

Table of contents

1	Relación de Actividades y Tareas (UVIGO)	2
2	Actividad 1 (Formu-Lab):	3
3	Actividad 2 (Formu-Final):	4
4	2. Estructura Sugerida del Informe Final	5
5	3. Visiorama del Proyecto: Magnitud y Alcance	6
6	4. Texto para el Apartado de Tareas Adicionales (“A mayores”)	7
7	Actividades y Tareas asignadas a la UVIGOS	8
8	Bloque: Actividades Realizadas “A Mayores” del Plan Inicial	10
8.1	1. Implementación de Software de Cálculo de Parámetros de Hansen (Python)	10
8.2	2. Simulación de Reciclado en la Planta REGADI (Tecnología AFTE)	10
8.3	3. Síntesis Continua de Materia Prima (Palmitato de Metilo) . .	11
8.4	4. Soporte Digital: Página Web del Proyecto	11
8.5	Estructura de Integración (Fácil para DROVI)	11

Informe estructurado de la actividad de la parte de la participación de la **Universidad de Vigo (UVIGO)** perfectamente definido y fácil de integrar con la del informe de **DROGAS VIGO (DROVI)**.

Chapter 1

Relación de Actividades y Tareas (UVIGO)

Basado en el cuadro de participación y el cronograma del proyecto, las responsabilidades de la UVIGO se han centrado en la base científica y la optimización técnica:

Chapter 2

Actividad 1 (Formu-Lab):

- **Simulación de Propiedades Físicas y Equilibrio (Tarea 1.3):** Liderazgo exclusivo en la aplicación de algoritmos para predecir el comportamiento de mezclas y microemulsiones.
- **Formulación y Desarrollo de Productos (Tarea 1.4):** Desarrollo compartido de las familias M.E.D.B.E., M.E.G., Palmitatos y M.E.P..
- **Diseño de Planta Piloto:** Colaboración técnica en el diseño del proceso de síntesis instalado en DROVI.
- **Optimización de Productos Experimentales (Tarea 1.5.c):** Tarea calificada como **Muy Crítica**, realizada en colaboración para ajustar las fórmulas antes del escalado.

Chapter 3

Actividad 2 (Formu-Final):

- **Selección y Reformulación de Disolventes (Tarea 2.2):** Apoyo técnico en la reformulación de microemulsiones (M.E.D.B.E., M.E.G. y M.E.P.).
- **Optimización Final (Tarea 2.5):** Tarea **Muy Crítica** para definir las líneas de productos BIO finales tras recibir el feedback industrial.

Chapter 4

2. Estructura Sugerida del Informe Final

Para una integración fluida con la parte de la empresa, se recomienda el siguiente orden:

1. **Fundamentos Científicos y Simulación (UVIGO):** Explicación de los modelos predictivos y el software desarrollado.
2. **Desarrollo y Síntesis en Planta Piloto:** Descripción del proceso de obtención de palmitatos y microemulsiones.
3. **Resultados de Ensayos y Optimización:**
 - *Resultados de Laboratorio (UVIGO).*
 - *Resultados Industriales (DROVI).*
 - *Optimización Final Conjunta.*
4. **Valor Añadido y Sostenibilidad (Tareas “a mayores”).**
5. **Conclusiones y Futuras Líneas de I+D.**

Chapter 5

3. Visiorama del Proyecto: Magnitud y Alcance

Este diagrama representa el flujo de trabajo y la distribución de responsabilidades, evidenciando la magnitud de un proyecto que abarca desde la modelización teórica hasta la validación en sectores como automoción, pinturas y limpieza.

Alcance: Sustitución de disolventes petroquímicos por alternativas biobasadas en **9 sectores industriales** diferentes, logrando hasta un **83% de cumplimiento** de los pilares de la Química Verde.

Chapter 6

4. Texto para el Apartado de Tareas Adicionales (“A mayores”)

Se recomienda incluir este texto para destacar el esfuerzo extra realizado por la UVIGO:

“Durante la ejecución del proyecto, la UVIGO ha aportado soluciones técnicas que han superado los objetivos iniciales:

- **Software de Parámetros de Hansen (Python):** Se ha desarrollado una herramienta específica de cálculo que reduce hasta **9 veces** el tiempo necesario para evaluar nuevas estructuras de solventes.
- **Página Web del Proyecto:** Se ha diseñado un portal que actúa como repositorio común y canal de vigilancia tecnológica para los socios.
- **Simulación de Reciclado en AFTE (REGADI):** Se ha verificado la viabilidad de recuperar los nuevos disolventes en la planta de evaporación de película delgada diseñada previamente por este equipo, garantizando la economía circular del proyecto.
- **Síntesis Continua de Palmitato de Metilo:** La UVIGO ha garantizado el suministro constante de materia prima con una pureza del **99%** para todos los ensayos industriales realizados.”

