

---

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination  
Academic Session 2007/2008

October/November 2007

**EKC 342 – Computational Method In Chemical Engineering**  
**[Kaedah Pengiraan Kejuruteraan Kimia]**

Duration : 3 hours  
[Masa : 3 jam]

---

Please check that this examination paper consists of NINE pages of printed material and ONE page of Appendix before you begin the examination.

*[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi SEMBILAN muka surat yang bercetak dan SATU muka surat Lampiran sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]*

**Instructions:** Answer **FOUR** (4) questions. Answer **TWO** (2) questions from Section A. Answer **TWO** (2) questions from Section B.

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

You may answer a question either in Bahasa Malaysia or in English.

*[Anda dibenarkan menjawab soalan sama ada dalam Bahasa Malaysia atau Bahasa Inggeris.]*

Section A : Answer any TWO questions.

Bahagian A : Jawab mana-mana DUA soalan.

- 1. [a] Chemical and mechanical engineers often need to know the vapor pressure of water for specific temperature. One approach requires the engineer to always refer to the infamous steam tables. Another approach seeks to use a simple model to predict the vapor pressure given the temperature as shown in Table Q. 1.[a].

*Jurutera kimia dan mekanik biasanya perlu mengetahui tekanan wap untuk air pada sesuatu bacaan suhu. Salah satu pendekatan yang biasa digunakan ialah dengan merujuk kepada jadual stim. Selain dari itu, cara yang lebih mudah ialah dengan menggunakan model untuk meramal tekanan wap dengan bacaan suhu diberikan seperti ditunjukkan dalam Jadual S.1.[a].*

Table Q. 1.[a] : The vapor pressure of water  
 Jadual S. 1.[a] : Tekanan wap untuk air

Temp (°C) Suhu (°C)	Vapor Pressure ( mmHg) Tekanan gas ( mmHg)
0	4.6
10	9.2
20	17.5
30	31.8
40	55.3
50	92.5
60	149.4
70	233.7
80	355.1
90	525.8
100	760.0

- [i] Plot the given data point vapor pressure (mmHg) in the function of temperature (K) using the linear axis and choose a function (power, exponential, logarithmic or reciprocal) that can best fit the data points and please justify your answer.

*Plotkan graf tekanan wap (mmHg) melawan suhu (Kelvin) dengan menggunakan graf paksi lurus, dan berdasarkan kepada graf yang telah diplotkan tersebut, pilih fungsi (kuasa, eksponan, logaritma atau separa lengkungan) yang sesuai dengan titik data tersebut dan sila nyatakan kewajaran jawapan anda.*

[6 marks/markah]

- [ii] Determine the coefficient of the function chosen in [i] using graph (Hint: Linearization function)

*Tentukan pekali bagi fungsi yang dipilih di [i] dengan menggunakan graf. (Petunjuk: fungsi pelelurusan)*

[12 marks/markah]

- [b] In order to determine the average conversion,  $\bar{X}$ , for a first order liquid-phase irreversible reaction in a reactor with completely segregated fluid mixing, the process engineer need to use the following expression

*Dalam menentukan penukaran purata,  $\bar{X}$ , untuk tindakbalas tak berbalik fasa cecair tertib pertama di dalam reaktor dengan pencampuran bendalir terasing penuh, jurutera proses perlu menggunakan rangkap berikut*

$$\bar{X} = \int_0^{\infty} X(t)E(t)dt$$

where  $X(t)$  is the conversion and  $E(t)$  is the residence time distribution function. The following RTD measurements are shown in Table Q.1.[b].

