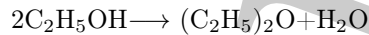


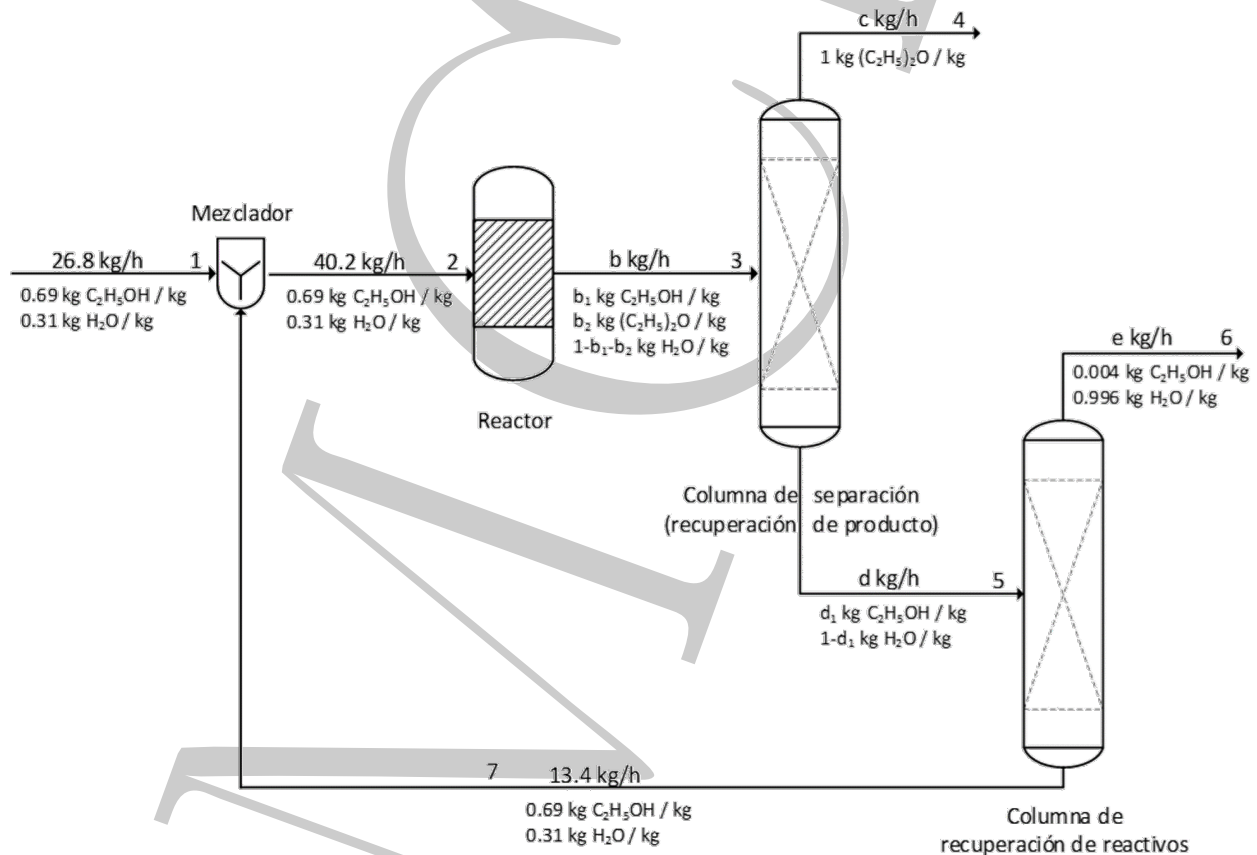
Problema 11. El solvente éter etílico se fabrica industrialmente mediante la deshidratación del alcohol etílico:



Se alimentan al proceso 26.8 kg/h de solución de alcohol (que contiene 69 % en peso de alcohol y 31 % en peso de agua) a un reactor. La corriente de salida del reactor es alimentada a una columna de separación en dos corrientes para la recuperación de producto, una con el éter puro y la otra corriente es alimentada a una columna para la recuperación de reactivos y tiene dos corrientes de salida: una con el alcohol recuperado el cual es recirculado a la entrada del reactor, y la otra corriente que contiene 0.4 % en peso de alcohol y lo restante de agua. Suponiendo que la recirculación es la mitad de la alimentación del proceso y tiene su misma composición.