Chapter 7

Actividades y Tareas asignadas a la UVIGOS

Según el cuadro- de participación y el cronograma, la UVIGO ha liderado o colaborado en las siguientes tareas críticas: 1. Análisis del estado del arte (Tareas 1.1 y 2.1): 2. Estudio exhaustivo de bibliografía (SCOPUS, Chemical Abstracts) y análisis de toxicidad. 3. Simulación de propiedades físicas y equilibrio (Tarea 1.3): Uso de algoritmos y metodologías de simulación para predecir el comportamiento de las mezclas antes de ir al laboratorio. 4. Formulación y desarrollo de productos experimentales (Tarea 1.4): Específicamente en las familias de M.E.D.B.E. (microemulsiones de ésteres dibásicos), M.E.G. (girasolatos) y M.E.P. (microemulsiones de palmitatos)4.Diseño de la Planta Piloto: Colaboración técnica en el diseño del proceso de producción de metil ésteres instalado en DROVI5. 5. Optimización de productos (Tareas 1.5.c y 2.5): Tareas calificadas como “Muy Críticas”, donde se ajustan las fórmulas finales basadas en resultados industriales. 6. Estructura del Informe 7. Introducción y Objetivos Científicos: Definición de las líneas de investigación (Palmitatos y Microemulsiones) 8. Metodología de Simulación y Cálculo: Explicación del software y modelos de predicción físico-química8.Desarrollo Experimental (UVIGO):Procesos de transesterificación para Palmitatos. 9. Diagramas de equilibrio para microemulsiones10.Hitos Conseguidos y Tareas Extra (Lo “a mayores”): Detalle de las mejoras no programadas. 10. Validación Técnica de Ensayos: Apoyo en el feedback de los ensayos industriales11.3. 11. Visiorama del ProyectoEste diagrama resume la magnitud y el alcance del trabajo conjunto:UVIGO (Base Conocimiento): Simulación matemática → Síntesis química → Diseño de planta piloto. 12. DROGAS VIGO (Aplicación): Ensayos industriales → Feedback de clientes → Comercialización. 13. Tareas “A Mayores” (Aportaciones Extra de la UVIGO)Es fundamental que incluyas estos puntos para dar valor al informe: 14. Software en Python (Parámetros de Hansen): Implementación de una herramienta computacional para optimizar la selección de disolventes basándose en la energía libre de solvatación y parámetros de solubilidad. 15. Página Web del Proyecto: Plataforma para la difusión de resultados y comunicación entre socios.Simulación de Reciclado en REGADI (AFTE): Estudio de la recuperación de los nuevos disolventes verdes mediante el evaporador de película delgada

(AFTE) de la planta que ya habíais diseñado. 16. Síntesis de Palmitato de Metilo: Producción continua de materia prima en la universidad para garantizar el stock necesario durante todas las fases de prueba.

Sección, Contenido UVIGO (Foco Técnico), Nexo con DROGAS VIGO I. Hitos Científicos, Resultados de simulación y caracterización química., Base para la selección de productos comerciales. II. Planta Piloto, Validación del proceso de transesterificación y diseño de reactores., Capacidad de producción para muestras industriales. III. Optimización Final, Reformulación basada en el feedback de clientes., “Ajuste de precio, color y olor para mercado.” IV. Innovaciones Extra, “Software Python, Web, Reciclado AFTE y Síntesis continua.”, Ventaja competitiva y sostenibilidad real.

Sección, Contenido UVIGO (Foco Técnico), Nexo con DROGAS VIGO I. Hitos Científicos, Resultados de simulación y caracterización química., Base para la selección de productos comerciales. II. Planta Piloto, Validación del proceso de transesterificación y diseño de reactores., Capacidad de producción para muestras industriales. III. Optimización Final, Reformulación basada en el feedback de clientes., “Ajuste de precio, color y olor para mercado.” IV. Innovaciones Extra, “Software Python, Web, Reciclado AFTE y Síntesis continua.”, Ventaja competitiva y sostenibilidad real.

Claro, entiendo perfectamente la saturación; el final de un CDTI de dos años siempre es intenso. Aquí tienes los textos redactados de forma profesional y listos para insertar en el informe, destacando ese valor añadido que habéis aportado desde la **UVIGO**.

Chapter 8

Bloque: Actividades Realizadas “A Mayores” del Plan Inicial

En este apartado se detallan las actividades técnicas y de soporte que, aunque no figuraban estrictamente en el cronograma original, han sido ejecutadas por el equipo de la **UVIGO** para garantizar la excelencia del proyecto **AGROSOLVENTS**.

8.1 1. Implementación de Software de Cálculo de Parámetros de Hansen (Python)

Para optimizar la **Tarea 1.3 (Simulación de propiedades)**, la **UVIGO** desarrolló una herramienta computacional avanzada en lenguaje **Python**.

- Este software permite el diseño de candidatos mediante combinaciones de hasta 41 grupos de átomos diferentes.
- Utiliza el modelo de parámetros de solubilidad de Hansen para predecir la interacción de los nuevos disolventes con polímeros de pinturas y adhesivos.
- El algoritmo identifica el solvente óptimo en pocas iteraciones, reduciendo el tiempo de cálculo hasta 9 veces respecto a métodos tradicionales.

