

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK  
REAKSI HIDROGENASI KARBON DIOKSIDA MENJADI DIMETIL  
ETER**

**SKRIPSI**

**ISMAIL  
0706269893**



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

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK  
REAKSI HIDROGENASI KARBON DIOKSIDA MENJADI DIMETIL  
ETER**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana**

**ISMAIL  
0706269893**



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

## HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

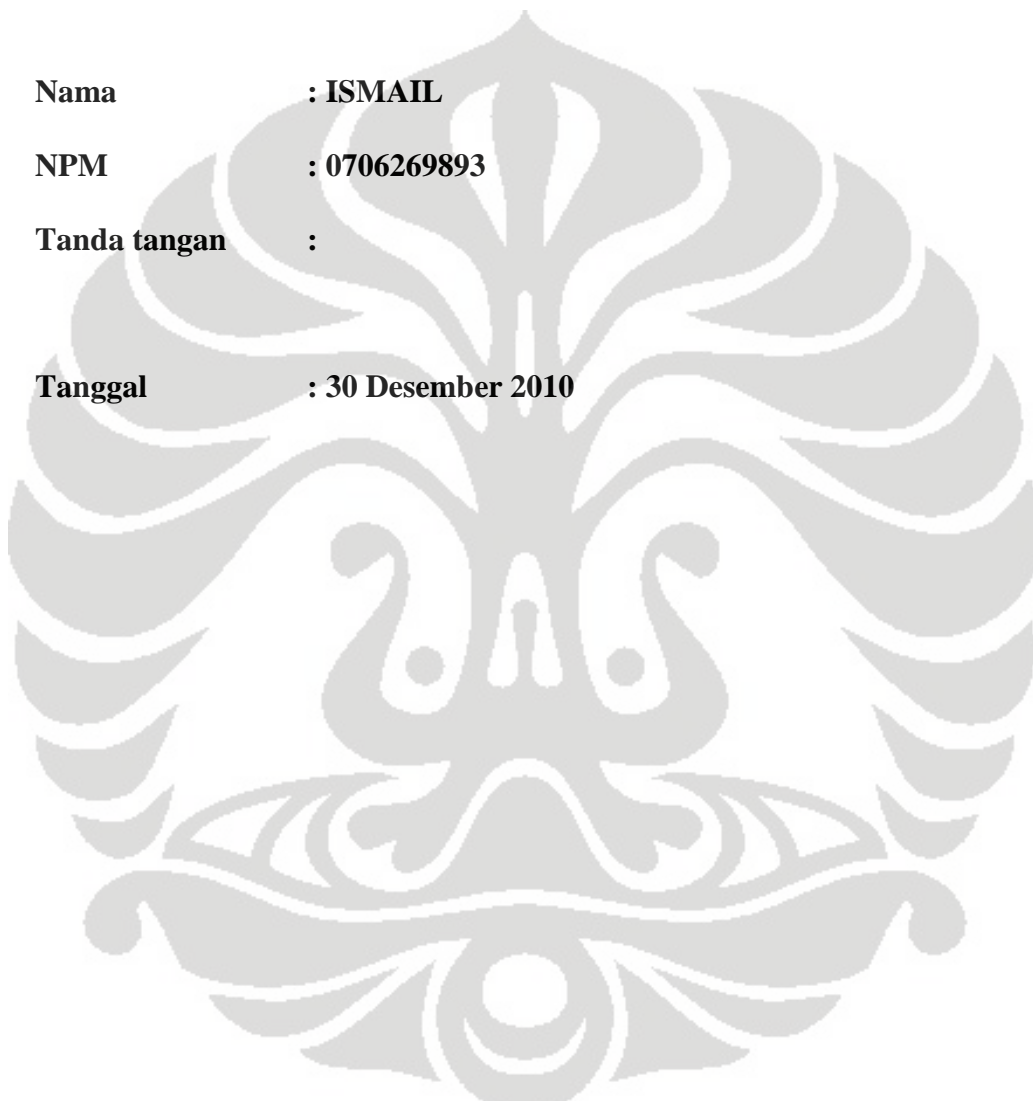
**Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.**

**Nama : ISMAIL**

**NPM : 0706269893**

**Tanda tangan :**

**Tanggal : 30 Desember 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 Reaktor Unggun Tetap Untuk Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter”** 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. Dr. rer. nat Yuswan Muharam, MT selaku pembimbing skripsi
3. Prof. Dr. Ir. Widodo Wahyu Purwanto, DEA selaku ketua Departemen Teknik Kimia FTUI
4. Seluruh keluarga atas segala perhatiannya selama ini.
5. Teman-teman Teknik Kimia UI angkatan 2007 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, 30 Desember 2010

Penulis

## DAFTAR PUSTAKA

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 .....	2
1.3 Tujuan Penelitian .....	2
1.4 Batasan Masalah .....	2
1.5 Sistematika Penulisan .....	3
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA .....	4
2.1 Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter .....	4
2.1.1 Sistem Produksi Dimetil Eter .....	4
2.1.2 Persamaan Stoikiometri dan Termodinamika .....	5
2.1.3 Selektivitas Reaksi .....	6
2.1.4 Katalis Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter .....	6
2.1.5 Kinetika Reaksi .....	7
2.2 Reaksi Katalitik .....	8
2.3 Reaktor Katalitik Unggun Tetap .....	10
2.4 Pemodelan Dan Simulasi .....	12
2.4.1 Pemodelan Dan Simulasi Reaktor Unggun Tetap .....	12
2.4.2 Pemodelan Dengan Teknologi Computational Fluid Dynamics .....	16
.....2.4.2.1 Teknologi Computational Fluid Dynamics (CFD) .....	16
.....2.4.2.2 Metode Elemen Hingga .....	17
.....2.4.2.3 Pemodelan Dengan Comsol .....	19
BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN .....	21
3.1 Diagram Penelitian .....	21
3.2 Prosedur Penelitian .....	22
BAB 4 PEMODELAN REAKTOR UNGGUN TETAP .....	25
4.1 Penyusunan Model Matematis .....	25
4.1.1 Skala Reaktor .....	26
4.1.1.1 Neraca Massa Skala Reaktor .....	26
4.1.1.2 Neraca Energi Skala Reaktor .....	32
4.1.1.3 Neraca Momentum .....	35
4.1.2 Lapisan Film .....	36
4.1.2.1 Neraca Massa .....	36

(CFD)

4.1.2.2 Neraca Energi.....	37
4.1.3 Skala Partikel Katalis.....	37
4.1.3.1 Neraca Massa Skala Partikel Katalis .....	37
4.1.3.2 Neraca Energi Skala Partikel Katalis.....	38
4.2 Pemodelan di COMSOL Multiphysics .....	41
4.2.1 Inialisasi Comsol .....	41
4.2.2 Pemodelan Geometri.....	42
4.2.3 Pemodelan Persamaan dan Parameter .....	43
4.2.4 Pemodelan Fenomena Reaktor Unggun Tetap .....	45
4.2.5 Kalkulasi Solusi Persamaan.....	50
4.2.6 <i>Post-Processing</i> .....	42
<b>BAB 5 SIMULASI DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>52</b>
5.1 Profil Suhu Dan Konsentrasi Berbagai Spesi .....	52
5.1.1 Profil Spesi Karbon Dioksida .....	54
5.1.2 Profil Spesi Hidrogen .....	56
5.1.3 Profil Spesi Dimetil Eter .....	57
5.1.4 Profil Spesi Metanol .....	59
5.1.5 Profil Spesi Karbon Monoksida .....	61
5.1.6 Profil Spesi Uap Air .....	62
5.1.7 Profil Suhu .....	64
5.2 Variasi Kondisi Operasi Reaktor .....	65
5.1.1 Pengaruh Tekanan Umpan .....	65
5.1.2 Pengaruh Laju Alir Umpan.....	67
5.1.3 Pengaruh Suhu Umpan .....	69
5.1.4 Pengaruh Komposisi Umpan .....	70
5.1.5 Pengaruh Panjang Reaktor .....	71
5.1.6 Pengaruh Radius Katalis .....	72
<b>BAB 6 KESIMPULAN.....</b>	<b>74</b>
6.1 Kesimpulan.....	74
6.2 Saran.....	74
<b>DAFTAR PUSTAKA.....</b>	<b>76</b>

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel 2.1</b> Katalis Komersial Sintesis Metanol .....	7
<b>Tabel 5.1</b> Kondisi Operasi Reaktor .....	52



## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 2.1</b> Ilustrasi Pori-Pori Katalis Dan Tahanan Film Di Partikel Katalis .....	9
<b>Gambar 2. 2</b> Grafik Peningkatan Kapasitas Reaktor Untuk Sintesis Amonia Dan .....	11
<b>Gambar 2.3</b> Reaktor Sintesis Amonia .....	11
<b>Gambar 2.4</b> Reaktor Reformasi Kukus Multitubular .....	12
<b>Gambar 2.5</b> Diagram Pembagian Model Reaktor Unggun Tetap .....	13
<b>Gambar 3.1</b> Diagram Alir Penelitian.....	21
<b>Gambar 4.1</b> Kontrol Volume Skala Reaktor .....	27
<b>Gambar 4.2</b> Kontrol Volume Skala Katalis.....	37
<b>Gambar 4.3</b> Halaman <i>Model Navigator</i> .....	42
<b>Gambar 4.4</b> Geometri Reaktor Dalam Comsol .....	43
<b>Gambar 4.5</b> Geometri Katalis Dalam Comsol .....	43
<b>Gambar 4.6</b> Tabulasi Konstanta Dalam Comsol .....	44
<b>Gambar 4.7</b> Tabulasi Persamaan Dalam Comsol .....	44
<b>Gambar 4.8</b> Jendela Subdomain <i>Convection And Diffusion</i> .....	46
<b>Gambar 4.9</b> Jendela Subdomain <i>Convection And Conduction</i> .....	46
<b>Gambar 4.10</b> Jendela Subdomain <i>PDE Coefficient Form</i> .....	47
<b>Gambar 4.11</b> Jendela Subdomain <i>Diffusion</i> .....	47
<b>Gambar 4.12</b> Jendela Subdomain <i>Conduction</i> .....	48
<b>Gambar 4.13</b> Jendela <i>Boundary Condition 1 Convection And Diffusion</i> .....	49
<b>Gambar 4.14</b> Jendela <i>Boundary Condition 1 Convection And Conduction</i> .....	49
<b>Gambar 4.15</b> Jendela <i>Boundary Condition 3 Diffusion</i> .....	50
<b>Gambar 4.16</b> Jendela <i>Boundary Condition 3 Conduction</i> .....	50
<b>Gambar 5.1.</b> Profil Konsentrasi Berbagai Spesi .....	53
<b>Gambar 5.2.</b> Profil Spesi Karbon Dioksida.....	54
<b>Gambar 5.3.</b> Profil Spesi Hidrogen .....	56
<b>Gambar 5.4.</b> Profil Spesi Dimetil Eter .....	57
<b>Gambar 5.5.</b> Profil Spesi Metanol.....	59
<b>Gambar 5.6.</b> Profil Spesi Karbon Monoksida .....	61
<b>Gambar 5.7.</b> Profil Spesi Uap Air .....	62
<b>Gambar 5.8.</b> Profil Suhu.....	64
<b>Gambar 5.9.</b> Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Tekanan UmpanYang Berbeda.....	66
<b>Gambar 5.10.</b> Profil <i>Yield DME</i> Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Tekanan UmpanYang Berbeda .....	66
<b>Gambar 5.11.</b> Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Laju Alir UmpanYang Berbeda.....	68
<b>Gambar 5.12.</b> Profil <i>Yield DME</i> Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Laju Alir UmpanYang Berbeda .....	68
<b>Gambar 5.13.</b> Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Suhu UmpanYang Berbeda.....	69
<b>Gambar 5.14.</b> Profil <i>Yield DME</i> Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Suhu UmpanYang Berbeda .....	69
<b>Gambar 5.15.</b> Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Komposisi UmpanYang Berbeda .....	70



**Gambar 5.16.** Profil *Yield DME* Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Komposisi Umpan Yang Berbeda ..... 71

**Gambar 5.17.** Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Panjang Reaktor Yang Berbeda ..... 72

**Gambar 5.18.** Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Radius Katalis Yang Berbeda ..... 73



## DAFTAR SIMBOL

$c_A$  = konsentrasi A

$u$  = kecepatan

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

$x, y, z, r, \theta, \phi$  = arah

$\rho$  = massa jenis campuran

$T$  = temperatur

$k$  = konduktivitas termal

$\mu$  = viskositas campuran

$p$  = 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

$C_p$  = kapasitas panas

$R$  = konstanta gas

$M$  = massa molekul relatif

$\rho_b$  = densitas

$M$  = massa molekul relatif

$R$  = konstanta gas ideal

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

$Mr_{mix}$  = massa molekul relatif campuran

$k_g$  = koefisien difusi masa lapisan film,

$h_g$  = koefisien difusi energi lapisan film,

### Subskrip

$dis$  = dispersi

$f_{=fluida}$

$i$  = spesi i

$w$  = dinding

$p$  = partikel

$s$  = permukaan katalis

## ABSTRAK

Nama : Ismail  
Program Studi : Teknik Kimia  
Judul : Pemodelan Dan Simulasi Reaktor Unggun Tetap Untuk Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter

Reaktor unggun tetap merupakan salah satu reaktor yang paling sering digunakan untuk reaksi katalitik. Dalam rangka merealisasikan suatu reaktor komersial, diperlukan informasi pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan informasi mengenai pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor unggun tetap untuk reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter melalui pemodelan dan simulasi. Simulasi dibantu dengan program Comsol Multiphysics. Model yang digunakan adalah model heterogen non-isothermal satu dimensi. Dalam penelitian ini divariasikan tekanan umpan, laju alir umpan, temperatur umpan, komposisi umpan, radius katalis dan juga panjang reaktor untuk melihat pengaruh variabel-variabel tersebut terhadap kinerja reaktor. Kenaikan tekanan umpan menaikkan konversi karbon dioksida dari 26% pada tekanan 2 MPa menjadi 37% pada tekanan 6 MPa dan menaikkan *yield* DME dari 15% menjadi 33%. Suhu umpan optimal dengan konversi karbon dioksida dan *yield* dimetil eter tertinggi adalah 500K. Kenaikan laju alir akan memperkecil konversi karbon dioksida dari 27,5% pada laju alir 0,3 mm/s menjadi 24% pada laju alir 1.1mm/s dan menurunkan *yield* DME dari 19% ke 15%. Kenaikan laju rasio  $H_2/CO_2$  akan menaikkan konversi karbon dioksida dari 5% pada perbandingan 1 menjadi 31% pada rasio 5 dan *yield* DME dari 4% menjadi 22%. Penambahan panjang reaktor lebih dari 0.4m tidak menaikkan konversi karbon dioksida secara signifikan. Penurunan radius katalis akan menaikkan konversi karbon dioksida dari 17% pada radius katalis 7 mm menjadi 27% pada radius katalis 0,7 mm.

**Kata kunci:** Reaktor unggun tetap, Reaksi hidrogenasi karbon dioksida, Sintesis dimetil eter.

## ABSTRACT

Name : Ismail  
Study Program : Chemical Engineering  
Title : Modelling and Simulation of Fixed Bed Reactor for Dimethyl Ether Synthesis Through Carbon Dioxide Hydrogenation

Fixed bed reactor is one of the most frequently used reactors for catalytic reactions. In order to realize a commercial reactor, it is necessary to know the influence of operating conditions on reactor performance. This study aimed to obtain information about the influence of operating conditions on the performance of fixed bed reactor for carbon dioxide hydrogenation reactions to dimethyl ether through modeling and simulation. Comsol Multiphysics program is used to simulate the reactor. The model used is non-isothermal heterogeneous one-dimensional model. In this study variables of feed pressure, feed flow rate, feed temperature, feed composition, catalyst diameter and also the length of the reactor are varied to see the influences of the variables on reactor performance. Increasing feed pressure increase the carbon dioxide conversion from 26% at a pressure of 2MPa to 37% at a pressure of 6 MPa and DME yield increase from 15% to 33%. Optimum feed temperature for the conversion of carbon dioxide and the *yield* of dimethyl ether is 500K. Increasing flow rate decreases the conversion of carbon dioxide from 27.5% at a flow rate of 0.3mm / s to 24% at a flow rate of 1.1mm / s and lowers the DME yield from 19% to 15%. Increasing the H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> ratio increases carbon dioxide conversion from 5% at ratio 1 to 31% at 5 and of DME *yield* from 4% to 22%. The addition of the reactor length beyond 0.4 m does not increase the carbon dioxide conversion significantly. Decreasing radius of catalyst will increase the carbon dioxide conversion from 17% at a radius of 7mm to 27% at a radius of 0.7 mm.

**Keywords** : Fixed bed reactor, carbon dioxide hydrogenation, dimethyl ether synthesis

# BAB 1

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Pemanasan global adalah peningkatan suhu udara rata-rata dekat permukaan bumi atau laut. Suhu permukaan secara global meningkat  $0,74 \pm 0,18$  °C ( $1,33 \pm 0,32$  °F) antara awal dan akhir abad ke-20. The Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) menyimpulkan bahwa sebagian besar peningkatan suhu yang diamati sejak pertengahan abad ke-20 kemungkinan besar disebabkan oleh meningkatnya konsentrasi gas rumah kaca akibat aktivitas manusia seperti pembakaran bahan bakar fosil dan deforestasi. Langkah-langkah atau tindakan untuk mengurangi intensitas radiasi yang dapat mengurangi pemanasan global sangat diperlukan. Salah satunya adalah dengan mengurangi sumber gas rumah kaca.

Karbon dioksida (CO<sub>2</sub>) merupakan gas rumah kaca yang dihasilkan dari pembakaran bahan bakar fosil dan kayu, produk samping pabrik hidrogen, produk samping fermentasi gula, dekomposisi batu gamping secara termal dan lain-lain. Konversi karbon dioksida menjadi dimetil eter merupakan upaya yang memberi keuntungan berganda, yaitu mengurangi sumber gas rumah kaca dan memperoleh produk yang bernilai ekonomis.

Hidrogenasi karbon dioksida adalah teknologi yang dapat mengkonversi karbon dioksida menjadi dimetil eter. Studi reaksi hidrogenasi karbon dioksida dengan berbagai katalis telah dilakukan. Tujuannya adalah untuk mendapatkan katalis dengan konversi dan selektivitas yang tinggi. Salah satu katalis tersebut dengan kinerja yang baik adalah Cu-ZnO-SiO<sub>2</sub>/HZSM-5 dan telah dilakukan studi kinetika oleh Wan Ji Yuan dkk (2007).

Untuk mendisain suatu reaktor unggul tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter perlu diketahui berbagai pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor tersebut. Namun, penelitian laboratorium memerlukan waktu dan biaya yang sangat tinggi melalui serangkaian uji coba dalam menemukan kondisi operasi untuk memperoleh kinerja yang baik. Oleh karena itu diperlukan pemodelan dan simulasi reaktor tersebut.

Dalam penelitian ini dilakukan pemodelan dan simulasi reaktor unggun tetap untuk reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter mengacu pada kinetika yang diusulkan oleh Wan Ji Yuan dkk (2007). Pemilihan untuk memodelkan reaktor unggun tetap dalam penelitian ini adalah sebagai alat bantu untuk simulasi parameter yang berpengaruh terhadap kinerja reaktor serta memanfaatkan kemampuan program COMSOL dalam melakukan simulasi reaktor. Model yang digunakan adalah model Heterogen non-isothermal dengan memperhitungkan faktor hidrodinamika berupa faktor konveksi dan difusi pada arah aksial pada reaktor serta difusi pada arah radial pada katalis dan juga transfer massa dan energi di lapisan film.

## **1.2. Perumusan Masalah**

Berdasarkan latar belakang yang telah dipaparkan di atas, maka rumusan masalah dari penelitian ini adalah bagaimana pengaruh berbagai kondisi operasi reaktor unggun tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter terhadap kinerja reaktor unggun tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter.

## **1.3. Tujuan**

Tujuan dari penelitian ini adalah diketahuinya pengaruh berbagai kondisi operasi reaktor unggun tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter terhadap kinerja reaktor tersebut untuk disain reaktor unggun tetap untuk reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter.

## **1.4. Batasan Masalah**

Batasan pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Reaktor dimodelkan secara heterogen dan non-isothermal
2. Model yang digunakan adalah model matematik satu dimensi (arah aksial pada reaktor dan arah radial pada katalis) dengan mempertimbangkan konveksi, difusi, difusivitas efektif, lapisan batas dan reaksi kimia.
3. Kinetika yang digunakan adalah Wan Ji Yuan dkk (2007)
4. Kondisi tunak
5. Neraca momentum didekati dengan persamaan Ergun
6. Gas dianggap ideal
7. Simulasi dibantu dengan program Comsol Multiphysics

## 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 2**

## TINJAUAN PUSTAKA

Bab ini berisikan teori-teori yang bersifat mendukung penelitian yang dilakukan penulis. Teori ini meliputi reaksi katalitik hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter beserta kondisi operasinya, jenis reaktor khususnya reaktor katalis unggun tetap, neraca massa dan energi serta metode elemen hingga yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan.

### 2.1 Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter

#### 2.1.1 Sistem Produksi Dimetil Eter

Dimetil eter (DME) adalah suatu senyawa organik dengan rumus kimia  $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ . Senyawa ini memiliki nama *IUPAC* metoksimetana. DME merupakan senyawa eter yang paling sederhana yang berfasa gas pada suhu dan tekanan standar. DME digunakan sebagai prekursor berbagai macam senyawa organik lainnya dan juga sebagai propelan aerosol maupun bahan bakar. DME juga memiliki potensi yang baik sebagai bahan bakar yang bersih. Hal ini karena ketika DME dibakar, DME menghasilkan  $\text{NO}_x$  dan  $\text{CO}$  yang sedikit. DME juga mudah mencair dengan tambahan tekanan dan pendinginan yang menyebabkannya mudah ditransportasikan.

Saat ini DME diproduksi sekitar lima juta ton setiap tahunnya. DME diproduksi umumnya dengan mengonversikan hidrokarbon dari gas alam atau batubara melalui proses gasifikasi menjadi gas sintetik. Gas sintetik kemudian dikonversi menjadi metanol dengan katalis yang berbasis tembaga yang berlanjut dengan dehidrasi metanol dengan katalis yang berbeda seperti zeolit. Selain itu DME juga dapat diproduksi dengan sintesis langsung dengan menggunakan katalis bifungsi yang dapat berfungsi sebagai sintesis metanol dan dehidrasi metanol DME sekaligus.

Beberapa tahun yang lalu, produksi DME dari karbon dioksida sebagai bahan mentah dianggap kurang menguntungkan karena karbon dioksida lebih stabil daripada karbon monoksida sehingga dianggap kurang reaktif. Selain itu kebutuhan akan produksi yang ramah lingkungan pun juga tidak terlalu besar karena berbagai peraturan emisi beberapa tahun lalu yang tidak terlalu ketat. Masalah juga ditimbulkan dari umpan hidrogen yang sulit didapatkan dalam jumlah banyak. Namun dengan semakin ketatnya peraturan lingkungan tentang emisi gas rumah kaca beserta pembuangan emisi gas rumah kaca terutama  $\text{CO}_2$  dari industri yang semakin ketat, kebutuhan akan reaksi yang



mampu mereduksi gas rumah kaca terutama CO<sub>2</sub> mulai mendapat perhatian untuk diteliti.

### 2.1.2 Persamaan Stoikiometri Dan Termodinamika

Reaksi pembentukan dimetil eter dari reaksi hidrogenasi karbon dioksida secara garis besar dibagi menjadi tiga tahap yaitu reaksi pembentukan metanol dari karbon dioksida, reaksi *reverse water gas shift* dan reaksi dehidrasi metanol. Reaksi ini dapat berlangsung secara dua tahap dengan katalis yang berbeda atau satu tahap sekaligus dengan katalis bifungsi.

#### 1. Reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol

Metanol terbentuk melalui reaksi hidrogenasi CO<sub>2</sub> (reaksi 2.1) dengan hasil samping berupa air. Reaksi ini memiliki entalpi sebesar -49.5kJ/mol pada suhu 25<sup>0</sup>C dan -58.1kJ/mol pada suhu 225<sup>0</sup>C. Stoikiometri reaksi ini adalah:



#### 2. Reaksi *reverse water-gas shift*

Reaksi ini merupakan kebalikan dari *water gas shift*. Pada reaksi ini dihasilkan produk samping yaitu karbon monoksida dan air. Reaksi ini dapat berlangsung ke arah sebaliknya jika produk terlalu banyak melebihi kesetimbangannya. Reaksi ini sangat sensitif terhadap temperatur. Reaksi ini juga berlangsung sangat cepat dan laju reaksinya jauh mengalahkan dua reaksi yang lain. Reaksi ini memiliki entalpi sebesar -41.2kJ/mol pada suhu 25<sup>0</sup>C dan -39.8kJ/mol pada suhu 225<sup>0</sup>C. Stoikiometri reaksi ini adalah:



#### 3. Reaksi dehidrasi metanol

Reaksi ini merupakan reaksi yang menghasilkan DME. Reaksi ini menghasilkan produk samping berupa air. Reaksi ini memiliki entalpi sebesar -0.9kJ/mol pada suhu 25<sup>0</sup>C. Stoikiometri reaksi ini adalah

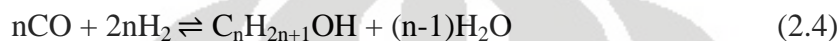


Seperti ditunjukkan pada data di atas, reaksi antara CO<sub>2</sub> dan H<sub>2</sub> keduanya bersifat eksotermis. Sedangkan reaksi RWGS dan reaksi dehidrasi metanol bersifat endotermis. Hal ini menyebabkan kenaikan suhu reaktor adiabatik tidak terlalu besar. Hal ini berbeda dengan reaksi dimana umpannya adalah gas sintetik seperti yang biasa terjadi

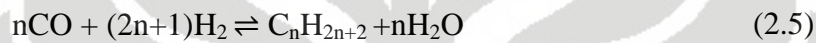
dimana suhunya dapat meningkat tinggi. Semua reaksi menghasilkan air sebagai produk samping. Hal ini mengakibatkan air sebagai produk cukup banyak sehingga umumnya dilakukan pemisahan air dulu pada setiap tahap reaksi untuk mengurangi penghambatan reaksi oleh air.

