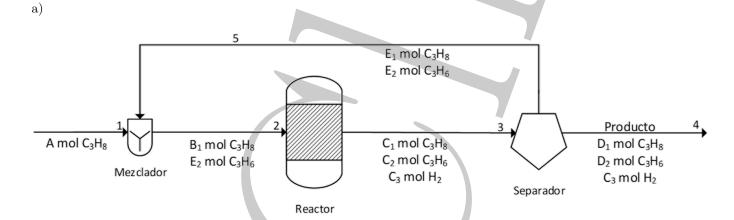
Problema 18. En un reactor se deshidrogena propano para dar propileno:

$$C_3H_8 \longrightarrow C_3H_6 + H_2$$

El proceso se va a diseñar para una conversión total de 95 % del propano. Los productos de reacción son alimentados a una unidad de separación donde se originan dos corrientes. La primera, el producto, contiene H_2 , C_3H_6 y $0.555\,\%$ (mol) del C_3H_8 que sale del reactor. La segunda corriente contiene el balance del C_3H_8 sin reaccionar y $5\,\%$ del C_3H_6 de la primera corriente, se recircula al reactor.

- a) Presenta el diagrama de flujo del proceso con corrientes, equipos y todos los datos e incógnitas.
- b) Presenta explícitamente los cálculos relevantes para la determinación de los grados de libertad del reactor. ¿Qué puedes concluir?
- c) Calcule:
 - i. La composición del producto.
 - ii. La relación (moles recirculados) / (moles de alimentación fresca).
 - iii. Conversión en un paso.
- d) Presentar una tabla de flujos molares en todas las corrientes de todos los compuestos.



Como es un proceso continuo en estado estacionario reaccionante, entonces la ecuación general de balance es: o Sistema general y Reactor:

- Reactivos:
 - $\begin{aligned} \text{Entrada} + \frac{\text{Generaci\'on}}{\text{Centrada}} \text{Salida} \text{Consumo} &= \frac{\text{Acumulaci\'on}}{\text{Entrada}} \\ &= \text{Salida} + \text{Consumo} \end{aligned}$
- Productos:

$$\label{eq:entrada} \begin{split} \text{Entrada} + \text{Generación} &- \text{Salida} - \text{Consumo} = \text{Acumulación} \\ \text{Entrada} &= \text{Salida} - \text{Generación} \end{split}$$

o Separador y Mezclador:

$$\label{eq:entrada} \begin{aligned} \text{Entrada} + \frac{\text{Generaci\'on}}{\text{Entrada}} - \frac{\text{Salida}}{\text{Salida}} = \frac{\text{Acumulaci\'on}}{\text{Salida}} \end{aligned}$$

- b) Sea ξ el grado de avance de la reacción.
- o Sistema general:

Ecuaciones independientes (4):

• Balance de C_3H_8 :

$$\label{eq:corriente} \begin{aligned} & \text{Corriente } 1 = \text{Corriente } 4 + \text{Consumo} \\ & \text{A mol } C_3 H_8 = D_1 \text{ mol } C_3 H_8 + \xi \text{ mol } C_3 H_8 \end{aligned}$$

• Balance de H₂:

$$0 = \mbox{Corriente} \ 4 \mbox{ - Generación}$$

$$0 \mbox{ mol} \ H_2 = C_3 \mbox{ mol} \ H_2 \mbox{ - } \xi \mbox{ mol} \ H_2$$

• Balance de C₃H₆:

$$0 = \text{Corriente 4 - Generación}$$

$$0 \text{ mol } C_3H_6 = D_2 \text{ mol } C_3H_6 - \xi \text{ mol } C_3H_6$$

• Conversión del propano:

$$0.95 = \frac{Consumido}{Suministrado} = \frac{A \ mol \ C_3H_8 - D_1 \ mol \ C_3H_8}{A \ mol \ C_3H_8}$$

En donde hay 5 incógnitas = $\{A, D_1, D_2, C_3, \xi\}$. Entonces, el grado de libertad es:

$$\mathrm{GL}=\#$$
 Incógnitas - $\#$ Ecuaciones independientes = 5 - 4 = 1

• Reactor:

Ecuaciones independientes (3):

• Balance de C_3H_8 :

$$\label{eq:corriente} \begin{array}{l} {\rm Corriente}~2 = {\rm Corriente}~3 + {\rm Consumo} \\ {\rm B}_3~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_8 = {\rm C}_1~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_8 + \xi~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_8 \end{array}$$

• Balance de H₂:

$$0 = \text{Corriente } 3$$
 - Generación
 $0 \text{ mol } H_2 = C_3 \text{ mol } H_2$ - $\xi \text{ mol } H_2$

• Balance de C₃H₆:

$$\label{eq:corriente} \begin{array}{l} Corriente \ 2 = Corriente \ 3 \ - \ Generación \\ E_2 \ mol \ C_3H_6 = C_2 \ mol \ C_3H_6 \ - \ \xi \ mol \ C_3H_6 \end{array}$$

En donde hay 6 incógnitas = $\{B_3, C_1, C_2, C_3, E_2, \xi\}$. Entonces, el grado de libertad es:

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

• Separador:

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

Ecuaciones independientes (4):

