

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKSI DEKOMPOSISI
METANA DI DALAM REAKTOR BERKATALIS PELAT
SEJAJAR DENGAN MENGGUNAKAN *COMPUTATIONAL
FLUID DYNAMICS***

SKRIPSI

**PETER FIRSIAN
0606076684**



**UNIVERSITAS INDONESIA
FAKULTAS TEKNIK
PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA
DEPOK
JULI 2010**

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKSI DEKOMPOSISI
METANA DI DALAM REAKTOR BERKATALIS PELAT
SEJAJAR DENGAN MENGGUNAKAN *COMPUTATIONAL
FLUID DYNAMICS***

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana

**PETER FIRSIAN
0606076684**



**UNIVERSITAS INDONESIA
FAKULTAS TEKNIK
PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA
DEPOK
JULI 2010**

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

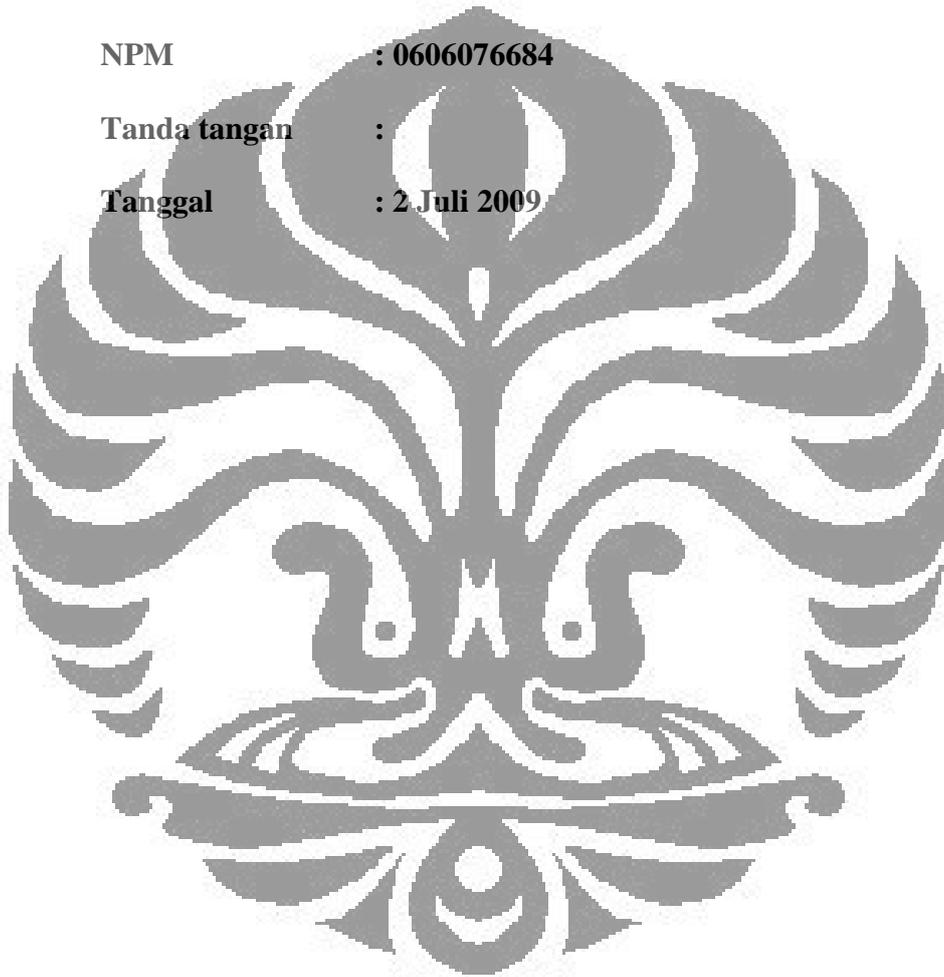
Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Peter Firstian

NPM : 0606076684

Tanda tangan :

Tanggal : 2 Juli 2009



HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Peter Firstian
NPM : 0606076684
Program Studi : Teknik Kimia
Judul Skripsi : Pemodelan dan Simulasi Reaksi Dekomposisi
Metana di Dalam Reaktor Berkatalis Pelat Sejajar
dengan Menggunakan *Computational Fluid
Dynamics* (CFD)

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik pada Program Studi Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Indonesia

DEWAN PENGUJI

Pembimbing I : Ir. Praswasti PDK Wulan, MT ()

Pembimbing II : Dr. rer. nat. Ir. Yuswan Muharam, MT ()

Penguji I : Dr. Ir. Asep Handaya Saputra, M.Eng ()

Penguji II : Ir. Dijan Supramono, M.Sc ()

Ditetapkan di : Depok

Tanggal : 2 Juli 2010

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa atas berkat dan rahmat-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi ini tepat pada waktunya. Skripsi dengan judul **“Pemodelan dan Simulasi Reaksi Dekomposisi Metana di Dalam Reaktor Berkatalis Pelat Sejajar dengan Menggunakan *Computational Fluid Dynamics (CFD)*”** ini disusun untuk memenuhi sebagian persyaratan akademis dalam meraih gelar Sarjana Teknik di Program Studi Teknik Kimia pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia.

Pada penulisan skripsi ini, penulis mendapatkan banyak bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Tuhan Yang Maha Esa
2. Ir. Praswasti PDK Wulan, MT dan Dr. rer. nat Yuswan Muharam, MT selaku pembimbing dalam riset grup karbon *nanotube*
3. Prof. Dr. Ir. Widodo Wahyu Purwanto, DEA selaku ketua Departemen Teknik Kimia FTUI dan pembimbing skripsi penulis
4. Seluruh keluarga atas segala perhatiannya selama ini.
5. Herry, Anindya, dan Riyandi sebagai rekan satu pembimbing atas bantuan dan semangatnya
6. Teman-teman Teknik Kimia UI angkatan 2006 atas masukan, dan dukungannya

Penulis menyadari bahwa masih terdapat banyak kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Untuk ini, saran dan kritik sangat diharapkan penulis untuk memperbaiki penulisan di masa mendatang. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi perkembangan ilmu pengetahuan.

Depok, 2 Juli 2010

Penulis

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang betrandu tangan di bawah ini:

Nama : Peter Firstian

NPM : 0606076684

Program Studi : Teknik Kimia

Departemen : Teknik Kimia

Fakultas : Teknik

Jenis Karya : Skripsi

demikian demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia **Hak Bebas Royalti Noneksklusif** (*Non-exclusive Royalty-Free Right*) atas karya ilmiah saya yang berjudul:

PEMODELAN DAN SIMULASI REAKSI DEKOMPOSISI METANA DI
DALAM REAKTOR BERKATALIS PELAT SEJAJAR DENGAN
MENGUNAKAN *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS*.

berserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada tanggal : 2 Juli 2010

Yang menyatakan,

(Peter Firstian)

ABSTRAK

Nama : Peter Firstian
Program Studi : Teknik Kimia
Judul : Pemodelan dan Simulasi Reaksi Dekomposisi Metana di dalam Reaktor Berkatalis Pelat Sejajar dengan menggunakan *Computational Fluid Dynamics*

Reaktor berkatalis pelat sejajar merupakan salah satu reaktor untuk dekomposisi katalitik metana dimana reaktor ini memiliki *pressure drop* yang rendah serta hasil karbon *nanotube* yang seragam (*well-aligned*). Dalam rangka merealisasikan suatu reaktor komersial, diperlukan beberapa informasi mengenai perilaku fluida di dalam reaktor tersebut. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan informasi mengenai hidrodinamik, pola aliran serta fenomena perpindahan dan mengetahui pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja dari reaktor berkatalis pelat sejajar. Dalam penelitian ini akan divariasikan temperatur, laju alir, tekanan serta komposisi umpan untuk melihat pengaruh variabel-variabel tersebut terhadap naiknya pembentukan karbon yang diwakili oleh penurunan konsentrasi metana.

Kata kunci: struktur katalis pelat sejajar, peristiwa perpindahan

ABSTRACT

Name : Peter Firstian
Study Program : Chemical Engineering
Title : Modelling and Simulation of Methane Decomposition Reaction in Parallel Plate Structured Catalyst Reactor using Computational Fluid Dynamics

Parallel-plate-structured-catalyst reactor is one of the reactors for the catalytic decomposition of methane which has low pressure drop and the carbon nanotubes are uniform (*well-aligned*). In order to build a commercial reactor, we need some information about the behavior of the fluid within the reactor. This research aimed to obtain information about the hydrodynamics, flow pattern and transport phenomena and the effect of operating conditions on the performance of the reactor. In this study, some variable will be vary such as temperature, flow rate, pressure and composition of the feed to see the impact of these variables to increase the formation of carbon are represented by decrease concentration of methane.

Keywords : Parallel-plate-structured-catalyst, transport phenomena

DAFTAR ISI

| | |
|--|-----|
| HALAMAN JUDUL..... | i |
| HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS | ii |
| LEMBAR PENGESAHAN | iii |
| KATA PENGANTAR | iv |
| HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS | v |
| ABSTRAK | vi |
| DAFTAR ISI..... | vii |
| DAFTAR TABEL..... | ix |
| DAFTAR GAMBAR..... | x |
| DAFTAR SIMBOL..... | xii |
| BAB 1 PENDAHULUAN | 1 |
| 1.1 Latar Belakang..... | 1 |
| 1.2 Rumusan Masalah | 3 |
| 1.3 Tujuan Penelitian..... | 3 |
| 1.4 Batasan Masalah | 3 |
| 1.5 Sistematika Penulisan..... | 4 |
| BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA..... | 5 |
| 2.1 Dekomposisi Katalitik Metana..... | 5 |
| 2.2 Kondisi Operasi Dekomposisi Metana..... | 6 |
| 2.2.1 Temperatur Operasi..... | 6 |
| 2.2.2 Tekanan Operasi..... | 7 |
| 2.3 Reaktor | 7 |
| 2.3.1 Reaktor Unggun Tetap (<i>Fixed Bed Reactor</i>) | 7 |
| 2.3.2 <i>Spouted bed Reactor</i> | 8 |
| 2.3.3 <i>Fluidized Bed Reactor</i> | 8 |
| 2.3.4 Reaktor Katalis Terstruktur | 9 |
| 2.4 Katalis Terstruktur Pelat..... | 11 |
| 2.5 Neraca Massa, Energi dan Momentum | 13 |
| 2.5.1 Neraca Massa | 13 |
| 2.5.2 Neraca Energi..... | 15 |
| 2.5.3 Neraca Momentum..... | 17 |
| 2.6 Computational Fluid Dynamics (CFD)..... | 18 |
| 2.7 Metode Elemen Hingga..... | 19 |
| BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN..... | 23 |
| 3.1 Diagram Penelitian | 23 |
| 3.2 Prosedur Penelitian | 24 |
| BAB 4 PEMODELAN DAN SIMULASI | 27 |
| 4.1 Penyusunan Model Matematis | 27 |
| 4.1.1 Neraca Energi..... | 27 |
| 4.1.1.1 Skala Reaktor | 27 |
| 4.1.1.2 Skala Katalis..... | 28 |
| 4.1.1.3 Neraca Energi pada Lapisan Batas..... | 28 |
| 4.1.2 Neraca Massa | 29 |

| | |
|--|-----|
| 4.1.2.1 Skala Reaktor | 29 |
| 4.1.2.2 Skala Katalis..... | 30 |
| 4.1.2.3 Neraca Massa pada Lapisan Batas | 30 |
| 4.1.3 Neraca Momentum..... | 31 |
| 4.1.4 Kondisi Batas Skala Reaktor | 33 |
| 4.1.5 Parameter Proses | 34 |
| 4.2 Langkah-langkah Pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics | 36 |
| 4.2.1 Model Pertama | 37 |
| 4.2.1.1 Pembuatan Geometri..... | 40 |
| 4.2.1.2 Pemasukan Model..... | 48 |
| 4.2.2 Model Kedua..... | 58 |
| 4.2.2.1 Pembuatan Geometri..... | 59 |
| 4.2.2.2 Pemasukan Model..... | 65 |
| 4.3 Verifikasi Model dan Geometri..... | 69 |
| BAB 5 HASIL SIMULASI..... | 71 |
| 5.1 Model Pertama | 71 |
| 5.1.1 Pengaruh Tekanan terhadap Konversi | 84 |
| 5.1.2 Pengaruh Temperatur Dinding terhadap Konversi | 87 |
| 5.1.3 Pengaruh Laju Alir Volumetrik terhadap Konversi | 88 |
| 5.1.4 Pengaruh Fraksi Mol Masukan terhadap Konversi | 89 |
| 5.2 Model Kedua | 91 |
| 5.1.1 Pengaruh Tekanan terhadap Konversi | 104 |
| 5.1.2 Pengaruh Laju Alir Volumetrik terhadap Konversi | 105 |
| 5.1.3 Pengaruh Fraksi Mol Masukan terhadap Konversi | 105 |
| BAB 6 KESIMPULAN..... | 107 |
| 6.1 Kesimpulan..... | 107 |
| 6.2 Saran..... | 108 |
| DAFTAR PUSTAKA..... | 109 |
| LAMPIRAN..... | 112 |

DAFTAR TABEL

| | |
|---|----|
| Tabel 2.1 Perbandingan Kinerja Reaktor..... | 11 |
| Tabel 4.1 Dimensi Pelat | 46 |
| Tabel 4.2 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel Difusi | 49 |
| Tabel 4.3 <i>Constant</i> untuk Variabel Difusi | 50 |
| Tabel 4.4 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel Konduktivitas Termal dan Viskositas..... | 50 |
| Tabel 4.5 <i>Constant</i> untuk Variabel Konduktivitas Termal dan Viskositas..... | 51 |
| Tabel 4.6 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel Massa Jenis | 51 |
| Tabel 4.7 <i>Constant</i> untuk Variabel Massa Jenis | 51 |
| Tabel 4.8 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel Kapasitas Panas | 52 |
| Tabel 4.9 <i>Constant</i> untuk Variabel Kapasitas Panas | 52 |
| Tabel 4.10 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel Laju Reaksi | 52 |
| Tabel 4.11 <i>Constant</i> untuk Variabel Laju Reaksi | 53 |
| Tabel 4.12 <i>Scalar Expression</i> untuk Variabel-variabel Lain | 53 |
| Tabel 4.13 <i>Constant</i> untuk variabel-variabel lain | 53 |
| Tabel 4.14 Pengaturan <i>Subdomain</i> Neraca Massa | 54 |
| Tabel 4.15 Pengaturan <i>Subdomain</i> Neraca Energi | 55 |
| Tabel 4.16 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Energi | 56 |
| Tabel 4.17 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa | 57 |
| Tabel 4.18 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 1..... | 62 |
| Tabel 4.19 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 2..... | 63 |
| Tabel 4.20 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 3..... | 64 |
| Tabel 4.21 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 4..... | 65 |
| Tabel 4.22 Pengaturan <i>Subdomain</i> Neraca Massa..... | 67 |
| Tabel 4.23 Pengaturan <i>Subdomain</i> Neraca Momentum | 67 |
| Tabel 4.24 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa | 67 |
| Tabel 4.25 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Momentum | 68 |
| Tabel 4.26 Kategori <i>Error</i> Menurut COMSOL | 69 |

DAFTAR GAMBAR

| | |
|---|----|
| Gambar 2.1 <i>Spouted Bed Reactor</i> | 8 |
| Gambar 2.2 Sistem Reaktor | 9 |
| Gambar 2.3 Substrat Anyaman Kawat (Gauze) Baja | 10 |
| Gambar 2.4 Hasil SEM Nanotube Karbon | 10 |
| Gambar 2.5 Berbagai Bentuk Material Monolit | 13 |
| Gambar 2.6 Program COMSOL | 21 |
| Gambar 2.7 <i>User Interface</i> COMSOL | 22 |
| Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian..... | 23 |
| Gambar 4.1 <i>Plate Fin Heat Sink</i> | 38 |
| Gambar 4.2 Tampilan Awal COMSOL | 40 |
| Gambar 4.3 Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan <i>Multiphysics</i> Model Pertama | 42 |
| Gambar 4.4 Desain Reaktor | 43 |
| Gambar 4.5 Pengaturan Geometri Reaktor | 43 |
| Gambar 4.6 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Geometri Reaktor..... | 44 |
| Gambar 4.7 Pengaturan Geometri Pelat | 45 |
| Gambar 4.8 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Geometri Pelat | 45 |
| Gambar 4.9 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Seluruh Geometri Pelat..... | 46 |
| Gambar 4.10 Tampilan COMSOL Setelah Menggunakan Fasilitas <i>Composite</i> | 47 |
| Gambar 4.11 Tampilan Reaktor yang Akan Di- <i>composite</i> | 47 |
| Gambar 4.12 Bentuk Akhir Reaktor..... | 48 |
| Gambar 4.13 Subdomain Settings pada COMSOL..... | 49 |
| Gambar 4.14 <i>Subdomain Settings</i> Neraca massa..... | 54 |
| Gambar 4.15 <i>Subdomain Settings</i> Neraca Energi..... | 55 |
| Gambar 4.16 <i>Boundary Settings</i> Neraca Energi..... | 57 |
| Gambar 4.17 <i>Boundary Settings</i> Neraca Massa..... | 58 |
| Gambar 4.18 Pembagian Geometri Model Kedua | 59 |
| Gambar 4.19 Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan <i>Multiphysics</i> Model Kedua | 61 |
| Gambar 4.20 Tampilan COMSOL Setelah Membuat 3 Buah Balok..... | 62 |
| Gambar 4.21 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 1..... | 63 |
| Gambar 4.22 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 2..... | 64 |
| Gambar 4.23 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 3..... | 64 |
| Gambar 4.24 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 4..... | 65 |
| Gambar 4.25 <i>Subdomain Settings</i> Neraca Massa..... | 66 |
| Gambar 4.26 <i>Subdomain Settings</i> Neraca Momentum | 66 |
| Gambar 5.1 Keluaran COMSOL dalam Konsentrasi CH ₄ | 72 |
| Gambar 5.2 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Panjang Reaktor..... | 73 |
| Gambar 5.3 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor..... | 74 |
| Gambar 5.4 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor..... | 75 |
| Gambar 5.5 Keluaran COMSOL dalam Konsentrasi H ₂ | 76 |
| Gambar 5.6 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Panjang Reaktor... | 77 |
| Gambar 5.7 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor... | 78 |

| | |
|---|-----|
| Gambar 5.7 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor... | 78 |
| Gambar 5.9 Selektivitas Model Reaktor Pertama..... | 79 |
| Gambar 5.10 Keluaran COMSOL Dalam Temperatur..... | 81 |
| Gambar 5.11 Perubahan Temperatur Terhadap Panjang Reaktor | 82 |
| Gambar 5.12 Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor..... | 83 |
| Gambar 5.13 Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor..... | 83 |
| Gambar 5.14 Perubahan <i>Pressure Drop</i> Terhadap Panjang Reaktor..... | 84 |
| Gambar 5.15 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Tekanan Tertentu..... | 85 |
| Gambar 5.16 Hubungan Antara Laju Reaksi Terhadap Tekanan Parsial.... | 86 |
| Gambar 5.17 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Temperatur Tertentu Pada Model Pertama..... | 87 |
| Gambar 5.18 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Laju Alir Tertentu Pada Model Pertama..... | 89 |
| Gambar 5.19 Perubahan Konversi Berdasarkan Fraksi Mol Pada Model Pertama..... | 90 |
| Gambar 5.20 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 1..... | 92 |
| Gambar 5.21 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 2 | 93 |
| Gambar 5.22 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 3..... | 94 |
| Gambar 5.23 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 4..... | 95 |
| Gambar 5.24 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Penampang Pertama..... | 96 |
| Gambar 5.25 Peningkatan Boundary Layer pada Aliran Laminar..... | 97 |
| Gambar 5.26 Grafik Perubahan Kecepatan Menurut Model Kedua ke Arah y..... | 97 |
| Gambar 5.27 Grafik pada posisi bagian tengah reaktor..... | 98 |
| Gambar 5.28 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor..... | 99 |
| Gambar 5.29 Grafik Penurunan Konsentrasi Metana dari Model Kedua.... | 100 |
| Gambar 5.30 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor.... | 101 |
| Gambar 5.31 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor.... | 101 |
| Gambar 5.32 Grafik Perubahan Konsentrasi Hidrogen dari Model Kedua... | 102 |
| Gambar 5.33 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor.... | 103 |
| Gambar 5.34 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor.... | 103 |
| Gambar 5.35 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Tekanan Tertentu pada Model Kedua..... | 104 |
| Gambar 5.36 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Laju Alir Tertentu pada Model Kedua..... | 105 |
| Gambar 5.37 Perubahan Konversi Berdasarkan Fraksi Mol Pada Model Pertama..... | 106 |

DAFTAR SIMBOL

| | |
|---|--|
| c_A = konsentrasi A | Cp_{mix} = kapasitas panas campuran |
| v = kecepatan superficial | $Cp_{i,j}$ = kapasitas panas komponen |
| \mathcal{D}_{AB} = koefisien difusivitas gas A terhadap B | $x_{i,j}$ = fraksi mol komponen |
| x, y, z, r, θ, ϕ = arah | Mr_{mix} = massa molekul relatif campuran |
| ρ = massa jenis campuran | L = panjang sirip dalam arah aliran |
| C_v = kapasitas panas | D_h = diameter hidrolis |
| T = temperatur | V = laju alir rata-rata |
| k = konduktivitas termal | N_{fin} = jumlah sirip |
| μ = viskositas campuran | t_f = tebal sirip |
| p = tekanan | W = tebal sirip dari sirip teratas hingga sirip terbawah |
| \mathcal{D}_{AB} = koefisien difusivitas | |
| $p_{cA,B}$ = tekanan kritis senyawa | |
| T_c = suhu | |
| $T_{cA,B}$ = temperatur kritis senyawa | |
| $M_{A,B}$ = massa molekul relatif | |
| μ_m = viskositas campuran | |
| μ_i = viskositas komponen i | |
| y_i = fraksi mol komponen i | |
| M_i = massa molekul relatif komponen i | |
| k = konduktivitas termal | |
| μ_m = viskositas campuran | |
| C_p = kapasitas panas | |
| R = konstanta gas | |
| M = massa molekul relatif | |
| ρ_b = densitas | |
| M = massa molekul relatif | |
| R = konstanta ksetimbangan gas | |

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Nanoteknologi dan pemrograman komputer adalah dua hal yang semakin berkembang akhir-akhir ini. Salah satu riset yang menarik tentang nanoteknologi adalah *carbon nanotube* (CNT) dari divisi nanokarbon. CNT menjadi pusat sorotan media segera setelah ditemukan oleh Iijima pada tahun 1991. CNT sangat berpotensi untuk digunakan pada berbagai aplikasi seperti nanoteknologi, elektronik, optik, dan lainnya. CNT memiliki kekuatan yang luar biasa dan sifat elektrik yang unik serta merupakan konduktor panas yang efisien. Sifat-sifat tersebut membuat CNT dapat digunakan sebagai penyimpanan hidrogen, *nanoscale transistor*, *flat-panel display*, superkapasitor, *nanoprobes* dan sensor (Daenan et al., 2003). Namun penggunaan dari CNT dibatasi karena berpotensi racun.

CNT dapat diproduksi menggunakan beberapa metode, yaitu *arc discharge*, *laser ablation*, *chemical vapour deposition* (CVD) dan dekomposisi katalitik metana. Sampai saat ini penggunaan metode yang paling ekonomis untuk memproduksi CNT masih diteliti. Salah satu metode untuk menghasilkan CNT adalah melalui reaksi dekomposisi katalitik metana dengan reaksi ($\text{CH}_4 \rightarrow \text{C} + 2\text{H}_2$ $\Delta H_{298\text{K}} = +75\text{kJ/mol}$). Reaksi ini merupakan reaksi endotermik yang memerlukan temperatur yang tinggi pada sistem (Song, 2005). Namun hal ini dapat diatasi dengan menambahkan katalis untuk menurunkan energi aktivasi.

Sedangkan dari metode-metode reaksi tersebut, ada beberapa reaktor, diantaranya: *fixed bed*, *spouted bed*, *CVD*, *fluidized bed*, atau reaktor katalis terstruktur. Reaktor katalis terstruktur telah terbukti dapat menanggulangi masalah-masalah yang terjadi pada reaktor-reaktor lainnya, seperti kenaikan *pressure drop* pada penggunaan reaktor jenis *fixed bed* (Purwanto, 2005) serta konversi metana yang rendah untuk penggunaan reaktor *spouted bed* (Muradov, 2001) dan reaktor *fluidized bed* (Muradov, 2001; Weizhong, 2004; Morancais, 2007). Produksi CNT melalui metode dekomposisi metana dengan menggunakan reaktor katalis terstruktur juga dapat memproduksi hidrogen dengan kemurnian tinggi yang mulai digunakan sebagai bahan bakar ramah lingkungan.

Penggunaan reaktor katalis terstruktur pertama kali dikembangkan dengan memakai struktur bentuk *wire mesh* (*gauze*). Namun, penelitian membuktikan bahwa jenis struktur ini mempunyai masalah pada *pressure drop*. Katalis terstruktur bentuk pelat sejajar dapat menanggulangi masalah tersebut meskipun luas permukaannya lebih kecil dibandingkan katalis terstruktur bentuk *gauze*. Dalam segi hasil, CNT yang terbentuk dengan katalis terstruktur pelat sejajar juga lebih *well-aligned* jika dibandingkan dengan katalis terstruktur *gauze*.

Dalam tim riset CNT Universitas Indonesia sedang dilakukan penelitian mengenai reaksi dekomposisi metana dengan menggunakan pelat sejajar yang kedepannya akan dilakukan rancang bangun untuk reaktor komersial. Sebelum mewujudkan hal tersebut, sebaiknya kinerja dari reaktor tersebut seperti hidrodinamik, pola aliran dan fenomena perpindahan dipelajari terlebih dahulu. Hal ini dapat dilakukan dengan cara memodelkan reaktor tersebut dengan menggunakan *Computational Fluid Dynamics* (CFD).

CFD telah dengan pesat berkembang demi memudahkan kegiatan manusia, termasuk dalam hal melakukan penelitian. Keuntungan dari CFD ini adalah memotong biaya dan mempersingkat waktu. Para *programmer* pun berlomba-lomba untuk membuat berbagai perangkat lunak untuk mempermudah pekerjaan peneliti lainnya. Di dalam bidang studi teknik kimia sendiri, ada banyak perangkat lunak yang digunakan, diantaranya: HYSYS, Pipesim, Chemcad, dan COMSOL Multiphysics.

Dalam melakukan simulasi mengenai fenomena-fenomena yang terjadi pada suatu sistem, COMSOL Multiphysics telah banyak digunakan dan teruji mampu menyelesaikan pemodelan yang rumit. COMSOL Multiphysics adalah suatu program yang menggunakan metode elemen hingga (*finite element method* = FEM) untuk menyelesaikan model. FEM adalah sebuah teknik numeris untuk menyelesaikan persamaan diferensial parsial dan persamaan integral.

Pada penelitian ini, fenomena yang terjadi dalam reaktor yang diekspresikan dalam persamaan matematis harus diselesaikan secara simultan untuk mendapatkan informasi mengenai pengaruh variabel proses dari reaktor berstruktur pelat dengan metode dekomposisi metana.

1.2 Rumusan Masalah

Penelitian laboratorium memerlukan waktu dan biaya yang sangat tinggi melalui serangkaian uji coba dalam menemukan kondisi operasi untuk memperoleh kinerja CNT yang baik. COMSOL Multiphysics akan digunakan untuk mendapatkan informasi mengenai hidrodinamik, pola aliran serta fenomena perpindahan yang terjadi dalam reaktor berkatalis terstruktur pelat. Selain itu COMSOL Multiphysics juga digunakan untuk melihat pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor tersebut.

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

- Mendapatkan informasi hidrodinamik, pola aliran dan fenomena transport pada reaktor katalis terstruktur bentuk pelat
- Mengetahui pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja dari reaktor katalis terstruktur bentuk pelat
- Untuk memahami fenomena proses yang terjadi pada reaksi dekomposisi metana

1.4 Batasan Masalah

Pada penelitian ini, beberapa batasan masalah yang digunakan adalah:

1. Reaktor yang digunakan adalah reaktor berbentuk tubular.
2. Katalis yang digunakan berbentuk pelat sejajar.
3. Sistem yang digunakan *steady-state*.
4. Aliran di dalam reaktor merupakan aliran laminar.
5. Kinerja reaktor yang dievaluasi adalah profil konsentrasi metana, hidrogen, temperatur dan kecepatan.
6. Sistem ditinjau menjadi dua bagian, yaitu skala reaktor dan skala pelat sejajar.
7. Katalis tidak berpori sehingga reaksi diasumsikan terjadi pada permukaan katalis
8. Konstanta difusi berlangsung ke segala arah

9. Data laju reaksi intrinsik menggunakan kinetika yang dikembangkan oleh Snoeck (Snoeck, 1996)
10. Model dan simulasi diselesaikan dengan menggunakan COMSOL Multiphysics.
11. Pendekatan model reaktor dalam COMSOL Multiphysics adalah:
 - Model 3-Dimensi dengan mempertimbangkan neraca massa, energi dan persamaan *pressure drop*
 - Model 3-Dimensi isothermal dengan mempertimbangkan neraca massa dan momentum

1.5 Sistematika Penulisan

Sistematika penulisan dalam makalah ini adalah sebagai berikut :

- **BAB I. PENDAHULUAN**
Berisikan latar belakang masalah, perumusan masalah, tujuan penelitian, batasan masalah dan sistematika penulisan.
- **BAB II. TINJAUAN PUSTAKA**
Berisikan studi literatur secara umum dan secara khusus mengenai hal-hal yang berkaitan dengan penelitian.
- **BAB III. METODE PENELITIAN**
Berisikan diagram alir penelitian, penjelasan diagram alir, serta langkah-langkah yang diperlukan dalam pembuatan model menggunakan COMSOL Multiphysics.
- **BAB IV. PEMODELAN DAN ANALISIS**
Berisikan penurunan model matematis dan langkah-langkah pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics.
- **BAB V. HASIL SIMULASI**
Berisikan analisa dari hasil simulasi dan variasi beberapa variabel.
- **BAB VI. KESIMPULAN**
Berisikan kesimpulan dari penelitian yang dilakukan beserta saran-saran.

BAB II TINJAUAN PUSTAKA

Pada bab ini berisikan teori-teori yang bersifat mendukung penelitian yang dilakukan penulis. Teori ini meliputi reaksi dekomposisi katalitik metana beserta kondisi operasinya, jenis reaktor khususnya reaktor katalis terstruktur jenis pelat, neraca, massa energi dan momentum serta metode elemen hingga yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan.

2.1 Dekomposisi Katalitik Metana

Dekomposisi didefinisikan sebagai salah satu dari reaksi kimia yang menguraikan atau memutuskan ikatan rantai suatu senyawa menjadi unsur-unsur atau senyawa yang lebih sederhana (Grujicic, 2002). Contoh dari dekomposisi adalah dekomposisi metana atau yang dikenal dengan *Methane Decomposition Reaction* (MDR). Reaksi ini memutuskan ikatan H-C dari metana menjadi komponen yang lebih sederhana yaitu hidrogen dan karbon, yaitu (Grujicic, 2002):



Reaksi diatas pada awalnya digunakan untuk produksi hidrogen sebagai salah satu energi bahan bakar alternatif, yaitu sel bahan bakar (*fuel cells*) yang akan menggantikan energi dari bahan bakar fosil. Metana lebih dipilih dibandingkan hidrokarbon lain sebagai reaktan dalam produksi hidrogen karena merupakan hidrokarbon dengan rasio hidrogen terhadap karbon yang paling tinggi. Metana juga merupakan hidrokarbon terbesar pada sebagian besar sumur gas, sehingga harganya cukup rendah jika dibandingkan dengan hidrokarbon lain.

Setelah ditemukannya bentuk material karbon selain grafit dan intan yang diduga dapat terbentuk dari reaksi ini, perkembangan penelitian dekomposisi metana pun semakin pesat. Sehingga sampai saat ini perkembangan penelitian dekomposisi metana secara umum, yaitu:

1. Dekomposisi metana secara termal (*thermal cracking*) yang menghasilkan hidrogen dan karbon hitam.

2. Dekomposisi katalitik metana dengan menggunakan katalis berdasar logam transisi (Fe, Co, dan Ni) yang menghasilkan jenis material karbon yang memiliki ukuran partikel nanometer yang biasa disebut dengan nanokarbon.

Analisis termodinamika dari reaksi dekomposisi metana menyatakan bahwa nilai untuk energi bebas Gibbs (ΔG_r^o) dan energi penguraian metana (ΔH_r^o) pada suhu 198 K, masing-masing sebesar 50,8 kJ/mol dan 75 kJ/mol (Song L, 2005). Nilai ΔG_r^o yang positif ini menunjukkan bahwa reaksi tidak dapat berjalan dengan spontan. Meskipun reaksi dapat berjalan, konversi yang dihasilkan reaksi tersebut tidak akan maksimal. Sedangkan nilai ΔH_r^o yang positif menandakan reaksi bersifat endotermis. Hal ini akan mempengaruhi konversi yang akan meningkat seiring dengan meningkatnya suhu reaksi sehingga reaksi ini harus dilakukan pada temperatur sangat tinggi.

Temperatur reaksi memegang peranan penting dalam tinjauan ekonomi suatu proses industri. Proses yang dilakukan pada temperatur yang lebih rendah akan lebih menguntungkan jika kita bandingkan dengan proses bertemperatur tinggi. Hal ini disebabkan energi yang dibutuhkan lebih sedikit. Oleh karena itu, untuk menurunkan temperatur reaksi perlu ditambahkan katalis yang dapat menurunkan energi aktivasi.

2.2 Kondisi Operasi Dekomposisi Metana

Kondisi operasi yang baik akan menghasilkan produk akhir dekomposisi metana yang baik juga. Untuk reaksi dekomposisi katalitik metana, dua kondisi operasi yang paling mempengaruhi adalah temperatur dan tekanan.

2.2.1 Temperatur Operasi

Reaksi dekomposisi katalitik metana membutuhkan temperatur yang cukup tinggi. Semakin tinggi temperatur maka gas metana akan semakin cepat terdekomposisi. Hal ini akan mempengaruhi produk dari reaksi ini sendiri baik dalam segi kualitas maupun kuantitas. Namun di sisi lain, suhu tinggi akan mengakibatkan katalis lebih mudah mengalami *sintering* dan karbon yang

terbentuk akan semakin banyak sehingga deaktivasi katalis juga semakin cepat terjadi.

Meskipun memiliki dampak negatif, penggunaan temperatur tinggi menyebabkan jumlah karbon yang terbentuk menjadi lebih banyak. Hasil uji produk membuktikan bahwa CNT hanya akan terbentuk pada temperatur lebih tinggi daripada temperatur terbentuknya karbon *nanofiber* pada umumnya. Karbon yang terbentuk pada temperatur yang lebih tinggi juga akan mempunyai bentuk yang lebih teratur dengan ketebalan yang seragam (Resketenko, 2003), tetapi penambahan temperatur juga akan menyebabkan diameter dan ketebalan dinding dari *nanotube* yang telah terbentuk semakin mengecil (Sinnots, 1999), sedangkan yang diharapkan adalah *nanotube* karbon dengan dinding yang tebal. Semua hal ini membuat tidak ada temperatur tertentu yang mutlak untuk reaksi ini. Temperatur optimal untuk reaksi dekomposisi metana agar terbentuk produk CNT yang diharapkan berada pada temperatur antara 650-750°C.

2.2.2 Tekanan Operasi

Pada reaksi dekomposisi metana, tekanan operasinya adalah tekanan rendah atau tekanan atmosferik. Hal ini dikarenakan reaksi dekomposisi metana adalah reaksi endotermis dimana penambahan tekanan malah akan menggeser kesetimbangan reaksi ke arah kiri (menambah reaktan).

2.3 Reaktor

Ada beberapa jenis reaktor yang telah digunakan untuk memproduksi CNT, diantaranya:

2.3.1 Reaktor Unggun Tetap (*Fixed Bed Reactor*)

Jenis reaktor yang umumnya digunakan untuk reaksi dekomposisi metana skala besar adalah reaktor ungun tetap (*fixed bed reactor*). Reaktor ungun tetap lebih mudah digunakan bila katalisnya memiliki *lifetime* yang lama. Namun pada kenyataannya, dalam beberapa proses aktivitas katalis dapat menurun dengan cepat akibat *sintering*, racun katalis, dan deposit karbon. Selain itu, reaktor ini mengalami penyumbatan akibat deposisi karbon pada katalis yang menyebabkan

kenaikan jatuhnya tekanan (*pressure drop*) (Purwanto, 2005). Konversi metana pada reaktor unggun tetap ini mencapai 47 %.

2.3.2 *Spouted bed Reactor*

Spouted bed Reactor digunakan Muradov dengan mengalirkan metana dari dasar reaktor dengan kecepatan yang tinggi sehingga menimbulkan *spouting zone* di tengah reaktor (Muradov, 2001). Sebagian katalis akan terbawa aliran metana di sepanjang *spouting zone* dan akan tersembur keluar di bagian atas *spouting zone*. Penetapan kecepatan superfisial gas 2 cm/s dan rasio tinggi terhadap diameter reaktor sebesar 5-6 dilakukan untuk memperoleh fluidisasi katalis yang homogen. Akan tetapi, penetapan ini masih menghasilkan pencampuran katalis yang tidak merata (homogen) sehingga konversi metana yang dihasilkan sangat kecil yaitu 7 % akibat singkatnya kontak antara metana dengan katalis. *Spouted bed reactor* yang digunakan oleh Muradov dapat dilihat pada Gambar 2.1.



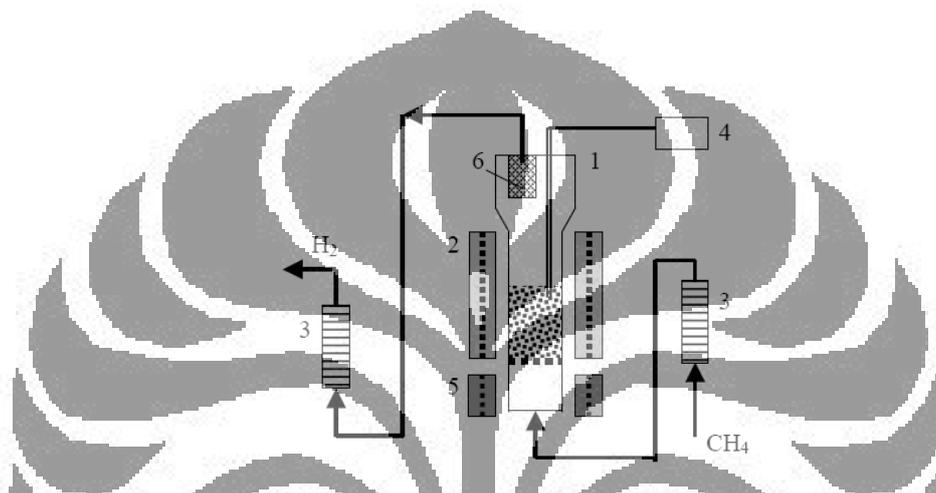
Gambar 2.1 *Spouted Bed Reactor*: (1) dinding luar reaktor, (2) *spouting zone*, (3) katalis, (4) *electric heater*, (5) *pre-heater*, dan (6) filter (Muradov, 2001).

2.3.3 *Fluidized Bed Reactor*

Muradov juga menggunakan jenis reaktor *Fluidized Bed Reactor* (FBR) sebagai alternatif untuk operasi skala besar menggantikan reaktor unggun diam yang mempunyai perbedaan *pressure drop* yang tinggi akibat deposit karbon

(Muradov, 2001). Metana dialirkan dari dasar reaktor dengan kecepatan tertentu sehingga menyebabkan katalis terfluidisasi sehingga memberikan kenaikan perpindahan panas dan perpindahan massa dari partikel ke gas.

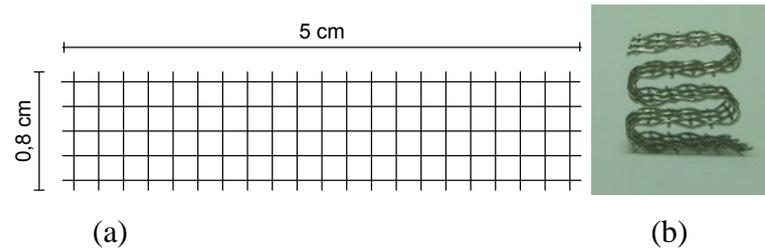
FBR sesuai untuk reaksi kontinu dan mampu mengikis partikel karbon dari reaktor sehingga mencegah terjadinya deposit karbon tetapi konversi metana masih rendah <40% akibat waktu tinggal reaktan yang singkat sehingga hidrogen yang diperoleh tidak murni (Muradov, 2001).



Gambar 2.2 Sistem Reaktor; (1) *fluidized bed reactor*, (2) *electric heater*, (3) *flow meter*, (4) *temperature controller*, (5) *pre-heater*, dan (6) *filter* (Muradov, 2001).

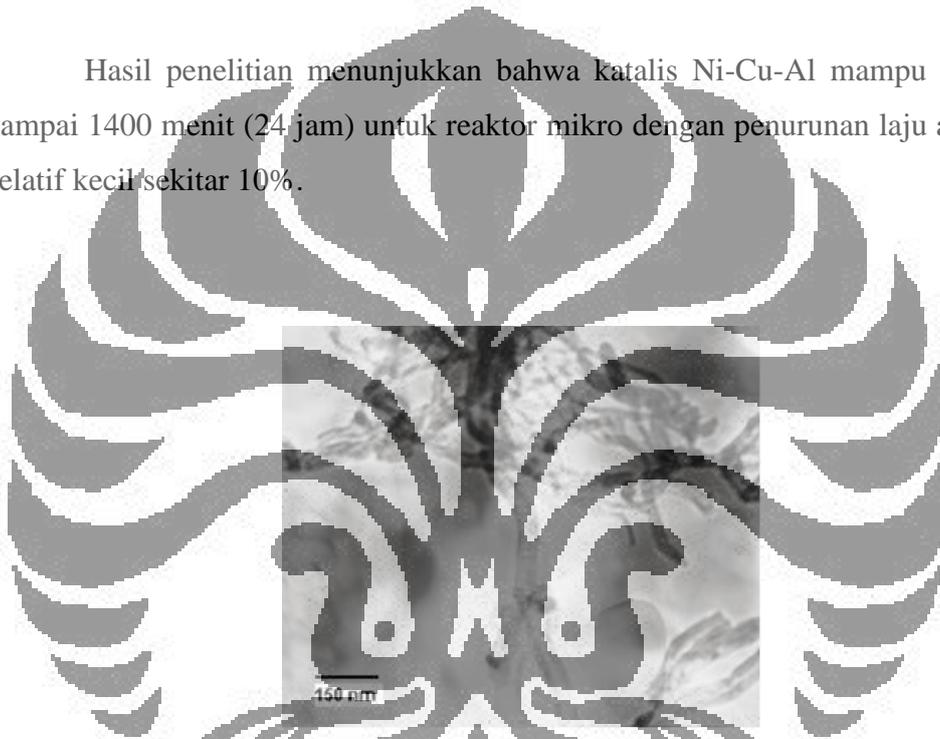
2.3.4 Reaktor Katalis Terstruktur

Muharam dan Widodo, 2007 telah melakukan riset menggunakan reaktor katalitik terstruktur (*wire mesh*) skala kecil (1 cm diameter) untuk reaksi dekomposisi metana, seperti terlihat pada gambar 2.3. Kemudian dengan metode *dip-coating*, Ni, Cu dan Al_2O_3 dilapiskan sebagai katalis. Ni berfungsi sebagai inti aktif, Cu sebagai promotor dan Al_2O_3 sebagai penyangga.



Gambar 2.3 Substrat Anyaman Kawat (*Gauze*) Baja
Sebelum (a) dan (b) Setelah Dibentuk
(Muharam, 2007)

Hasil penelitian menunjukkan bahwa katalis Ni-Cu-Al mampu bertahan sampai 1400 menit (24 jam) untuk reaktor mikro dengan penurunan laju alir yang relatif kecil sekitar 10%.



Gambar 2.4 Hasil SEM *Nanotube* Karbon
(Muharam, 2007).