### 2.1.3. Selektivitas Reaksi

Banyak sekali reaksi samping pada reaksi sintesis methanol seperti pembentukan senyawa alkohol rantai panjang :



pembentukan hidrokarbon seperti reaksi *Fischer Tropsch*:



Namun reaksi samping dapat dikurangi dengan penggunaan katalis yang tepat.

### 2.1.4 Katalis Reaksi Hidrogenasi Karbon Dioksida Menjadi Dimetil Eter

Katalis untuk reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi DME dibagi dua jenis yaitu katalis reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol dan katalis reaksi dehidrasi metanol. Katalis reaksi tersebut dapat berbentuk terpisah maupun bersifat bifungsi memiliki dua inti aktif yang dapat mengkatalisis reaksi hidrogenasi menjadi metanol dan dehidrasi metanol.

Saat ini katalis untuk hidrogenasi karbon dioksida menjadi methanol umumnya digunakan Cu,ZnO, SiO<sub>2</sub> maupun Pd untuk menghambat produksi hidrokarbon sekaligus meningkatkan *yield* dan selektivitas reaksi. Hal ini karena Cu/ZnO telah diketahui memiliki aktivitas dan selektivitas akan metanol yang tinggi. Beberapa katalis komersial untuk reaksi hidrogenasi metanol diberikan di tabel di bawah. Untuk katalis reaksi dehidrasi metanol umumnya digunakan zeolit HZSM-5 karena tidak sensitif terhadap konsentrasi air.

**Tabel 2.1** Katalis Komersial Sintesis Metanol

Produsen	Komponen				
	Cu	Zn	Al	C	Ref
BASF	65-75	20-30	5-10	-	(Brocker

					dkk 1978)
Sud Chemie	65-75	18-23	5-10	-	(Schenider dkk 1987)
ICI	61	30	9	-	(Gallagher dkk 1965)
DuPont	50	19	31	31	(Hoppener dkk 1986)
Haldor Topse	50-60	21-25	15-28	6-8	(Topsec 1987)

### 2.1.5 Kinetika Reaksi

Mekanisme pembentukan metanol dari hidrogenasi karbon dioksida telah banyak diajukan. Herman dkk (1979) mengajukan teori dua tempat untuk disosiasi adsorpsi dari molekul hydrogen ke ZnO saat karbon monoksida teradsorp pada lokasi tembaga monovalen. Mekanisme elementernya, dijelaskan bahwa karbon monoksida teradsorp sebagai spesi karbonil, dan spesi format merupakan senyawa antara untuk reaksi sintesis metanol dan *water gas shift*. Tembaga tereduksi atau teroksidasi melalui adsorpsi CO dan CO<sub>2</sub> dan fenomena ini terjadi pada dua tempat yang berbeda. (Klier dkk 1982). Karena ada beberapa tahap elementer untuk setiap reaksi maka beberapa kombinasi untuk persamaan laju reaksi untuk berbagai tahap pembatas laju reaksi dikembangkan. Wang Ji Yuan dkk telah mengajukan persamaan kinetika untuk katalis Cu-ZnO-SiO<sub>2</sub>/HZSM-5 dengan basis mekanisme Langmuir Hinshelwood. Kinetikanya dimodelkan dengan persamaan 2.6 sampai 2.8.

$$r_{\text{co2hyd}} = \frac{k_1 f_{\text{CO}_2} f_{\text{H}_2} \left(1 - \frac{(K_2/K_{\text{eqm1}})(f_{\text{CH}_3\text{OH}} f_{\text{H}_2\text{O}})}{f_{\text{CO}_2} f_{\text{H}_2}^3}\right)}{\left(1 + \frac{K_1 f_{\text{H}_2\text{O}}}{f_{\text{H}_2}} + \sqrt{K_{\text{H}_2} f_{\text{H}_2}} + K_4 f_{\text{H}_2\text{O}}\right)^3} \quad (2.6)$$

$$r_{\text{rwgs}} = \frac{k_2 f_{\text{CO}_2} \left(1 - \frac{(K_1/K_{\text{eqm2}})(f_{\text{CO}} f_{\text{H}_2\text{O}})}{f_{\text{CO}_2} f_{\text{H}_2}^1}\right)}{1 + \frac{K_1 f_{\text{H}_2\text{O}}}{f_{\text{H}_2}} + \sqrt{K_{\text{H}_2} f_{\text{H}_2}} + K_4 f_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (2.7)$$

$$r_{\text{metdehydr}} = \frac{k_3 \left( \frac{f_{\text{CH}_3\text{OH}}^2}{f_{\text{H}_2\text{O}}} - \frac{K_3}{K_{\text{eqm3}}} f_{\text{DME}} \right)}{(1 + K_{\text{CH}_3\text{OH}} f_{\text{CH}_3\text{OH}} + K_{\text{H}_2\text{O}} f_{\text{H}_2\text{O}})^2} \quad (2.8)$$

## 2.2 Reaksi Katalitik

Katalis adalah suatu zat yang mempercepat laju reaksi kimia pada suhu tertentu, tanpa mengalami perubahan atau terpakai oleh reaksi itu sendiri. Suatu katalis berperan dalam reaksi tapi bukan sebagai pereaksi ataupun produk.

Katalis memungkinkan reaksi berlangsung lebih cepat atau memungkinkan reaksi pada suhu lebih rendah akibat perubahan yang dipicunya terhadap pereaksi. Katalis menyediakan suatu jalur pilihan dengan energi aktivasi yang lebih rendah. Katalis mengurangi energi yang dibutuhkan untuk berlangsungnya reaksi.

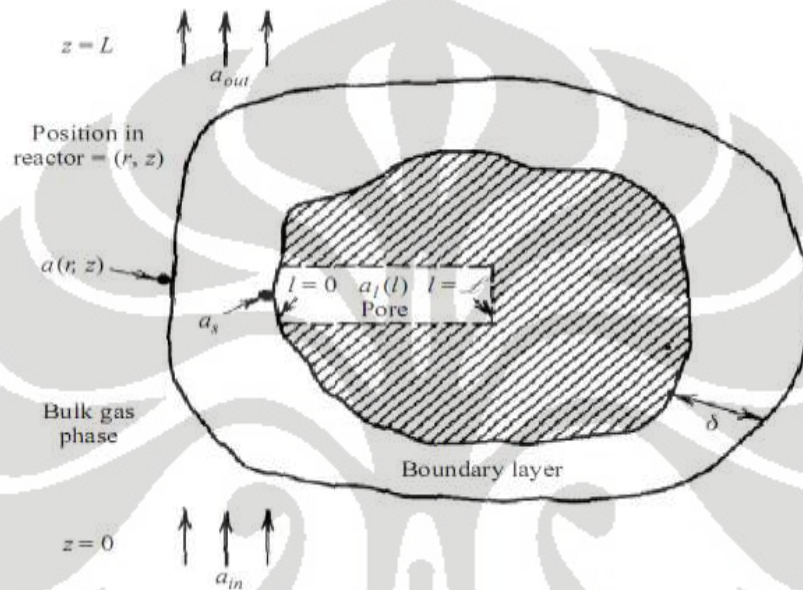
Katalis dapat dibedakan ke dalam dua golongan utama: katalis homogen dan katalis heterogen. Katalis heterogen adalah katalis yang ada dalam fase berbeda dengan pereaksi dalam reaksi yang dikatalisinya, sedangkan katalis homogen berada dalam fase yang sama. Satu contoh sederhana untuk katalisis heterogen yaitu bahwa katalis menyediakan suatu permukaan di mana pereaksi-pereaksi (atau substrat) untuk sementara teradsorp. Ikatan dalam substrat-substrat menjadi lemah sedemikian sehingga memadai terbentuknya produk baru. Ikatan antara produk dan katalis lebih lemah, sehingga akhirnya terlepas.

Katalis homogen umumnya bereaksi dengan satu atau lebih pereaksi untuk membentuk suatu perantara kimia yang selanjutnya bereaksi membentuk produk akhir reaksi, dalam suatu proses yang memulihkan katalisnya.

Pada reaksi katalitik, molekul mengikuti serangkaian tahap-tahap sebelum akhirnya bereaksi. Molekul reaktan memasuki reaktor dengan konsentrasi  $c_{\text{in}}$  dan meninggalkan reaktor dengan konsentrasi yang berbeda  $c_{\text{out}}$ . Di antara masuk dan keluarnya molekul reaktan tersebut mengalami peristiwa-peristiwa sebagai berikut:

1. Peristiwa perpindahan reaktan di fasa *bulk* (gas) sampai ke sekitar partikel katalis.
2. Peristiwa perpindahan melewati tahanan film dari fasa *bulk* (gas) ke permukaan eksternal katalis.
3. Peristiwa perpindahan reaktan ke dalam partikel katalis melalui difusi melewati pori-pori katalis.

4. Adsorpsi molekul reaktan di atas permukaan internal katalis.
5. Reaksi antar komponen teradsorpsi di atas permukaan katalis.
6. Desorpsi molekul produk dari permukaan ke pori-pori katalis.
7. Difusi molekul produk keluar dari pori-pori katalis ke permukaan eksternal katalis.
8. Peristiwa perpindahan produk melewati tahanan film menuju ke fasa bulk (gas).
9. Peristiwa perpindahan produk di fasa bulk (gas) sampai ke outlet reaktor.



**Gambar 2.1** Ilustrasi Pori-Pori Katalis Dan Tahanan Film Di Partikel Katalis  
(Nauman, 2001)

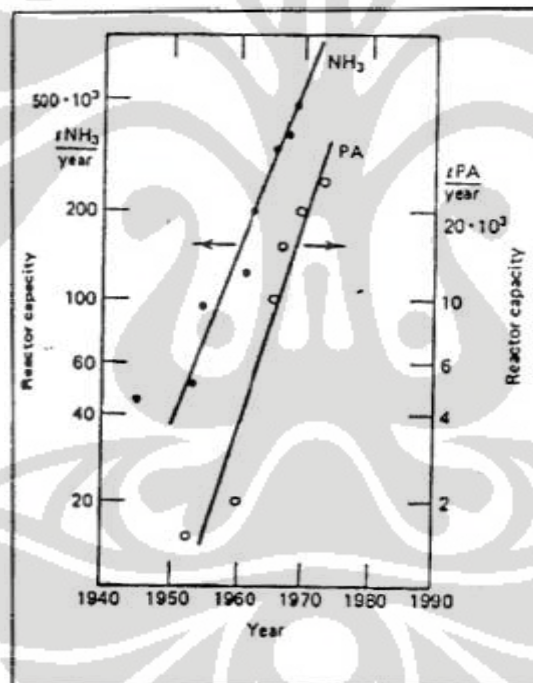
### 2.3 Reaktor Katalitik Jenis Unggun Tetap

Teknologi katalisis dengan katalis berbentuk padatan penerapannya pada teknik proses kimia membawa perubahan yang cukup besar dalam dunia industri di awal abad ini. Penemuan ini membuat diversifikasi terhadap proses yang sudah mapan membawanya kepada inovasi baru teknik proses. Hampir semua proses katalitik tersebut berbasiskan pada penggunaan katalis padat.

Bagian utama dalam proses katalitik berlangsung pada reaktor dengan jenis unggun tetap (*fix bed reactor*). Penggunaan jenis reaktor ini berkisar mulai dari industri kimia dasar, industri petrokimia sampai proses penyulingan minyak bumi.

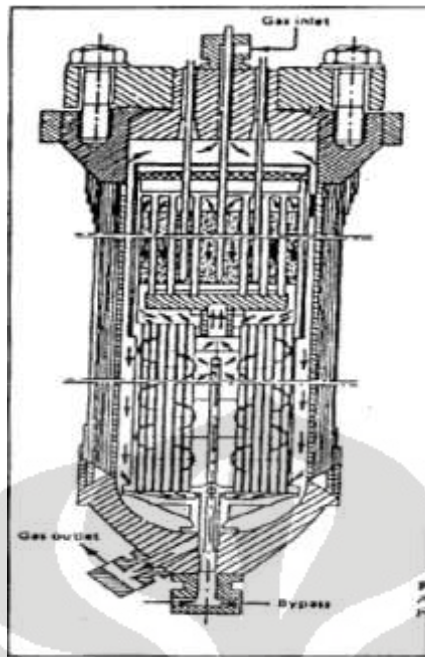
Teknologi reaktor unggun tetap semakin berkembang seiring dengan semakin meningkatnya produksi akibat semakin besarnya permintaan pasar. Hal ini menyebabkan

kapasitas reaktor unggun tetap menjadi besar sesuai dengan target produksi. Sebagai gambaran dapat dilihat pada Gambar di bawah yang menunjukkan perkembangan kapasitas reaktor unggun tetap untuk proses sintesis amonia dan *phthalic anhydride*. Dari Gambar dibawah terlihat peningkatan kapasitas reaktor unggun tetap pada industri kimia yang menggunakan katalis padat. Perkembangan ini pada akhirnya membawa pada inovasi-inovasi baru untuk menciptakan desain reaktor unggun tetap yang mampu memenuhi kapasitas produksi yang diinginkan. Berbagai bentuk reaktor dirancang untuk mendapatkan kondisi dan dimensi yang optimal dengan efisiensi operasi yang tinggi pula. Pada Gambar di bawah menunjukkan reaktor unggun tetap yang digunakan pada sintesis amonia dengan menggunakan penukar panas berbentuk silinder.

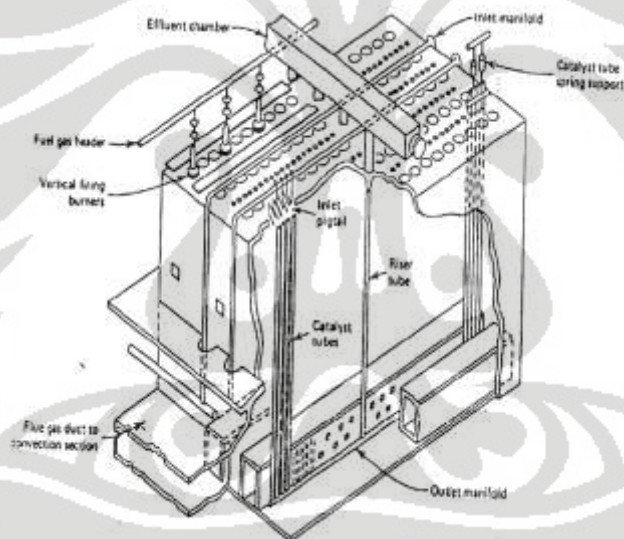


**Gambar 2.2** Grafik Peningkatan Kapasitas Reaktor Untuk Sintesis Amonia Dan *Phthalic Anhydride*  
(Froment and Bischoff, 1990)

Jenis reaktor unggun tetap multitubular yang agak berbeda digunakan pada proses reformasi *naphta* atau gas alam menjadi hidrogen atau gas sintesis (*synthesis gas, syngas*). Reaksi yang terjadi bersifat endotermis yang memerlukan pemanasan antara 500 sampai 800 °C. Jumlah pipa dengan diameter 10 cm yang berada dalam satu reaktor bisa mencapai 300 buah.



**Gambar 2.3.** Reaktor Sintesis Amonia (Froment and Bischoff, 1990)



**Gambar 2.4.** Reaktor Reformasi Kukus Multitubular (Froment and Bischoff, 1990)

Reaktor unggun tetap merupakan jenis reaktor utama untuk reaksi katalisis dengan katalis padat. Reaktor unggun tetap sangat diminati karena sederhana dan murah jika dibandingkan dengan reaktor unggun terfluidisasi. Permasalahan yang sering terjadi di reaktor unggun tetap adalah terbentuknya *hot spot* yaitu bagian di katalis yang memiliki suhu yang jauh berbeda dari suhu reaktor. Hal ini disebabkan karena aliran panas konduksi di katalis yang kurang cepat. Masalah lainnya adalah penurunan tekanan yang tinggi serta adanya tahanan difusi di intrapartikel katalis yang menyebabkan

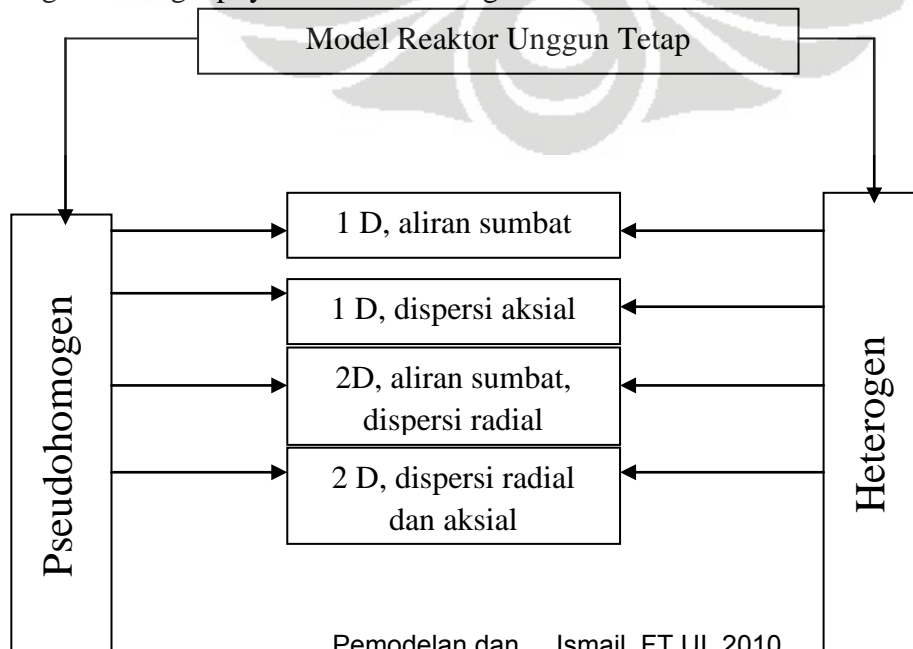
terhambat laju reaksi. Walaupun begitu, berbagai teknik pendinginan dan prinsip pemodelan dan simulasi telah bisa memprediksi fenomena di reaktor unggun tetap.

## 2.4 Pemodelan dan Simulasi

### 2.4.1 Pemodelan dan Simulasi Reaktor Unggun Tetap

Pada proses pemodelan akan diturunkan persamaan matematis dari sistem reaktor tubular unggun tetap. Dalam menurunkan persamaan tentunya harus diperhitungkan berbagai aspek yang terlibat di dalam sistem dan kemudian merepresentasikannya ke dalam persamaan matematis. Secara umum, untuk proses yang melibatkan proses perpindahan maka akan melibatkan prinsip tiga kesetimbangan yaitu Neraca Massa, Neraca Energi dan Neraca Momentum. Ketiga aspek tersebut bersama-sama membentuk sebuah fenomena perpindahan yang secara simultan mempengaruhi profil sepanjang reaktor.

Dalam desain reaktor dan analisa selalu berbenturan dengan derajat kerumitan yang bisa ditoleransi. Model reaktor unggun tetap secara garis besar dibagi dua yaitu pseudo-homogen dan heterogen. Pada model pseudo-homogen permukaan katalis diasumsikan terpapar seluruhnya oleh aliran ruah fluida sehingga dianggap tidak ada hambatan transfer massa maupun energi dari katalis fasa padat ke fluida maupun sebaliknya. Sedangkan pada model heterogen, neraca massa maupun energi diperhitungkan untuk setiap fasa dan hambatan transport massa dan energi antar fasa turut diperhitungkan. Model reaktor juga dibagi berdasarkan dimensinya. Model satu dimensi hanya memperhitungkan satu arah saja yaitu arah aksial sedangkan model dua dimensi turut memperhitungkan fenomena transportasi arah aksial maupun radial. Pembagian selengkapnya terlihat dari diagram di bawah.







**Gambar 2.5.** Diagram Pembagian Model Reaktor Unggun Tetap (Iordanidis, 2002)

### 1 Model pseudo-homogen Satu dimensi

Model Pseudo-homogen satu dimensi merupakan model reaktor yang paling simple. Pada model ini fenomena transport yang diperhitungkan hanyalah konvektif secara aksial. Karena sifat alirannya yang sama untuk tiap arah radial maka model ini disebut model aliran sumbat (*plug flow*). Pada model ini seluruh sifat dari fluida maupun katalis dirata-ratakan karena model ini mengasumsikan hanya satu fasa. Persamaan model reaktornya adalah

Neraca massa

$$u_{int} \frac{dC_i}{dz} = -R_i(C, T) \quad (2.9)$$

Neraca energi

$$u_{int} \rho_f c_p \frac{dT}{dz} = -R_T(C, T) - \frac{4U_W}{dt} (T - T_w) \quad (2.10)$$

### 2 Model heterogen satu dimensi

Model ini memperhitungkan fenomena transport yang sama seperti model sebelumnya yaitu konvektif arah aksial. Namun perbedaannya dengan model sebelumnya terletak bahwa model ini memperhitungkan transfer antar fasa katalis ke fasa fluida ruah. Hal ini diakibatkan karena model ini memperhitungkan dua fasa yaitu katalis dan fluida ruah. Model ini juga membedakan antara konsentrasi di permukaan partikel katalis dan konsentrasi pada fluida ruah. Persamaan untuk model ini adalah

Fasa Fluida

$$u_{int} \frac{dC_i}{dz} = k_g a_p (C_{s,i} - C_i) \quad (2.11)$$

$$u_s \rho_f c_p \frac{dT}{dz} = h_g a_p (T_s - T) - \frac{4U_W}{dt} (T - T_w) \quad (2.12)$$

Fasa Solid

$$k_g a_p (C_{s,i} - C_i) = -R_i(C_s, T_s) \quad (2.13)$$

$$h_g a_p (T_s - T) = -\Delta H_j R_i(C_s, T_s) \quad (2.14)$$

### 3 Model heterogen satu dimensi dengan memperhitungkan difusi aksial

Model ini merupakan model yang heterogen sehingga memperhitungkan neraca massa dan energi untuk fasa katalis maupun fluida ruah. Model ini memiliki penambahan suku difusi ke arah difusi aksial untuk menambah akurasi fenomena yang terjadi. Persamaan yang digunakan adalah

Fasa Fluida

$$u_s \frac{dC_i}{dz} - D_{i,m} \frac{d^2 C_i}{dz^2} = k_g a_p (C_{s,i} - C_i) \quad (2.15)$$

$$u_s \rho_f c_p \frac{dT}{dz} - \lambda_f \frac{d^2 T}{dz^2} = h_g a_p (T_s - T) - \frac{4U_W}{dt} (T - T_w) \quad (2.16)$$

Fasa Solid

$$k_g a_p (C_{s,i} - C_i) = -R_i(C_s, T_s) \quad (2.17)$$

$$h_g a_p (T_s - T) = -R_T(C_s, T_s) \quad (2.18)$$

### 4 Model dua dimensi pseudo-homogen

Model dua dimensi ini transfer massa dan energi diperhitungkan untuk arah aksial dan radial. Pada arah aksial fenomena transport yang terjadi umumnya adalah secara konvektif sedangkan untuk arah radial fenomena yang terjadi umumnya adalah difusi. Persamaan yang digunakan adalah

Neraca massa

$$u_s \frac{\partial C_i}{\partial z} - \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) = -R_i(C, T) \quad (2.19)$$

Neraca energi

$$u_s \rho_f c_p \frac{dT}{dz} - \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = -R_T(C, T) \quad (2.20)$$

### 5. Model dengan memperhitungkan hambatan intrapartikel katalis

Model ini berdasarkan bahwa setelah reaktan maupun produk melewati lapisan batas maka senyawa tersebut harus berdifusi lagi di dalam pori-pori partikel

untuk menuju inti aktif katalis. Fenomena transport yang terjadi pada katalis hanya difusi, tidak seperti aliran fluida ruah, di katalis tidak terdapat aliran konvektif.

Model dasar yang paling banyak digunakan hingga saat ini adalah model pseudo-homogen satu-dimensi (Froment, 1990; Andrigo 1999), yang hanya memperhitungkan transport sebagai aliran sumbat pada arah aksial. Model tersebut sesuai untuk reaktor yang panjang, laju alir tinggi, ukuran katalis kecil (Andrigo 1999); dan gradien massa dan temperatur ke arah radial kecil sehingga bisa diabaikan (Avci 2006). Sementara untuk mendapatkan ketelitian yang tinggi dan dengan reaktor yang tidak terlalu panjang, laju alir rendah dan ukuran katalis besar maka umumnya digunakan model heterogen.

