



UNIVERSITAS INDONESIA

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK
REAKSI FISCHER TROPSCH DENGAN MENGGUNAKAN CFD
(COMPUTATIONAL FLUID DINAMIC)**

SKRIPSI

IBNU SULTAN A

0806367941

DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS INDONESIA

DEPOK

Juni 2011

LEMBAR PENGESAHAN

Laporan skripsi dengan judul :

**PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK REAKSI
FISCHER TROPSCH DENGAN MENGGUNAKAN CFD (COMPUTATIONAL
FLUID DINAMIC)**

Oleh :

IBNU SULTAN A

0 8 0 6 3 6 7 9 4 1

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

DEWAN PENGUJI

Pembimbing : Dr. rer. nat. Ir. Yuswan Muharam, MT. ()
Penguji I : Kamarza Mulia, MSc., PhD. ()
Penguji II : Dr. Ir. Andy Noorsaman, DEA. ()
Penguji III : Bambang Heru Susanto, ST. MT. ()

Ditetapkan di : Depok

Tanggal :

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi dengan judul,

PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK REAKSI FISCHER TROPSCH DENGAN MENGGUNAKAN CFD (COMPUTATIONAL FLUID DINAMIC)

Yang dibuat untuk melengkapi sebagian persyaratan menjadi Sarjana Teknik pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, sejauh yang saya ketahui bukan merupakan tiruan atau duplikasi dari skripsi yang sudah dipublikasikan dan atau pernah dipakai untuk mendapatkan gelar kesarjanaan di lingkungan Universitas Indonesia maupun di Perguruan Tinggi atau Instansi manapun, kecuali bagian yang sumber informasinya dicantumkan sebagaimana mestinya.

Depok, 8 Juni 2011

Ibnu Sultan A

0806367941

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur kepada Allah SWT karena atas berkat dan rahmat-Nya tugas Skripsi ini dapat terselesaikan tepat pada waktunya. Dalam penyusunan makalah Skripsi ini, penulis banyak mendapat bantuan, bimbingan, dan dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga skripsi ini selesai dengan baik.
2. Bapak Dr.rer.nat. Ir. Yuswan Muharam, M.T. selaku dosen pembimbing dalam tugas ini. Terima kasih atas segala bantuan serta diskusinya.
3. Bapak Prof. Dr. Ir. Widodo Wahyu Purwanto, DEA selaku Ketua Departemen Teknik Kimia FTUI.
4. Orang tua tercinta yang telah memberikan kasih sayang, perhatian, doa, dan dukungan setiap saat.
5. Raden rahmi Dewi dan Awathif Iftinah Syadza tercinta yang telah memberikan kasih sayang, perhatian, doa, dan dukungan setiap saat.
6. Teman-teman yang telah banyak memberikan dukungan selama ini.
7. Pihak-pihak lain tidak dapat disebutkan satu persatu.

Penulis menyadari masih terdapat banyak kekurangan dalam penulisan tugas Skripsi ini. Oleh karena itu, saran dan kritik sangat penulis harapkan untuk memperbaiki penulisan di masa yang akan datang.

Depok, 8 Juni 2011

Ibnu Sultan A

0806367941

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI

TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

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

Nama : Ibnu Sultan Amirullah
NPM : 0806367941
Program Studi : Teknik Kimia - Ekstensi
Departemen : Teknik Kimia
Fakultas : Teknik
Jenis Karya : Skripsi

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

**Pemodelan dan Simulasi Reaktor Unggun Tetap Untuk Reaksi Fischer Tropsch
Menggunakan *Computational Fluid Dynamics (CFD)***

berserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalih media/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok, Jawa Barat, Indonesia

Pada tanggal : 28 Juni 2011

Yang menyatakan

(Ibnu Sultan Amirullah)

Ibnu Sultan A
NPM 0806367941
Chemical Engineering Departement

Dosen Pembimbing
Dr. rar. net. Ir. Yuswan Muharam, MT

PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR UNGGUN TETAP UNTUK REAKSI FISCHER TROPSCH DENGAN MENGGUNAKAN CFD (COMPUTATIONAL FLUID DINAMIC)

ABSTRAK

Sintesis Fischer-Tropsch (FT) merupakan proses penting dalam industri untuk mengubah gas sintesis yang dihasilkan dari proses reformasi kukus, parsial oksidasi atau autotermal reforming menjadi senyawa hidrokarbon dan oksigenat. Saat ini sintesis Fischer-Tropsch merupakan suatu pilihan untuk memproduksi bahan bakar transportasi yang ramah lingkungan dan sebagai bahan baku kimia.

