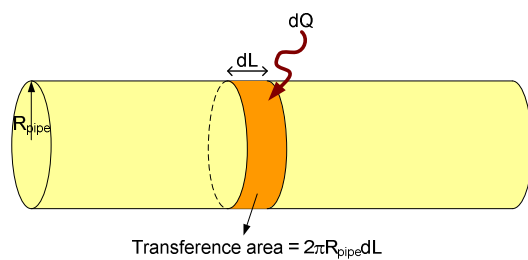


Problem 3: Thermal cracking of ethane

The thermal cracking of ethane is carried out in long pipes that are horizontally placed inside a gas-fired furnace. Each pipe length is 100 m, its internal diameter is 0.108 m and it is fed with 0.020919 kmol/s of a gas mixture with the following composition (in molar basis): 98.2% ethane, 1% C₂H₄ 0.8% C₃H₆. The last two are impurities. The inlet pressure is 3.0 bar and the inlet temperature is 680°C. The heat flux supplied to the reactor in a dL through the wall of the pipe (heat rate per unit area) is equal to $dQ / (2\pi R_{\text{pipe}} dL) = 80$ kJ/(m²·s).



Taking into account the effect of the pressure drop, study the evolution of the temperature, pressure, molar flow rate of each component and concentration of each component along the length of the reactor (4 charts in total).

Assume that the viscosity of the gas mixture is equal to a 10^{-5} Pa·s, $\alpha = 0.96$ and that the friction factor can be calculated as: $f = 0.046 Re^{-0.2}$, where Re is the Reynolds number.

Other data

Reaction	Total reaction order	k_0 (s ⁻¹ or m ³ /(kmol·s))	E (kJ/kmol)	$\Delta H_{298\text{ K}}$ (kJ/kmol)
1. C ₂ H ₆ → C ₂ H ₄ + H ₂	1	$4.65 \cdot 10^{13}$	273020	136300
2. C ₂ H ₄ + H ₂ → C ₂ H ₆	2	$8.75 \cdot 10^8$	136870	-136300
3. 2C ₂ H ₆ → C ₃ H ₈ + CH ₄	1	$3.85 \cdot 10^{11}$	273190	-11400
4. C ₃ H ₆ → C ₂ H ₂ + CH ₄	1	$9.81 \cdot 10^8$	154580	133900
5. C ₂ H ₂ + CH ₄ → C ₃ H ₆	2	$5.87 \cdot 10^4$	29480	-133900
6. C ₂ H ₂ + C ₂ H ₄ → C ₄ H ₆	2	$1.03 \cdot 10^{12}$	172750	-170800
7. C ₂ H ₄ + C ₂ H ₆ → C ₃ H ₆ + CH ₄	2	$7.08 \cdot 10^{13}$	253010	-23100

Assume that the specific heat capacity of each component is constant in the T range used.

	CH ₄	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₆	H ₂
C _{pi} (kJ/(kmol·K))	34.3	42.4	40.8	49.4	59.6	68.0	73.5	28.8

Suggestions:

a.- Decide on the order of the species (j) and the reactions (i) to build the stoichiometric coefficient matrix α_{ij} . Make sure that you keep that order all over the exercise.

b.- The following set of equations are the differential equations necessary to solve the problem. If you choose the dependent variables as n_j , T and P then the set of differential equations is:

- 8 mole balances:

$$\frac{dn_j}{dL} = Ar_j = A \sum_{i=1}^R (r_i \alpha_{ij}) = f_j^{Mol.B.}(n_j, T, P) \quad \forall j$$

where L is the length and A is the cross-sectional area of the reactor

- 1 energy balance:

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{dQ}{dL} - A \sum_{i=1}^R (r_i \Delta H_i(T))}{\sum_{j=1}^S (n_j C_{pj})} = f^{En.B.}(n_j, T, P)$$

