

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1997/98

April 1997

EKC 450 - Simulasi dan Pengoptimuman Proses

Masa: [3 jam]

ARAHAN KEPADA CALON

Sila pastikan kertas peperiksaan ini mengandungi **TUJUH (7)** muka surat dan **TIGA (3)** lampiran bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan.

Kertas peperiksaan ini mengandungi **LIMA (5)** soalan.

Jawab **EMPAT (4)** soalan. Jawab soalan **No. 1** dari Bahagian A yang **diwajibkan** dan **TIGA (3)** soalan dari Bahagian B.

Anda **dimestikan** menjawab soalan **No. 1** dalam Bahasa Malaysia.

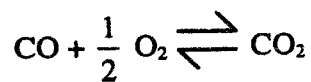
Soalan terjemahan Bahasa Inggeris ditaip dalam tulis **Italic**.

...2/-

BAHAGIAN A: Soalan No. 1 adalah wajib

1. Karbon monoksida dari suatu loji air gas dibakar dengan udara di dalam sebuah reaktor adiabatik. Kedua-dua karbon monoksida dan udara disuapkan ke dalam reaktor pada 25°C dan tekanan atmosfera. Tindakbalas yang berlaku di dalam reaktor adalah berbalik dan boleh diwakili sebagai:-

Carbon monoxide from a water gas plant is burned with air in an adiabatic reactor. Both the carbon monoxide and air are being fed to the reactor at 25°C and atmospheric pressure. The reaction taking place in the reactor is reversible and represented as:



Perubahan tenaga bebas piawai (25°C) ialah:-
The standard free energy change (25°C) is:

$$\Delta G_{T_0}^{\circ} = -62 \text{ (k cal/gmol of CO)}$$

Haba tindakbalas piawai pada 25°C ialah:-
The standard heat of reaction at 25°C is:

$$\Delta H_{T_0}^{\circ} = -67.611 \text{ (k cal / gmol of CO)}$$

Keadaan piawai bagi kesemua komponen-komponen adalah gas-gas tulen pada 1 atm.

The standard states for all components are the pure gases at 1 atm.

Tuliskan persamaan-persamaan model dan tunjukkan keterangan gambarajah aliran untuk mengira suhu adiabatik (T) dan penukaran keseimbangan (X_e) bagi karbon monoksida seandainya sebuah suapan disuapkan ke reaktor pada pembahagian stoikiometri.

Formulate the model equations and show the information flow diagram for the calculation of the adiabatic temperature (T) and the equilibrium conversion (X_e) of carbon monoxides if a feed is fed to the reactor in stoichiometric proportions.

(25 markah)

..3/-

Data tambahan (Additional data):

Tekanan tetap muatan tentu (C_{p_i}) bagi berbagai jujuk di dalam (Cal/gmol.K) diberi seperti berikut:-

The constant pressure heat capacities (C_{p_i}) for the various constituents in (cal/gmol.K) are given by

$$C_{p_i} = A_i + B_i T + C_i T^2$$

T : suhu dalam unit K

Angkatapnya diberi di dalam jadual di bawah:

The constant are as given below:

Gas	A	B	C
CO	6.25	2.091×10^{-3}	-0.459×10^{-6}
O ₂	6.13	2.99×10^{-3}	-0.806×10^{-6}
CO ₂	6.85	8.533×10^{-3}	-2.475×10^{-6}
N ₂	6.30	1.819×10^{-3}	-0.345×10^{-6}

Petunjuk: Rangkumkan keseimbangan makroskopik bahana keseimbangan entalpi dan hubungkait keseimbangan untuk membentuk 2 persamaan algebra yang tak lurus dalam sebutan 2 angkubah yang tak diketahui iaitu T dan X_e .

Hint: *Combine the macroscopic material balance, enthalpy balance and equilibrium relationship to form two nonlinear algebraic equations in two unknowns i.e., T and X_e .*

BAHAGIAN B

2. Suatu reaktor menukarkan sebatian organik ke hasil P dengan memanaskan bahan dengan adanya bahan tambah A (nisbah molar = x_A). Bahan tambah boleh dimasukkan ke dalam reaktor, disamping stim dimasukkan ke dalam gegelung pemanas di dalam reaktor untuk menghasilkan haba.

A reactor converts an organic compound to a product P by heating the material in the presence of an additive A (mole fraction = x_A). The additive can be injected into the reactor, while steam can be injected into a heating coil inside the reactor to provide heat.