- Balance de C₃H₈: C₁ mol C₃H₈ = D₁ mol C₃H₈ + E₁ mol C₃H₈
- Balance de C_3H_6 : C_2 mol C_3H_6 = D_2 mol C_3H_6 + E_2 mol C_3H_6
- Relación de C_3H_8 : $(0.00555)(C_1 \text{ mol } C_3H_8) = D_1 \text{ mol } C_3H_8$
- Relación de C_3H_6 : $(0.05)(D_2 \text{ mol } C_3H_6) = E_2 \text{ mol } C_3H_6$

En donde hay 6 incógnitas = $\{C_1, C_2, D_1, D_2, E_1, E_2\}$. Entonces, el grado de libertad es:

$$\mathrm{GL}=\#$$
 Incógnitas - $\#$ Ecuaciones independientes = 6 - 4 = 2

• Mezclador:

Corriente
$$1 + \text{Corriente } 5 = \text{Corriente } 2$$

Ecuaciones independientes (1):

 \bullet Balance de C_3H_8 : A mol $C_3H_8+E_1$ mol $C_3H_8=B_1$ mol C_3H_8

En donde hay 3 incógnitas = $\{A, E_1, B_1\}$. Entonces, el grado de libertad es:

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

Con los cálculos de grados de libertad anteriores podemos ver que primero hay que asignar una base de cálculo. Sea A = 100. Así el Sistema general tiene GL = 0 y se halla D_1, D_2, C_3, ξ , de aquí el Separador tiene GL = 0 y se calcula C_1, C_2, E_1, E_2 y finalmente el Mezclador tiene GL = 0 y se obtiene B_1 .

o Sistema general:

Con la conversión del propano:

$$0.95 = \frac{100 \ \text{mol} \ C_3H_8 - D_1 \ \text{mol} \ C_3H_8}{100 \ \text{mol} \ C_3H_8}$$

$$D_1 \ \text{mol} \ C_3H_8 = 100 \ \text{mol} \ C_3H_8 - (0.95)(100 \ \text{mol} \ C_3H_8) = 5 \ \text{mol} \ C_3H_8$$

En el balance de C_3H_8 :

$$100~{\rm mol}~C_3H_8=5~{\rm mol}~C_3H_8+\xi~{\rm mol}~C_3H_8$$
 $\xi~{\rm mol}~C_3H_8=100~{\rm mol}~C_3H_8-5~{\rm mol}~C_3H_8=95~{\rm mol}~C_3H_8$

En el balance de H_2 :

0 mol H
$$_2$$
 = C $_3$ mol H $_2$ - 95 mol H $_2$ C $_3$ mol H $_2$ = 95 mol H $_2$

En el balance de C_3H_6 :

0 mol
$$C_3H_6=D_2$$
 mol C_3H_6 - 95 mol C_3H_6
$$D_2 \text{ mol } C_3H_6=95 \text{ mol } C_3H_6$$

• Separador:

Con la relación de C_3H_6 :

$$(0.05)(95 \text{ mol } C_3H_6) = E_2 \text{ mol } C_3H_6 = 4.75 \text{ mol } C_3H_6$$

En el balance de C_3H_6 :

$$C_2 \text{ mol } C_3H_6 = 95 \text{ mol } C_3H_6 + 4.75 \text{ mol } C_3H_6 = 99.75 \text{ mol } C_3H_6$$

Con la relación de C_3H_8 :

$$\begin{array}{l} (0.00555)(C_1 \ mol \ C_3H_8) = 5 \ mol \ C_3H_8 \\ C_1 \ mol \ C_3H_8 = \frac{5 \ mol \ C_3H_8}{0.00555} = 900.9009 \ mol \ C_3H_8 \end{array}$$

En el balance de C_3H_8 :

$$900.9009 \ mol \ C_3H_8 = 5 \ mol \ C_3H_8 + E_1 \ mol \ C_3H_8$$

$$E_1 \ mol \ C_3H_8 = 900.9009 \ mol \ C_3H_8 - 5 \ mol \ C_3H_8 = 895.9009 \ mol \ C_3H_8$$

• Mezclador:

En el balance de C_3H_8 :

$$100 \text{ mol } C_3H_8 + 895.9009 \text{ mol } C_3H_8 = B_1 \text{ mol } C_3H_8 = 995.9009 \text{ mol } C_3H_8$$

i) El producto es la Corriente 4:

Cantidad molar (mol)							Fracción molar						
	1	2	3	4	5			1	2	3	4	5	
C_3H_8	100	995.9009	900.9009	5	895.9009		C_3H_8	1	0.9953	0.8223	0.0256	0.9947	
C_3H_6	0	4.75	99.75	95	4.75		C_3H_6	0	0.0047	0.0910	0.4872	0.0053	
H_2	0	0	95	95	0		H_2	0	0	0.0867	0.4872	0	
Total	100	1000.6509	1095.6509	195	900.6509								

ii) Los moles recirculados son la Corriente 5 y los moles de alimantación fresca son la Corriente 1.

$$\frac{\text{Moles recirculados}}{\text{Moles de alimentación fresca}} = \frac{900.6509 \text{ mol}}{100 \text{ mol}} = 9.007$$

$$Conversión en un paso = \frac{Reactivo \ consumido}{Reactivo \ suministrado} \ x \ 100 \% = \frac{95 \ mol}{995.9009 \ mol} \ x \ 100 \% = 9.5391 \%$$