## **2.4.2 Pemodelan dengan Teknologi Computational Fluid Dynamics (CFD)**

### **2.4.2.1 Teknologi 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
- Pemodelan Reaksi

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

#### **2.4.2.2 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, Runga 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 detil 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 differensial, yaitu *Finite Difference Method* (FDM). Perbedaan antara FEM dan FDM adalah :

- FDM adalah suatu pendekatan ke persamaan differensial, 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

### 2.4.2.3 Pemodelan dengan Comsol

COMSOL Multiphysics (sebelumnya FEMLAB) adalah perangkat lunak analisis elemen hingga, solver dan simulasi untuk berbagai aplikasi fisika dan teknik. COMSOL Multiphysics juga menawarkan antarmuka yang luas untuk MATLAB dan peralatan untuk berbagai macam aplikasi pemrograman, pra-proses dan pasca-proses. Comsol bersifat cross-platform (apat digunakan di Windows, Mac, Linux, Unix). Selain antarmuka konvensional yang berbasis-fisika, COMSOL Multiphysics juga memungkinkan untuk memasuki persamaan system digabungkan dengan persamaan diferensial parsial (PDEs).

Comsol memiliki berbagai modul-modul yaitu

1. AC/DC Module

Modul ini dapat mensimulasikan sistem komponen dan peralatan elektrik yang bergantung pada proses elektrostatis, magnetostatis dan elektromagnetik kuasi-statis. Modul ini juga dapat dipasangkan dengan berbagai fenomena fisika lainnya. Modul ini juga memiliki *interface* untuk aplikasi sirkuit *SPICE*.

2. Acoustics Module

Modul ini memiliki modus aplikasi dan kondisi batas untuk memodelkan propagasi di zat padat atau fluida statis. Modul ini juga bisa memodelkan aplikasi aeroakustik pada fluida bergerak.

3. CAD Import Module

Modul ini berguna untuk pembacaan berbagai format *Computer Aided Design* standar industry pada umumnya. Modul ini memiliki *plugin* untuk membaca berbagai format geometri.

4. Chemical Engineering Module

Modul ini mampu menganalisis neraca massa dan energi yang dikolring dengan persamaan reaksi kimia. Modul ini mampi memodelkan berbagai fenomena transportasi fluida termasuk transport ionic dan difusi multikomponen.

5. Earth Science Module

Modul ini mampu memodelkan fenomena geologis dan lingkungan berdasarkan fenomena aliran *subsurface*. Modul ini ideal aliran pada media pori yang dikopling dengan fenomena fisik lainnya seperti poroelastik.

6. Heat Transfer Module

Modul ini memiliki mode aplikasi transfer massa melalui konduksi, konveksi dan radiasi. Modul ini juga dapat dapat menyelesaikan berbagai masalah transfer energi yang terintegrasi dengan fenomena fisika lainnya.

7. Material Library

Modul ini menyimpan berbagai data sifat fisik dan kimia dari berbagai zat dan material. Modul ini memudahkan prediksi sifat fisik dan kimia suatu material

8. Structural Mechanics Module

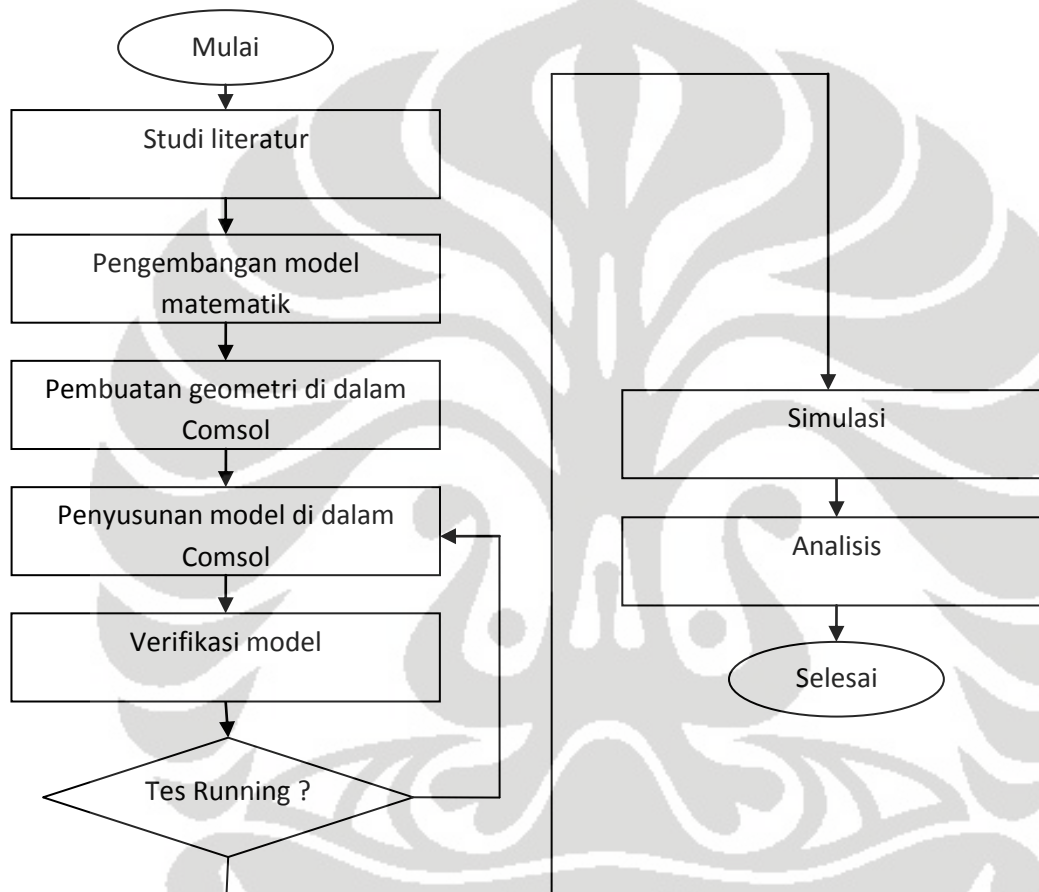
Modul ini mampu menganalisis tegangan regangan material dengan kopling persamaan fisika lainnya. Modul ini mampu memodelkan material non linear, yang terdeformasi secara besar dengan kopling persamaan fisika lainnya

Pada penelitian ini akan digunakan modul Chemical Engineering. Modul Chemical Engineering memiliki kemampuan analisis CFD dan neraca massa dan energi yang digabungkan dengan kinetika reaksi kimia. Modul ini juga mampu menggabungkan sejumlah besar model aplikasi untuk bidang fenomena transportasi masa termasuk transportasi ion dan difusi multi komponen.

## BAB 3 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, simulasi reaktor, ada beberapa langkah yang dilakukan dalam penelitian ini yang meliputi:



### 3.2.1 Studi Literatur

Studi literatur mengenai reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi DME serta reaktor katalitik unggun tetap dan program COMSOL. Hal ini ditujukan agar mengerti tentang permasalahan yang terjadi.

### 3.2.2 Pengembangan Model Matematik

Penentuan batasan model untuk reaktor katalis unggun tetap yang terdiri dari neraca massa, neraca energi di katalis maupun di fluida ruah. Penentuan batasan model ini bertujuan untuk menyederhanakan pemodelan dengan memasukkan asumsi-asumsi yang telah ditetapkan sebelumnya.

### 3.2.3 Pembuatan Geometri di Comsol

Pembuatan geometri meliputi geometri reaktor dan geometri katalis. Geometri reaktor berupa garis lurus sedangkan geometri katalis berupa persegi.

### 3.2.4 Penyusunan Model di Comsol

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 dan energi, *boundary settings* untuk kondisi batas neraca massa dan energi serta *constants* dan *general 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 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 memasukkan tanda model dapat dilihat dari hasil output pada COMSOL, contohnya seperti memasukkan laju reaksi, ketika salah memasukkan tanda maka yang terjadi adalah penambahan konsentrasi reaktan. 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 ber-pangkat setengah (seperti  $\text{bar}^{1/2}$  pada konstanta Arrhenius). Untuk itu penggunaannya harus secara kreatif membuat nilai awal yang mengabaikan iterasi mengarah ke nilai yang tidak boleh bernilai negatif.

### **3.2.6 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.

### **3.2.7 Analisis**

Setelah menjalankan seluruh variasi, dianalisis berbagai profil pada reaktor. Setelah itu grafik hubungan antara berbagai kondisi operasi dan konversi karbon dioksida dan *yield* DME di-*plot* untuk kemudian di analisis dengan menggunakan teori-teori yang telah ada.

## **BAB 4**

### **PEMODELAN REAKTOR UNGGUN TETAP**

Bab ini berisikan pemodelan yang dilakukan untuk mensimulasikan reaktor unggun tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi DME. Pemodelan ini meliputi penurunan model-model dari persamaan umum neraca massa dan energi beserta asumsi yang digunakan, serta aplikasi model tersebut dalam COMSOL.

#### **4.1 Penyusunan Model Matematis**

Dalam melakukan penurunan persamaan, tentunya harus diperhitungkan berbagai aspek yang terlibat di dalam sistem dan kemudian merepresentasikannya ke dalam persamaan matematis. Secara umum, untuk proses yang melibatkan proses perpindahan maka akan melibatkan prinsip tiga kesetimbangan yaitu neraca massa, neraca energi, dan neraca momentum. Ketiga aspek tersebut bersama-sama membentuk sebuah fenomena perpindahan yang secara simultan mempengaruhi profil sepanjang reaktor.

Model reaktor yang digunakan adalah model heterogen satu dimensi ke arah aksial reaktor dan arah radial katalis. Pemilihan model satu dimensi karena diasumsikan variasi konsentrasi ke arah radial reaktor sangat kecil karena aliran gas yang berviskositas rendah. Selain itu variasi suhu ke arah radial pun diasumsikan kecil untuk rasio panjang terhadap lebar reaktor yang besar. Model heterogen dipilih karena mampu merepresentasikan fenomena difusi lapisan film dan fenomena difusi intrakatalis yang memiliki efek yang cukup besar pada diameter katalis yang cukup besar. Selain itu kita hanya menganalisis kondisi tunak, yaitu kondisi operasi reaktor ketika tidak ada variasi kondisi terhadap waktu.

Penurunan persamaan model reaktor unggun tetap akan dibedakan antara fasa fluida (gas), dan fasa solid atau padatan (katalis), di mana reaksi hanya terjadi di permukaan pori-pori partikel katalis sesuai kinetika Wan Ji Yuan dkk (2007). Oleh karena itu, pengaruh difusi pori-pori katalis dan transfer massa dari fasa gas ke padatan perlu diikutsertakan. Sistem akan dibagi menjadi 2 bagian, yaitu skala reaktor dan skala partikel katalis. Di dalam kedua sistem akan dimodelkan neraca massa dan energi sesuai dengan fenomena transportasinya masing-masing.

##### **4.1.1 Skala Reaktor**

Pada skala reaktor ini persamaan dibagi menjadi tiga bagian, yaitu persamaan neraca massa, neraca momentum dan neraca energi. Persamaan ini bertujuan memodelkan fenomena-fenomena perpindahan yang terjadi pada skala reaktor dalam bentuk persamaan matematis.

#### 4.1.1.1 Neraca Massa Skala Reaktor

Dalam persamaan neraca massa kondisi tunak berlaku persamaan umum :

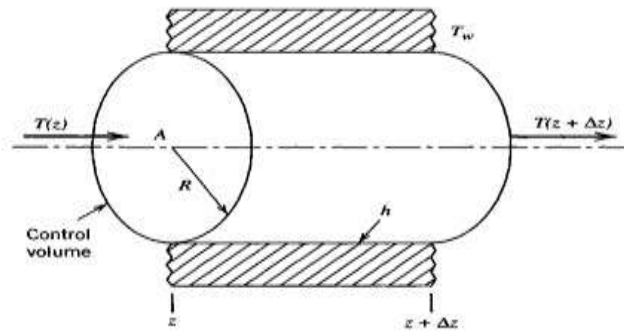
$$\left[ \begin{array}{c} \text{Laju Massa} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Laju Massa} \\ \text{Keluar} \end{array} \right] - [\text{Laju Generasi massa}] = 0 \quad (4.1)$$

Persamaan di atas diuraikan lagi berdasarkan efek atau fenomena-fenomena perpindahan massa yang ada di dalamnya. Fenomena yang terjadi di fluida ruah di reaktor adalah konveksi, dispersi dan difusi lapisan film. Sedangkan fenomena konveksi terjadi karena fluida ruah memiliki kecepatan. Fenomena difusi lapisan film terjadi karena adanya perbedaan konsentrasi spesi di fasa padat dan fasa gas. Dispersi adalah fenomena transfer massa makroskopik akibat aliran yang tidak merata akibat tumbukan dengan katalis maupun efek pencampuran. Fenomena ini berbeda dari difusi karena difusi terjadi akibat fenomena mikroskopik perpindahan molekular yang acak. Pada fenomena transport dengan aliran, fenomena perpindahan secara dispersi jauh signifikan dibandingkan difusi.

Di dalam pemodelan ini hanya diperhitungkan efek dispersi dan konvektif dalam aliran fluida pada arah aksial, maka persamaan matematis dengan memperhitungkan arah aksial dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Laju (Massa)} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Massa} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{konvektif aksial}} + \left[ \begin{array}{c} \text{Laju (Massa)} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Massa} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{dispersif aksial}} - [\text{Laju Generasi Massa}] = 0 \quad (4.2)$$

Supaya dapat dihitung dan ditentukan nilainya secara kuantitatif maka persamaan di atas harus diubah menjadi bentuk persamaan matematis dengan kontrol terhadap volum sebagai berikut ini :



Gambar 4.1 Kontrol Volume Skala Reaktor

Bentuk persamaan matematis dari persamaan di atas dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\left[ \pi r^2 C_i v_z \right]_z + \left[ \pi r^2 J_i \right]_z - \left[ \pi r^2 C_i v_z \right]_{z+\Delta z} - \left[ 2\pi r^2 J_i \right]_{z+\Delta z} + \pi r^2 \Delta z k_g a_p (C_i - C_{i,s}) \quad (4.3)$$

dengan  $z$  adalah jarak untuk arah aksial. Masing-masing suku di atas mewakili fenomena konvektif aksial, difusi aksial dan generasi massa.

Dari persamaan di atas dapat dilihat bahwa neraca massa dievaluasi pada posisi  $z$  dengan interval sebesar  $\Delta z$ . Tinjauan dengan interval ini dimaksudkan agar neraca massa dapat ditinjau pada kondisi tertentu yang dapat dihitung.

Selanjutnya persamaan di atas ditransformasikan ke dalam bentuk fluks di mana :

Fluks massa = (Kecepatan Aliran Massa / Luas Bidang).

Untuk itu maka persamaan di atas dibagi dengan  $\pi r^2 (\Delta z)$  Maka persamaan di atas menjadi :

$$\left[ \frac{\pi r^2 (C_i v_z|_{z+\Delta z} - C_i v_z|_z)}{\pi r^2 \Delta z} \right] + \left[ \frac{\pi r^2 (J_{i,z}|_{z+\Delta z} - J_{i,z}|_z)}{\pi r^2 \Delta z} \right] + \left[ \frac{\pi r^2 \Delta z k_g a_p \Delta C}{\pi r^2 \Delta z} \right] = 0 \quad (4.4)$$

Dengan menggunakan teori limit di mana  $\Delta z$  mendekati nol maka persamaan di atas dapat dituliskan dalam persamaan diferensial sebagai berikut :

$$\left(\frac{\partial C_i v_z}{\partial z}\right) + \left(\frac{\partial J_{i,z}}{\partial z}\right) + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) = 0 \quad (4.5)$$

Lalu substitusi nilai,

$$J_{i,z} = - D_{dis,i} \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad (4.6)$$

Maka persamaan menjadi :

$$\frac{\partial C_i v_z}{\partial z} + D_{dis,i} \left[ \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right] + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) = 0 \quad (4.7)$$

1                      2                      3

Di mana :

1. Aksial konvektif
2. Aksial dispersif
3. Transfer massa lapisan film

Selain itu kita perlu melakukan proses pentakdimensial variabel arah aksial. Pentakdimensial arah aksial memudahkan saat variasi panjang reaktor. Dengan menggunakan bilangan pentakdimensial, maka tidak diperlukan penggantian geometri reaktor secara terus menerus untuk setiap variasi panjang reaktor. Jika digunakan faktor parameter pentakdimensial  $\omega$  persamaan di atas menjadi

$$\left( \omega \frac{\partial C_i v_z}{\partial z} - \omega D_{dis,i} \left[ \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right] + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) \right) = 0 \quad (4.8)$$

dengan,

$$\omega = \text{panjang reaktor model} / \text{panjang reaktor sebenarnya}$$

Supaya berbagai persamaan di atas bisa diselesaikan maka perlu dihitung pula parameter sifat fisik dan transportasi fluida. Parameter tersebut diantaranya adalah koefisien disperse aksial unggul tetap, koefisien difusivitas molekuler campuran, kecepatan interstisi serta koefisien transfer massa di lapisan film.

- Koefisien dispersi aksial unggul tetap (Wen dkk 1975)

Koefisien ini bertujuan menghitung fluks dispersi pada fluida ruah di reaktor unggun tetap. Koefisien ini dihitung dengan persamaan

$$D_{dis,i} = \left( \frac{0.5}{1 + 9.5 \frac{\varepsilon_{bed}}{Re Sc}} + \frac{0.75 \varepsilon_{bed}}{Re Sc} \right) v d_p \quad (4.9)$$

dimana,

$D_{dis,i}$  = koefisien dispersi spesi i

$\varepsilon_{bed}$  = porositas unggun

$\nu$  = viskositas kinematik

$d_p$  = diameter katalis

$Re Sc$  = perkalian bilangan reynold dan schmidt fluida

- Koefisien difusi molekular campuran (Wilke)

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. Namun karena molekul suatu spesi berdifusi ke campuran maka diperlukan penentuan koefisien difusi campuran.

$$D_{i,m} = \frac{1 - y_i}{\sum_j D_{i,j}} \quad (4.10)$$

dimana,

$D_{i,j}$  = koefisien difusivitas i,j

$y_i$  = fraksi mol i di fluida ruah

- Kecepatan interstisi fluida

Fluida ruah memiliki kecepatan awal yaitu kecepatan umpan. Kecepatan umpan ini adalah kecepatan superfisial. Kecepatan ini merupakan kecepatan superfisial karena diukur pada saat belum ada unggun. Ketika ada unggun kita perlu melakukan koreksi terhadap kecepatan superfisial ini supaya bias menjadi kecepatan

interstisial. Selanjutnya kecepatan interstisial ini perlu dikoreksi sesuai persamaan gas ideal.

$$u_{\text{intfeed}} = u_{\text{supfeed}} / \varepsilon_{\text{bed}} \quad (4.11)$$

$$u = u_{\text{intfeed}} \frac{C}{C_{\text{feed}}} \frac{P_{\text{feed}}}{P} \quad (4.12)$$

dimana,

$u$  = kecepatan fluida interstisi

$u_{\text{intfeed}}$  = kecepatan intersiti umpan

- Koefisien difusi molekular biner (Fuller)

Difusivitas atau koefisien difusi merupakan konstanta proporsional antara fluks molar karena difusi molekul dan gradien konsentrasi dari suatu campuran. Koefisien ini berguna untuk menghitung koefisien difusivitas campuran dengan persamaan Wilke di atas.

$$D_{i,j} = \frac{0.0103T^{1.75} \left( \frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{0.5}}{P \left( V_i^{\frac{1}{3}} + V_j^{\frac{1}{3}} \right)^2} \quad (4.13)$$

dimana,

$P$  = tekanan

$D_{i,j}$  = koefisien difusivitas

$M_i$  = massa molekul relatif

$T$  = suhu

$V_i$  = volume yang dipakai spesi  $i$

- Koefisien transfer massa lapisan film

Koefisien transfer massa di lapisan film bertujuan untuk menentukan besarnya difusi massa pada lapisan film. Semakin besar koefisien transfer massa lapisan film maka semakin besar pula fluks massa yang berdifusi dari katalis ke fluida ruah reaktor maupun sebaliknya. Untuk menghitung nilai ini diperlukan bilangan Reynold, Sherwood dan Nusselt. Bilangan Reynold menyatakan rasio gaya inersia akibat kecepatan terhadap gas viskos. Sedangkan bilangan Schmidt



menyatakan rasio difusifitas momentum dan difusifitas massa. Lalu kita memerlukan bilangan Sherwood untuk menghitung koefisien transfer massa lapisan film.

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_{im}} = 2 + 0.6Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (4.14)$$

$$Re = \frac{\rho d_p u}{\mu} \quad (4.15)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{im}} \quad (4.16)$$

- 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.

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.17)$$

dimana,

$\mu_m$  = viskositas campuran

$\mu_i$  = viskositas komponen  $i$

$y_i$  = fraksi mol komponen  $i$

$M_i$  = massa molekul relatif komponen

- 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

$$\rho_b = \frac{p * M}{R * T} \quad (4.18)$$

dimana,

$\rho_b$  = densitas

$M$  = massa molekul relatif

$R$  = konstanta ksetimbangan gas

#### 4.1.1.2 Neraca Energi Skala Reaktor

Untuk neraca energi reaktor pada arah aksial dapat dinyatakan dengan persamaan berikut:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{(Laju Energi)} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{(Laju Energi)} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{konvektif aksial}} + \left[ \begin{array}{c} \text{(Laju Energi)} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{(Laju Energi)} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{dispersif aksial}} - \left[ \begin{array}{c} \text{Laju Generasi} \\ \text{Energi} \end{array} \right] = 0 \quad (4.19)$$

Sesuai dengan kontrol volume pada neraca massa skala reaktor, bentuk persamaan matematis dari persamaan di atas dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\left[ \pi^2 (\rho c_p T) v_z \right]_z + \left[ \pi^2 q_i \right]_z - \left[ \pi^2 (\rho c_p T) v_z \right]_{z+\Delta z} - \left[ 2\pi^2 q_i \right]_{z+\Delta z} + \pi^2 \Delta z h_g a_p (T_f - T_s) = 0 \quad (4.20)$$

dengan  $z$  adalah jarak untuk arah aksial. Masing-masing suku di atas mewakili fenomena konvektif aksial, dispersif aksial dan generasi energi

Dari persamaan di atas dapat dilihat bahwa neraca massa dievaluasi pada posisi  $z$  dengan interval sebesar  $\Delta z$ . Tinjauan dengan interval ini dimaksudkan agar neraca massa dapat ditinjau pada kondisi tertentu yang dapat dihitung.

Selanjutnya persamaan di atas ditransformasikan ke dalam bentuk fluks di mana :

Fluks energi = (Kecepatan Aliran Massa / Luas Bidang).

Untuk itu maka persamaan di atas dibagi dengan  $\pi r^2 (\Delta z)$  Maka persamaan di atas menjadi :

$$\left[ \frac{\pi^2 \left( (\rho c_p T)_{z+\Delta z} - (\rho c_p T)_z \right)}{\pi^2 \Delta z} \right] + \left[ \frac{\pi^2 \left( q_{i,z}|_{z+\Delta z} - q_{i,z}|_z \right)}{\pi^2 \Delta z} \right] + \left[ \frac{\pi^2 \Delta z h_g a_p \Delta T}{\pi^2 \Delta z} \right] = 0 \quad (4.21)$$

Dengan menggunakan teori limit di mana  $\Delta z$  mendekati nol maka persamaan di atas dapat dituliskan dalam persamaan diferensial sebagai berikut :

$$\left( \frac{\partial (\rho c_p T)_z}{\partial z} \right) + \left( \frac{\partial q_{i,z}}{\partial z} \right) + h_g a_p \Delta T = 0 \quad (4.22)$$

Lalu substitusi nilai,

$$q_{i,z} = -k_{dis} \frac{\partial T_f}{\partial z} \quad (4.23)$$

Maka persamaan menjadi :

$$\frac{\partial T_f u_{int}}{\partial z} + k_{dis} \left[ \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} \right] + h_g a_p (T_f - T_s) = 0 \quad (4.24)$$

1                      2                      3

Di mana :

1. Aksial konvektif
2. Aksial dispersif
3. Transfer energi lapisan film

Selain itu kita perlu melakukan proses pentakdimensial variabel arah aksial. Pentakdimensial arah aksial memudahkan saat variasi panjang reaktor. Dengan menggunakan bilangan pentakdimensial, maka tidak diperlukan penggantian geometri reaktor secara terus menerus untuk setiap variasi panjang reaktor. Jika digunakan faktor parameter pentakdimensial  $\omega$  persamaan di atas menjadi

$$\omega \frac{\partial T_f u_{int}}{\partial z} + \omega k_{dis} \left[ \frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} \right] + h_g a_p (T_f - T_s) = 0 \quad (4.25)$$

1                      2                      3

dengan

$\omega$  = panjang reaktor model/ panjang reaktor sebenarnya

Supaya persamaan di atas bisa diselesaikan maka perlu dihitung pula parameter sifat fisik dan transportasi fluida. Parameter tersebut diantaranya adalah konduktivitas fluida, kecepatan ruah fluida serta koefisien transfer panas di lapisan batas. Konduktivitas gas dihitung dengan persamaan Eucken. Sedangkan untuk koefisien transfer energi digunakan bilangan Nusselt, Reynold dan Prandtl.