..4/-

Hasil P boleh dijual pada kadar RM 50 per kg mol. Bagi 1 kg mol suapan, kos bagi bahan tambah (di dalam RM per kg mol) sebagai fungsi x_A di beri oleh formula berikut:-

The product P can be sold for RM 50 per kg mol. For 1 kg mol of feed, the cost of the additive (in RM per kg mol) as function of x_A is given by the formula:

$$2.0 + 10 x_A + 20 x_A^2$$

Kos bagi stim (di dalam RM) sebagai fungsi S ialah:-
The cost of the steam (in RM) as a function of S is:-

$$1.0 + 0.003S + 2.0 \times 10^{-6} S^2$$

(S = kg stim per kg mol suapan)
 (S = kg steam per kg mol feed)

Persamaan hasil ialah:
The yield equation is:

$$Y_p = 0.1 + 0.3x_A + 0.001S + 0.0001 x_A S$$

(Y_p = kg mol hasil per kg mol suapan)
 (Y_p = kg mol product per kg mol feed)

- [a] Tulis fungsi keuntungan di dalam sebutan x_A dan S.
Formulate the profit function in terms of x_A and S.

(10 markah)

- [b] Maksimakan fungsi keuntungan dengan mengambil kira kekangan-kekangan
Maximize the profit function subject to the constraints

$$0 \leq x_A \leq 1 \quad \text{and} \quad S \geq 0$$

dengan menggunakan sebarang kaedah.
using any methods.

(10 markah)

..5/-

- [c] Adakah fungsi keuntungan cekung atau cembung? Tunjukkan jawapan anda secara matematik.
Is the profit function concave or convex? Demonstrate your finding mathematically.

(5 markah)

3. Satu tangki berbentuk silinder bergarispusat 2.0m dan mempunyai ketinggian 8.0m mengandungi minyak kelapa sawit yang mempunyai ketumpatan 950 kg/m^3 . Tangki tersebut terdedah ke atmosfera. Lubang luahan yang bergarispusat 0.02 m terletak di tengah-tengah dasar tangki tersebut. Permukaan cecair berkenaan berada pada paras 7.0 di atas lubang luahan. Apabila lubang luahan dibuka, paras cecair jatuh ke 4.5 m.

A cylindrical tank 2.0 m in diameter and 8.0 m high contains a Palm Oil having a density of 950 kg/m^3 . The tank is opened to the atmosphere. A discharge hole of 0.02 m diameter is located in the centre of the bottom of the tank. The surface of the liquid is located 7.0 m above the discharge hole. When the drainage hole was opened the liquid level dropped to 4.5 m.

- [a] Buat suatu keseimbangan makroskopik yang diperlukan dan lukiskan pengawalan isipadu bagi sistem tersebut.
Make necessary macroscopic balances, and draw the control volume of the system.

(10 markah)

- [b] Kira masa yang diambil di dalam saat, bagi paras cecair jatuh ke 4.5 m.
Compute the time in seconds for the liquid level to drop to 4.5 m.

(10 markah)

- [c] Sekiranya lubang luahan dibesarkan ke 0.04 m, kirakan masa yang diambil untuk mengalirkan keluar kesemua cecair di dalam tangki berkenaan.
If the discharge hole is increased to 0.04 m compute the time of draining the whole tank.

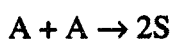
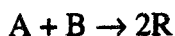
(5 markah)

Tuliskan kesemua andaian-andaian yang anda buat di dalam penyelesaian anda.
Make all necessary assumptions for your solutions.

..6/-

4. Di dalam suatu proses untuk membentuk sebatian R, tindakbalas-tindakbalas berikut berlaku:

In a process to make compound R, the following reactions occur:



- [a] Terangkan mengapa keadaan persekitaran kimia yang optimum akan tinggi bagi kepekatan B dan rendah bagi kepekatan A.
Explain why the optimum chemical environment would be high B and low A concentrations.

(8 markah)

- [b] Rupa reaktor yang sempurna untuk memenuhi tindakbalas di atas ialah sebuah reaktor dengan aliran sampingan suapan A seperti yang ditunjukkan pada gambarajah Q4 di mana $f(v)$ (dalam unit m^3 suapan sampingan/hr. m^3 isipadu reaktor) adalah merupakan taburan bagi penambahan suapan sampingan di sepanjang reaktor yang hendak ditentukan. Andaikan bahawa reaktor sebagai aliran palam, terbitkan persamaan-persamaan keseimbangan jisim.

An idealised reactor configuration to achieve this is a reactor with side stream feeds of A, as shown in Fig. Q4. Where $f(v)$ (in m^3 side feed/hr. m^3 reactor volume) is the distribution of side feed additions along the reactor length (volume) to be determined. Assuming the reactor to be a plug flow, derive the mass balances equations.

