
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2006/2007

Oktober – November 2006

EKC 342 – Kaedah Pengiraan Kejuruteraan Kimia

Masa : 3 jam

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi TIGA BELAS muka surat yang bercetak dan SATU muka surat Lampiran sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Arahan: Jawab **EMPAT (4)** soalan. Jawab mana-mana **DUA (2)** soalan dari Bahagian A. Jawab mana-mana **DUA (2)** soalan dari Bahagian B.

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.

Bahagian A : Jawab mana-mana DUA soalan.

Section A : Answer any TWO questions.

1. [a] Tindakbalas kimia berbalik yang berikut berlaku di dalam sistem tertutup



Pada keseimbangan, persamaan di atas boleh dicirikan oleh

$$K_1 = \frac{C_c}{C_a^2 C_b}$$

$$K_2 = \frac{C_c}{C_a C_d}$$

Jika x_1 dan x_2 adalah bilangan mol C yang masing-masing dihasilkan oleh tindakbalas pertama dan kedua,

- [i] Bentukkan semula hubungan keseimbangan dalam ungkapan kepekatan awal jujuk.

[2 markah]

- [ii] Andaikan anda ingin menyelesaikan x_1 dan x_2 dengan menggunakan kaedah lelaran titik tetap, huraikan secara terperinci langkah demi langkah cara anda menganggarkan tekaan awal bagi x_1 dan x_2 .

[4 markah]

- [iii] Dengan menggunakan tekaan awal $x_1=2$ dan $x_2=5$, tentukan nilai-nilai x_1 dan x_2 menggunakan kaedah lelaran titik tetap. Berhenti selepas dua lelaran dan kirakan ralat anggaran relatif peratusan mutlak untuk setiap lelaran. Beri ulasan bagi jawapan anda.

[6 markah]

Diberi:

$$K_1 = 4.0 \times 10^{-4}$$

$$K_2 = 3.7 \times 10^{-3}$$

$$C_{ao} = 50$$

$$C_{bo} = 20$$

$$C_{co} = 5$$

$$C_{do} = 10$$

Dimana subskrip "o" mewakili kepekatan awal setiap jujuk.

- [b] Bahan tindakbalas A ditukarkan kepada B secara berterusan dalam satu reaktor tiub. Pada keadaan mantap, seorang jurutera mendapati bahawa suhu reaktor, T ialah satu fungsi kepanjangan reaktor, x .

$$T(x) = C(-1.5x^6 - 2x^4 + 12x)$$

Carikan suhu maksima dan ralat nisbi yang akan tercapai dalam reaktor dengan menggunakan cara pencarian Golden (lakukan 3 lelaran). C ialah satu pemalar. (Plot menunjukkan bahawa suhu maksima berada dalam julat x 0 dan 2).

[13 markah]

1. [a] *The following reversible chemical reactions take place in a closed system*



At equilibrium, they can be characterized by

$$K_1 = \frac{C_c}{C_a^2 C_b}$$

$$K_2 = \frac{C_c}{C_a C_d}$$

If x_1 and x_2 are the number of moles of C that are produced due to the first and second reactions respectively,

- [i] *Reformulate the equilibrium relationships in terms of the initial concentration of the constituents.*

[2 marks]

- [ii] *Assuming that you want to solve x_1 and x_2 using Fix Point Iteration method, give a STEP to STEP DETAIL description on how do you estimate the initial guess for x_1 and x_2 .*

[4 marks]

- [iii] *Using an initial guess of $x_1 = 2$ and $x_2 = 5$, determine the values of x_1 and x_2 using Fix Point Iteration method. Stop after 2 iteration and calculate the absolute percent relative approximation error for every iteration. Comment on your answer.*

[6 marks]

Given:

$$K_1 = 4.0 \times 10^{-4}$$

$$K_2 = 3.7 \times 10^{-3}$$

$$C_{ao} = 50$$

$$C_{bo} = 20$$

$$C_{co} = 5$$

$$C_{do} = 10$$

where the subscript "o" designates the initial concentration of each constituent.