*Dimana  $X(t)$  ialah penukaran dan  $E(t)$  ialah fungsi agihan masa mastautin. Bacaan pengukuran RTD adalah tersedia seperti ditunjukkan dalam Jadual S.1.[b].*

Table Q. 1.[b] : RTD measurements  
 Jadual S.1.[b] : Bacaan Pengukuran RTD

t, min	E(t),min <sup>-1</sup>	X(t)
0	0	0
1	0.02	0.09
2	0.1	0.18
3	0.16	0.26
5	0.2	0.33
7	0.12	0.45
9	0.06	0.55
11	0.03	0.63
13	0.012	0.7
15	0	0.75

Using a combination of the Simpson's 1/3 rule and Simpson's 3/8 rule, compute the average conversion for a first order liquid-phase irreversible reaction in the reactor.

*Dengan menggunakan kombinasi aturan Simpson's 1/3, dan Simpson's 3/8, kirakan penukaran purata untuk tindakbalas tak berbalik fasa cecair tertib pertama di dalam reaktor tersebut.*

[7 marks/markah]

2. [a] [i] Consider a chemical process that uses bacteria to produce an antibiotic in the pharmaceutical industry. The reactor has been contaminated with a protozoa that consumes the bacteria. Predator-prey equations are used to model the system as shown below;

*Pertimbangkan suatu proses kimia yang menggunakan bakteria untuk menghasilkan antibiotik di dalam industri farmaseutik. Sebuah reaktor telah dicemari dengan protozoa yang akan memakan bakteria. Persamaan pemangsa-mangsa telah digunakan untuk memodelkan sistem ini seperti yang ditunjukkan di bawah;*

...4/-

$$\frac{dx}{dt} = 1.2x - 0.6xy$$

$$\frac{dy}{dt} = -0.8y + 0.2xy$$

Where x represent bacteria (prey) and y represent protozoa (predator) and  $x(0) = 2$ , while  $y(0) = 1$ . By using 4<sup>th</sup> order Runge-Kutta (RK) method, determine how much is the bacteria and protozoa at the end of 4 hours operation? How would you decide on step size,  $h$ , to be used in the calculations?

*Di mana x adalah bakteria (mangsa) dan y adalah protozoa (pemangsa) dan  $x(0) = 2$  sementara  $y(0) = 1$ . Dengan menggunakan kaedah Runge-Kutta tertib keempat, tentukan berapa banyakkah bakteria dan protozoa di akhir 4 jam operasi? Bagaimanakah anda menentukan saiz langkah,  $h$ , yang patut digunakan di dalam pengiraan tersebut?*

[13 marks/markah]

- [ii] Show in proper programming steps on how you would solve the problem in Q.2.[a] [i] using Matlab<sup>TM</sup>.

*Tunjukkan dengan langkah pengaturcaraan Matlab<sup>TM</sup> yang lengkap bagaimana anda menyelesaikan masalah di S.2.[a][i]*

[6 marks/markah]

- [b] Approximate the following function at the given value of x. Use the first derivatives approximation ( $f'$ ) using FDA, BDA and CDA with 2-points approximation.

*Anggarkan fungsi berikut pada nilai x yang diberikan. Gunakan kaedah hampiran terbitan pertama ( $f'$ ) menggunakan FDA, BDA dan CDA dengan penghampiran 2-titik.*

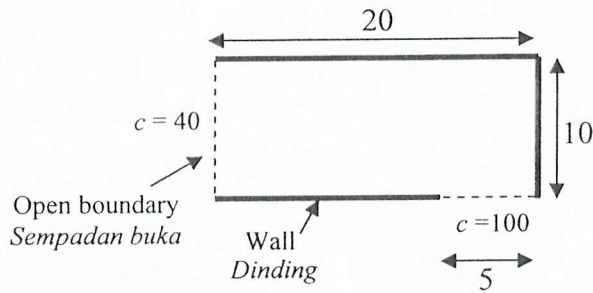
$$f(x) = \tan\left(\cos\left(\frac{\sqrt{5} + \sin(x)}{1 + x^2}\right)\right); \quad x = \frac{1 + \sqrt{5}}{3}, \quad h = 0.2.$$

[6 marks/markah]

3. [a] Develop the Laplacian difference equations to compute the steady state distribution of concentration,  $c$  for tank shown as below:

*Bangunkan persamaan bezaan Laplace bagi pengiraan pengagihan kepekatan,  $c$  pada keadaan mantap bagi tangki di bawah:*

...5/-



The PDE governing this system is  
 Persamaan kebezakan separa yang mengawal sistem ini ialah

$$D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - kc = 0$$

and the boundary conditions are as shown. Employ a value of 0.5 for  $D$  and 0.1 for  $k$ .