- Koefisien Dispersi Energi Aksial Unggun Tetap (Dixon, 1986)  
Koefisien ini bertujuan menghitung fluks dispersi pada fluida ruah di reaktor ungun tetap. Koefisien ini dihitung dengan persamaan

$$k_{dis} = \left( \frac{k_f}{u\rho_f c_{pf} d_p} + \frac{\frac{k_{as}}{k_f}}{Re Pr} + \frac{u\rho_f c_{pf}}{ah_g d_p} \right) u\rho_f c_{pf} d_p \quad (4.26)$$

dimana,

$k_f$  = konduktivitas fluida

$k_{as}$  = konduktivitas katalis

$Re Pr$  = perkalian bilangan reynold dan prandtl fluida

- 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.

$$k = \mu_m \left( C_p + \frac{5 * R}{4 * M} \right) \quad (4.27)$$

dimana,

$k$  = konduktivitas termal

$\mu_m$  = viskositas campuran

$C_p$  = kapasitas panas

$R$  = konstanta 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.

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i * x_i + Cp_j * x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.28)$$

dimana,

$Cp_{mix}$  = kapasitas panas campuran

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

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

$Mr_{mix}$  = massa molekul relatif campuran

- Koefisien transfer energi lapisan film

Koefisien transfer energi di lapisan film bertujuan untuk menentukan besarnya difusi energi pada lapisan film. Semakin besar koefisien transfer energi lapisan film maka semakin besar pula fluks energi yang berdifusi dari katalis ke fluida ruah reaktor maupun sebaliknya. Untuk menghitung nilai ini diperlukan bilangan Reynold, Prandtl dan Nusselt. Bilangan Reynold menyatakan rasio gaya inersia akibat kecepatan terhadap gas viskos. Sedangkan bilangan Prandtl menyatakan rasio difusifitas momentum dan difusifitas termal. Lalu kita memerlukan bilangan Nusselt untuk menghitung koefisien transfer energi lapisan film.

$$Nu = \frac{h_g d_p}{k} = 2 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3} \quad (4.29)$$

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k} \quad (4.30)$$

#### 4.1.1.3 Neraca Momentum

Neraca momentum dimodelkan dengan persamaan Ergun yang dapat memodelkan penurunan tekanan sepanjang reaktor. Pada pemodelan ini tidak digunakan neraca momentum *Navier Stokes* karena jumlah katalis yang banyak akan menyulitkan penyelesaian jika digunakan neraca momentum untuk tiap katalis. Selain itu penggunaan neraca momentum memerlukan penggambaran geometri tiap

katalis yang kurang efisien. Persamaan Ergun untuk menghitung penurunan tekanan adalah

$$\frac{dP}{dx} = \left( -\frac{\rho u}{\rho g_c D_p} \right) \frac{(1-\varphi)}{\varphi^3} \left[ \frac{150(1-\varphi)\mu}{D_p} + 1.75\rho\mu \right] \quad (4.31)$$

Persamaan ini setelah dimasukkan bilangan pentakdimensian menjadi

$$\frac{dP}{dx} = \left( -\frac{\rho u}{\rho g_c D_p} \right) \frac{(1-\varphi)}{\varphi^3} \left[ \frac{150(1-\varphi)\mu}{D_p} + 1.75\rho\mu \right] \frac{1}{\omega} \quad (4.32)$$

#### 4.1.2 Lapisan Film (Perpindahan Antar Fasa)

Interaksi antara skala reaktor dan skala partikel katalis terjadi melalui sebuah lapisan film yang merupakan media perpindahan massa antara fasa gas di skala reaktor dengan fasa padatan di partikel katalis. Melalui lapisan film inilah terjadi kesetimbangan antara suku perpindahan antar fasa di skala reaktor dengan fluks difusif yang berada di permukaan katalis (skala partikel). Selain itu juga terjadi perpindahan energi antara fasa gas dan padatan. Pada lapisan film ini juga terjadi suatu tahanan yang disebut sebagai tahanan film. Tahanan inilah yang menyebabkan terjadinya gradien konsentrasi dan temperatur di lapisan film.

##### 4.1.2.1 Neraca Massa di Lapisan Film

Neraca massa di lapisan film mewakili transfer massa antar massa antara skala reaktor dan skala partikel katalis. Persamaan inilah yang menyebabkan profil di skala reaktor juga dipengaruhi oleh perubahan profil di skala katalis.

Transfer massa antar fasa skala reaktor = Fluks difusif di permukaan katalis

Persamaan ini diuraikan lebih lanjut menjadi persamaan sebagai berikut :

$$\underbrace{k_g a(C_i - C_{i,s})}_1 = \underbrace{-D_{eff} \frac{dC_{i,s}}{dr}}_2 \quad (4.33)$$

Dengan nilai  $r_p = \frac{d_p}{2}$

Keterangan :

1. Transfer massa antar fasa

2. Fluks difusif

#### 4.1.2.2 Neraca Energi Panas di Lapisan Film

Pada lapisan film ini terjadi pertukaran panas antara fasa gas melewati lapisan film menuju fasa padatan partikel katalis. Reaksi yang bersifat endotermis pada dekomposisi metana, membutuhkan panas yang kemudian ditransfer oleh fasa gas skala reaktor melalui lapisan film ini.

Bentuk persamaan matematis neraca energi pada lapisan film adalah sebagai berikut :

Transfer energi antar fasa skala reaktor = fluks difusif di permukaan katalis

Persamaan diuraikan lebih lanjut menjadi persamaan sebagai berikut :

$$\underbrace{ha(T - T_s)}_1 = \underbrace{-K_s a \frac{dT_s}{dr}}_2 \quad (4.34)$$

dengan nilai  $r_p = \frac{d_p}{2}$

keterangan :

1. Transfer energi antar fasa
2. Fluks konduktif

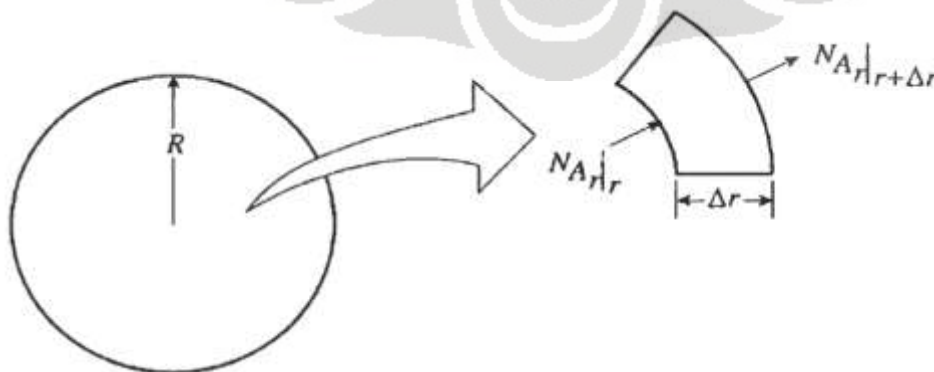
#### 4.1.3 Skala Partikel Katalis

Setelah reaktan melalui lapisan film terjadi reaksi di permukaan pori-pori katalis. Di skala partikel ini terjadi konsumsi atau generasi massa akibat adanya reaksi dan terdapat pengaruh difusi yang menyebabkan profil konsentrasi berubah-ubah sepanjang jari-jari partikel katalis.

##### 4.1.3.1. Neraca Massa Skala Partikel Katalis

Partikel katalis berbentuk silinder dengan jari-jari  $r_p$ . Persamaan umum neraca massa skala partikel katalis adalah sebagai berikut :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Massa} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Massa} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{difusi radial}} - \left[ \begin{array}{c} \text{Generasi} \\ \text{Massa} \end{array} \right] = 0 \quad (4.35)$$



Gambar 4.2 Kontrol Volume Skala Katalis

Supaya persamaan tersebut dapat diselesaikan maka perlu dibuat kontrol volume sesuai gambar diatas. Bentuk persamaan matematisnya menjadi :

$$\left[4\pi r^2 J_{i,p}\right]_r - \left[4\pi(r+\Delta r)^2 J_{i,p}\right]_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 \Delta r \Sigma R_j \quad (4.36)$$

Persamaan di atas kemudian dibagi dengan  $4\pi\Delta r$  dengan limit  $\Delta r$  mendekati nol.

Persamaan di atas menjadi

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\left[r^2 J_{i,p}\right]_r - \left[r^2 J_{i,p}\right]_{r+\Delta r}}{\Delta r} + r^2 \Sigma R_j \quad (4.37)$$

$$\frac{d(r^2 J_{i,p})}{dr} + r^2 \Sigma R_j \quad (4.38)$$

Setelah itu substitusi,

$$J_{i,p} = -D_{eff} \frac{\partial C_{i,p}}{\partial r} \quad (4.39)$$

persamaan menjadi :

$$\frac{1}{r^2} D_{eff} \left( \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dC_{i,p}}{dr} \right) \right) + \Sigma R_i = 0 \quad (4.40)$$

Supaya model ini dapat diselesaikan maka diperlukan persamaan fisik transportasi fluida di katalis. Parameter tersebut adalah difusifitas efektif fluida di katalis. Parameter ini dihitung dengan persamaan korelasi yang diajukan oleh Spechia dkk (4.34).

$$D_{eff} = \frac{u_{int} d_p}{8.65 \left[ 1 + 19.4 \left( \frac{d_p}{d_r} \right)^2 \right]} \quad (4.41)$$

#### 4.1.3.2. Neraca Energi Panas Skala Partikel Katalis

Persamaan umum neraca massa skala partikel katalis adalah sebagai berikut :

$$\left[ \begin{matrix} \text{Energi} \\ \text{Masuk} \end{matrix} \right] - \left[ \begin{matrix} \text{Energi} \\ \text{Keluar} \end{matrix} \right]_{\text{difusi radial}} - \left[ \begin{matrix} \text{Generasi} \\ \text{Energi} \end{matrix} \right] = 0 \quad (4.42)$$

Supaya persamaan tersebut dapat diselesaikan maka perlu dibuat kontrol volume sesuai neraca massa di katalis sebelumnya. Bentuk persamaan matematisnya menjadi :



$$\left[4\pi r^2 q_{i,p}\right]_r - \left[4\pi(r+\Delta r)^2 q_{i,p}\right]_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 \Delta r \sum \Delta H_j R_j \quad (4.44)$$

Persamaan di atas kemudian dibagi dengan  $4\pi\Delta r$  dengan limit  $\Delta r$  mendekati nol.

Persamaan di atas menjadi

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\left[r^2 q_{i,p}\right]_r - \left[r^2 q_{i,p}\right]_{r+\Delta r}}{\Delta r} + r^2 \sum \Delta H_j R_j \quad (4.45)$$

$$\frac{d(r^2 q_{i,p})}{dr} + r^2 \sum \Delta H_j R_j \quad (4.46)$$

Setelah itu substitusi,

$$q_{i,p} = -k_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (4.47)$$

persamaan menjadi :

$$\frac{1}{r^2} k_{eff} \left( \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dT_p}{dr} \right) \right) + \sum \Delta H_j R_j = 0 \quad (4.48)$$

Supaya model ini dapat diselesaikan maka diperlukan persamaan fisik transportasi energi di katalis. Parameter tersebut adalah konduktivitas efektif fluida di katalis. Parameter ini dihitung dengan persamaan korelasi yang diajukan oleh Yagi dan Wakao (4-28).

$$k_{eff} = k(13 * 0.11 Pr Re) \quad (4.49)$$

#### 4.1.4. Kondisi Batas

Persamaan pada kondisi batas merupakan persamaan di titik di mana persamaan yang akan diselesaikan memiliki rentang minimal dan rentang maksimal di sepanjang intervalnya. Persamaan neraca dan energi yang telah diturunkan di atas merupakan persamaan diferensial parsial di mana terdapat masing-masing dua kondisi batas untuk masing-masing arah aksial dan radial. Batasan-batasan yang ditentukan berdasarkan spesifikasi kasus ini baik pada skala reaktor maupun skala partikel katalis, meliputi hal-hal berikut ini :

##### 4.1.4.1. Kondisi Batas Skala Reaktor

Pada arah aksial umpan masuk adalah tetap. Posisi umpan masuk berada pada  $z = 0$  dan temperatur masuk adalah konstan, sehingga berlaku hubungan :

pada  $z = 0$

$$\begin{aligned} C_A &= C_{A,in} \\ T_A &= T_{in} \end{aligned} \quad (4.50)$$

Kondisi batas untuk neraca energi dan massa pada skala reaktor analog satu sama lain.

Untuk kondisi batas di posisi lainnya berlaku hubungan bahwa turunan pertama di posisi tersebut adalah nol. Hubungan ini berarti bahwa pada posisi tersebut diasumsikan sudah tidak ada gradien konsentrasi dan temperatur.

Pada  $z = L$  :

$$\begin{aligned} dC_A/dz &= 0 \\ dT/dz &= 0 \end{aligned} \quad (4.51)$$

#### 4.1.4.2 Kondisi Batas Skala Partikel Katalis

Kondisi batas pada skala ini terdapat pada pusat dan permukaan katalis. Pada posisi pusat katalis diasumsikan tidak terjadi lagi perubahan konsentrasi dengan kata lain gradien konsentrasi adalah nol, begitu juga yang terjadi pada neraca energi. Persamaan kondisi batasnya adalah sebagai berikut :

Pada  $r_p = 0$  :

$$\begin{aligned} dC_{A,s}/dr_p &= 0 \\ dT/dr_p &= 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

pada  $r_p = R_p$

$$\begin{aligned} D_{\text{eff}}(dC/dr_p) &= k(C_s - C) \\ k_{\text{eff}}(dT/dr_p) &= h(T_s - T) \end{aligned} \quad (4.53)$$

## 4.2 Pemodelan di Comsol

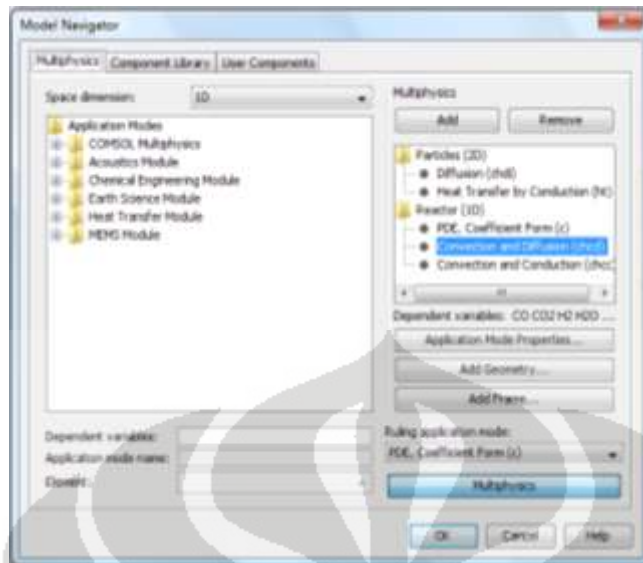
Pada bab ini dijelaskan bagaimana cara mengimplementasikan persamaan-persamaan model matematik yang sebelumnya telah diuraikan ke dalam Comsol.

### 4.2.1 Inisialisasi Comsol

Pada tahap ini kita menginisialisasi model kita dengan menentukan dimensi geometri sistem, menentukan variabel dependen serta memilih fenomena fisika yang terjadi. Geometri untuk reaktor adalah satu dimensi untuk menggambarkan arah aksial saja sedangkan untuk katalis berupa dua dimensi karena katalis menggambarkan fenomena fisika kearah radial katalis sepanjang aksial reaktor. Langkah-langkah inisialisasi model Comsol adalah

1. Membuka **Comsol Multiphysics**
2. Membuat Geometri dan memilih **2D** di daftar **Space dimension**
3. Mengisi nama *particles* pada kolom **Geometry Name**
4. Mengisi independen variabel  $x$   $r$   $z$  pada kolom isian
5. Memilih mode aplikasi **COMSOL Multiphysics>Chemical Engineering Module>Mass Transport>Diffusion**
6. Mengisi  $CO_p$   $CO2_p$   $CH3OH_p$   $CH3OCH3_p$   $H2_p$   $H2O_p$  pada kolom **dependent variable**
7. Memilih mode aplikasi **COMSOL Multiphysics>Chemical Engineering Module>Energy Transport>Conduction**
8. Mengisi  $T_{kat}$  pada kolom **dependent variable**
9. Membuat Geometri dan memilih **1D** di daftar **Space dimension**
10. Mengisi nama *Reactor* pada kolom **Geometry Name**
11. Mengisi independen variabel  $x$   $y$   $z$  pada kolom isian
12. Memilih mode aplikasi **COMSOL Multiphysics>Chemical Engineering Module>Mass Transport>Diffusion and Convection**
13. Mengisi  $CO$   $CO2$   $CH3OH$   $CH3OCH3$   $H2$   $H2O$  pada kolom **dependent variable**
14. Memilih mode aplikasi **COMSOL Multiphysics>Chemical Engineering Module>Energy Transport>Convection and Conduction**
15. Mengisi  $T$  pada kolom **dependent variable**
16. Mengklik tombol **Add**
17. Memilih mode aplikasi **COMSOL Multiphysics>PDE Modes>PDE Coefficient Form.**
18. Mengisi  $P$  pada kolom **Dependent Variable**

Hasil dari langkah ini terlihat di gambar di bawah

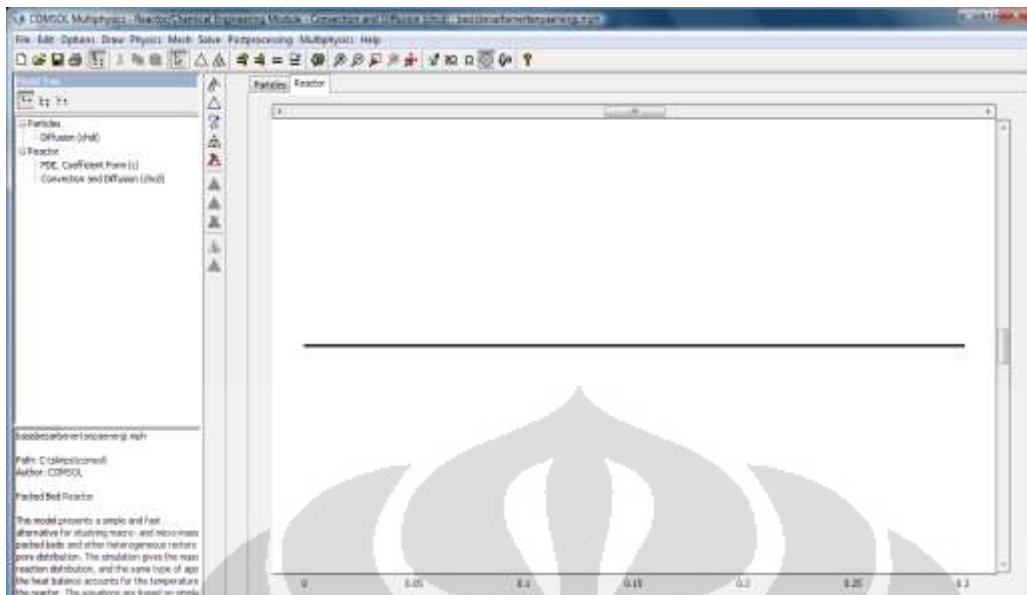


Gambar 4.3 Halaman *Model Navigator*

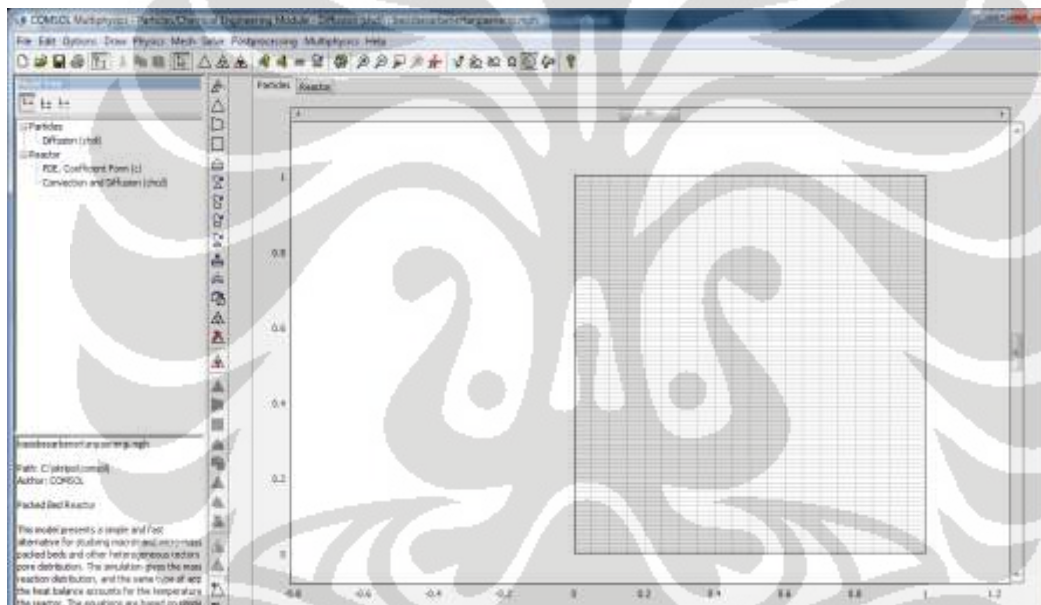
#### 4.2.2 Pemodelan Geometri

Pada tahap ini kita menggambarkan geometri untuk reaktor dan katalis. Reaktor memiliki geometri garis lurus sepanjang 0.3m. Panjang ini merupakan panjang reaktor awal sebelum divariasikan. Geometri katalis berupa persegi dengan panjang 1x1m. Dimensi geometri katalis karena dilakukan proses pentakdimensian seperti yang dijelaskan di bab 4.1 di atas. Langkah-langkah memodelkan geometri adalah :

1. Memilih geometri reaktor dari menu **multiphysics**
2. Membuat garis dengan **line tools** sepanjang 0.3m dari titik 0m
3. Memilih geometri katalis dari menu **multiphysics**
4. Membuat persegi dengan **square tools** seukuran 1mx1m



Gambar 4.4 Geometri Reaktor dalam Comsol



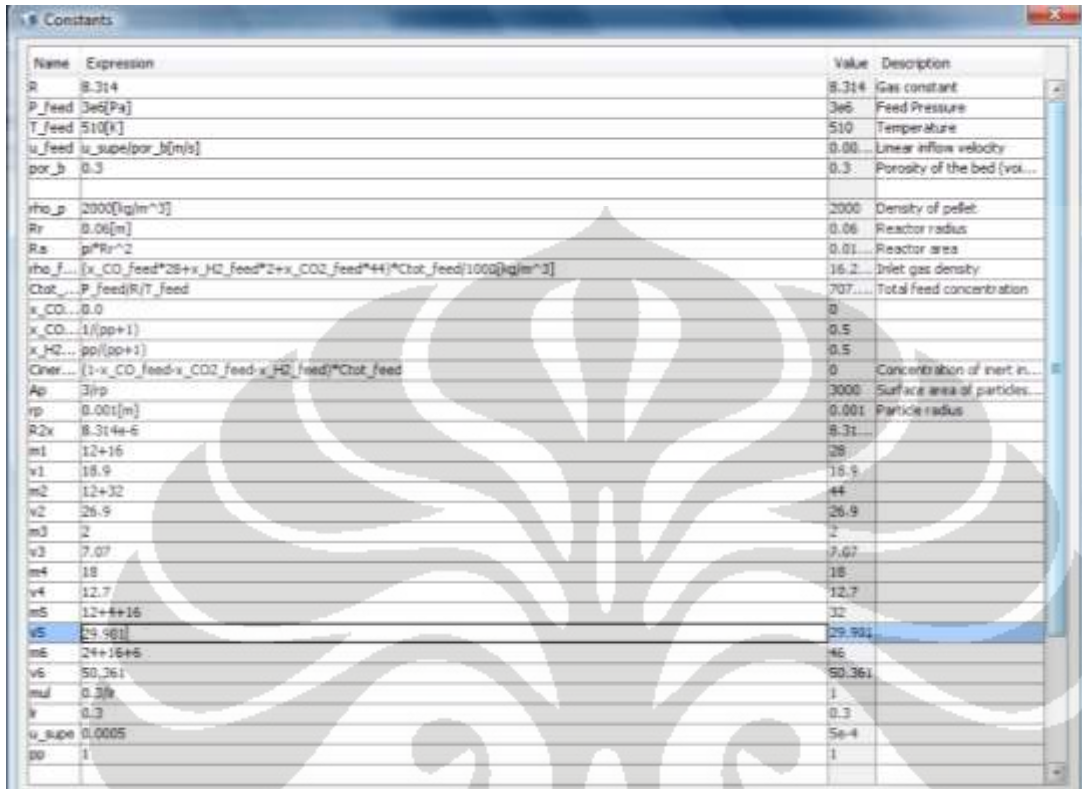
Gambar 4.5 Geometri Katalis dalam Comsol

#### 4.2.3 Pemodelan Parameter dan Persamaan Reaktor

Pada tahap ini dimodelkan berbagai konstanta dan persamaan untuk model reaktor unggul tetap. Konstanta berisi nilai-nilai yang besarnya tidak berubah. Konstanta ini berisi parameter reaktor, kondisi operasi reaktor dan konstanta dari persamaan lain yang menjelaskan persamaan reaktor. Sedangkan kolom ekspresi berupa persamaan yang nilainya berubah terus menerus sepanjang reaktor. Langkah-langkah memodelkan persamaan di Comsol adalah