...4/-

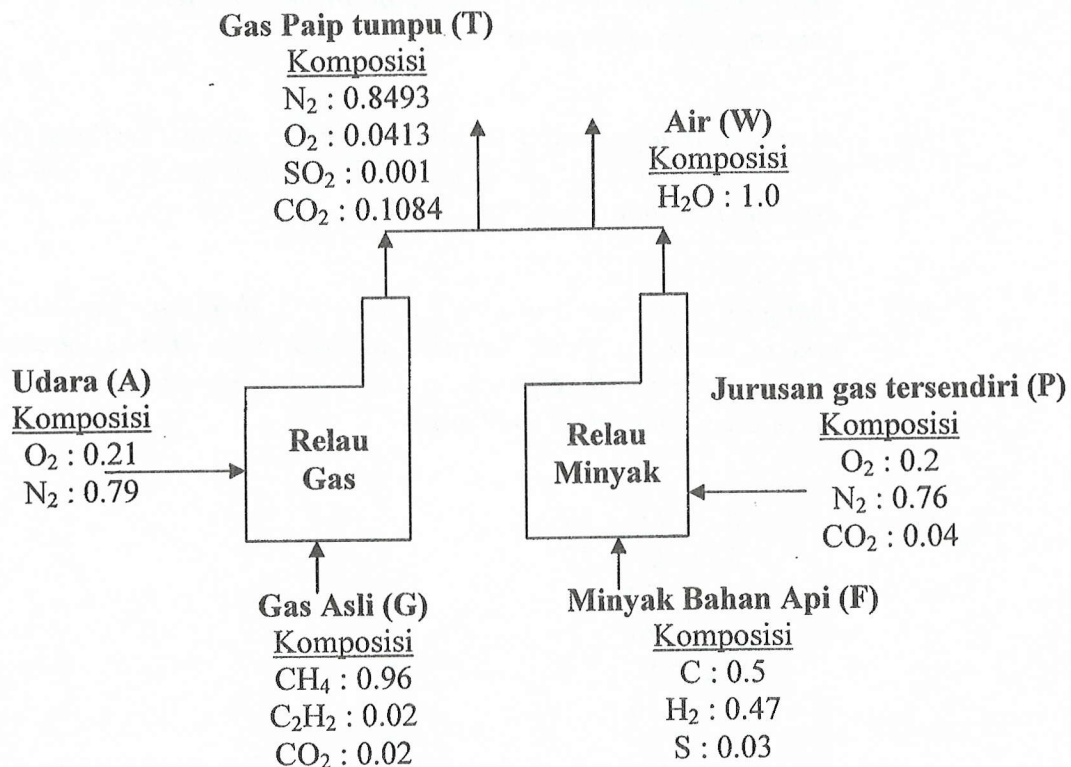
[b] Reactant A is converted to B continuously in a tubular reactor. At steady state condition, a process engineer found that the temperature, T of the reactor is a function of the length of reactor, x .

$$T(x) = C(-1.5x^6 - 2x^4 + 12x)$$

Find the maximum temperature and the relative error that will be achieved in the reactor using Golden search method (Perform 3 iterations). C is a constant (Plot shows x corresponding to the maximum temperature is between 0 and 2).

[13 marks]

2. [a] Bagi mengatasi kos bahan api yang semakin meningkat dan ketidakpastian bekalan bahan api tertentu, banyak syarikat mengendalikan dua relau, satu dibakar dengan gas asli dan yang satu lagi dengan minyak bahan api. Setiap relau mempunyai bekalan oksigen sendiri di syarikat ABC. Relau gas menggunakan udara dan relau minyak menggunakan aliran gas tersendiri. Gas paip tumpu melalui paip tumpu yang sama. Sistem relau dan komposisi semua aliran masuk/keluar relau diberikan di Rajah S.2.[a]. Semua komposisi diberi dalam pecahan mol. Dua keluaran ditunjukkan dari paip tumpu supaya untuk menunjukkan bahawa analisa gas paip tumpu ialah berdasarkan asas kering tetapi wap air juga hadir dalam gas paip tumpu. Semasa hujan lebat, semua pengangkutan ke syarikat ABC terputus. Bekalan minyak bahan api masih banyak tetapi simpanan gas asli yang tertinggal hanya 450 kg (Berat Molekul gas asli dianggap 16). Beban haba minimum bagi syarikat jika ditukar kepada keluaran gas paip tumpu ialah 6,205 mol/jam gas paip tumpu kering. Pada kadar aliran gas paip tumpu kering itu, kadar aliran minyak bahan api ialah 207 mol/jam.



