

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama  
Sidang Akademik 2004/2005

Oktober 2004

**EKC 342 – Kaedah Pengiraan Kejuruteraan Kimia**

Masa : 3 jam

---

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TUJUH muka surat yang bercetak dan DUA muka surat Lampiran sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

**Arahan:** Jawab mana-mana **EMPAT (4)** soalan.

Pelajar boleh menjawab semua soalan dalam Bahasa Malaysia. Jika pelajar ingin menjawab dalam Bahasa Inggeris, pelajar hendaklah menjawab sekurang-kurangnya SATU soalan dalam Bahasa Malaysia.

Jawab mana-mana EMPAT soalan.

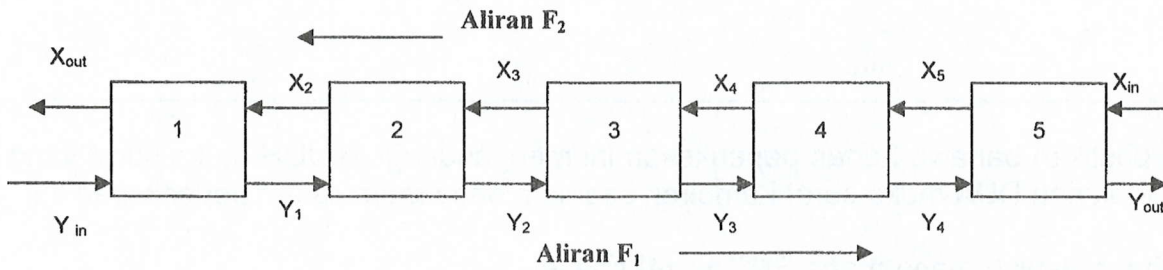
Answer any FOUR questions.

1. [a] Satu penyarian lima peringkat ditunjukkan dalam Rajah S.1 [a]. Satu arus bahan kimia yang mempunyai nisbah berat 0.1 ( $Y_{in}$ ) masuk dari arah kiri pada kadar aliran 400 kg/jam ( $F_1$ ). Secara serentak satu bahan pelarut yang mengandungi nisbah berat 0 ( $X_{in}$ ) bahan kimia yang sama masuk dari arah kanan pada kadar aliran 800 kg/jam ( $F_2$ ). Tentukan nilai  $Y_{out}$  dan  $X_{out}$ .

Bagi peringkat  $i$ , imbalan jisim boleh diwakilkan sebagai

$$F_1 Y_{i-1} + F_2 X_{i+1} = F_1 Y_i + F_2 X_i$$

Pada setiap peringkat diandaikan keseimbangan tercapai di antara  $Y_i$  dan  $X_i$  sebagai  $K = X_i / Y_i$  di mana  $K$  adalah pekali agihan dan bernilai 5. Persamaan di atas boleh diselesaikan untuk  $Y_i$  dengan menggunakan hubungan keseimbangan  $K = X_i / Y_i$ . Ambil perhatian bahawa persamaan tersebut perlu diubah untuk mengambil kira nisbah berat aliran masuk apabila digunakan kepada peringkat pertama dan peringkat terakhir. Gunakan Algoritma Thomas untuk selesaikan Matrik Tri-diagonal untuk menganggarkan nilai-nilai yang tidak diketahui.



Rajah S. 1 [a]

[21 markah]

- [b] Berikan definisi punca berganda. Sila berikan kaedah pencarian punca yang paling efektif untuk punca berganda.

[4 markah]

1. [a] A five stage extraction process is shown in Figure Q. 1 [a]. A stream containing a weight fraction 0.1 ( $Y_{in}$ ) of a chemical enters from the left at a mass flow rate of 400 kg/h ( $F_1$ ). Simultaneously, a solvent carrying a weight fraction 0 ( $X_{in}$ ) of the same chemical enters from the right at a flow rate of 800 kg/h ( $F_2$ ). Determine the values of  $Y_{out}$  and  $X_{out}$ .

