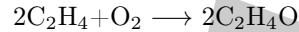
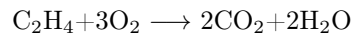


Problema 13. El óxido de etileno se produce por oxidación catalítica del etileno:



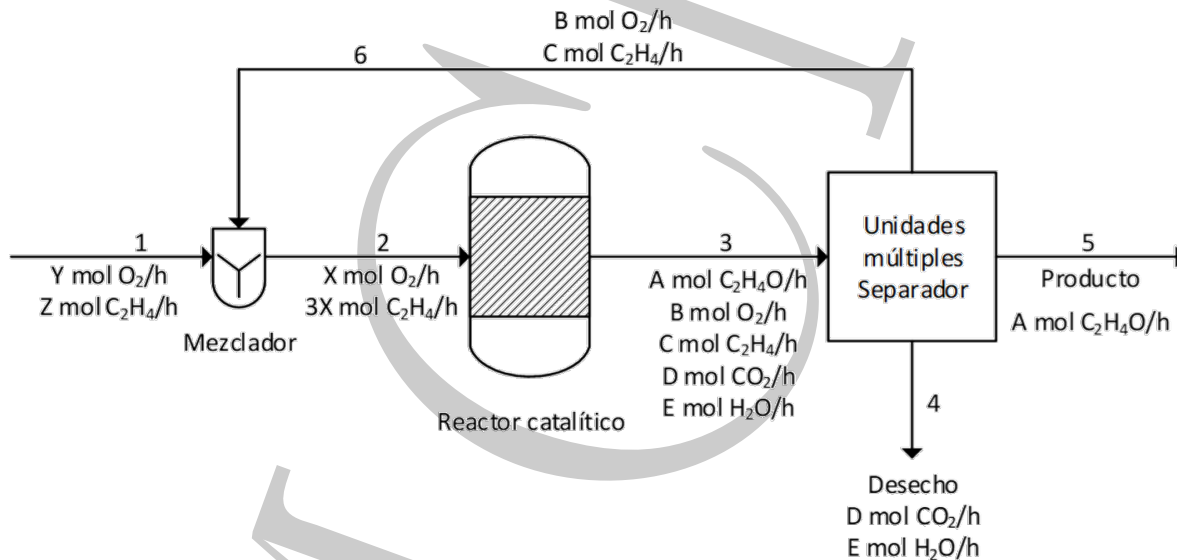
Hay una reacción indeseable que compite con ella:



La alimentación al reactor contiene 3 moles de etileno por mol de oxígeno. La conversión del etileno en un paso es de 20% y por cada 100 moles de etileno consumidos en el reactor, salen de este 90 moles de óxido de etileno como producto. Un proceso de unidades múltiples se usa para separar los productos: el etileno y el oxígeno se recirculan al reactor, el óxido de etileno se vende como producto, y el dióxido de carbono y el agua se desechan.

- Hacer el diagrama de flujo del proceso.
- Hacer análisis de grados de libertad, ¿Qué concluyes?
- Calcular el flujo molar de etileno y oxígeno en la alimentación fresca que se requieren para producir 1 tonelada por hora de óxido de etileno.
- Presentar todos los flujos másicos en una tabla.

a)



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

○ Sistema general y Reactor catalítico:

● Reactivos:

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

● Productos:

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

○ Separador y Mezclador:

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

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

○ Sistema general:

Ecuaciones independientes (6):

● Balance de O_2 :

Corriente 1 = Consumo

$$Y \text{ mol } O_2/h = \xi_1 \text{ mol } O_2/h + 3\xi_2 \text{ mol } O_2/h$$

● Balance de C_2H_4 :

Corriente 1 = Consumo

$$Z \text{ mol } C_2H_4/h = 2\xi_1 \text{ mol } C_2H_4/h + \xi_2 \text{ mol } C_2H_4/h$$

● Balance de C_2H_4O :

0 = Corriente 5 - Generación

$$0 \text{ mol } C_2H_4O/h = A \text{ mol } C_2H_4O/h - 2\xi_1 \text{ mol } C_2H_4O/h$$

● Balance de CO_2 :

0 = Corriente 4 - Generación

$$0 \text{ mol } CO_2/h = D \text{ mol } CO_2/h - 2\xi_2 \text{ mol } CO_2/h$$

● Balance de H_2O :

0 = Corriente 4 - Generación

$$0 \text{ mol } H_2O/h = E \text{ mol } H_2O/h - 2\xi_2 \text{ mol } H_2O/h$$

● Relación molar del óxido de etileno:

Sabiendo que C = 12 g/mol, H = 1 g/mol y O = 16 g/mol se tiene que $C_2H_4O = [12(2)+1(4)+16] \text{ g/mol} = 44 \text{ g/mol} = 0.044 \text{ kg/mol} = 0.000044 \text{ ton/mol}$

$$A \text{ mol } C_2H_4O/h = \frac{1 \text{ ton } C_2H_4O/h}{0.000044 \text{ ton } C_2H_4O/mol}$$

En donde hay 7 incógnitas = $\{Y, Z, A, D, E, \xi_1, \xi_2\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

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

○ Reactor catalítico:

Ecuaciones independientes (8):

● Balance de O_2 :

Corriente 2 = Corriente 3 + Consumo

$$X \text{ mol } O_2/h = B \text{ mol } O_2/h + \xi_1 \text{ mol } O_2/h + 3\xi_2 \text{ mol } O_2/h$$

● Balance de C_2H_4 :

Corriente 2 = Corriente 3 + Consumo

$$3X \text{ mol } C_2H_4/h = C \text{ mol } C_2H_4/h + 2\xi_1 \text{ mol } C_2H_4/h + \xi_2 \text{ mol } C_2H_4/h$$

● Balance de C_2H_4O :

0 = Corriente 3 - Generación

$$0 \text{ mol } C_2H_4O/h = A \text{ mol } C_2H_4O/h - 2\xi_1 \text{ mol } C_2H_4O/h$$

- Balance de CO_2 :

$$0 = \text{Corriente 3 - Generación}$$

$$0 \text{ mol CO}_2/\text{h} = D \text{ mol CO}_2/\text{h} - 2\xi_2 \text{ mol CO}_2/\text{h}$$

- Balance de H_2O :

$$0 = \text{Corriente 3 - Generación}$$

$$0 \text{ mol H}_2\text{O}/\text{h} = E \text{ mol H}_2\text{O}/\text{h} - 2\xi_2 \text{ mol H}_2\text{O}/\text{h}$$

- Relación molar del óxido de etileno:

$$A \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} = 1 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} \left| \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}}{0.000044 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}} \right|$$

- Conversión del etileno:

$$0.20 = \frac{\text{Consumido}}{\text{Suministrado}} = \frac{3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}{3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}$$

- Relación del etileno y óxido de etileno:

$$\frac{100 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h consumido}}{90 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h producido}} = \frac{3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}{A \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h}}$$

En donde hay 8 incógnitas = $\{X, A, B, C, D, E, \xi_1, \xi_2\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 8 - 8 = 0$$

- Separador:

$$\text{Corriente 3} = \text{Corriente 4} + \text{Corriente 5} + \text{Corriente 6}$$

Ecuaciones independientes (1):

- Relación molar del óxido de etileno:

$$A \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} = 1 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} \left| \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}}{0.000044 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}} \right|$$

En donde hay 5 incógnitas = $\{A, B, C, D, E\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

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

- Mezclador:

$$\text{Corriente 1} + \text{Corriente 6} = \text{Corriente 2}$$

Ecuaciones independientes (2):

- Balance de O_2 : $Y \text{ mol O}_2/\text{h} + B \text{ mol O}_2/\text{h} = X \text{ mol O}_2/\text{h}$

- Balance de C_2H_4 : $Z \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} + C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$

En donde hay 5 incógnitas = $\{Y, Z, B, C, X\}$. Entonces, el *grado de libertad* es:

$$\text{GL} = \# \text{ Incógnitas} - \# \text{ Ecuaciones independientes} = 5 - 2 = 3$$

Con los cálculos de grados de libertad anteriores podemos ver que primero se tiene que resolver el Reactor catalítico y obtener $X, A, B, C, D, E, \xi_1, \xi_2$. Así el Mezclador tiene $\text{GL} = 0$ y se halla Y, Z .

c)

- Reactor catalítico:

Con la relación molar del óxido de etileno:

$$A \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} = 1 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h} \left| \frac{1 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}}{0.000044 \text{ ton C}_2\text{H}_4\text{O}} \right| = 22727.2727 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O}/\text{h}$$

En el balance de $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$:

$$0 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h} = 22727.2727 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h} - 2\xi_1 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h}$$

$$\xi_1 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h} = \frac{22727.2727 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h}}{2} = 11363.6364 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h}$$

