surgir entre las partes, así como garantizar que la Dirección Facultativa pueda, de hecho, coordinar, dirigir y controlar la obra, por lo que es conveniente que se especifiquen y determinen con claridad, como mínimo, los siguientes puntos:

- Documentos a aportar por el contratista.
- Condiciones de ocupación del solar y de inicio de las obras.
- Responsabilidades y obligaciones del contratista: Legislación laboral.
- Responsabilidades y obligaciones del promotor.
- Presupuesto del contratista.
- Revisión de precios.
- Forma de pago: Certificaciones.
- Plazos de ejecución: Planificación.
- Retraso de la obra: Penalizaciones.
- Recepción de la obra: Provisional y definitiva.
- Litigio entre las partes,

Todos los agentes que intervienen en el proceso de la construcción, definidos en la "Ley 38/1999. Ley de Ordenación de la Edificación", tienen derecho a percibir puntualmente las cantidades devengadas por su correcta actuación con arreglo a las condiciones contractualmente establecidas, pudiendo exigirse recíprocamente las garantías suficientes para el cumplimiento diligente de sus obligaciones de pago.

### 4.2. FINANZAS

El contratista presentará una fianza con arreglo al procedimiento que se estipule en el contrato de obra.

#### 4.2.1. 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.

#### 4.2.2. DEVOLUCIÓN DE LA FIANZA

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.

#### 4.2.3. DEVOLUCIÓN DE LA FIANZA EN 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.

#### 4.3. 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 basándonos en esos precios, calcularemos el presupuesto.

##### 4.3.1. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN DE 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.

##### 4.3.2. 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.

#### 4.3.3. 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. Sólo se procederá a efectuar revisión de precios cuando haya quedado explícitamente determinado en el contrato de obra entre el promotor y el contratista.

#### 4.3.4. 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 éste, siendo el contratista responsable de su guarda y conservación.

### 4.4. VALORACIÓN Y ABONO DE LOS TRABAJOS

#### 4.4.1. FORMA Y PLAZOS DE ABONO DE LAS OBRAS

Se realizará por certificaciones de ora 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 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.

#### 4.4.2. RELACIONES VALORADAS Y CERTIFICACIONES

En los plazos fijados en el contrato de obra entre el promotor y el contratista, éste último formulará una relación valorada de las obras ejecutadas durante las fechas previstas, según la medición practicada por el director de ejecución de 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.

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 al que la valoración se refiere. Si la Dirección Facultativa lo exigiera, las certificaciones se extenderán a origen.

#### 4.5. INDEMNIZACIONES MUTUAS

##### 4.5.1. 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.

##### 4.5.2. DEMORA DE LOS PAGOS POR PARTE DEL PROMOTOR

Se regulará en el contrato de obras las condiciones a cumplir por parte de ambos.

#### 4.6. PLAZOS DE EJECUCIÓN: PLANIFICACIÓN DE LA OBRA

En el contrato de obra deberán figurar los plazos de ejecución y entregas, tanto totales como parciales. Además, será conveniente adjuntar al respectivo contrato una planificación 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.

#### 4.7. LIQUIDACIÓN ECONÓMICA DE LAS OBRAS

Simultáneamente al libramiento de la última certificación, se procederá a otorgar el 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 a 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 las mismas 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.

#### 4.8. 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, ésta sólo mediará, en caso de desavenencia o desacuerdo, en el recurso ante los Tribunales.

## 5. DISPOSICIONES LEGALES

### 5.1. RECONOCIMIENTO DE MARCAS REGISTRADAS

La autora 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.

### 5.2. DERECHOS DE AUTOR

Los derechos de autor, 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.

## 6. DISPOSICIONES TÉCNICAS PARTICULARES DEL PROYECTO

El objeto de este apartado es reflejar los requisitos técnicos básicos para realizar la puesta en marcha de la planta de generación del complejo titanio-ácido glicólico.

### 6.1. ESPECIFICACIONES DE LA INSTALACIÓN ELÉCTRICA

Las instalaciones eléctricas serán ejecutadas por una empresa especializada, cumpliendo todos los requisitos que establece la legislación vigente. Toda la documentación acreditativa será presentada por el Director de Obra para que pueda emitir la oportuna autorización de comienzo de los trabajos.

Todo el personal que intervenga en cualquier ejecución en cualquier parte de las instalaciones eléctricas, aunque sea accesoria, deberá estar en posesión de los oportunos certificados de calificación profesional.