Rajah S. 2. [a] : Sistem relau bagi syarikat ABC.

- [i] Terbitkan persamaan imbangan jisim bagi unsur-unsur nitrogen (N), hidrogen (H), oksigen (O) dan karbon (C) pada sistem relau itu.

[4 markah]

- [ii] Selesaikan set persamaan imbangan jisim tersebut untuk mengira kadar aliran W, A, G dan P. Gunakan kaedah Gauss-Seidel. Gunakan tekaan awal berikut; A = 500 mol/jam, G = 500 mol/jam, P = 1500 mol/jam dan W = 1000 mol/jam. Hentikan lelaran apabila peratus ralat penghampiran relatif mutlak kurang daripada 2.5%.

[13 markah]

- [iii] Berapa jamkah syarikat itu dapat beroperasi sebelum mereka kehabisan gas asli?

[2 markah]

- [b] Dengan bantuan lakaran grafik, terbitkan formula Newton-Raphson untuk mencari punca persamaan. Bincang secara ringkasnya kebaikan dan keburukan kaedah Newton-Raphson dan bandingkan dengan kaedah punca pencarian yang lain.

[6 markah]

2. [a] *In the face of higher fuel costs and the uncertainty of the supply of a particular fuel, many companies operate two furnaces, one fired with natural gas and the other with fuel oil. In the ABC Corp., each furnace has its own supply of oxygen. The gas furnace uses air while the oil furnace uses a special gas stream. The stack gas goes up a common stack. The furnace system and the composition of all the various stream in/out of the furnaces are given in Figure Q. 2. [a]. All the compositions are given in mole fraction. Note that two outputs are shown from the common stack to point out that the stack gas analysis is on a dry basis but water vapor also exists in the stack gas. During one heavy downpour, all transportation to ABC Corp. was cut off. There was still ample supply of fuel oil but the reserve for natural gas was only left 450 kg (MW of natural gas can be taken as 16). The minimum heating load for the company when translated into the stack gas output was 6,205 mol/hr of dry stack gas. At that flow rate of dry stack gas, the flow rate of fuel oil stream was found to be 207 mol/hr.*