Kualitas CNT yang dihasilkan dari metode ini cukup baik dengan diameter 30-50 nm dan ketebalan dinding 10-20 nm (Gambar 2.4) dan kemurnian hidrogen mencapai lebih dari 99%. Untuk reaktor skala lab mampu beroperasi selama 33 jam dengan yield CNT sebesar 200 gr C/gr katalis dan kemurnian hidrogen 95%.

Perbandingan kinerja reaktor-reaktor yang digunakan untuk sintesis CNT terangkum pada Tabel 2.1.

Tabel 2.1 Perbandingan Kinerja Reaktor

| Peneliti | Tahun | Jenis Reaktor | Konversi | Pressure drop | Lifetime katalis | Aglomerasi & penyumbatan |
|----------------------|-------|------------------------------|----------|---------------|------------------|----------------------------|
| Muradov | 2000 | <i>Spouted bed</i> | 7% | Rendah | - | Tidak |
| | 2001 | <i>Fluidized bed</i> | 20% | Rendah | - | Tidak |
| Qian, dkk | 2003 | <i>2-stage fluidized bed</i> | 20-40% | Rendah | ~ 17 jam | Tidak |
| Siang-Pao, dkk | 2006 | <i>Fixed bed</i> | 47% | Tinggi | ~ 1 jam | Ya |
| Muharam dan Purwanto | 2007 | Reaktor katalis terstruktur | 95% | Rendah | ~ 24 jam | Ya setelah waktu yang lama |

Berdasarkan keunggulan-keunggulannya, dipilih reaktor katalis terstruktur untuk dekomposisi metana menjadi CNT dan hidrogen. Meskipun penelitian yang dilakukan baru sampai tahap skala *bench*, metode ini sangat berpotensi untuk menghasilkan CNT dan hidrogen. Konversi reaktor jenis ini juga paling besar dibandingkan reaktor lainnya. Selain itu, *pressure drop* reaktor rendah dan kualitas CNT yang dihasilkan cukup baik.

2.4 Katalis Terstruktur Pelat

Katalis terstruktur didefinisikan sebagai katalis yang dibentuk dengan struktur tertentu sebagai alternatif pengganti katalis bentuk konvensional yang masih mempunyai kekurangan dalam aplikasinya. Penggunaan katalis terstruktur ini memiliki keuntungan dibanding dengan katalis bentuk konvensional seperti bubuk, antara lain: aliran yang seragam, *pressure drop* yang rendah, distribusi katalis yang teratur, dan tidak sensitif terhadap *fouling* akibat debu.

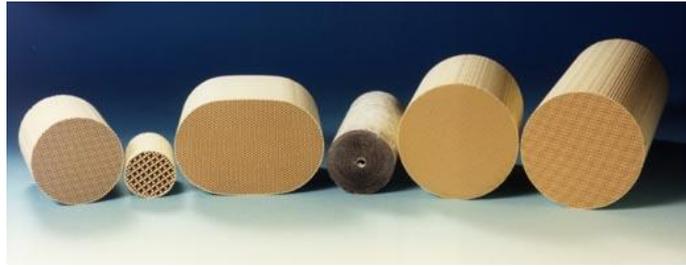
Ada beberapa jenis katalis terstruktur yang sering digunakan, diantaranya (1) katalis monolitik yang terdiri dari struktur yang mempunyai kesatuan yang

seragam, dengan saluran-saluran sempit yang teratur baik paralel maupun *zig-zag*, (2) katalis membran yang tidak hanya mempunyai interaksi terhadap dinding akan tetapi terjadi juga perpindahan massa melewati dinding yang permeabel (difusi) yang memiliki pori-pori yang kecil, dan (3) *arranged catalyst*, yaitu katalis terstruktur yang memberikan perpindahan massa yang relatif cepat melalui zona reaksi yang tegak lurus terhadap aliran dan biasanya untuk reaksi katalitik dua fasa.

Katalis terstruktur *wire mesh* (gauze) yang digunakan pada penelitian sebelumnya merupakan jenis *arranged catalyst*. Riset mengenai penggunaan reaktor gauze untuk dekomposisi katalitik metana dilakukan pertama kali oleh Muharam dan Purwanto pada tahun 2007, untuk menyelesaikan permasalahan-permasalahan di atas, khususnya permasalahan *pressure drop*. Riset pertama kali dilakukan dalam skala kecil dengan menggunakan reaktor mikro dengan katalis heterogen Ni-Cu-Al yang mana logam Ni sebagai inti aktif, logam Cu yang baik sebagai *structural promoter*, dan logam Al sebagai *textural promoter*. Namun, ternyata reaktor gauze memiliki kekurangan yaitu luas kontak yang kecil dan bentuk nanokarbon yang tidak sejajar.

Untuk memperbaiki kekurangan dari katalis terstruktur *wire mesh* (gauze), digunakan katalis terstruktur bentuk pelat dari jenis katalis monolitik. Kata monolit berasal dari bahasa Yunani dimana *mono* berarti tunggal dan *lithos* berarti batu (Heiszwolf, 2010).

Dalam ruang lingkup teknik kimia, monolit adalah sebuah blok keramik yang berisi sejumlah saluran kecil dan paralel. Pada bagian dinding dari katalis monolit tersebut dapat dimasukkan sebuah lapisan aktif sebagai tempat terjadinya reaksi kimia. Semakin banyak saluran yang terdapat pada katalis monolit tersebut, semakin besar pula area kontak antara lapisan katalis dan fluida yang mengalir pada saluran tersebut. *Pressure drop* pada katalis monolit ini juga sangat rendah karena salurannya lurus dan paralel.



Gambar 2.5 Berbagai Bentuk Material Monolit.

Aplikasi dari katalis monolitik yang terkenal adalah *three way catalyst* yang digunakan pada kendaraan bermotor. Monolit ini membersihkan gas keluaran dari kendaraan bermotor. Reaktor monolit ini dapat diletakan langsung pada pipa keluaran dari suatu kendaraan tanpa mengubah unjuk kerja dari mesin kendaraan tersebut. Hal ini didukung oleh rendahnya *pressure drop* pada reaktor monolit. Lapisan katalisnya meliputi platinum, yang mengubah hidrokarbon, karbon monoksida dan nitrogen oksida menjadi senyawa yang tidak berbahaya (karbon dioksida, air dan nitrogen).

Informasi diatas menunjukkan bahwa katalis ini memungkinkan untuk mengontrol selektivitas dari reaksi yang kompleks, mempunyai hambatan difusi internal yang kecil, *pressure drop* yang lebih kecil 2-3 kali dari reaktor *fixed bed*.

2.5 Neraca Massa, Energi dan Momentum

Fenomena-fenomena yang terjadi di dalam reaktor berkatalis struktur sejajar yang paling mempengaruhi adalah perpindahan massa, energi dan momentum.

2.5.1 Neraca Massa

Neraca massa merupakan aplikasi dari hukum kekekalan massa, yaitu massa tidak dapat diciptakan ataupun dihancurkan. Keseimbangan massa hampir selalu menjadi syarat untuk perhitungan lain dalam masalah teknik kimia baik yang sederhana maupun yang kompleks. Untuk membuat sebuah keseimbangan massa, pertama-tama kita harus menentukan sistem yang akan kita buat kesetimbangannya, kemudian menguraikan batas-batasnya. Pada neraca massa, ada beberapa istilah yang digunakan, yaitu (1) sistem, merupakan bagian atau

keseluruhan proses untuk analisis; (2) kondisi batas merupakan suatu kumpulan kondisi yang ditentukan untuk menyelesaikan suatu persamaan diferensial di batas domain; (3) sistem terbuka merupakan sistem dengan adanya massa yang keluar dan masuk melalui kondisi batas; (4) sistem tertutup merupakan sistem tanpa adanya perpindahan massa selama jangka waktu yang diinginkan.

Neraca massa sendiri dibagi menjadi dua menurut alirannya, yaitu (1) *unsteady state* (keadaan tidak tunak) dimana nilai variabel-variabel yang berkaitan berubah berdasarkan waktu; dan (2) *steady state* (keadaan tunak) dimana nilai dari variabel-variabel yang berkaitan tidak berubah terhadap waktu. Keadaan tunak menyebabkan tidak adanya nilai dari akumulasi sehingga akan mempermudah persamaan tersebut.

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca massa adalah konveksi, difusi dan reaksi dengan persamaan pada koordinat silinder (Bird, 1994):

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (2.2)$$

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat balok:

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left(v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (2.3)$$

- Koordinat bola:

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial c_A}{\partial \phi} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \phi^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (2.4)$$

dimana,

*1 = suku difusi

*3 = suku difusi

*2 = suku konveksi

*4 = suku generasi massa

c_A = konsentrasi A

v = kecepatan superficial

\mathcal{D}_{AB} = koefisien difusivitas gas A terhadap B

x, y, z, r, θ, ϕ = arah

2.5.2 Neraca Energi

Sama dengan neraca massa, neraca energi merupakan aplikasi dari hukum kekekalan energi yang berbunyi energi tidak dapat diciptakan dan tidak dapat dihilangkan. Menurut Himmelblau, ada enam jenis energi, yaitu (1) kerja (*work*) adalah suatu bentuk yang menunjukkan perpindahan antara sistem dan sekitarnya. Kerja bernilai positif ketika dilakukan pada sistem. (2) Kalor (*heat*) adalah bagian dari aliran energi total yang mengalir melewati kondisi batas yang disebabkan oleh perbedaan suhu antara sistem dan sekitarnya. (3) Energi kinetik adalah energi yang dimiliki oleh suatu sistem karena kecepatannya relatif terhadap sekitarnya. (4) Energi potensial adalah energi yang dimiliki oleh suatu sistem karena gaya yang disesakkan pada massanya oleh medan gravitasi atau elektromagnetik terhadap permukaan referensi. (5) Energi internal adalah pengukuran makroskopik dari energi molekuler, atomik, dan subatomik yang semuanya mengikuti kaidah konservasi tertentu. (6) Entalpi merupakan kombinasi dari dua variabel pada kesetimbangan energi.

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca energi adalah konveksi dan konduksi dengan persamaan pada koordinat silinder (Bird, 1994):

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 \\
 & = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \\
 & + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_r \right) \right]^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\
 & + \mu \underbrace{\left\{ \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right\}}_4
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat balok:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 \\
 & = k \underbrace{\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \\
 & + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\
 & + \mu \underbrace{\left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right\}}_4
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

- Koordinat bola:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right)}_2 \\
 & = k \underbrace{\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \right]}_3 \\
 & + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta \cot \theta}{r} \right)^2 \right\} \\
 & + \mu \left\{ \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right]^2 \right. \\
 & \left. + \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\phi}{r} \right) \right]^2 + \left[\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v_\phi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right]^2 \right\} + \underbrace{Q}_5
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

dimana,

*1 = suku akumulasi

*2 = suku konveksi

*3 = suku konduksi

*4 = suku transformasi kecepatan aliran menjadi energi

*5 = suku generasi panas

ρ = massa jenis campuran

C_v = kapasitas panas

T = temperatur

k = konduktivitas termal

μ = viskositas campuran

2.5.3 Neraca Momentum

Tidak seperti energi, momentum didefinisikan dengan persamaan yang lebih sederhana yaitu massa dan kecepatan ($p=mv$). Momentum adalah besaran vektor, yaitu besaran yang memiliki arah. Momentum sebuah partikel dapat dipandang sebagai ukuran kesulitan untuk mendiamkan benda. Persamaan neraca momentum akan memberikan gambaran terhadap apa yang terjadi pada suatu sistem melalui pola alirannya. Sifat fisik yang akan menggambarkan resistansi aliran dari fluida ini dikenal dengan viskositas.

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca momentum digambarkan dengan persamaan pada koordinat silinder (Bird, 1994):

- Komponen r

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_r}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 \\ + \underbrace{\rho g_r}_5 \end{aligned} \quad (2.8)$$

- Komponen Θ

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_\theta}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right]}_4 \\ + \underbrace{\rho g_\theta}_5 \end{aligned} \quad (2.9)$$

- Komponen z

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_z}_5 \end{aligned} \quad (2.10)$$

dimana,

*1 = suku akumulasi

*2 = suku momentum dari konveksi

*3 = suku tekanan

*4 = suku momentum dari viskositas

*5 = suku gravitasi

2.6 Computational Fluid Dynamics (CFD)

Computational Fluid Dynamics (CFD) adalah sebuah analisa dari suatu sistem meliputi aliran fluida, transfer energi, pembakaran serta reaksi kimia yang menggunakan simulasi yang berbasis komputasi (Coker, 2001). Contoh penggunaan dalam ruang lingkup teknik kimia meliputi

- Polimerisasi
- Aliran multifasa dalam reaktor
- Pemodelan Reaksi
- Sedimentasi
- Separasi
- Jaringan pipa kompleks
- Mixing

CFD mengandung tiga elemen penting, yaitu yaitu *pre-processor*, *solver* dan *post-processor*. *Pre-processor* terdiri dari memasukan sebuah masalah dalam program CFD menggunakan format yang sesuai. Beberapa langkah dalam *pre-processor* meliputi:

- Menentukan geometri sistem yang akan disimulasikan.
- Menentukan *grid*.
- Menentukan fenomena-fenomena fisik dan kimia yang terjadi di dalam sistem yang dibuat geometrinya.
- Menentukan sifat fisik dan kimia fluida yang digunakan dalam simulasi.
- Menentukan kondisi batas yang tepat

Keakuratan dari CFD sangat bergantung pada jumlah sel pada *grid*. Semakin banyak jumlah sel yang dibuat semakin akurat perhitungan yang dilakukan oleh CFD. Namun dengan tingginya jumlah sel, maka spesifikasi komputer yang digunakan juga lebih tinggi.

Elemen kedua yaitu *solver*, atau penyelesaian masalah (perhitungan). Ada tiga metode numerik yang digunakan oleh CFD, yaitu metode *finite different*, metode elemen hingga, dan metode spektral. Dalam melakukan perhitungan, ketiga metode ini mengikuti langkah-langkah berikut :

- Pendekatan dari aliran-aliran yang tidak diketahui secara sederhana.
- Diskritisasi atau pemotongan-pemotongan menjadi beberapa elemen yang setiap elemennya memiliki persamaan.
- Solusi dari persamaan aljabar

Elemen ketiga adalah *post-procesor*, yaitu untuk melihat berbagai macam solusi yang telah dihitung pada tahap *solver*. Solusi ini dapat berupa beberapa bentuk meliputi: gambar vektor, gambar permukaan 2D maupun 3D. Penggunaan CFD yang tepat adalah ketika penggunaannya mengerti fenomena fisik dan kimia yang terjadi pada model tersebut. Teknik modelling yang baik diperlukan dalam menentukan asumsi-asumsi sehingga kompleksitas masalah menjadi sederhana. Pengetahuan tentang algoritma solusi numeris yang cukup juga diperlukan. Konsep matematika untuk menentukan kesuksesan algoritma meliputi konvergensi, konsistensi dan stabilitas.

2.7 Metode Elemen Hingga

Metode elemen hingga atau *Finite Element Method* (FEM) adalah suatu teknik numeris untuk mendapatkan solusi tepat baik dari persamaan diferensial parsial maupun persamaan integral. Solusi ini didasarkan dengan mengeliminasi seluruh persamaan diferensial (*steady state*) ataupun mengubah persamaan diferensial parsial tersebut menjadi sistem dari persamaan diferensial biasa, yang kemudian diintegrasikan secara numeris menggunakan metode Euler, Runge Kutta, dan lainnya.

Dalam menyelesaikan persamaan diferensial parsial, tantangan utamanya adalah membuat suatu persamaan yang mengindikasikan persamaan yang dipelajari. Ada banyak metode untuk melakukan hal ini dengan segala keuntungan dan kesulitannya sendiri. Metode elemen hingga merupakan pilihan yang baik untuk menyelesaikan persamaan diferensial parsial rumit.

Metode elemen hingga pertama kali dibuat untuk menyelesaikan masalah elastisitas kompleks dan analisis struktur dalam teknik sipil dan *aeronautical*. Metode elemen hingga dikembangkan oleh Alexander Hrennikoff (1941) dan Richard Courant (1942).

Berbagai macam spesialisasi dalam teknik mesin (seperti *aeronautical*, biomekanikal dan industri otomotif) biasanya menggunakan metode elemen hingga terintegrasi dalam mendesain dan mengembangkan produk mereka. Metode elemen hingga dapat menggunakan visualisasi detail ketika strukturnya bengkok ataupun diputar dan menunjukkan distribusi tegangannya. Perangkat

lunak metode elemen hingga menyediakan pilihan simulasi yang luas untuk mengontrol kompleksitas model dan analisis dari suatu sistem.

FEM dapat menangani beberapa masalah meliputi (Burnett, 1987):

- Berbagai masalah matematika dan fisika meliputi persamaan kalkulus seperti diferensial, integral, dan variasi dari persamaan-persamaan
- Masalah *boundary-value* (seperti masalah *steady state*), masalah eigen (fenomena resonansi dan stabilitas) dan masalah *initial-value* (difusi, vibrasi dan propagasi gelombang)
- Sifat fisik (seperti densitas, permeabilitas, konduktivitas yang bervariasi pada sistem)
- Masalah dapat berupa linear dan non-linear

Selain FEM, ada sebuah metode untuk menyelesaikan persamaan diferensial, yaitu *Finite Difference Method* (FDM). Perbedaan antara FEM dan FDM adalah :

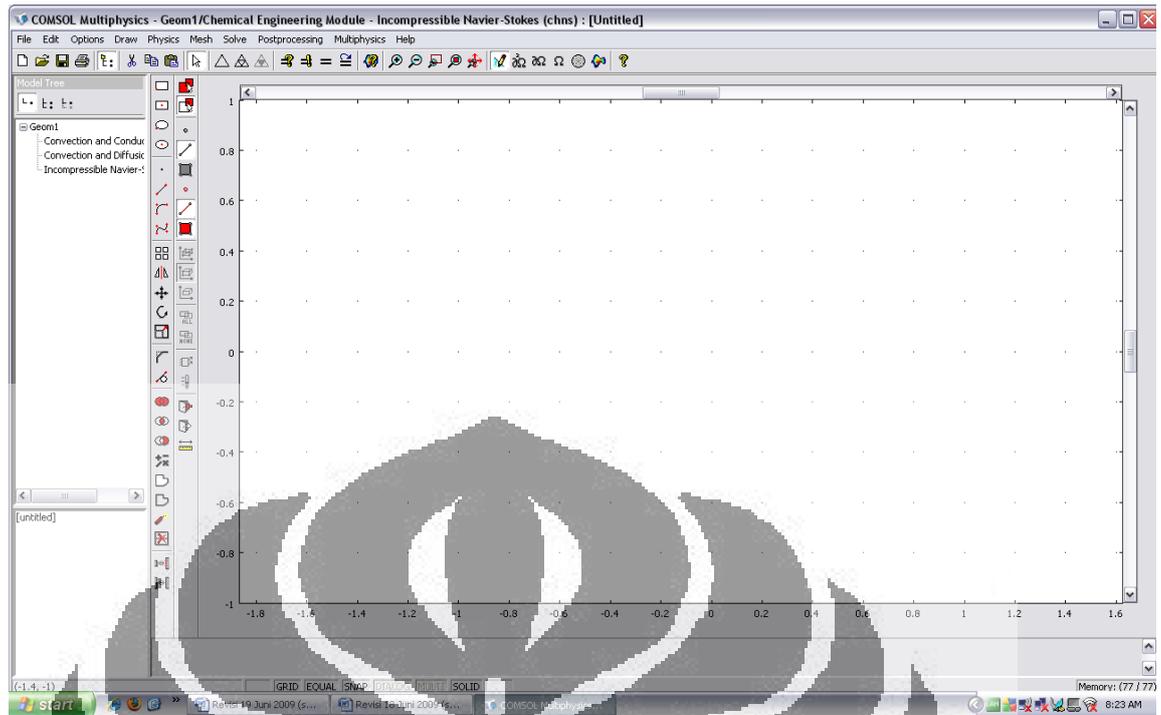
- FDM adalah suatu pendekatan ke persamaan diferensial, sedangkan FEM adalah pendekatan ke hasilnya
- FEM dapat mengatasi masalah dalam geometri rumit, sedangkan FDM hanya dapat menyelesaikan geometri dasar seperti persegi panjang dan lingkaran.
- FDM lebih mudah jika dibandingkan dengan FEM
- Kualitas pendekatan FEM jauh lebih tinggi dibandingkan FDM

Salah satu perangkat lunak yang menggunakan metode *finite element* sebagai dasar perhitungan adalah COMSOL Multiphysics. COMSOL Multiphysics adalah perangkat lunak yang dapat menganalisis dan menyelesaikan berbagai aplikasi fisika dan teknik, terutama yang berfenomena ganda, yang dikenal sebagai multiphysics. COMSOL dapat dijalankan dalam berbagai sistem operasi (Windows, Mac, Linux, Unix). Tampilan awal COMSOL terlihat pada Gambar 2.6.



Gambar 2.6 Program COMSOL

COMSOL Multiphysics juga dapat memasukkan sistem persamaan diferensial parsial ganda. Ada beberapa alasan yang mendasari penggunaan COMSOL dalam penelitian ini, yaitu: program ini merupakan program *user friendly* yang membuat penggunaanya mudah dalam memasukkan modelnya sendiri dan parameter-parameter koefisien lainnya, kondisi batas, kondisi awal dan hubungannya dengan fenomena fisika lain. Kedua, program ini dibuat berdasarkan MATLAB, sehingga seluruh kegunaan pemrograman yang diperlukan untuk menyusun model bertingkat kesulitan tinggi tersedia. Ketiga, program ini berdasar pada gambar geometri dan fenomena-fenomena yang terjadi pada model tersebut. Ruang kerja COMSOL Multiphysics dapat dilihat pada Gambar 2.7.

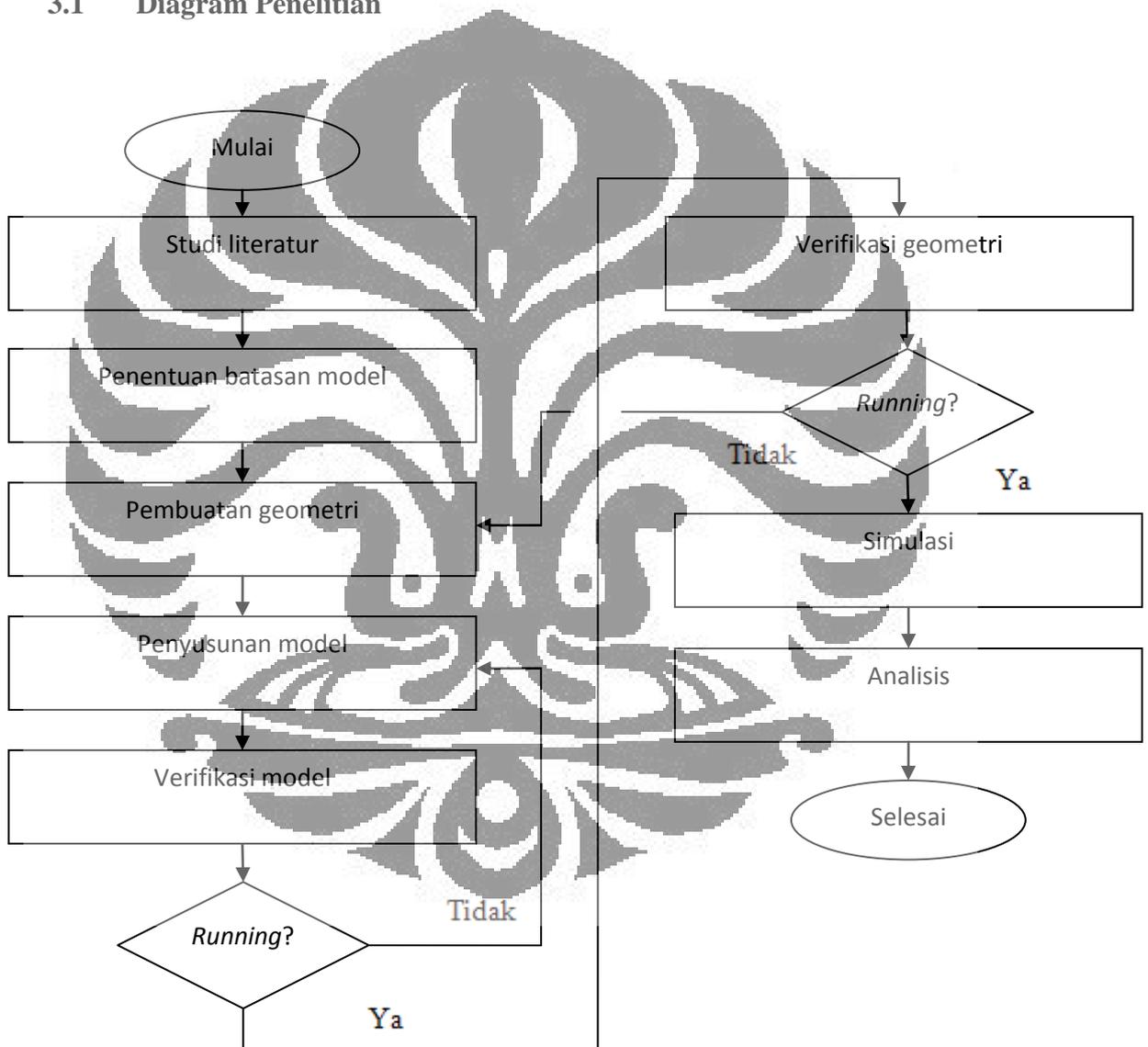


Gambar 2.7 User Interface COMSOL

BAB III METODE PENELITIAN

Pada bab ini berisikan diagram penelitian yang digunakan dalam penelitian ini serta penjelasan-penjelasan terhadap langkah-langkah pada diagram penelitian tersebut.

3.1 Diagram Penelitian



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.2 Prosedur Penelitian

Seperti terlihat pada Gambar 3.1, untuk mencapai tujuan akhir dalam penelitian ini, yaitu scale up reaktor, ada beberapa langkah yang dilakukan dalam penelitian ini yang meliputi:

3.2.1 Studi Literatur

Studi literatur mengenai reaksi dekomposisi metana menjadi CNT dan hidrogen, reaktor beserta katalis terstruktur bentuk pelat, dan program COMSOL. Hal ini ditujukan agar mengerti tentang permasalahan yang terjadi.

3.2.2 Penentuan Batasan Model

Penentuan batasan model untuk reaktor katalis terstruktur yang terdiri dari neraca massa, neraca energi dan neraca momentum. Penentuan batasan model ini bertujuan untuk menyederhanakan pemodelan dengan memasukkan asumsi-asumsi yang telah ditetapkan sebelumnya.

3.2.3 Pembuatan Geometri

Pembuatan geometri meliputi geometri reaktor dan geometri pelat sejajar. Geometri reaktor terbuat dari silinder sedangkan geometri pelat sejajar terbuat dari susunan balok. Kedua geometri ini dibuat se-ril mungkin dimana seluruh ukuran mengacu pada reaktor hasil scale-up oleh Refani Iskandar, 2009 yang memiliki panjang efektif sebesar 32 cm.

3.2.4 Penyusunan Model

Penyusunan model dari hasil penurunan rumus pada langkah penentuan batasan model. Model ini dimasukkan ke dalam ruang kerja COMSOL Multiphysics sehingga model hasil penurunan tersebut dapat dijalankan pada program COMSOL Multiphysics. Persamaan-persamaan ini dimasukkan dalam beberapa bagian dalam COMSOL Multiphysics, yaitu *subdomain settings* untuk persamaan neraca massa, energi dan momentum, *boundary settings* untuk kondisi batas neraca massa energi dan momentum, serta constants dan scalar expressions

untuk persamaan-persamaan lainnya seperti koefisien difusi, konduktivitas termal dan lainnya.

3.2.5 Verifikasi Model

Setelah geometri dan model dimasukkan, langkah berikut yang dilakukan adalah verifikasi model, yaitu apakah dengan model yang telah dimasukkan program COMSOL Multiphysics dapat dirunning. Jika ya, maka langkah-langkah dalam metodologi penelitian ini dapat dilanjutkan. Namun jika tidak, maka kembali ke langkah penyusunan model (4) untuk memperbaiki kesalahan dalam pemasukan model ke dalam COMSOL. Kesalahan-kesalahan ini biasanya terjadi karena kesalahan tanda model, adanya variabel yang belum dimasukkan, pemasukan terkaan awal (*initial value*), serta faktor satuan.

Untuk kesalahan dalam pemasukan tanda model dapat dilihat dari hasil output pada COMSOL, contohnya seperti pemasukkan laju reaksi, ketika salah pemasukkan tanda maka yang terjadi adalah penambahan konsentrasi metana. Ketika adanya kesalahan variabel yang belum dimasukkan, COMSOL Multiphysics akan berhenti melakukan perhitungan dan memberitahukan bahwa suatu variabel tidak ada dalam ruang kerjanya. Ketika terjadi kesalahan terkaan awal, biasanya COMSOL tidak dapat menyelesaikan perhitungan dengan pesan *error* bahwa hasil tidak konvergen. Kesalahan yang juga sering dilakukan adalah kesalahan pada faktor satuan. COMSOL Multiphysics tidak dapat menggunakan satuan berpangkat setengah (seperti $\text{bar}^{1/2}$ pada konstanta Arrhenius). Untuk itu penggunaannya harus secara kreatif membuat satuan-satuan tersebut tidak berpangkat setengah tanpa mengubah nilainya.

3.2.6 Verifikasi Geometri

Selain kesalahan akibat pemasukan model, COMSOL Multiphysics juga terkadang tidak dapat menyelesaikan suatu model oleh karena geometri dari model tersebut yang terlalu sulit dan meshing yang terlalu tinggi. Untuk menanggulangi hal tersebut, pengguna COMSOL dapat mengurangi bentuk geometri tersebut dengan membaginya menjadi beberapa bagian serta

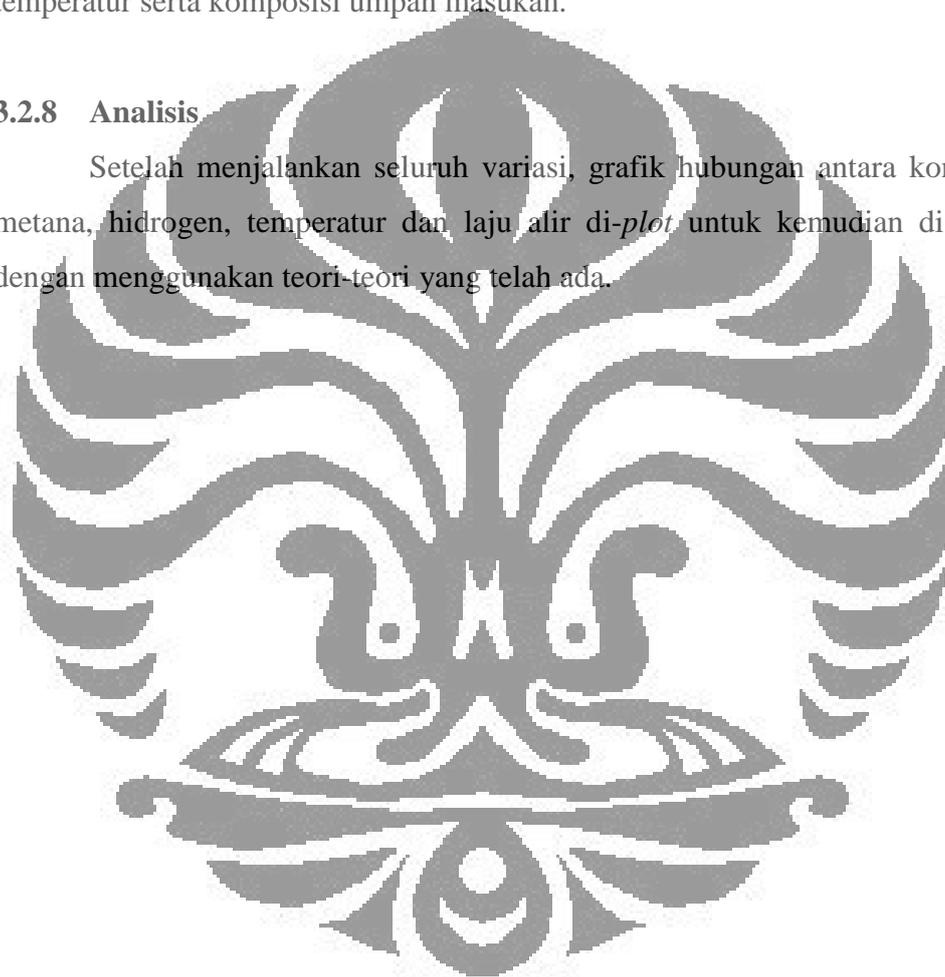
menurunkan tingkat meshing yang digunakan dalam model tersebut meskipun hal ini juga berarti kurang dalam ketelitian suatu simulasi.

3.2.7 Simulasi

Setelah melakukan verifikasi model dan geometri, simulasi dapat dilakukan dengan menggunakan data-data masukan tekanan, temperatur, laju alir dan komposisi tertentu. Selain itu juga dilakukan variasi berupa laju alir, tekanan, temperatur serta komposisi umpan masukan.

3.2.8 Analisis

Setelah menjalankan seluruh variasi, grafik hubungan antara konsentrasi metana, hidrogen, temperatur dan laju alir di-*plot* untuk kemudian di analisis dengan menggunakan teori-teori yang telah ada.



BAB IV PEMODELAN DAN SIMULASI

Pada bab ini berisikan pemodelan yang dilakukan untuk mensimulasikan dekomposisi katalitik metana dengan menggunakan katalis terstruktur bentuk pelat. Pemodelan ini meliputi penurunan model-model dari persamaan umum yang terdapat pada bab 2 beserta asumsi yang digunakan, pembuatan geometri pada program COMSOL serta memasukkan penurunan model tersebut dalam COMSOL.

4.1 Penyusunan Model Matematis

Persamaan model matematis ini dibagi menjadi tiga bagian yaitu neraca massa, energi dan momentum yang akan disederhanakan dengan mengikuti fenomena-fenomena dalam reaktor berkatalis terstruktur model pelat.

4.1.1 Neraca Energi

Neraca Energi yang digunakan dibagi menjadi dua yaitu neraca energi skala reaktor dan neraca energi skala katalis dimana keduanya dihubungkan dengan transfer energi antar fasa pada lapisan batas.

4.1.1.1 Skala Reaktor

Seperti yang tertulis pada Tinjauan Pustaka, Persamaan neraca energi untuk koordinat silinder adalah:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 \\
 & = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \\
 & + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_r \right) \right]^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\
 & + \underbrace{\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right\}}_4 + \underbrace{Q}_5
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

dimana *1 merupakan suku akumulasi, *2 merupakan suku konveksi, *3 merupakan suku konduksi, *4 merupakan suku transformasi kecepatan aliran menjadi energi sedangkan *5 merupakan generasi panas. Untuk menyederhanakan persamaan diatas, maka perlu ditetapkan beberapa asumsi meliputi:

- Pengaruh penambahan transformasi energi kinetik menjadi energi panas pada sistem dianggap terlalu kecil sehingga dapat diabaikan dan tidak ada generasi panas. Setelah mengaplikasikan asumsi suku *4 dan *5 dapat diabaikan dalam persamaan, sehingga persamaan ini maka persamaan tersebut menjadi:

$$\underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.1)$$

- *Steady state* (tidak ada akumulasi). Setelah mengaplikasikan asumsi ini suku *1 dapat diabaikan sehingga persamaan menjadi :

$$\underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.2)$$

4.1.1.2 Skala Katalis

Sama seperti neraca energi skala reaktor, skala katalis juga diturunkan dari persamaan 2.5. Dengan memasukkan tidak ada konveksi pada skala katalis, aliran *steady state*, pengaruh penambahan transformasi energi kinetik menjadi energi panas pada sistem dianggap terlalu kecil, dan tidak ada generasi energi di dalam padatan katalis, praktis persamaan neraca energi skala katalis menjadi

$$0 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.3)$$

4.1.1.3 Neraca Energi pada Lapisan Batas

Neraca energi di lapisan batas mewakili transfer energi antara skala reaktor dan skala partikel katalis. Persamaan inilah yang menyebabkan profil di

skala reaktor juga dipengaruhi oleh perubahan profil di skala katalis. Dalam persamaan matematis, Fluks energi pada lapisan film adalah sebagai berikut :

$$-k \left(\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{\partial T}{\partial z} \right) = q_0 \quad (4.4)$$

Reaksi terjadi pada permukaan katalis, sehingga membuat adanya konsumsi energi yang dibutuhkan reaksi dimana,

$$q_0 = -rate \times \Delta H \quad (4.5)$$

4.1.2 Neraca Massa

Sama seperti neraca energi, neraca massa juga dibagi menjadi dua yaitu skala reaktor dan skala katalis yang keduanya juga dihubungkan dengan persamaan transfer massa antar fasa.

4.1.2.1 Skala Reaktor

Persamaan untuk koordinat silinder adalah:

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \mathcal{D}_{AB} \underbrace{\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (2.2)$$

dimana *1 merupakan suku difusi, *2 merupakan suku konveksi, *3 merupakan suku difusi dan *4 merupakan suku generasi massa. Sama seperti persamaan energi, untuk menyederhanakan persamaan diatas perlu ditetapkan beberapa asumsi, meliputi:

- *Steady state* (tidak ada akumulasi) dan tanpa generasi massa. Setelah mengaplikasikan asumsi ini suku *1 dan *4 dapat diabaikan sehingga persamaan menjadi:

$$\underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 \quad (4.6)$$

4.1.2.2 Skala Katalis

Skala katalis juga didasarkan pada persamaan (2.2), dimana dengan mengaplikasikan bahwa aliran *steady state*, tidak ada difusi fluida di dalam katalis, dan tidak adanya konveksi, maka persamaan menjadi:

$$\underbrace{R_A}_4 = 0 \quad (4.7)$$

4.1.2.3 Neraca Massa pada Lapisan Batas

Sama seperti neraca energi, persamaan transfer antar fasa inilah yang menyebabkan profil di skala reaktor juga dipengaruhi oleh perubahan profil di skala katalis. Fluks massa pada lapisan film adalah sebagai berikut :

$$N = -D \left(\frac{\partial c_A}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) + c_A \cdot v \quad (4.8)$$

Karena reaksi terjadi di permukaan katalis, maka nilai N merupakan fluks laju reaksi yaitu

$$N = \text{rate} \cdot \frac{W}{A} \quad (4.9)$$

dimana W/A merupakan *loading* katalis.

Untuk persamaan laju reaksi, digunakan persamaan kinetika snoeck (Snoeck, 1996) yaitu:

$$\text{rate} = \frac{k_M^+ \cdot K_{CH_4} \cdot p_{CH_4} - \frac{k_M^-}{K_r} \cdot p_{H_2}^2}{\left(1 + \frac{1}{K_r} \cdot p_{H_2}^2 + K_{CH_4} \cdot p_{CH_4} \right)^2} \quad (4.10)$$

dimana,

$$k_M^+ = 23444 \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}} \right] \cdot e^{\frac{-59033 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R \cdot T}} \quad (4.11)$$

$$K_{CH_4} = 4389 \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{bar}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{h}} \right] \cdot e^{\frac{-60522 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R \cdot T}} \quad (4.12)$$

$$k_M^- = 0,21 [\text{bar}^{-1}] \cdot e^{\frac{-143 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R \cdot T}} \quad (4.13)$$

$$K_r'' = 1,109 \cdot 10^8 \left[\text{bar}^{\frac{3}{2}} \right] \cdot e^{\frac{-137314 \left[\frac{J}{\text{mol}} \right]}{R \cdot T}} \quad (4.14)$$

4.1.3 Neraca Momentum

Untuk persamaan momentum, hanya ada skala reaktor karena katalis tidak bergerak. Persamaan untuk neraca momentum pada silinder adalah

- Komponen r

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_r}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 \\ + \underbrace{\rho g_r}_5 \end{aligned} \quad (2.8)$$

- Komponen θ

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_\theta}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right]}_4 \\ + \underbrace{\rho g_\theta}_5 \end{aligned} \quad (2.9)$$

- Komponen z

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_z}_5 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Persamaan ini juga dapat disederhanakan dengan asumsi sebagai berikut.

- *Steady state* (tidak ada akumulasi). Setelah mengaplikasikan asumsi ini suku *1 dapat diabaikan sehingga persamaan menjadi :

- Komponen r

$$\begin{aligned} & \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ & = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 \\ & \quad + \underbrace{\rho g_r}_5 \end{aligned} \quad (4.15)$$

- Komponen Θ

$$\begin{aligned} & \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)}_2 \\ & = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right]}_4 \\ & \quad + \underbrace{\rho g_\theta}_5 \end{aligned} \quad (4.16)$$

- Komponen z

$$\begin{aligned} & \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_2 \\ & = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_z}_5 \end{aligned} \quad (4.17)$$

- Pengaruh gravitasi terhadap kecepatan terlalu kecil dan tidak ada faktor gaya lainnya. Setelah mengaplikasikan asumsi ini suku *5 dapat diabaikan sehingga persamaan menjadi:

- Komponen r

$$\begin{aligned} & \underbrace{\rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ & = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 + \underbrace{\mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 \end{aligned} \quad (4.18)$$

▪ Komponen Θ

$$\rho \left(\underbrace{v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r}}_2 + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 + \mu \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right)}_4 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right] \quad (4.19)$$

▪ Komponen z

$$\rho \left(\underbrace{v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z}}_2 \right) = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \mu \left[\underbrace{\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right)}_4 + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \quad (4.20)$$

4.1.4 Kondisi Batas Skala Reaktor

Untuk menyederhanakan model, umpan masukan reaktor dianggap tetap, baik dalam konsentrasi, temperatur maupun kecepatannya, sehingga berlaku persamaan pada $z = 0$ adalah

$$C = C_0 \quad (4.21)$$

$$T = T_0 \quad (4.22)$$

$$u = u_0 \quad (4.23)$$

Pada dinding reaktor, tidak ada massa yang keluar sehingga tidak ada gradien konsentrasi, sedangkan untuk neraca energinya, temperatur dinding diatur pada temperatur tertentu (dikarenakan oleh *furnace*) dan untuk neraca momentum, tidak ada aliran masuk maupun keluar pada dinding, sehingga persamaan yang berlaku pada $r = R$ adalah

$$\frac{dC}{dt} = 0 \quad (4.24)$$

$$T = T_{wall} \quad (4.25)$$

$$u = 0 \quad (4.26)$$

Untuk bagian akhir dari reaktor tersebut, tidak ada massa maupun energi yang keluar, sehingga tidak ada gradien konsentrasi dan temperatur, sedangkan untuk neraca momentum, tekanan akhir diasumsikan hampir sama dengan tekanan awal. Persamaan yang berlaku pada $z = L$ adalah

$$\frac{dC}{dt} = 0 \quad (4.27)$$

$$\frac{dT}{dt} = 0 \quad (4.28)$$

$$P = P_0 \quad (4.29)$$

Pada permukaan katalis, terjadi reaksi pembentukan karbon, hidrogen, pengurangan metana serta penambahan panas. Sehingga pada permukaan katalis berlaku persamaan transfer antar fasa baik massa maupun energi.

4.1.5 Parameter Proses

Selain penurunan persamaan serta kondisi batas, ada beberapa parameter proses yang perlu diketahui secara *trial and error*. Variabel-variabel ini bergantung pada suhu, tekanan serta konsentrasi, sehingga agar mencapai hasil yang akurat, variabel-variabel tersebut harus dicantumkan dalam model. Variabel-variabel terikat ini meliputi:

- Koefisien difusi (Bird, 1994)

Difusivitas atau koefisien difusi merupakan konstanta proporsional antara fluks molar karena difusi molekul dan gradien konsentrasi dari suatu campuran. Umumnya koefisien difusi berpasangan, dimana semakin tinggi difusivitasnya (dari suatu bahan terhadap bahan lain), semakin cepat bahan tersebut berdifusi satu sama lain.