Use  $\Delta x$  and  $\Delta y = 5$ . Use Leblmann's method to solve for the concentration of the tank at steady state (calculate the concentration at 10 points). Use a relaxation factor of 1.2 and iterate 1 time. Start from the point  $i = 1, j = 0$  with the assumption that all the unknown points are zeros.

dan keadaan sempadan adalah seperti yang ditunjuk. Gunakan nilai 0.5 bagi  $D$  dan 0.1 bagi  $k$ .

Gunakan  $\Delta x$  dan  $\Delta y = 5$ . Gunakan cara Leblmann untuk menyelesaikan kepekatan bagi tangki pada keadaan mantap (kirakan kepekatan pada 10 titik). Gunakan faktor santaian 1.2 dan lelar 1 kali. Bermula dari titik  $i = 1, j = 0$  dengan anggapan bahawa semua titik yang tidak diketahui kepekataannya ialah kosong.

[15 marks/markah]

- [b] The temperature of a system was found to have the following relationship with a dimensionless quantity,  $x$ .

Suhu sebuah sistem didapati mempunyai hubungan dengan kuantiti tidak berdimensi  $x$  seperti yang berikut.

$$T(x) = 50 + 5x - 8x^2 - 2x^3 - 0.9\sin(x), \quad -1 \leq x \leq 1$$

Use the Golden-section search method to find the maximum of the function ( $x_l = 0.1, x_u = 0.3, \epsilon_s = 15\%$ ).

Gunakan kaedah pencarian Golden-section untuk mencari maksimum bagi fungsi tersebut ( $x_l = 0.1, x_u = 0.3, \epsilon_s = 15\%$ ).

[10 marks/markah]

...6/-

Section B : Answer any TWO questions.

Bahagian B : Jawab mana-mana DUA soalan.

4. [a] Employ the Newton's method ( $x_0 = -0.2$ ,  $\epsilon_s = 1\%$ ) to find the maximum of the following function:

*Gunakan cara Newton ( $x_0 = -0.2$ ,  $\epsilon_s = 1\%$ ) untuk mencari maksimum bagi fungsi yang berikut:*

$$T(x) = 50 + 5x - 8x^2 - 2x^3 - 0.9\sin(x), \quad -1 \leq x \leq 1$$

[10 marks/markah]

- [b] A 4 cm long thin rod is insulated at all point except at its ends. At time  $t = 0$ , the temperature of the whole rod is  $30^\circ\text{C}$  and the boundary conditions are fixed for all times at  $T(0) = 150^\circ\text{C}$  and  $T(10) = 55^\circ\text{C}$ . Given  $\Delta x = 1$  cm,  $\Delta t = 1$  s and  $k = 0.944$  cm<sup>2</sup>/s. Calculate the temperature distribution at  $t = 2$ s using the simple implicit method. The Laplacian difference equations for the system is given as

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l \quad \text{where } \lambda = k \Delta t / (\Delta x)^2$$

*Sebatang rod lurus berukuran 4 sm panjang telah ditebat pada semua bahagian kecuali pada dua penghujungnya. Pada masa  $t = 0$ , suhu rod ialah  $30^\circ\text{C}$  dan keadaan-keadaan sempadan telah ditetapkan pada  $T(0) = 150^\circ\text{C}$  dan  $T(10) = 55^\circ\text{C}$ . Diberi  $\Delta x = 1$  sm,  $\Delta t = 1$  s dan  $k = 0.944$  sm<sup>2</sup>/s. Kirakan pengagihan suhu pada  $t = 2$ s menggunakan cara tersirat mudah. Persamaan bezaan Laplace bagi sistem diberi seperti berikut*

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l \quad \text{di mana } \lambda = k \Delta t / (\Delta x)^2$$

[15 marks/markah]

5. [a] A local Small-Medium Industries (SMI) factory produces a variety of crisps namely Tiny-cut crisp, 'Tempeyek' crisp and Helical-cut crisp. A blend of three major raw material enhances the quality and taste of these crisps. The recipes to produce each crisps are given in Table Q. 5.[a] below.