...6/-

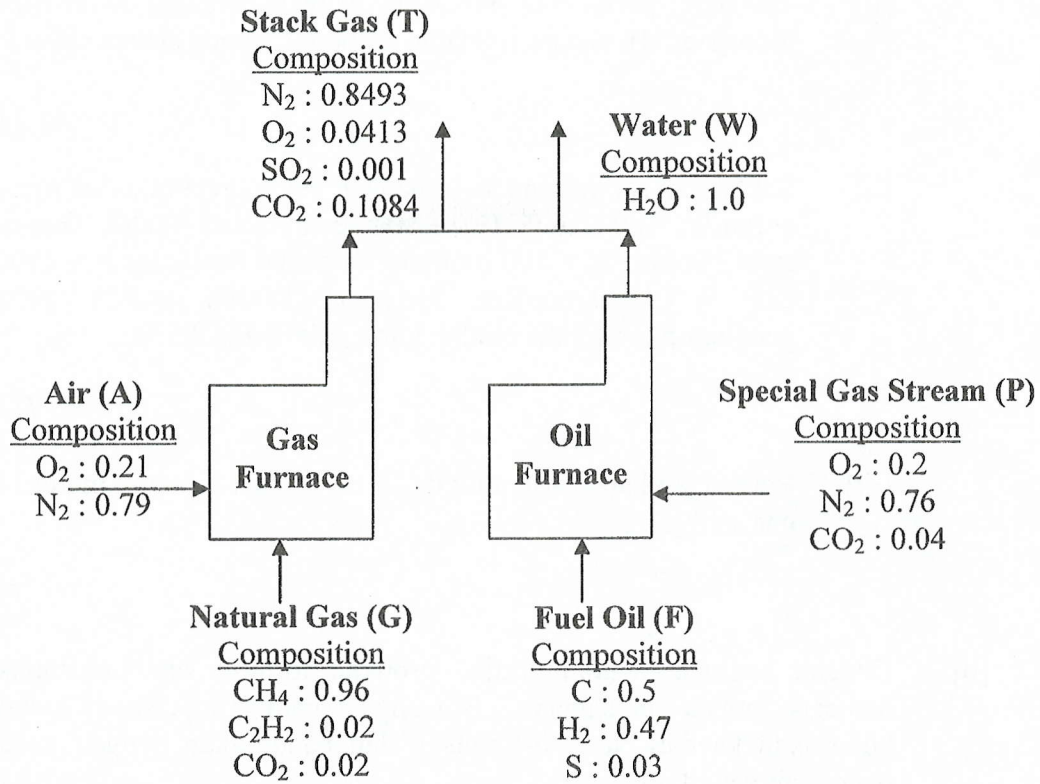


Figure Q. 2. [a] : Furnace system for ABC Corp.

[i] Derive mass balance equations on the furnace system for nitrogen (N), hydrogen (H), oxygen (O) and carbon (C).

[4 marks]

[ii] Solve the set of mass balance equation to calculate the flow rate of W, A, G and P. Use Gauss-Seidel method. The initial guess can be taken as; A = 500 mol/h, G = 500 mol/h, P = 1500 mol/h and W = 1000 mol/h. Stop the iteration when the absolute percent relative approximation error is less than 2.5%.

[13 marks]

[iii] How many hours can the company operate before they run out of natural gas?

[2 marks]

[b] With the help of a graphical sketch, derive the Newton-Raphson formula to find the root of an equation. Briefly discuss the advantages and disadvantages of the Newton Raphson method as compared to other root finding methods.

[6 marks]

3. [a] PQ Bersaudara Sdn. Bhd adalah sebuah syarikat besar yang menghasilkan alat mainan X, Y dan Z. Bagi menghasilkan alat mainan dengan cara yang betul, 3 jenis bahan mentah berikut diperlukan: plastik, logam dan epoksi. Jumlah setiap bahan mentah yang diperlukan untuk menghasilkan setiap alatan mainan diberi di dalam Jadual S.3 [a] di bawah.

Jadual S. 3 [a] : Jumlah bahan mentah yang diperlukan untuk menghasilkan mainan X, Y dan Z

Bahan mentah	Plastik (g/mainan)	Logam (g/mainan)	Epoksi (g/mainan)
X	15	2.5	10
Y	17	3.3	12
Z	19	4.2	16

Jika setiap hari, hanya 2,120 g plastik, 434 g logam dan 1,640 g epoksi yang sedia ada, berapakah jumlah X, Y dan Z yang boleh dihasilkan dengan mengandaikan kesemua bahan mentah mesti digunakan sepenuhnya setiap hari. Selesaikan masalah tersebut dengan menggunakan kaedah penguraian LU. Gunakan sekurang-kurangnya 5 angka bererti dalam kiraan anda.

[13 markah]

- [b] Persamaan keadaan Redlich-Kwong diberikan oleh

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)\sqrt{T}}$$

di mana R = pemalar gas semesta (0.518 kJ/kg.K), T = suhu mutlak (K), p = tekanan mutlak (kPa) dan v = isipadu tentu untuk gas tulen (m³/kg). Parameter a dan b dikira oleh

$$a = 0.427 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{p_c} \qquad b = 0.0866 R \frac{T_c}{p_c}$$

di mana T_c ialah suhu genting (K) dan p_c ialah tekanan genting (kPa). Sebagai seorang jurutera kimia, anda diminta untuk menentukan jumlah bahan api metana yang boleh disimpan di dalam tangki 3 m³ pada suhu - 40°C dengan tekanan 65,000 kPa. Suhu dan tekanan genting bagi metana diberikan sebagai 191 K dan 4,600 kPa. Gunakan kaedah bahagi dua sama dengan tekaan awal v₁ = 0.002 (m³/kg) dan v_u = 0.004 (m³/kg). Hentikan lelaran apabila ralat anggaran relatif peratusan mutlak adalah kurang dari 3.0%.