- Presenta el diagrama de flujo del proceso con corrientes, equipos y todos los datos e incógnitas.
- Presenta explícitamente los cálculos relevantes para la determinación de los grados de libertad de todos los equipos. ¿Qué puedes concluir?
- Calcula los flujos de todas las corrientes del sistema.
- Presentar los resultados en una tabla con todas las corrientes y todos los compuestos.
- Calcular la conversión del reactor y la conversión para el proceso.

a)



Como es un proceso continuo en estado estacionario reaccionante, entonces la *ecuación general de balance* es:

○ Sistema general y Reactor:

● Reactivos:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

$$\text{Entrada} = \text{Salida} + \text{Consumo}$$

- Productos:

$$\begin{aligned} \text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} &= \text{Acumulación} \\ \text{Entrada} &= \text{Salida} - \text{Generación} \end{aligned}$$

- Columna de separación, Columna de recuperación de reactivos y Mezclador:

$$\begin{aligned} \text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} &= \text{Acumulación} \\ \text{Entrada} &= \text{Salida} \end{aligned}$$

b) Sea ξ el grado de avance de la reacción.

- Sistema general:

Ecuaciones independientes (3):

- Balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$:

$$\begin{aligned} \text{Corriente 1} &= \text{Corriente 6} + \text{Consumo} \\ (26.8 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) &= (e \text{ kg/h})(0.004 \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + 2\xi \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/h} \end{aligned}$$

- Balance de $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} \\ 0 \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} &= (c \text{ kg/h})(1 \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}) - \xi \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} \end{aligned}$$

- Balance de H_2O :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 1} &= \text{Corriente 6} - \text{Generación} \\ (26.8 \text{ kg/h})(0.31 \text{ kg H}_2\text{O/kg}) &= (e \text{ kg/h})(0.996 \text{ kg H}_2\text{O/kg}) - \xi \text{ kg H}_2\text{O/h} \end{aligned}$$

En donde hay 3 incógnitas = $\{c, e, \xi\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 3 - 3 = 0$$

- Reactor:

Ecuaciones independientes (3):

- Balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$:

$$\begin{aligned} \text{Corriente 2} &= \text{Corriente 3} + \text{Consumo} \\ (40.2 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) &= (b \text{ kg/h})(b_1 \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + 2\xi \text{ kg C}_2\text{H}_5\text{OH/h} \end{aligned}$$

- Balance de $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$:

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 3} - \text{Generación} \\ 0 \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} &= (b \text{ kg/h})(b_2 \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}) - \xi \text{ kg (C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} \end{aligned}$$

- Balance total:

$$\begin{aligned} \text{Corriente 2} &= \text{Corriente 3} \\ 40.2 \text{ kg/h} &= b \text{ kg/h} \end{aligned}$$

En donde hay 4 incógnitas = $\{b, b_1, b_2, \xi\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 4 - 3 = 1$$

- Columna de separación:

$$\text{Corriente 3} = \text{Corriente 4} + \text{Corriente 5}$$

Ecuaciones independientes (3):

- Balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$: $(b \text{ kg/h})(b_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) = (d \text{ kg/h})(d_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg})$
- Balance de $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$: $(b \text{ kg/h})(b_2 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}) = (c \text{ kg/h})(1 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg})$
- Balance total: $b \text{ kg/h} = c \text{ kg/h} + d \text{ kg/h}$

En donde hay 6 incógnitas = $\{b, b_1, b_2, c, d, d_1\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 6 - 3 = 3$$

o Columna de recuperación de reactivos:

$$\text{Corriente 5} = \text{Corriente 6} + \text{Corriente 7}$$

Ecuaciones independientes (2):

- Balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$: $(d \text{ kg/h})(d_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) = (e \text{ kg/h})(0.004 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + (13.4 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg})$
- Balance total: $d \text{ kg/h} = e \text{ kg/h} + 13.4 \text{ kg/h}$

En donde hay 3 incógnitas = $\{d, d_1, e\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 3 - 2 = 1$$

o El Mezclador tiene como función juntar la alimentación y la recirculación (ambas con la misma composición), en el diagrama ya está resuelto este equipo.