*Sebuah kilang Industri Kecil Sederhana (IKS) mengeluarkan pelbagai jenis kerepek iaitu kerepek potongan kecil, kerepek tempeyek dan kerepek potong heliks. Campuran tiga bahan mentah utama dapat menambah kualiti dan rasa kepada kerepek-kerepek tersebut. Resipi bagi pembuatan kerepek-kerepek tersebut adalah seperti dalam Jadual S. 5.[a] di bawah.*

Table Q.5.[a] : Amount of raw material required to produce the crisps.  
 Jadual S.5.[a]: Jumlah bahan mentah yang diperlukan untuk pengeluaran kerepek-kerepek tersebut.

	Recipe (g/packet crisp) Resipi (g/paket kerepek)		
	Wheat flour Tepung gandum	Chilli powder Serbuk cili	Curry powder Serbuk kari
Tiny-cut Potongan kecil	18	0	10
'Tempeyek' Tempeyek	17	3.3	12
Helical-cut Potongan heliks	19	4.2	16

Hourly availability of wheat flour, chili powder and curry powder is 2120 g, 434 g and 1640 g, respectively. Calculate the quantities of production using the Gauss Elimination method with assumption that all material must be used up each hour. Verify your answer.

Bekalan tepung gandum, serbuk cili dan serbuk kari setiap jam adalah 2120 g, 434 g dan 1640 g. Kirakan kuantiti pengeluaran menggunakan kaedah Penyingkiran Gauss dengan anggapan bahawa semua bahan mentah perlu digunakan setiap jam. Sahkan jawapan anda.

[10 marks/markah]

- [b] A new research shows that an additional of chilli powder into the recipe for making Tiny-cut crisp can enhance its taste. The suggested amount is 2.5 g/packet crisp. At the same time, the amount of wheat flour in Tiny-cut crisp is decreased by 3 g/packet crisp.

What are the new quantities of Tiny-cut crisp, 'Tempeyek' crisp and Helical-cut crisp can be produced due to the new recipe research? Please use the LU Decomposition method. Use at least 5 significant digits in the calculation.

Satu kajian menunjukkan penambahan serbuk cili kepada resipi pembuatan kerepek potongan kecil dapat menambah rasanya. Jumlah yang dicadangkan ialah 2.5 g/paket kerepek. Pada masa yang sama, jumlah tepung gandum dalam kerepek potongan kecil dikurangkan sebanyak 3 g/paket kerepek.

Berapakah jumlah pengeluaran yang baru bagi kerepek potongan kecil kerepek, tempeyek dan kerepek potongan heliks menurut kajian resipi yang baru? Sila gunakan kaedah penguraian LU. Gunakan sekurang-kurangnya 5 angka bererti dalam pengiraan tersebut.

[12 marks/markah]

- [c] Discuss the flaws of the Gauss Elimination method.

Bincangkan kekurangan kaedah Penyingkiran Gauss.