[12 markah]

...8/-

3. [a] PQ Brothers Sdn. Bhd. is a big company that produces toys namely X, Y and Z. In order to produce the toy properly, three types of raw materials are required: plastic, metal and epoxy. The quantities for each of the raw materials required to produce each of the toy is given in Table Q.3 [a] below.

Table Q. 3 [a] : Amount of raw materials required to produce toy X, Y and Z

Raw materials	Plastic (g/toy)	Metal (g/toy)	Epoxy (g/toy)
X	15	2.5	10
Y	17	3.3	12
Z	19	4.2	16

If each day, there are only 2,120 g of plastic, 434 g of metal and 1,640 g of epoxy available, how many X, Y and Z toys can be produced assuming that all the raw materials must be used up each day. Solve your problem using LU Decomposition method. Use at least 5 significant digits in your calculation.

[13 marks]

- [b] The Redlich-Kwong equation of state is given by

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)\sqrt{T}}$$

where R = the universal gas constant (0.518 kJ/kg.K), T = absolute temperature (K), p = absolute pressure (kPa) and v = specific volume of a pure gas (m^3/kg). The parameters a and b are calculated by

$$a = 0.427 \frac{R^2 T_c^{2.5}}{p_c} \qquad b = 0.0866 R \frac{T_c}{p_c}$$

where T_c is the critical temperature (K) and p_c is the critical pressure (kPa). As a chemical engineer, you are asked to determine the amount of methane fuel that can be held in a $3 m^3$ tank at a temperature of $-40^\circ C$ with a pressure of 65,000 kPa. The critical temperature and pressure for methane is given as 191 K and 4,600 kPa, respectively. Use Bisection method with initial guesses of $v_l = 0.002 (m^3/kg)$ and $v_u = 0.004 (m^3/kg)$. Stop the iteration when the absolute percent relative approximation error is less than 3.0%.

[12 marks]

Bahagian B : Jawab mana-mana DUA soalan.

Section B : Answer any TWO questions.

4. Data berikut adalah diberi.

$(t-1)$	w
-1	6
-0.5	4.83
0	3.70
0.5	3.15
1	2.41
1.5	1.83
2	1.49
2.5	1.21
3	0.96
3.5	0.73
4	0.64

[a] Berdasarkan data yang diberi di atas, plotkan graf (w adalah bergantung kepada t) dengan menggunakan graf skala lurus.

[8 markah]

[b] Berdasarkan kepada graf yang telah diplotkan di [a], pilih fungsi (kuasa, eksponan, logaritma atau separa lengkungan) yang sesuai dengan data tersebut dan sila tentu sahkan jawapan anda.

[5 markah]

[c] Tentukan pekali fungsi berdasarkan fungsi yang dipilih di [b] dengan menggunakan graf. (Petunjuk: fungsi pelelurusan)

[12 markah]

4. The following data points are given.

$(t-1)$	w
-1	6
-0.5	4.83
0	3.70
0.5	3.15
1	2.41
1.5	1.83
2	1.49
2.5	1.21
3	0.96
3.5	0.73
4	0.64

...10/-

[a] Plot the given data point (w as a function of t) using the linear axis.

[8 marks]

[b] According to the plots in [a] choose a function (power, exponential, logarithmic or reciprocal) that can best fit the data points and please justify your answer.