Sintesis Fischer Tropsch dapat dilakukan dengan menggunakan reaktor unggun tetap, reaktor slurry kolom gelembung atau reaktor terfluidisasi. Dalam penelitian ini dilakukan pemodelan dan simulasi reaktor unggun tetap untuk sintesis Fishcer-Tropsch mengacu pada kinetika Bo-Tao Teng 2005.

Faktor hidrodinamika berupa konveksi dan dispersi pada arah aksial dan radial diperhitungkan untuk memperoleh hasil simulasi yang mendekati kondisi riil. Validasi model dilakukan dengan data-data eksperimen skala lab.

Model pseudohomogen reaktor unggun tetap untuk reaksi Fischer Tropsch dapat memprediksi kinerja reaktor dengan baik. Kenaikan rasio H_2/CO 1 dari 2 hingga menunjukkan peningkatan konversi CO yang besar, yaitu dari 6.9% menjadi 20.2%. Kenaikan temperatur dari 400 K hingga 410 K meningkatkan konversi CO dari 6.9% menjadi 8.3%. Kenaikan tekanan akan meningkatkan nilai konversi CO yaitu dari 1 bar menjadi 5 bar meningkatkan konversi CO 6.9% menjadi 27%.

Kata kunci : Fischer-Tropsch, desain reaktor, model, simulasi

**MODELING AND SIMULATION REACTOR FIX BED FOR THE REACTION
FISCHER TROPSCH USING CFD (COMPUTATIONAL FLUID DINAMIC)**

ABSTRACT

Synthesis of Fischer-Tropsch (FT) is an important process in the industry to convert the synthesis gas produced from the process of steam reforming, partial oxidation or reforming autothermal into hydrocarbons and oxygenate. Currently the Fischer-Tropsch synthesis is an option to produce transportation fuels that are environmentally friendly and as chemical raw materials.

Fischer Tropsch synthesis can be performed using fixed bed reactors, slurry bubble column reactor or a fluidized reactor. In this study the modeling and simulation of fixed bed reactor for Fischer-Tropsch synthesis refers to the kinetics of Bo-Tao Teng 2005. Factor in the form of convection and hydrodynamic dispersion in axial and radial direction calculated to obtain the simulation results are close to real conditions. Model validation performed by the data lab-scale experiments.

Model pseudohomogen fixed bed reactor for Fischer-Tropsch reaction can predict the performance of the reactor well. H₂/CO a rise in the ratio of 2 to show a large increase in CO conversion, which was from 6.9% to 20.2%. The increase in temperature from 400 K to 410 K increases CO conversion of 6.9% to 8.3%. The increase in pressure will increase the value of the conversion of CO is from 1 bar to 5 bar of CO conversion increase 6.9% to 27%.