Será condición necesaria para que la dirección autorice su intervención en los trabajos, la entrega de una copia, autenticada por la empresa especializada, de los certificados mencionados, así como la justificación de estar de alta en el Libro de Matrícula.

Antes de iniciar la obra, el Contratista presentará unos planos de detalle que indiquen preferentemente una situación real de los recorridos de canalizaciones y conductores. Al finalizar la obra, presentará los mismos planos corregidos en la forma como se hizo.

### 6.2. ESPECIFICACIONES DE LA INSTALACIÓN DE FONTANERÍA

Las tuberías serán del tipo, diámetro y presión de servicio que se indican en las Mediciones y Presupuestos de este proyecto y cumplirán las especificaciones contenidas en dichos documentos.

Las piezas especiales, serán capaces de soportar presiones de prueba y trabajo iguales a las tuberías en que hayan de instalarse. El cuerpo principal de estos elementos será el material que garantice el fabricante de reconocida solvencia nacional, previa aprobación del director de obra, quien también ha de autorizar los modelos a utilizar. En todo caso, el acabado de las piezas especiales, será perfecto y de amplio funcionamiento, durabilidad y resistencia. Deberán acreditarse mediante los oportunos certificados oficiales.

La superficie interior de cualquier elemento será lisa, no pudiendo admitirse otros defectos de regularidad que los de carácter accidental o local que queden dentro de las

tolerancias prescritas y que no representen ninguna merma de la calidad de circulación de agua. La reparación de tales defectos no podrá realizarse sin la previa autorización del director de la obra.

### 6.3. INSTALACIÓN DE LA MAQUINARIA

Todas las partes de la maquinaria que debe estar en contacto con la materia prima, serán de material inalterable, con la superficie lisa y fácil de limpiar. De la misma manera, el exterior de la maquinaria deberá estar esmaltado o cubierto de materia inalterable y sin ángulos entrantes que impidan una limpieza perfecta.

En el caso de tener partes móviles deberán estar provistos de los debidos dispositivos de protección para el manejo del operador. Si en condiciones de trabajo normales una máquina, con fuerza de acondicionamiento suficiente y manejada de acuerdo con las instrucciones, no diera el rendimiento garantizado, se comunicará a la casa vendedora para que comunique las deficiencias y haga las modificaciones oportunas. Si en el plazo de un mes, estas deficiencias no fueran subsanadas, la casa se hará cargo de la maquinaria, puesta, embalada en la estación más próxima a la residencia del cliente, devolviendo el mismo importe que haya pagado, o suministrándole a elección de éste, en sustitución de la maquinaria retirada, otra de rendimiento correcto.

Serán a cuenta de la casa suministradora el transporte, embalaje, derechos y aduanas, riesgos, seguros e impuestos hasta que la maquinaria se encuentre en el lugar de su emplazamiento. El montaje será por cuenta de la casa vendedora, si bien el promotor proporcionará las escaleras, instalación eléctrica, herramienta gruesa y material de albañilería, carpintería y cerrajería necesaria para el montaje, así como personal auxiliar para ayudar al especializado que enviará la empresa suministradora.

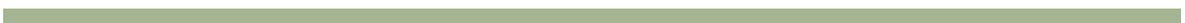
El plazo que para la entrega de maquinaria pacte el promotor con el vendedor de la misma, no podrá ser ampliado más que por causa de fuerza mayor, como huelgas, lock-out, movilización del ejército, guerra o revolución. Si el retraso es imputable a la casa vendedora, el promotor tendrá derecho a un 1% de rebaja en el precio por cada semana de retraso como compensación por los perjuicios ocasionados.

Será por cuenta de la entidad vendedora suministrar los aparatos y útiles precisos para ejecutar las pruebas de las máquinas y verificar las comprobaciones necesarias, siendo de su cuenta los gastos que originen éstas.

En cada máquina o grupo de máquinas, se establecerá una fecha de prueba con el objeto de poder efectuar la recepción provisional, para el plazo mínimo de garantía de un año, en el cual su funcionamiento ha de ser perfecto, comprometiéndose la empresa suministradora a reponer por su cuenta las piezas que aparezcan deterioradas a causa de una defectuosa construcción o instalación y a subsanar por su cuenta las anomalías o irregularidades de funcionamiento que impidan su uso normal.