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{CA}p_{CB})^{\frac{1}{3}}(T_{CA}T_{CB})^{\frac{5}{12}}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{\frac{1}{2}}} = a \left(\frac{T}{\sqrt{T_{CA}T_{CB}}}\right)^b \quad (4.30)$$

dimana,

p = tekanan

D_{AB} = koefisien difusivitas

$p_{CA,B}$ = tekanan kritis senyawa

T = suhu

$T_{CA,B}$ = temperatur kritis senyawa

$M_{A,B}$ = massa molekul relatif

$a = 2,745 \times 10^{-4}$

$b = 1,823$

- Viskositas (Coulson, 2005)

Viskositas adalah pengukuran dari ketahanan fluida yang dapat dideformasi oleh tegangan geser dan tegangan tensil. Semakin besar

viskositasnya, suatu bahan akan lebih sulit mengalir dibandingkan dengan bahan yang memiliki viskositas rendah.

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.31)$$

dimana,

μ_m = viskositas campuran

μ_i = viskositas komponen i

y_i = fraksi mol komponen i

M_i = massa molekul relatif komponen i

- Konduktivitas Termal (Coulson, 2005)

Konduktivitas termal suatu bahan menentukan kemampuan bahan tersebut untuk mengalirkan panas. Konduktivitas panas dapat menentukan daya yang hilang yang melewati suatu bahan.

$$k = \mu_m \left(C_p + \frac{5 * R}{4 * M} \right) \quad (4.32)$$

dimana,

k = konduktivitas termal

R = konstanta gas

μ_m = viskositas campuran

M = massa molekul relatif

C_p = kapasitas panas

- Densitas (Persamaan Gas Ideal)

Densitas bahan didefinisikan sebagai massa dari bahan tersebut dibagi dengan volumenya. Secara umum, densitas dapat berubah seiring dengan perubahan tekanan dan temperatur. Ketika tekanannya dinaikkan maka densitas suatu bahan akan naik. Ketika temperatur dinaikkan, pada umumnya densitas akan turun kecuali pada kasus tertentu. Perubahan densitas yang dipengaruhi oleh tekanan dan temperatur cukup kecil pada liquid dan solid, tetapi pada wujud gas, densitasnya sangat dipengaruhi oleh tekanan. Densitas dari gas ideal adalah

$$\rho_b = \frac{p * M}{R * T} \quad (4.33)$$

dimana,

ρ_b = densitas

R = konstanta ksetimbangan gas

M = massa molekul relatif

- Kapasitas Panas (Coulson, 2005)

Kapasitas panas adalah pengukuran dari suatu energi panas yang dibutuhkan untuk menaikkan temperatur. Semakin besar kapasitas panas suatu bahan, semakin tinggi energi yang dibutuhkan untuk meningkatkan temperatur.

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i * x_i + Cp_j * x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.34)$$

dimana,

Cp_{mix} = kapasitas panas campuran

$Cp_{i,j}$ = kapasitas panas komponen

$x_{i,j}$ = fraksi mol komponen

Mr_{mix} = massa molekul relatif campuran

4.2 Langkah-langkah Pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics

Untuk menggunakan suatu perangkat lunak, tentunya ada beberapa prosedur yang harus dipenuhi sebelum perangkat lunak tersebut dapat membantu memecahkan masalah penggunaannya. Di dalam pengerjaan dalam COMSOL, ada beberapa komplikasi dalam pembuatan reaktor kimia, yaitu ketika adanya geometri padatan dalam reaktor, dimana padatan tersebut berupa katalis, neraca massa (konsentrasi) dan energi (temperatur) dapat melewatinya. Namun kedua persamaan ini tidak diikuti dengan neraca momentum yang tidak dapat diaplikasikan pada model tersebut yang disebabkan aliran kecepatan tidak menganggap pelat katalis tersebut sebagai penghalang sehingga menyebabkan *error*.

Di sisi lain, ketika katalis tersebut ditiadakan sehingga geometri katalis menjadi sesuatu yang kosong (tidak memiliki sifat fisik dan kimia), neraca massa

dan momentum dapat melewatinya. Namun tidak halnya dengan neraca energi yang tidak dapat menembus geometri katalis yang dianggap kosong. Temperatur dari dinding tidak dapat menembus geometri tersebut karena geometri pelat tidak memiliki variabel konduktivitas termal sehingga membuat transfer energi ke katalis bagian tengah menjadi terganggu.

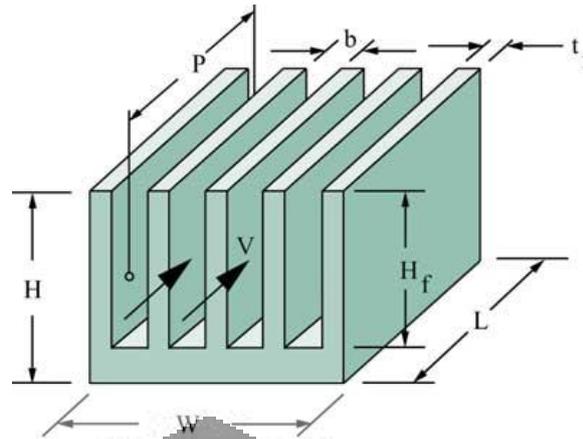
Untuk itu, reaktor berkatalis terstruktur pelat didekati dengan menggunakan dua buah model. Pada model pertama, terdapat perpindahan massa dan energi, sedangkan neraca momentum diwakili persamaan *pressure drop*. Tujuan dari model pertama ini adalah melihat pengaruh temperatur yang berubah karena dikonsumsi (reaksi endotermis) terhadap reaksi. Sedangkan pada model kedua, karena telah diasumsikan bahwa reaksi terjadi di permukaan katalis sehingga model tersebut dapat tidak menggunakan geometri katalis. Namun karena energi tidak dapat lewat pada model ini, suhu dianggap isothermal disepanjang reaktor. Tujuan dari model yang kedua ini adalah melihat pengaruh pola aliran terhadap konversi.

Kedua model ini akan dibahas secara terpisah dan lebih mendalam pada sub bab berikutnya baik dalam pembuatan geometri maupun pemasangan model ke dalam program COMSOL Multiphysics.

4.2.1 Model Pertama

Seperti yang telah disebutkan sebelumnya, peneliti membagi 2 bagian dari fenomena-fenomena yang terdapat pada reaktor berkatalis terstruktur pelat. Pada asumsi yang pertama, peneliti menggunakan persamaan empiris untuk mengevaluasi *pressure drop* yang terjadi dalam reaktor.

Persamaan empiris untuk menghitung *pressure drop* dari reaktor berkatalis terstruktur bentuk pelat, peneliti mendekati *pressure drop* dari sirip bentuk pelat untuk menurunkan panas (*plate fin heat sink*) seperti ditunjukkan Gambar 4.1.



Gambar 4.1 Plate Fin Heat Sink (Electronic cooling, 2003)

Untuk menghitung *pressure drop* sepanjang sirip ini digunakan persamaan

$$\Delta P = \left(K_c + 4 \cdot f_{app} \cdot \frac{L}{D_h} + K_e \right) \cdot \rho \frac{V^2}{2} \quad (4.35)$$

dimana,

L = panjang sirip dalam arah aliran

D_h = diameter hidrolik

V = laju alir rata-rata

Diameter hidrolik kira-kira sama dengan $2b$ dimana b adalah jarak antar pelat yang menggunakan persamaan

$$b = \frac{W - N_{fin} \cdot t_f}{N_{fin} - 1} \quad (4.36)$$

dimana,

N_{fin} = jumlah sirip

t_f = tebal sirip

W = tebal sirip dari sirip teratas hingga sirip terbawah

Koefisien K_c dan K_e mewakili kehilangan tekanan yang disebabkan *sudden contraction* dan *sudden expansion* dari aliran yang memasuki dan meninggalkan pelat. Koefisien ini dapat ditentukan dari persamaan

$$K_c = 0,42 \cdot (1 - \sigma^2) \quad (4.37)$$

dan

$$K_e = (1 - \sigma^2)^2 \quad (4.38)$$

dimana nilai σ dapat ditentukan dari persamaan

$$\sigma = \frac{1 - N_{fin} \cdot t_f}{W} \quad (4.39)$$

Kecepatan rata-rata yang digunakan pada persamaan akan dihubungkan dengan laju alir volumetrik, G dengan persamaan

$$V = \frac{G}{N_{fin} \cdot b \cdot H_f} \quad (4.40)$$

Friksi untuk aliran laminar yang berkembang secara hidrodinamis berhubungan dengan faktor friksi untuk aliran yang berkembang penuh dan dapat dihitung dengan persamaan

$$f_{app} = \frac{\left[\left(\frac{3,44}{\sqrt{L^*}} \right)^2 + (f \cdot Re)^2 \right]^{\frac{1}{2}}}{Re} \quad (4.41)$$

dimana L^* ,

$$L^* = \frac{L/D_h}{Re} \quad (4.42)$$

dan bilangan Reynold dari persamaan

$$Re = \frac{\rho \cdot V \cdot D_h}{\mu} \quad (4.43)$$

dan faktor friksi untuk aliran laminar yang berkembang penuh adalah

$$f = \frac{24 - 32,527 \cdot \lambda + 46,721 \cdot \lambda^2 - 40,829 \cdot \lambda^3 + 22,954 \cdot \lambda^4 - 6,089 \cdot \lambda^5}{Re} \quad (4.44)$$

dimana,

$$\lambda = b/H_f \quad (4.45)$$

Dengan mengasumsikan tidak adanya neraca momentum, kecepatan superficial tidak dapat diselesaikan dengan menggunakan program, sehingga peneliti menambahkan asumsi dimana kecepatan superficial hanya berlangsung ke arah z, sehingga persamaan neraca massa dan energi menjadi:

- Neraca energi

$$\underbrace{\rho C_v \left(v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.46)$$

- Neraca massa

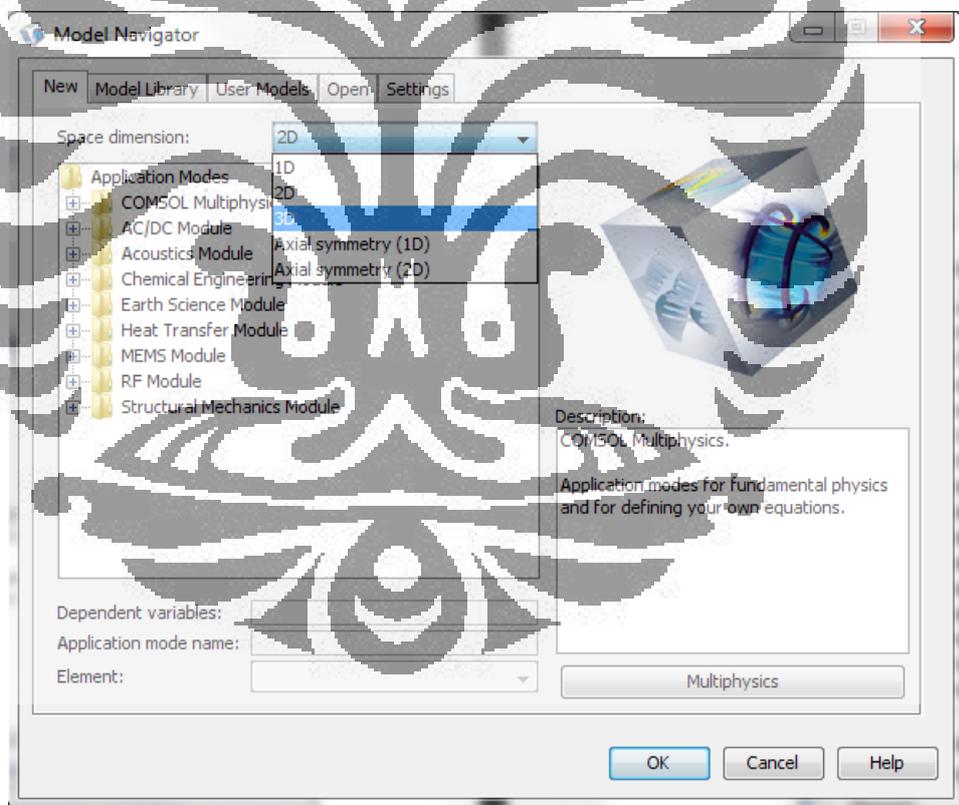
$$\underbrace{\left(v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.47)$$

4.2.1.1 Pembuatan Geometri

COMSOL merupakan suatu perangkat lunak yang menitikberatkan pada geometri atau bentuk dari suatu sistem. Untuk itu, penggunaanya dituntut untuk membuat geometri yang sesuai dengan bentuk yang sesungguhnya. Untuk membuat geometri, langkah-langkah yang harus dilakukan adalah sebagai berikut.

1. Menentukan geometri dari model yang akan dibuat, apakah model tersebut akan berdimensi satu, dua, atau tiga.

Pada pemodelan ini akan menggunakan sistem tiga dimensi agar model yang dibuat menjadi lebih akurat. Untuk itu dalam *space dimension* pada tampilan awal COMSOL, penulis memilih 3D.



Gambar 4.2 Tampilan Awal COMSOL

2. Menentukan fenomena-fenomena apa saja yang dialami oleh model tersebut.

Pada model yang akan dibuat, fenomena dominan yang terjadi adalah perpindahan massa dan energi. Persamaan energi hasil penurunan model:

$$\underbrace{\rho C_v \left(v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.46)$$

Ini sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module >> energy transport>>convection and conduction>>steady state analysis*, yaitu:

$$\nabla \cdot (-k \nabla T) = Q - \rho C_p u \cdot \nabla T \quad (4.48)$$

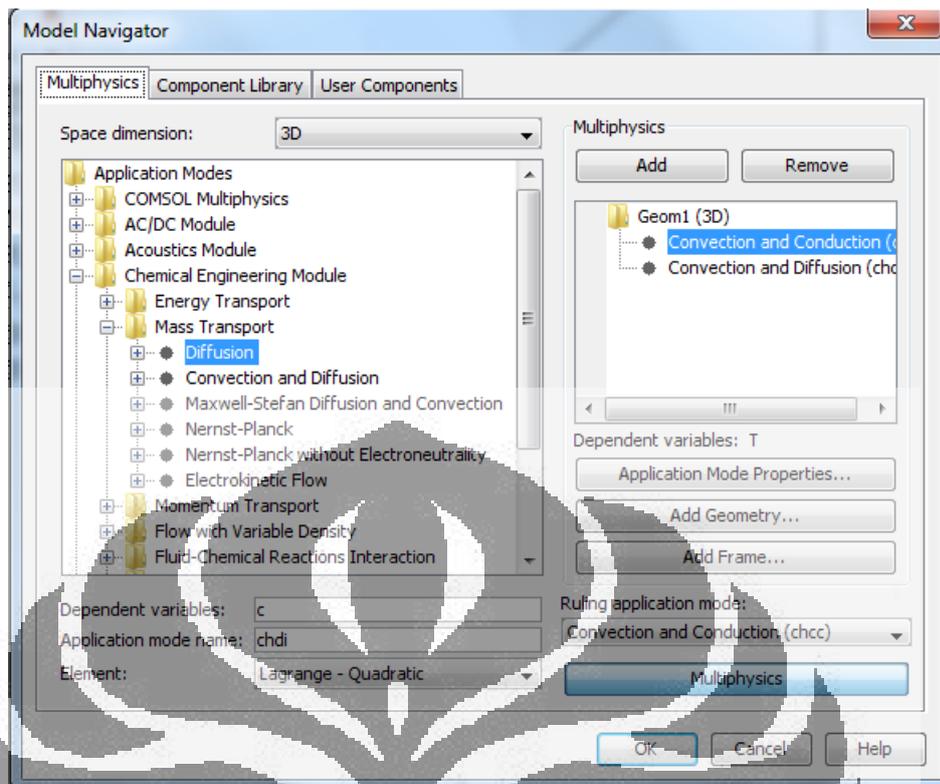
Sedangkan perpindahan massa hasil penurunan model:

$$\underbrace{\left(v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \mathcal{D}_{AB} \underbrace{\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 \quad (4.47)$$

Ini sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module >> mass transport>>convection and diffusion>>steady state analysis*, yaitu:

$$\nabla \cdot (-D \nabla c) = R - u \cdot \nabla c \quad (4.49)$$

Dependent variable (variabel terikat) perlu menjadi perhatian karena akan mempengaruhi hasil yang diperoleh. Untuk modul *convection and conduction*, variabel terikatnya adalah T (temperatur), sedangkan untuk modul *convection and diffusion* yang menjadi variabel terikat adalah c_{ch4} (konsentrasi CH₄) dan c_{h2} (konsentrasi H₂).



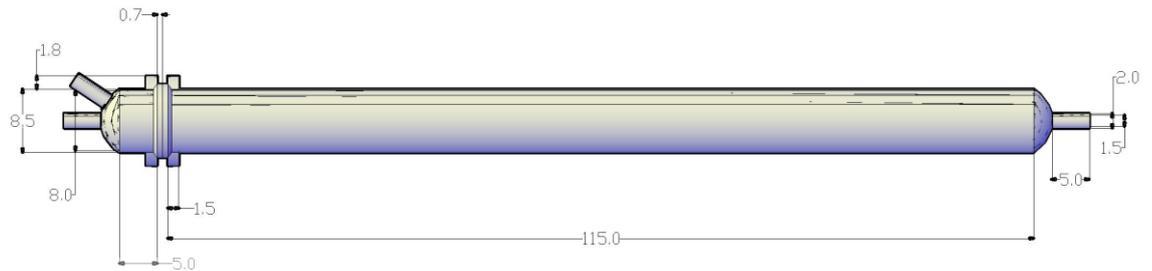
Gambar 4.3 Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan *Multiphysics Model* Pertama

3. Setelah menentukan *multiphysics*nya, langkah selanjutnya adalah membuat geometri dari yaitu membuat geometri.

Untuk membuat model reaktor berstruktur pelat, diperlukan dua geometri, yaitu geometri untuk reaktor dan pelat. Geometri ini didapat dari penelitian yang dilakukan oleh Refani Iskandar, 2009 yang menggunakan reaktor berbentuk tabung, berdiameter 8 cm dan panjang 120 cm, dan menggunakan katalis pelat berupa lembaran stainless steel dengan ukuran sebagai berikut.

- Pelat 1: 55 mm x 320mm x 1mm
- Pelat 2 : 64mm x 320mm x 1mm
- Pelat 3 : 70mm x 320mm x 1mm
- Pelat 4: 73mm x 320mm x 1mm
- Pelat 5: 70mm x 320mm x 1mm
- Pelat 6 : 64mm x 320mm x 1mm
- Pelat 7 : 55 mm x 320mm x 1mm

Jarak antara kawat yang satu dengan kawat yang lain adalah 0,6 cm. Geometri dari reaktor aktual terlihat pada Gambar 4.4



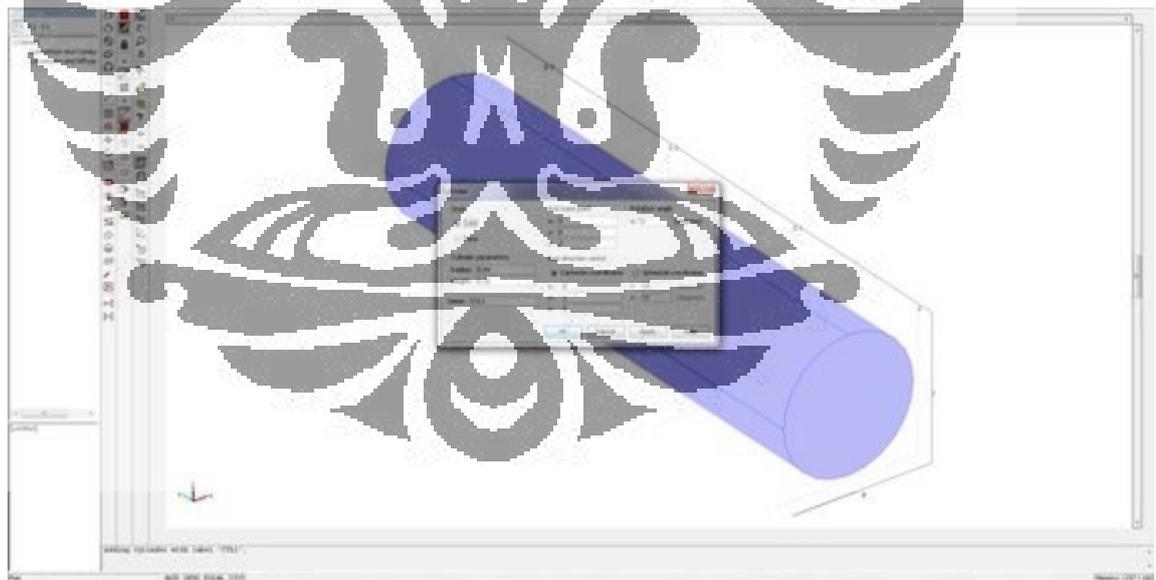
Gambar 4.4 Desain Reaktor

a. Geometri skala reaktor

Menentukan geometri reaktor dari panjang efektif reaksi yang terjadi, dalam hal ini sepanjang pelat katalis. Pembuatan geometri reaktor digambarkan sebagai berikut:

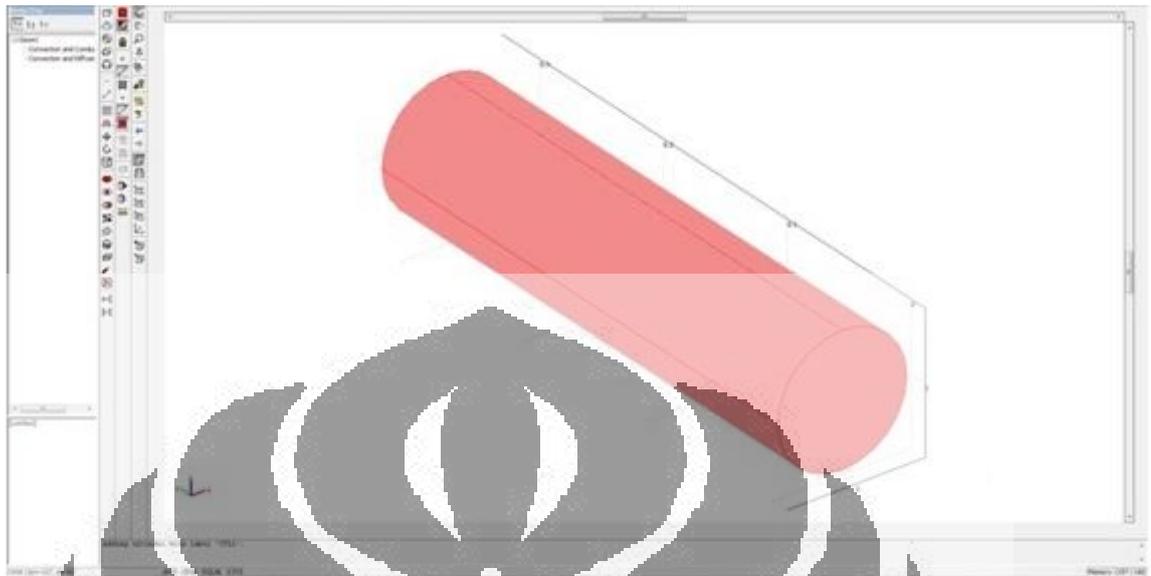
Variabel yang perlu dimasukkan adalah :

- Dimensi reaktor (radius dan panjang)
- Titik basis aksis
- Vektor arah aksis



Gambar 4.5 Pengaturan Geometri Reaktor

Setelah memasukkan variabel-variabel tersebut maka COMSOL akan membentuk suatu geometri reaktor dengan dimensi sebenarnya seperti pada Gambar 4.6

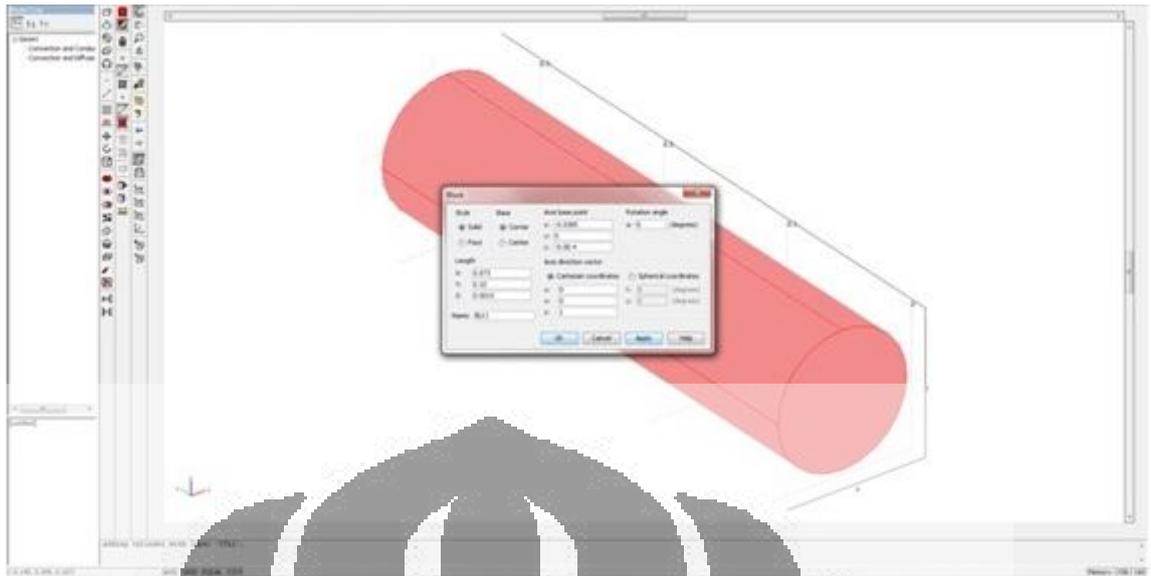


Gambar 4.6 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Geometri Reaktor

b. Geometri untuk pelat (*stainless steel*)

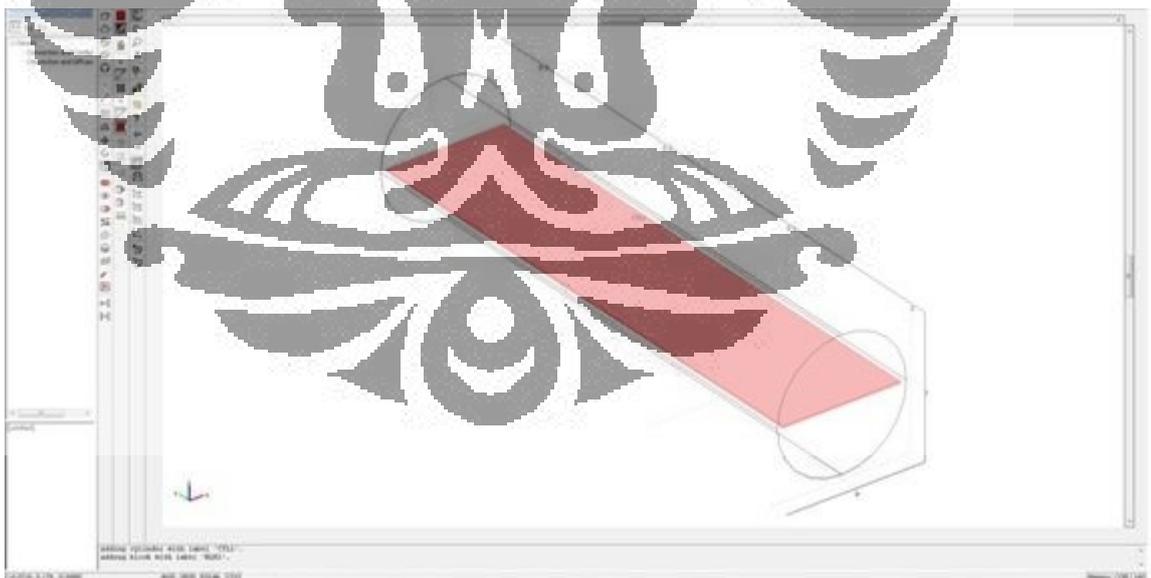
Sama seperti pembuatan geometri reaktor, penulis membuat geometri pelat dari ukuran-ukuran yang telah ditentukan. Pembuatan geometri pelat memerlukan beberapa variabel yaitu:

- Dimensi pelat (panjang, lebar dan tebal)
- Titik basis aksis
- Vektor arah aksis



Gambar 4.7 Pengaturan Geometri Pelat

Setelah memasukkan variabel-variabel tersebut maka COMSOL akan membentuk suatu geometri yaitu satu pelat dengan dimensi yang sebenarnya seperti pada Gambar 4.8.



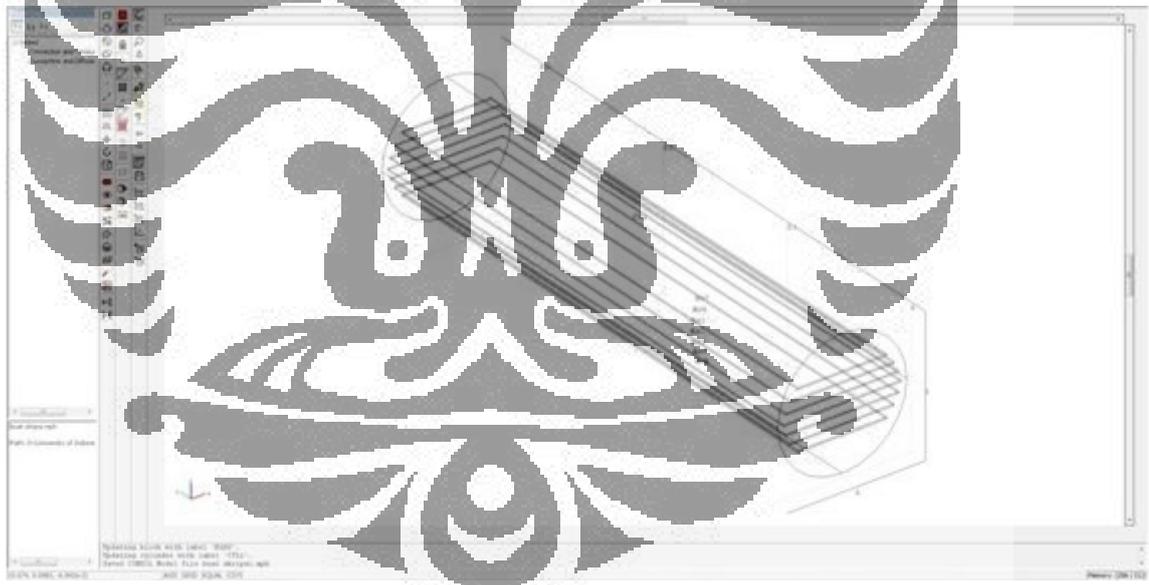
Gambar 4.8 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Geometri Pelat

Setelah membuat plat yang pertama, penulis membuat pelat-pelat lain yang sejajar sesuai dengan Tabel 4.1

Tabel 4.1 Dimensi Pelat

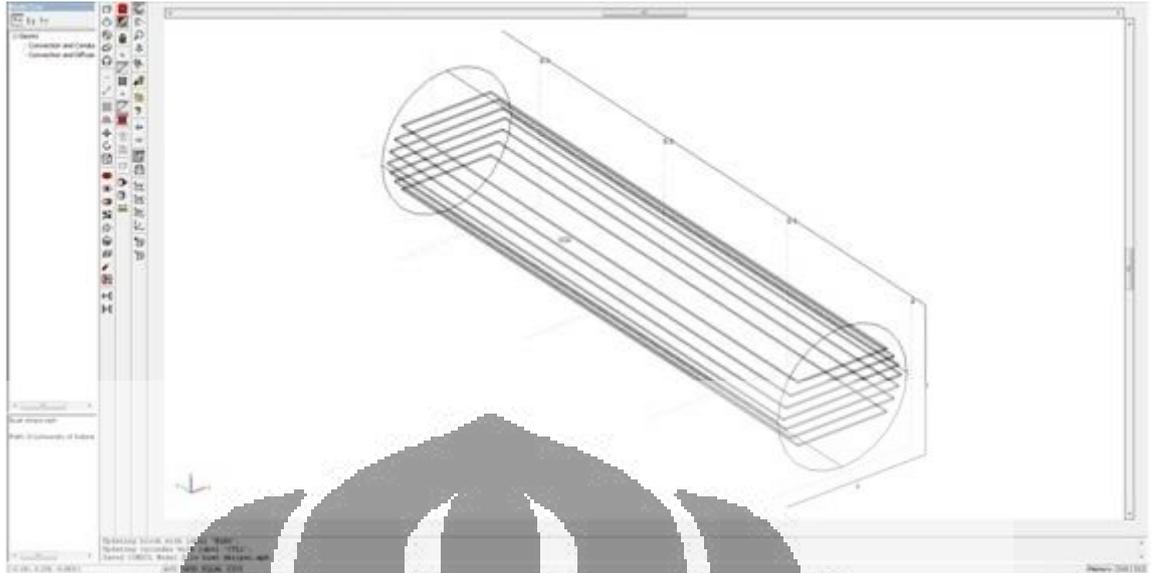
| No. | Dimensi | | | Vektor arah aksis | | |
|-----|---------|-------|--------|-------------------|---|---------|
| | Panjang | Lebar | Tinggi | x | y | z |
| 1 | 0,055 | 0,32 | 0,001 | -0,0275 | 0 | 0,0175 |
| 2 | 0,064 | 0,32 | 0,001 | -0,032 | 0 | 0,0115 |
| 3 | 0,07 | 0,32 | 0,001 | -0,035 | 0 | 0,0055 |
| 4 | 0,07 | 0,32 | 0,001 | -0,035 | 0 | -0,0065 |
| 5 | 0,064 | 0,32 | 0,001 | -0,032 | 0 | -0,0125 |
| 6 | 0,055 | 0,32 | 0,001 | -0,0275 | 0 | -0,0185 |

Setelah penulis memasukkan seluruh variabel untuk membuat pelat, maka COMSOL akan membentuk Gambar 4.9



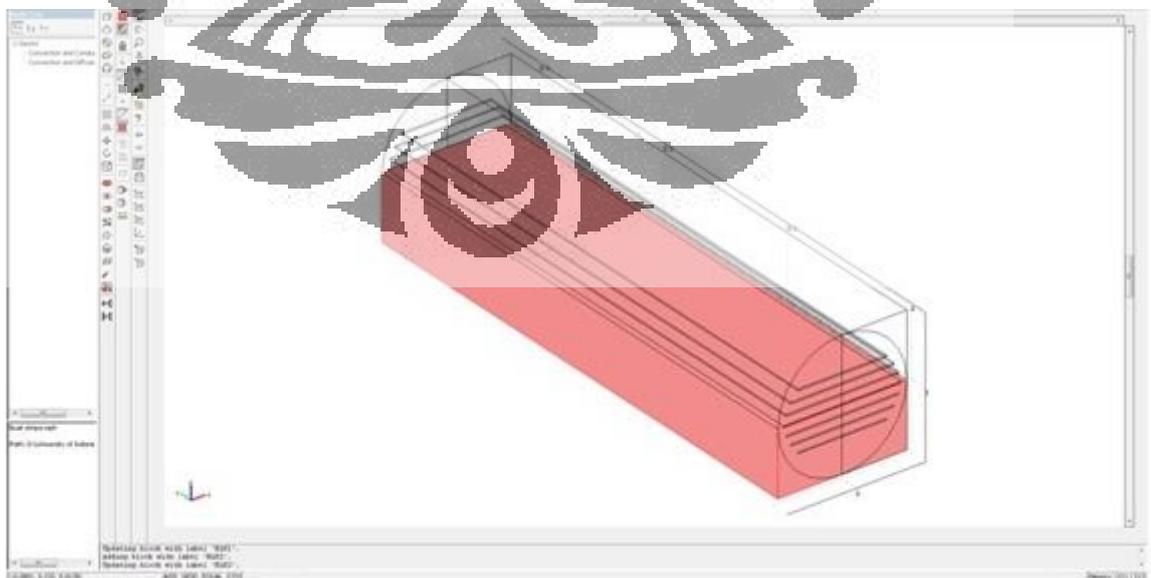
Gambar 4.9 Tampilan COMSOL Setelah Membuat Seluruh Geometri Pelat

Untuk menyatukan geometri-geometri tersebut dilakukan dengan cara meng-*composite* seluruh bagian yang ada sehingga pada akhirnya seluruh geometri hanya dianggap 1 buah geometri seperti Gambar 4.10



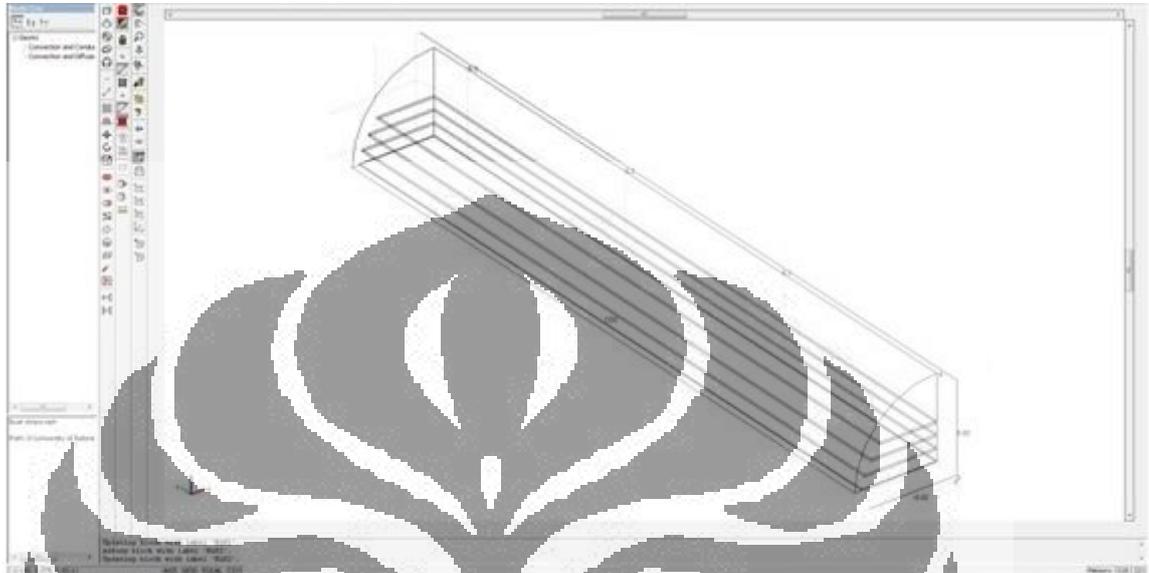
Gambar 4.10 Tampilan COMSOL Setelah Menggunakan Fasilitas *Composite*

Namun, karena keterbatasan komputer dalam menggunakan perangkat lunak COMSOL, penulis membagi reaktor menjadi empat dalam rangka mencegah *meshing* (suatu cara yang digunakan COMSOL untuk memetakan dan menghitung persamaan pada suatu geometri) menjadi *error* yang dikarenakan keterbatasan *memory*. Untuk membuatnya menjadi beberapa bagian, maka dilakukan dengan cara meng-*composite* silinder tersebut. Gambar 4.11 menunjukkan reaktor yang akan dibagi menjadi 4 bagian.



Gambar 4.11 Tampilan Reaktor yang akan Di-*composite*

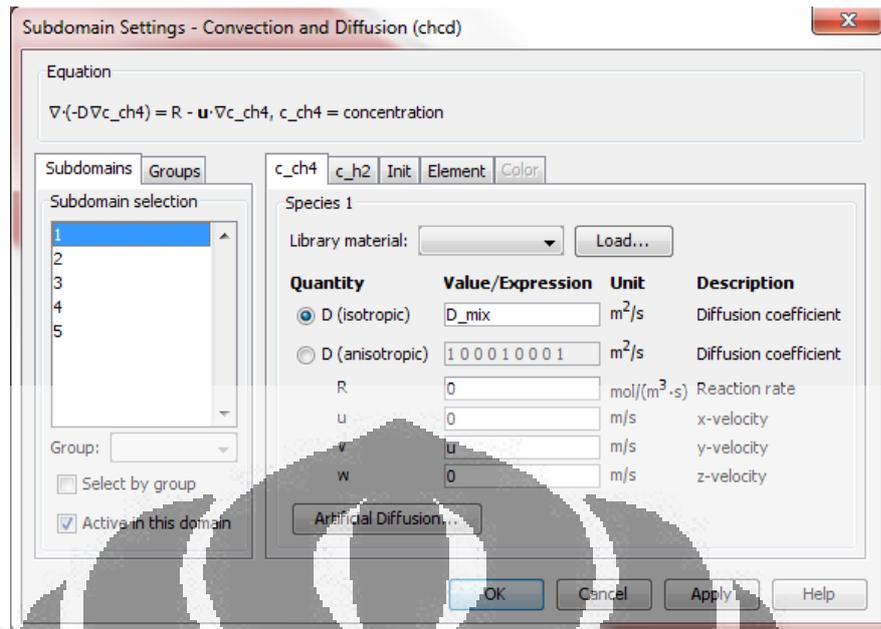
Untuk membagi reaktor tersebut menjadi seperempat bagian, fasilitas *composite* kembali digunakan dengan mengetik CO1-BLK1-BLK2. Setelah *dicomposite*, bentuk akhir dari geometri ditunjukkan Gambar 4.12



Gambar 4.12 Bentuk Akhir Reaktor

4.2.1.2 Pemasukkan model

Setelah membuat geometri, langkah selanjutnya adalah memasukkan variabel-variabel sifat fisik fluida dalam *subdomain settings*. Pada modul *convection and diffusion*, data fisik yang diperlukan adalah koefisien difusi, seperti terlihat pada Gambar 4.13.



Gambar 4.13 Subdomain Settings pada COMSOL

Seperti yang telah dibahas sebelumnya, persamaan yang digunakan untuk mencari nilai difusivitas adalah

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{cA}p_{cB})^{\frac{1}{3}}(T_{cA}T_{cB})^{\frac{5}{12}}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{\frac{1}{2}}} = a\left(\frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}\right)^b \quad (4.30)$$

Penulis memasukkan variabel D_{mix} pada *subdomain settings*, kemudian untuk memasukkan persamaan ke dalam COMSOL, penulis menggunakan fasilitas *constant* dan *scalar expression*. Sepintas kedua fasilitas ini serupa, namun berbeda dalam hal penggunaan. *Constant* digunakan untuk memasukkan persamaan-persamaan yang tidak berubah sepanjang simulasi, sedangkan *scalar expression* digunakan untuk memasukkan persamaan-persamaan yang berubah menurut fungsi variabel terikat (dalam hal ini konsentrasi dan temperatur). Untuk variabel pertama, D_{mix} , persamaan-persamaan yang dimasukkan pada *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.2.

Tabel 4.2 Scalar Expression untuk Variabel Difusi

| Name | Expression | Description |
|-------|--|-----------------|
| D_mix | $((a*((T/1[K])/(\text{sqrt}(T_{c_ch4}*T_{c_h2})))^b)*((P_{c_ch4}*P_{c_h2})^(1/3))*((T_{c_ch4}*T_{c_h2})^(5/12))*(((1/(M_{r_ch4}*1[\text{kmol/kg}]))+(1/(M_{r_h2}*1[\text{kmol/kg}]))^(1/2))))*1[\text{cm}^2/\text{s}]$ | Difusivitas gas |

Sedangkan persamaan-persamaan yang dimasukkan dalam *Constants* terdapat pada Tabel 4.3.

Tabel 4.3 *Constants* untuk Variabel Difusi

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|-------------------|----------------------------|
| a | 2.75e-4[1] | Konstanta difusivitas |
| Tc_ch4 | 190.3[1] | Temperatur kritis metana |
| Tc_h2 | 33.3[1] | Temperatur kritis hidrogen |
| b | 1.823[1] | Konstanta difusivitas |
| Pc_ch4 | 45.8[1] | Tekanan kritis metana |
| Pc_h2 | 12.8[1] | Tekanan kritis hidrogen |
| Mr_ch4 | 16.04[kg/kmol] | Berat molekul metana |
| Mr_h2 | 2.016[kg/kmol] | Berat molekul hidrogen |
| D_ss | 1e-9[m^2/s] | Difusivitas padatan |

Variabel-variabel data fisik neraca energi juga dimasukkan ke dalam *constant* dan *Scalar expression*. Untuk konduktivitas termal, berlaku persamaan

$$k = \mu_m \left(C_p + \frac{5R}{4M} \right) \quad (4.32)$$

Sedangkan untuk persamaan μ_m sendiri berlaku persamaan

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.31)$$

Persamaan-persamaan dari variabel konduktivitas panas fasa gas yang dimasukkan ke dalam *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.4.

