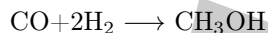


**Problema 16.** Se produce metanol haciendo reaccionar monóxido de carbono e hidrógeno:



La corriente de alimentación fresca que contiene CO y H<sub>2</sub> se une a la corriente de recirculación y la corriente combinada se alimenta a un reactor. El flujo de salida del reactor es 350 mol/min y contiene 10.6 % de H<sub>2</sub>, 64.0 % de CO y 25.4 % de CH<sub>3</sub>OH (en masa). Esta corriente entra a un condensador donde casi todo el metanol se condensa. El metanol líquido condensado se retira como producto. La corriente de gas que sale del condensador contiene CO, H<sub>2</sub> y 0.40 % (mol) de vapor de CH<sub>3</sub>OH sin condensar, se recircula y combina con la alimentación fresca.

- Hacer el diagrama de flujo del proceso.
- Hacer el análisis de grados de libertad, ¿Qué concluyes?
- Calcula:
  - El flujo molar de CO y H<sub>2</sub> en la alimentación fresca.
  - El flujo molar de metanol líquido producido.
  - La conversión en un paso y la conversión total de CO.
- Presenta todos los flujos másicos en una tabla.
- Tras varios meses de operación, el flujo de metanol líquido comienza a disminuir. Presente tres posibles explicaciones para este hecho e indique cómo podría comprobar su validez.

Las unidades de flujo molar que vamos a usar en el diagrama de flujo son mol/min. Sabemos que cualquier cantidad de una mezcla tendrá la misma composición másica y molar, además que en 100 g del flujo de salida del reactor hay 10.6 g de H<sub>2</sub>, 64 g de CO y 25.4 g de CH<sub>3</sub>OH. Conociendo que C = 12 g/mol, H = 1 g/mol y O = 16 g/mol se tiene que la masa molecular del H<sub>2</sub>, CO y CH<sub>3</sub>OH es [1(2)] g/mol = 2 g/mol, [12+16] = 28 g/mol y [12+1(3)+16+1] g/mol = 32 g/mol, respectivamente:

$$10.6 \text{ g de H}_2 \left| \frac{1 \text{ mol de H}_2}{2 \text{ g de H}_2} \right| = 5.3 \text{ mol de H}_2$$

$$64 \text{ g de CO} \left| \frac{1 \text{ mol de CO}}{28 \text{ g de CO}} \right| = 2.2857 \text{ mol de CO}$$

$$25.4 \text{ g de CH}_3\text{OH} \left| \frac{1 \text{ mol de CH}_3\text{OH}}{32 \text{ g de CH}_3\text{OH}} \right| = 0.7938 \text{ mol de CH}_3\text{OH}$$

Por lo que en 100 g de la mezcla hay (5.3+2.2857+0.7938) mol = 8.3795 mol de mezcla:

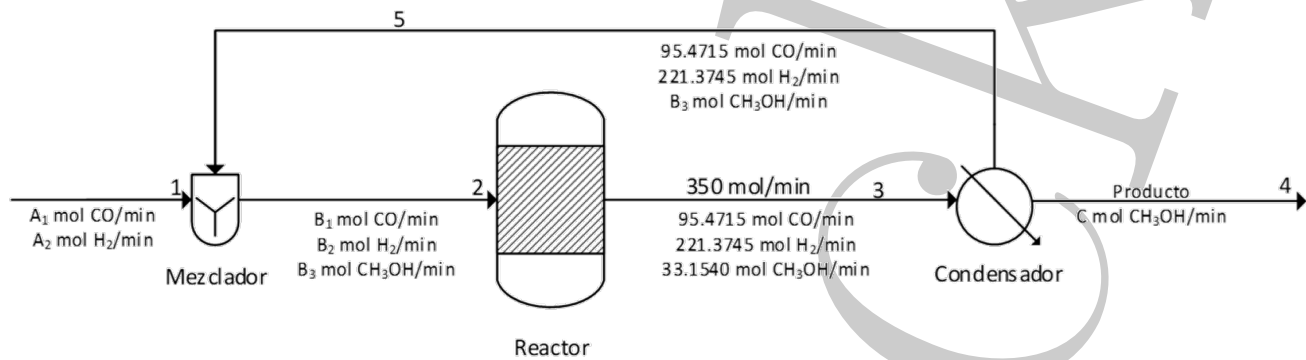
$$y_{\text{H}_2} = \frac{\text{Moles de H}_2}{\text{Moles totales}} = \frac{5.3 \text{ mol}}{8.3795 \text{ mol}} = 0.6325$$

$$y_{\text{CO}} = \frac{\text{Moles de CO}}{\text{Moles totales}} = \frac{2.2857 \text{ mol}}{8.3795 \text{ mol}} = 0.2728$$

$$y_{\text{CH}_3\text{OH}} = \frac{\text{Moles de CH}_3\text{OH}}{\text{Moles totales}} = \frac{0.7938 \text{ g}}{8.3795 \text{ mol}} = 0.0947$$