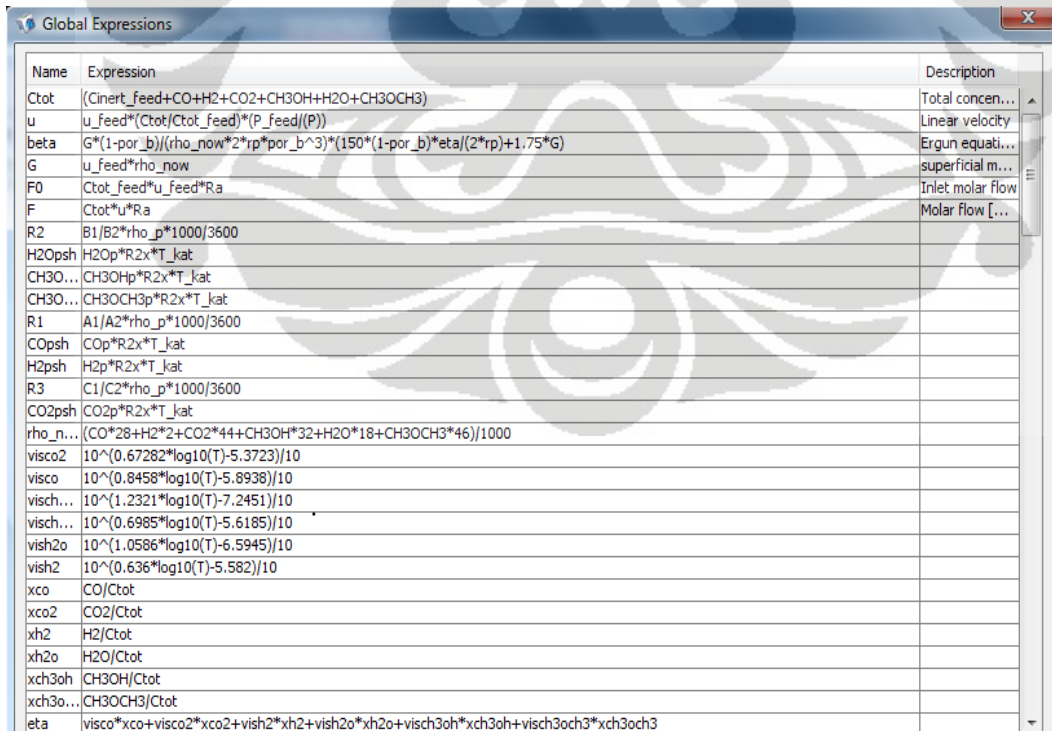
1. Memilih menu **options>Constants**
2. Memasukan nama konstanta di kolom **Name**, ekspresi di kolom **expression** dan deksripsi di kolom **description**

3. Memilih menu **options>Expressions>Global Expressions**
4. Memasukan nama konstanta di kolom **Name**, ekspresi di kolom **expression** dan deksripsi di kolom **description**



Name	Expression	Value	Description
R	8.314	8.314	Gas constant
P_feed	3e6[Pa]	3e6	Feed Pressure
T_feed	510[K]	510	Temperature
u_feed	u_supe[por_b][m/s]	0.00...	Linear inflow velocity
por_b	0.3	0.3	Porosity of the bed (vol...
rho_p	2000[kg/m^3]	2000	Density of pellet
Rr	0.06[m]	0.06	Reactor radius
Ra	pi*Rr^2	0.01...	Reactor area
rho_f...	(x_CO_feed*28+x_H2_feed*2+x_CO2_feed*44)*Ctot_feed/1000[kg/m^3]	16.2...	Inlet gas density
Ctot...	P_feed/R/T_feed	707....	Total feed concentration
x_CO...	0.0	0	
x_CO...	1/(pp+1)	0.5	
x_H2...	pp/(pp+1)	0.5	
Cinert...	(1-x_CO_feed-x_CO2_feed-x_H2_feed)*Ctot_feed	0	Concentration of inert in...
Ap	3/rp	3000	Surface area of particles
rp	0.001[m]	0.001	Particle radius
R2x	8.314e-6	8.31...	
m1	12+16	28	
v1	18.9	18.9	
m2	12+32	44	
v2	26.9	26.9	
m3	2	2	
v3	7.07	7.07	
m4	18	18	
v4	12.7	12.7	
m5	12+4+16	32	
v5	29.981	29.981	
m6	24+16+6	46	
v6	50.361	50.361	
mu	0.3[s]	1	
nu	0.3	0.3	
u_supe	0.0005	5e-4	
pp	1	1	

Gambar 4.5 Tabulasi Konstanta dalam Comsol



Name	Expression	Description
Ctot	(Cinert_feed+CO+H2+CO2+CH3OH+H2O+CH3OCH3)	Total concen...
u	u_feed*(Ctot/Ctot_feed)*(P_feed/(P))	Linear velocity
beta	G*(1-por_b)/(rho_now*2*rp*por_b^3)*(150*(1-por_b)*eta/(2*rp)+1.75*G)	Ergun equati...
G	u_feed*rho_now	superficial m...
F0	Ctot_feed*u_feed*Ra	Inlet molar flow
F	Ctot*u*Ra	Molar flow [...
R2	B1/B2*rho_p*1000/3600	
H2Opsh	H2Op*R2x*T_kat	
CH3O...	CH3Op*R2x*T_kat	
CH3O...	CH3OCH3p*R2x*T_kat	
R1	A1/A2*rho_p*1000/3600	
COpsh	COp*R2x*T_kat	
H2psh	H2p*R2x*T_kat	
R3	C1/C2*rho_p*1000/3600	
CO2psh	CO2p*R2x*T_kat	
rho_n...	(CO*28+H2*2+CO2*44+CH3OH*32+H2O*18+CH3OCH3*46)/1000	
visco2	10^(0.67282*log10(T)-5.3723)/10	
visco	10^(0.8458*log10(T)-5.8938)/10	
visch...	10^(1.2321*log10(T)-7.2451)/10	
visch...	10^(0.6985*log10(T)-5.6185)/10	
vish2o	10^(1.0586*log10(T)-6.5945)/10	
vish2	10^(0.636*log10(T)-5.582)/10	
xco	CO/Ctot	
xco2	CO2/Ctot	
xh2	H2/Ctot	
xh2o	H2O/Ctot	
xch3oh	CH3OH/Ctot	
xch3o...	CH3OCH3/Ctot	
eta	visco*xco+visco2*xco2+vish2*xh2+vish2o*xh2o+visch3oh*xch3oh+visch3och3*xch3och3	

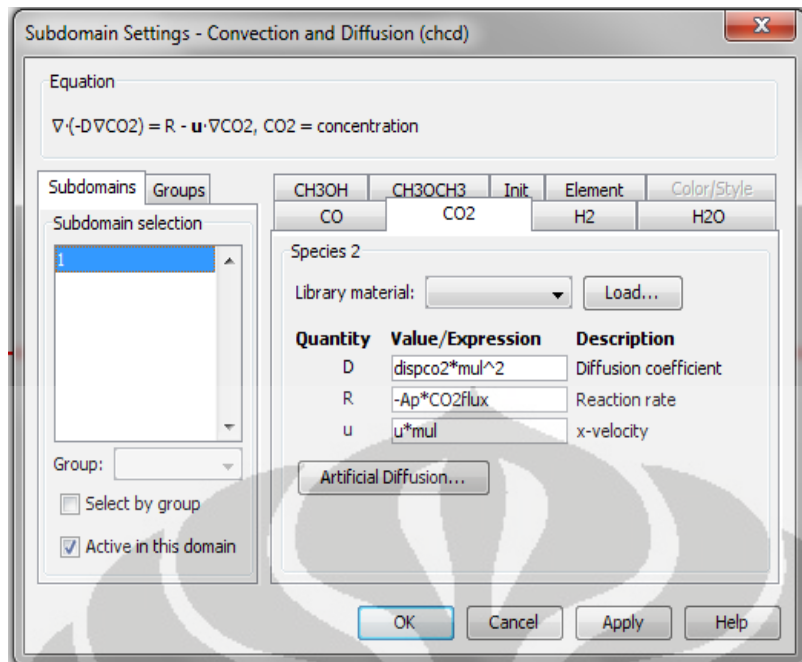
Gambar 4.6 Tabulasi Persamaan dalam Comsol

#### 4.2.4 Pemodelan Fenomena Reaktor Unggun Tetap

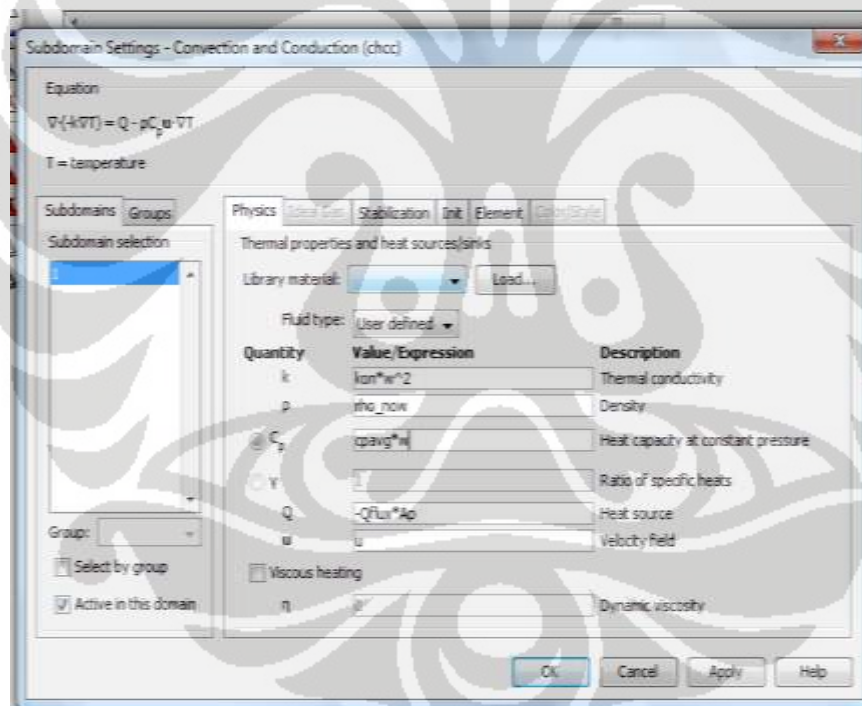
Pada tahap ini dimodelkan berbagai persamaan model reaktor dan katalis. Dalam memodelkan kita perlu mengeset *subdomain* dan *boundary condtions*. *Subdomain* berisi parameter berbagai macam persamaan fisika yang dipakai. Sedangkan *boundary conditions* berisi kondisi pada batas-batas fenomena fisika pada geometri yang diatur. Langkah-langkah memodelkan persamaan fisika di Comsol adalah

##### A Memodelkan *Subdomain*

1. Memilih fenomena **Reactor : Convection and Diffusion**
2. Masuk ke menu **Physics>Subdomain Settings**
3. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
4. Memilih fenomena **Reactor : Convection and Conduction**
5. Masuk ke menu **Physics>Subdomain Settings**
6. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
7. Memilih fenomena **Reactor : PDE Coefficient Form**
8. Masuk ke menu **Physics>Subdomain Settings**
9. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
10. Memilih fenomena **Particles : Diffusion**
11. Masuk ke menu **Physics>Subdomain Settings**
12. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
13. Memilih fenomena **Particles : Conduction**
14. Masuk ke menu **Physics>Subdomain Settings**
15. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah

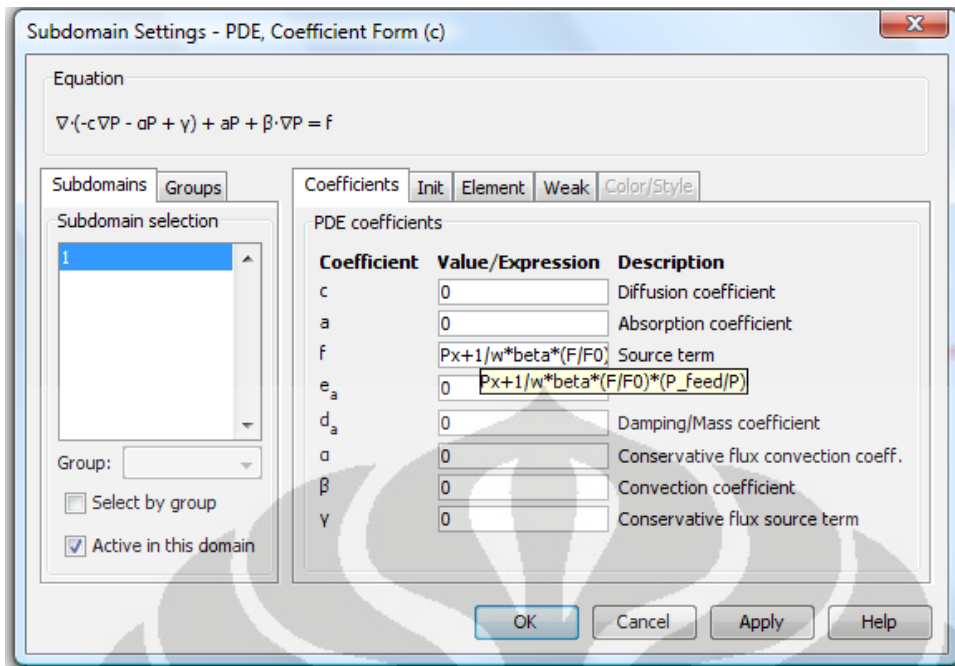


**Gambar 4.7** Jendela *Subdomain Convection and Diffusion*

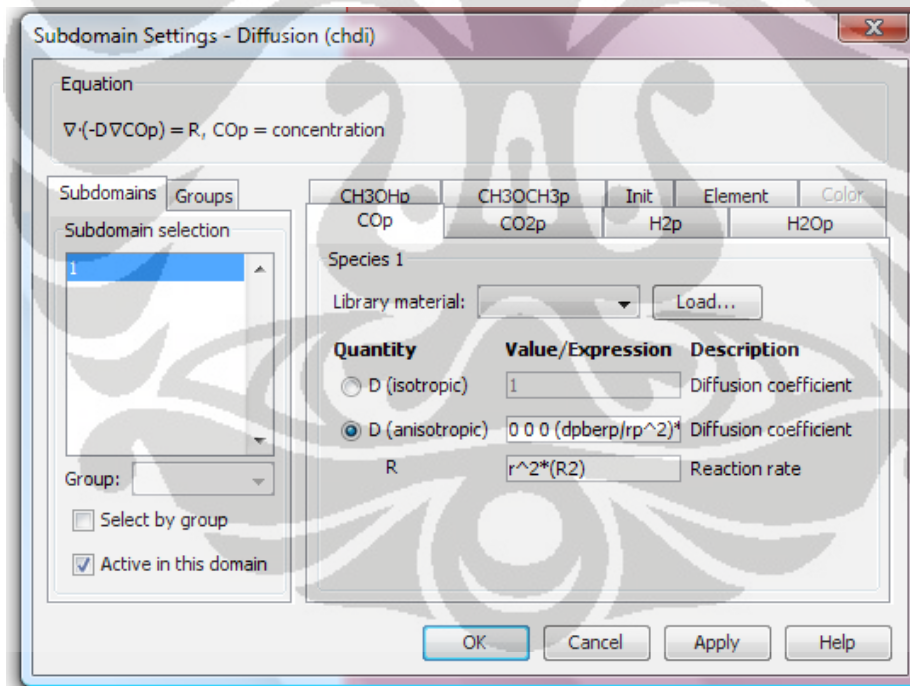


**Gambar 4.8** Jendela *Subdomain Convection and Conduction*

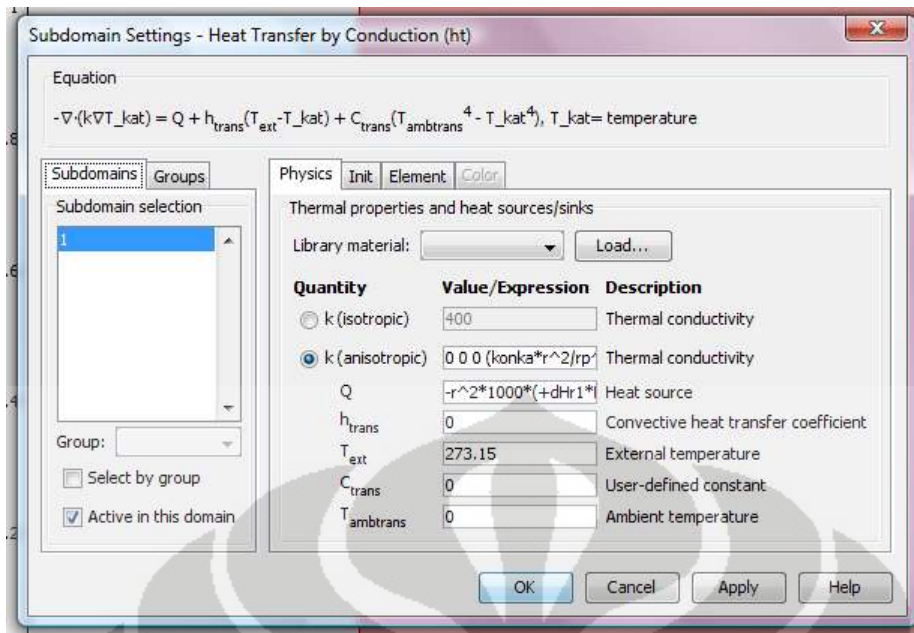




Gambar 4.9 Jendela Subdomain PDE Coefficient Form



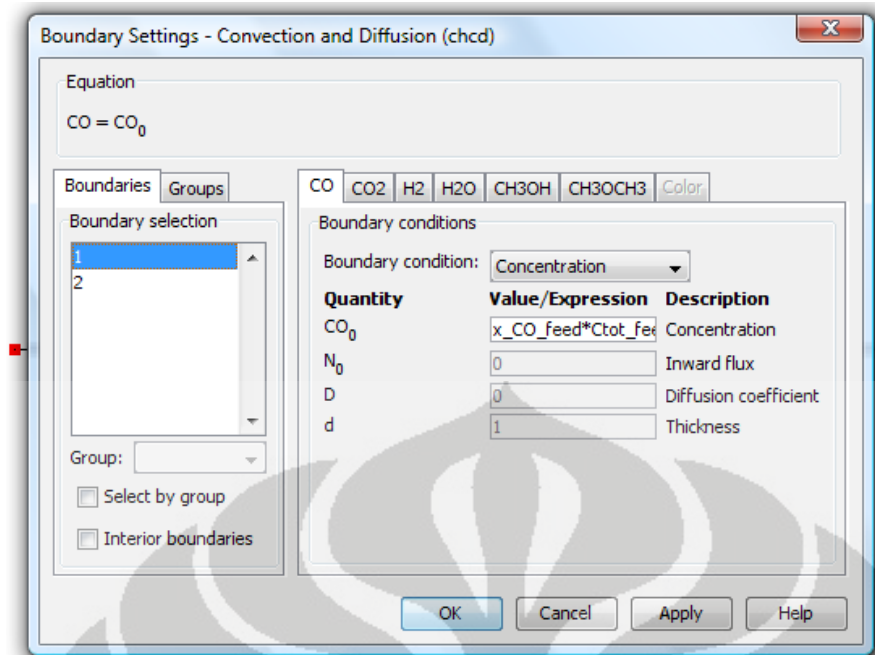
Gambar 4.10 Jendela Subdomain Diffusion



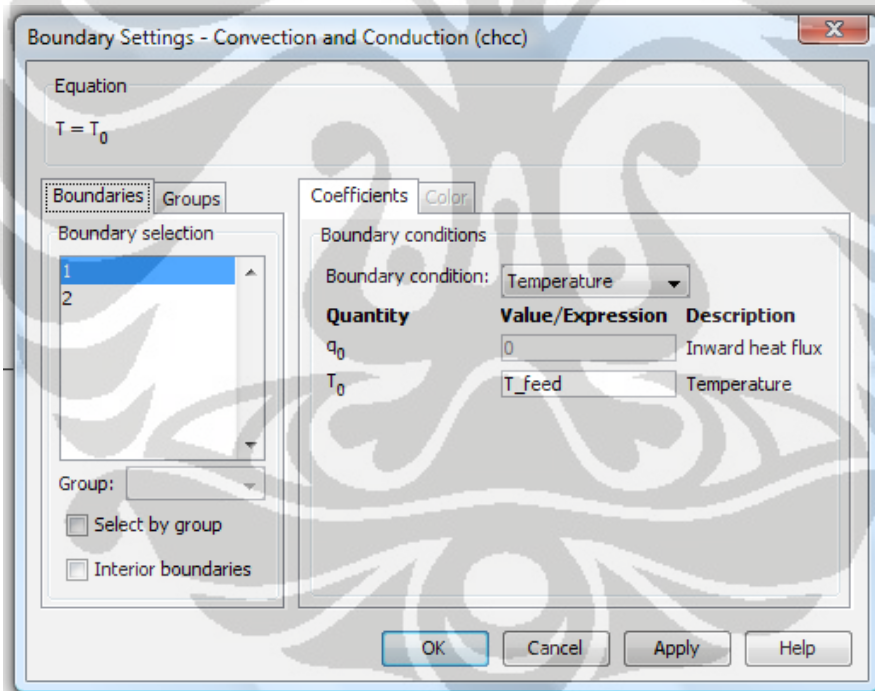
**Gambar 4.11** *Jendela Subdomain Conduction*

## B Memodelkan *Boundary Conditions*

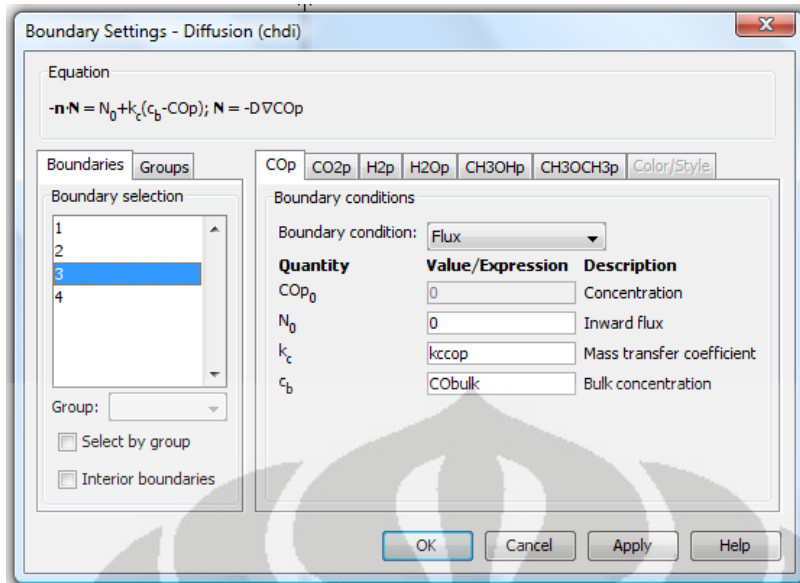
1. Memilih fenomena **Reactor : Convection and Diffusion**
2. Masuk ke menu **Physics>Boundary Settings**
3. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
4. Memilih fenomena **Reactor : Convection and Conduction**
5. Masuk ke menu **Physics>Boundary Settings**
6. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
7. Memilih fenomena **Reactor : PDE, coefficient Form**
8. Masuk ke menu **Physics>Boundary Settings**
9. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
10. Memilih fenomena **Particles : Diffusion**
11. Masuk ke menu **Physics>Boundary Settings**
12. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah
13. Memilih fenomena **Particles : Conduction**
14. Masuk ke menu **Physics>Boundary Settings**
15. Mengisi kolom sesuai gambar di bawah



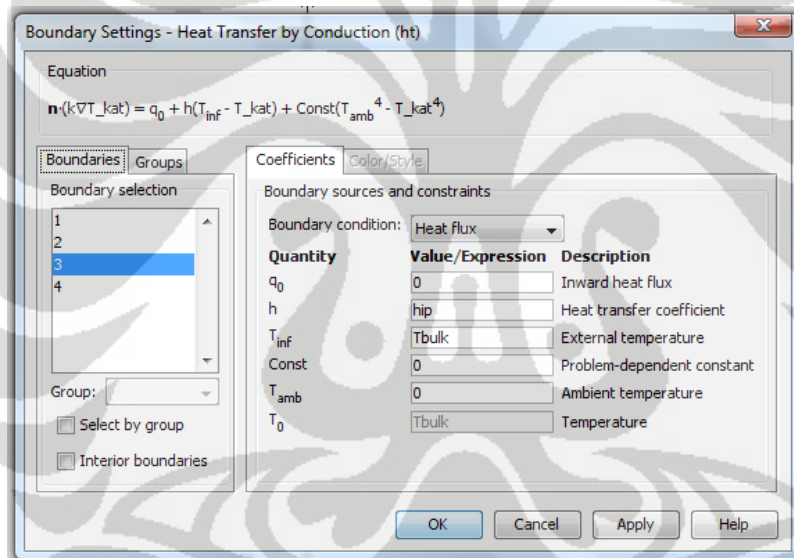
Gambar 4.12 Jendela *Boundary Condition 1 Convection and Diffusion*



Gambar 4.13 Jendela *Boundary Condition 1 Convection and Conduction*



Gambar 4.14 Jendela *Boundary Condition 3 Diffusion*



Gambar 4.15 Jendela *Boundary Condition 3 Conduction*

#### 4.2.5 Kalkulasi Solusi Persamaan

Tahap setelah membuat model dan menuliskan persamaan adalah kalkulasi persamaan. Kalkulasi persamaan ini menggunakan jenis *solver* yang disediakan Comsol. Jenis *solver* dipilih adalah *Parametric Stationary Segregated*. Jenis *parametric* dipilih karena kita bisa memvariasikan parameter reaksi lalu Comsol menghitung solusinya sekaligus. Hal ini bermanfaat ketika kita ingin mengetahui pengaruh suatu kondisi reaktor terhadap hasil reaksi. Jenis *stationary* karena model yang digunakan merupakan model tunak yang tidak bergantung terhadap waktu.