Tabel 4.4 *Scalar Expression* untuk Variabel Konduktivitas Termal dan Viskositas

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|--|-----------------------------|
| k | $(C_{p_mix} + (5 * R) / (4 * M_{r_mix})) * \mu_{mix}$ | Konduktivitas termal fluida |
| Mr_mix | $(M_{r_ch4} * x_{ch4}) + (M_{r_h2} * x_{h2})$ | Berat molekul campuran |
| miu_mix | $((\mu_{ch4} * x_{ch4} * \sqrt{M_{r_ch4}}) + (\mu_{h2} * x_{h2} * \sqrt{M_{r_h2}})) / ((x_{ch4} * \sqrt{M_{r_ch4}}) + (x_{h2} * \sqrt{M_{r_h2}}))$ | Viskositas campuran |
| x_ch4 | $(c_{ch4} / (c_{ch4} + c_{h2}))$ | Fraksi mol metana |
| x_h2 | $(c_{h2} / (c_{ch4} + c_{h2}))$ | Fraksi mol hidrogen |

Sedangkan persamaan-persamaan variabel konduktivitas panas yang dimasukkan ke dalam *constant* terdapat pada Tabel 4.5.

Tabel 4.5 *Constant* untuk Variabel Konduktivitas Termal dan Viskositas

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|-------------------|--------------------------------------|
| miu_ch4 | 0.0000127[Pa*s] | Viskositas metana |
| miu_h2 | 0.00000865[Pa*s] | Viskositas hidrogen |
| sqrt_Mr_ch4 | 4.004997 | Akar dari berat molekul metana |
| sqrt_Mr_h2 | 1.419859 | Akar dari berat molekul hidrogen |
| k_ss | 21.4[W/m/K] | Konduktivitas termal stainless steel |

Variabel ketiga yaitu ρ memiliki persamaan berikut,

$$\rho_b = \frac{P * M}{R * T} \quad (4.33)$$

Persamaan-persamaan variabel massa jenis yang dimasukkan ke dalam *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.6.

Tabel 4.6 *Scalar Expression* untuk Variabel Massa Jenis

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|-------------------|----------------------|
| rho | P*Mr_mix/R/T | Massa jenis campuran |

Sedangkan variabel massa jenis dalam *constant* terdapat pada Tabel 4.7.

Tabel 4.7 *Constant* untuk Variabel Massa Jenis

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|--------------------------|-----------------------------|
| R | 8.314[J/mol/K] | Konstanta gas |
| rho_ss | 8.03[g/cm ³] | Massa jenis stainless steel |

Variabel keempat yaitu kapasitas panas memiliki bentuk persamaan

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i * x_i + Cp_j * x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.34)$$

Variabel-variabel kapasitas panas yang dimasukkan ke dalam *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.8.

Tabel 4.8 *Scalar Expression* untuk Variabel Kapasitas Panas

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|--|--------------------------|
| Cp_mix | ((Cp_ch4*x_ch4)+(Cp_h2*x_h2))/Mr_mix | Kapasitas panas campuran |
| Cp_ch4 | (19.87+5.021e-2*(T/1[K])+1.268e-5*((T/1[K])^2)-11e-9*((T/1[K])^3))*1[J/mol/K] | Kapasitas panas metana |
| Cp_h2 | (28.84+0.00765e-2*((T/1[K])-273.15)+0.3288e-5*((T/1[K])-273.15)^2)-0.8698e-9*((T/1[K])-273.15)^3))*1[J/mol/degC] | Kapasitas panas hidrogen |

Sedangkan variabel kapasitas panas dalam *constant* terdapat pada Tabel 4.9.

Tabel 4.9 *Constant* untuk Variabel Kapasitas Panas

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|-------------------|---------------------------------|
| Cp_ss | 500[J/kg/K] | Kapasitas panas stainless steel |

Variabel kelima yaitu laju reaksi, *rate*, ditunjukkan oleh persamaan berikut,

$$rate = \frac{k_M^+ \cdot K_{CH_4} \cdot p_{CH_4} - \frac{k_M^-}{K_r} \cdot p_{H_2}^2}{\left(1 + \frac{1}{K_r} \cdot p_{H_2}^2 + K_{CH_4} \cdot p_{CH_4}\right)^2} \quad (4.10)$$

Variabel-variabel laju reaksi yang dimasukkan ke dalam *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.10.

Tabel 4.10 *Scalar Expression* untuk Variabel Laju Reaksi

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|--|------------------------|
| rate | rate_snoeck*WA | Laju reaksi |
| rate_snoeck | ((kMplus*KCH4*(P_ch4/1[bar])-(kMminus/Kr)*((P_h2/1[bar])^2))/((1+((1/Kr)*((P_h2/1[bar])^(3/2)))+(KCH4*(P_ch4/1[bar]))^2))*1[mol/g/h] | Laju reaksi eksperimen |
| kMplus | 23444*exp(-59033[J/mol]/R/T) | |
| KCH4 | 0.21*exp(-143[J/mol]/R/T) | |
| kMminus | 4389*exp(-60522[J/mol]/R/T) | |
| Kr | 1.109e8*exp(-137314[J/mol]/R/T) | |
| Q | rate*H | Panas yang dikonsumsi |

Sedangkan variabel laju reaksi dalam *constant* terdapat pada Tabel 4.11.

Tabel 4.11 *Constant* untuk Variabel Laju Reaksi

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|------------------------------|--------------------|
| WA | 0.000653[g/cm ²] | W/A |
| H | 75[kJ/mol] | Entalpi reaksi |

Untuk persamaan-persamaan pendukung lainnya, seperti *pressure drop*, variabel yang dimasukkan dalam *scalar expression* terdapat pada Tabel 4.12.

Tabel 4.12 *Scalar Expression* untuk Variabel-variabel Lain

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|---|-----------------------|
| P | P_feed-delP | Tekanan |
| delP | $((Kc+4*fapp*L/Dh+Ke)*rho*(v^2)/2)*y/0.32[m]$ | Perbedaan tekanan |
| Lbintang | 26.67/Re | |
| Re | $rho_feed*v*Dh/miu_mix$ | |
| f | 21.069/Re | |
| fapp | $((((3.44/(sqrt(Lbintang)))^2)+(f*Re)^2)^{0.5})/Re$ | |
| u | $u_feed*rho_feed/rho$ | Kecepatan superficial |

Sedangkan variabel yang dimasukkan dalam *Constant* terdapat pada Tabel 4.13

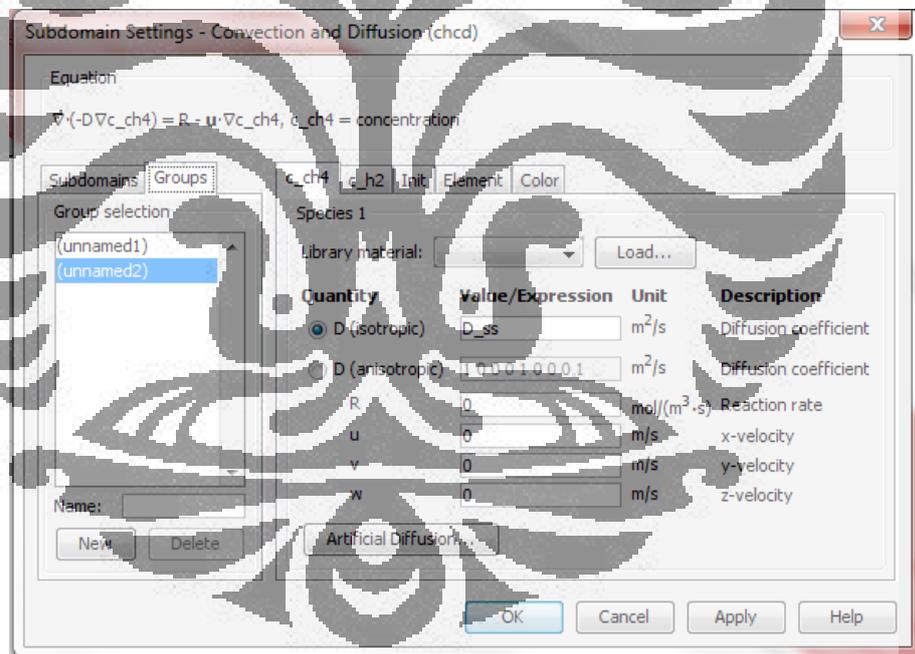
Tabel 4.13 *Constant* untuk Variabel-variabel Lain

| <i>Name</i> | <i>Expression</i> | <i>Description</i> |
|-------------|-----------------------------|---------------------------|
| P_feed | 1[atm] | Tekanan umpan masuk |
| u_feed | G/A | Kecepatan umpan masuk |
| rho_feed | $P_feed*Mr_ch4/R/T_feed$ | Massa jenis umpan |
| Dh | 12[mm] | Diameter hidrolis |
| Kc | 0.1256[1] | |
| Ke | 0.089[1] | |
| v | $G/(7*6[mm]*64.43[mm])$ | |
| G | 42[L/h] | Laju alir volumetrik |
| A | $22*0.04[m]*0.04[m]/7$ | Luas penampang reaktor |
| x_ch4_feed | 1 | Fraksi mol metana masuk |
| x_h2_feed | 0 | Fraksi mol hidrogen masuk |
| T_wall | 973[K] | Temperatur <i>furnace</i> |
| T_feed | 800[K] | Temperatur masuk |

Setelah mengisi tabel data *constant* dan *scalar expression*, langkah selanjutnya adalah mengatur sifat fisik fluida yang telah dimasukkan dalam *constant* dan *scalar expression* ke dalam *subdomain settings* seperti pada Tabel 4.14

Tabel 4.14 Pengaturan *Subdomain* Neraca Massa

| <i>Subdomain</i> | <i>Quantity</i> | <i>c_ch4</i> | <i>c_h2</i> |
|--------------------------|-----------------|--------------|-------------|
| 1 (skala reaktor) | D | D_mix | D_mix |
| | R | 0 | 0 |
| | u | 0 | 0 |
| | v | u | u |
| | w | 0 | 0 |
| 2, 3, 4, 5 (skala pelat) | D | D_ss | D_ss |
| | R | 0 | 0 |
| | u | 0 | 0 |
| | v | 0 | 0 |
| | w | 0 | 0 |



Gambar 4.14 *Subdomain Settings* Neraca Massa

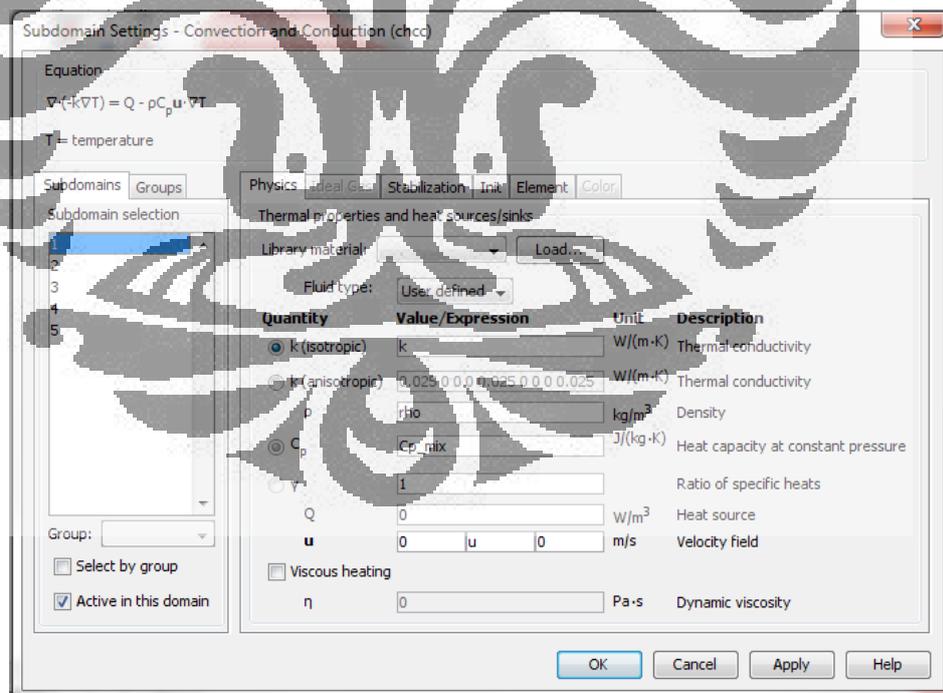
Seperti yang disebutkan sebelumnya, reaksi terjadi di permukaan katalis, yaitu tepat ketika gas menyentuh permukaan katalis bukan di fasa gas ataupun di dalam fasa padatan, sehingga pada persamaan laju reaksi fasa gas dan padatan diisikan angka 0. Sebenarnya untuk katalis yang digunakan juga tidak memiliki pori sehingga tidak memiliki nilai difusivitas, tetapi nilai difusivitas ini harus tetap

dimasukkan agar program dapat berjalan. Peneliti memasukkan nilai difusivitas yang serendah mungkin agar program dapat tetap berjalan.

Selain *subdomain settings* pada neraca massa, peneliti juga memasukkan *subdomain settings* pada neraca energi seperti pada Tabel 4.15.

Tabel 4.15 Pengaturan *Subdomain* Neraca Energi

| <i>Subdomain</i> | <i>Quantity</i> | <i>Properties</i> |
|--------------------------|-----------------|-------------------|
| 1 (skala reaktor) | k | k |
| | ρ | rho |
| | C_p | Cp_mix |
| | u | 0 |
| | v | u |
| | w | 0 |
| 2, 3, 4, 5 (skala pelat) | k | k_ss |
| | ρ | rho_ss |
| | C_p | Cp_ss |
| | u | 0 |
| | v | u |
| | w | 0 |



Gambar 4.15 *Subdomain Settings* Neraca Energi

Selain *subdomain settings*, variabel-variabel yang telah diketahui sebelumnya juga harus dimasukkan ke dalam *boundary settings* sebagai kondisi

batas. Pada kondisi batas penelitian ini, terdapat 41 boundary yang dapat dibagi menjadi 4 kelompok (*convection and conduction*), yaitu:

Tabel 4.16 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Energi

| <i>Boundary</i> | <i>Boundary condition</i> | <i>Nilai</i> |
|---|---------------------------|--------------|
| 3 (masukan) | <i>Temperature</i> | T_feed |
| 4 (keluaran) | <i>Convective flux</i> | |
| 2 (dinding) | <i>Temperature</i> | T_wall |
| 5,8,10,12,13,15,17,18,20,22,23 (permukaan katalis) | <i>Heat Flux</i> | -Q |
| 1,6,7,9,11,14,16,19,21,24-32 (bagian simetris) | <i>Thermal insulation</i> | |

Boundary condition yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Thermal insulation*

$$-n(-k\nabla T) = 0 \quad (4.50)$$

Persamaan ini digunakan ketika tidak ada panas yang keluar dari sistem.

- *Temperature*

$$T = T_0 \quad (4.51)$$

dimana T_0 adalah variabel yang dapat diisikan.

Persamaan ini digunakan ketika pengguna COMSOL menginginkan temperatur tertentu pada suatu bagian reaktor

- *Convective Flux*

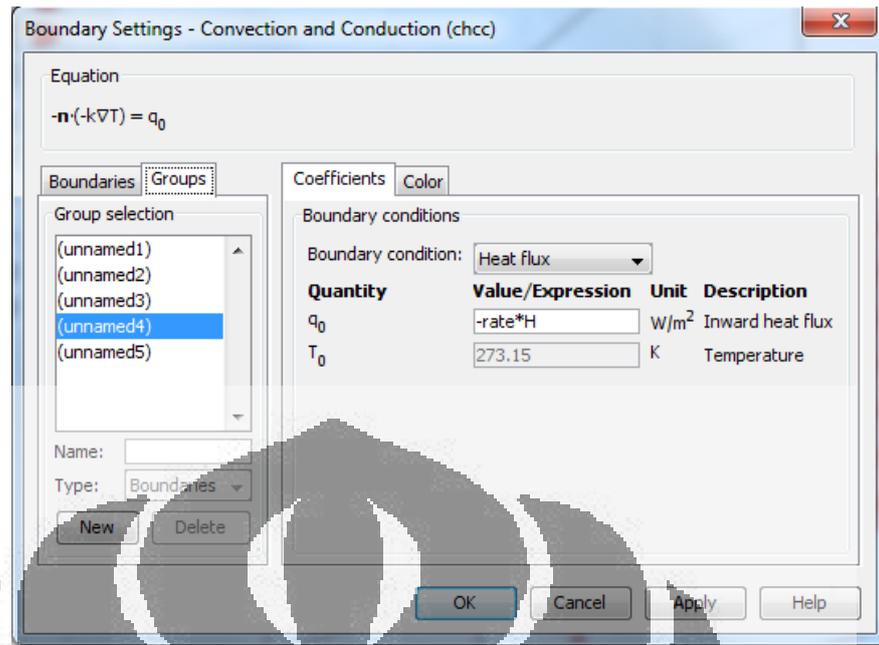
$$n(-k\nabla T) = 0 \quad (4.52)$$

Persamaan ini digunakan sebagai kondisi batas di ujung reaktor dengan maksud bahwa di ujung reaktor sudah tidak terjadi perubahan temperatur

- *Heat Flux*

$$-n(-k\nabla T) = q_0 \quad (4.53)$$

dimana q_0 dimasukkan $-Q$ karena reaksi berlangsung hanya pada kawat, sehingga panas hasil reaksi juga hanya terjadi pada kawat.



Gambar 4.16 *Boundary Settings* Neraca Energi

Sementara pada kondisi batas *convection and diffusion*, dibagi menjadi 4 kelompok, yaitu:

Tabel 4.17 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa

| <i>Boundary</i> | <i>Boundary condition</i> | Nilai (e_ch4) | Nilai (c_h2) |
|-----------------------------------|----------------------------|----------------------------|-------------------------|
| 1, 2, 33, 34 (bagian simetris) | <i>Insulation/Symmetry</i> | | |
| 3 (masuk) | <i>Concentration</i> | 40,6 [mol/m ³] | 0 [mol/m ³] |
| 4 (keluar) | <i>Convective Flux</i> | | |
| 5-32, 35-41 (katalis) | <i>Flux</i> | -rate | 2*rate |

Boundary condition yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Insulation/Symmetry*

$$n \cdot N = 0; N = -D\nabla C + C \cdot u \quad (4.54)$$

Persamaan ini digunakan ketika tidak ada konsentrasi yang keluar maupun masuk.

- *Concentration*

$$C = C_0 \quad (4.55)$$

dimana C_0 adalah konsentrasi awal

Persamaan ini digunakan ketika pengguna COMSOL menginginkan konsentrasi tertentu pada suatu bagian.

- *Convective Flux*

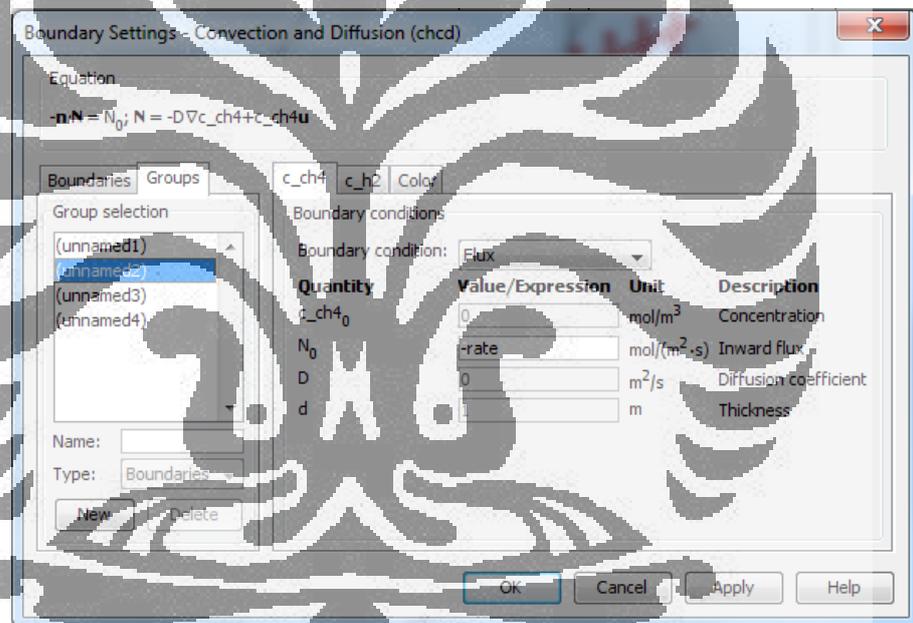
$$n(-D\nabla C) = 0 \quad (4.56)$$

Persamaan ini digunakan sebagai kondisi batas di ujung reaktor dengan maksud bahwa di ujung reaktor sudah tidak terjadi perubahan konsentrasi.

- *Flux*

$$-n \cdot N = N_0; N = -D\nabla C + C \cdot u \quad (4.57)$$

dimana nilai N_0 dimasukkan laju reaksi. Hal ini disebabkan reaksi terjadi di permukaan kawat.



Gambar 4.17. Boundary settings neraca massa

4.2.2 Model Kedua

Untuk pendekatan yang kedua, peneliti mengasumsikan bahwa temperatur masukan sudah seragam dengan temperatur dinding sehingga temperatur dapat dianggap isothermal. Untuk itu, neraca energi pada model yang kedua ini dapat diabaikan. Sama seperti model sebelumnya, dua hal yang perlu dilakukan dalam COMSOL adalah membuat geometri dan memasukkan persamaan yang telah diturunkan. Neraca momentum memiliki dua buah pola aliran yang berbeda

sehingga perlu dilakukan perhitungan bilangan Reynold terlebih dahulu untuk dapat mengetahui pola aliran yang terjadi pada model.

Perhitungan bilangan Reynold:

$$Re = \frac{\rho \cdot V \cdot D_h}{\mu} \quad (4.58)$$

Terlihat bahwa bilangan Reynold dipengaruhi oleh massa jenis dan viskositas, sehingga untuk menentukan apakah suatu aliran laminar ataupun turbulen, bilangan Reynold kedua fluida (hidrogen dan metana) dihitung:

$$Re_{CH_4} = \frac{0,651613 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \cdot 2,32 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m}{s} \right] \cdot 12 \cdot 10^{-3} [m]}{0,000011 [Pa \cdot s]}$$

$$Re_{CH_4} = 1,649$$

$$Re_{H_2} = \frac{0,08988 \left[\frac{kg}{m^3} \right] \cdot 2,32 \cdot 10^{-3} \left[\frac{m}{s} \right] \cdot 12 \cdot 10^{-3} [m]}{0,00000865 [Pa \cdot s]}$$

$$Re_{H_2} = 0,289$$

Dengan angka Reynold yang kurang dari 2000, maka dapat disimpulkan bahwa pola aliran yang terjadi dalam reaktor akan didominasi pola aliran laminar.

4.2.2.1 Pembuatan Geometri

Untuk mengurangi memori yang cukup besar, maka peneliti membagi reaktor tersebut berdasarkan pelat seperti yang terlihat pada Gambar 4.18.



Gambar 4.18 Pembagian Geometri Model Kedua

Sama seperti pembuatan geometri asumsi pertama, peneliti menggunakan langkah-langkah berikut untuk membuat geometri asumsi kedua.

1. Memilih *space dimension* 3D untuk membuat model lebih akurat.
2. Menentukan fenomena-fenomena apa saja yang dialami oleh model tersebut.

Pada asumsi yang kedua ini, fenomena-fenomena yang terjadi adalah neraca massa dan momentum. Persamaan neraca massa hasil penurunan model adalah:

$$\begin{aligned} & \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) \\ & = \mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + \underbrace{R_A}_{\frac{4}{4}} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Ini sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module >>mass transport>>convection and diffusion>>steady state analysis*, yaitu:

$$\nabla \cdot (-D \nabla c) = R - u \cdot \nabla c \quad (4.49)$$

Sedangkan untuk persamaan neraca momentum hasil penurunan model adalah:

- Komponen r

$$\begin{aligned} & \rho \left(v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \\ & = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

- Komponen θ

$$\begin{aligned} & \rho \left(v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right) \\ & = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (4.19)$$

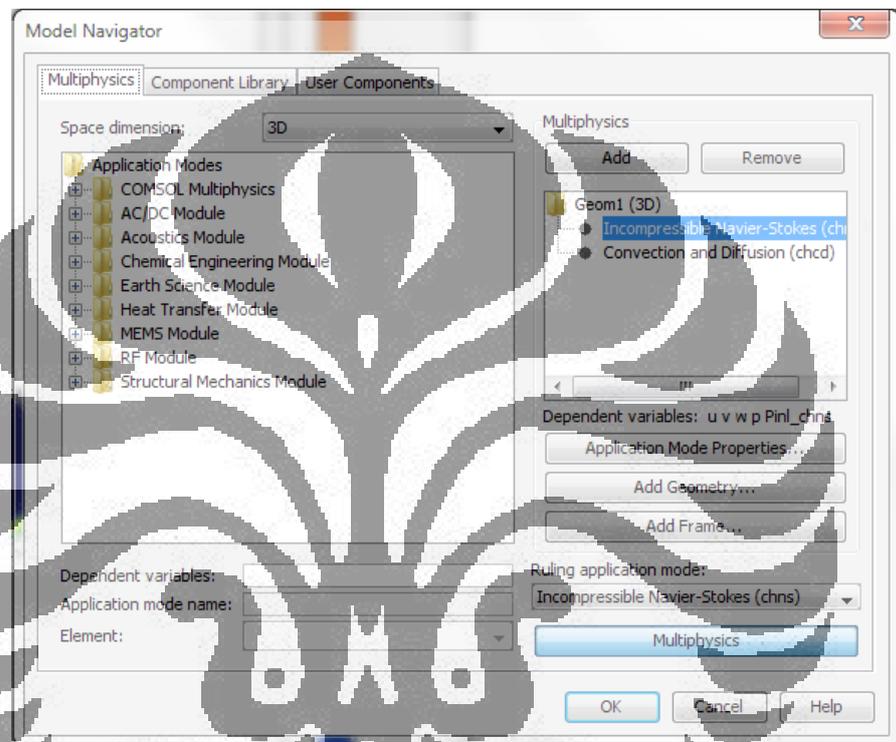
- Komponen z

$$\rho \left(v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \quad (4.20)$$

Ini sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module* >> *momentum transport*>>*Laminar Flow* >> *Incompressible Navier-Stokes* >> *Steady-state Analysis*, yaitu:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pl + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)] + F \quad (4.59)$$

Dengan *dependent variable* *c_ch4* dan *c_h2* untuk neraca massa dan *u*, *v*, *w*, dan *p* untuk neraca momentum seperti terlihat pada Gambar 4.19



Gambar 4.19 Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan *Multiphysics* Model Kedua

3. Pembuatan geometri

Pada kasus ini pembuatan geometri adalah sama seperti pembuatan geometri pada kasus sebelumnya hingga langkah pada Gambar 4.10. Geometri ini kemudian akan dipecah menjadi 4 bagian untuk mengurangi pemakaian memori (penggunaan neraca momentum menggunakan memori computer yang sangat besar dibanding neraca massa dan energi). Keempat bagian reaktor yang akan dibuat tersebut ditunjukkan Gambar 4.18

Untuk membuat bentuk reaktor yang sesuai, peneliti membuat 3 buah balok yang berfungsi untuk mengurangi bentuk tersebut. Koordinat ketiga balok ini adalah:

Tabel 4.18 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 1

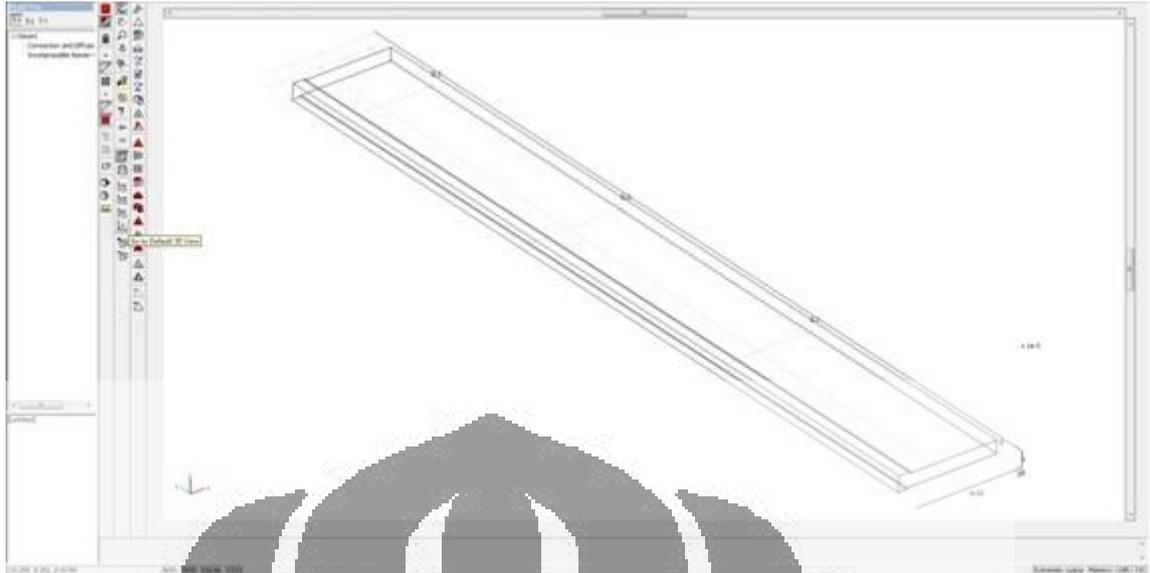
| No. | Dimensi | | | Vektor arah aksis | | |
|-----|---------|-------|--------|-------------------|---|-------|
| | Panjang | Lebar | Tinggi | x | y | z |
| 1 | 0,04 | 0,32 | 0,08 | 0 | 0 | -0,04 |
| 2 | 0,08 | 0,32 | 0,04 | -0,04 | 0 | 0,006 |
| 3 | 0,08 | 0,32 | 0,04 | -0,04 | 0 | -0,04 |

Setelah memasukkan ketiga balok ini, balok tersebut akan menutupi reaktor seperti Gambar 4.20.



Gambar 4.20 Tampilan COMSOL Setelah Membuat 3 Buah Balok

Dengan menggunakan fasilitas *composite object* (CYL1-(BLK1+BLK2+BLK3+BLK4+NLK5+BLK6+BLK7+BLK8+BLK9)) sehingga didapatkan Gambar 4.21,



Gambar 4.21 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 1

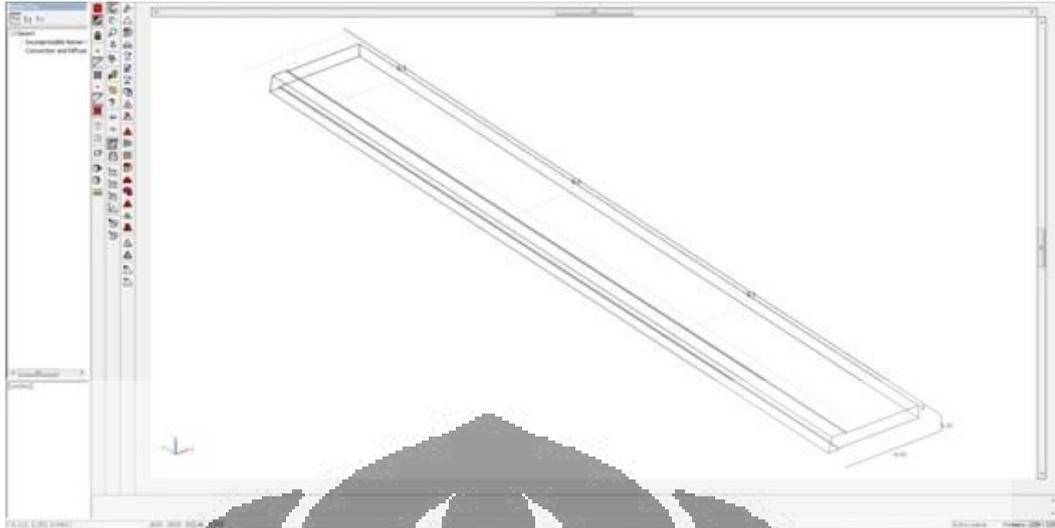
Gambar 4.21 merupakan gambar reaktor pada bagian tengah, sedangkan untuk pembuatan geometri lainnya peneliti melakukan hal yang sama tetapi dengan ketiga balok yang berdimensi berbeda, yaitu:

- Pembuatan bagian reaktor nomor 2 menggunakan tiga buah balok yang berdimensi:

Tabel 4.19 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 2

| No. | Dimensi | | | Vektor arah aksis | | |
|-----|---------|-------|--------|-------------------|---|-------|
| | Panjang | Lebar | Tinggi | x | y | z |
| 1 | 0,04 | 0,32 | 0,08 | 0 | 0 | -0,04 |
| 2 | 0,08 | 0,32 | 0,04 | -0,04 | 0 | 0,012 |
| 3 | 0,08 | 0,32 | 0,045 | -0,04 | 0 | -0,04 |

Sehingga mendapatkan reaktor seperti pada Gambar 4.22



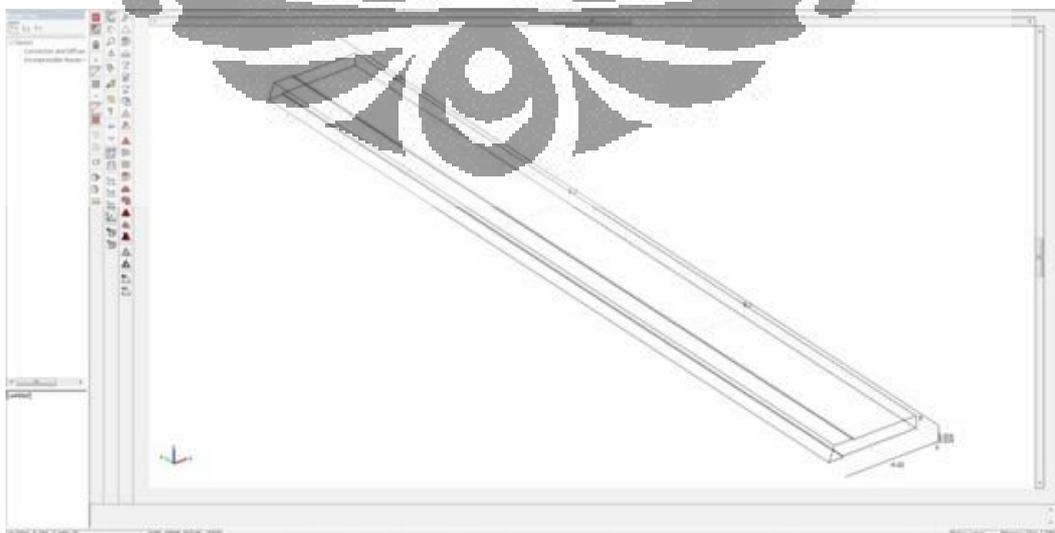
Gambar 4.22 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 2

- Pembuatan bagian reaktor nomor 3 menggunakan tiga buah balok yang berdimensi:

Tabel 4.20 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 3

| No. | Dimensi | | | Vektor arah aksis | | |
|-----|---------|-------|--------|-------------------|---|-------|
| | Panjang | Lebar | Tinggi | x | y | Z |
| 1 | 0,04 | 0,32 | 0,08 | 0 | 0 | -0,04 |
| 2 | 0,08 | 0,32 | 0,04 | -0,04 | 0 | 0,018 |
| 3 | 0,08 | 0,32 | 0,052 | -0,04 | 0 | -0,04 |

Sehingga mendapatkan reaktor seperti pada Gambar 4.23



Gambar 4.23 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 3

- Pembuatan bagian reaktor nomor 4 menggunakan tiga buah balok yang berdimensi:

Tabel 4.21 Dimensi Balok untuk Penampang Nomor 4

| No. | Dimensi | | | Vektor arah aksis | | |
|-----|---------|-------|--------|-------------------|---|-------|
| | Panjang | Lebar | Tinggi | x | y | Z |
| 1 | 0,04 | 0,32 | 0,08 | 0 | 0 | -0,04 |
| 3 | 0,08 | 0,32 | 0,058 | -0,04 | 0 | -0,04 |

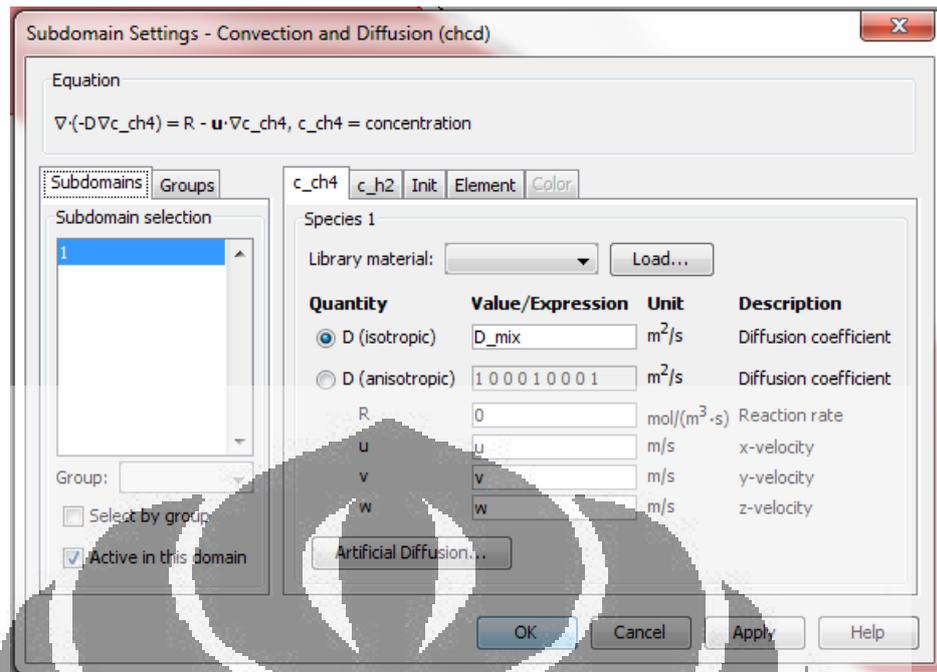
Sehingga mendapatkan reaktor seperti pada Gambar 4.24



Gambar 4.24 Tampilan COMSOL untuk Penampang Nomor 4

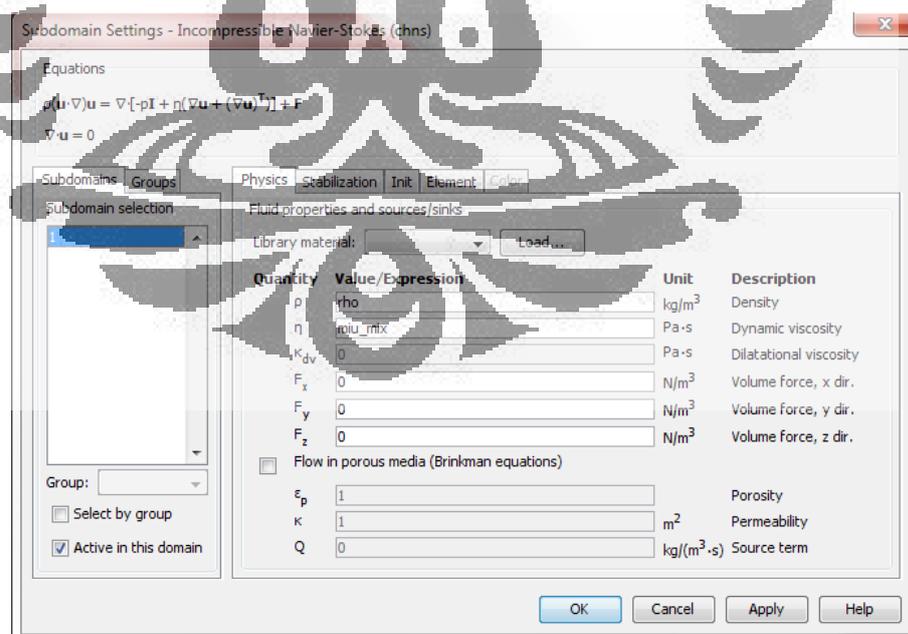
4.2.2.1 Memasukkan Model

Setelah membuat empat buah geometri, peneliti memasukkan variabel-variabel sifat fisik fluida dalam *subdomain settings*. Sama seperti asumsi pertama, pada modul *convection and diffusion*, data fisik yang diperlukan adalah koefisien difusi dan kecepatan yang diambil dari neraca momentum, seperti terlihat pada Gambar 4.25.



Gambar 4.25 Subdomain Settings Neraca Massa

Sedangkan untuk modul *incompressible navier-stokes*, data fisik yang diperlukan adalah viskositas dan massa jenis, seperti terlihat pada Gambar 4.26.



Gambar 4.26 Subdomain Settings Neraca Momentum

Untuk persamaan dan data yang dimasukkan pada *constant* dan *scalar expression* ini sama dengan asumsi pertama dengan menambahkan *constant* $T = 973[\text{K}]$ dan menghilangkan persamaan P. Setelah memasukkan *constant* dan *scalar expression*, peneliti memasukkan data fisik ke dalam subdomain seperti pada Tabel 4.22 dan 4.23.

Tabel 4.22 Pengaturan *Subdomain* Neraca Massa

| <i>Subdomain</i> | <i>Quantity</i> | <i>c_ch4</i> | <i>c_h2</i> |
|------------------|-----------------|--------------|-------------|
| 1 | D | D_mix | D_mix |
| | R | 0 | 0 |
| | u | U | u |
| | v | V | v |
| | w | W | w |

Tabel 4.23 Pengaturan *Subdomain* Neraca Momentum

| <i>Subdomain</i> | <i>Quantity</i> | <i>Properties</i> |
|------------------|-----------------|-------------------|
| 1 | ρ | rho |
| | η | miu_mix |
| | F_x | 0 |
| | F_y | 0 |
| | F_z | 0 |

Sedangkan untuk kondisi batas, peneliti mengatur kondisi batas pada *boundary settings*, yaitu:

Tabel 4.24 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa

| <i>Geometri</i> | <i>Boundary</i> | <i>Boundary condition</i> | Nilai (<i>c_ch4</i>) | Nilai (<i>c_h2</i>) |
|-----------------|-----------------|----------------------------|---------------------------|-------------------------|
| 1,2,3 | 1, 2, 5,10 | <i>Insulation/Symmetry</i> | | |
| | 3 | <i>Concentration</i> | 40,6[mol/m ³] | 0 [mol/m ³] |
| | 4 | <i>Convective Flux</i> | | |
| | 6,7,8,9 | <i>Flux</i> | -rate | 2*rate |
| 4 | 1, 2, 7 | <i>Insulation/Symmetry</i> | | |
| | 3 | <i>Concentration</i> | 40,6[mol/m ³] | 0 [mol/m ³] |
| | 4 | <i>Convective Flux</i> | | |
| | 5,6 | <i>Flux</i> | -rate | 2*rate |

Boundary condition yang digunakan pada neraca momentum berikut persamaannya adalah:

Tabel 4.25 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Momentum

| <i>Geometri</i> | <i>Boundary</i> | <i>Boundary condition</i> | <i>Nilai</i> |
|-----------------|-----------------|---|--------------------------------|
| 1,2,3 | 1,6,7,8,9 | <i>Wall, no slip</i> | |
| | 2,5 | <i>Open boundary, no viscous stress</i> | |
| | 3 | <i>Inlet, velocity</i> | $2,32 \times 10^{-3}$ [m/s] |
| | 4 | <i>Outlet, pressure</i> | 1[atm] |
| | 10 | <i>Symmetry boundary</i> | |
| 4 | 2,5,6 | <i>Wall, no slip</i> | |
| | 1 | <i>Open boundary, no viscous stress</i> | |
| | 3 | <i>Inlet, velocity</i> | $2,32 \times 10^{-3}$ [m/s] |
| | 4 | <i>Outlet, pressure</i> | 1[atm] |
| | 7 | <i>Symmetry boundary</i> | |

Boundary condition yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Wall, no slip*

$$u = 0 \quad (4.60)$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa tidak ada kecepatan pada suatu bagian.