For a stage  $i$ , a mass balance can be represented as,

$$F_1 Y_{i-1} + F_2 X_{i+1} = F_1 Y_i + F_2 X_i$$

At each stage, an equilibrium is assumed to be established between  $Y_i$  and  $X_i$  as in  $K = X_i / Y_i$  where  $K$  is the distribution coefficient and is equal to 5. The above equation can be solved for  $Y_i$  by using equilibrium relationship  $K = X_i / Y_i$ . Note that the equation must be modified to account for the inflow weight fractions when applied to the first and last stages. Use Thomas Algorithm to solve the Tri-diagonal matrix to estimate the values of the unknowns.

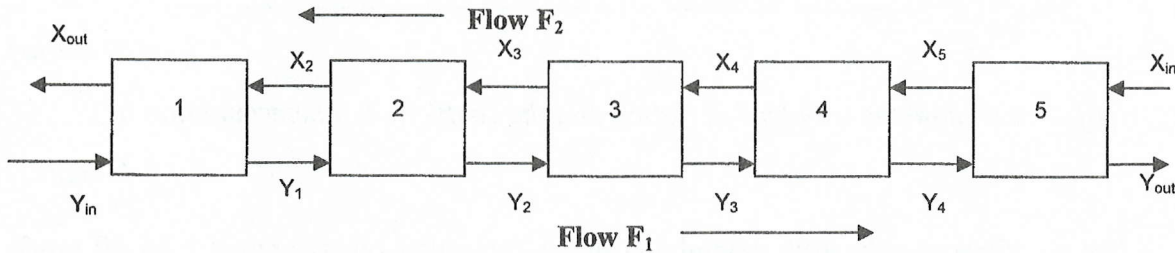


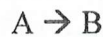
Figure Q. 1 [a]

[21 marks]

[b] Define multiple root. Name the most effective root finding method for multiple root.

[4 marks]

2. [a] Data-data berikut diambil dari reaktor tangki teraduk. Gunakan data tersebut untuk menentukan anggaran terbaik bagi  $K_{01}$  dan  $E$  bagi tindakbalas berikut



$$-\frac{dC_A}{dt} = K_{01} e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)} C_A$$

$$R = 8.3144 \text{ J/mol K}; E [\text{J/mol}]; K_{01} [\text{s}^{-1}]$$

$-dC_A / dt$ (mol/l s)	$C_A$ (mol/l)	T (K)
460	200	280
385	100	300
960	150	320
940	80	350
1530	60	400

[20 markah]

[b] Anggarkan nilai sisihan piawai dan pekali penentuan ( $r^2$ ).

[5 markah]

2. [a] The following data was taken from a stirred tank reactor. Use the data to determine the best possible estimates for  $K_{01}$  and  $E$  for the following reaction



$$-\frac{dC_A}{dt} = K_{01} e^{-\left(\frac{E}{RT}\right)} C_A$$

...4/-

$$R = 8.3144 \text{ J/mol K}; E [\text{J/mol}]; K_{01} [\text{s}^{-1}]$$

$-dC_A / dt$ (moles/l s)	$C_A$ (moles/l)	$T$ (K)
460	200	280
385	100	300
960	150	320
940	80	350
1530	60	400

[20 marks]

[b] Estimate the standard deviation and the coefficient of determination ( $r^2$ ).

[5 marks]

3. [a] Kirakan suhu titik gelembung untuk campuran binari unggul bagi 10 mol% *n*-pentana dan 90 mol% *n*-heptana pada 1 atmosfera. Tekanan wap *n*-Pentane diberi oleh persamaan Antoine sebagai

$$\log P_A^* = 6.85221 - \frac{1064.63}{T + 232}$$

sementara tekanan wap *n*-heptana diberi oleh persamaan Antoine sebagai

$$\log P_B^* = 6.87776 - \frac{1171.53}{T + 224}$$

di mana  $T$  dalam  $^{\circ}\text{C}$ ,  $P_A^*$  and  $P_B^*$  adalah dalam mm Hg. Titik didih bagi *n*-pentana ialah  $36.07^{\circ}\text{C}$  dan of *n*-heptane ialah  $68.7^{\circ}\text{C}$ . [Petunjuk : Pada titik didih, jumlah tekanan separa bagi sebatian-sebatian mesti sama dengan jumlah tekanan. Perlu diingatkan juga, untuk larutan unggul,  $\bar{P}_A = X_A P_A^*$  ( $\bar{P}_A$  adalah tekanan separa bagi sebatian A dan  $P_A^*$  adalah tekanan wap bagi sebatian A). Sila lihat pada campuran sebatian dan titik didih komponen tulen yang berkaitan untuk mendapatkan anggaran bagi tekaan awal anda].