Jenis *segregated* karena jenis solver ini mampu menyelesaikan persamaan fisika secara tersegregasi, hal ini berarti bisa membuat solver bisa berpindah-pindah menyelesaikan persamaan fisika. Metode ini lebih lama dibandingkan yang tidak tersegregasi, tetapi metode segregasi menggunakan memori computer yang jauh lebih sedikit.

#### **4.2.6 Post-Processing**

Pada tahap ini kita mengolah data hasil simulasi ke dalam bentuk yang diinginkan. Dari data hasil simulasi didapatkan profil konsentrasi untuk setiap spesi baik di reaktor maupun di katalis. Kita bisa mengolah data tersebut menjadi data yang lebih mudah dianalisis yaitu konversi karbon dioksida dan *yield* DME. Konversi karbon dioksida menyatakan banyaknya karbon dioksida yang bereaksi. Namun, data konversi belum cukup karena karbon dioksida yang bereaksi dapat bereaksi juga membentuk karbon monoksida. Oleh karena itu kita memerlukan variabel lain yaitu *yield* DME. Data *yield* menyatakan banyaknya karbon dioksida yang terkonversi menjadi DME.

## BAB 5

### SIMULASI DAN PEMBAHASAN

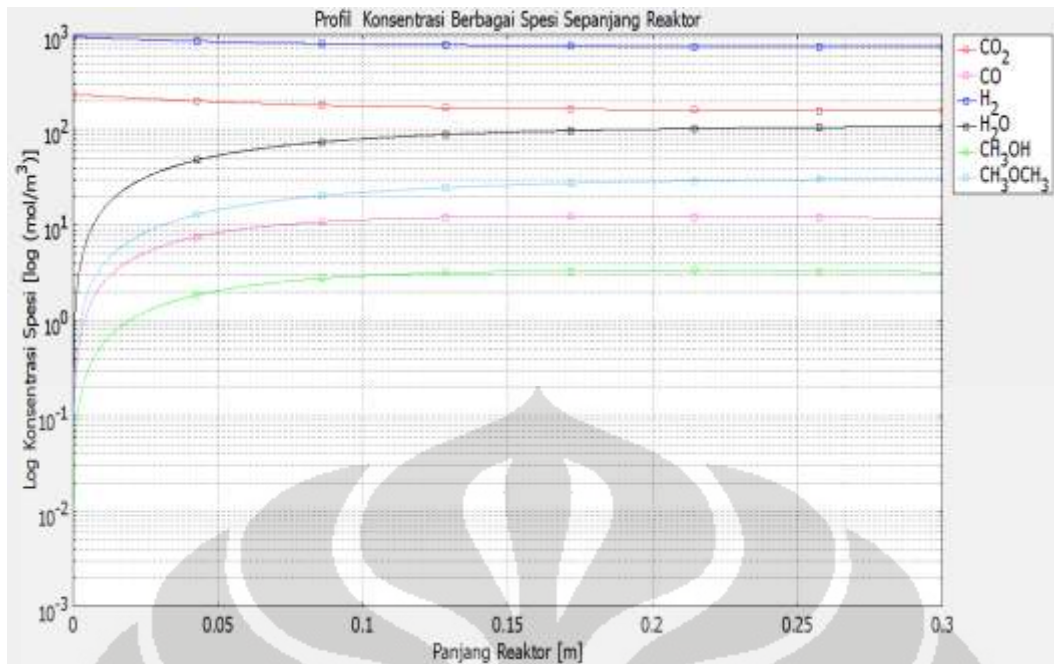
Pada bagian ini divariasikan berbagai kondisi operasi pada reaktor. Setelah itu akan dianalisis berbagai kondisi operator terhadap kinerja reaktor unggun tetap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi dimetil eter. Kondisi reaktor yang disimulasikan ditabulasikan pada tabel 5.1 di bawah.

Tabel 5.1 Kondisi Operasi Reaktor

<b>Kondisi Operasi</b>	
Temperatur umpan	400K-550K
Tekanan Umpan	$3 \times 10^6$ Pa – $7 \times 10^6$ Pa
Laju Alir Superfisial Umpan	$3 \times 10^{-4}$ – $1.1 \times 10^{-3}$ m/s
Rasio H <sub>2</sub> /CO <sub>2</sub> Umpan	1-5
<b>Geometri Reaktor</b>	
Radius Reaktor	0.06 m
Panjang Reaktor	0.3 m
<b>Data Katalis</b>	
Radius Katalis	0.007m-0.0007 m
Porositas	0.603
Turtuositas	3

#### 5.1 Profil Suhu Dan Konsentrasi Berbagai Spesi

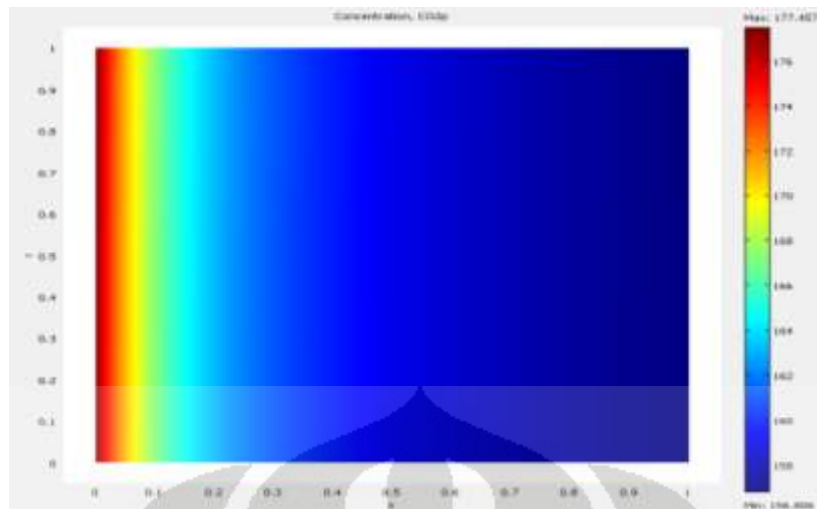
Simulasi reaktor unggun tetap menghasilkan profil konsentrasi berbagai spesi yang terlibat dalam reaksi sepanjang reaktor baik di fluida ruah maupun di dalam katalis. Profil konsentrasi spesi di sepanjang reaktor dengan kondisi operasi tekanan umpan  $5 \times 10^6$  Pa, suhu umpan 510K, rasio H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> 4, laju alir superfisial umpan  $5 \times 10^{-4}$  m/s dan radius partikel  $1 \times 10^{-3}$  m digambarkan pada grafik 5.1. Grafik 5.1 digunakan grafik logaritmik pada sumbu y karena perbedaan konsentrasi yang cukup besar antara spesi di reaktor.



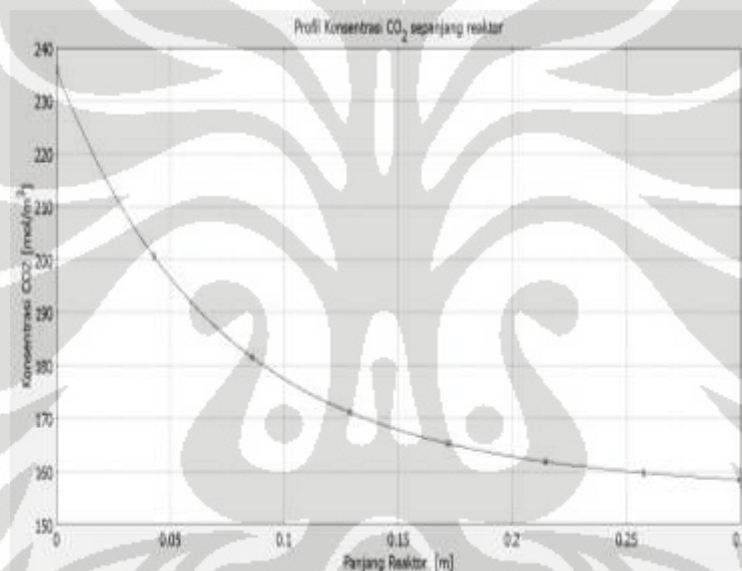
**Gambar 5.1.** Profil Konsentrasi Berbagai Spesi Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

Grafik 5.1 memperlihatkan berbagai konsentrasi spesi yang terlibat untuk kondisi operasi tekanan umpan  $5 \times 10^6$  Pa, suhu umpan 510K, rasio  $H_2/CO_2$  4 dan laju alir superfisial umpan  $5 \times 10^{-4}$  m/s. Grafik 5.1 di atas menggambarkan tipikal profil konsentrasi setiap spesi di reaktor. Grafik 5.1 menunjukkan bahwa spesi produk yaitu DME dan uap air meningkat konsentrasinya di reaktor sedangkan spesi reaktan yaitu karbon dioksida, gas hidrogen menurun konsentrasinya sepanjang reaktor. Spesi antara reaksi yaitu karbon monoksida dan metanol konsentrasinya meningkat sepanjang reaktor dari awalnya nol. Namun konsentrasi spesi antara tidak begitu meningkat terlalu tinggi, hal ini karena spesi antara ini mengalami konversi pada reaksi lanjutan.

### 5.1.1 Profil Spesi Karbon Dioksida



(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruang

**Gambar 5.2.** Profil Konsentrasi Karbon Dioksida Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510 K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

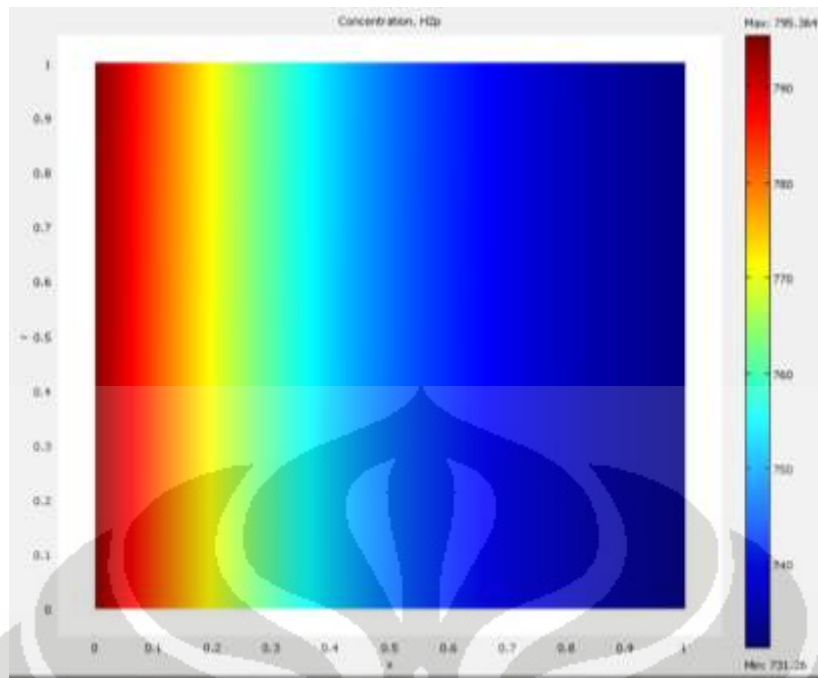
Reaktan dalam sistem reaksi ini adalah karbon dioksida dan gas hidrogen. Reaktan  $CO_2$  umumnya terkonversi sekitar 20-37% sepanjang reaktor. Konversi ini tidak terlalu besar. Hal ini karena sangat banyaknya uap air yang dihasilkan. Banyaknya uap air yang dihasilkan akan menghambat reaksi keseluruhan. Konversi gas karbon dioksida ini bisa mengikuti dua jalur yang ada yaitu karbon dioksida bereaksi menjadi metanol melalui reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol atau terkonversi menjadi gas karbon monoksida melalui reaksi *rwgs*. Reaksi pertama lebih menguntungkan karena mampu menghasilkan



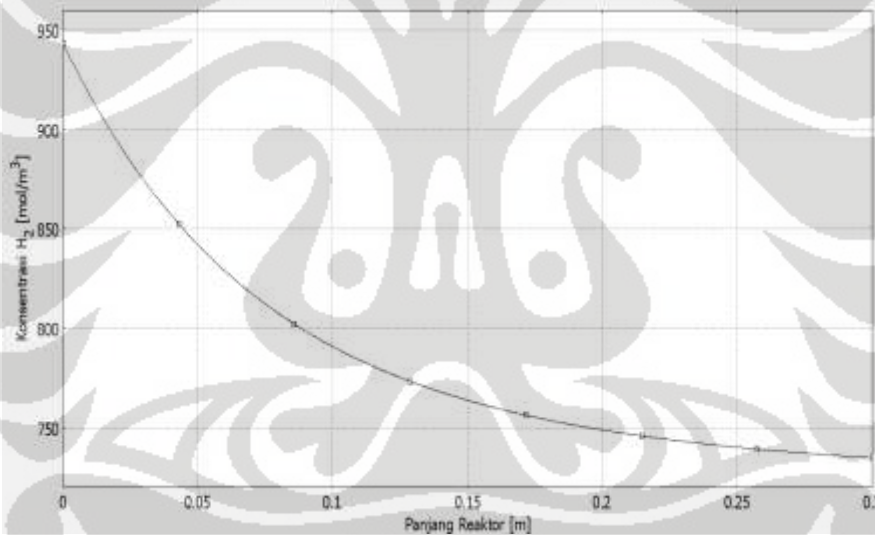
produk yang lebih bernilai yaitu DME. Perbandingan banyaknya jalur yang dipilih bergantung dari kondisi reaksi. Perbandingan kedua jalur ini akan terlihat pada *yield* DME.

Profil karbon dioksida baik di reaktor maupun di katalis memiliki nilai yang menurun sepanjang reaktor. Hal ini disebabkan karena karbon dioksida terkonversi dengan berbagai reaksi. Dari grafik di atas juga terlihat bahwa konsentrasi di katalis lebih kecil daripada di reaktor. Hal ini terjadi karena terjadi hambatan difusi lapisan film yang menghambat aliran spesi ke dalam atau ke luar katalis. Grafik di atas menunjukkan bahwa variasi konsentrasi karbon dioksida di arah radial katalis sangat kecil. Hal ini menunjukkan bahwa hambatan difusi lapisan film lebih besar daripada difusi intrakatalis.

### 5.1.2 Profil Spesi Hidrogen



(a) Di Katalis



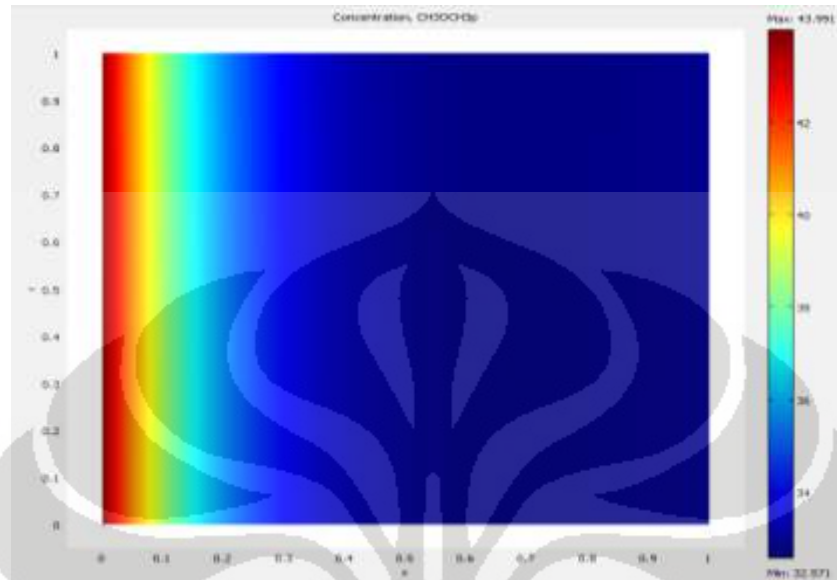
(b) Di Fluida Ruah

**Gambar 5.3.** Profil Konsentrasi  $H_2$  Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6 \text{ Pa}$ , Suhu Umpan  $510 \text{ K}$ , Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4} \text{ m/s}$  Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3} \text{ m}$

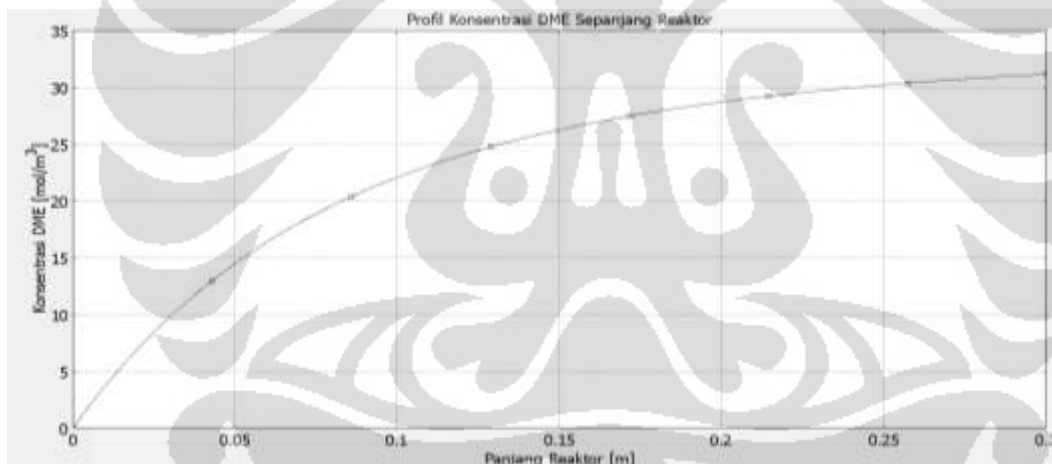
Profil gas hidrogen baik di reaktor maupun di katalis mirip seperti karbon dioksida yaitu memiliki nilai yang menurun sepanjang reaktor. Hal ini disebabkan karena gas hidrogen terkonversi dengan berbagai reaksi. Dari grafik di atas juga terlihat bahwa konsentrasi di katalis lebih kecil daripada di reaktor. Hal ini terjadi karena terjadi hambatan difusi lapisan film yang menghambat aliran spesi ke dalam atau ke luar katalis. Grafik di atas

menunjukkan bahwa variasi konsentrasi gas hidrogen di arah radial katalis sangat kecil. Hal ini menunjukkan bahwa hambatan difusi lapisan film lebih besar daripada difusi intrakatalis.

### 5.1.3 Profil Spesi Dimetil Eter



(a) Di Katalis



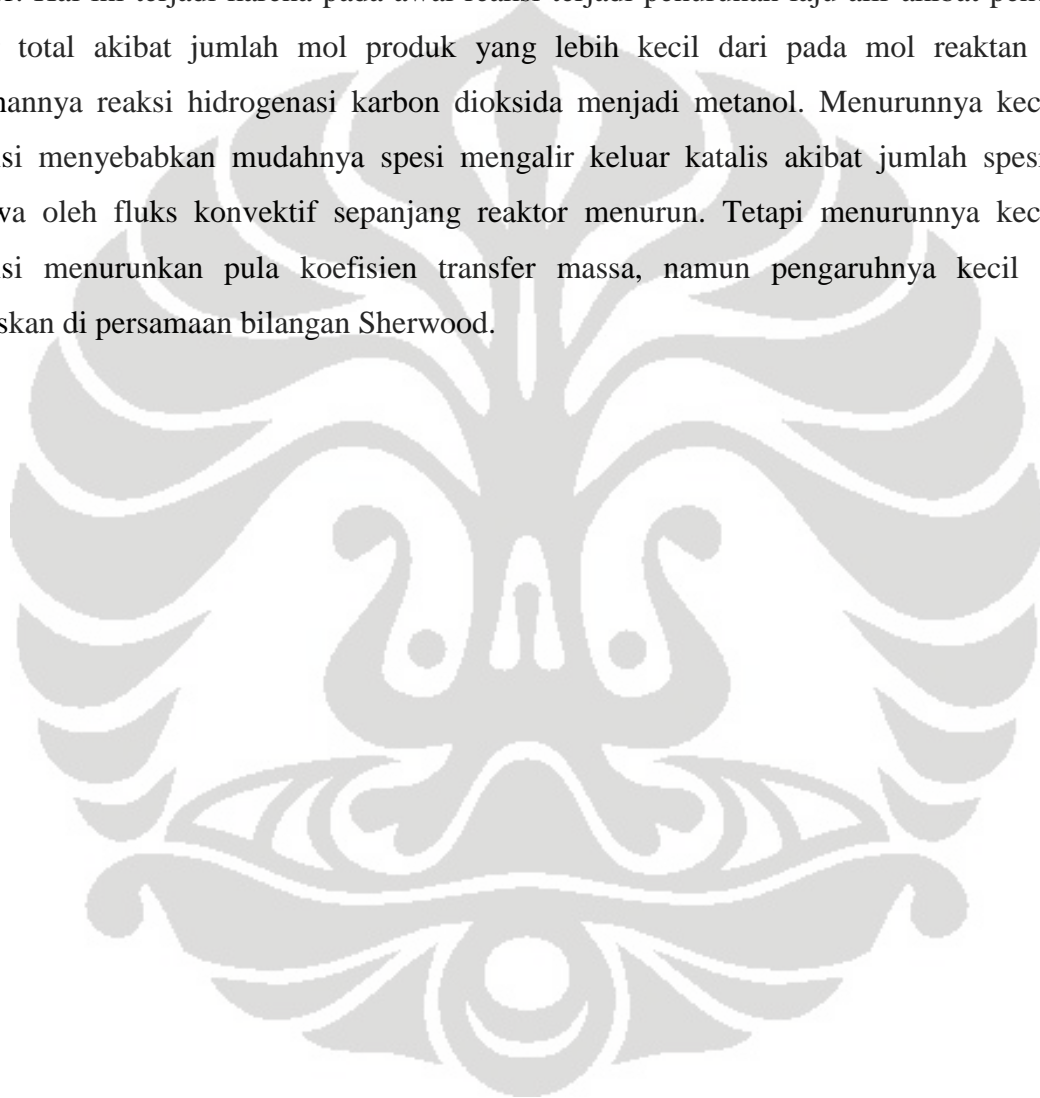
(b) Di Reaktor

**Gambar 5.4** Profil Konsentrasi DME Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

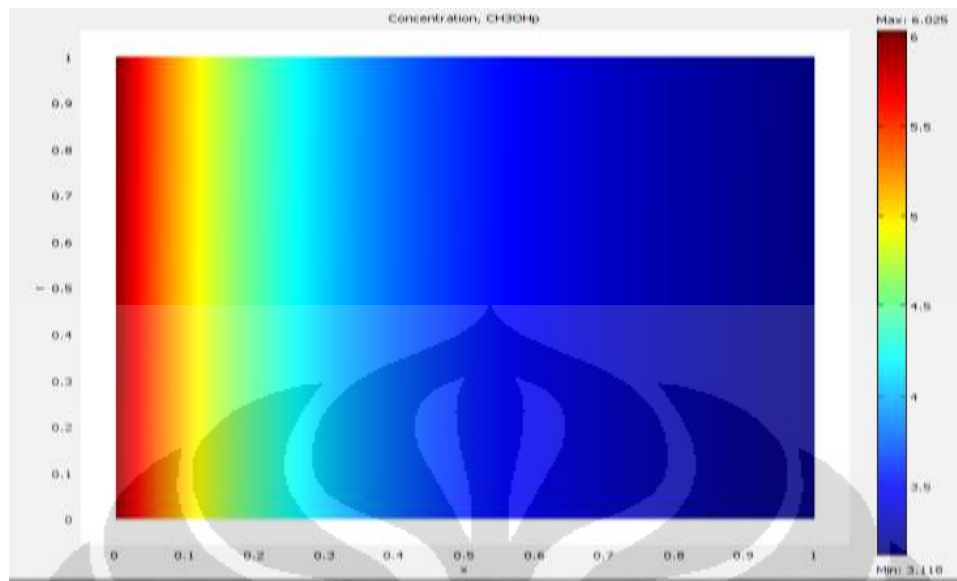
Dimetil eter merupakan produk kedua terbanyak yang dihasilkan. Produksi DME tidak sebanyak uap air karena DME hanya dihasilkan oleh satu reaksi. Produksi DME juga lebih banyak dibandingkan metanol karena metanol yang terbentuk akan terdehidrasi menjadi DME. Reaksi dehidrasi metanol merupakan reaksi yang cepat jadi banyak metanol yang terbentuk akan terkonversi menjadi DME. Reaksi pembentukan DME secara langsung merupakan kelebihan sintesis DME secara satu tahap. Hal ini mengakibatkan metanol yang

diproduksi langsung terkonversi sehingga tidak menghambat reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol secara termodinamika.