[5 marks]

[c] Determined the coefficient of the function chosen in [b] using the graph (Hint: Linearization function)

[12 marks]

5. [a] Selesaikan masalah berikut dengan menggunakan kaedah Runge-Kutta tertib keempat

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 0.1 \frac{dy}{dx} + 2y = 0$$

dimana $y(0) = 4$ dan $y' = 0$. Selesaikan dari $x = 0$ hingga 4 dengan $h = 1$

[15 markah]

[b] Seorang jurutera kimia berminat untuk menentukan keadaan operasi yang boleh memaksimumkan hasil, y , sesuatu proses. Dua pembolehubah kawalan mempengaruhi y , iaitu masa, t dan suhu tindakbalas, T . Pada masa ini jurutera tersebut menjalankan operasi pada masa tindakbalas proses 35 minit dan suhu tindakbalas berada pada 155°C dan menghasilkan hasil sekitar 40%. Memandangkan pada kawasan operasi tersebut kebarangkalian untuk mendapatkan keadaan optimum adalah sedikit, jurutera tersebut bertindak menjalankan beberapa ujikaji pada sekitar 30 hingga 40 minit masa tindakbalas dan suhu tindakbalas pada julat 150°C hingga 160°C . Persamaan emperik yang berikut diperolehi dan hanya sesuai digunakan berdasarkan unit yang dinyatakan di atas:

$$y = \alpha + \beta t + \gamma T + \theta tT$$

Dengan menggunakan data ujikaji berikut, tentukan pekali-pekali model tersebut (Petunjuk: Gunakan cara *Gauss Elimination*)

Masa Tindakbalas, t (saat)	Suhu, T (Kelvin)	Hasil, y
1800	423	39.3
1800	433	40.0
2400	423	40.9
2400	433	41.5
2100	428	40.3
2100	428	40.5
2100	428	40.2

[10 markah]

...11/-

5. [a] Solve the following problem with the fourth-order Runge-Kutta method

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 0.1 \frac{dy}{dx} + 2y = 0$$

where $y(0) = 4$ and $y' = 0$. Solve from $x = 0$ to 4 with $h = 1$

[15 marks]

- [b] A chemical engineer is interested in determining the operating condition that maximizes the yield, y of a process. Two controllable variables influence y , the yield: the reaction time, t , and the reaction temperature, T . The engineer is currently operating the process reaction time of 35 min and a temperature of 155 °C, which results in an yield about 40 %. Since it is unlikely that this region contains optimum, she decides to run a few experiment around 30 to 40 min reaction time and in the range of 150 to 160 °C. The following empirical equation is fitted based on the unit mentioned in the statement above:

$$y = \alpha + \beta t + \gamma T + \theta tT$$

Using the experiment data given below, estimate the model parameters (Hint: used Gauss Elimination methods)

Reaction Time, t (second)	Temperature, T (Kelvin)	Yield, y
1800	423	39.3
1800	433	40.0
2400	423	40.9
2400	433	41.5
2100	428	40.3
2100	428	40.5
2100	428	40.2

[10 marks]

6. [a] Dalam menentukan jumlah berat mangkin yang diperlukan untuk mencapai penukaran 89.5 % toluena kepada benzena di dalam reaktor turus terpadat, persamaan berikut hendaklah dipatuhi

$$W = F_0 \int_0^X \frac{dX}{-r(X)}$$

Di mana W adalah berat mangkin dalam kg, F_0 adalah kadar aliran molar toluena dalam mol/min, X adalah pecahan penukaran dan r adalah kadar dalam mol/kg-mangkin/minit. Data berikut diperolehi:

$X[-]$	$-r(X) \times 10^{-3}$, mol/kg-mangkin/minit
0.0	2.24
0.1	1.89
0.2	1.52
0.4	96.3
0.6	53.4
0.8	21.8
0.895	10.3

...12/-

Dengan menggunakan kombinasi peraturan Trapezoidal, peraturan Simpson 1/3, dan peraturan Simpson 3/8, tentukan jumlah mangkin yang diperlukan jika F_0 adalah 11.175 mol/menit

[13 markah]

- [b] Dalam satu tindakbalas kimia, A ditukarkan kepada B. Persamaan Arrhenius, yang ditunjukkan di bawah, telah digunakan untuk meramal pemalar kadar tindakbalas itu:

$$k(T) = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$$

di mana A , E_a , R dan T masing-masing menandakan pekali Arrhenius, tenaga pengaktifan, pemalar gas dan suhu.

- [i] Terbitkan tertib pertama dan tertib kedua pengembangan siri Taylor k bagi T_0 .