Key words: *Fischer-Tropsch process, reactor design, modeling, simulation*

DAFTAR ISI

| | |
|---|------|
| JUDUL..... | i |
| LEMBAR PENGESAHAN | ii |
| PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI..... | iii |
| KATA PENGANTAR | v |
| ABSTRAK..... | vi |
| ABSTRACT..... | vii |
| DAFTAR ISI..... | viii |
| DAFTAR GAMBAR..... | xi |
| DAFTAR TABEL..... | xvi |
| DAFTAR SIMBOL | xvii |
| BAB I PENDAHULUAN..... | 1 |
| 1.1 Latar Belakang | 1 |
| 1.2 Perumusan Masalah | 4 |
| 1.3 Tujuan Penelitian | 4 |
| 1.4 Batasan Masalah | 4 |
| 1.5 Sistematika Penulisan | 5 |
| BAB II TINJAUAN PUSTAKA | 7 |
| 2.1 Proses Gas To Liquid (GTL) | 7 |
| 2.2 Produksi Gas Sintesis | 11 |
| 2.3 Sintesis Fischer-Tropsch | 14 |
| 2.3.1 Sejarah Pengembangan FT | 15 |
| 2.3.2 Kimia sintesis FT | 17 |
| 2.3.3 Mekanisme Reaksi Fischer-Tropsch..... | 18 |
| 2.3.4 Distribusi Produk Fischer Tropsch | 21 |
| 2.3.5 Katalis Fischer Tropsch | 22 |
| 2.3.6 Perbandingan katalis Fe dan Co..... | 23 |
| 2.3.7 Kinetika Fischer Tropsch | 25 |
| 2.3.8 Water Gas Shift Reaction (RWGS) | 28 |
| 2.3.9 Reaktor Fischer Tropsch..... | 29 |
| 2.3.10 Kondisi Operasi | 33 |

| | |
|---|-----------|
| 2.3.11 Produk Sintesis FT | 34 |
| 2.3.12 Metoda Pengontrolan Produk | 36 |
| 2.4 Reaktor Unggun Tetap (Fixed Bed)..... | 36 |
| 2.5 Prinsip Scale Up Reaktor | 40 |
| 2.5.1 Prinsip Scale Up..... | 40 |
| 2.5.2 Kriteria Similaritas | 42 |
| 2.5.3 Pemodelan..... | 44 |
| 2.6 Simulasi..... | 46 |
| BAB III Metodologi Penelitian..... | 48 |
| 3.1 Diagram Penelitian..... | 48 |
| 3.2 Prosedur Penelitian | 49 |
| 3.2.1 Studi Literatur..... | 49 |
| 3.2.2 Pengembangan Model Matematik..... | 49 |
| 3.2.3 Pemrograman dengan COMSOL | 49 |
| 3.2.3.1 Pembuatan Geometri di Comsol..... | 49 |
| 3.2.3.2 Penyusunan Model di Comsol..... | 49 |
| 3.2.4 Validisasi Model..... | 50 |
| 3.2.5 Analisis | 51 |
| BAB IV PEMODELAN REAKTOR UNGGUN TETAP..... | 52 |
| 4.1 Tinjauan Umum | 52 |
| 4.1.1 Neraca Massa | 53 |
| 4.1.2 Neraca Energi | 54 |
| 4.1.3 Kondisi Batas | 56 |
| 4.1.3.1 Kondisi Batas Skala Reaktor..... | 57 |
| 4.1.3.2 Kondisi Batas Skala Partikel Katalis..... | 57 |
| 4.2 Model Reaktor Unggun Tetap untuk Sintesis Fischer Tropsch | 58 |
| 4.2.1 Neraca Massa Skala Reaktor | 58 |
| 4.2.2 Neraca Energi Skala Reaktor | 64 |
| 4.2.3 Neraca Momentum | 68 |
| 4.3 Lapisan Film (Kondisi Batas pada comsol gas-padat)..... | 68 |
| 4.3.1 Neraca Massa di Lapisan Film | 68 |
| 4.3.2 Neraca Energi Panas di Lapisan Film | 69 |
| 4.4 Skala Partikel Katalis | 69 |
| 4.4.1 Neraca Massa Skala Partikel Katalis..... | 70 |

