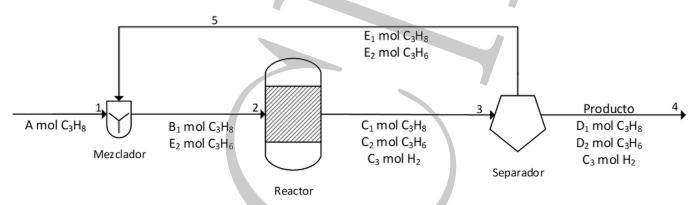
## Problema 18. En un reactor se deshidrogena propano para dar propileno:

$$C_3H_8 \longrightarrow C_3H_6 + H_2$$

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.

a)



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

- o Sistema general y Reactor:
- Reactivos:

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

• Productos:

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

o Separador y Mezclador:

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

- b) Sea  $\xi$  el grado de avance de la reacción.
- o Sistema general:

Ecuaciones independientes (4):

• Balance de  $C_3H_8$ :

Corriente 1 = Corriente 4 + Consumo  
A mol 
$$C_3H_8$$
 =  $D_1$  mol  $C_3H_8$  +  $\xi$  mol  $C_3H_8$ 

• Balance de H<sub>2</sub>:

$$0=$$
 Corriente  $4$  - Generación 
$$0 \text{ mol } H_2=C_3 \text{ mol } H_2$$
 -  $\xi \text{ mol } H_2$ 

• Balance de  $C_3H_6$ :

$$0 = \text{Corriente 4 - Generación}$$
 
$$0 \text{ mol } C_3H_6 = D_2 \text{ mol } C_3H_6 - \xi \text{ mol } C_3H_6$$

• 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:

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

• Reactor:

Ecuaciones independientes (3):

• Balance de  $C_3H_8$ :

$$\begin{aligned} & \text{Corriente 2} = \text{Corriente 3} + \text{Consumo} \\ & \text{B}_3 \text{ mol } \text{C}_3\text{H}_8 = \text{C}_1 \text{ mol } \text{C}_3\text{H}_8 + \xi \text{ mol } \text{C}_3\text{H}_8 \end{aligned}$$

• Balance de H<sub>2</sub>:

$$0 = \mbox{Corriente 3 - Generación}$$
 
$$0 \mbox{ mol $H_2$} = \mbox{C}_3 \mbox{ mol $H_2$} - \xi \mbox{ mol $H_2$}$$

• Balance de C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>:

$$\label{eq:corriente} \begin{array}{l} {\rm Corriente}~2 = {\rm Corriente}~3 \mbox{ - Generación} \\ {\rm E}_2~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_6 = {\rm C}_2~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_6 \mbox{ - }\xi~{\rm mol}~{\rm C}_3{\rm H}_6 \end{array}$$

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):

- $\bullet$  Balance de  $C_3H_8$ :  $C_1$  mol  $C_3H_8=D_1$  mol  $C_3H_8+E_1$  mol  $C_3H_8$
- 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:

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

• Mezclador:

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

Ecuaciones independientes (1):

• 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  $D_1, D_2, C_3, \xi$ , 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  $B_1$ .

c) y d)

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 
$$\mathrm{H}_2=\mathrm{C}_3$$
 mol  $\mathrm{H}_2$  - 95 mol  $\mathrm{H}_2$  
$$\mathrm{C}_3 \text{ mol } \mathrm{H}_2=95 \text{ mol } \mathrm{H}_2$$

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<sub>3</sub>H<sub>6</sub>:

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

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  $C_3H_8$ :

$$(0.00555)(C_1 \text{ mol } C_3H_8) = 5 \text{ mol } C_3H_8$$
  $C_1 \text{ mol } C_3H_8 = rac{5 \text{ mol } C_3H_8}{0.00555} = 900.9009 \text{ mol } C_3H_8$ 

En el balance de  $C_3H_8$ :

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

o 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.

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

iii)

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