[5 markah]

- [ii] Diberi $A = 7.2 \times 10^{10} \text{ min}^{-1}$, $E_a/R = 8750K$ dan $T_0 = 300K$, gunakan pengembangan siri Taylor tertib pertama dan tertib kedua di atas untuk meramal pemalar kadar tindakbalas pada $T = 310K$ dan peratus ralat bagi ramalan daripada nilai sebenar. Peratus ralat ramalan boleh dikira dengan menggunakan formula di bawah:

$$e_{\text{ramalan}} = \left| \frac{k_{\text{sebenar}} - k_{\text{ramalan}}}{k_{\text{sebenar}}} \right| \times 100\%$$

[4 markah]

- [iii] Berikan ulasan perhubungan di antara kejituan ramalan dengan tertib pengembangan siri Taylor.

[3 markah]

6. [a] *In order to determined the catalyst weight necessary to achieve 89.5% conversion of toluene to benzene in a packed-bed reactor, one need to use the following expression*

$$W = F_0 \int_0^X \frac{dX}{-r(X)}$$

Where W is the weight of catalyst in kg, F_0 is the molar flow rate of toluene in mol/min, X is the fractional conversion and r is the rate in mol/kg-cat/min. The following data is available:

$X[-]$	$-r(X) \times 10^3, \text{ mol/kg-cat/min}$
0.0	2.24
0.1	1.89
0.2	1.52
0.4	96.3
0.6	53.4
0.8	21.8
0.895	10.3

...13/-

If F_0 is 11.175 mol/min, determine the amount catalyst necessary using a combination of the Trapezoidal Rule, Simpson's 1/3 rule, and Simpson's 3/8 rule

[13 marks]

[b] In a chemical reaction, A was converted to B. The Arrhenius equation, which has the following form, is used to predict the rate constant of the reaction:

$$k(T) = Ae^{\frac{E_a}{RT}}$$

where A, E_a, R and T denote Arrhenius coefficient, activation energy, gas constant and temperature, respectively.

[i] Derive the first-order and second-order Taylor series expansions of k around T_0 .

[5 marks]

[ii] Given $A = 7.2 \times 10^{10} \text{ min}^{-1}$, $E_a/R = 8750\text{K}$ and $T_0 = 300\text{K}$, use the above first-order and second-order Taylor series expansions to predict the reaction rate constant at $T = 310\text{K}$ and their associated percentage of prediction error with respect to the true value. Note that the percentage of the prediction error can be calculated by the following formula:

$$e_{\text{prediction}} = \left| \frac{k_{\text{true}} - k_{\text{predicted}}}{k_{\text{true}}} \right| \times 100\%$$

[4 marks]

[iii] Comment on the relationship between the accuracy of the prediction and the order of Taylor series expansion.

[3 marks]

Lampiran

RK Fourth order Method

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

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

$$k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h)$$

$$k_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h)$$

Numerical integration

Trapezoidal Rule

$$I \cong (b - a) \frac{f(b) - f(a)}{2}$$

Simpson's 1/3rd rule

$$I \cong (b - a) \frac{[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]}{6}$$

Simpson's 3/8th rule

$$I \cong (b - a) \frac{[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]}{8}$$

Multiple Linear Regression

Case 1:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x_2 + e$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_{1,i} & \sum x_{2,i} \\ \sum x_{1,i} & \sum x_{1,i}^2 & \sum x_{1,i}x_{2,i} \\ \sum x_{2,i} & \sum x_{1,i}x_{2,i} & \sum x_{2,i}^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1,i}y_i \\ \sum x_{2,i}y_i \end{Bmatrix}$$

Case 2:

$$y = a_0 + a_1x + a_2x_2 + a_3x_3 + e$$

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_1 & \sum x_2 & \sum x_3 \\ \sum x_1 & \sum x_1^2 & \sum x_1 * x_2 & \sum x_1 * x_3 \\ \sum x_2 & \sum x_1 * x_2 & \sum x_2^2 & \sum x_2 * x_3 \\ \sum x_3 & \sum x_1 * x_3 & \sum x_2 * x_3 & \sum x_3^2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum y \\ \sum x_1 * y \\ \sum x_2 * y \\ \sum x_3 * y \end{Bmatrix}$$