Con la relación del etileno y óxido de etileno:

$$\frac{100 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h consumido}}{90 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h producido}} = \frac{3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}{22727.2727 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h}}$$

$$3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = \frac{(100 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h})(22727.2727 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h})}{90 \text{ mol C}_2\text{H}_4\text{O/h}} = 25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

Con la conversión del etileno:

$$0.20 = \frac{25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}{3X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}$$

$$X \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = \frac{25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}}{3(0.20) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}} = 42087.5421 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

$$3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

$$C \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - 25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 101010.1010 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

En el balance de C₂H₄:

$$3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 101010.1010 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} + 2(11363.6364) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} + \xi_2 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

$$\xi_2 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - 101010.1010 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - 2(11363.6364) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

$$\xi_2 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 2525.2525 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

En el balance de O₂:

$$42087.5421 \text{ mol O}_2/\text{h} = B \text{ mol O}_2/\text{h} + 11363.6364 \text{ mol O}_2/\text{h} + 3(2525.2525) \text{ mol O}_2/\text{h}$$

$$B \text{ mol O}_2/\text{h} = 42087.5421 \text{ mol O}_2/\text{h} - 11363.6364 \text{ mol O}_2/\text{h} - 3(2525.2525) \text{ mol O}_2/\text{h} = 23148.1481 \text{ mol O}_2/\text{h}$$

En el balance de CO₂:

$$0 \text{ mol CO}_2/\text{h} = D \text{ mol CO}_2/\text{h} - 2(2525.2525) \text{ mol CO}_2/\text{h}$$

$$D \text{ mol CO}_2/\text{h} = 2(2525.2525) \text{ mol CO}_2/\text{h} = 5050.5051 \text{ mol CO}_2/\text{h}$$

En el balance de H₂O:

$$0 \text{ mol H}_2\text{O/h} = E \text{ mol H}_2\text{O/h} - 2(2525.2525) \text{ mol H}_2\text{O/h}$$

$$E \text{ mol H}_2\text{O/h} = 2(2525.2525) \text{ mol H}_2\text{O/h} = 5050.5051 \text{ mol H}_2\text{O/h}$$

o Mezclador:

En el balance de O₂:

$$Y \text{ mol O}_2/\text{h} + 23148.1481 \text{ mol O}_2/\text{h} = 42087.5421 \text{ mol O}_2/\text{h}$$

$$Y \text{ mol O}_2/\text{h} = 42087.5421 \text{ mol O}_2/\text{h} - 23148.1481 \text{ mol O}_2/\text{h} = 18939.3939 \text{ mol O}_2/\text{h}$$

En el balance de C₂H₄:

$$Z \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} + 101010.1010 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

$$Z \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 3(42087.5421) \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} - 101010.1010 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h} = 25252.5253 \text{ mol C}_2\text{H}_4/\text{h}$$

En la alimentación se requieren 25252.5253 mol C_2H_4 /h y 18939.3939 mol O_2 /h para producir 1 ton C_2H_4 /h.

Flujo molar (mol/h)						
	1	2	3	4	5	6
O_2	18939.3939	42087.5421	23148.1481	0	0	23148.1481
C_2H_4	25252.5253	126262.6263	101010.1010	0	0	101010.1010
C_2H_4O	0	0	22727.2727	0	22727.2727	0
CO_2	0	0	5050.5051	5050.5051	0	0
H_2O	0	0	5050.5051	5050.5051	0	0
Total	44191.9192	168350.1684	156986.5320	10101.0101	22727.2727	124158.2492

d)

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

- $O_2 = [16(2)]$ g/mol = 32 g/mol = 0.000032 ton/mol
- $C_2H_4 = [12(2)+1(4)]$ = 28 g/mol = 0.000028 ton/mol
- $C_2H_4O = [12(2)+1(4)+16]$ g/mol = 44 g/mol = 0.000044 ton/mol
- $CO_2 = [12+16(2)]$ g/mol = 44 g/mol = 0.000044 ton/mol
- $H_2O = [1(2)+16]$ g/mol = 18 g/mol = 0.000018 ton/mol

Flujo másico (ton/h)						
	1	2	3	4	5	6
O_2	0.6061	1.3468	0.7407	0	0	0.7407
C_2H_4	0.7071	3.5354	2.8283	0	0	2.8283
C_2H_4O	0	0	1	0	1	0
CO_2	0	0	0.2222	0.2222	0	0
H_2O	0	0	0.0909	0.0909	0	0
Total	1.3131	4.8822	4.8822	0.3131	1	3.5690