[16 markah]

- [b] Kepekatan kimia bagi satu aliran keluar daripada satu reaktor tercampur sepenuhnya diukur seperti berikut:

t, minit	0	2	4	6	8	12	16	20
C, mg/m <sup>3</sup>	10	20	30	40	60	72	70	50

Bagi satu aliran keluar  $Q = 12 \text{ m}^3/\text{minit}$ , sila anggarkan jisim kimia yang keluar daripada reaktor antara masa  $t = 0$  hingga 20 minit. Sila gunakan kombinasi kaedah-kaedah pengkamilan berangka untuk menilai kamilan tersebut.

[Petunjuk :  $M = Q \int_{t_1}^{t_2} C dt$ ]

[9 markah]

...5/-

3. [a] Calculate the bubble point temperature for an ideal binary mixture of 10 mol% n-pentane and 90 mol% n-heptane at 1 atmosphere. The vapor pressure of n-Pentane is given by Antoine Equation as

$$\log P_A^* = 6.85221 - \frac{1064.63}{T + 232}$$

while the vapor pressure of n-heptane is given by Antoine equation as

$$\log P_B^* = 6.87776 - \frac{1171.53}{T + 224}$$

where  $T$  is in  $^{\circ}\text{C}$ ,  $P_A^*$  and  $P_B^*$  are in mm Hg. The boiling point of n-pentane is  $36.07^{\circ}\text{C}$  and that of n-heptane is  $68.7^{\circ}\text{C}$ . [Hint: Remember at bubble point the sum of partial pressures of compounds must be equal to total pressure. Also remember for ideal solution  $\bar{P}_A = X_A P_A^*$  ( $\bar{P}_A$  is partial pressure of compound A and  $P_A^*$  is vapor pressure of compound A). Look at the composition of the mixture and the corresponding boiling points of the pure components to have a fair estimate of your initial guess.]

[16 marks]

- [b] The outflow of a chemical concentration from a completely mixed reactor is measured as:

$t, \text{ min}$	0	2	4	6	8	12	16	20
$C, \text{ mg/m}^3$	10	20	30	40	60	72	70	50

For an outflow of  $Q = 12 \text{ m}^3/\text{min}$ , estimate the mass of chemical that exits the reactor from  $t = 0$  to 20 min. Use combination of numerical integration methods to evaluate the integral

$$[\text{Hint : } M = Q \int_{t_1}^{t_2} C dt]$$

[9 marks]

4. [a] Imbangan jisim bagi sebuah reaktor kelompok yang mengandungi 3 komponen A, B dan C menghasilkan persamaan-persamaan tersebut,

$$\frac{dC_A}{dt} = C_A + C_C$$

$$\frac{dC_B}{dt} = C_B C_A$$

$$\frac{dC_C}{dt} = 2C_B C_C$$

...6/-

di mana C adalah kepekatan. Pada awalnya, pada  $t = 0$ , kepekatan komponen-komponen adalah seperti berikut  $C_A = 1$ ;  $C_B = 0$  dan  $C_C = 1$ . Carikan kepekatan komponen-komponen pada penghujung masa 5 s dengan menggunakan saiz langkah 5 s.

[18 markah]

- [b] Data berikut telah diambil semasa melakukan tindakbalas tertib pertama yang mudah  $A \rightarrow B$  di dalam reaktor kelompok. Jadual di bawah memberikan kepekatan produk B dengan masa,

t, minit	2	3	5
C, mol/m <sup>3</sup>	4	5.25	19.75

Cari kepekatan produk tersebut pada  $t = 4$  minit menggunakan persamaan perbezaan pembahagi penentu dalam Polinomial Newton.