Con los cálculos de grados de libertad anteriores podemos ver que primero se tienen que resolver el Sistema general y obtener c, e, ξ . Así el Reactor y la Columna de recuperación de reactivos tienen $\text{GL} = 0$ y se halla b, b_1, b_2, d, d_1 .

c)

o Sistema general:

Resolviendo el sistema de ecuaciones simultáneas conformado por el balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ y el balance de H_2 :

$$(26.8 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) = 18.492 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/h} = (e \text{ kg/h})(0.004 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + 2\xi \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/h}$$

$$(26.8 \text{ kg/h})(0.31 \text{ kg } \text{H}_2\text{O/kg}) = 8.308 \text{ kg } \text{H}_2\text{O/h} = (e \text{ kg/h})(0.996 \text{ kg } \text{H}_2\text{O/kg}) - \xi \text{ kg } \text{H}_2\text{O/h}$$

$$e \text{ kg/h} = \begin{vmatrix} 18.492 & 2 \\ 8.308 & -1 \\ 0.004 & 2 \\ 0.996 & -1 \end{vmatrix} \text{ kg/h} = 17.5892 \text{ kg/h}$$

$$\xi \text{ kg/h} = \begin{vmatrix} 0.004 & 18.492 \\ 0.996 & 8.308 \\ 0.004 & 2 \\ 0.996 & -1 \end{vmatrix} \text{ kg/h} = 9.2108 \text{ kg/h}$$

En el balance de $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$:

$$0 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} = (c \text{ kg/h})(1 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}) - 9.2108 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h}$$

$$c \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} = 9.2108 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h}$$

o Reactor:

Usando el balance total en el balance de $(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$ y $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$:

$$40.2 \text{ kg/h} = b \text{ kg/h}$$

$$0 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h} = (40.2 \text{ kg/h})(b_2 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}) - 9.2108 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h}$$

$$b_2 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg} = \frac{9.2108 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/h}}{40.2 \text{ kg/h}} = 0.2291 \text{ kg } (\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O/kg}$$

$$(40.2 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) = (40.2 \text{ kg/h})(b_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + 2(9.2108) \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/h}$$

$$b_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg} = \frac{(40.2 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) - 2(9.2108) \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/h}}{40.2 \text{ kg/h}} = 0.2318 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}$$

o Columna de recuperación de reactivos:

En el balance total:

$$d \text{ kg/h} = 17.5892 \text{ kg/h} + 13.4 \text{ kg/h} = 30.9892 \text{ kg/h}$$

En el balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$:

$$(30.9892 \text{ kg/h})(d_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) = (17.5892 \text{ kg/h})(0.004 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + (13.4 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg})$$

$$d_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg} = \frac{(17.5892 \text{ kg/h})(0.004 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}) + (13.4 \text{ kg/h})(0.69 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg})}{30.9892 \text{ kg/h}}$$

$$d_1 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg} = 0.3006 \text{ kg } \text{C}_2\text{H}_5\text{OH/kg}$$

d)

Flujo másico (kg/h)							
	1	2	3	4	5	6	7
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	18.492	27.738	9.3164	0	9.3164	0.0704	9.246
H_2O	8.308	12.462	21.6728	0	21.6728	17.5188	4.154
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$	0	0	9.2108	9.2108	0	0	0
Total	26.8	40.2	40.2	9.2108	30.9892	17.5892	13.4

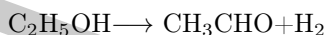
Fracción másica							
	1	2	3	4	5	6	7
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	0.69	0.69	0.2318	0	0.3006	0.004	0.69
H_2O	0.31	0.31	0.5391	0	0.6994	0.996	0.31
$(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{O}$	0	0	0.2291	1	0	0	0

e)

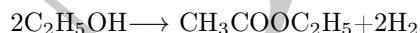
$$\text{Conversión del reactor} = \frac{\text{Reactivo consumido}}{\text{Reactivo suministrado}} \times 100\% = \frac{18.4216 \text{ kg/h}}{27.738 \text{ kg/h}} \times 100\% = 66.4130\%$$

$$\text{Conversión del proceso} = \frac{\text{Reactivo consumido}}{\text{Reactivo suministrado}} \times 100\% = \frac{18.4216 \text{ kg/h}}{18.492 \text{ kg/h}} \times 100\% = 99.6195\%$$