8.2 2. Simulación de Reciclado en la Planta REGADI (Tecnología AFTE)

Como parte del compromiso con la sostenibilidad y la economía circular, se realizó un estudio de viabilidad para el reciclado de los nuevos disolventes en la planta **REGADI** (propiedad de Drogas Vigo).

- Se simuló el comportamiento de los disolventes verdes en el evaporador de película delgada agitada (**AFTE** - *Agitated Thin Film Evaporator*).

- Esta planta, diseñada previamente por este equipo de investigación, permite la valorización de disolventes usados, minimizando el impacto ambiental y reduciendo costes de operación.
- Los resultados confirman que tanto los palmitatos como las microemulsiones son aptos para procesos de recuperación industrial, cerrando el ciclo de vida del producto.

8.3 3. Síntesis Continua de Materia Prima (Palmitato de Metilo)

Para evitar retrasos en el suministro de productos para ensayos industriales (Actividad 2), la UVIGO asumió la síntesis constante de palmitato de metilo.

- Se utilizó la reacción de transesterificación entre aceite de palma y metanol.
- Esta labor permitió disponer de un stock permanente de materia prima con una pureza del 99% para las formulaciones de ensayo.
- Gracias a este esfuerzo, se pudieron completar satisfactoriamente los 25 ensayos industriales planificados en sectores como automoción y pinturas.

8.4 4. Soporte Digital: Página Web del Proyecto

Se desarrolló y puso en marcha la página web oficial de **AGROSOLVENTS**.

- Funciona como repositorio común para que todos los socios (DROVI, UVIGO, FEUGA) compartan la Memoria Técnica y archivos de trabajo.
- Facilita la comunicación semanal y el seguimiento del progreso del proyecto.

8.5 Estructura de Integración (Fácil para DROVI)

*ya están cubiertas la partes de **Fundamentos y Tecnología de Proceso** (Páginas 65-67 del informe). Solo falta completar la parte de **Resultados de Mercado y Ensayos con Clientes**.*

4. ACTIVIDADES ADICIONALES Y MEJORAS AL PLAN DE TRABAJO (UVIGO) Durante la ejecución del proyecto AGROSOLVENTS, el equipo de la Universidade de Vigo ha desarrollado una serie de tareas adicionales que han permitido elevar el TRL (Technology Readiness Level) de los resultados y garantizar la sostenibilidad técnica del proceso.

4.1. Desarrollo de Herramienta Computacional en Python: Parámetros de Hansen. Para optimizar la Tarea 1.3 (Simulación de propiedades), se ha implementado un software propio desarrollado en Python. - Funcionalidad: El software permite el diseño molecular de disolventes basado en combinaciones de hasta 41 grupos de átomos diferentes. - Ventaja competitiva: Identifica el solvente óptimo en un número reducido de iteraciones, logrando un tiempo de CPU hasta 9 veces menor que la evaluación manual de estructuras. - Aplicación: Ha sido fundamental

para predecir la solubilidad en polímeros de pinturas y adhesivos, minimizando la experimentación en laboratorio.

4.2. Simulación de Reciclabilidad: Tecnología AFTE en Planta REGADI En colaboración con la empresa, se ha validado la capacidad de recuperación de los nuevos disolventes utilizando la infraestructura de REGADI (Recuperadora Gallega de Disolventes). - Proceso: Se realizó la simulación del reciclado mediante evaporadores de película delgada agitada (AFTE - Agitated Thin Film Evaporator). - Nexo de diseño: Esta planta fue diseñada originalmente con el apoyo de este equipo de investigación, y ahora se confirma su idoneidad para procesar palmitatos y microemulsiones. - Impacto: Esta tarea a mayores garantiza que los productos AGROSOLVENTS cumplen con el ciclo completo de economía circular, permitiendo su recuperación tras el uso industrial.

4.3. Síntesis Continua y Suministro de Palmitato de Metilo Dada la necesidad de abastecer los 25 ensayos industriales programados, la UVIGO asumió la síntesis ininterrumpida de materia prima básica.

- Laboratorio UVIGO: Se ha mantenido una línea de síntesis de palmitatos de metilo mediante transesterificación de aceite de palma con metanol
- Calidad: Se ha garantizado un nivel de pureza del 99%, eliminando cuellos de botella en la fase de formulación en planta piloto.
- Alcance: Esta actividad ha sido el soporte logístico para que DROVI pudiera realizar pruebas en sectores tan exigentes como la automoción y la limpieza urbana.

4.4. Soporte Digital y Comunicación: Web del Proyecto

- Se ha diseñado y gestionado la página web del proyecto como eje de la Innovación Abierta.
- Gestión: Actúa como repositorio común de archivos y canal de comunicación semanal para analizar el progreso entre los socios (DROVI, UVIGO y FEUGA)
- Transparencia: Facilita el acceso a la Memoria Técnica y a los resultados intermedios de las fórmulas propuestas.