[7 markah]

4. [a] *Mass balance of a batch reactor involving three components A, B and C yielded following equations,*

$$\frac{dC_A}{dt} = C_A + C_C$$

$$\frac{dC_B}{dt} = C_B C_A$$

$$\frac{dC_C}{dt} = 2C_B C_C$$

where C is the concentration. Initially at  $t = 0$ , concentration of the components are  $C_A = 1$ ;  $C_B = 0$  and  $C_C = 1$ . Find the concentration of the components at the end of 5 s with a step size of 5 s

[18 marks]

- [b] *The following data has been acquired while conducting a simple first order reaction  $A \rightarrow B$  in a batch reactor. Following table gives the concentration of product B with time,*

t, min	2	3	5
C, mol/m <sup>3</sup>	4	5.25	19.75

Find the concentration of the product at  $t = 4$  minutes using Newton divide difference Interpolating polynomial Equation

[7 marks]

5. [a] Bahan tindakbalas A ditukarkan ke B di dalam reaktor tangki teraduk. Produk B dan bahan A yang tidak bertindak balas dituliskan di dalam unit pemisahan. Bahan A yang tidak bertindak balas kemudian disalurkan semula ke dalam reaktor.

Seorang jurutera proses mendapati bahawa kos awal sistem tersebut adalah satu fungsi bagi penukaran,  $x_A$ .

Cari penukaran terbabit yang akan menghasilkan kos sistem terendah dengan menggunakan kaedah pengiraan pilihan anda. C adalah pemalar berkadaran terus. (Plot menunjukkan  $x_A$  sepadan dengan kos minimum di antara 0.5 dan 0.6)

$$\text{Kos} = C \left[ \left( \frac{1}{(1-x_A)^2} \right)^{0.6} + 5 \left( \frac{1}{x_A} \right)^{0.6} \right]$$

[15 markah]

[b] Data berikut diambil semasa mengisi lori tangki minyak yang besar,

t, minit	0	15	30	45	60	90	120
V barrel	0.50	0.65	0.73	0.88	1.03	1.14	1.30

Kirakan kadar alir keluar pada setiap masa kepada tertib ketepatan  $O(h^2)$ .

[10 markah]

5. [a] *Reactant A is converted to product B in a stirred tank reactor. The product B and unreacted A are purified in a separation unit. Unreacted A is recycled back to the reactor. A process engineer has found that the initial cost of the system is a function of the conversion,  $x_A$ .*

*Find the conversion that will result in lowest cost of system using numerical method of your choice. C is proportionality constant. (Plot shows  $x_A$  corresponding to minimum cost is between 0.5 and 0.6)*

$$\text{Cost} = C \left[ \left( \frac{1}{(1-x_A)^2} \right)^{0.6} + 5 \left( \frac{1}{x_A} \right)^{0.6} \right]$$

[15 marks]

[b] *Following data is collected while loading a large oil tanker,*

t, min	0	15	30	45	60	90	120
V barrels	0.50	0.65	0.73	0.88	1.03	1.14	1.30

*Calculate the rate of discharge at each time to the order of accuracy  $O(h^2)$*

[10 marks]

Lampiran

## Useful Formulae

**Thomas Algorithm**

$$E_k = e_k / f_{k-1}; \quad f_k = f_k - e_k g_{k-1}$$

**Linear Regression**

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}$$

**Roots of Equation**

## False Position Method

$$x_r = x_u - \frac{f(x_u)(x_l - x_u)}{f(x_l) - f(x_u)}$$

## Secant Method

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

**Numerical Integration**

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_a) + f(x_b)}{2} \quad \text{Trapezoidal rule}$$

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6} \quad \text{Simpson } 1/3^{\text{rd}} \text{ rule}$$

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8} \quad \text{Simpson } 3/8^{\text{th}} \text{ rule}$$

**Numerical Differentiation**

$$f'(x) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} \quad \text{Forward difference}$$

$$f'(x) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h} \quad \text{Backward difference}$$

$$f'(x) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} \quad \text{Central difference}$$