- *Open boundary, no viscous stress*

$$\eta(\nabla u + (\nabla u)^T)n = 0 \quad (4.61)$$

Persamaan ini berlaku pada sambungan dari suatu bagian reaktor lainnya yang tidak dapat dianggap simetris

- *Inlet, velocity*

$$u = -U_0 n \quad (4.62)$$

Persamaan ini digunakan ketika pengguna COMSOL menginginkan temperatur tertentu pada suatu bagian reaktor

- *Outlet, pressure*

$$p = p_0 \quad (4.63)$$

Persamaan ini digunakan untuk menentukan tekanan yang terjadi di dalam reaktor.

- *Symmetry boundary*

$$n \cdot u = 0, t \cdot [-pI + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)]n = 0 \quad (4.64)$$

Persamaan ini digunakan ketika suatu geometri simetris sehingga pada permukaan tidak terjadi perubahan kecepatan atau dengan kata lain tidak terjadi peristiwa perubahan momentum baik masuk ataupun keluar permukaan

4.3 Verifikasi Model dan Geometri

Verifikasi model merupakan langkah yang dibutuhkan agar program COMSOL Multiphysics ini dapat dirunning. Ada banyak hal-hal teknis yang dapat mengganggu program COMSOL untuk dirunning. Hal ini dapat dilihat pada *ebook* bawaan dari program COMSOL 3.5 (C:\COMSOL35\doc\multiphysics) pada bagian *diagnostic*. Disini terlihat beberapa pesan *error* yang ditampilkan oleh COMSOL ketika suatu hal teknis tidak dipenuhi. Secara garis besar, pesan *error* pada COMSOL dikategorikan berdasarkan angka, meliputi:

Tabel 4.26 Kategori *Error* Menurut COMSOL

| <i>Numbers</i> | <i>Category</i> |
|----------------|---|
| 1000-1999 | <i>Importing models</i> |
| 2000-2999 | <i>Geometry Modeling</i> |
| 3000-3999 | <i>CAD Import</i> |
| 4000-4999 | <i>Mesh Generation</i> |
| 5000-5999 | <i>Point, Edge, Boundary, and Subdomain Specification</i> |
| 6000-6999 | <i>Assembly and Extended Mesh</i> |
| 7000-7999 | <i>Solvers</i> |
| 8000-8999 | <i>Postprocessing</i> |
| 9000-9999 | <i>General</i> |

Beberapa *error* yang dihadapi beserta pemecahannya adalah:

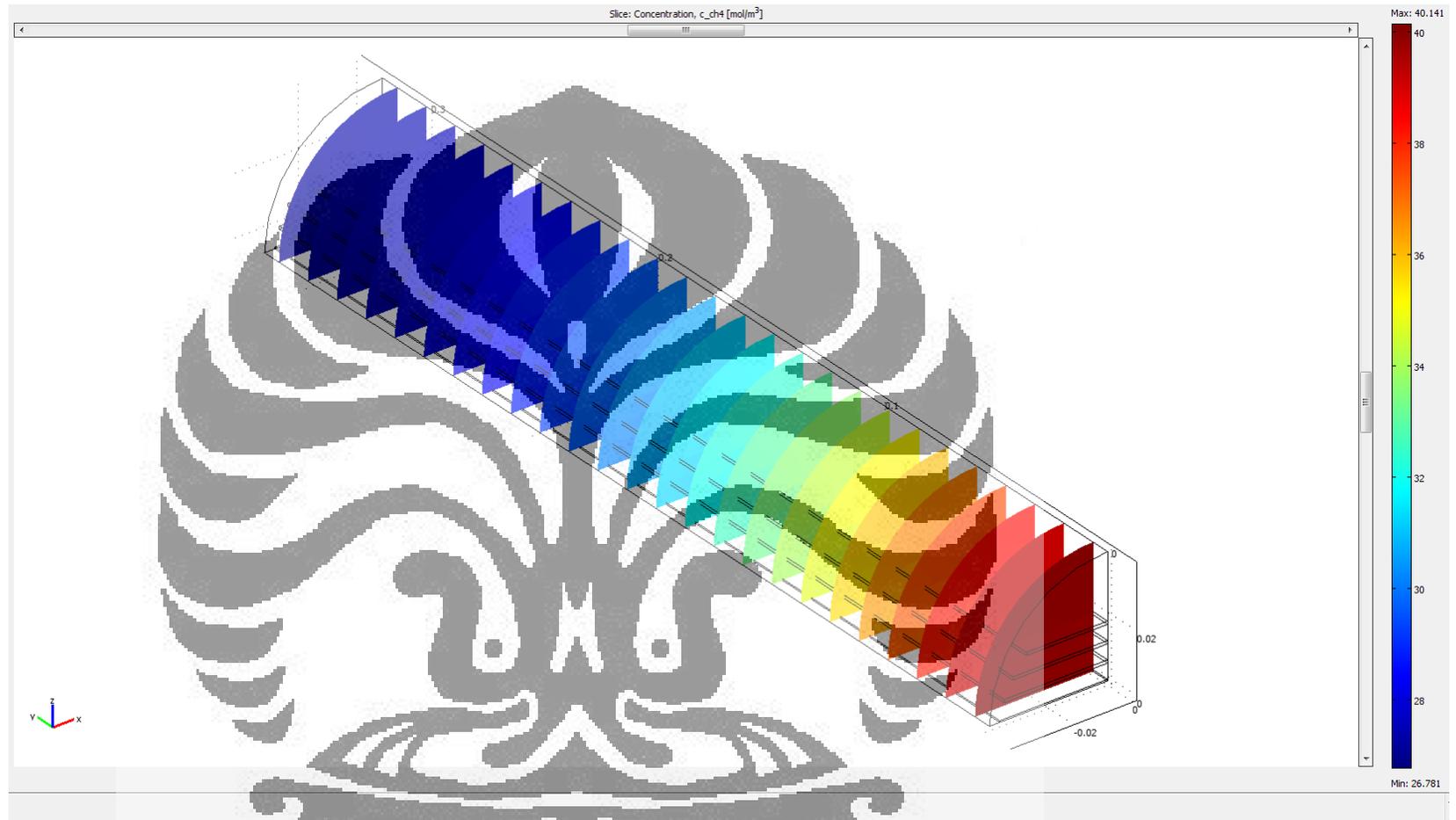
- Ketika terjadi pesan *error failed to find a solution*, maka yang harus dilakukan adalah mengganti initial value. Hal ini terjadi karena mungkin *initial value* yang dimasukkan melebihi dari *range* tertentu sehingga program tidak dapat mencari solusi.
- Ketika terjadi pesan *error out of memory during meshing*, maka yang harus dilakukan adalah mengkasarkan *meshing*. Hal ini dapat terjadi karena COMSOL memerlukan memori yang cukup besar dalam penggunaannya. Dengan mengurangi kehalusan suatu *meshing* serta membagi-baginya dalam hal penyelesaian, maka memori yang akan digunakan COMSOL menjadi berkurang.
- Ketika terjadi *error 4001*, maka dari *mesh*, harus dikecilkan (lebih didetailkan). Hal ini terjadi pada saat menyusun geometri, sebab antara katalis dan reaktor sangat berbeda dalam hal dimensi. *Error* ini bertolak belakang dengan pesan *error out of memory*, sehingga penyusun harus menemukan *meshing* yang pas.
- Ketika terjadi pesan *error undefined value*, maka ganti initial value. Ini terjadi karena *initial value* yang dimasukkan adalah 0. Hal ini disebabkan adanya persamaan yang dibagi dengan 0 sehingga mendapatkan nilai yang tak dapat terdefinisikan.

BAB V HASIL SIMULASI

Pada bab ini berisikan hasil simulasi yang merupakan output dari COMSOL berupa gambar 3-Dimensi serta grafik-grafik yang menunjukkan *plot* temperatur, laju alir, konsentrasi metana dan hidrogen ke arah panjang reaktor serta jari-jari reaktor.

5.1 Model Pertama

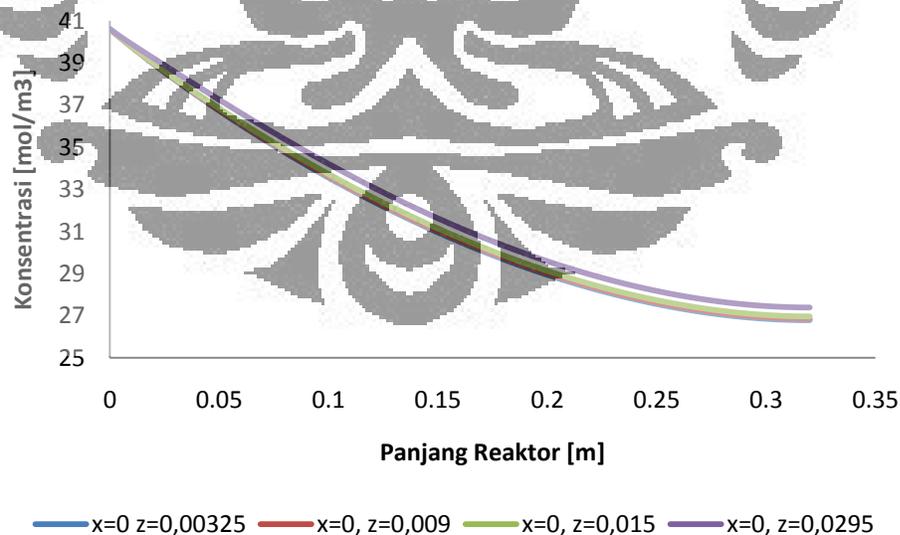
Setelah melakukan langkah-langkah yang ditunjukkan pada bab 4, COMSOL akan mengeluarkan output berupa pewarnaan pada gambar reaktor yang telah dibuat sebelumnya. Seperti yang telah dijelaskan pada bab 4, simulasi ini dibagi menjadi dua pendekatan, yaitu model pertama yang mengabaikan pola aliran yang terbentuk serta model kedua yang mengabaikan perubahan temperatur. Suatu model adalah membuat persamaan matematis dari suatu fenomena. Untuk melihat apakah suatu model valid, dilakukan validasi terhadap data eksperimen. Namun karena ketiadaan data, model ini tidak dapat dievaluasi. Untuk model pertama, program COMSOL akan menghasilkan output konsentrasi metana seperti yang ditunjukkan Gambar 5.1



Gambar 5.1 Keluaran COMSOL, Dalam Konsentrasi CH_4

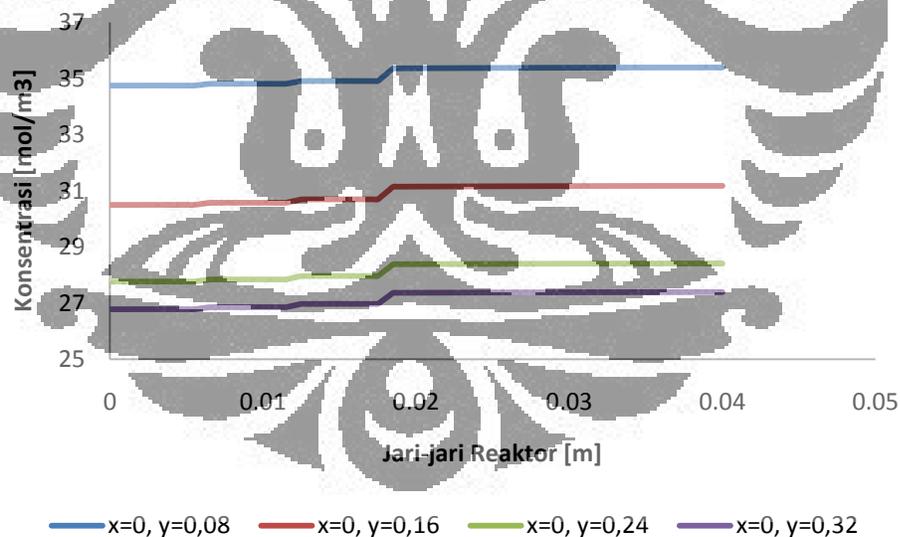
Output pada Gambar 5.1 menunjukkan perubahan konsentrasi dari CH_4 berdasarkan panjang reaktor dengan memperhitungkan perubahan temperatur dan konsentrasi di setiap titik. Disini terlihat konsentrasi metana yang berkurang (ditunjukkan dengan perubahan warna) yang disebabkan oleh faktor-faktor seperti laju difusi, konveksi, konduksi dan laju reaksinya. Output COMSOL ini dapat diubah-ubah menjadi variabel lain seperti temperatur, tekanan dan laju alir. Sedangkan untuk melihat penurunan variabel-variabel tersebut lebih mendetail, digunakan fasilitas *cross section plot parameters*. Pada fasilitas ini, diperlukan dua buah titik untuk membuat sebuah garis dalam reaktor. COMSOL Multiphysics menggunakan koordinat x, y, z untuk menentukan kedua titik tersebut sehingga untuk analisa lebih mendetail digunakan koordinat balok yaitu x, y, z, sehingga untuk grafik, digunakan arah x, y, z dimana, arah x merupakan jari-jari yang sejajar dengan pelat sejajar, arah y merupakan panjang reaktor sedangkan arah z merupakan jari-jari ke arah tegak lurus pelat.

Penurunan konsentrasi metana sepanjang reaktor dapat dilihat dari Gambar 5.2.



Gambar 5.2 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Panjang Reaktor ($y=0$ hingga $y=0,32$)

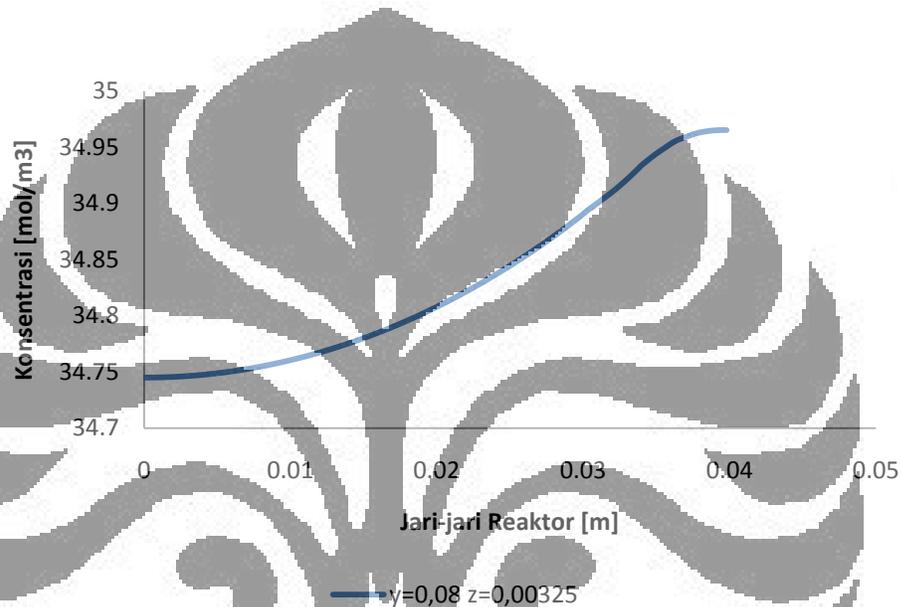
Gambar 5.2 merupakan grafik dari konsentrasi metana yang menurun terhadap jari-jari reaktor tegak lurus pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$). Grafik ini menunjukkan sejumlah metana akan terkonversi menjadi karbon dan hidrogen. Pada grafik ini terlihat bahwa ketika suatu posisi berada pada bagian tengah, semakin besar pula konversi metana menjadi hidrogen yang disebabkan pelat bagian tengah memiliki luas area yang lebih besar dibandingkan posisi-posisi di atasnya. Sedangkan semakin keatas terlihat bahwa konsentrasi metana kurang terkonversi yang disebabkan pada bagian atas jauh dari daerah pelat katalis sehingga masih banyak metana yang tidak terkena katalis yang menyebabkan tidak terkonversi. Posisi $x=0$, $z=0,00325$ menunjukkan konversi metana sebesar 34,05%, posisi $x=0$, $z=0,009$ menunjukkan konversi metana sebesar 33,87%, posisi $x=0$, $z=0,015$ menunjukkan konversi sebesar 33,57% dan posisi $x=0$, $z=0,0295$ menunjukkan konversi sebesar 32,54%. Sedangkan untuk melihat perubahan konsentrasi metana terhadap jari-jari reaktor dapat dilihat pada Gambar 5.3.



Gambar 5.3 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)

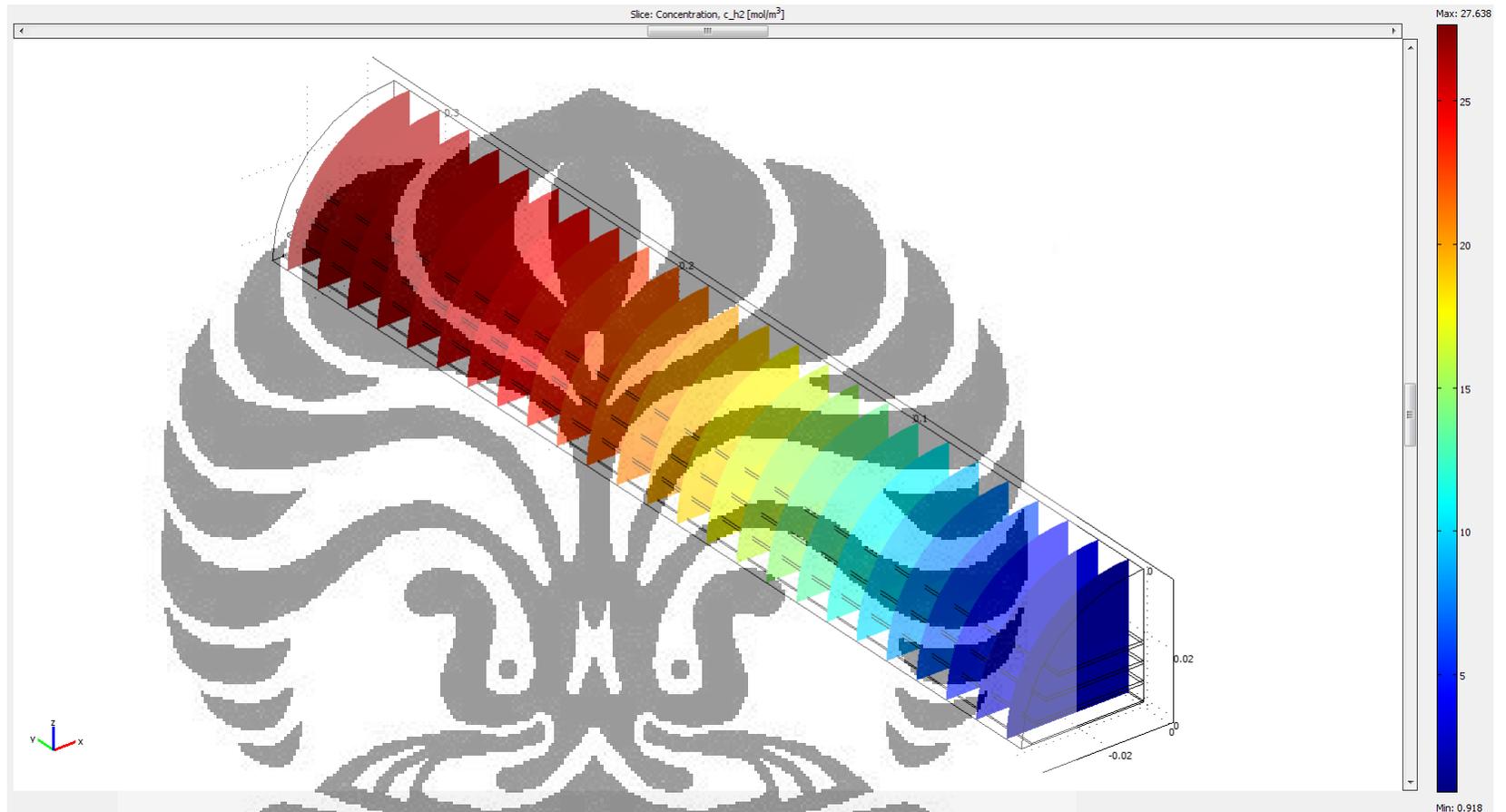
Pada Gambar 5.3 terlihat bahwa konsentrasi antara dua buah pelat bagian paling tengah selalu paling rendah jika dibandingkan dengan pelat-pelat di atasnya.

Hal ini juga disebabkan oleh luas area katalis pada bagian tengah lebih besar dibandingkan pelat-pelat di atasnya. Sedangkan bagian pada grafik yang terlihat patah merupakan gambaran COMSOL adanya katalis di dalam reaktor tersebut. Hal ini tidak berpengaruh pada hasil simulasi. Untuk melengkapi analisis, grafik juga digambarkan ke arah sejajar dengan pelat (sumbu x) seperti terlihat pada Gambar 5.4.



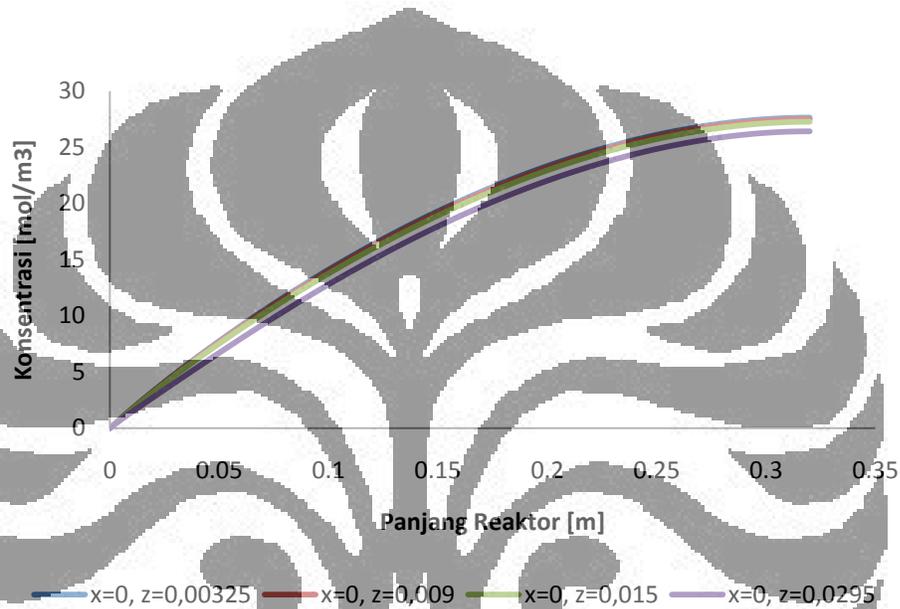
Gambar 5.4 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

Pada grafik ini, terlihat bahwa konsentrasi di pusat pelat lebih tinggi dibanding daerah-daerah pelat lainnya. Hal ini disebabkan bagian tengah pelat merupakan pusat reaksi. Pada ujung sebelah kanan terlihat adanya bentuk meliuk. Hal ini disebabkan lebar dari pelat hanya 73 milimeter sehingga ada bagian dimana tidak terjadi konversi metana melainkan hanya difusi dari metana tersebut. Grafik ini hanya *plot* pada satu sumbu y karena nilai konsentrasi pada bagian tengah dan ujung jari-jari reaktor tidak signifikan sehingga penambahan titik dari sumbu y tidak akan menunjukkan grafik yang bergradien. Variabel kedua yang dapat dipetakan COMSOL Multiphysics adalah gradien konsentrasi dari hidrogen yang merupakan produk dari reaksi dekomposisi metana seperti yang ditunjukkan Gambar 5.5.



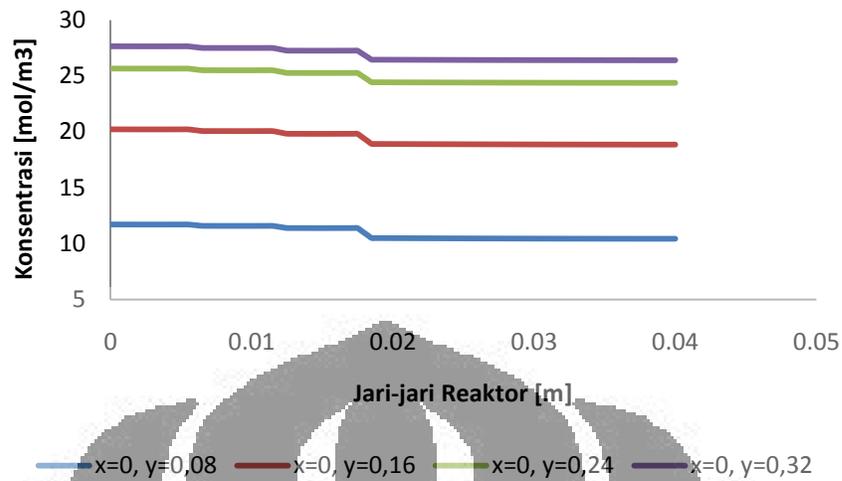
Gambar 5.5 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi H_2

Gambar 5.5 menunjukkan kenaikan H_2 berdasarkan panjang reaktor dengan memperhitungkan perubahan temperatur dan konsentrasi di setiap titik. Pada gambar ini terlihat bahwa konsentrasi hidrogen terus meningkat yang ditandai dengan perubahan warna. Untuk mengevaluasinya lebih mendetail, dibuat grafik antara konsentrasi hidrogen berdasarkan posisi tinggi reaktor (z) yang dapat terlihat pada Gambar 5.6.



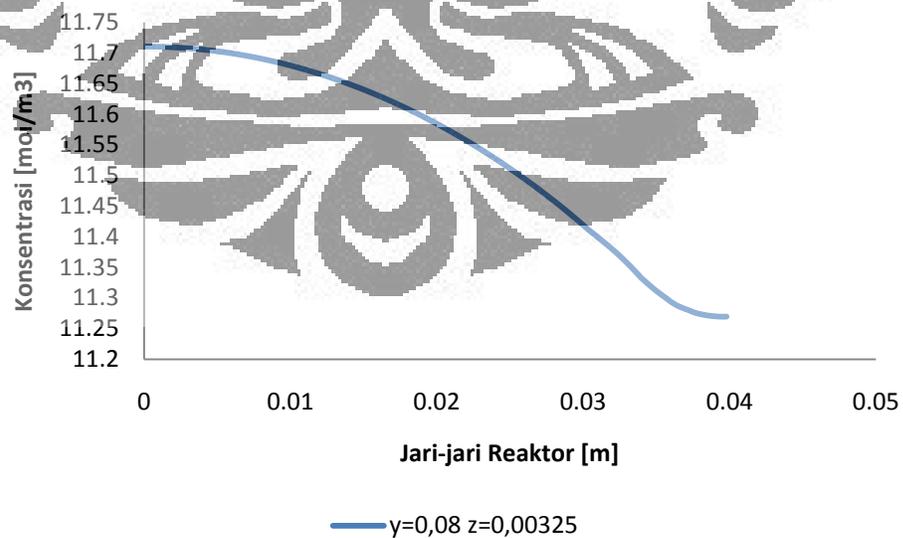
Gambar 5.6 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Panjang Reaktor ($y=0$ hingga $y=0,32$)

Gambar 5.6 menunjukkan perubahan konsentrasi hidrogen. Terlihat bahwa metana telah terkonversi menjadi hidrogen. Konsentrasi hidrogen yang terbentuk sekitar dua kali lipat konsentrasi metana yang dikonsumsi yang disebabkan oleh kesetaraan reaksi dimana satu mol metana akan menghasilkan dua mol hidrogen. Sama seperti metana, hidrogen juga lebih banyak terbentuk pada bagian tengah yang disebabkan luas area yang lebih besar. Sedangkan untuk grafik antara penurunan konsentrasi hidrogen terhadap jari-jari dapat terlihat pada Gambar 5.7.



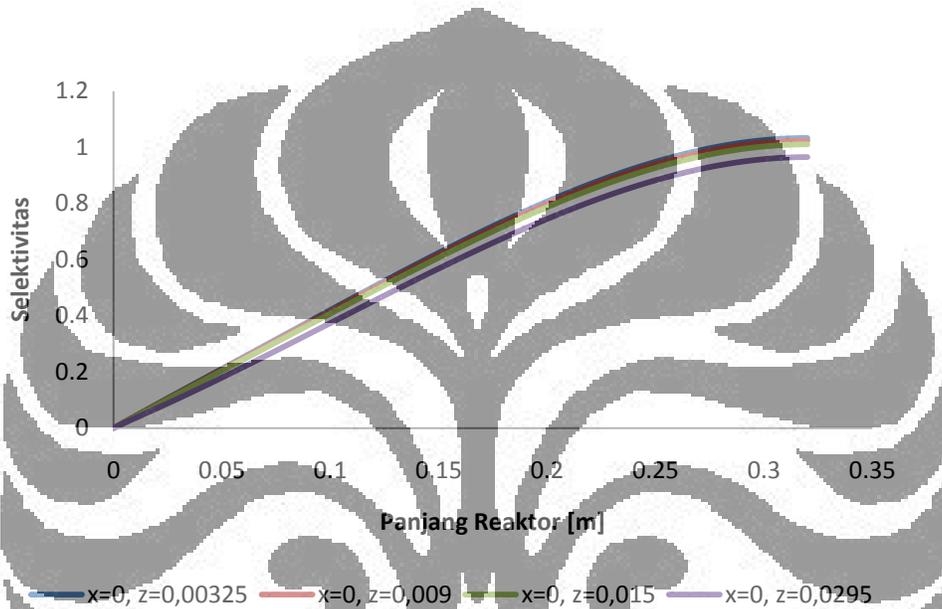
Gambar 5.7 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)

Sama seperti metana, Gambar 5.7 juga memperlihatkan bagian tengah reaktor memiliki konsentrasi hidrogen tertinggi yang menunjukkan konversi paling tinggi berada di pusat reaktor. Hal ini juga disebabkan oleh besarnya luas area katalis pada bagian tengah reaktor. Grafik juga *diplot* ke arah jari-jari yang sejajar pelat seperti Gambar 5.8.



Gambar 5.8 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

Grafik pada Gambar 5.8 menunjukkan hal yang sama seperti Gambar 5.3 yaitu bagian tengah memiliki konversi yang lebih tinggi. Hal ini disebabkan adanya *boundary layer* yang disebabkan dinding reaktor. Setelah melihat perubahan konsentrasi metana dan hidrogen, grafik selektivitas dapat dibuat dengan cara membagi mol hidrogen dengan mol metana seperti terlihat pada Gambar 5.9.

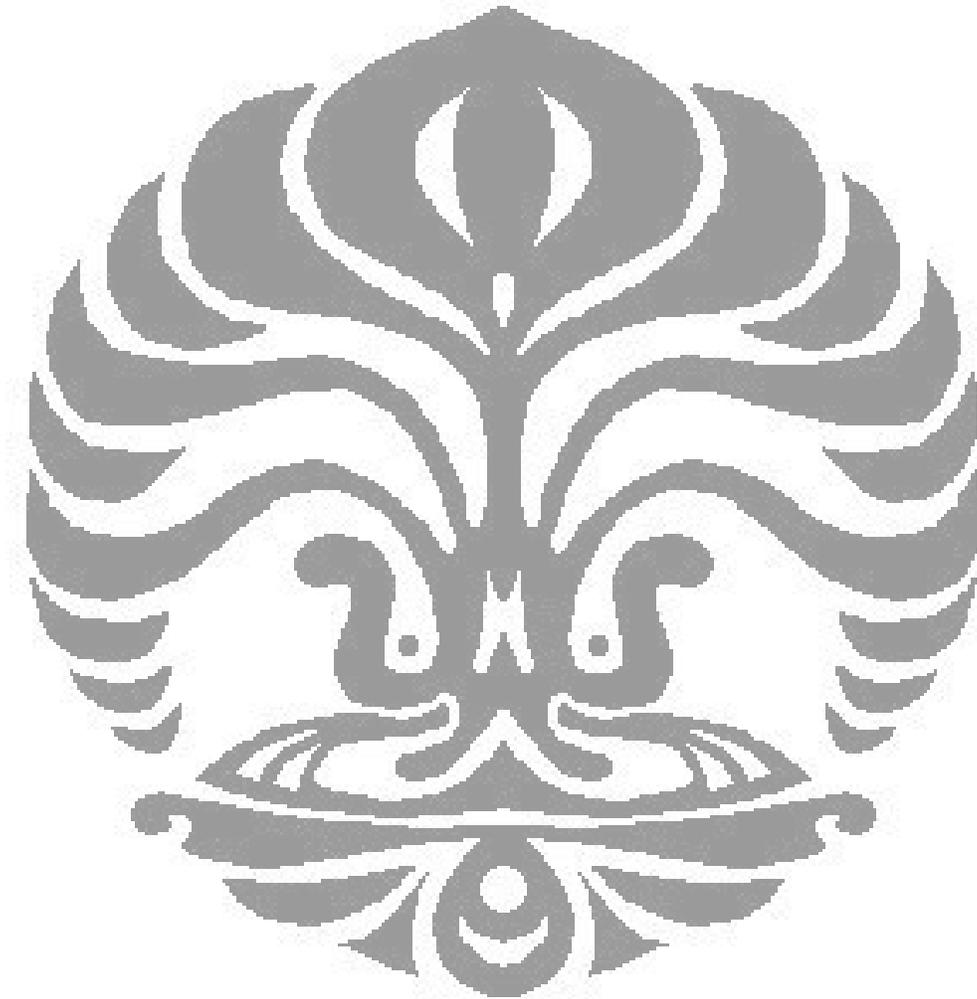


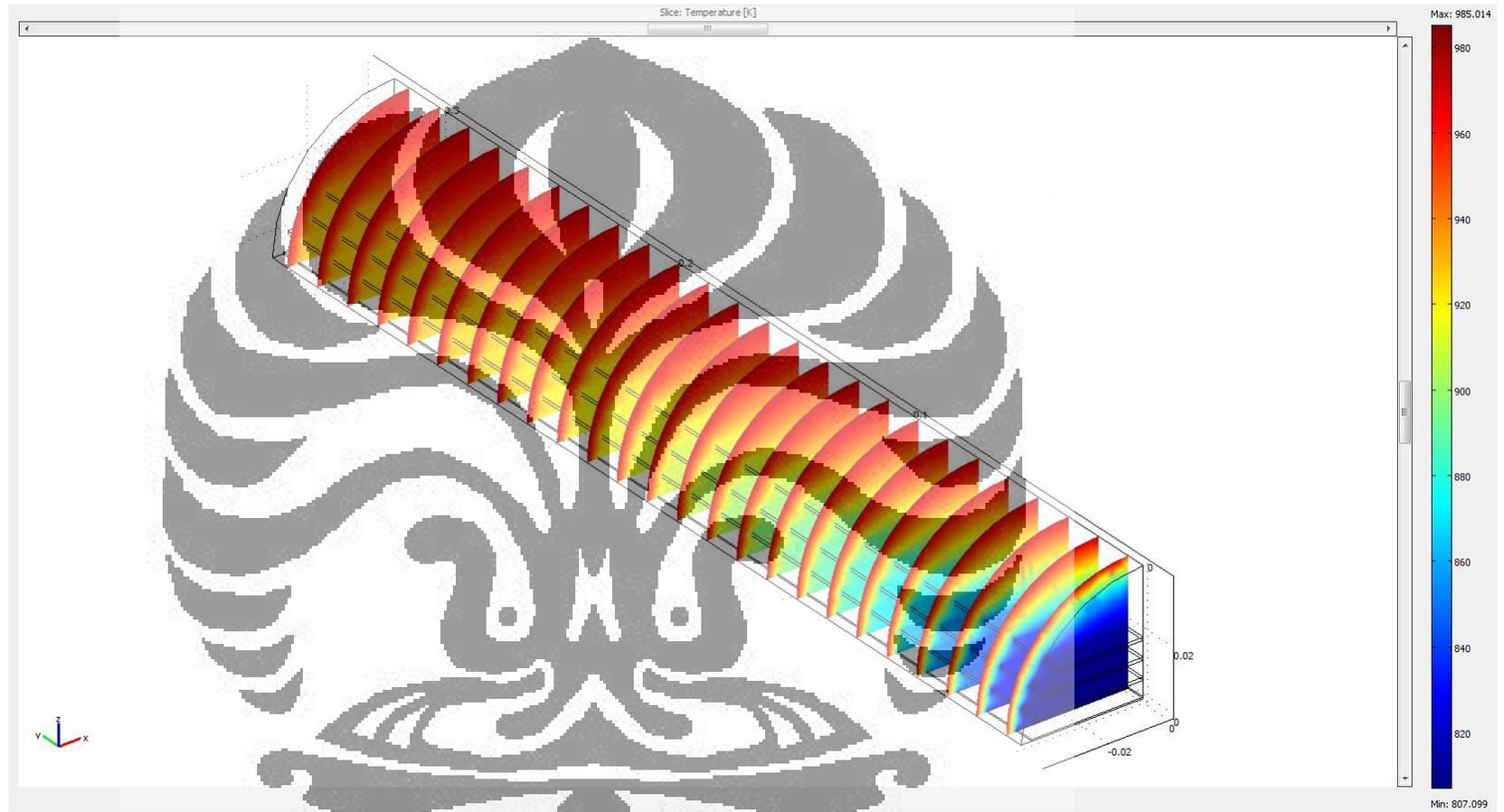
Gambar 5.9 Selektivitas Model Reaktor Pertama

Pada grafik ini terlihat bahwa pada keluaran reaktor, mol hidrogen hampir sama dengan mol metana sisa reaksi dengan perbandingan 1:1. Dari seluruh grafik ini terlihat bahwa model pertama hanya menghasilkan konversi rata-rata sebesar 34%. Konversi ini terbilang kecil yang disebabkan kecilnya koefisien perpindahan massa dan energi pada lapisan batas karena model tidak mempertimbangkan kekasaran permukaan padatan. Selain itu model juga tidak mempertimbangkan kemungkinan adanya reaksi pada bagian dalam padatan (berpori).

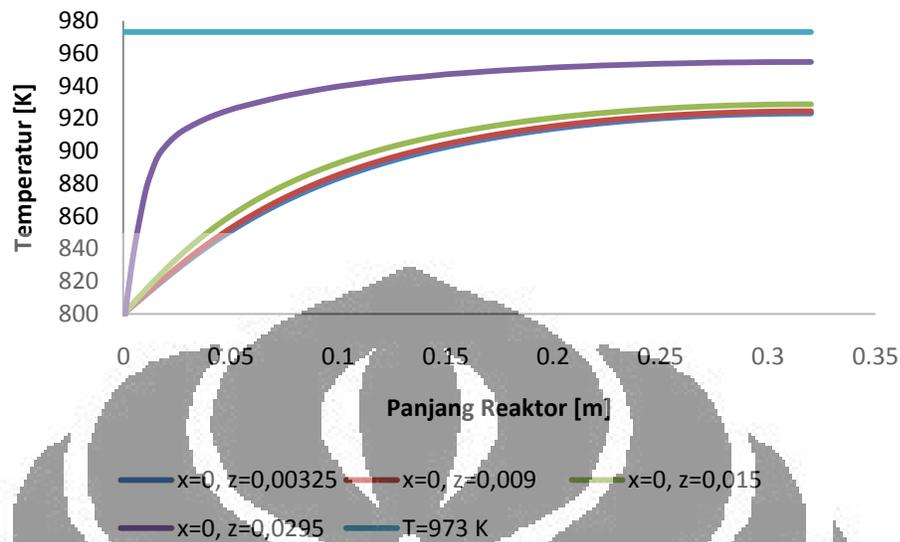
Variabel lain yang dapat dievaluasi adalah perubahan temperatur yang diakibatkan adanya pemanasan yang dilakukan oleh *furnace*, serta konsumsi energi yang disebabkan oleh reaksi endotermis seperti terlihat pada Gambar 5.10. Pada

Gambar 5.8 terlihat bahwa semakin mendekati dinding, temperatur semakin cepat mendekati temperatur dinding. Sedangkan semakin mendekati pusat reaksi, temperatur ini semakin sulit untuk mencapai temperatur dinding karena energi dari panas tersebut juga dikonsumsi oleh reaksi dekomposisi metana yang merupakan reaksi endotermis. Untuk mengevaluasi temperatur lebih mendalam, dibuat grafik temperatur sepanjang reaktor pada posisi tertentu seperti terlihat pada Gambar 5.11.



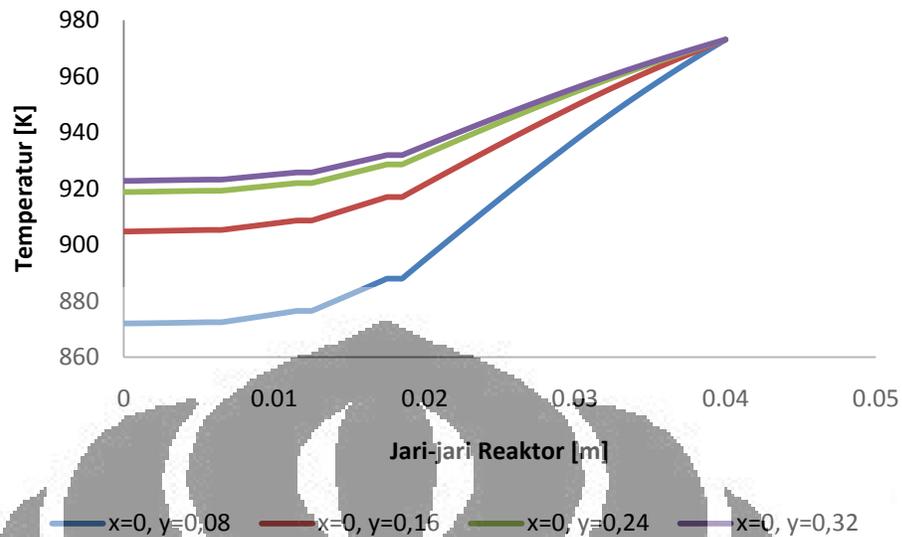


Gambar 5.10 Keluaran COMSOL Dalam Temperatur



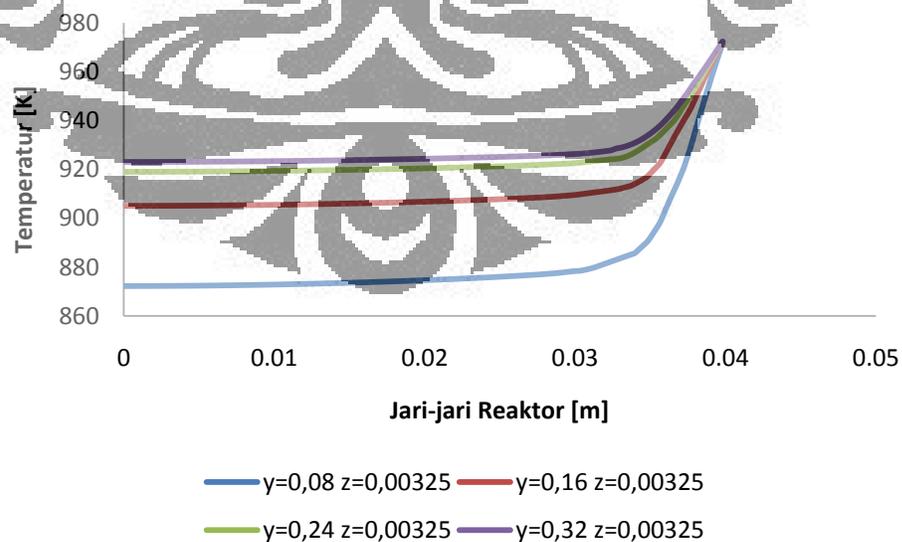
Gambar 5.11 Perubahan Temperatur Terhadap Panjang Reaktor ($y=0$ hingga $y=0,32$)

Pada Gambar 5.11 menunjukkan grafik bergradien positif yang berarti temperatur reaktor yang semakin meningkat yang disebabkan oleh pemanasan *furnace*. Gradien positif ini juga menunjukkan pemanasan yang dilakukan oleh *furnace* melebihi panas yang dikonsumsi reaksi endotermis. Dari grafik tersebut terlihat bahwa ketika suatu posisi berada semakin mendekati pusat reaksi (bagian tengah) semakin besar pula konsumsi energi yang memang dibutuhkan untuk reaksi. Sebaliknya, ketika suatu posisi berada pada posisi lebih jauh dari pusat reaksi ($x=0$, $z=0,015$), temperatur lebih cepat mencapai temperatur yang sama dengan *furnace*. Pada grafik ini terlihat adanya transfer panas dengan perbedaan skitar 100 K yang berarti tahanan perpindahan panas ini besar. Hal ini disebabkan titik tersebut lebih jauh dengan pusat reaksi yang menyebabkan panas yang dikonsumsi menjadi jauh lebih kecil dibandingkan panas yang masuk dari *furnace*. Selain itu, grafik temperatur terhadap jari-jari reaktor juga dievaluasi seperti Gambar 5.12.