| | |
|--|------------|
| 4.4.2 Neraca Energi Panas Skala Partikel Katalis | 71 |
| 4.5 Persamaan Geometri Reaktor Unggun Tetap dalam Comsol | 72 |
| 4.6 Validasi Model..... | 80 |
| BAB V SIMULASI DAN PEMBAHASAN | 82 |
| 5.1 Data Eksperimen..... | 82 |
| 5.2 Data Hasil Simulasi Program Comsol | 85 |
| 5.2.1 Profil Spesi Karbon Monoksida | 89 |
| 5.2.2 Profil Spesi Hidrogen | 94 |
| 5.2.3 Profil Spesi Metana (CH ₄)..... | 100 |
| 5.2.4 Profil Spesi etanol | 106 |
| 5.2.5 Profil Spesi Propena | 110 |
| 5.2.6 Profil Spesi Uap Air | 115 |
| 5.2.7 Profil Karbon dioksida | 121 |
| 5.2.8 Profil Asam karboksilat (etoksi karboksilat-C ₂ H ₃ OOH) | 126 |
| 5.2.9 Profil Suhu..... | 131 |
| 5.2.10 Profil Tekanan | 133 |
| 5.2.11 Pengaruh Tekanan awal..... | 134 |
| 5.2.12 Pengaruh Penjagaan Suhu Dinding Reaktor | 134 |
| 5.2.13 Pengaruh Suhu Awal Reaksi | 135 |
| 5.2.14 Pengaruh Rasio CO dan H ₂ | 136 |
| BAB VI KESIMPULAN | 137 |
| 6.1 Kesimpulan | 137 |
| 6.2 Saran | 137 |
| DAFTAR PUSTAKA | 138 |

DAFTAR GAMBAR

| | |
|---|----|
| Gambar 2.1 Skema Proses GTL..... | 7 |
| Gambar 2.2 Skema Teknologi Gas-To-Liquid (GTL) terintegrasi..... | 8 |
| Gambar 2.3 Feedstock dan katalis | 14 |
| Gambar 2.4 Pengamatan dan postulat kemisorpsi spesi selama sintesis FT..... | 18 |
| Gambar 2.5 Mekanisme reaksi pembentukan parafin, olefin, alkohol dan asam melalui mekanisme penyisipan CH_2 ; R berarti $\text{C}_{n-1}\text{H}_{2n-1}$. untuk sintesis FT (Bo-Tao Teng 2006):..... | 19 |
| Gambar 2.6 Reaksi sekunder dari olefin..... | 20 |
| Gambar 2.7 Usulan mekanisme reaksi sintesis FT | 21 |
| Gambar 2.8 Reaktor fixed bed | 30 |
| Gambar 2.9 Reaktor circulating fluidized bed | 31 |
| Gambar 2.10 Reaktor slurry..... | 28 |
| Gambar 2.11 Grafik peningkatan kapasitas reaktor untuk sintesis amonia dan phthalic anhydride..... | 39 |
| Gambar 2.12 Reaktor sintesis amonia | 39 |
| Gambar 2.13 Reaktor reformasi kukus multitubular | 40 |
| Gambar 2.14 Klasifikasi Model Matematika..... | 45 |
| Gambar 2.15 Model Berdasarkan Jenis Persamaan..... | 46 |
| Gambar 3.1 Prosedur Penelitian | 48 |
| Gambar 4.1 Kontrol Volume Skala Reaktor..... | 59 |
| Gambar 4.2 Kontrol Volume Skala Katalis | 70 |
| Gambar 4.3 Pemilihan Modul COMSOL..... | 72 |
| Gambar 4.4 Model Navigator | 74 |
| Gambar 4.5 Geometri sistem reactor | 74 |
| Gambar 4.6 Geometri sistem partikel | 75 |
| Gambar 4.7 Subdomain settings-Diffusion Particle | 76 |
| Gambar 4.8 Heat transfer by conduction subdomain setting..... | 77 |
| Gambar 4.9 PDE, coefficient form (c)-subdomain setting..... | 78 |
| Gambar 4.10 convection and conduction (chcc) subdomain setting | 79 |
| Gambar 4.11 konstants..... | 79 |
| Gambar 4.12 Expression..... | 80 |

