

Pengembangan model dan simulasi reaktor unggun tetap untuk proses oksidasi parsial katalitik Metana menjadi gas sintesis

Satya Adhika Putra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=81532&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Dalam penelitian ini dikembangkan model reaktor unggun tetap (fixed bed) untuk proses oksidasi parsial katalitik, yaitu berupa model heterogen satu dimensi dengan kondisi adiabatik. Pengaruh dispersi aksial massa dalam reaktor dipertimbangkan dengan menggunakan pendekatan koefisien difusivitas efektif aksial, dan dispersi aksial energi dengan pendekatan koefisien konduktivitas efektif panas. Model heterogen ini membedakan kedua fasa pada reaktor, yaitu fasa solid berupa pelet katalis, dan fasa gas pada ruang antar pelet. Model ini juga mempertimbangkan adanya batasan transfer massa dan panas antar fasa, juga batasan difusi pori dalam pelet katalis. Model reaktor ini menggunakan mekanisme reaksi oksidasi parsial langsung ('direct oxidation') dari Hickman dan Schmidt, yang melibatkan 19 reaksi elementer dari adsorpsi, desorpsi dan reaksi permukaan.

Penyelesaian problema difusi-reaksi dalam partikel katalis skala pelet dilakukan dengan metoda kolokasi ortogonal. Sedangkan persamaan-persamaan diferensial parsial eliptik skala reaktor diselesaikan dengan menggunakan 'formulasi control volume' atas persamaan neraca massa, panas dan momentum.

Proses oksidasi parsial katalitik dipelajari dengan melalui pemodelan reaktor beserta proses reaksi yang terjadi dan dengan melakukan simulasi komputer. Model reaktor unggun tetap tersebut disimulasikan pada beberapa kondisi proses, dengan melakukan variasi tekanan masuk reaktor, diameter partikel katalis pada kondisi tekanan atmosfer sesuai dengan Hickman dan Schmidt. Selanjutnya dicoba melakukan simulasi pada kondisi tekanan tinggi untuk mendekati ke kondisi reaktor industri.

Hasil secara menyeluruh menunjukkan bahwa problema proses oksidasi parsial katalitik yang kompleks itu dapat digambarkan dengan baik melalui model heterogen yang dikembangkan tersebut. Model tersebut menghasilkan profil konsentrasi intrapartikel skala pelet, serta profil konsentrasi dan temperatur pada koordinat aksial skala reaktor, yang menggambarkan kinerja reaktor.

Hasil-hasil yang diperoleh terlihat sesuai dengan Hickman dan Schmidt, diperoleh bahwa H₂ dan CO merupakan produk primer dari 'proses langsung', serta dihasilkan sedikit produk H₂O dan CO₂. Simulasi menunjukkan bahwa oksidasi parsial katalitik merupakan proses dengan reaksi yang berlangsung cepat, dengan fluks produksi maupun konsumsi komponen terutama terjadi di awal reaktor (sekitar seperempat bagian dan masukan reaktor), untuk selanjutnya manumit dengan cepat. Ini menghasilkan profil yang curam pada awal reaktor dan selanjutnya mengarah ke profil mendatar. Dengan reaksi yang cepat tersebut, didapatkan bahwa reaksi berlangsung hanya pada zone reaksi yang tipis dari permukaan partikel katalis (10%). Bagian selanjutnya dari katalis tidak lagi terjadi reaksi, profil menjadi mendatar yang disebut dengan

zone 'burn out'.

Model ini selanjutnya dapat digunakan untuk penelitian yang lebih jauh terhadap proses oksidasi parsial katalitik dan untuk mendisain reaktor unggul tetap berskala industri, dengan melakukan lebih banyak studi variasi variabel proses, serta didukung dengan studi verifikasi atas model ini. Dengan model reaktor ini juga dimungkinkan.

ABSTRACT

A fixed bed reactor model for catalytic partial oxidation is developed by applying a heterogeneous one dimensional model with adiabatic condition. The axial dispersion of mass is taken into account by axial effective diffusion coefficient, and the axial dispersion of enthalpy by axial effective thermal conductivity. The heterogeneous model distinguishes between the two phases in the reactor; a solid phase consists of the catalyst pellets in the reactor, and the fluid phase consists of void phase between the pellets. The model considers interphase mass and heat transfer limitation, also the pore diffusion limitation in catalyst pellet.

This model uses a step model reaction scheme involving 19 elementary reaction of adsorption, desorption and surface reaction proposed by Hickman and Schmidt, which known as a direct partial oxidation process.

Method of orthogonal collocation is used to discretize the diffusion-reaction problem in intraparticle pellet scale, and a set of elliptic partial differential equation in reactor scale is solved using finite volume formulation over the balance equations of mass, heat and momentum.

The process of catalytic is studied through numerical modeling and computer simulation. The fixed bed reactor model is simulated at several processes conditions by making variation on reactor inlet temperature, catalyst particle diameter at atmospheric pressure reactor according to Hickman and Schmidt. Then it is tried to simulate at higher pressure closing to the condition of industrial reactor.

The overall results show that this complex catalytic partial oxidation process can be well described by this heterogeneous model. The model results on both intraparticle pellet scale profile of concentration, and the axial reactor scale temperature and concentration profile.

The results are in satisfy agreement with Hickman and Schmidt, since H₂ and CO are primary product of direct oxidation process, and less H₂O and CO₂ produced. The simulations show that catalytic partial oxidation is a fast reacting system, which most reacting components production fluxes resulted at the beginning part of reactor and the rest part are very low. This makes a steep profile at the beginning part of reactor and become flat toward the end of reactor. Since the reaction is very fast, it is founded that in catalyst particle pore there is a thin reaction zone where reaction takes place. The other part of the particle is called 'burn-out' zone, with no reaction take place anymore, there will be no concentration profile in this zone.

This model can be used for further investigation of catalytic partial oxidation process and in designing a fixed bed industrial reactor scale, by making more process variation study, also making a verification study of this model. It is also possible to apply other kinetics of catalytic partial oxidation which implement more

complete and complex reaction mechanism.</i>