[3 marks/markah]

6. A new carbon dioxide gas tank with a volume of  $2.5 \text{ m}^3$  was installed in a Petronas plant. The original design was from a German consultant with specification of  $T = 20^\circ\text{C}$  and  $P = 9.38 \text{ atm}$ . However, your manager wanted the tank to hold the gas at temperature  $30^\circ\text{C}$  and he wanted you to recalculate the amount of  $\text{CO}_2$  (in mol) that can be stored in the tank. In order to calculate this, the Soave-Redlich-Kwong (SRK) equation of state is suitable:

*Sebuah tangki gas karbon dioksida yang baru dengan isipadu  $2.5 \text{ m}^3$  telah dipasang di loji Petronas. Rekabentuk asal dengan spesifikasi  $T = 20^\circ\text{C}$  dan  $P = 9.38 \text{ atm}$  adalah dari sebuah jururunding Jerman. Namun begitu, pengurus anda menghendaki tangki tersebut menyimpan gas pada suhu  $30^\circ\text{C}$  dan beliau mahu anda mengira semula jumlah  $\text{CO}_2$  (dalam mol) yang boleh disimpan. Untuk pengiraan ini, persamaan keadaan 'Soave-Redlich-Kwong' (SRK) adalah sesuai digunakan:*

$$P = \frac{RT}{\hat{V} - b} - \frac{\alpha a}{\hat{V}(\hat{V} + b)}$$

where the parameters  $a$ ,  $b$  and  $\alpha$  are empirical function of the critical temperature,  $T_c$  and pressure,  $P_c$  and the Pitzer acentric factor,  $\omega = 0.225$  and the system temperature,  $T$ .

Where  $R =$  the universal gas constant ( $0.08206 \text{ L.atm/mol.K}$ ),  $T =$  absolute temperature (K),  $P =$  absolute pressure (atm) and  $\hat{V} =$  specific volume of pure gas ( $\text{L/mol}$ ). The parameters 'a' and 'b' are calculated by :

*di mana parameter  $a$ ,  $b$  dan  $\alpha$  adalah fungsi empirikal bagi suhu kritikal,  $T_c$  dan tekanan kritikal,  $P_c$  dan faktor tak sepusat Pitzer,  $\omega = 0.225$  dan suhu sistem,  $T$ .*

*Di mana  $R =$  pemalar gas universal ( $0.08206 \text{ L.atm/mol.K}$ ),  $T =$  suhu mutlak (K),  $P =$  tekanan mutlak (atm) dan  $\hat{V} =$  isipadu tentu gas tulen ( $\text{L/mol}$ ). Parameter 'a' dan 'b' boleh dikira dengan :*

$$a = 0.42747 \frac{(RT_c)^2}{P_c}$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

$$m = 0.48508 + 1.55171 \omega - 0.1561 \omega^2$$

$$T_r = T/T_c$$

$$\alpha = [1 + m(1 - \sqrt{T_r})]^2$$

The critical temperature and pressure for  $\text{CO}_2$  are given as  $304.2 \text{ K}$  and  $72.9 \text{ atm}$ , respectively.

*Suhu kritikal dan tekanan kritikal bagi  $\text{CO}_2$  adalah masing-masing  $304.2 \text{ K}$  dan  $72.9 \text{ atm}$ .*

...9/-



- [a] Use the graphical method in order to determine the initial guesses for the false-position method. Use the initial upper ( $\hat{V}_u$ ) and lower guess ( $\hat{V}_l$ ) values as such

$$\hat{V}_u = \text{your graphical answer} + 0.5$$

$$\hat{V}_l = \text{your graphical answer} - 0.5$$

Stop the iteration when the absolute percent relative approximation error is less than 3%.

*Gunakan kaedah bergraf untuk menentukan tekaan awal bagi kaedah kedudukan palsu. Gunakan nilai tekaan awal atas ( $\hat{V}_u$ ) dan tekaan awal bawah ( $\hat{V}_l$ ) seperti*

$$\hat{V}_u = \text{jawapan bergraf anda} + 0.5$$

$$\hat{V}_l = \text{jawapan bergraf anda} - 0.5$$

*Hentikan lelaran apabila ralat anggaran relatif peratusan mutlak mencecah kurang daripada 3%.*

*[21 marks/markah]*

- [b] Comment on the advantages and disadvantages of bisection and false-position method.

*Komen kelebihan dan kekurangan kaedah-kaedah bahagian dua sama dan kedudukan palsu.*

*[4 marks/markah]*