| | |
|--|-----|
| Gambar 5.1. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi P _{feed} = 20 bar, T _{feed} = 450 K, rasio H ₂ /CO 0,5:0,5 = 1, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 90 |
| Gambar 5.2. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,6:0,3 = 2, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 90 |
| Gambar 5.3. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,6:0,4 = 1.5, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 91 |
| Gambar 5.4. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,3:0,3 = 1, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida | 92 |
| Gambar 5.5. Profil konsentrasi CO arah radial pada arah aksial tertentu..... | 93 |
| Gambar 5.6. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi P _{feed} = 20 bar, T _{feed} = 450 K, rasio H ₂ /CO 0,5:0,5 = 1, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 95 |
| Gambar 5.7. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,6:0,3 = 2, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 96 |
| Gambar 5.8. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,6:0,4 = 1.5, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 97 |
| Gambar 5.9. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,3:0,3 = 1, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 98 |
| Gambar 5.10. Profil konsentrasi H ₂ arah radial pada arah aksial tertentu | 98 |
| Gambar 5.11. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi P _{feed} = 20 bar, T _{feed} = 450 K, rasio H ₂ /CO 0,5:0,5 = 1, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 101 |
| Gambar 5.12. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi P _{feed} = 1 bar, T _{feed} = 400 K, rasio H ₂ /CO 0,6:0,3 = 2, u _{feed} = 4.10 ⁻⁴ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 102 |

| | |
|--|-----|
| Gambar 5.13. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 103 |
| Gambar 5.14. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 104 |
| Gambar 5.15. Profil konsentrasi CH_4 arah radial pada arah aksial tertentu | 104 |
| Gambar 5.16. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 106 |
| Gambar 5.17. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 107 |
| Gambar 5.18. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 108 |
| Gambar 5.19. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 109 |
| Gambar 5.20. Profil konsentrasi etanol arah radial pada arah aksial tertentu..... | 110 |
| Gambar 5.21. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 111 |
| Gambar 5.22. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 112 |
| Gambar 5.23. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 113 |
| Gambar 5.24. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 114 |
| Gambar 5.25. Profil konsentrasi Propena arah radial pada arah aksial tertentu .. | 115 |

| | |
|---|-----|
| Gambar 5.26. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 116 |
| Gambar 5.27. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 117 |
| Gambar 5.28. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 118 |
| Gambar 5.29. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor | 119 |
| Gambar 5.30. Profil konsentrasi Uap air arah radial pada arah aksial tertentu ... | 120 |
| Gambar 5.31. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 122 |
| Gambar 5.32. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 123 |
| Gambar 5.33. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 124 |
| Gambar 5.34. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida | 125 |
| Gambar 5.35. Profil konsentrasi Karbon Dioksida arah radial pada arah aksial tertentu | 125 |
| Gambar 5.36. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 127 |
| Gambar 5.37. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor..... | 128 |

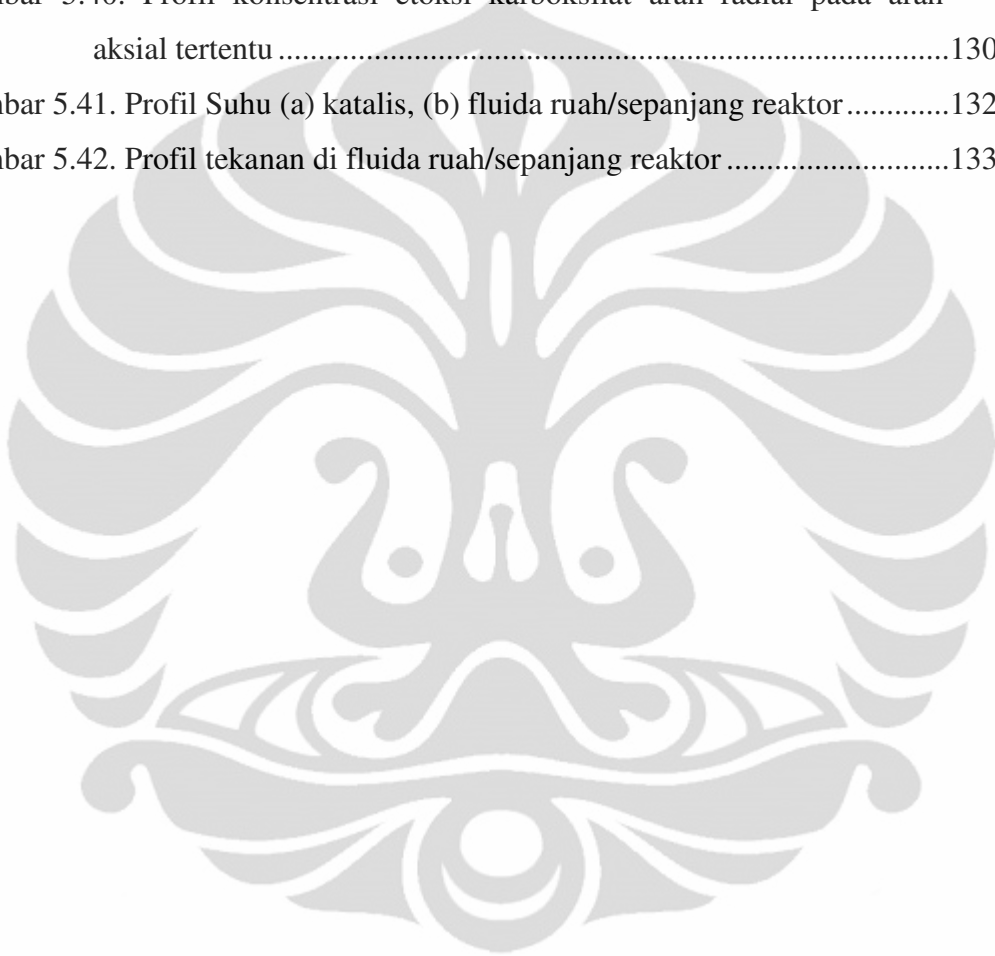
Gambar 5.38. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi
 $P_{\text{feed}} = 1 \text{ bar}$, $T_{\text{feed}} = 400 \text{ K}$, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5,
 $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor.....129