Entonces, en esta corriente hay (350 mol/min)(0.6325 mol H<sub>2</sub>/mol)=221.3745 mol H<sub>2</sub>/min, (350 mol/min)(0.2728 mol CO/mol)=95.4715 mol CO/min y (350 mol/min)(0.0947 mol CH<sub>3</sub>OH/mol)=33.1540 mol CH<sub>3</sub>OH/min.

a)



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

○ Sistema general y Reactor:

● Reactivos:

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

● Productos:

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

○ Condensador y Mezclador:

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

b) Sea  $\xi$  el grado de avance de la reacción.

○ Sistema general:

Ecuaciones independientes (3):

● Balance de  $\text{H}_2$ :

$$\begin{aligned} \text{Corriente 1} &= \text{Consumo} \\ A_2 \text{ mol H}_2/\text{min} &= 2\xi \text{ mol H}_2/\text{min} \end{aligned}$$

● Balance de CO:

$$\begin{aligned} \text{Corriente 1} &= \text{Consumo} \\ A_1 \text{ mol CO/min} &= \xi \text{ mol CO/min} \end{aligned}$$

● Balance de  $\text{CH}_3\text{OH}$ :

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Corriente 4} - \text{Generación} \\ 0 \text{ mol CH}_3\text{OH/min} &= C \text{ mol CH}_3\text{OH/min} - \xi \text{ mol CH}_3\text{OH/min} \end{aligned}$$

En donde hay 4 incógnitas =  $\{A_1, A_2, C, \xi\}$ . Entonces, el *grado de libertad* es:

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

◦ Reactor:

Ecuaciones independientes (3):

- Balance de  $H_2$ :

$$\begin{aligned}\text{Corriente 2} &= \text{Corriente 3} + \text{Consumo} \\ B_2 \text{ mol } H_2/\text{min} &= 221.3745 \text{ mol } H_2/\text{min} + 2\xi \text{ mol } H_2/\text{min}\end{aligned}$$

- Balance de CO:

$$\begin{aligned}\text{Corriente 2} &= \text{Corriente 3} + \text{Consumo} \\ B_1 \text{ mol CO}/\text{min} &= 95.4715 \text{ mol CO}/\text{min} + \xi \text{ mol CO}/\text{min}\end{aligned}$$

- Balance de  $CH_3OH$ :

$$\begin{aligned}\text{Corriente 2} &= \text{Corriente 3} - \text{Generación} \\ B_3 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} &= 33.1540 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} - \xi \text{ mol } CH_3OH/\text{min}\end{aligned}$$

En donde hay 4 incógnitas =  $\{B_1, B_2, B_3, \xi\}$ . Entonces, el *grado de libertad* es:

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

◦ Condensador:

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

Ecuaciones independientes (2):

- Balance de  $CH_3OH$ :  $33.1540 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} = C \text{ mol } CH_3OH/\text{min} + B_3 \text{ mol } CH_3OH/\text{min}$
- Relación de  $CH_3OH$ :  $[0.004 \text{ mol } CH_3OH/\text{mol}][(95.4715 + 221.3745 + B_3) \text{ mol}/\text{min}] = B_3 \text{ mol } CH_3OH/\text{min}$

En donde hay 2 incógnitas =  $\{B_3, C\}$ . Entonces, el *grado de libertad* es:

$$GL = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 2 - 2 = 0$$

◦ Mezclador:

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

Ecuaciones independientes (2):

- Balance de  $H_2$ :  $A_2 \text{ mol } H_2/\text{min} + 221.3745 \text{ mol } H_2/\text{min} = B_2 \text{ mol } H_2/\text{min}$
- Balance de CO:  $A_1 \text{ mol CO}/\text{min} + 95.4715 \text{ mol CO}/\text{min} = B_1 \text{ mol CO}/\text{min}$

En donde hay 4 incógnitas =  $\{A_1, A_2, B_1, B_2\}$ . Entonces, el *grado de libertad* es:

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

Con los cálculos de grados de libertad anteriores podemos ver que primero se tiene que resolver el Condensador y obtener  $B_3, C$ . Así el Reactor tiene  $GL = 0$  y se halla  $B_1, B_2, \xi$ . Finalmente el Mezclador tiene  $GL = 0$  y se calcula  $A_1, A_2$ .

c)

◦ Condensador:

Con la relación de  $CH_3OH$ :

$$\begin{aligned}[0.004 \text{ mol } CH_3OH/\text{mol}][(95.4715 + 221.3745 + B_3) \text{ mol}/\text{min}] &= B_3 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} \\ B_3 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} &= \frac{[0.004 \text{ mol } CH_3OH/\text{mol}][(95.4715 + 221.3745) \text{ mol}/\text{min}]}{1 - 0.004} = 1.2725 \text{ mol } CH_3OH/\text{min}\end{aligned}$$

En el balance de  $CH_3OH$ :

$$\begin{aligned}33.1540 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} &= C \text{ mol } CH_3OH/\text{min} + 1.2725 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} \\ C \text{ mol } CH_3OH/\text{min} &= 33.1540 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} - 1.2725 \text{ mol } CH_3OH/\text{min} = 31.8815 \text{ mol } CH_3OH/\text{min}\end{aligned}$$

o Reactor:

En el balance de CH<sub>3</sub>OH:

$$1.2725 \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min} = 33.1540 \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min} - \xi \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min}$$

$$\xi \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min} = 33.1540 \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min} - 1.2725 \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min} = 31.8815 \text{ mol CH}_3\text{OH}/\text{min}$$

En el balance de H<sub>2</sub>:

$$B_2 \text{ mol H}_2/\text{min} = 221.3745 \text{ mol H}_2/\text{min} + 2(31.8815) \text{ mol H}_2/\text{min} = 285.1375 \text{ mol H}_2/\text{min}$$

En el balance de CO:

$$B_1 \text{ mol CO}/\text{min} = 95.4715 \text{ mol CO}/\text{min} + 31.8815 \text{ mol CO}/\text{min} = 127.3530 \text{ mol CO}/\text{min}$$

o Mezclador:

En el balance de H<sub>2</sub>:

$$A_2 \text{ mol H}_2/\text{min} + 221.3745 \text{ mol H}_2/\text{min} = 285.1375 \text{ mol H}_2/\text{min}$$

$$A_2 \text{ mol H}_2/\text{min} = 285.1375 \text{ mol H}_2/\text{min} - 221.3745 \text{ mol H}_2/\text{min} = 63.7630 \text{ mol H}_2/\text{min}$$

En el balance de CO:

$$A_1 \text{ mol CO}/\text{min} + 95.4715 \text{ mol CO}/\text{min} = 127.353 \text{ mol CO}/\text{min}$$

$$A_1 \text{ mol CO}/\text{min} = 127.353 \text{ mol CO}/\text{min} - 95.4715 \text{ mol CO}/\text{min} = 31.8815 \text{ mol CO}/\text{min}$$

Flujo molar (mol/min)						Fracción molar					
	1	2	3	4	5		1	2	3	4	5
CO	31.8815	127.3530	95.4715	0	95.4715	CO	0.3333	0.3078	0.2728	0	0.3001
H <sub>2</sub>	63.7630	285.1375	221.3745	0	221.3745	H <sub>2</sub>	0.6667	0.6891	0.6325	0	0.6959
CH <sub>3</sub> OH	0	1.2725	33.1540	31.8815	1.2725	CH <sub>3</sub> OH	0	0.0031	0.0947	1	0.004
Total	95.6445	413.7630	350	31.8815	318.1185						

i) En la alimentación fresca hay 31.8815 mol CO/min y 63.763 mol H<sub>2</sub>/min.

ii) Se produce 31.8815 mol CH<sub>3</sub>OH/min líquido.

iii)

$$\text{Conversión del reactor} = \frac{\text{Reactivo consumido}}{\text{Reactivo suministrado}} \times 100\% = \frac{31.8815 \text{ mol/min}}{127.353 \text{ mol/min}} \times 100\% = 25.03396\%$$

$$\text{Conversión del proceso} = \frac{\text{Reactivo consumido}}{\text{Reactivo suministrado}} \times 100\% = \frac{31.8815 \text{ mol/min}}{31.8815 \text{ mol/min}} \times 100\% = 100\%$$

d)

Flujo másico (g/min)					
	1	2	3	4	5
CO	892.6819	3565.8838	2673.2019	0	2673.2019
H <sub>2</sub>	127.526	570.275	442.7491	0	442.7491
CH <sub>3</sub> OH	0	40.7192	1060.927	1020.2078	40.7192
Total	1020.2078	4176.878	4176.878	1020.2078	3156.6702

e)

- La conversión de CO disminuyó: Calcular cuántos mol/min entran, se consumen y salen de CO en el reactor.
- En el condensador sale más CH<sub>3</sub>OH a la recirculación que al producto, es decir, disminuye su rendimiento de condensación: Obtener el flujo y composición molar en la recirculación y el producto de CH<sub>3</sub>OH.
- Entra menos CO al proceso: Ver cuántos mol/min de CO hay en la alimentación fresca.