- 1 momentum balance:

$$\frac{dP}{dL} = \frac{\frac{2fQ_v}{D} + \frac{R_g}{\alpha P} \left[\frac{dT}{dL} \sum_{j=1}^S n_j + T \sum_{j=1}^S \frac{dn_j}{dL} \right]}{\frac{R_g T}{\alpha P^2} \sum_{j=1}^S n_j - \frac{A^2}{\sum_{j=1}^S (n_j MW_j)}} = f^{Mom.B.}(n_j, T, P)$$

where R_g is the ideal gas constant, and MW_j is the molecular weight of each species j

If you choose the dependent variables as ξ_i , T and P , then the set of differential equations is:

- 7 mole balances:

$$\frac{d\xi_i}{dL} = Ar_i = f_i^{Mol.B.}(\xi_i, T, P) \quad \forall i$$

- 1 energy balance:

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{dQ}{dL} - \sum_{i=1}^R \left(\frac{d\xi_i}{dL} \Delta H_i(T) \right)}{\sum_{j=1}^S (n_j C_{pj})} = f^{E.B.}(\xi_i, T, P)$$

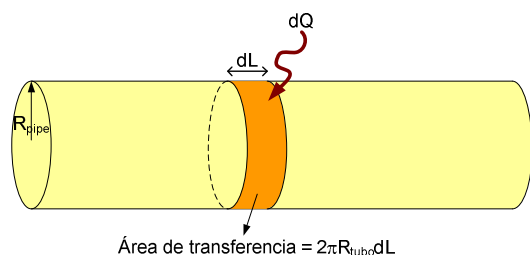
- 1 momentum balance:

$$\frac{dP}{dL} = \frac{\frac{2fQ_v}{D} + \frac{R_g}{\alpha P} \left(\frac{dT}{dL} \sum_{j=1}^S n_j + T \sum_{j=1}^S \sum_{i=1}^R \left(\frac{d\xi_i}{dL} \alpha_{ij} \right) \right)}{\frac{R_g T}{\alpha P^2} \sum_{j=1}^S n_j - \frac{A^2}{\sum_{j=1}^S (n_j MW_j)}} = f^{M.B.}(\xi_i, T, P)$$

where $n_j = n_{j,in} + \sum_{i=1}^R (\xi_i \alpha_{ij})$

Problema 3: Craqueo térmico de etano

El craqueo térmico del etano se realiza en tubos de gran longitud dispuestos horizontalmente en el interior de un horno de llama. La longitud de cada tubo es de 100 m, su diámetro interno de 0.108 m y se alimenta cada uno con 0.020919 kmol/s de una mezcla gaseosa con la siguiente composición (en base molar): 98.2% de etano, 1% de C_2H_4 y 0.8% de C_3H_6 . Los dos últimos son impurezas. La presión de entrada es de 3.0 bar y la temperatura de entrada de 680°C. La densidad de flujo de calor aportado al reactor en un dL por las paredes del tubo (flujo de calor por unidad de área) es igual a $dQ / (2\pi R_{tubo} dL) = 80 \text{ kJ}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$.



Teniendo en cuenta el efecto de la caída de presión, estudiar la evolución de la temperatura, presión, flujos molares de cada componente y concentración de cada componente a lo largo de la longitud del reactor (4 figuras en total).

Suponer que la viscosidad del gas es constante e igual a $10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\alpha = 0.96$ y que el factor de fricción se puede calcular como: $f = 0.046 \text{ Re}^{-0.2}$, donde Re es el nº de Reynolds.

