

Pemodelan Sintesis Gamma Valerolactone Melalui Hidrogenasi Asam Levulinat pada Katalis Ru/C di dalam Reaktor Unggun Diam = Modeling of Gamma Valerolactone Synthesis from Levulinic Acid Hydrogenation over Ru/C Catalyst in Fixed Bed Reactor

Melati Permata Sari, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920559314&lokasi=lokal>

Abstrak

Penelitian ini dilakukan untuk mendapatkan model reaktor unggun diam untuk reaksi hidrogenasi asam levulinat menjadi Gamma Valerolactone (GVL) dengan katalis Ru/C, mendapatkan parameter kinetika reaksi sintesis GVL, dan mendapatkan pengaruh parameter proses dan parameter geometri terhadap kinerja reaktor. Model matematika reaktor unggun diam dikembangkan dari persamaan neraca massa, neraca momentum (hukum Darcy), dan neraca energi. Model yang telah dikembangkan kemudian disimulasikan menggunakan software COMSOL Multiphysics 5.5 untuk mendapatkan parameter kinetika reaksi hidrogenasi asam levulinat menjadi GVL dengan menyesuaikan hasil simulasi dengan data eksperimen. Energi aktivasi yang didapatkan untuk reaksi hidrogenasi asam levulinat, reaksi maju esterifikasi HPA (4-Hydroxypentanoic acid), dan reaksi mundur esterifikasi HPA berturut-turut adalah 22,7 kJ/mol, 30,1 kJ/mol, dan 33,1 kJ/mol dengan range AARD (average absolute relative deviation) antara 1,385-11,111%. Hasil parameter kinetika yang didapatkan digunakan untuk melakukan studi sensitivitas dengan mensimulasikan reaktor pada kondisi non-isothermal dengan ukuran panjang 4-6 m dan diameter 5-15 cm dengan konfigurasi aliran searah kebawah. Hasil simulasi menunjukkan bahwa konversi asam levulinat dan yield GVL akan naik seiring dengan naiknya temperatur umpan, tekanan umpan, dan panjang reaktor, sedangkan konversi asam levulinat dan yield GVL akan turun seiring naiknya kecepatan masuk gas, naiknya kecepatan masuk cairan, dan semakin besarnya diameter reaktor. Setelah memvariasikan parameter proses dan parameter geometri didapatkan kondisi yang memberikan konversi asam levulinat dan yield GVL terbaik adalah pada temperatur 403 K, tekanan 45 bar, panjang reaktor 6 m, kecepatan gas 0,138 m/s, kecepatan cairan 0,00623 m/s, dan diameter reaktor 5 cm.

..... The purposes of this research are to obtain a fixed bed reactor model for the hydrogenation reaction of levulinic acid (LA) to gamma valerolactone (GVL) with Ru / C catalyst, to obtain the kinetics parameters for GVL synthesis, and to understand the effect of process parameters and geometric parameters on reactor performance. Mathematical models for fixed bed reactor are developed from mass, momentum (Darcy's law), and energy balance equations. The developed models are simulated using COMSOL Multiphysics 5.5 to find the kinetic parameter of levulinic acid hydrogenation to GVL by matching the simulation result with experimental data. The result shows that activation energies for levulinic acid hydrogenation, forward, and the backward reaction of HPA esterification are 22,7 kJ/mol, 30,1 kJ/mol, and 33,1 kJ/mol respectively with the range of AARD between 1.385-11.111%. The validated kinetic parameters are used to perform sensitivity study by simulating the reactor under a non-isothermal condition with 4-6 m length and 5-15 cm diameter and co-current downflow configuration. The result from the simulation indicates that the conversion of levulinic acid and yield of GVL increase with increasing reactor length, inlet temperature, and inlet pressure, while the LA conversion and GVL yield decrease with increasing inlet gas velocity, inlet liquid velocity, and reactor diameter. After varying process parameters and geometric parameters, the

conditions that provide the best LA conversion and GVL yield are at a temperature of 403 K, a pressure of 45 bar, a reactor length of 6 m, a gas velocity of 0.138 m/s, a liquid velocity of 0.00623 m/s, and a reactor diameter of 5 cm.