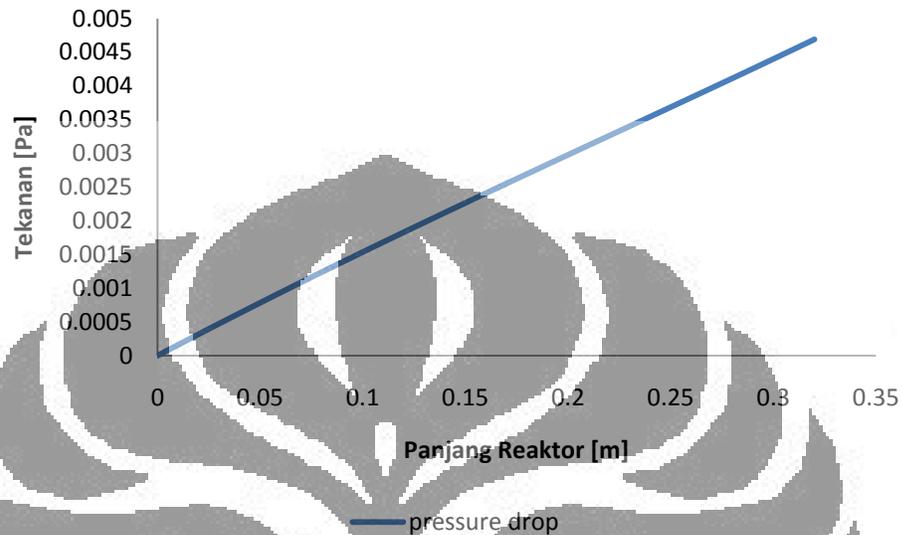
Gambar 5.12 Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)

Pada Gambar 5.12 terlihat bahwa ketika posisi reaktor semakin mendekati jari-jari reaktor, semakin cepat pula temperatur masukan mendekati temperatur dinding. Hal ini disebabkan semakin dekat suatu posisi dengan dinding, semakin kecil pula panas yang diambil untuk kebutuhan reaksinya. *Plot* grafik temperatur terhadap jari-jari reaktor yang sejajar dengan konfigurasi pelat ditunjukkan Gambar 5.13.



Gambar 5.13 Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

Sedangkan untuk *pressure drop* yang telah dimasukkan dalam model dapat dievaluasi dari Gambar 5.14.

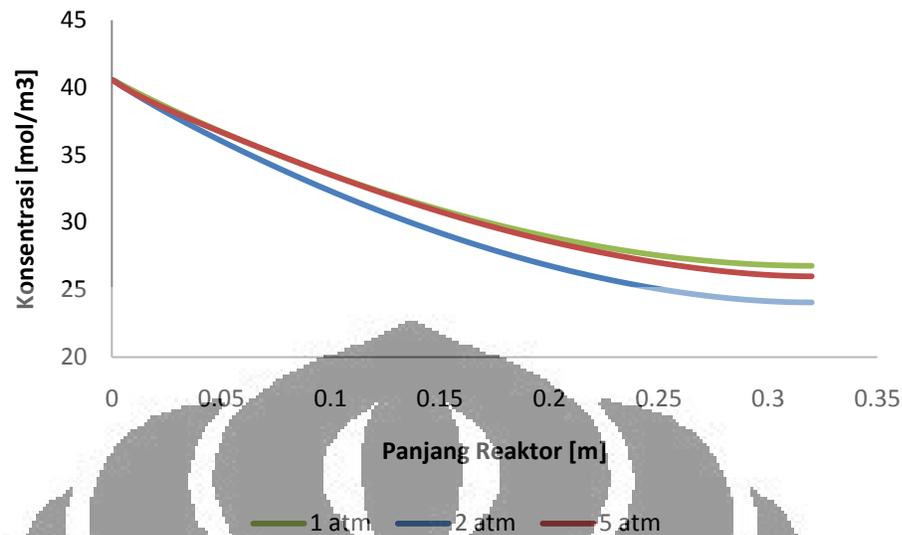


Gambar 5.14 Perubahan *Pressure Drop* Terhadap Panjang Reaktor

Pada Gambar 5.14 terlihat bahwa tekanan terus turun sepanjang reaktor secara linier. Hal ini disebabkan oleh *pressure drop* yang merupakan persamaan linier berorde 1. Namun perubahan ini terbilang kecil karena hanya berorde 10^{-3} Pascal sedangkan tekanan operasi berorde 10^5 Pascal.

5.1.1 Pengaruh Tekanan terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh tekanan awal terhadap kinerja reaktor, tekanan reaktor divariasikan dari 2 atm hingga 5 atm, pada temperatur masukan 800K, laju alir volumetrik 42 liter per jam serta umpan masuk metana murni. Grafik yang digambarkan hanyalah perubahan konsentrasi metana terhadap panjang reaktor pada bagian tengah karena bagian ini merupakan bagian dengan konversi terbesar.

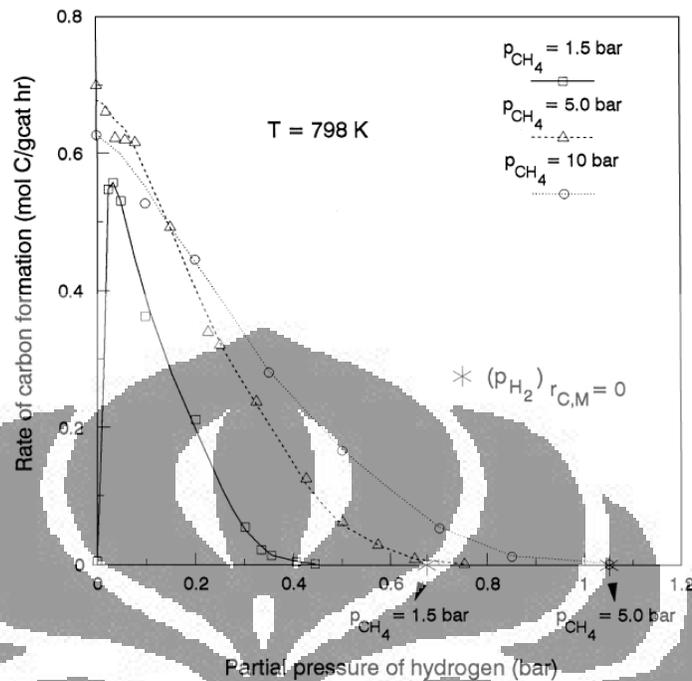


Gambar 5.15 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Tekanan Tertentu

Pada Gambar 5.15 terlihat bahwa pada tekanan 1 atm (tekanan standar) akan terkonversi sebesar 34,05 %, tekanan 2 atm metana akan terkonversi sebesar 40,72%, dan tekanan 5 atm akan menghasilkan konversi metana sebesar 35,96%. Teori umum menyebutkan bahwa perubahan tekanan pada reaksi fasa gas akan meningkatkan laju reaksi dari gas reaktan. Hal ini hanya terjadi pada fasa gas, sedangkan pada fasa cair dan padat tidak berpengaruh (www.chemguide.com, 2010).

Dari grafik pada Gambar 5.15 terlihat bahwa adanya suatu tekanan optimum untuk laju reaksi tersebut. Tekanan total yang besar akan membuat *driving force* metana menjadi besar. Namun, kenaikan jumlah hidrogen yang banyak akan menghambat laju alir hidrogen yang hendak keluar dari katalis karena tekanan sistem lebih besar daripada tekanan hidrogen. Pengaruh laju hidrogen ini lebih besar dibandingkan pengaruh metana.

Selain itu, grafik dari kinetika reaksi snoeck yang terlihat dari Gambar 5.16 menunjukkan bahwa laju reaksi awal akan meningkat dengan besarnya tekanan parsial metana tetapi berangsur menurun yang dipengaruhi oleh tekanan parsial hidrogen.



Gambar 5.16 Hubungan Antara Laju Reaksi Terhadap Tekanan Parsial (Snoeck, 1996)

Hal ini dapat dilihat lebih jelas dari persamaan laju reaksi dengan persamaan 4.10.

$$rate = \frac{k_M^+ \cdot K_{CH_4} \cdot p_{CH_4} - \frac{k_M^-}{K_r} \cdot p_{H_2}^2}{\left(1 + \frac{1}{K_r} \cdot p_{H_2}^3 + K_{CH_4} \cdot p_{CH_4}\right)^2} \quad (4.10)$$

Dari persamaan terlihat bahwa tekanan parsial hidrogen yang merupakan fraksi mol hidrogen dikali tekanan total, bersifat mengurangi laju reaksi. Pada masukan awal dimana masukan berupa metana murni, laju reaksi memang semakin tinggi ketika karena tidak adanya hidrogen. Namun ketika hidrogen mulai terbentuk, pengaruh tekanan parsial metana kurang dibanding pengaruh tekanan parsial hidrogen sehingga membuat laju reaksi tersebut menjadi lebih rendah. Semakin tinggi tekanan, akan membuat laju reaksi bergradien lebih negatif (lebih curam) dengan perbandingan komposisi antara metana dan hidrogen yang sama.

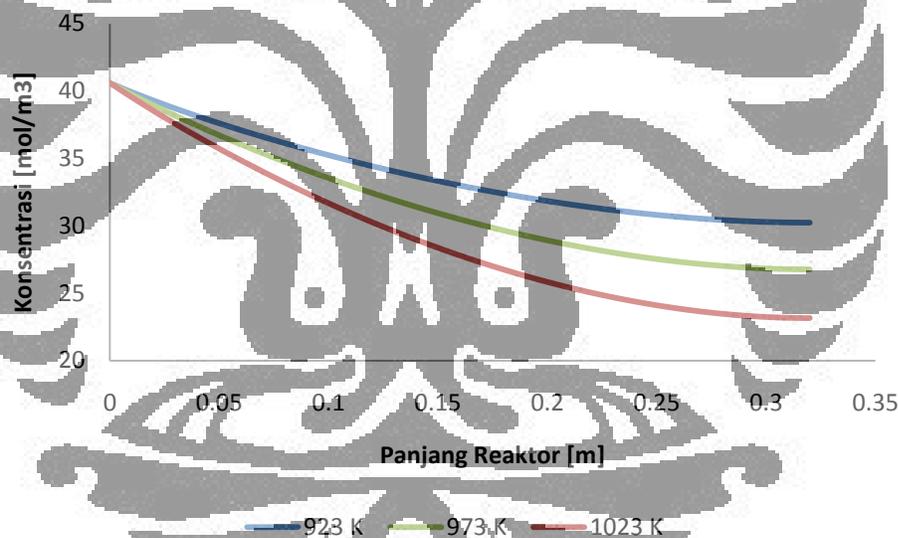
Hal lain yang mempengaruhi konversi adalah nilai koefisien difusivitas seperti pada persamaan

$$\underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \quad (4.6)$$

Kenaikan tekanan akan serta merta menurunkan koefisien difusivitas yang menyebabkan kurangnya jumlah tumbukan dan membuat berkurangnya konversi.

5.1.2 Pengaruh Temperatur Dinding terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh temperatur masukan awal terhadap kinerja reaktor, temperatur dinding reaktor divariasikan dari 923 K dan 1023 K laju alir volumetrik 42 liter per jam serta umpan masuk metana murni pada tekanan 1 atm.



Gambar 5.17 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Temperatur Tertentu Pada Model Pertama

Pada model pertama, temperatur dinding sebesar 923 K akan menghasilkan konversi sebesar 25,5%, temperatur dinding sebesar 973 K (standar) akan menghasilkan konversi sebesar 34,05%, sedangkan temperatur dinding 1023 K akan menghasilkan konversi sebesar 42,97%.

Dari grafik pada Gambar 5.14 terlihat bahwa semakin tinggi temperatur operasi semakin besar jumlah metana yang terkonversi. Hal ini disebabkan karena

reaksi dekomposisi metana merupakan reaksi endotermik, yaitu reaksi yang memerlukan panas, sehingga peningkatan temperatur mengakibatkan konversi semakin tinggi. Kenaikan temperatur juga berarti meningkatnya energi dari partikel-partikel metana yang menyebabkan lebih banyak molekul-molekul yang memiliki cukup energi untuk bereaksi sehingga laju reaksinya akan naik (Fogler, 2006).

Dalam persamaan, temperatur yang meningkat akan memperbesar konstanta-konstanta Arrhenius seperti pada keempat persamaan berikut

$$k_M^+ = 23444 \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}} \right] \cdot e^{\frac{-59033 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R.T}} \quad (4.10)$$

$$K_{CH_4} = 4389 \left[\frac{\text{mol}}{\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{bar}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{h}} \right] \cdot e^{\frac{-60522 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R.T}} \quad (4.11)$$

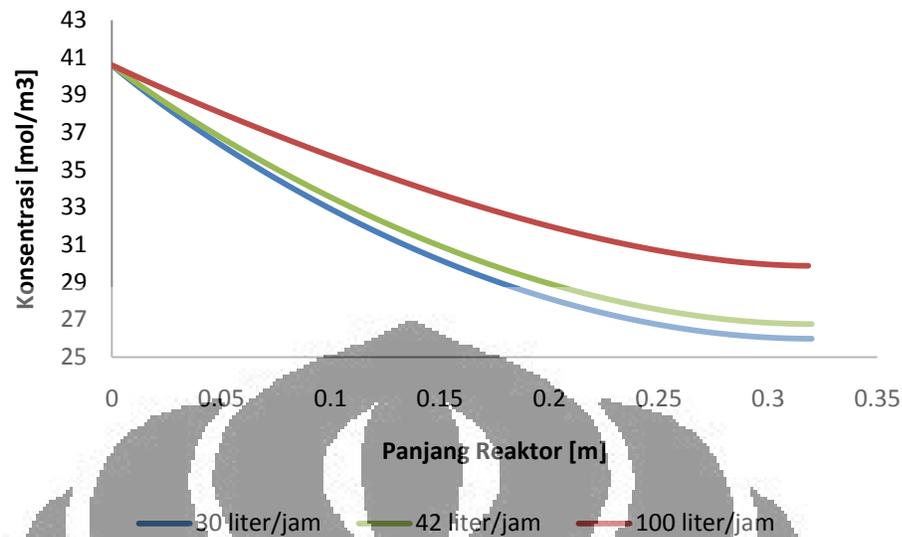
$$k_M^- = 0,21 [\text{bar}^{-1}] \cdot e^{\frac{-143 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R.T}} \quad (4.12)$$

$$K_r'' = 1,109 \cdot 10^8 [\text{bar}^{-1}] \cdot e^{\frac{-137314 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]}{R.T}} \quad (4.13)$$

Kenaikan temperatur akan memperbesar nilai persamaan Arrhenius yang juga berarti akan meningkatkan persamaan laju reaksi yang menyebabkan konversi semakin tinggi.

5.1.3 Pengaruh Laju Alir Volumetrik terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh laju alir masukan awal terhadap kinerja reaktor, laju alir volumetrik divariasikan dari 30 liter/jam dan 45 liter/jam, pada tekanan 1 atm, temperatur masuk 800 K serta umpan masuk metana murni.

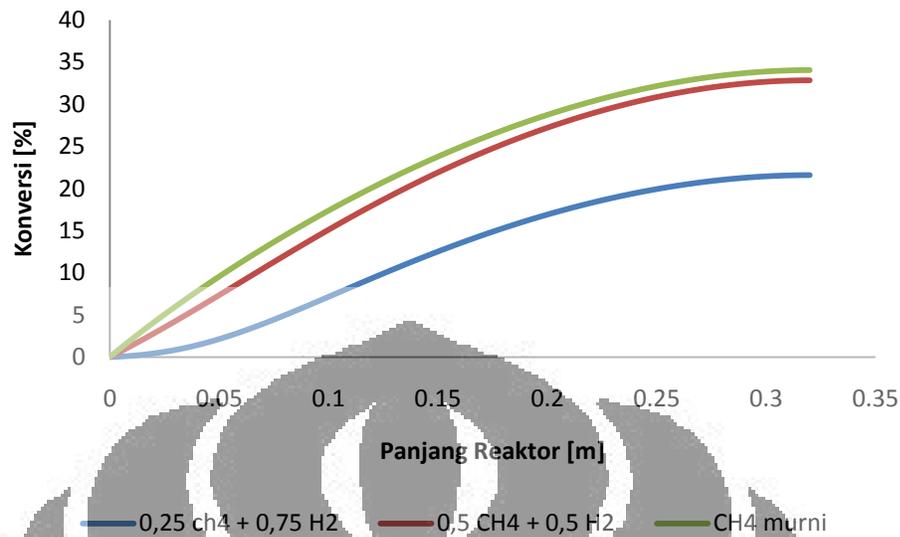


Gambar 5.18 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Laju Alir Tertentu Pada Model Pertama

Pada model pertama, laju alir 30 liter akan menghasilkan konversi sebesar 36,02%, laju alir 42 liter akan menghasilkan konversi sebesar 34,05% dan 100 liter akan menghasilkan konversi sebesar 26,39 %. Dari grafik Gambar 5.18 terlihat bahwa semakin tinggi laju alir volumetrik akan menurunkan konversi dari metana. Hal ini disebabkan semakin besar laju alir volumetrik akan menyebabkan naiknya kecepatan dan berarti menurunkan waktu kontak terhadap pelat katalis dalam reaktor.

5.1.4 Pengaruh Fraksi Mol Masukan terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh fraksi mol masukan awal terhadap kinerja reaktor, fraksi mol masukan divariasikan dari perbandingan metana-hidrogen 0,25 – 0,75; 0,5 – 0,5 dan umpan metana murni (standar), pada tekanan 1 atm, temperatur masuk 800 K, laju alir 42 liter per jam serta umpan masuk metana murni.



Gambar 5.19 Perubahan Konversi Berdasarkan Fraksi Mol Pada Model Pertama

Pada model pertama, komposisi metana:hidrogen 0,25:0,75 akan menghasilkan konversi sebesar 21,60%, komposisi metana:hidrogen 0,5:0,5 akan menghasilkan konversi sebesar 32,85% dan umpan metana murni (standar) akan menghasilkan konversi sebesar 34,05%.

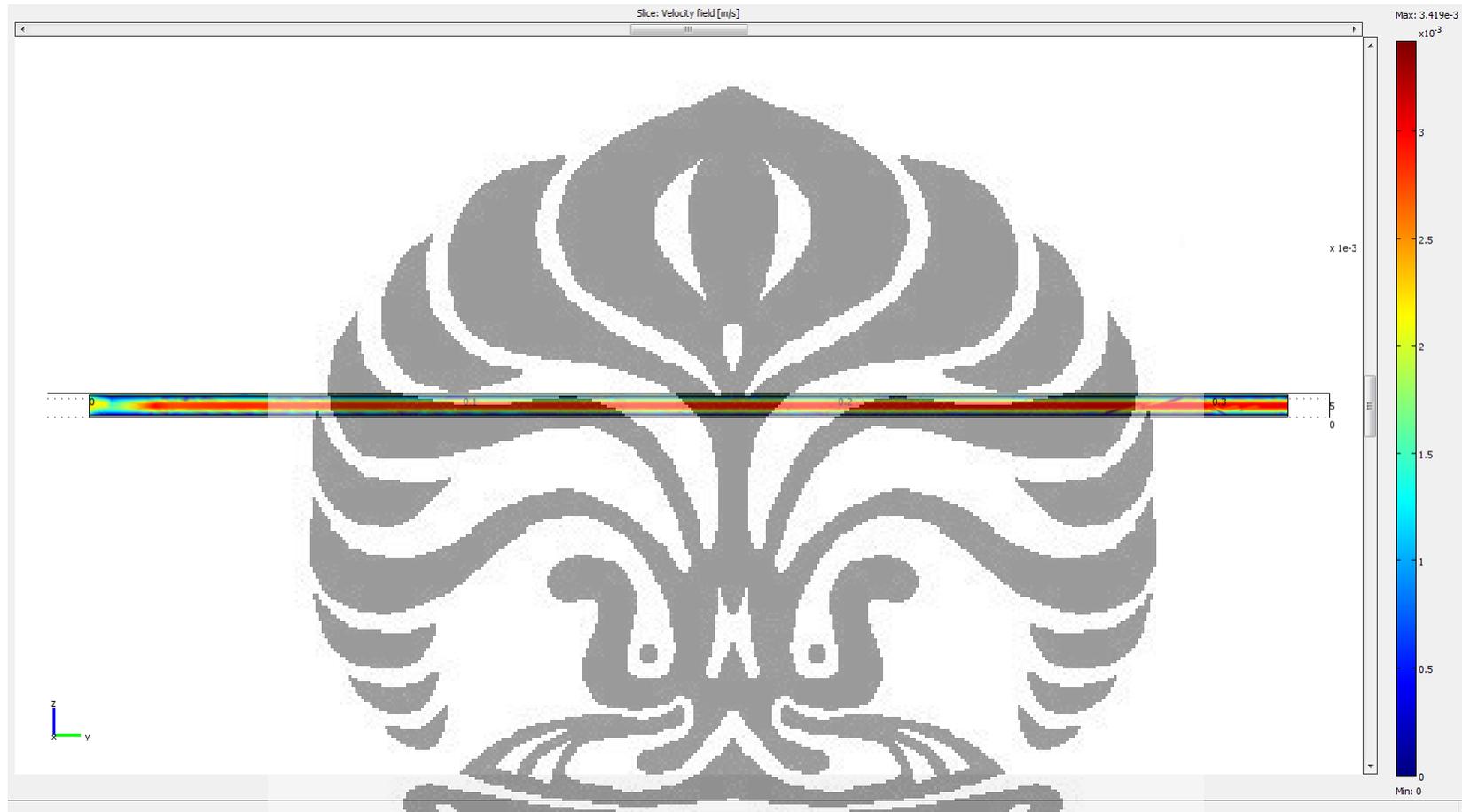
Penambahan produk dalam reaktan secara umum akan mengganggu kinerja reaktor tersebut. Hidrogen merupakan gas inert dan hasil reaksi pada dekomposisi katalitik metana. Hal ini juga didukung dengan eksperimen yang telah dilakukan oleh Sergei, bahwa peningkatan tekanan parsial hidrogen dalam aliran reaktan akan menurunkan laju maksimal pembentukan karbon. Semakin banyak partikel hidrogen dalam reaktor akan semakin menghalangi kontak metana dengan inti katalis dan mengakibatkan kemungkinan metana terkonversi menjadi lebih kecil.

Jika dilihat dari persamaan laju reaksi yang digunakan (Snoeck, 1996) memang penambahan produk (hidrogen) dalam masukan akan menurunkan laju reaksi yang berlaku, dimana adanya produk pada masukan akan membuat nilai tekanan parsial hidrogen semakin besar dan memperkecil laju reaksi.

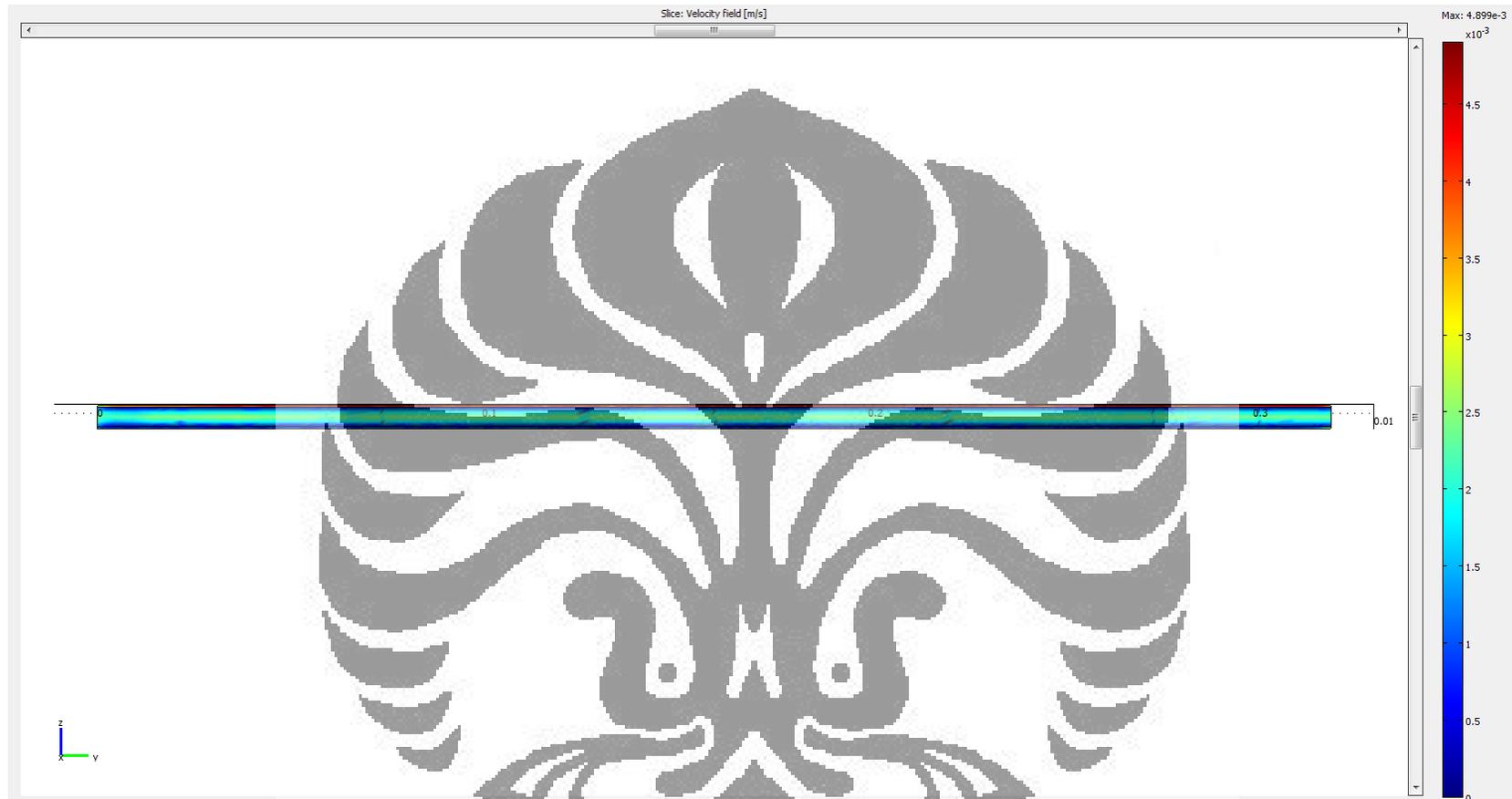
5.2 Model Kedua

Berbeda dengan model pertama, model kedua lebih menitikberatkan pada pengaruh pola aliran dibandingkan perubahan temperatur. Setelah membuat geometri dan memasukkan model seperti yang dijelaskan pada bab 4, COMSOL akan menghasilkan output seperti Gambar 5.20 – Gambar 5.23. Pada keempat gambar ini terlihat bahwa kecepatan akan semakin cepat pada bagian tengah sedangkan semakin dekat pada dinding reaktor maupun pelat, kecepatan akan menurun yang disebabkan adanya *boundary layer* yang terbentuk akibat friksi.

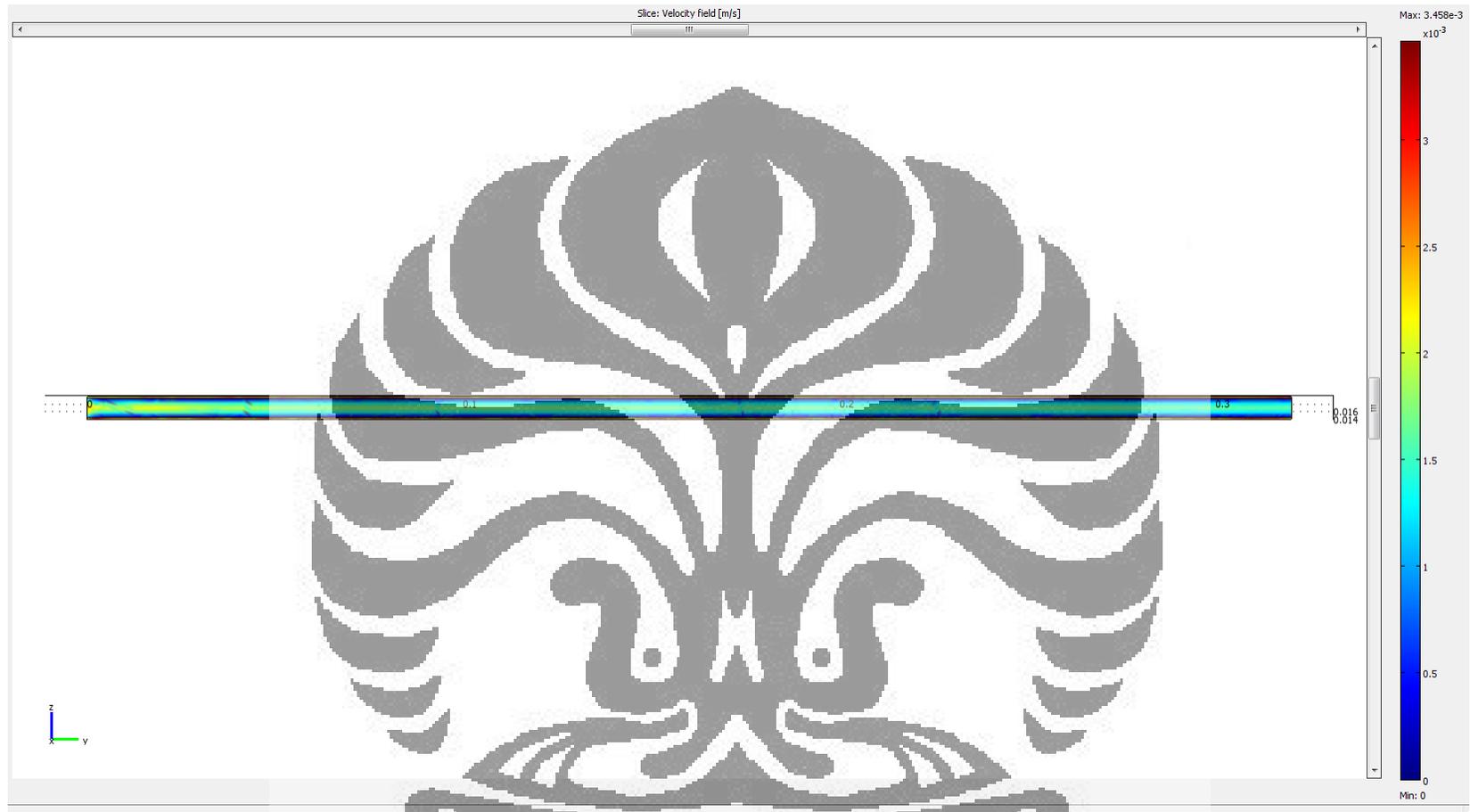




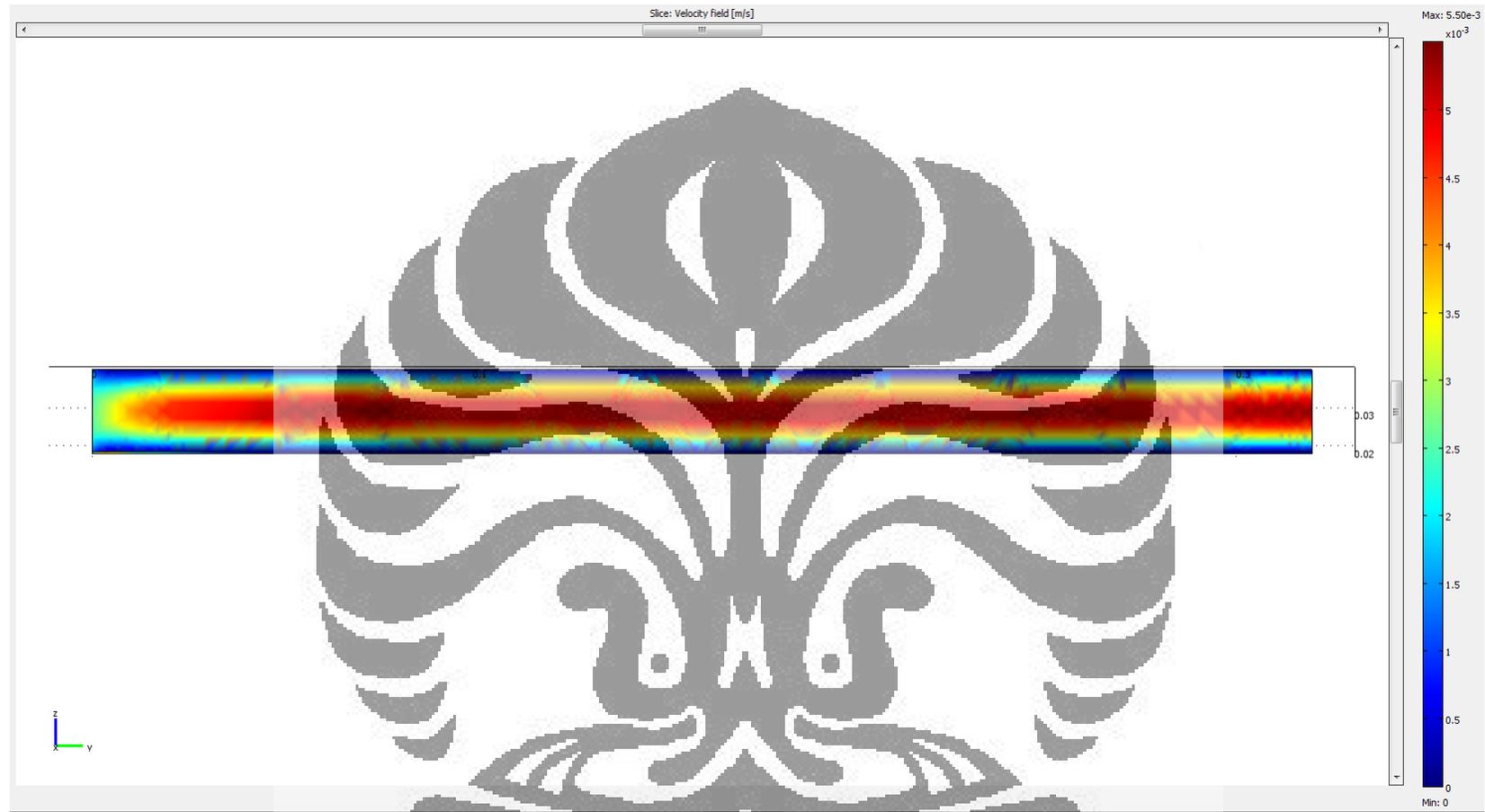
Gambar 5.20 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 1.



Gambar 5.21 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 2.

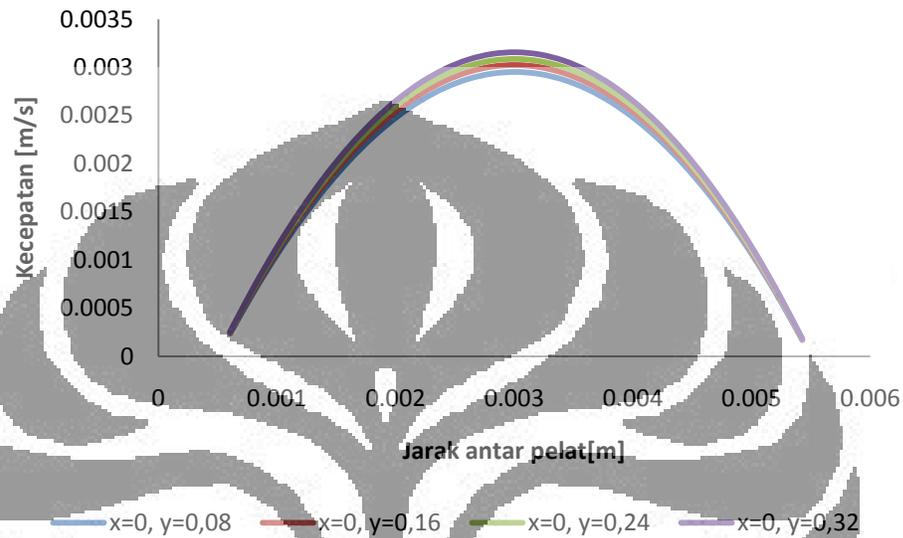


Gambar 5.22 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 3.



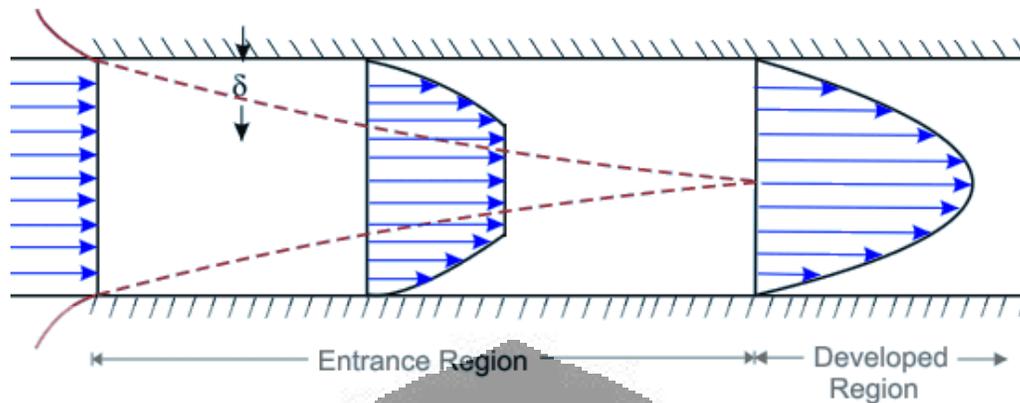
Gambar 5.23 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Model Kedua Nomor 4.

Untuk mengevaluasi secara lebih mendetail, penampang bagian pertama, yaitu pada dua buah pelat yang paling tengah dibuat grafik hubungan antara kecepatan dan jarak antar pelat reaktor seperti ditunjukkan Gambar 5.24.



Gambar 5.24 Keluaran COMSOL Mengenai Kecepatan Penampang Pertama ($z=0$ hingga $z=0,01$)

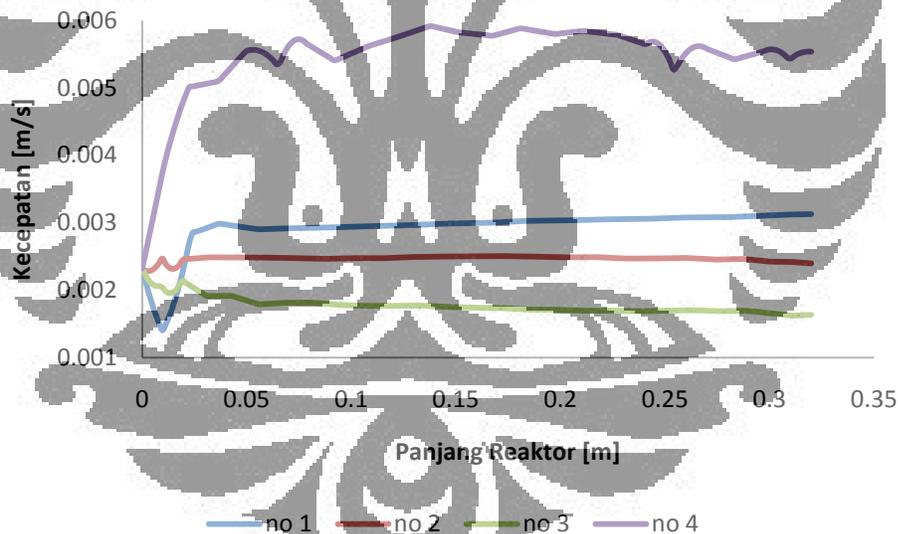
Pada Gambar 5.24 terlihat bahwa kecepatan fluida paling besar pada bagian tengah sedangkan pada bagian pinggir hampir mendekati nol yang disebabkan adanya gradien kecepatan. Gambar 5.24 juga menunjukkan semakin fluida mengalir, maka kecepatannya semakin tinggi. Keempat model ini menunjukkan hasil yang serupa. Hal ini sesuai dengan teori kecepatan antara dua pelat seperti ditunjukkan Gambar 5.25.



Gambar 5.25 Peningkatan Boundary Layer pada Aliran Laminar

(<http://nptel.iitm.ac.in/>, 2010)

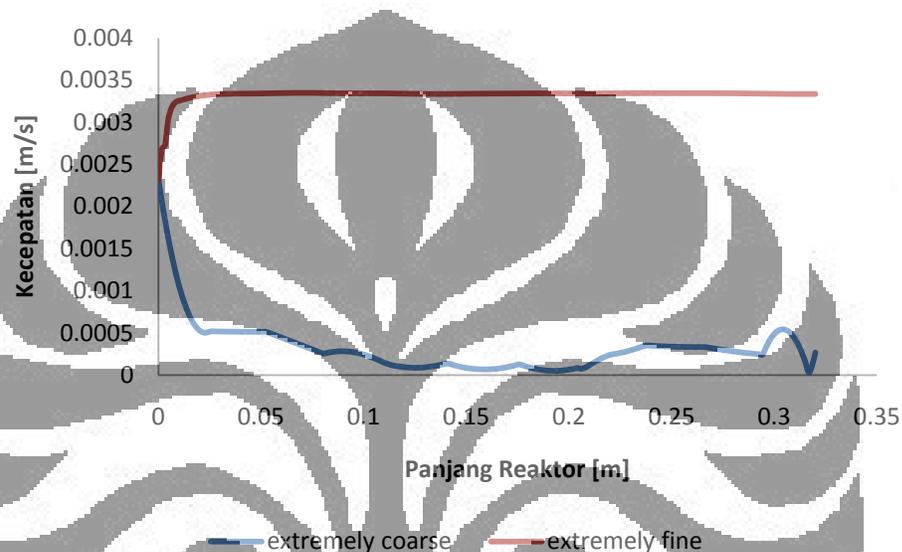
Untuk melihat meningkatnya kecepatan, grafik antara kecepatan terhadap panjang reaktor seperti yang ditunjukkan Gambar 5.26



Gambar 5.26 Grafik Perubahan Kecepatan Menurut Model Kedua ke Arah y Berturut-turut dari (a) Tengah (No 1), (b) No 2, (c) No 3, (d) Atas (No 4).

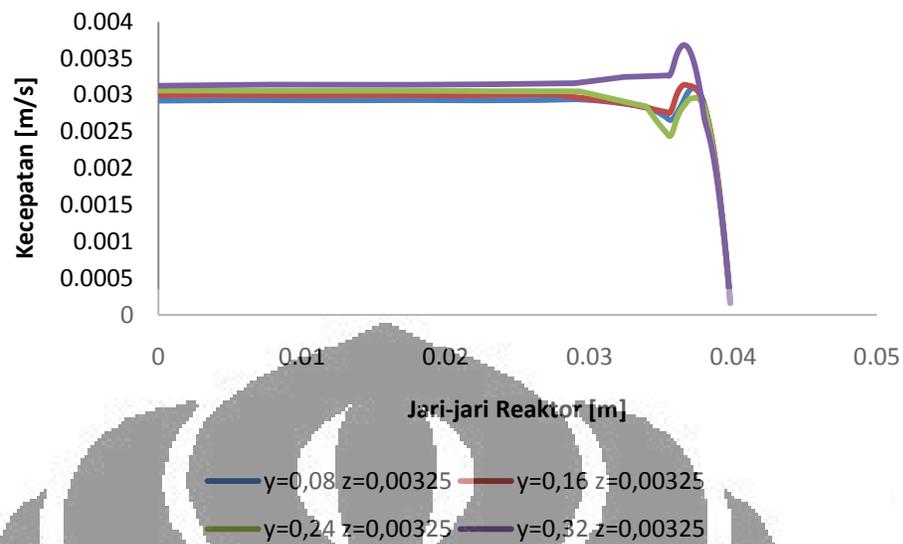
Pada Gambar 5.26, terlihat bahwa kecepatannya tidak stabil, hal ini disebabkan akibat solusi kurang akurat yang disebabkan oleh dua hal yaitu tingkat meshing serta kriteria konvergensi. Hal ini nampak jelas pada percobaan dengan

menggunakan model sederhana yaitu sebuah reaktor yang memiliki panjang 0,32 m, lebar 0,06 m, serta tinggi 0,006 m dengan kecepatan serta sifat fisik fluida yang konstan. Hasil *plot* grafik ini terlihat pada Gambar 5.27. Hal ini tidak ditunjukkan dengan konsentrasi CH_4 ataupun H_2 .