# 6. ESTADO DE MEDICIONES





## ÍNDICE

<b>1. ESTADO DE MEDICIONES .....</b>	<b>5</b>
1.1. PARTIDA 1: EL REACTOR .....	5
1.2. PARTIDA 2: EL SISTEMA DE IMPULSIÓN .....	5
1.3. PARTIDA 3: EL SISTEMA DE SECADO.....	6



## 1. Estado de mediciones

En el Estado de Mediciones se hace un registro de aquellas partidas presupuestarias que ejercen una influencia directa en el presupuesto del proyecto. En la Tabla EM.1 se muestran las partidas en las que se divide en este proyecto.

**Tabla EM.1:** Partidas presupuestarias.

Nº de partida	Partida
Partida 1	Reactor
Partida 2	Sistema de impulsión neumática
Partida 3	Sistema de secado

### 1.1. Partida 1: Reactor

En la Tabla EM.2 se muestra el estado de mediciones del reactor, contemplando como parte de éste los equipos auxiliares.

**Tabla EM.2:** Partida del reactor.

Equipo	Unidades	Cantidad
Reactor RCTA	Ud.	1
Tanque de mezclado	Ud.	1
Ciclón	Ud.	1
Filtro	Ud.	2
Bomba de impulsión	Ud.	1

### 1.2. Partida 2: Sistema de impulsión neumática

En la Tabla EM.3 se muestra el estado de mediciones del sistema de impulsión neumática.

**Tabla EM.3:** Partida del sistema de impulsión.

Equipo	Unidades	Cantidad
Micro dosificador	Ud.	1
Conducciones (D = 20mm)	m	2,3

### 1.3. Partida 3: Sistema de secado

En la Tabla EM.4 se muestra el estado de mediciones del sistema de secado.

Tabla EM.4: Partida del sistema de secado.

Equipo	Unidades	Cantidad
Columna de rectificación	Ud.	1
Secadero por atomización	Ud.	1

# 7. PRESUPUESTO



## ÍNDICE

<b>1. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL (PEM)</b> .....	<b>5</b>
1.1. PEM PARCIAL .....	5
1.1.1. Partida 1: Reactor .....	5
1.1.2. Partida 2: Sistema de impulsión neumática .....	5
1.1.3. Partida 3: Sistema de secado.....	6
1.1.4. Partida 4: Mano de obra .....	6
1.1.5. Partida 5: Parcela y obra civil .....	6
1.2. PEM TOTAL.....	7
<b>2. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (PEC)</b> .....	<b>8</b>
<b>3. PRESUPUESTO TOTAL</b> .....	<b>9</b>



## 1. Presupuesto de ejecución material (PEM)

El Presupuesto de Ejecución de Material es el presupuesto en el que se consideran los costes de construcción del proyecto como la mano de obra o los equipos.

### 1.1. PEM parcial

El Presupuesto de Ejecución de Material se puede desglosar en distintas partidas presupuestarias, las mencionadas en el documento “Estado de mediciones” y una partida presupuestaria extra, correspondiente a la mano de obra no contemplada en dicho documento. Por tanto, en conjunto las partidas presupuestarias son las siguientes:

- Partida 1: Reactor.
- Partida 2: Sistema de impulsión neumática.
- Partida 3: Sistema de secado.
- Partida 4: Mano de obra.
- Partida 5: Parcela y obra civil.

Éstas partidas se describen en detalle en los siguientes apartados.

#### 1.1.1. Partida 1: Reactor

La primera partida del Presupuesto de Ejecución de Material está formada por los distintos equipos presentes en la planta. En la Tabla P.1.1 se muestran los equipos, sus costes por unidad y el precio total de su adquisición.

**Tabla P.1.1:** *Desglose de la partida presupuestaria correspondiente a la partida 1.*

Equipo	Cantidad (Ud.)	Precio unitario (€/Ud.)	Precio (€)
Reactor RCTA	1	2.500,00	2.500,00
Tanque de mezclado	1	1.500,00	1.500,00
Ciclón	1	500,00	500,00
Filtro	1	400,00	400,00
<b>TOTAL</b>			<b>4.900,00 €</b>

#### 1.1.2. Partida 2: Sistema de impulsión neumática

La segunda partida del Presupuesto de Ejecución de Material contempla los equipos de la impulsión neumática y los metros de conducciones (Tabla P.1.2).