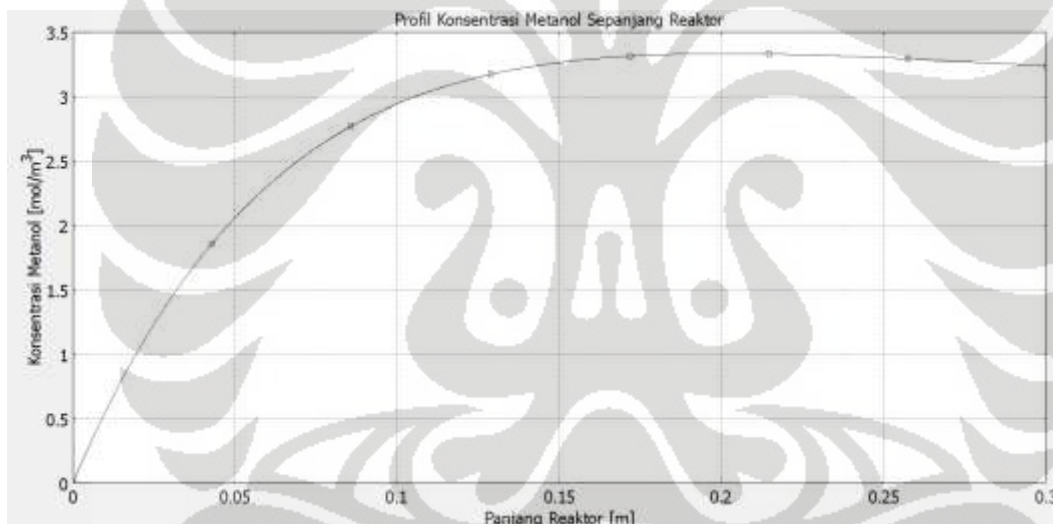
Gambar di atas menunjukkan tipikal profil DME di dalam pori-pori katalis. Gambar di atas menunjukkan bahwa konsentrasi DME di katalis lebih besar daripada di reaktor. Hal ini diakibatkan karena produk terhambat keluar dari katalis karena terhambat oleh difusi lapisan film. Profil DME dari gambar di atas menunjukkan tren yang menurun sepanjang reaktor reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaksi terjadi penurunan laju alir akibat penurunan molar total akibat jumlah mol produk yang lebih kecil dari pada mol reaktan akibat dominannya reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol. Menurunnya kecepatan intertisi menyebabkan mudahnya spesi mengalir keluar katalis akibat jumlah spesi yang terbawa oleh fluks konvektif sepanjang reaktor menurun. Tetapi menurunnya kecepatan intertisi menurunkan pula koefisien transfer massa, namun pengaruhnya kecil seperti dijelaskan di persamaan bilangan Sherwood.



### 5.1.4 Profil Spesi Metanol



(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruang

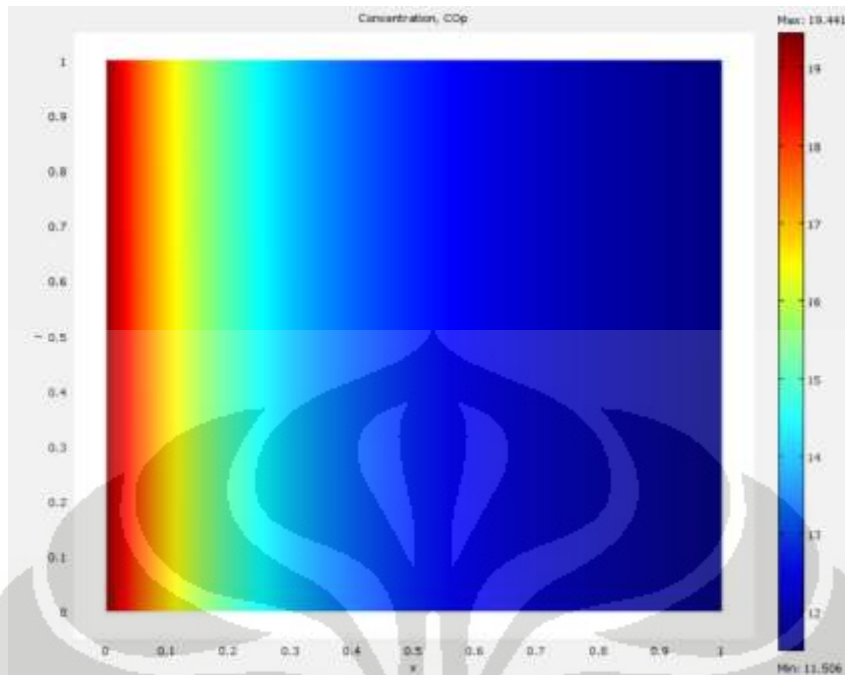
**Gambar 5.5.** Profil Konsentrasi Metanol Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

Profil Metanol di fluida ruang memiliki tren menaik di awal reaktor lalu menurun di akhir reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol cukup tinggi karena konsentrasi karbon dioksida yang besar serta konsentrasi metanol yang kecil. Namun menuju akhir reaktor, konsentrasi metanol cukup banyak sehingga reaksi dehidrasi metanol juga cukup banyak sementara reaktan reaksi hidrogenasi karbon dioksida sudah banyak berkurang.

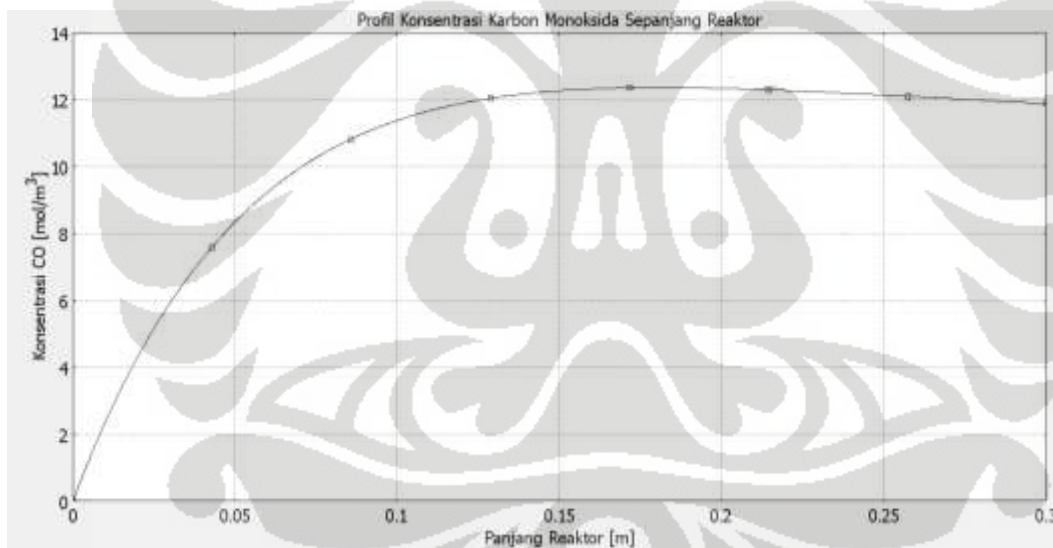
Profil metanol di katalis mirip dengan DME yaitu menurun sepanjang reaktor. Hal ini juga karena laju alir fluida yang menurun sepanjang reaksi. Selain itu juga konsentrasi di katalis lebih tinggi daripada di reaktor karena metanol terhambat keluar katalis. Profil metanol juga tinggi di awal reaktor karena konsentrasi reaktan di awal reaktor masih tinggi sehingga menyebabkan konsentrasi metanol di awal cukup tinggi akibat reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol.



### 5.1.5 Profil Spesi Karbon Monoksida



(a) Di Katalis

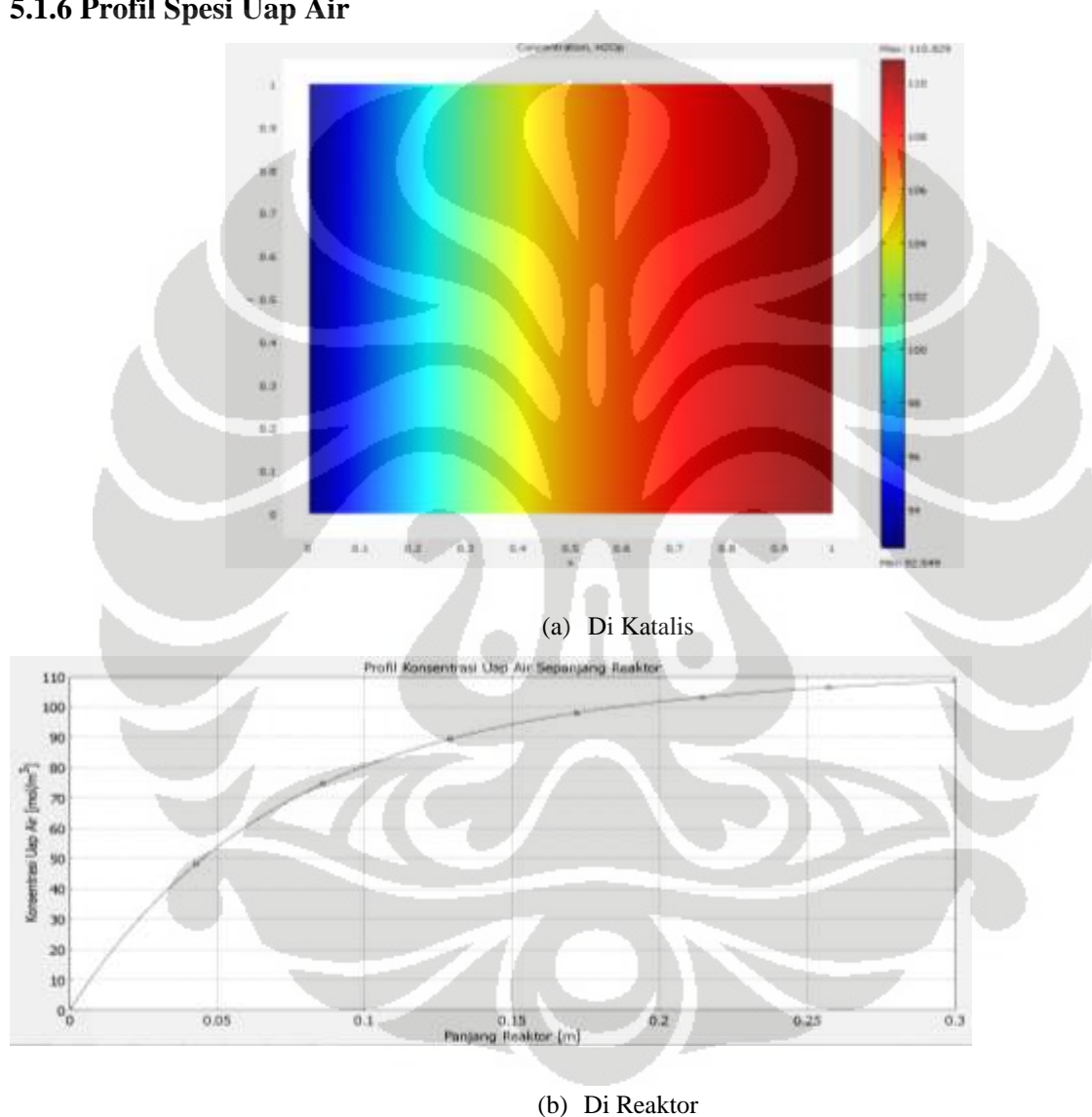


**Gambar 5.6.** Profil Konsentrasi CO Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

Profil CO di fluida ruah memiliki tren yang sama dengan metanol karena keduanya merupakan produk antara yaitu menaik di awal reaktor lalu menurun di akhir reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi *rwgs* dioksida menjadi cukup tinggi karena konsentrasi karbon dioksida yang besar serta konsentrasi CO yang kecil. Namun menuju akhir reaktor, konsentrasi uap air sangat banyak cukup banyak sehingga reaksi menjadi berkebalikan arah.

Profil CO di katalis mirip dengan DME dan metanol yaitu menurun sepanjang reaktor. Hal ini juga karena laju alir fluida yang menurun sepanjang reaksi. Selain itu juga konsentrasi di katalis lebih tinggi daripada di reaktor karena CO terhambat keluar katalis. Profil CO juga tinggi di awal reaktor karena konsentrasi reaktan di awal reaktor masih tinggi sehingga menyebabkan konsentrasi CO di awal cukup tinggi akibat reaksi *rwgs* yang sangat cepat.

### 5.1.6 Profil Spesi Uap Air



**Gambar 5.7.** Profil Konsentrasi Uap Air Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6$  Pa, Suhu Umpan 510K, Rasio  $H_2/CO_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4}$  m/s Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3}$  m

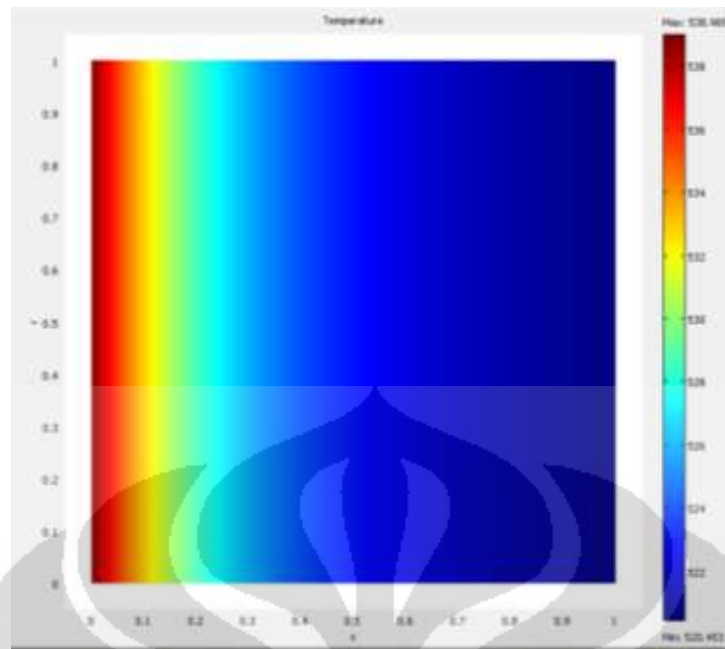
Profil uap air di reaktor memiliki tren menaik. Uap air juga merupakan produk yang dihasilkan terbanyak. Hal ini terjadi karena uap air dihasilkan oleh kesemua tahapan reaksi. Uap air yang dihasilkan ini akan menghambat reaksi karena produk kesemua reaksi. Hal ini



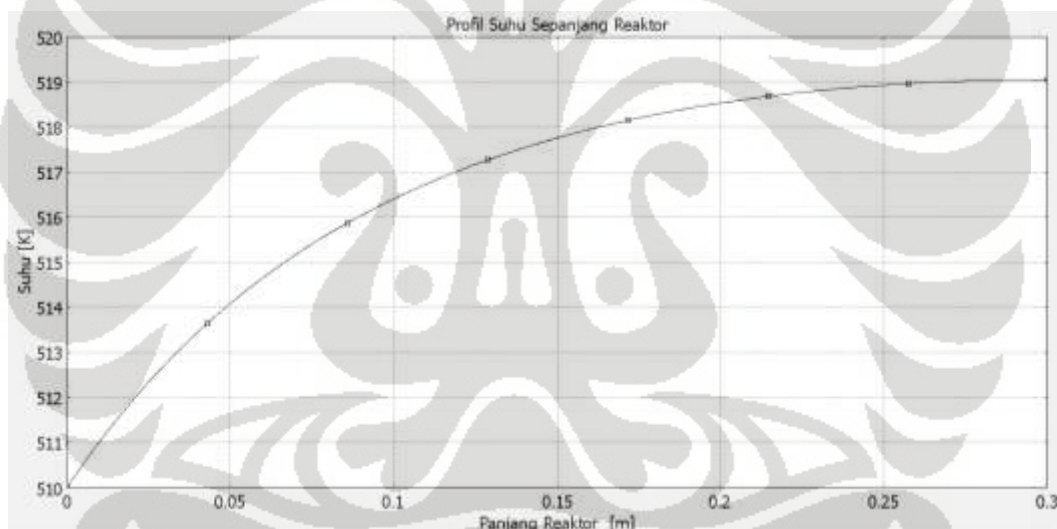
berbeda dengan reaksi hidrogenasi *syngas* karena uap air dikonsumsi di salah satu tahap sehingga jumlahnya tidak sebanyak hidrogenasi karbon dioksida.

Terlihat dari profil uap air di katalis memiliki tren yang sama dengan di reaktor yaitu meningkat sepanjang arah reaktor. Profil menunjukkan bahwa hambatan intrapartikel tidak menghambat laju transportasi keseluruhan karena tidak terlihat gradien konsentrasi di arah radial katalis. Faktor penghambat laju transpor terjadi di lapisan film, hal ini dibuktikan dengan adanya perbedaan konsentrasi di fasa fluida dan fasa katalis yang cukup signifikan. Konsentrasi uap air di katalis lebih tinggi dibandingkan konsentrasi uap air di fluida ruah, hal ini terjadi karena uap air merupakan produk. Produk uap air yang dihasilkan terhambat keluar katalis akibat difusi lapisan film, hal inilah yang mengakibatkan profil produk uap air lebih besar di katalis daripada di fluida ruah.

### **5.1.7 Profil Suhu**



(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruang

**Gambar 5.8.** Profil Suhu Dengan Kondisi Operasi Tekanan Umpan  $5 \times 10^6 \text{ Pa}$ , Suhu Umpan  $510 \text{ K}$ , Rasio  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  4, Laju Alir Superfisial  $5 \times 10^{-4} \text{ m/s}$  Dan Radius Partikel  $1 \times 10^{-3} \text{ m}$

Profil suhu sepanjang reaktor menunjukkan tren menaik di awal reaktor lalu tidak bertambah di akhir reaktor. Hal ini disebabkan di awal reaktor reaksi yang dominan adalah reaksi hidrogenasi karbon dioksida. Reaksi ini bersifat eksotermis sehingga menyebabkan suhu reaktor naik. Sedangkan di akhir reaktor, konsentrasi metanol sudah banyak sehingga menyebabkan reaksi dehidrasi metanol pun meningkat. Reaksi ini bersifat endotermis sehingga reaksi ini bisa mengimbangi kenaikan suhu akibat reaksi hidrogenasi karbon

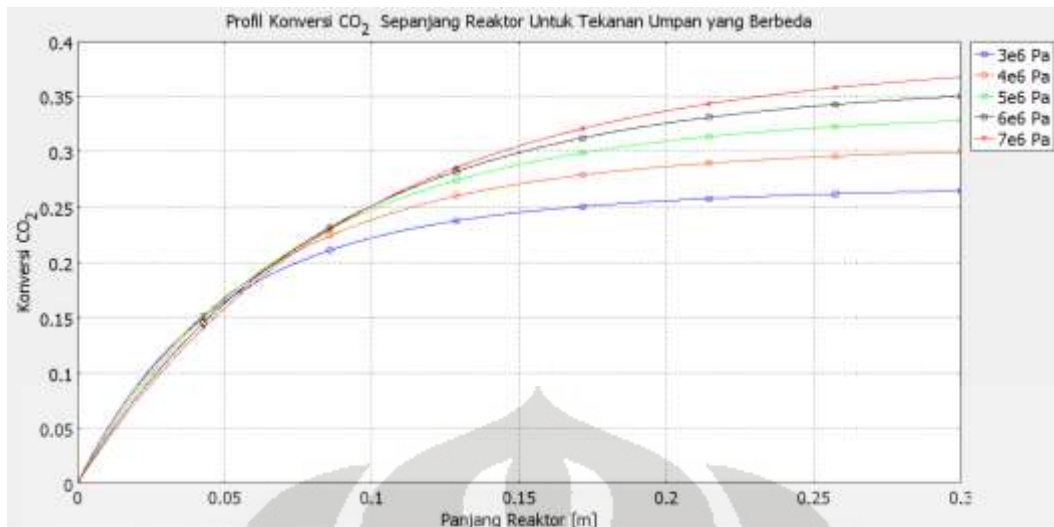
dioksida menjadi metanol. Reaksi *r<sub>wgs</sub>* yang bersifat endotermis juga berperan meredam kenaikan suhu reaksi hidrogenasi karbon dioksida sehingga kenaikan suhu reaktor hanya sekitar 10K. Reaktor ini tidak terlalu memerlukan pendingin atau pemanas karena perubahan suhu di reaktor hanya sekitar 10K.

Profil suhu di katalis agak memiliki tren yang berbeda dengan tren profil suhu di reaktor. Suhu di katalis memiliki tren menurun sepanjang reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaksi terjadi penurunan laju alir akibat penurunan molar total akibat jumlah mol produk yang lebih kecil dari pada mol reaktan. Menurunnya kecepatan intertisi menyebabkan mudahnya energi mengalir keluar katalis akibat jumlah energi yang terbawa oleh fluks konvektif sepanjang reaktor menurun. Namun suhu di katalis lebih tinggi dibandingkan di reaktor. Hal ini terjadi karena reaksi yang terjadi bersifat agak eksotermis sehingga suhu di katalis lebih tinggi. Dari grafik di atas terlihat pula bahwa gradien suhu ke arah radial katalis hampir tidak ada, hal ini menunjukkan bahwa hambatan transfer energi di lapisan film jauh lebih besar daripada hambatan transfer energi di katalis. Walaupun menurunnya kecepatan intertisi menurunkan pula koefisien transfer energi, namun pengaruhnya kecil seperti dijelaskan di persamaan bilangan Nusselt.

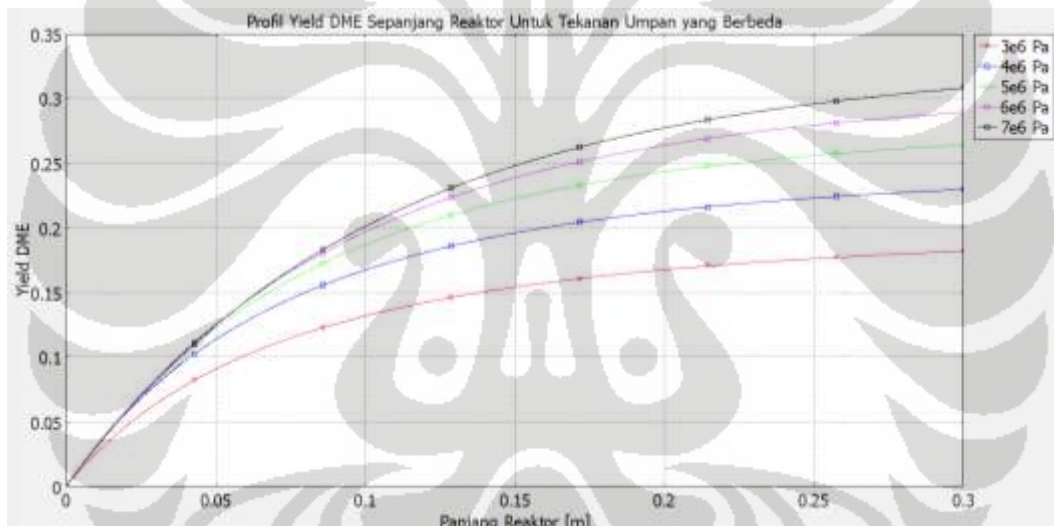
## **5.2 Variasi Kondisi Operasi Reaktor**

### **5.2.1 Pengaruh Tekanan Umpan**

Pada simulasi kali ini dilakukan simulasi dengan memvariasikan tekanan operasi dari  $2 \times 10^6$  sampai  $6 \times 10^6$  Pa. Setelah itu diplotkan data-data konversi  $\text{CO}_2$  dan *yield* DME sepanjang reaktor untuk tiap-tiap tekanan. Data konversi  $\text{CO}_2$  dan *yield* DME dapat dilihat di grafik 5.9 dan 5.10 di bawah



**Gambar 5.9.** Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Tekanan Umpan Yang Berbeda



**Gambar 5.10.** Profil Yield DME Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Tekanan Umpan Yang Berbeda

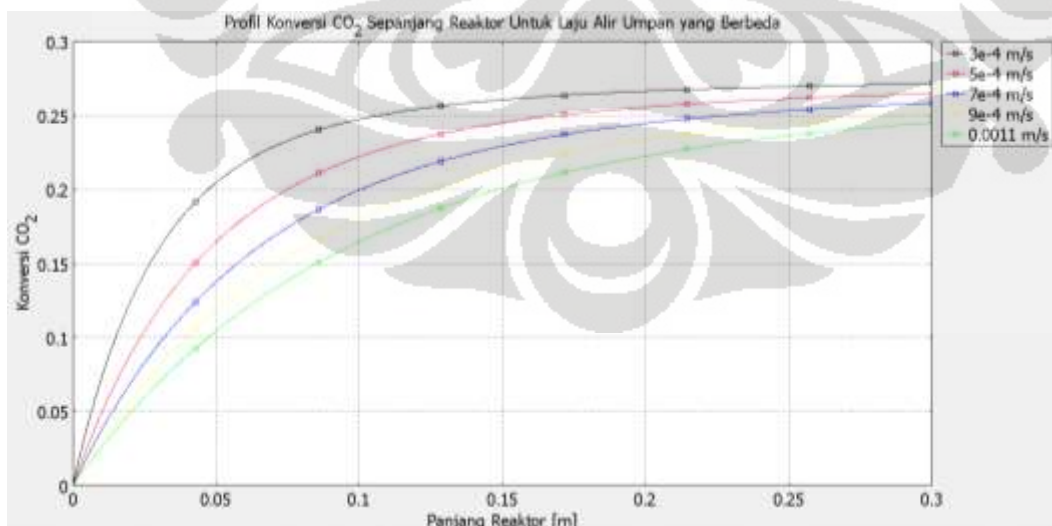
Grafik 5.9 dan 5.10 memperlihatkan bahwa semakin besar tekanan maka konversi dan yield meningkat. Hal ini dapat dijelaskan melalui prinsip *Le Chatelier*. Reaksi pembentukan DME dari karbon dioksida merupakan reaksi dimana jumlah mol produk lebih sedikit dibandingkan reaktan. Mol produk lebih besar daripada mol reaktan terjadi saat hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol yaitu empat mol reaktan berbanding dengan dua mol produk. Sedangkan reaksi *RWGS* maupun dehidrasi metanol keduanya memiliki jumlah mol produk dan reaktan yang sama. Oleh karena itu menurut prinsip *Le Chatelier*, jika mol produk lebih sedikit lebih dari mol reaktan maka tekanan yang lebih tinggi akan menggeser kesetimbangan ke arah produk.