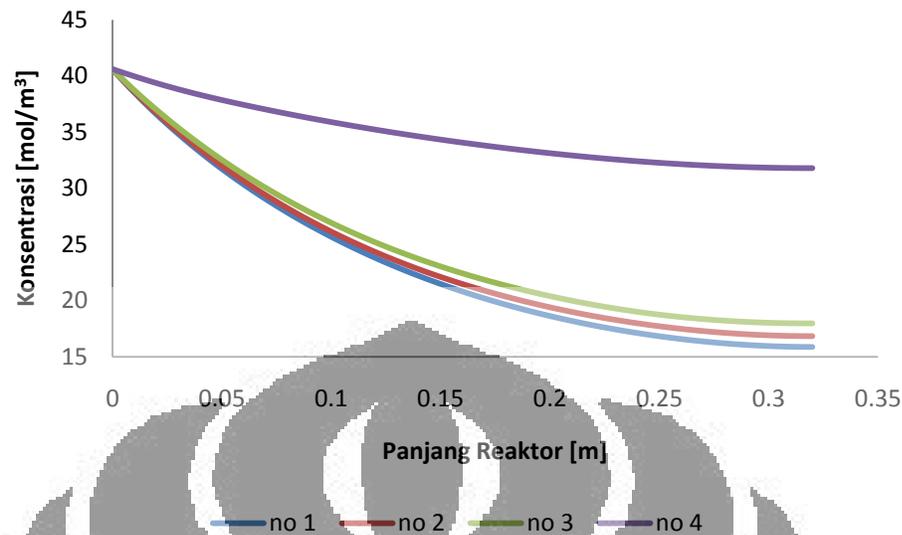
Gambar 5.27 Grafik pada posisi bagian tengah reaktor

Terlihat bahwa *meshing* tinggi akan menghasilkan kecepatan yang naik yang disebabkan *boundary layer*. *Boundary layer* ini menyebabkan aliran pada posisi dekat pelat menjadi melambat akibat friksi yang disebabkan oleh gesekan antara pelat dan aliran fluida. Namun pada posisi tengah (tepat antara dua buah pelat), kecepatan akan naik akibat resultan fluks momentum dari *boundary layer*. Namun karena keterbatasan komputer, membuat model dengan *meshing* tinggi adalah tidak mungkin. Karena *plot* grafik ke arah panjang reaktor menghasilkan *error*, *plot* ke arah sumbu lain juga perlu dievaluasi apakah pengaruh dari *error* ini cukup besar dan mempengaruhi solusi-solusi keluaran COMSOL. Untuk *plot* grafik kecepatan terhadap jari-jari yang sejajar dengan pelat terlihat pada Gambar 5.28



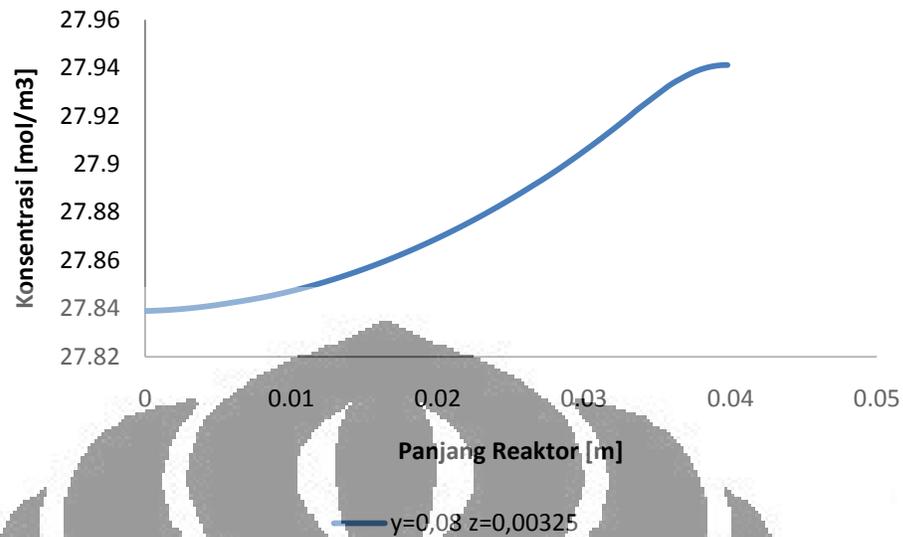
Gambar 5.28 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

Pada Gambar 5.28 juga tidak menunjukkan grafik yang halus. Pada grafik tersebut terlihat kecepatan di antar pelat hampir sama sepanjang lebar pelat kemudian pada bagian kanan grafik tersebut terlihat berbeda yang disebabkan bagian tersebut tidak lagi terdapat pelat katalis sehingga aliran fluida seperti aliran masuk kemudian lebih ke kanan lagi kecepatan terlihat lebih meningkat yang disebabkan adanya faktor friksi dengan dinding reaktor. Setelah mengevaluasi kecepatan, variabel lain yang dapat dievaluasi adalah konsentrasi metana dan hidrogen. Penurunan konsentrasi metana terlihat pada Gambar 5.29.



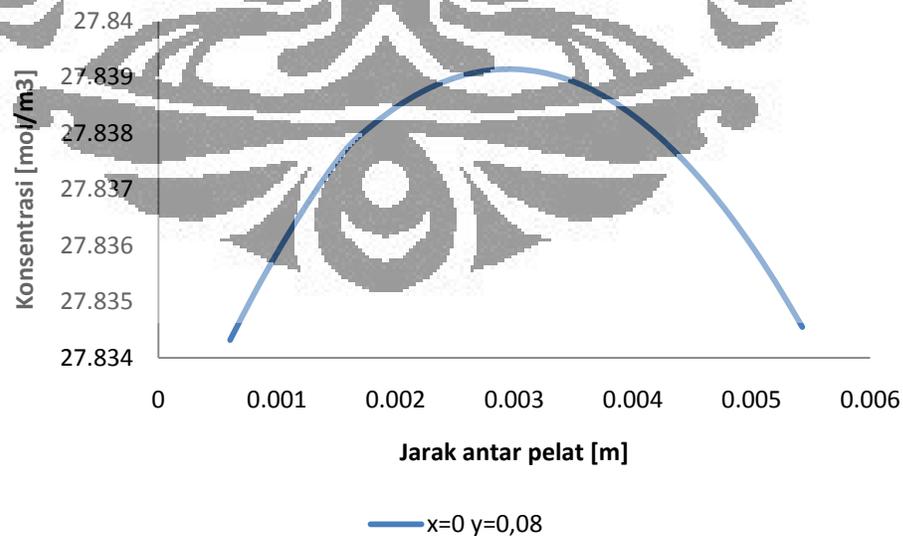
Gambar 5.29 Grafik Penurunan Konsentrasi Metana dari Model Kedua Berturut-turut dari (a) Tengah (no 1), (b) no 2, (c) no 3, (d) Atas (no 4).

Gambar 5.29 menunjukkan konsentrasi yang berubah secara lebih mendetail. Pada grafik terlihat konsentrasi metana ini turun ke angka 16 mol/m^3 . Hal ini bukan disebabkan oleh karena pola aliran dan kecepatan yang berubah-ubah, tetapi lebih kepada temperatur seragam yang tinggi dan tidak adanya konsumsi panas yang dilakukan oleh sistem. Dari grafik antara no 1, 2, 3 dan 4 juga terlihat bahwa semakin suatu fluida jauh dari daerah reaksi, maka konversinya juga semakin rendah. Sedangkan untuk grafik konsentrasi metana terhadap jari-jari reaktor yang sejajar pelat ditunjukkan oleh Gambar 5.30.



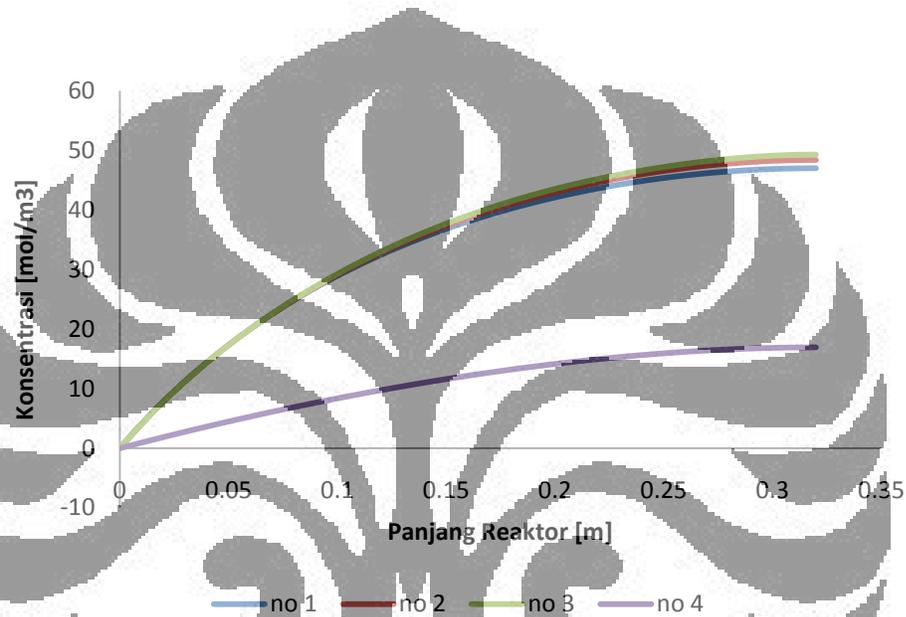
Gambar 5.30 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

Sama seperti model pertama, model kedua juga menunjukkan gradien positif dari penurunan metana. Bagian tengah dari reaktor pelat sejajar memiliki konversi yang paling tinggi meskipun tidak begitu signifikan dibanding daerah disekitarnya. Sedangkan untuk grafik konsentrasi terhadap jarak antar pelat dari pelat ditunjukkan oleh Gambar 5.31.



Gambar 5.31 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)

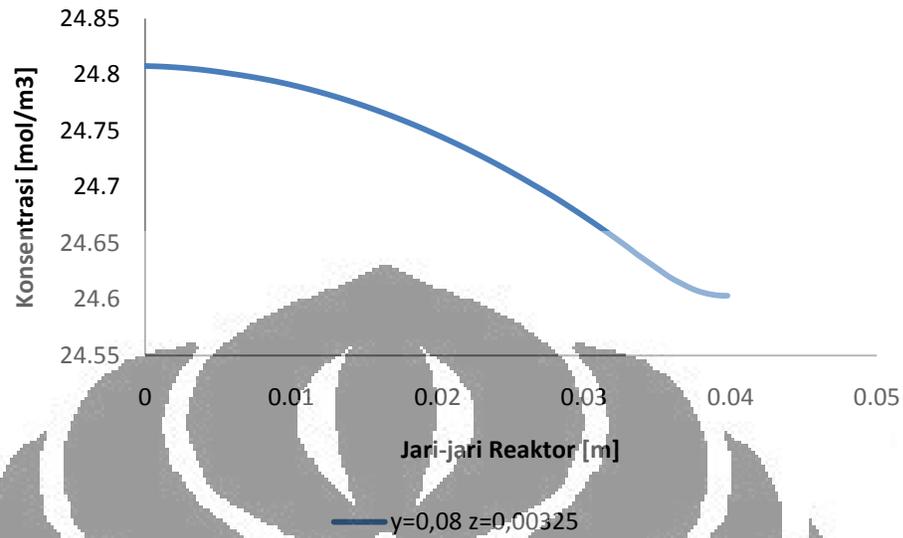
Pada Gambar 5.31 terlihat perbedaan konsentrasi pada bagian antar pelat dimana bagian lebih dekat dengan pelat memiliki konsentrasi yang lebih rendah. Selain konsentrasi metana, hidrogen juga dapat dievaluasi menurut panjang dari reaktor pada masing-masing penampang seperti terlihat pada Gambar 5.32.



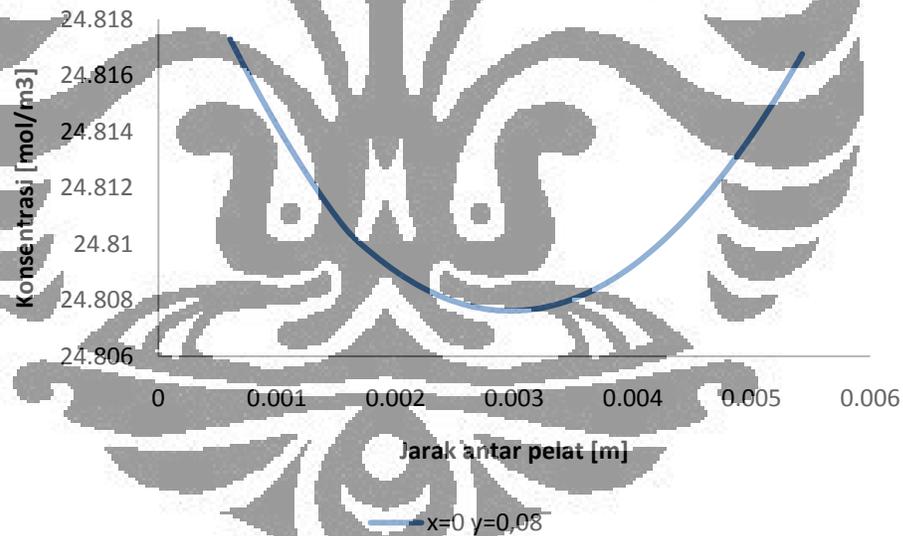
Gambar 5.32 Grafik Perubahan Konsentrasi Hidrogen dari Model Kedua Berturut-turut dari (a) Tengah (no 1), (b) no 2, (c) no 3, (d) Atas (no 4).

Grafik ini juga berbeda dengan model pertama dibandingkan model pertama dimana penampang nomor 3 yang memiliki luas area yang lebih kecil dibanding penampang nomor 1 dapat menghasilkan hidrogen yang lebih besar. Hal ini juga diduga disebabkan oleh solusi yang kurang akurat yang disebabkan oleh tingkat *meshing* serta faktor konvergensi yang rendah.

Meskipun grafik hidrogen ke arah panjang menunjukkan ketidaksesuaian, grafik antara konsentrasi hidrogen ke arah jari-jari baik tegak lurus reaktor maupun sejajar reaktor menunjukkan hasil yang cukup baik seperti terlihat pada Gambar 5.33 dan 5.34.



Gambar 5.33 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

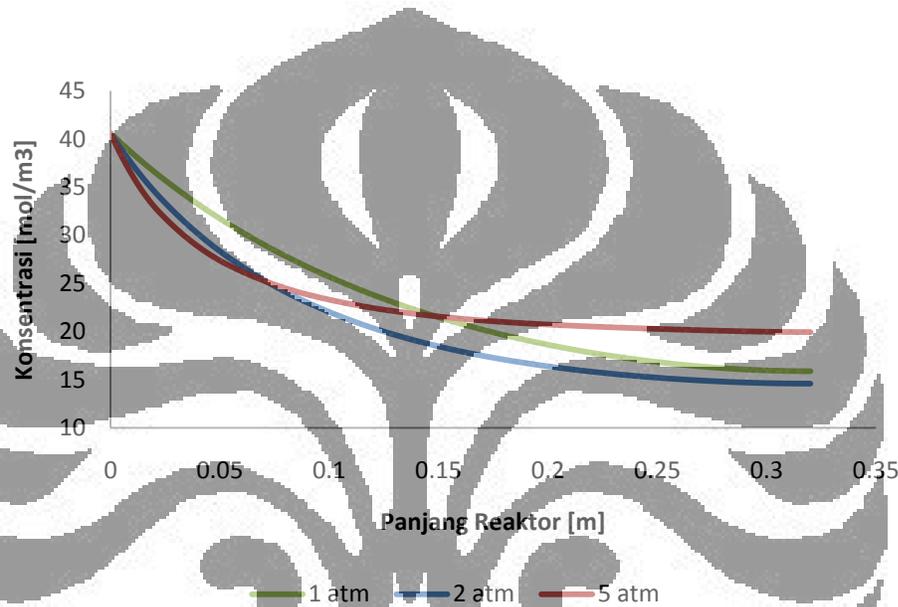


Gambar 5.34 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)

Kedua gambar ini menunjukkan perilaku yang sama seperti grafik penurunan konsentrasi metana dimana bagian tengah pelat (Gambar 5.33) dan lebih dekat dengan pelat (Gambar 5.34) memiliki konversi yang lebih tinggi.

5.2.1 Pengaruh Tekanan terhadap Konversi

Sama seperti model pertama, model kedua ini juga divariasikan dengan beberapa variabel-variabel seperti tekanan, laju alir dan komposisi masukan. Untuk mensimulasikan pengaruh tekanan awal terhadap kinerja reaktor, tekanan reaktor divariasikan dari 2 atm hingga 5 atm, laju alir volumetrik 42 liter per jam, umpan masuk metana murni dan temperatur rata-rata 973 K.

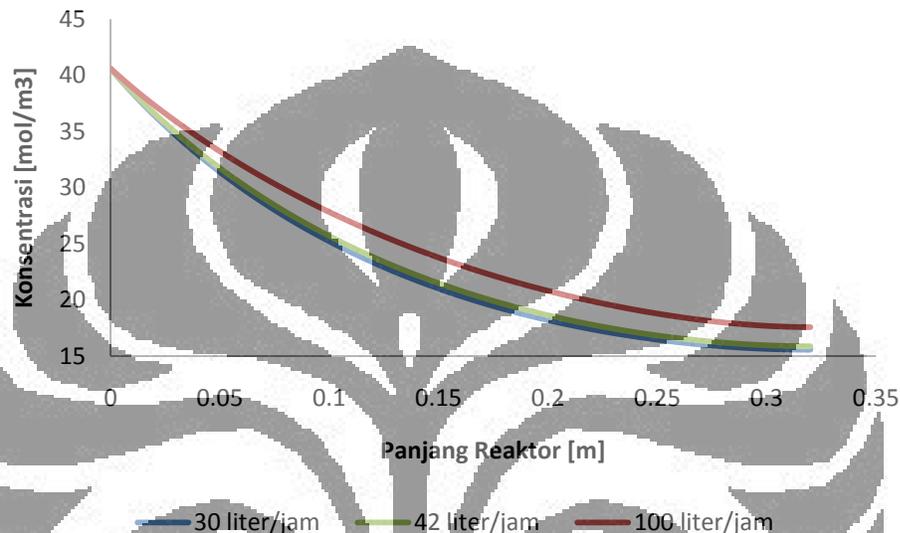


Gambar 5.35 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Tekanan Tertentu pada Model Kedua

Pada gambar ini terlihat bahwa tekanan standar memberikan konversi sebesar 60,89%, kenaikan tekanan hingga 2 atm memberikan konversi sebesar 64,09% dan kenaikan tekanan 5 atm memberikan konversi sebesar 50,91%. Jika dibandingkan dengan model pertama, pada model ini menunjukkan tekanan sebanyak 5 atm akan memberikan konversi yang lebih kecil dibandingkan 1 atm. Hal ini terjadi oleh karena konversi model kedua ini lebih besar (karena temperatur seragam) sehingga produktivitas hidrogen bertambah dan mengurangi laju reaksi dengan cepat.

5.2.2 Pengaruh Laju Alir terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh laju alir masukan awal terhadap kinerja reaktor, laju alir volumetrik divariasikan dari 30 liter/jam dan 100 liter/jam, pada tekanan 1 atm, temperatur masuk 800 K serta umpan masuk metana murni.

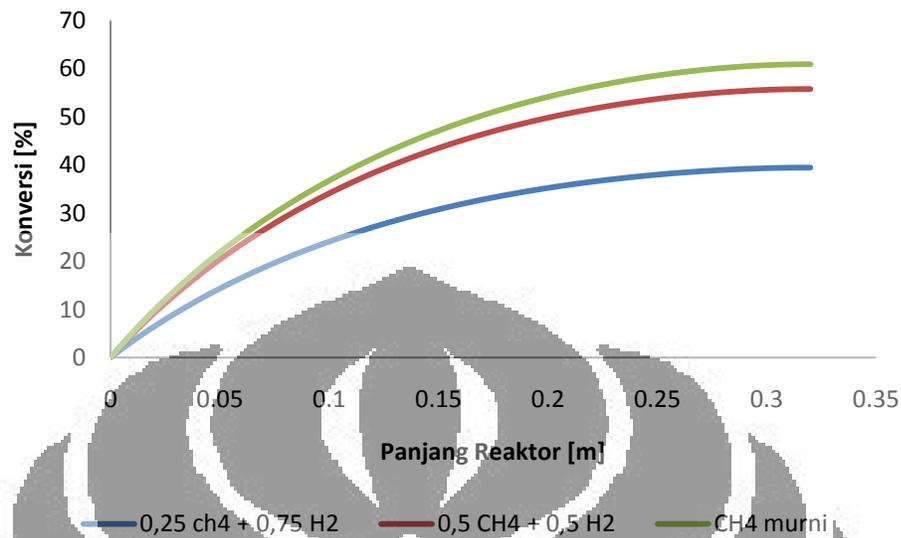


Gambar 5.36 Penurunan Konsentrasi Metana Berdasarkan Laju Alir Tertentu pada Model Kedua

Pada model kedua, Laju alir 30 liter akan menghasilkan konversi sebesar 61,68%, laju alir 42 liter akan menghasilkan konversi sebesar 60,9% dan 100 liter akan menghasilkan konversi sebesar 56,68%. Grafik ini menunjukkan hal yang sama seperti model pertama yaitu menurunnya konversi yang disebabkan akibat berkurangnya waktu kontak dalam reaktor.

5.2.3 Pengaruh Fraksi Mol Masukan terhadap Konversi

Untuk mensimulasikan pengaruh fraksi mol masukan awal terhadap kinerja reaktor, fraksi mol masukan divariasikan dari perbandingan metana-hidrogen 0,25 – 0,75; 0,5 – 0,5 dan umpan metana murni (standar), pada tekanan 1 atm, temperatur masuk 800 K, laju alir 42 liter per jam serta umpan masuk metana murni.



Gambar 5.37 Perubahan Konversi Berdasarkan Fraksi Mol Pada Model Pertama

Pada model kedua, komposisi metana:hidrogen 0,25:0,75 akan menghasilkan konversi sebesar 39,46%, komposisi metana:hidrogen 0,5:0,5 akan menghasilkan konversi sebesar 55,75% dan umpan metana murni (standar) akan menghasilkan konversi sebesar 60,89 %. Variasi ini juga menunjukkan hal yang sama seperti model pertama yaitu adanya pengurangan konversi akibat adanya produk dalam masukan.

BAB VI

KESIMPULAN

6.1 Kesimpulan

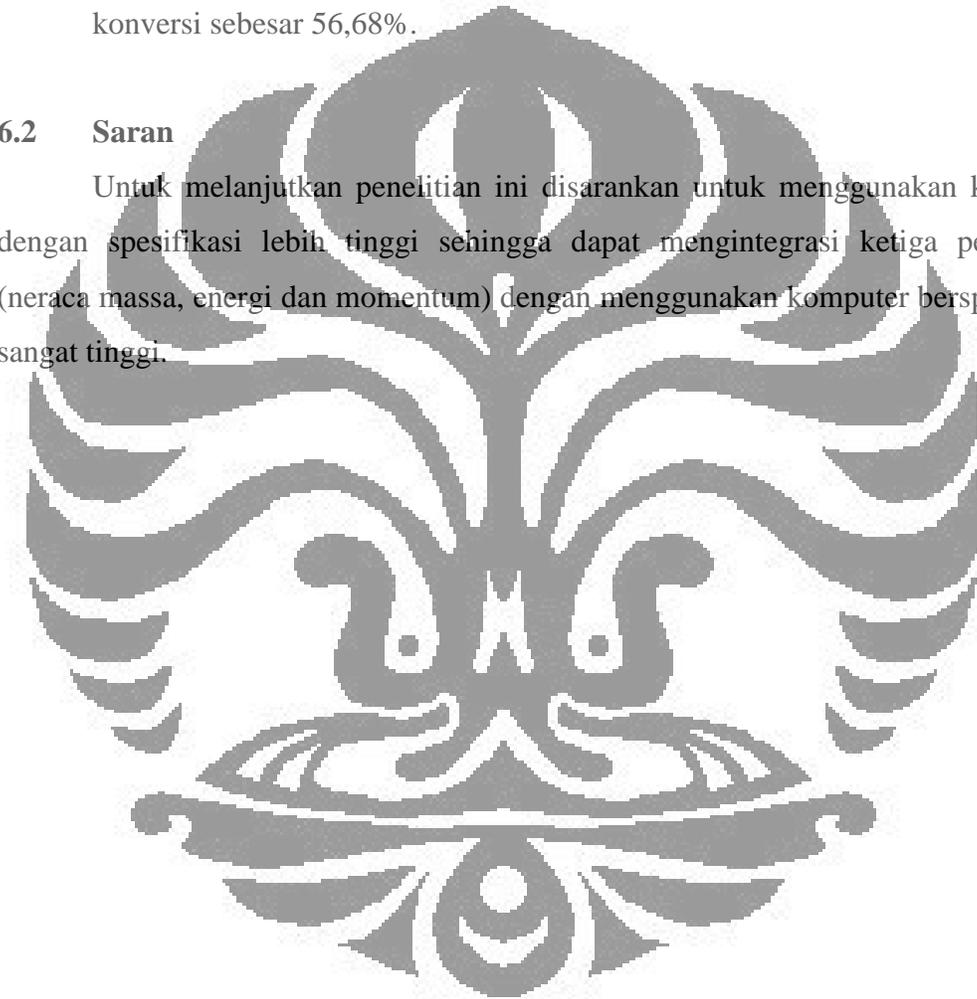
Setelah melakukan penelitian ini, peneliti menyimpulkan beberapa hal, yaitu

1. Konversi dengan variabel-variabel awal model pertama adalah 34,05% sedangkan model kedua adalah 60,89 %.
2. Semakin tinggi tekanan total akan memperbesar konversi pada awal reaktor, tetapi seiring bertambahnya hidrogen, laju reaksi akan berkurang. Pada model pertama, kenaikan tekanan menjadi 2 atm akan meningkatkan konversi menjadi 40,72%, sedangkan kenaikan tekanan menjadi 5 atm hanya akan menaikkan konversi menjadi 35,96%. Pada model kedua, kenaikan tekanan hingga 2 atm memberikan konversi sebesar 64,09% dan kenaikan tekanan 5 atm memberikan konversi sebesar 50,91%.
3. Semakin tinggi temperatur dinding membuat konversi semakin besar karena dekomposisi katalitik metana merupakan reaksi endotermis. Pada model pertama, ketika temperatur dinding diturunkan menjadi 923 K akan menurunkan konversi menjadi 25,5%, sedangkan ketika temperatur dinding dinaikkan menjadi 1023 K akan meningkatkan konversi menjadi 42,97%.
4. Adanya hidrogen pada umpan akan mengganggu konversi metana yang diakibatkan hidrogen adalah gas inert dimana keberadaannya akan menghambat metana untuk bereaksi dengan inti katalis. Pada model pertama, dengan adanya hidrogen dengan komposisi metana:hidrogen 0,25:0,75 akan menghasilkan konversi sebesar 21,60%, sedangkan dengan komposisi komposisi metana:hidrogen 0,5:0,5 akan menghasilkan konversi sebesar 32,85%. Pada model kedua, komposisi metana:hidrogen 0,25:0,75 akan menghasilkan konversi sebesar 39,46%, komposisi metana:hidrogen 0,5:0,5 akan menghasilkan konversi sebesar 55,75%.

5. Semakin tinggi laju alir volumetrik akan menurunkan konversi akibat berkurangnya waktu kontak dengan inti katalis. Pada model pertama, dengan menurunkan laju alir menjadi 30 liter akan menghasilkan konversi sebesar 36,02%, sedangkan dengan menaikkan laju alir menjadi 100 liter akan menghasilkan konversi sebesar 26,39 %. Pada model kedua, laju alir 30 liter akan menghasilkan konversi sebesar 61,68% dan 100 liter akan menghasilkan konversi sebesar 56,68%.

6.2 Saran

Untuk melanjutkan penelitian ini disarankan untuk menggunakan komputer dengan spesifikasi lebih tinggi sehingga dapat mengintegrasikan ketiga persamaan (neraca massa, energi dan momentum) dengan menggunakan komputer berspesifikasi sangat tinggi.

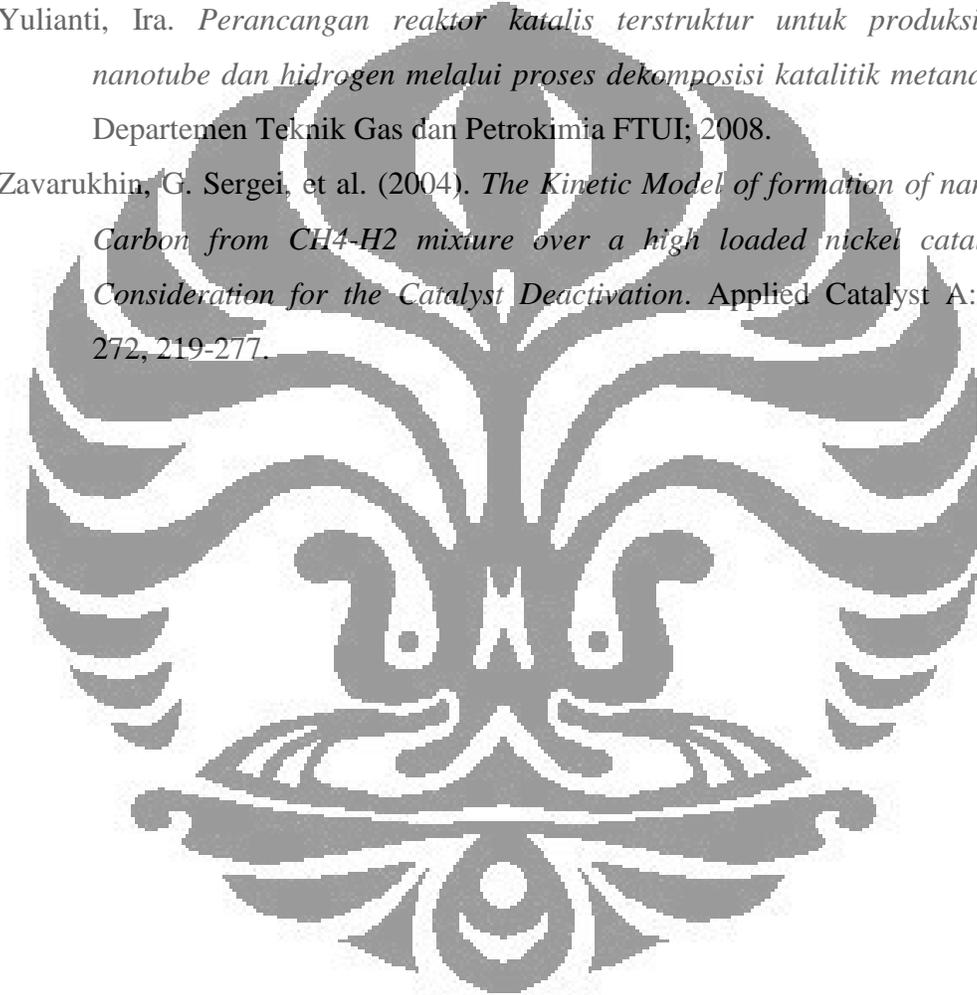


DAFTAR PUSTAKA

- Adiwardhana, Anindya. 2009. *Pemodelan dan simulasi reaktor berkatalis pelat sejajar untuk dekomposisi katalitik metana menjadi karbon nanotube*. Seminar. Depok: Universitas Indonesia.
- Mass Balance. Juni, 15 2009. http://en.wikipedia.org/Mass_balance.
- The Effect of Pressure on Reaction Rates. Juni, 6 2010. <http://www.chemguide.co.uk/physical/basicrates/pressure.html>.
- Beers, Annemarie E. W., et al. 2003. *BEA Coating of Structured Supports – Performance in Acylation*. Applied Catalysis A: General, vol. 243.
- Bird, R. Byron., et al. 1994. *Transport Phenomena*. Singapore: John Wiley & sons
- Burnett, David S. 1987. *Finite Element Analysis*, New Jersey: Addison-Wesley Publishing Company
- Coker, Kayode. 2001. *Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design*. Texas: Gulf Publishing Company
- Coulson. 2005. *Chemical Engineering Design volume 6*. Elsevier Butterworth-Heinemann
- Daenan M, de Fouw RD, Hamers B, Janssen PGA, Schouteden K, Veld MAJ. *Wondrous World of Carbon Nanotubes*. Eindhoven University of Technology; 2003
- Fogler, H.Scott. *Elements of Chemical Reaction Engineering fourth edition*. United States: Pearson Education International.
- Grujicic M, Cao G, Gersten B. *An atomic-scale analysis of catalytically assisted chemical vapor deposition of carbon nanotubes*. Materials Science and Engineering 2002; B94:247-259.
- Heiszwolf, Johan. *Introduction to Monoliths*. Mei, 15 2010. <http://www.dct.tudelft.nl/monoliet/Intro/introduction.html>.
- Iskandar, Refani. *Rancang Bangun Reaktor Katalis Terstruktur Pelat melalui Reaksi Dekomposisi Metana untuk Produksi Nanokarbon*. Skripsi. 2009

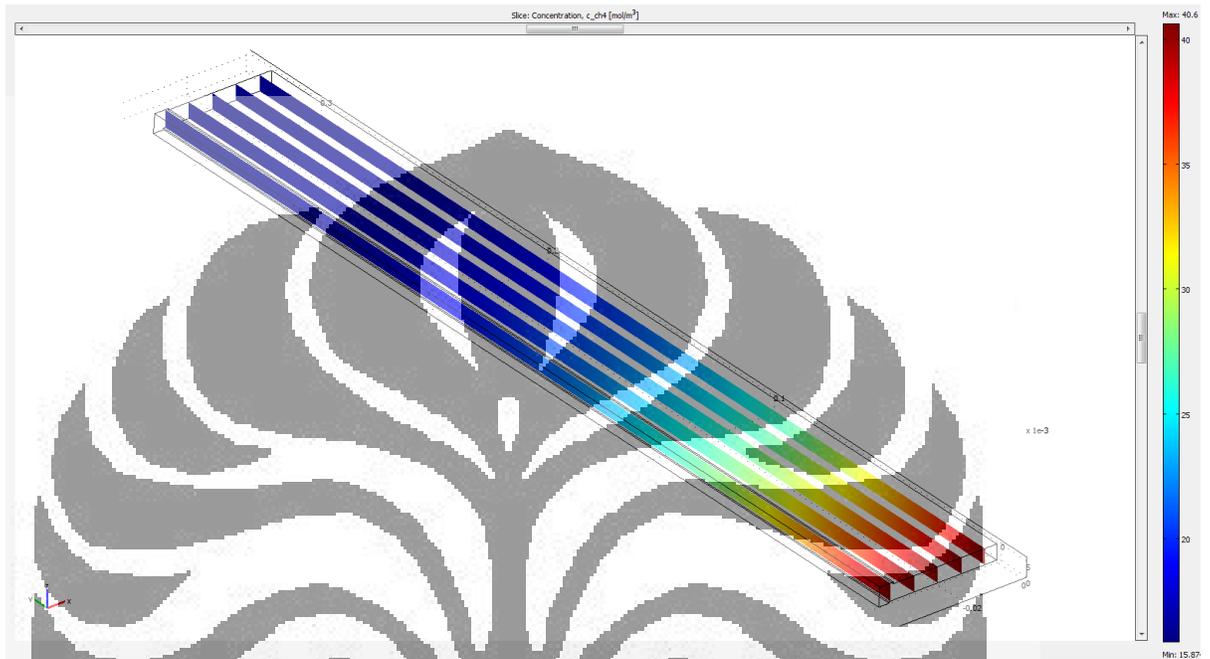
- Laminar Boundary Layer. Juni, 23, 2010. http://nptel.iitm.ac.in/courses/Webcourse-contents/IIT-KANPUR/FLUID-MECHANICS/lecture-31/31-1_entry_flow.htm.
- L. X. Zheng et al. (2004). *Ultralong Single-Wall Carbon Nanotubes*. **3**. pp. 673–676. [doi:10.1038/nmat1216](https://doi.org/10.1038/nmat1216).
- Morançais A, Causat B, Kihn Y, Kalck P, Plee D, Gaillard P, Bernard D et al. (2007). *A Parametric Study of The Large Scale Production of Multi-Walled Carbon Nanotubes by a Fluidized Bed Catalytic Chemical Vapour Deposition*. *Carbon*, 45, 624-635.
- Muharam Y., Purwanto W.W., Afianty A. (2007). *Uji kinerja reaktor katalitik terstruktur untuk reaksi dekomposisi katalitik metana*. Laporan Riset Departemen Teknik Kimia UI
- Muradov, N. (2001). *Catalysis of Methane Decomposition over Elemental Carbon*. *Catalysis Communication*, 2, 89 – 94.
- Prasetyo, Herry. 2009. *Pemodelan dan simulasi reaktor gauze untuk produksi karbon nanotube melalui proses dekomposisi katalitik metana*. Seminar. Depok: Universitas Indonesia.
- Purwanto W.W., M. Nasikin, E. Saputra, L. Song (2005). *Decomposition of Methane to Produce NanoCarbon and Hydrogen with Ni-Cu-Al-Si as the Catalyst*, *Prosiding Seminar Nasional Rekayasa Kimia dan Proses*, UNDIP Semarang.
- Resketenko, T.V., dkk. 2003. *Carbon capacious Ni-Cu-Al₂O₃ catalyst for high temperature methane decomposition*. *Applied Catalyst A: General*, 247, 51-63.
- S.G. Zavarukhin and G.G. Kuvshinov, *J. Appl. Catal. A*, vol. 272, p. 219, 2004.
- S.B. Sinnott, dkk, *Chem. Phys. Lett.* 315 (1999) 25
- Simons, Robert. *Estimating Parallel Plate-fin Heat Sink Pressure Drop*. Juni, 1 2010. <http://www.electronics-cooling.com/2003/05/estimating-parallel-plate-fin-heat-sink-pressure-drop/>.
- Snoeck, et al. 1996. *Kinetic Study of the Carbon Filament Formation by Methane Cracking on a Nickel Catalyst*. England

- Song L. *Pengaruh keasaman katalis berbasis Ni-Cu terhadap kinerja reaksi dekomposisi katalitik metana menjadi hydrogen dan nanokarbon*. Skripsi. Departemen Teknik Gas dan Petrokimia FTUI; 2005.
- Weizhong, Qian, et al. (2004). Production of Hydrogen and Carbon Nanotubes from Methane *Decomposition in a Two-Stage Fluidized Bed Reactor*. *Applied Catalysis*, 260, 223-228.
- Yulianti, Ira. *Perancangan reaktor katalis terstruktur untuk produksi karbon nanotube dan hidrogen melalui proses dekomposisi katalitik metana*. Skripsi Departemen Teknik Gas dan Petrokimia FTUI; 2008.
- Zavarukhin, G. Sergei, et al. (2004). *The Kinetic Model of formation of nanofibrous Carbon from CH₄-H₂ mixture over a high loaded nickel catalyst with Consideration for the Catalyst Deactivation*. *Applied Catalyst A: General* 272, 219-277.