**Tabla P.1.2:** *Desglose de la partida presupuestaria correspondiente a la partida 2.*

Equipo	Cantidad	Precio unitario	Precio (€)
Micro dosificador	1 Ud.	800 €/ud.	800,00
Conducciones (D = 20mm)	2,3 m	13 €/m	32,50
<b>TOTAL</b>			<b>832,50 €</b>

### 1.1.3. Partida 3: Sistema de secado

La tercera partida del Presupuesto de Ejecución de Material está formada por todos los equipos del sistema de secado. En la Tabla P.1.3 se muestran los equipos con sus costes y el valor total de su adquisición.

**Tabla P.1.3:** *Desglose de la partida presupuestaria correspondiente a la partida 3.*

Equipo	Cantidad	Precio unitario (€/Ud.)	Precio (€)
Columna de rectificación	1 Ud.	25000	25.000,00
Secadero por atomización	1 Ud.	35000	35.000,00
<b>TOTAL</b>			<b>60.000,00 €</b>

### 1.1.4. Partida 4: Mano de obra

La cuarta partida del Presupuesto de Ejecución de Material corresponde a las estimaciones del coste de la mano de obra para el montaje de la planta. Según el Colegio de Ingenieros Industriales de la Comunidad Valenciana, esta partida presupuestaria será un 15% del coste total de los equipos (Tabla P.1.4).

**Tabla P.1.4:** *Desglose de la partida presupuestaria correspondiente a la partida 4.*

Elemento	Unidad	Cantidad	Precio total equipos (€)	Precio total (€)
Mano de obra	%	15	6.2732,50	9.859,88

### 1.1.5. Partida 5: Parcela y obra

La quinta partida del Presupuesto de Ejecución de Material comprende la compra de la parcela en la que se va a instalar la planta diseñada en éste proyecto. También se ha considerado parte de la misma partida el coste de la construcción de la nave industrial donde se instalarán los equipos (Tabla P.1.5).

**Tabla P.1.5:** Desglose de la partida presupuestaria correspondiente a la mano de obra.

<b>Elemento</b>	<b>Unidad</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio unitario</b>	<b>Precio total (€)</b>
Parcela	m <sup>2</sup>	900	92 €/m <sup>2</sup>	82.800 €
Nave industrial 8 m de altura	m <sup>2</sup>	450	180 €/m <sup>2</sup>	81.000 €
<b>TOTAL</b>				<b>163.800,00 €</b>

## 1.2. PEM TOTAL

Finalmente, en el Presupuesto de Ejecución de Material total se obtiene a partir de la suma de los totales de las partidas presupuestarias definidas en el Presupuesto de Ejecución de Material parcial. En la Tabla P.1.6 se muestra un resumen de los totales de las partidas presupuestarias y el valor total del PEM.

**Tabla P.1.6:** Presupuesto de Ejecución Material total.

<b>Partidas</b>	<b>Coste (€)</b>
Reactor	4.900,00
Sistema de impulsión neumática	832,50
Sistema de secado	60.000,00
Mano de obra	9.859,88
Parcela y obra	163.800,00
<b>TOTAL</b>	<b>239.392,38</b>

## 2. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (PEC)

El Presupuesto de Ejecución por Contrata está formado por la suma del PEM, los gastos generales y el beneficio industrial. Éstos últimos obtienen a partir de PEM ya que, los gastos generales suponen un 13% de éste y el beneficio industrial un 6%. Estos porcentajes son los valores empleados habitualmente en la contratación de obras.

En los gastos generales se incluyen los posibles costes derivados del seguimiento y control, las licencias y seguridad y salud. En la Tabla P.2.1 se muestra un resumen del Presupuesto de Ejecución por Contrata.

**Tabla P.2.1:** *Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC).*

	<b>Coste (€)</b>
PEM	239.392,38
Gastos generales	31.121,01
Beneficio industrial	14.363,55
<b>TOTAL</b>	<b>284.876,93</b>

### 3. PRESUPUESTO TOTAL

El presupuesto total, equivalente a la inversión inicial, es el Presupuesto de Ejecución por Contrata más el IVA (21%) aplicable. En la Tabla P.3.1 se muestra el resumen del cálculo del presupuesto total.

**Tabla P.3.1:** *Presupuesto total del proyecto.*

	Coste (€)
PEC	284.876,93
IVA (21%)	59.824,16
<b>TOTAL</b>	<b>344.701,09</b>

El presupuesto total del proyecto *Diseño de una planta para la producción de un complejo Titanio-Ácido glicólico* asciende a TRESCIENTOS CUARENTA Y CUATRO MIL SETECIENTOS UN EUROS CON NUEVE CÉNTIMOS.