Grafik 5.9 dan grafik 5.10 memiliki perbedaan sedikit pada profilnya. Perbedaannya yaitu grafik 5.9 menunjukkan pengaruh tekanan yang agak kurang signifikan sedangkan grafik 5.10 cukup signifikan. Hal ini terjadi karena untuk karbon dioksida membentuk DME, karbon dioksida harus melewati tahap reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol. Reaksi ini kurang menyukai tekanan rendah akibat mol produk lebih besar daripada mol reaktan. Sementara konversi karbon dioksida bisa terjadi dengan jalan lain yaitu reaksi *rwgs* yang tidak terlalu terpengaruh tekanan umpan karena jumlah mol produk dan reaktan yang sama.

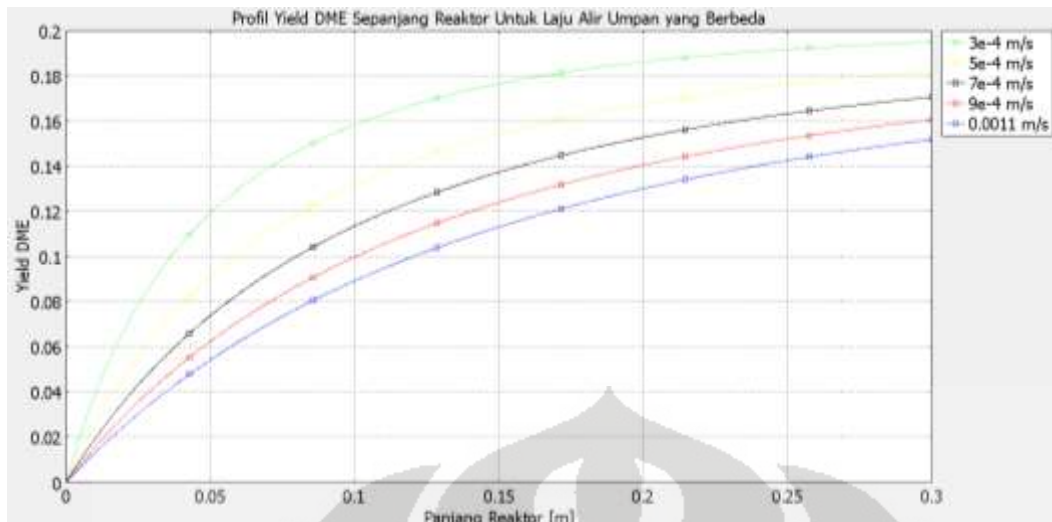
Perbedaan lainnya adalah di grafik 5.9 konversi di awal-awal reaktor menunjukkan bahwa konversi karbon dioksida lebih tinggi pada tekanan rendah dibandingkan tekanan tinggi. Hal ini dapat dijelaskan karena pada awal-awal, kondisi reaksi yang paling banyak adalah reaksi *rwgs* hal ini terjadi karena lajunya yang jauh lebih cepat dibandingkan dengan laju dua reaksi lainnya. Setelah reaksi *rwgs* mendekati kesetimbangan, maka laju reaksi karbon dioksida menjadi metanol baru memiliki laju yang komparabel dengan reaksi *rwgs*.

## 5.2.2 Pengaruh Laju Alir Umpan

Pada simulasi kali ini laju alir fluida umpan divariasikan dari 0.0003m/s sampai 0.0011 m/s. Setelah itu diplotkan data-data konversi CO<sub>2</sub> dan *yield* DME serta profil tekanan sepanjang reaktor untuk tiap-tiap laju alir. Profil konversi CO<sub>2</sub> dan *yield* DME sepanjang reaktor dapat dilihat di grafik 5.11 dan 5.12 di bawah



**Gambar 5.11.** Profil Konversi Karbon Dioksida Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Laju Alir Yang Berbeda

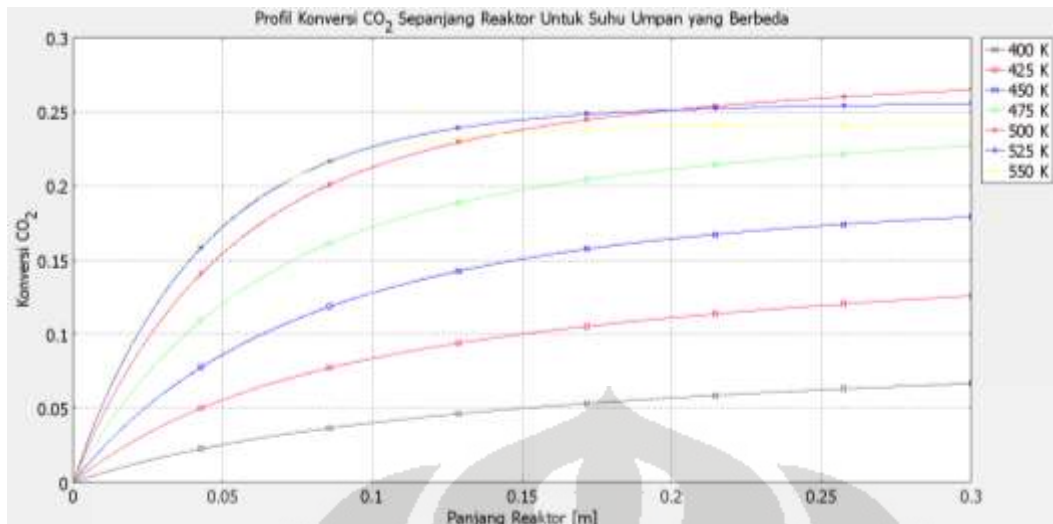


**Gambar 5.12** Profil *Yield* DME Sepanjang Reaktor Untuk Variasi Laju Alir Yang Berbeda

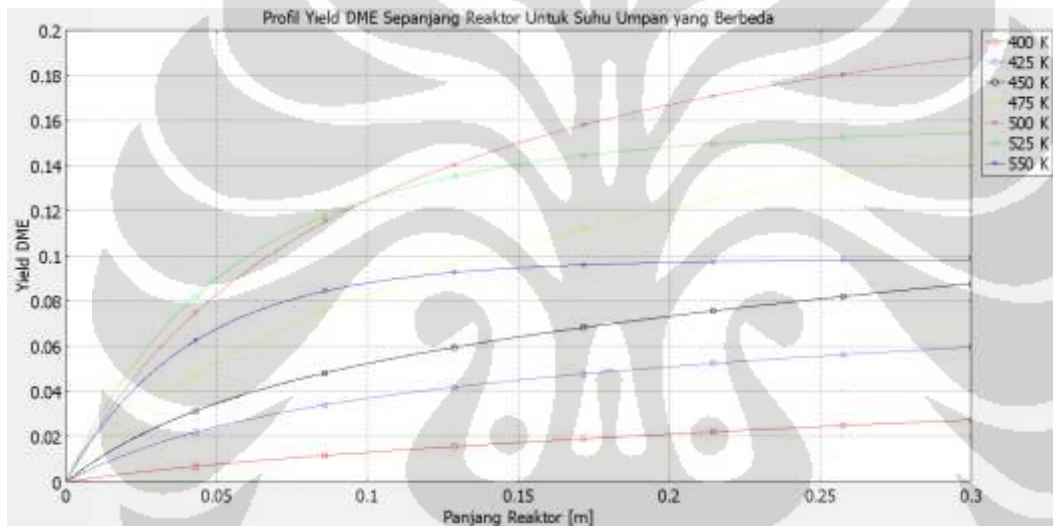
Grafik 5.11 dan 5. 12 memperlihatkan bahwa semakin besar laju alir maka konversi dan yield menurun. Hal ini karena untuk reaktan untuk bereaksi, reaktan perlu berdifusi di dalam pori-pori katalis. Jika laju alir reaktan besar maka fluks yang masuk ke lapisan film katalis semakin berkurang karena terbawa oleh fluks konvektif fluida ruah. Selain itu bahwa penurunan tekanan juga semakin besar dengan meningkatnya laju alir. Penurunan tekanan yang besar dapat menyebabkan kecilnya fugasitas di katalis yang menyebabkan laju reaksi berkurang. Namun semakin kecilnya laju alir maka semakin kecil pula laju alir produk yang didapat.

### 5.2.3 Pengaruh Suhu Umpan

Pada simulasi kali ini dilakukan simulasi dengan memvariasikan suhu umpan dari 400K hingga 550K. Setelah itu diplotkan data-data konversi  $\text{CO}_2$  dan *yield* DME sepanjang reaktor untuk tiap-tiap variasi komposisi. Data konversi  $\text{CO}_2$  dan *yield* DME dapat dilihat di grafik 5. 13 dan 5.14 di bawah



**Gambar 5.13.** Profil Konversi Karbon Dioksida sepanjang reaktor untuk variasi suhu umpan yang berbeda



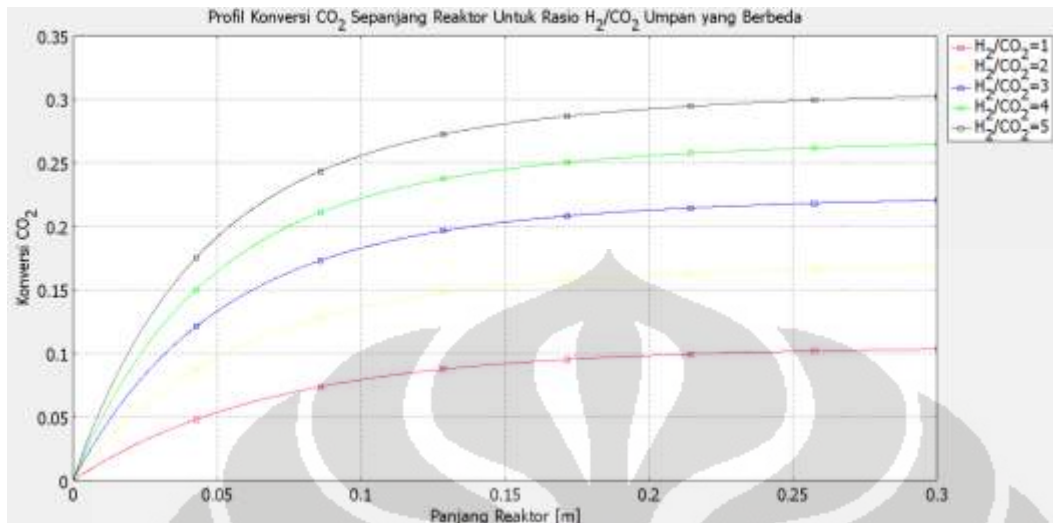
**Gambar 5.14.** Yield DME sepanjang reaktor untuk variasi suhu umpan yang berbeda

Grafik 5.13 dan 5.14 menunjukkan bahwa konversi karbon dioksida dan *yield* DME terus meningkat dengan naiknya suhu sampai suatu suhu tertentu. Hal ini karena menaikkan suhu akan menaikkan laju kinetika reaksi, tetapi juga menghambat kesetimbangan reaksi. Reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol yang merupakan reaksi kunci berlanjutnya reaksi dehidrasi metanol bersifat eksotermis, oleh karena itu suhu yang terlalu tinggi tidak menguntungkan secara termodinamika.

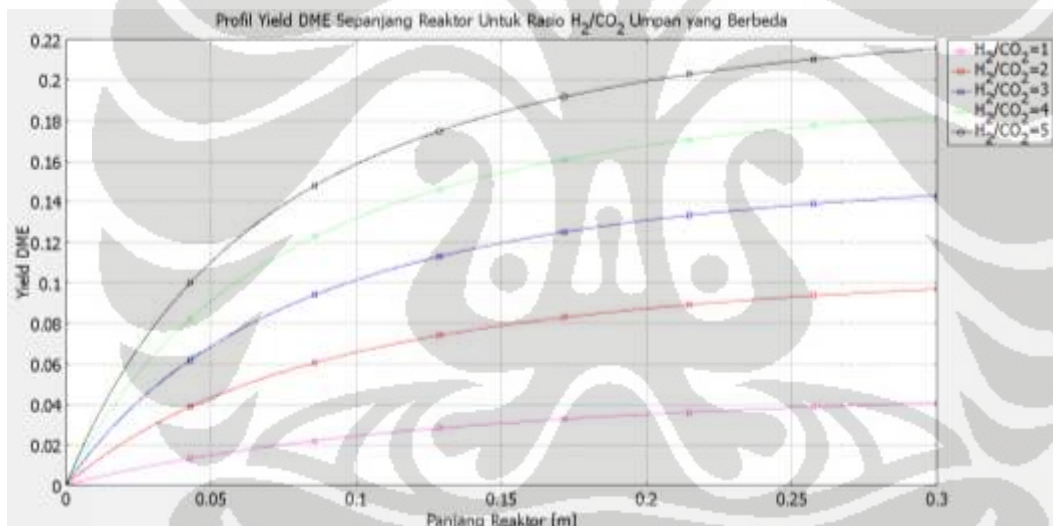
### 5.2.4 Pengaruh Komposisi Umpan

Pada simulasi kali ini dilakukan simulasi dengan memvariasikan rasio komposisi umpan  $H_2/CO_2$  dari satu hingga empat.. Setelah itu diplotkan data-data konversi  $CO_2$  dan

yield DME sepanjang reaktor untuk tiap-tiap variasi komposisi. Data konversi  $\text{CO}_2$  dan yield DME dapat dilihat di grafik 5.15 dan 5.16 di bawah



**Gambar 5.15.** Konversi karbon dioksida sepanjang reaktor untuk variasi komposisi umpan yang berbeda



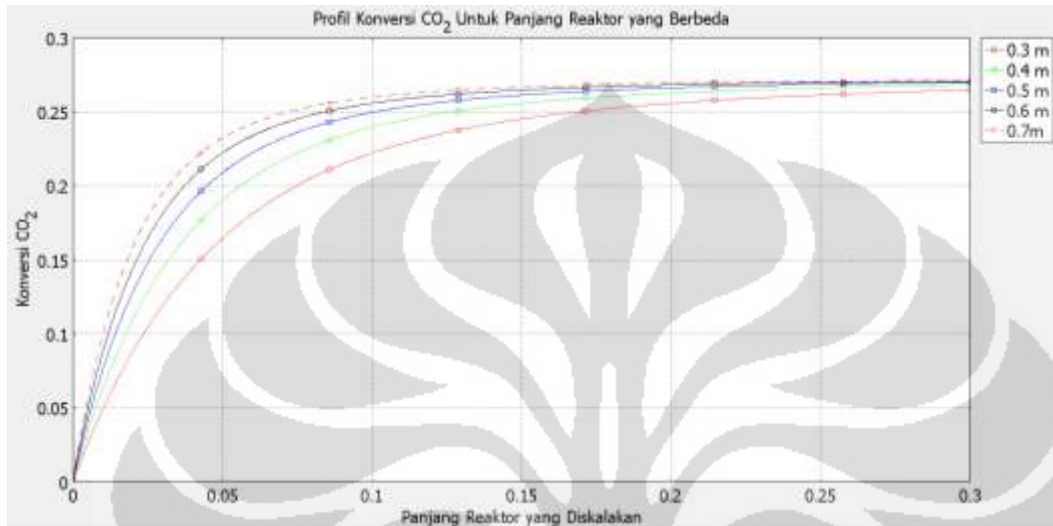
**Gambar 5.16.** Yield DME sepanjang reaktor untuk variasi rasio umpan yang berbeda

Grafik 5.15 dan 5.16 di atas menunjukkan bahwa makin besar rasio  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  maka semakin besar konversi  $\text{CO}_2$  dan yield DME. Hal ini disebabkan dengan semakin berlebihnya reaktan maka laju reaksi semakin meningkat akibat kesetimbangan yang mengarah ke arah produk. Maka, dengan meningkatnya laju reaksi maka meningkat pula produk yang terbentuk.

## 5.5 Pengaruh Panjang Reaktor



Pada simulasi kali ini dilakukan simulasi dengan memvariasikan panjang katalis dari 0.3m sampai 0.7m. Tujuan simulasi ini adalah untuk mencari panjang optimum, hal ini karena reaktor yang terlalu panjang tanpa memberikan penambahan konversi merupakan hal yang rugi. Hubungan antara konversi karbon dioksida dengan panjang reaktor diplot pada grafik 5.17 di bawah

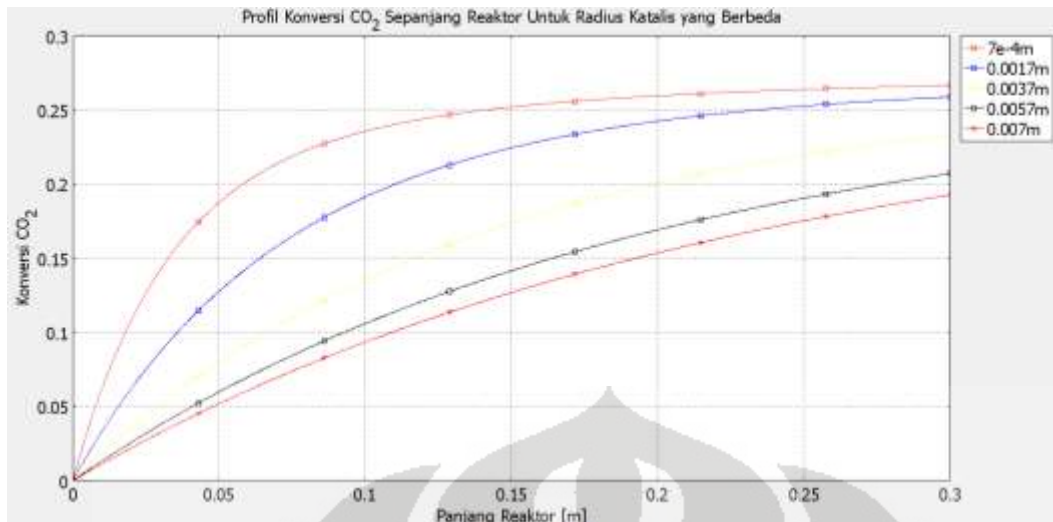


**Gambar 5.17.** Konversi karbon dioksida sepanjang reaktor untuk variasi panjang reaktor yang berbeda

Grafik 5.17 menunjukkan bahwa konversi meningkat dengan meningkatnya panjang reaktor. Namun untuk panjang tertentu, penambahan panjang reaktor tidak lagi memberikan penambahan konversi yang signifikan. Hal ini terjadi karena reaksi sudah mengalami kesetimbangan sehingga laju reaksinya pun sudah kecil. Terlihat dari grafik antara panjang reaktor 0.5m dan 0.7 m hanya didapatkan perbedaan konversi yang sangat kecil. Jadi penambahan panjang reaktor yang berlebihan tidak memberikan kenaikan konversi yang signifikan.

## 5.6 Pengaruh Radius Katalis

Pada simulasi kali ini dilakukan simulasi dengan memvariasikan radius katalis dari 0.0007 m hingga 0.007m Setelah itu diplotkan data-data *yield* DME sepanjang reaktor untuk tiap-tiap variasi komposisi. Data *yield* DME dapat dilihat di grafik 5.18 di bawah.



**Gambar 5.18.** Konversi CO<sub>2</sub> sepanjang reaktor untuk variasi radius katalis yang berbeda

Grafik di atas menunjukkan bahwa semakin kecil radius katalis maka semakin besar konversi karbon dioksida. Hal ini disebabkan karena semakin kecil radius katalis maka semakin kecil pula hambatan difusi di dalam pori-pori katalis. Hal ini menyebabkan konsentrasi reaktan di dalam pori katalis yang tinggi sehingga laju reaksi pun tinggi. Namun menurunnya radius katalis memiliki kekurangan yaitu meningkatnya penurunan tekanan sepanjang reaktor. Namun hal ini kurang begitu signifikan karena orde penurunan tekanan adalah sekitar  $10^{-3}$ Pa sementara tekanan berada di orde  $10^6$ Pa. Jadi, walaupun penurunan radius katalis bisa meningkatkan penurunan tekanan namun hal ini baru signifikan di katalis dengan radius yang sangat kecil.

## BAB 6

### KESIMPULAN

#### 6.1 Kesimpulan

Setelah melakukan penelitian ini, peneliti menyimpulkan beberapa hal, yaitu

1. Dari berbagai variasi kondisi operasi reaktor, konversi karbon dioksida paling besar adalah 37% sedangkan *yield* dimetil eter paling besar adalah 33%.
2. Semakin tinggi tekanan total akan memperkecil konversi karbon dioksida pada awal reaktor akibat reaksi *reverse water gas shift*, tetapi memperbesar konversi karbon dioksida di akhir reaktor akibat reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi metanol mulai dominan. Secara keseluruhan menaikkan tekanan menaikkan konversi karbon dioksida dari 26% pada tekanan 2MPa menjadi 37% pada tekanan 6 MPa dan menaikkan *yield* DME dari 15% menjadi 33%.
3. Kenaikan suhu sampai 500K menaikkan konversi karbon dioksida dan *yield* DME. Namun setelah itu baik konversi maupun *yield* turun kembali.
4. Kenaikan laju alir akan memperkecil konversi karbon dioksida dari 27.5% pada laju alir 0.0003 m/s menjadi 24% pada laju alir 0.0011m/s dan menurunkan *yield* DME dari 19% ke 15%.
5. Kenaikan laju rasio  $H_2/CO_2$  akan menaikkan konversi karbon dioksida dari 5% pada perbandingan 1 menjadi 31% pada rasio 5 dan *yield* DME dari 4% menjadi 22%.
6. Penambahan panjang reaktor tidak menaikkan konversi karbon dioksida secara signifikan.
7. Penurunan radius katalis akan menaikkan konversi karbon dioksida dari 17% pada radius katalis 0.007m menjadi 27% pada radius katalis 0.0007m.

## **6.2 Saran**

Saran untuk penelitian selanjutnya adalah dilakukan eksperimen untuk memvalidasi model ini. Model juga bisa dikembangkan lebih lanjut menjadi model heterogen dua dimensi.



## **DAFTAR PUSTAKA**

- Andrigo, P., R Bagatin, G Pagani, 1999, *Fixed Bed Reactors*, Catalysis Today; 52:197-221.
- Agung Wibowo, A., *Pembuatan Metanol dengan Proses Hidrogenasi CO<sub>2</sub> Memakai katalis logam kompleks CuO/ZnO/ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, tugas akhir (1995)
- Avci, Ahmet K., 2006, *Fixed-bed reactor models*, CATREL – Catalyst Technology and Reaction Engineering Laboratory.
- Bill, Alain, *Carbon Dioxide Hydrogenation to Methanol at Low Pressure and Temperature*,  
Tesis no 1726(1997)
- Davies P, F.F Snowdown, *US Patent 3.326.956* (ICI, 1967)
- Froment, G.F., dan K. B. Bischoff, 1990 *Chemical Reactor Design and Analysis*, John Wiley and Sons, New York.
- Hawkins, R.J, R.J Kane, W.E Slinkard, J.L Trumbley, *Encyclopedia of Chemical Processing and Design* J.J Ketta, W.A Cunningham (Ed.) (Marcel Deker, New York, 1988) pp 418
- Herman, R. G.; Klier, K.; Simmons, G. W.; Finn, B. P.; Bulko, J. B. *J. Catal.* **1979**, 56, 407–429.
- Hye-Won Lim, Myung-June Park, Suk-Hwan Kang, Ho-Jeong Chae, Jong Wook Bae, and Ki-Won Jun , *Modeling of the Kinetics for Methanol Synthesis using Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ZrO<sub>2</sub> Catalyst: Influence of Carbon Dioxide during Hydrogenation* Ind. Eng. Chem. Res 2009, 48, 10448-10455
- Klier, K.; Chatikavanij, V.; Herman, R. G.; Simmons, G. W. *J. Catal.* **1982**, 74, 343–360.
- Marschner F, F.W Moeller, *Appl. Ind. Cat.* **2**,349(1983)
- Muharam Yuswan, *Pemodelan Kinetika Reaksi Hidrogenasi Karbon Doksida menjadi Metanol dengan Katalis CuO/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/PdO* (1999)
- Pierantozzi, Ronald *Carbon Dioxide. Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. Wiley (2001).
- Sahibzada, M.,D. Chadwick and I.S. Metcalfe, *Methanol Synthesis from CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> over Pd-Promoted Cu/Zn/ Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalyst : Kinetics and Deactivation*, Natural Gas and Conversion IV : Studies in Surface Science and Catalysts Vol 107.1997
- Stafford, Ned *.Future crops: The other greenhouse effect. Nature* 448: 7153. (2007).