Problema 12. Es posible obtener el acetaldehído (CH_3CHO) por la deshidrogenación catalítica de etanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$) mediante la reacción:



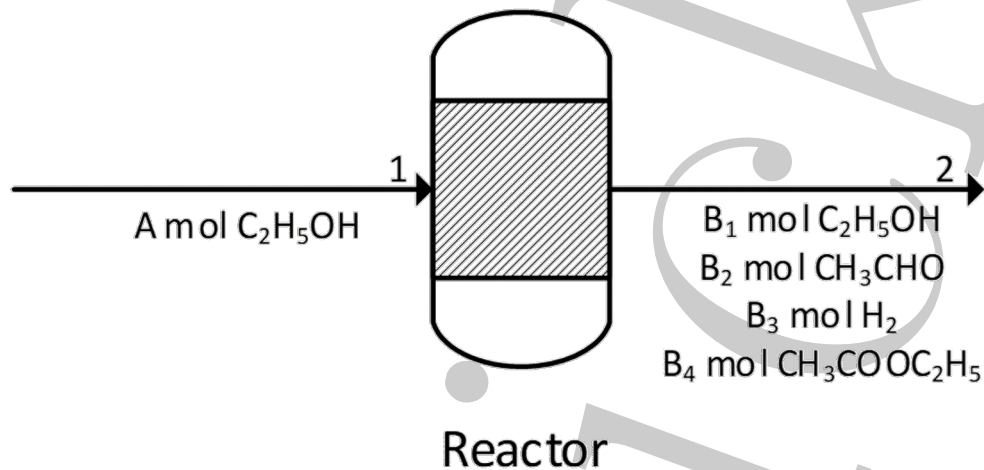
Ocurre también una reacción paralela que produce acetato de etilo ($\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$):



Supóngase que en un reactor determinado se ajustan las condiciones, de modo que se obtiene una conversión de etanol de 95 %, con un rendimiento de 80 % de acetaldehído y la alimentación al mismo es de etanol puro.

- Presenta el diagrama de flujo del proceso con corrientes, equipos y todos los datos e incógnitas.
- Presenta explícitamente los cálculos relevantes para la determinación de los grados de libertad de todos los equipos. ¿Qué puedes concluir?
- Calcula los flujos y composición de todas las corrientes del sistema.
- Presentar los resultados en una tabla con todas las corrientes y todos los compuestos.

a)



Como es un proceso continuo en estado estacionario reaccionante, entonces la *ecuación general de balance* en el sistema es:

- Reactivos:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

$$\text{Entrada} = \text{Salida} + \text{Consumo}$$

- Productos:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} - \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

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

b) Sean ξ_1 y ξ_2 los grados de avance de la primera y segunda reacción, respectivamente.

Ecuaciones independientes (6):

- Balance de $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$:

$$\text{Corriente 1} = \text{Corriente 2} + \text{Consumo}$$

$$A \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH} = B_1 \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH} + \xi_1 \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH} + 2\xi_2 \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH}$$

- Balance de CH_3CHO :

$$0 = \text{Corriente 2} - \text{Generación}$$

$$0 \text{ mol CH}_3\text{CHO} = B_2 \text{ mol CH}_3\text{CHO} - \xi_1 \text{ mol CH}_3\text{CHO}$$

- Balance de H_2 :

$$0 = \text{Corriente 2} - \text{Generación}$$

$$0 \text{ mol H}_2 = B_3 \text{ mol H}_2 - \xi_1 \text{ mol H}_2 - 2\xi_2 \text{ mol H}_2$$

- Balance de $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$:

$$0 = \text{Corriente 2} - \text{Generación}$$

$$0 \text{ mol CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 = B_4 \text{ mol CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 - \xi_2 \text{ mol CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$$

- Conversión del etanol:

$$0.95 = \frac{\text{Consumido}}{\text{Suministrado}} = \frac{A \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH} - B_1 \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH}}{A \text{ mol C}_2\text{H}_5\text{OH}}$$

• Rendimiento del acetaldehído:

La máxima cantidad de acetaldehído que se puede obtener sin reacciones secundarias y con una conversión del 100 % se tiene cuando se consume todo los moles de etanol de la entrada (A mol de C_2H_5OH) y como la relación es 1 : 1 en la primera ecuación química del etanol : acetaldehído, entonces la máxima cantidad de acetaldehído que se puede producir es A mol de CH_3CHO .

$$0.80 = \frac{\text{Producido}}{\text{Máximo}} = \frac{B_2 \text{ mol } CH_3CHO}{A \text{ mol } CH_3CHO}$$

En donde hay 7 incógnitas = $\{A, B_1, B_2, B_3, B_4, \xi_1, \xi_2\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$GL = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 7 - 6 = 1$$

Por lo que hay que asignar una base de cálculo. Sea $A = 100$.

c)

Con el rendimiento del acetaldehído:

$$0.80 = \frac{B_2 \text{ mol } CH_3CHO}{100 \text{ mol } CH_3CHO}$$

$$B_2 \text{ mol } CH_3CHO = (0.80)(100 \text{ mol } CH_3CHO) = 80 \text{ mol } CH_3CHO$$

Con la conversión del etanol:

$$0.95 = \frac{100 \text{ mol } C_2H_5OH - B_1 \text{ mol } C_2H_5OH}{100 \text{ mol } C_2H_5OH}$$

$$B_1 \text{ mol } C_2H_5OH = 100 \text{ mol } C_2H_5OH - (0.95)(100 \text{ mol } C_2H_5OH) = 5 \text{ mol } C_2H_5OH$$

En el balance de CH_3CHO :

$$0 \text{ mol } CH_3CHO = 80 \text{ mol } CH_3CHO - \xi_1 \text{ mol } CH_3CHO$$

$$\xi_1 \text{ mol } CH_3CHO = 80 \text{ mol } CH_3CHO$$

En el balance de C_2H_5OH :

$$100 \text{ mol } C_2H_5OH = 5 \text{ mol } C_2H_5OH + 80 \text{ mol } C_2H_5OH + 2\xi_2 \text{ mol } C_2H_5OH$$

$$\xi_2 \text{ mol } C_2H_5OH = \frac{100 \text{ mol } C_2H_5OH - 5 \text{ mol } C_2H_5OH - 80 \text{ mol } C_2H_5OH}{2} = 7.5 \text{ mol } C_2H_5OH$$

En el balance de H_2 :

$$0 \text{ mol } H_2 = B_3 \text{ mol } H_2 - 80 \text{ mol } H_2 - 2(7.5) \text{ mol } H_2$$

$$B_3 \text{ mol } H_2 = 80 \text{ mol } H_2 + 2(7.5) \text{ mol } H_2 = 95 \text{ mol } H_2$$

En el balance de $CH_3COOC_2H_5$:

$$0 \text{ mol } CH_3COOC_2H_5 = B_4 \text{ mol } CH_3COOC_2H_5 - 7.5 \text{ mol } CH_3COOC_2H_5$$

$$B_4 \text{ mol } CH_3COOC_2H_5 = 7.5 \text{ mol } CH_3COOC_2H_5$$

d)

Cantidad molar (mol)			Fracción molar		
	1	2		1	2
C_2H_5OH	100	5	C_2H_5OH	1	0.02667
CH_3CHO	0	80	CH_3CHO	0	0.42667
H_2	0	95	H_2	0	0.50667
$CH_3COOC_2H_5$	0	7.5	$CH_3COOC_2H_5$	0	0.04
Total	100	187.5			

Sabiendo que C = 12 g/mol, H = 1 g/mol y O = 16 g/mol se tiene que:

- $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} = [12(2)+1(5)+16+1] \text{ g/mol} = 46 \text{ g/mol}$
- $\text{CH}_3\text{CHO} = [12+1(3)+12+1+16] = 44 \text{ g/mol}$
- $\text{H}_2 = [1(2)] \text{ g/mol} = 2 \text{ g/mol}$
- $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5 = [12+1(3)+12+16+16+12(2)+1(5)] \text{ g/mol} = 88 \text{ g/mol}$

Cantidad másica (g)			Fracción másica		
	1	2		1	2
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	4600	230	$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$	1	0.05
CH_3CHO	0	3520	CH_3CHO	0	0.76522
H_2	0	190	H_2	0	0.04130
$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$	0	660	$\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$	0	0.14358
Total	4600	4600			