Otros datos:

Reacción	Orden global de reacción	$k_0 \text{ (s}^{-1} \text{ o m}^3/(\text{kmol}\cdot\text{s}))$	E (kJ/kmol)	$\Delta H_{298 \text{ K}}^\circ$ (kJ/kmol)
1. $C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$	1	$4.65 \cdot 10^{13}$	273020	136300
2. $C_2H_4 + H_2 \rightarrow C_2H_6$	2	$8.75 \cdot 10^8$	136870	-136300
3. $2C_2H_6 \rightarrow C_3H_8 + CH_4$	1	$3.85 \cdot 10^{11}$	273190	-11400
4. $C_3H_6 \rightarrow C_2H_2 + CH_4$	1	$9.81 \cdot 10^8$	154580	133900
5. $C_2H_2 + CH_4 \rightarrow C_3H_6$	2	$5.87 \cdot 10^4$	29480	-133900
6. $C_2H_2 + C_2H_4 \rightarrow C_4H_6$	2	$1.03 \cdot 10^{12}$	172750	-170800
7. $C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow C_3H_6 + CH_4$	2	$7.08 \cdot 10^{13}$	253010	-23100

Supón que las capacidades caloríficas de los compuestos son constantes en el rango de T utilizado:

	CH_4	C_2H_2	C_2H_4	C_2H_6	C_3H_6	C_3H_8	C_4H_6	H_2
$C_{pj} \text{ (kJ}/(\text{kmol}\cdot\text{K}))$	34.3	42.4	40.8	49.4	59.6	68.0	73.5	28.8

Sugerencias:

a.- Decide el orden de los componentes (j) y de las reacciones (i) para construir la matriz de coeficientes estequiométricos α_{ij} . Asegúrate de que mantienes este orden en todo el ejercicio.

b.- A continuación se listan las ecuaciones diferenciales necesarias para resolver el problema. Si eliges como variables dependientes: n_j , T y P, el conjunto de ecuaciones diferenciales a usar es:

- 8 balances molares:

$$\frac{dn_j}{dL} = Ar_j = A \sum_{i=1}^R (r_i \alpha_{ij}) = f_j^{Mol.B.}(n_j, T, P) \quad \forall j$$

donde L es la longitud y A es la sección transversal del reactor

- 1 balance de energía:

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{dQ}{dL} - A \sum_{i=1}^R (r_i \Delta H_i(T))}{\sum_{j=1}^S (n_j C_{pj})} = f^{En.B.}(n_j, T, P)$$

- 1 balance de cantidad de movimiento:

$$\frac{dP}{dL} = \frac{\frac{2fQ_v}{D} + \frac{R_g}{\alpha P} \left[\frac{dT}{dL} \sum_{j=1}^S n_j + T \sum_{j=1}^S \frac{dn_j}{dL} \right]}{\frac{R_g T}{\alpha P^2} \sum_{j=1}^S n_j - \frac{A^2}{\sum_{j=1}^S (n_j MW_j)}} = f^{Mom.B.}(n_j, T, P)$$

donde R_g es la constante de los gases ideales, y MW_j es el peso molecular de cada especie j

Si eliges como variables dependientes ξ_i , T y P, entonces el conjunto de ecuaciones diferenciales es:

- 7 balances molares:

$$\frac{d\xi_i}{dL} = Ar_i = f_i^{Mol.B.}(\xi_i, T, P) \quad \forall i$$

- 1 balance de energía:

$$\frac{dT}{dL} = \frac{\frac{dQ}{dL} - \sum_{i=1}^R \left(\frac{d\xi_i}{dL} \Delta H_i(T) \right)}{\sum_{j=1}^S (n_j C_{pj})} = f^{E.B.}(\xi_i, T, P)$$

- 1 balance de cantidad de movimiento:

$$\frac{dP}{dL} = \frac{\frac{2fQ_v}{D} + \frac{R_g}{\alpha P} \left(\frac{dT}{dL} \sum_{j=1}^S n_j + T \sum_{j=1}^S \sum_{i=1}^R \left(\frac{d\xi_i}{dL} \alpha_{ij} \right) \right)}{\frac{R_g T}{\alpha P^2} \sum_{j=1}^S n_j - \frac{A^2}{\sum_{j=1}^S (n_j MW_j)}} = f^{M.B.}(\xi_i, T, P)$$

donde $n_j = n_{j,in} + \sum_{i=1}^R (\xi_i \alpha_{ij})$