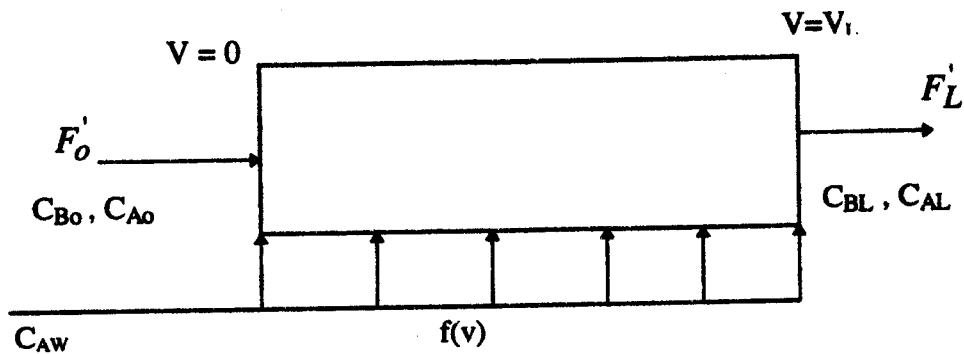
(10 markah)

- [c] Sebagai anggaran rekabentuk yang optimum, keadaan yang akan digunakan adalah suapan sampingan akan diubahsuai untuk menjaga $C_A = \text{tetap}$. (iaitu $C_A = C_{A0} = C_{AL}$). Penukaran A yang tinggi adalah dikehendaki, dan untuk memudahkan pengiraan, adalah diandaikan bahawa kepekatan suapan sampingan adalah tinggi, $C_{AW} \gg C_A = C_{A0} = C_{AL}$. Terbitkan persamaan-persamaan keseimbangan jisim bagi keadaan-keadaan tertentu berkenaan.

As an approximate optimal design, the conditions will be used that the side feed be adjusted to maintain $C_A = \text{constant}$ (i.e., $C_A = C_{A0} = C_{AL}$). Also, a high conversion of A is desired, and to simplify the calculations, it will be assumed that the side feed concentration is high, $C_{AW} \gg C_A = C_{A0} = C_{AL}$. Derive the mass balance equations for these special conditions.

(7 markah)

..7/-



Gambarajah Q4

5. Pertimbangkan masalah pelampauan berikut:
Consider the following extremisation problem

$$f(x) = x_1^2 + x_1 x_2 + x_2^2 + 3x_1$$

- [a] Cari persamaan pelampauan secara analitik
Find the extremum analytically

(10 markah)

- [b] Seandainya arah pencarian S diberi sebagai $(1, 0)^T$ bermula pada $(0, 0)$, cari titik pelampau bagi fungsi di atas dan bandingkan dengan bahagian [a].

Suppose the search direction S is given by $(1, 0)^T$. Start at $(0, 0)$, find the extremum of the above function and compare with part [a].

(15 markah)

-ooo0ooo-

Solution of non-linear Equations

1. Newton's Method:

$$f(x) = f(x_0) [x - x_0] + f'(x_0)$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

2. Secant Method:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

3. Regula Falsi Method:

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i) \frac{(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

4. Illionis Method:

$$x_{i+2} = x_{i+1} - f(x_{i+1}) \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{f(x_{i+1}) - \frac{1}{2}f(x_{i-1})}$$

5. Solution of n non-linear Equations

$$\sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial f_k(x)}{\partial x_i} \right|_{x^{(j)}} d_i^{(j)} = -f_k[x^{(j)}]$$

$$k = 1, 2, \dots, n$$

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} + d_i^{(j)}$$

$$i = 1, 2, \dots, n$$

j = number of iteration.

Solution of ODE

1. Explicit Euler method:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x f(x_i, y_i)$$

2. Runge-Kutta Method:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

where

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}\Delta x, y_i + \frac{1}{2}k_1\Delta x\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}\Delta x, y_i + \frac{1}{2}k_2\Delta x\right)$$

$$k_4 = f(x_i + \Delta x, y_i + k_3\Delta x)$$

3. Implicit Methods:

- 3.1 Euler

$$y_{i+1} = y_i + \Delta x f(x_{i+1}, y_{i+1})$$

- 3.2 Trapezoidal

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta x}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]$$

4. Systems of Coupled ODE'S

Runge-Kutta fourth Order:

$$y_{i,j+1} = y_{i,j} + \frac{\Delta x}{6}(k_{1,i,j} + 2k_{2,i,j} + 2k_{3,i,j} + k_{4,i,j})$$

where

$$k_{1,i,j} = f_i(x_j, y_{1,j}, y_{2,j}, \dots, y_{n,j})$$

$$k_{2,i,j} = f_i\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_{i,j} + \frac{\Delta x}{2} k_{1,1,j}, \dots, y_{n,j} + \frac{\Delta x}{2} k_{1,n,j}\right)$$

$$k_{3,i,j} = f_i\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}, y_{1,j} + \frac{\Delta x}{2} k_{2,1,j}, \dots, y_{n,j} + \frac{\Delta x}{2} k_{2,n,j}\right)$$

$$k_{4,i,j} = f_i(x_j + \Delta x, y_{i,j} + \Delta x k_{3,1,j}, \dots, y_{n,j} + \Delta x k_{3,n,j})$$