LAMPIRAN A

A.1 Hasil Plot Penampang Pertama Model Kedua

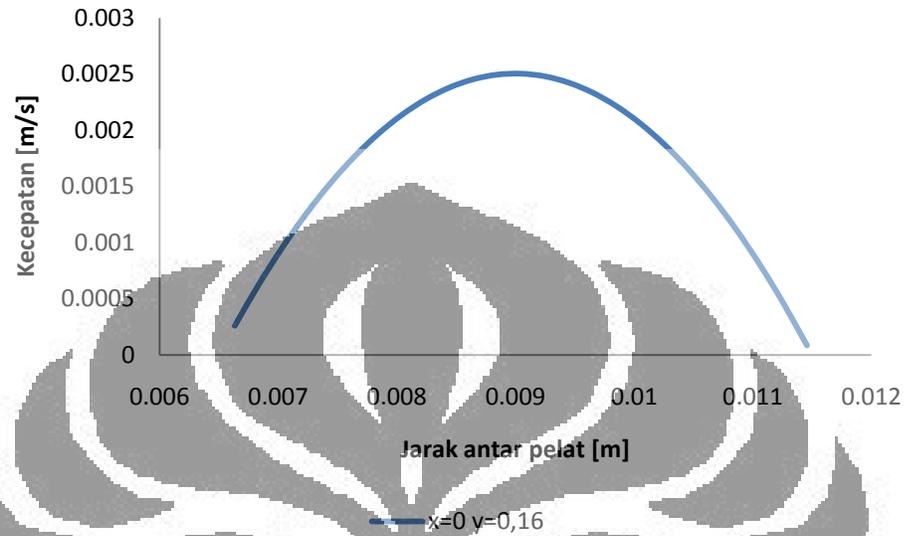


Gambar A.1 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi CH_4 Model Kedua Penampang Pertama

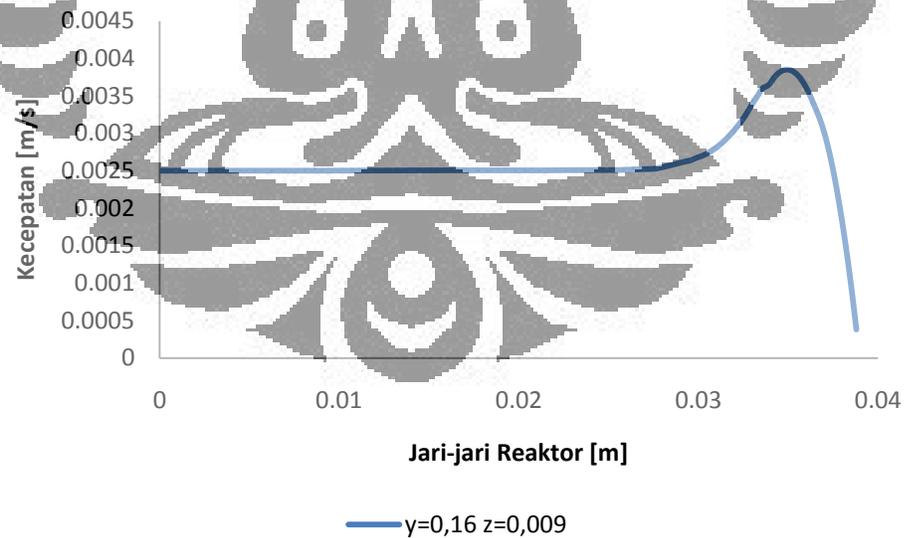


Gambar A.2 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi H_2 Model Kedua Penampang Pertama

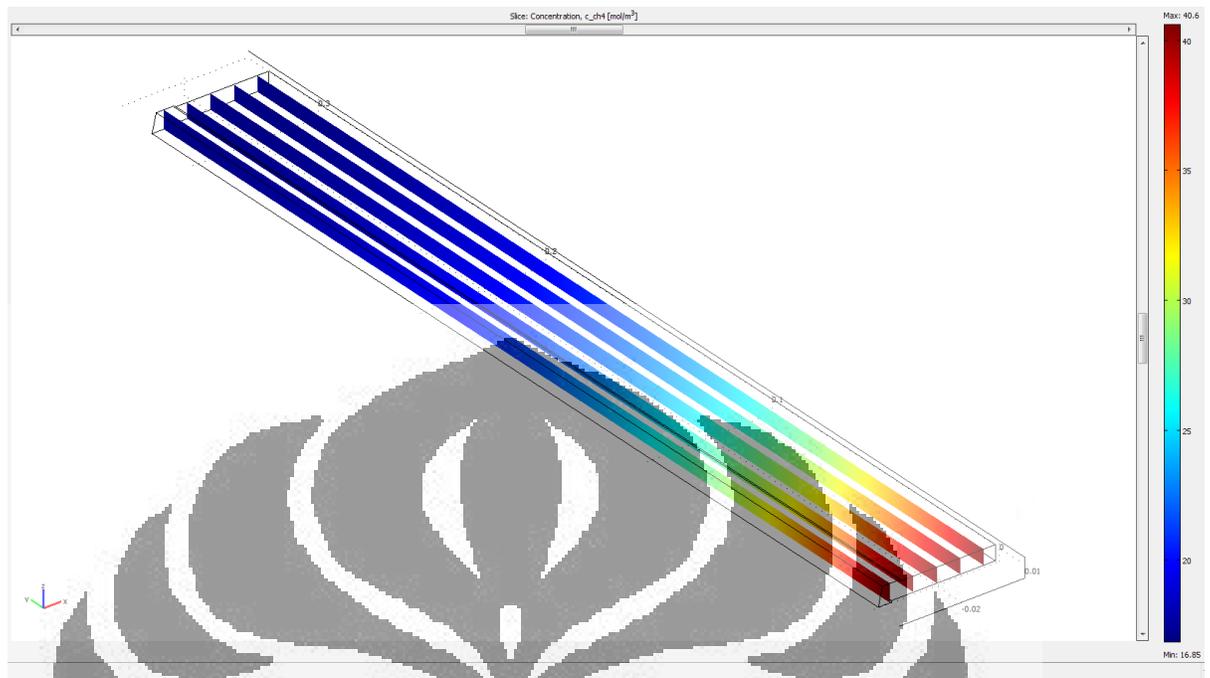
A.2 Hasil Plot Penampang Kedua Model Kedua



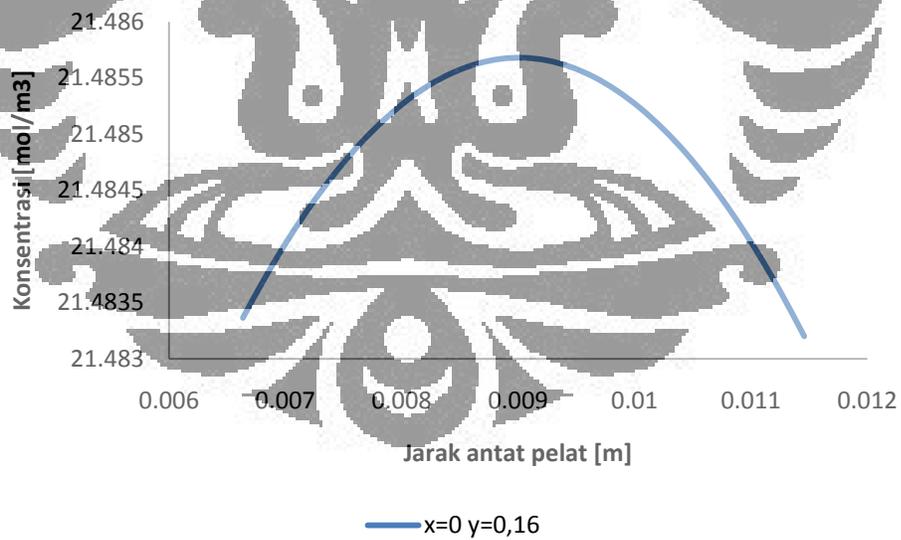
Gambar A.3 Perubahan Kecepatan Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)



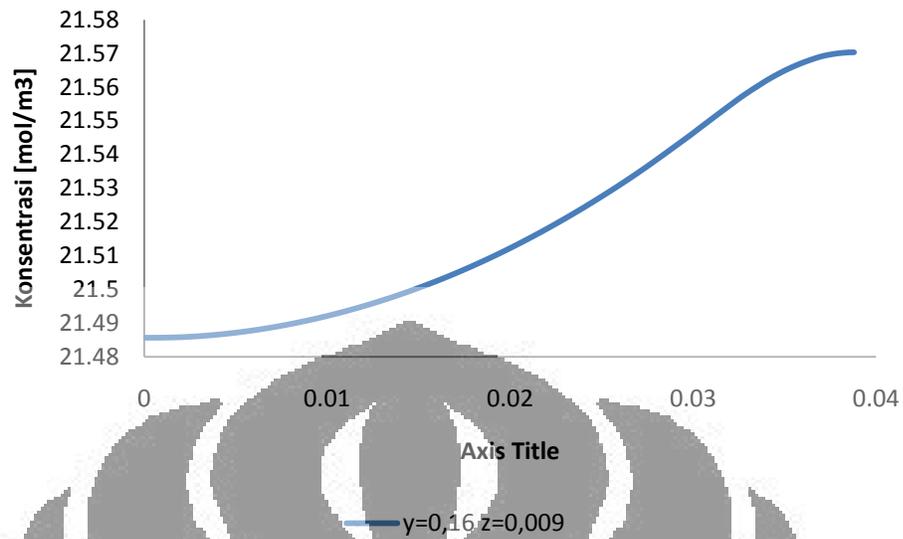
Gambar A.4 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)



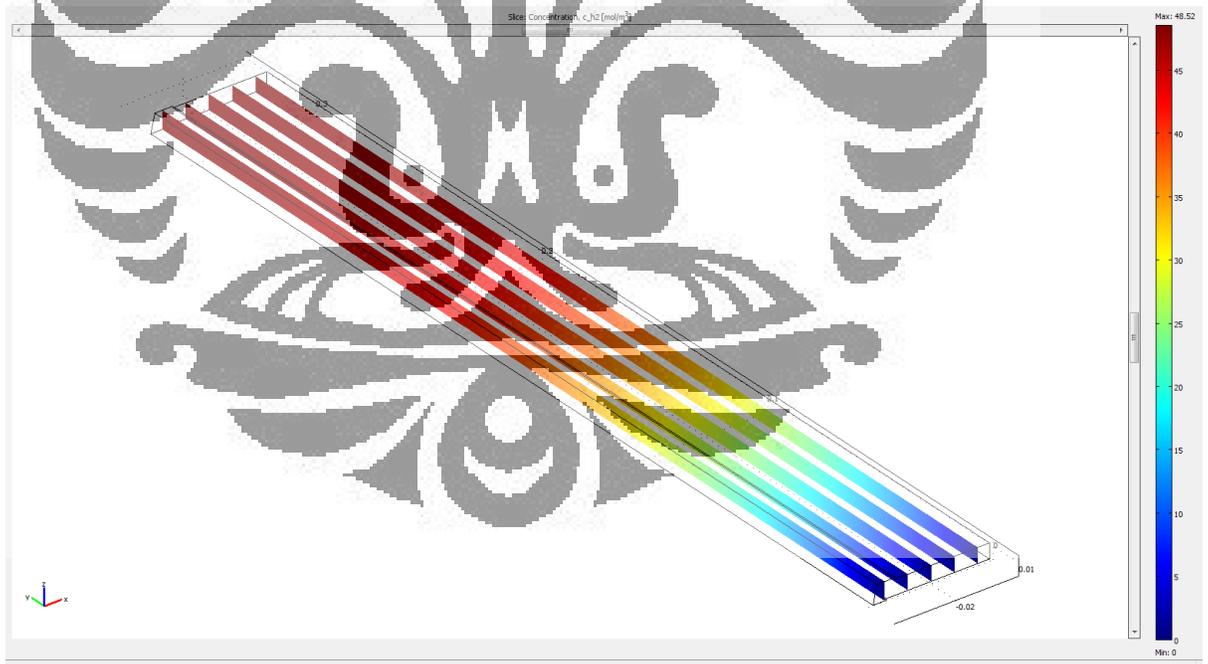
Gambar A.5 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi CH_4 Model Kedua Penampang Kedua



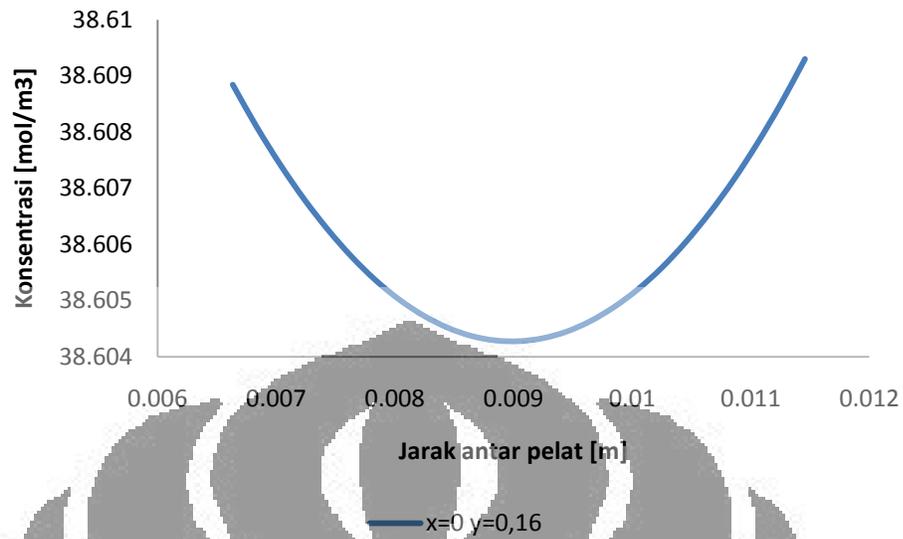
Gambar A.6 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)



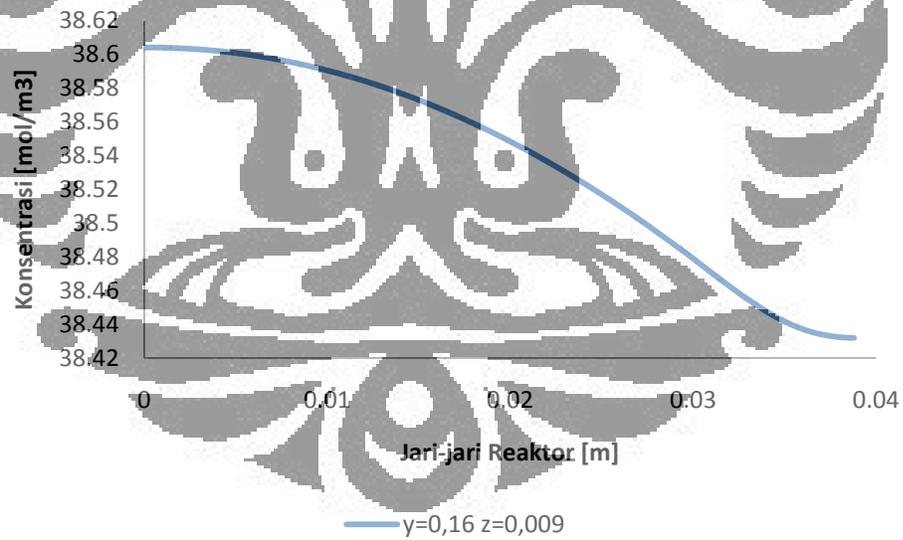
Gambar A.7 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)



Gambar A.8 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi H_2 Model Kedua Penampang Kedua

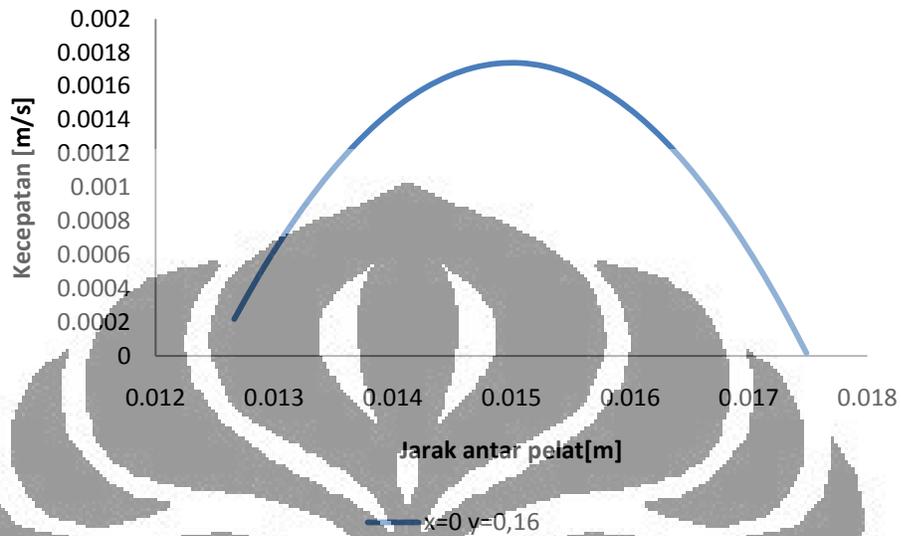


Gambar A.9 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)

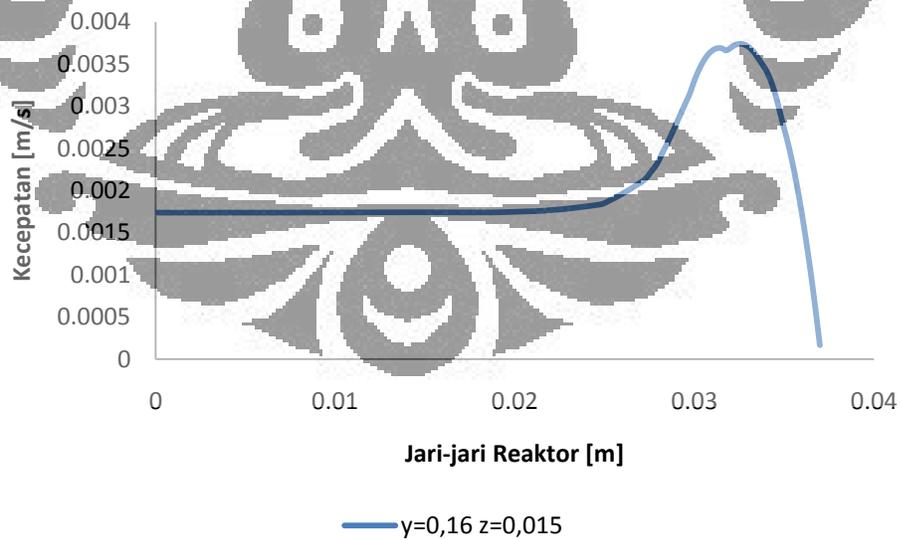


Gambar A.10 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

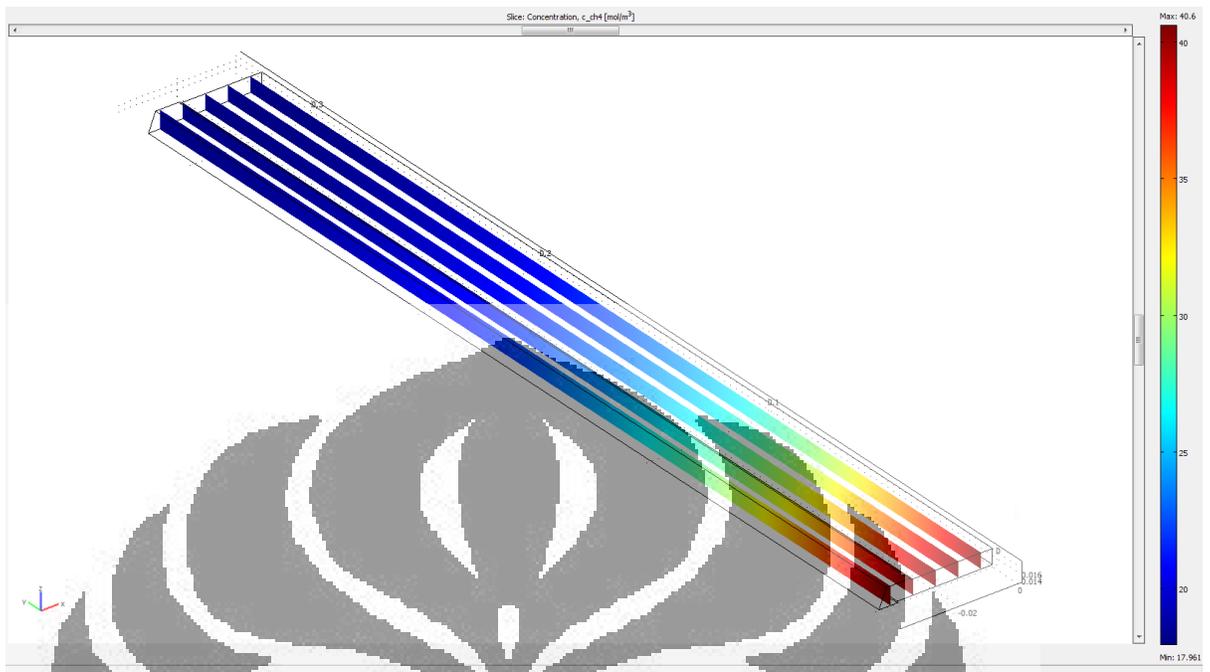
A.3 Hasil Plot Penampang Ketiga Model Kedua



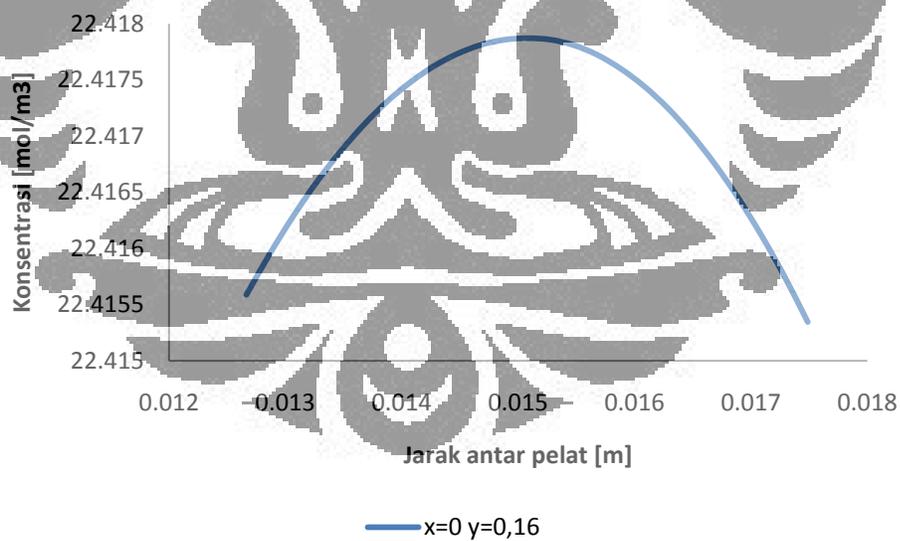
Gambar A.11 Perubahan Kecepatan Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)



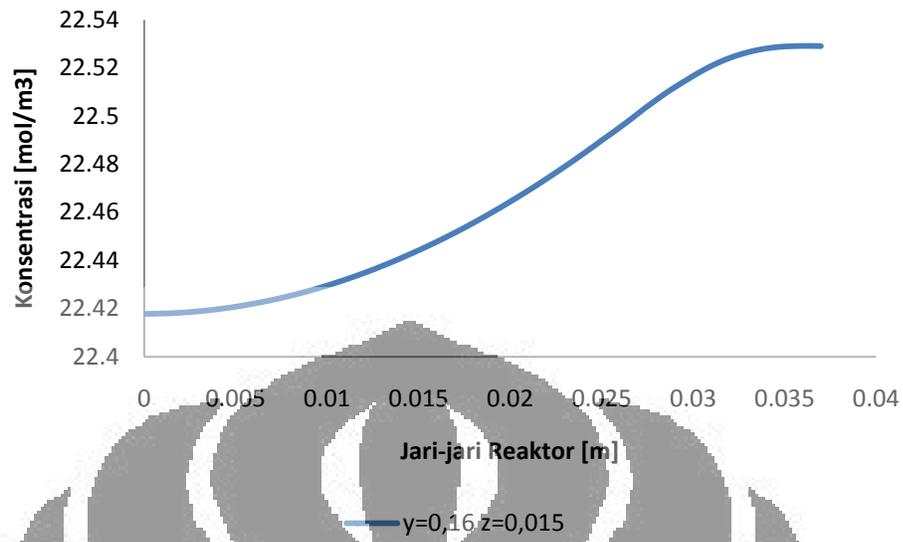
Gambar A.12 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)



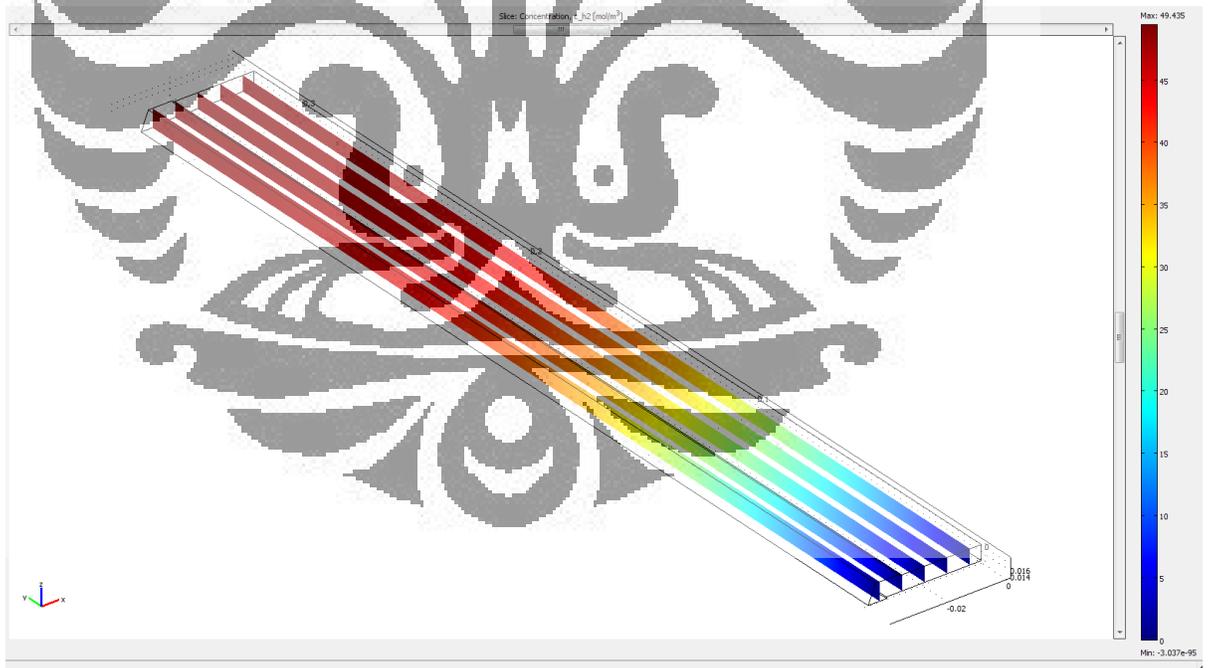
Gambar A.13 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi CH_4 Model Kedua Penampang Ketiga



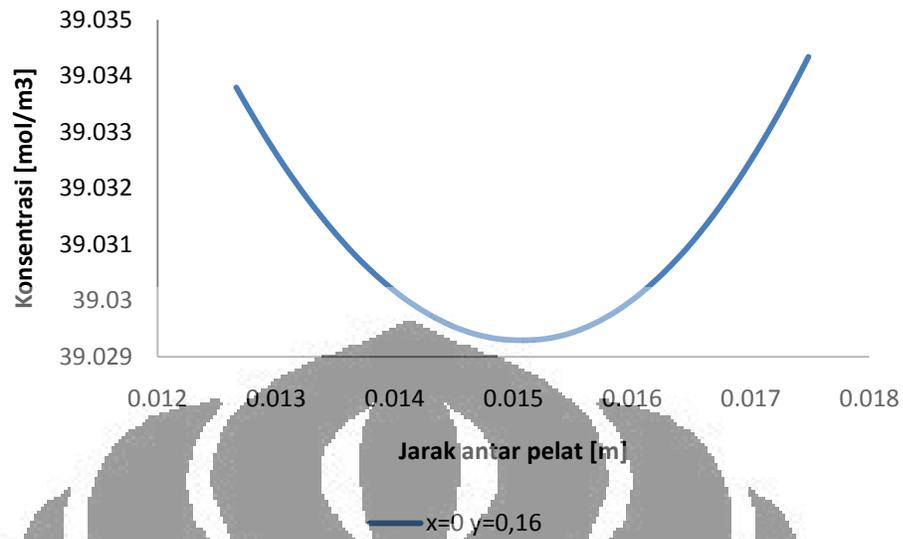
Gambar A.14 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)



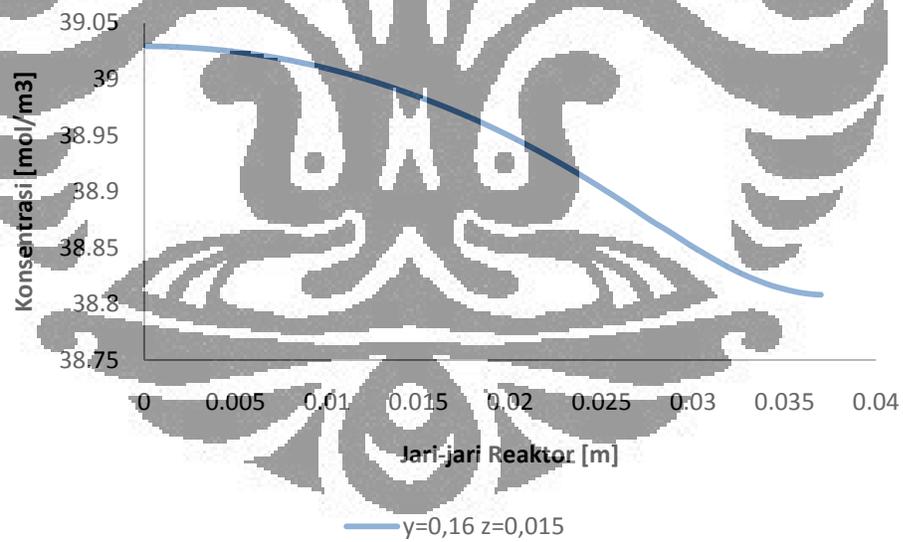
Gambar A.15 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)



Gambar A.16 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi H_2 Model Kedua Penampang Ketiga

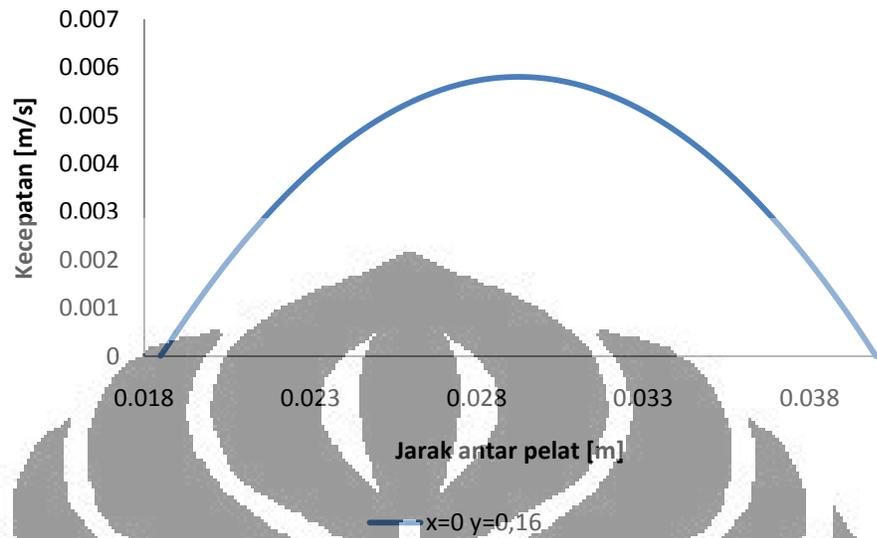


Gambar A.17 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)

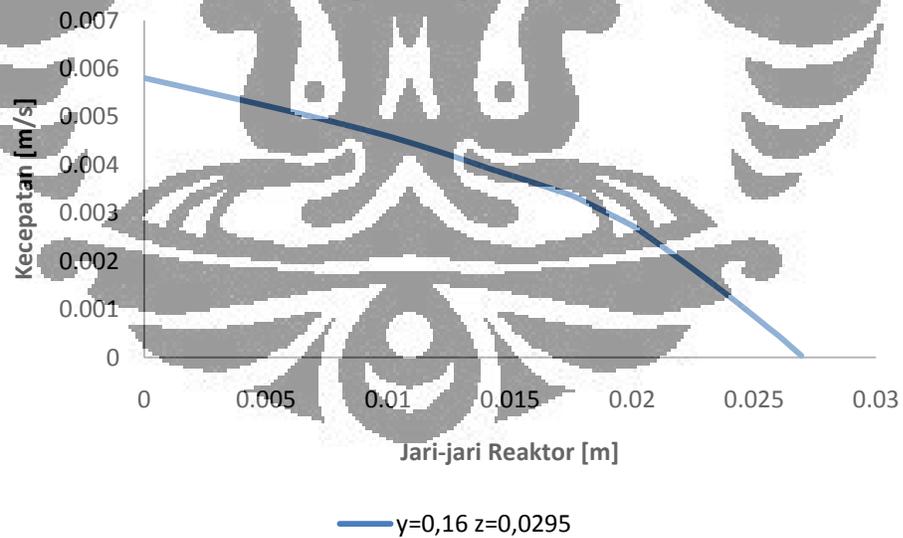


Gambar A.18 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

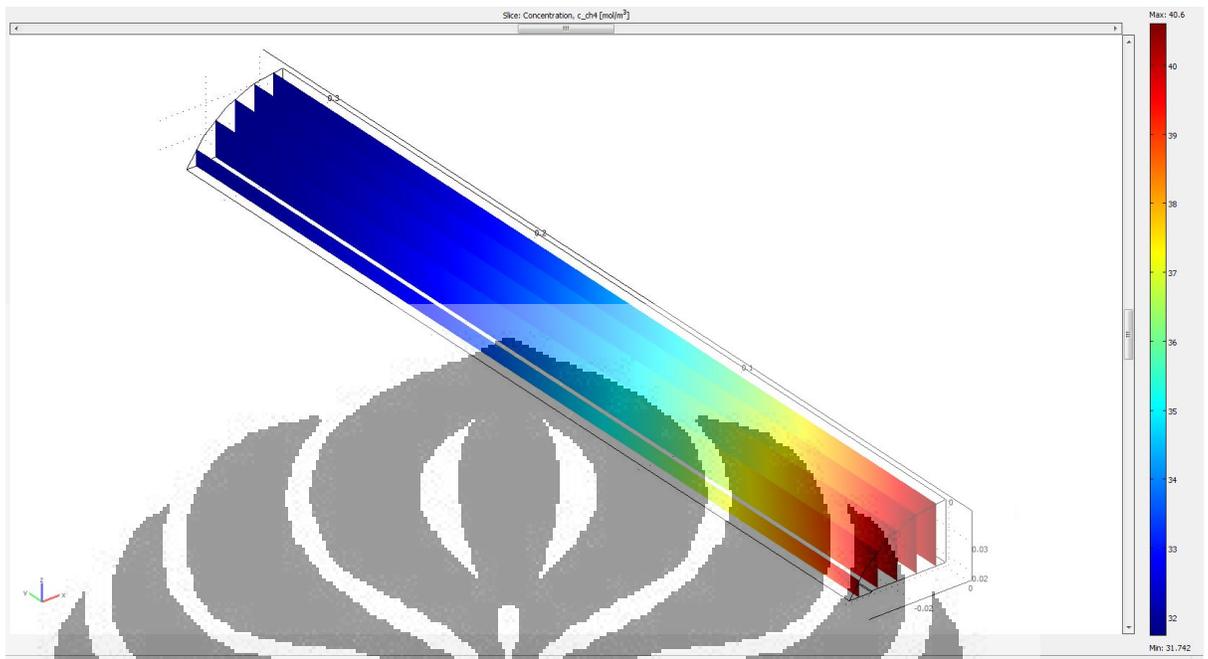
A.4 Hasil Plot Penampang Kempat Model Kedua



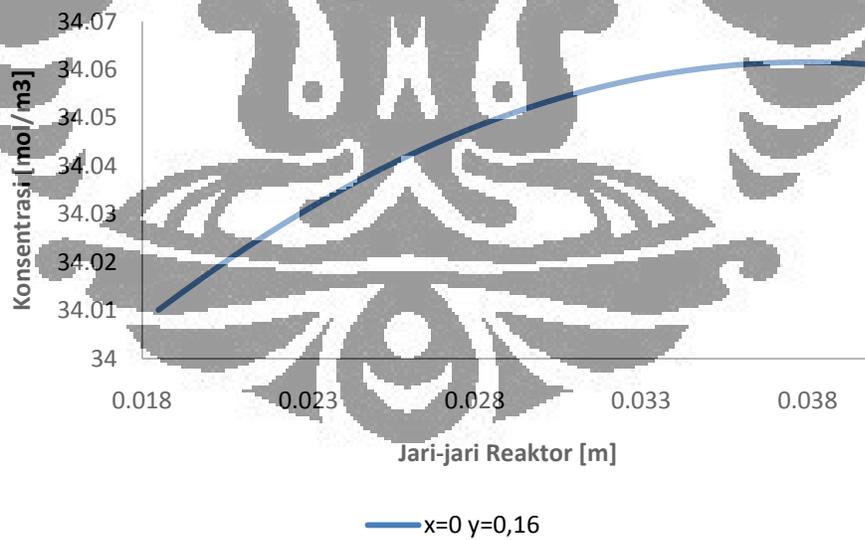
Gambar A.19 Perubahan Kecepatan Terhadap Jarak Antar Pelat ($z=0$ hingga $z=0,04$)



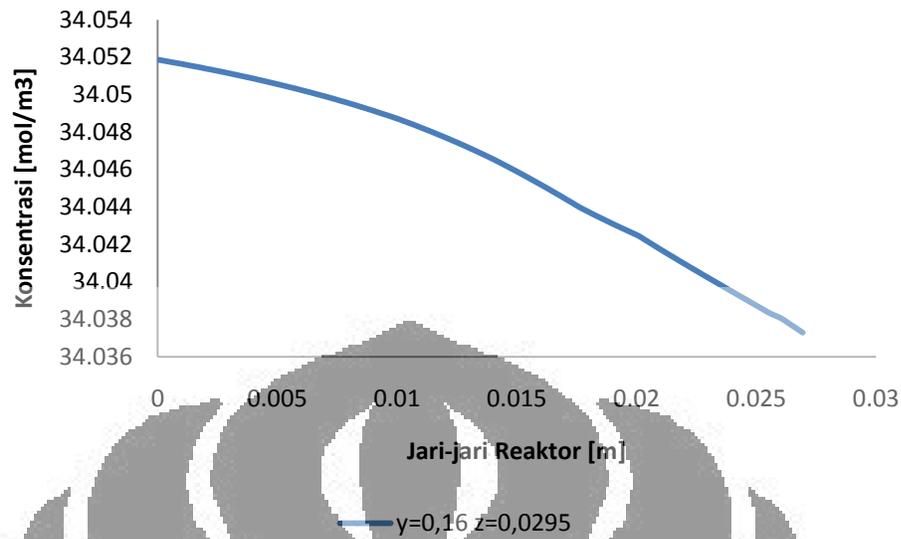
Gambar A.20 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)



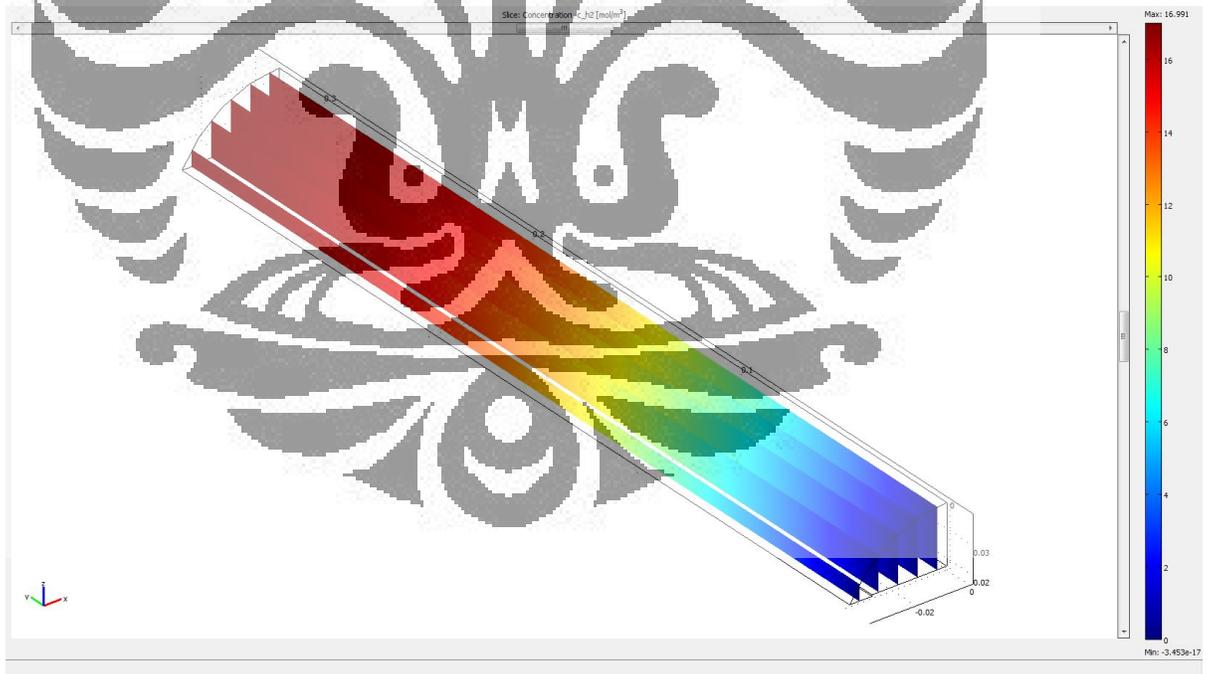
Gambar A.21 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi CH_4 Model Kedua Penampang Keempat



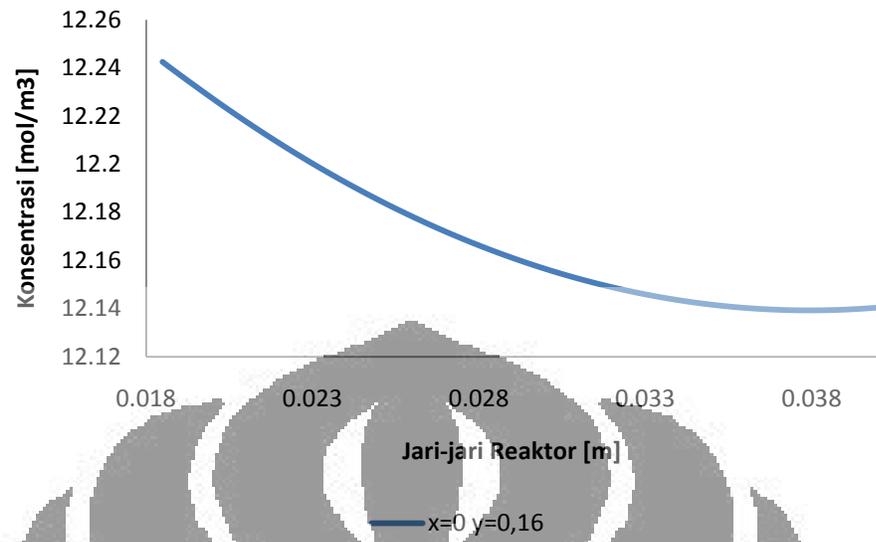
Gambar A.22 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)



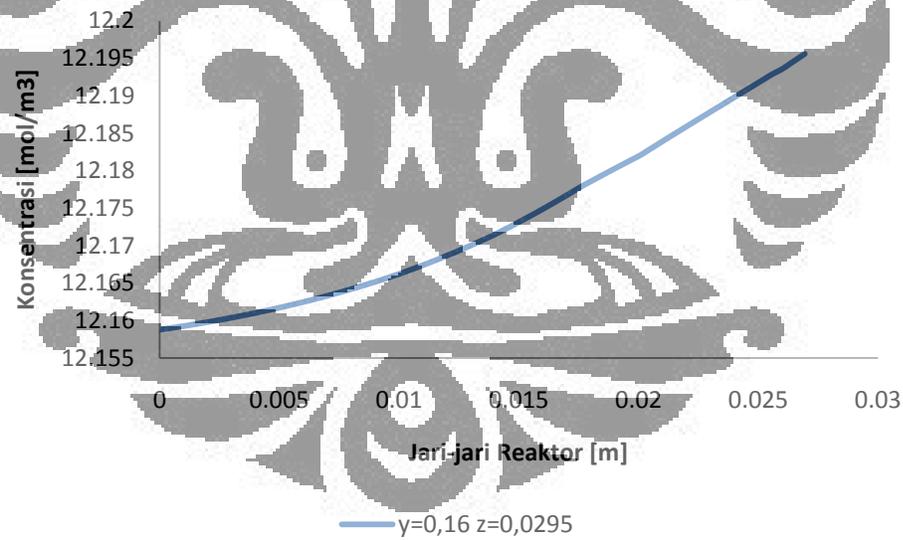
Gambar A.23 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)



Gambar A.24 Keluaran COMSOL Dalam Konsentrasi H_2 Model Kedua Penampang Keempat



Gambar A.25 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($z=0$ hingga $z=0,04$)

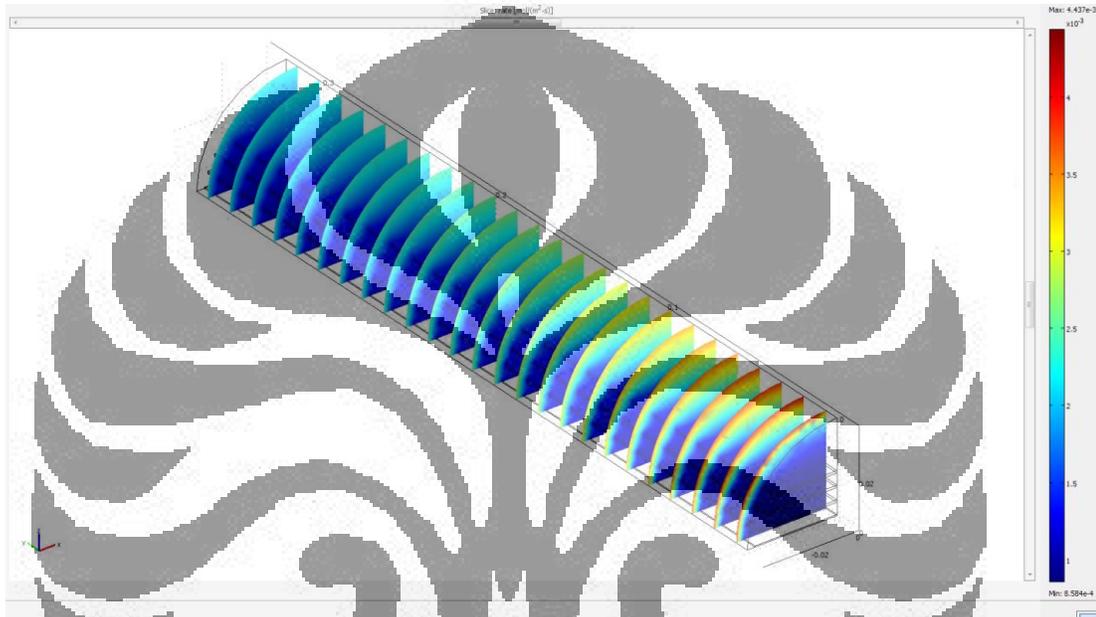


Gambar A.26 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor ($x=0$ hingga $x=0,04$)

LAMPIRAN B

Validitas asumsi pelat tidak bertambah tebal

Laju reaksi dapat dilihat dari Gambar B.1



Gambar B.1 Laju Reaksi Model Pertama

Dari Gambar B.1 terlihat bahwa pada permukaan katalis, laju reaksinya adalah $8,36 \cdot 10^{-4} \text{ mol}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$. untuk mencari berat dari mol, dikalikan dengan berat molekul sehingga menjadi:

$$8,36 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \cdot 12 \frac{\text{gram}}{\text{mol}} = 100,32 \frac{\text{gram}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$$

Sedangkan untuk mencari tebal, berat per luas detik ini akan dibagi dengan densitas dari CNT. Sehingga pertumbuhan tebal dari CNT adalah:

$$\begin{aligned} &= \frac{100,32 \frac{\text{gram}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}}{2,1 \frac{\text{gram}}{\text{cm}^3}} \\ &= 4,777 \frac{\text{nm}}{\text{s}} \end{aligned}$$