Gambar 5.39. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi
 $P_{\text{feed}} = 1 \text{ bar}$, $T_{\text{feed}} = 400 \text{ K}$, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, u_{feed}
 $= 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida130

Gambar 5.40. Profil konsentrasi etoksi karboksilat arah radial pada arah
aksial tertentu130

Gambar 5.41. Profil Suhu (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor132

Gambar 5.42. Profil tekanan di fluida ruah/sepanjang reaktor133



DAFTAR TABEL

| | |
|---|-----|
| Tabel 2.1 Perbandingan spesifikasi diesel GTL dan diesel konvensional | 10 |
| Tabel 2.2 Perbandingan biaya investasi dan pendapatan per tahun beberapa teknologi gas (Umpan Gas = 100 MMSCFD)..... | 11 |
| Tabel 2.3 Komposisi <i>Syngas</i> | 12 |
| Tabel 2.4 Proses produksi <i>Syngas</i> di industri | 13 |
| Tabel 2.5 Perbedaan katalis besi (Fe) dan kobal (Co) | 23 |
| Tabel 2.6 Efek promotor pada katalis besi (Fe) | 24 |
| Tabel 2.7 Efek promotor pada katalis cobalt (Co)..... | 24 |
| Tabel 2.8 Perbedaan reaktor fixed bed dan circulating bed | 32 |
| Tabel 2.9 Produk reaktor sintesis FT | 34 |
| Tabel 2.10 Aplikasi reaktor unggun tetap..... | 38 |
| Tabel 4.1. Pesan Error pada COMSOL..... | 80 |
| Tabel 5.1. Data kondisi operasi eksperimen | 83 |
| Tabel 5.2. Data kondisi operasi Comsol untuk validasi data eksperimen..... | 83 |
| Tabel 5.3. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-1 | 84 |
| Tabel 5.4. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-2..... | 84 |
| Tabel 5.5. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-3..... | 85 |
| Tabel 5.6. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-4..... | 85 |
| Tabel 5.7. Data hasil eksperimen dan kondisi sesuai tabel 5.1 | 86 |
| Tabel 5.8. Data hasil eksperimen dan kondisi sesuai tabel 5.2 | 86 |
| Tabel 5.9. Data hasil simulasi ke-1 dan kondisi sesuai tabel 5.3 | 87 |
| Tabel 5.10. Data hasil simulasi ke-2 dan kondisi sesuai tabel 5.4 | 87 |
| Tabel 5.11. Data hasil simulasi ke-3 dan kondisi sesuai tabel 5.5 | 88 |
| Tabel 5.12. Data hasil simulasi ke-4 dan kondisi sesuai tabel 5.6 | 88 |
| Tabel 5.13. Data hasil simulasi pengaruh tekanan awal P = 1, 2 dan 5 bar | 134 |
| Tabel 5.14. Data hasil simulasi pengaruh penjagaan suhu dinding reaktor dan divariasikan dari 300 K, 320 K, 340 K dan 400 K | 135 |
| Tabel 5.15. Data hasil simulasi pengaruh suhu awal reaksi pada suhu 400 K, 410 K, 430 K dan 450 K..... | 135 |
| Tabel 5.16. Data hasil simulasi pengaruh variasi rasio H ₂ /CO = 1 ; 1,5 ; 2, yaitu fraksi mol H ₂ fraksi mol CO = 0,3/0,3 ; 0,6/0,4 ; 0,6/0,3..... | 136 |
| Tabel 6.1. Hasil Validasi dan Simulasi | 137 |
| Tabel 6.2. Konversi hasil simulasi berdasarkan tekanan, suhu dinding reaktor, temperatur dan rasio H ₂ /CO | 137 |

DAFTAR SIMBOL

c_A = konsentrasi A

u = kecepatan

\mathfrak{D}_{AB} = koefisien dispersifitas gas A terhadap B

x, y, z, r, θ, ϕ = arah

ρ = massa jenis campuran

T = temperatur

k = konduktivitas termal

μ = viskositas campuran

p = tekanan

\mathcal{D}_{AB} = koefisien dispersifitas

$p_{cA,B}$ = 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

ρ_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

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Indonesia merupakan salah satu negara yang sedang berkembang. Sebagai suatu negara yang sedang berkembang, kebutuhan energi Indonesia akan terus meningkat seiring dengan perkembangan kegiatan industri, perdagangan dan jasa serta penambahan penduduk. Perkembangan tersebut berdampak pada meningkatnya kebutuhan energi terutama untuk kegiatan industri. Salah satu industri yang cukup berperan penting untuk memenuhi kebutuhan hidup masyarakat adalah industri petrokimia. Perkembangan industri secara kontinyu membutuhkan pasokan energi yang berkesinambungan atau "*sustainable energi supply*" yang bertujuan untuk meningkatkan produktivitas industri secara efektif dan efisien. Dengan kata lain pasokan energi yang berkesinambungan dan ketersediaan bahan baku secara kontinyu serta teknologi yang memadai merupakan hal yang mutlak sangat penting untuk kelangsungan industri. Oleh karena itu, kita harus mengoptimalkan pemanfaatan sumber daya alam dengan baik.

Tingginya konsumsi masyarakat akan BBM, tidak mampu diimbangi oleh produksi dan ketersediaan cadangan minyak bumi yang ada di perut bumi negara kita. Sebagai dampak dari konsumsi BBM tersebut adalah tingginya tingkat pencemaran lingkungan melalui emisi yang dihasilkan, seperti CO₂, NO_x, SO_x, dll. Hal ini terkait langsung dengan isu dunia mengenai pemanasan global sebagai akibat dari efek rumah kaca. Sebagai bangsa yang dianugerahi oleh beragam SDA, sudah saatnya bagi bangsa ini untuk mulai melirik SDA lain, seperti gas alam, untuk diolah sehingga dapat mengurangi porsi minyak bumi, baik sebagai sumber energi maupun bahan baku industri lainnya. Untuk itu, diversifikasi dan penguasaan teknologi merupakan faktor yang penting disamping kesadaran akan kelestarian lingkungan. Teknologi *Gas To Liquid* (GTL) merupakan salah satu teknologi yang saat ini tengah berkembang di dunia karena kemampuannya dalam mengolah gas alam guna menghasilkan bahan bakar cair

sintetis yang mirip dengan produk-produk turunan minyak bumi, bahkan dengan kualitas yang lebih baik.

Perkembangan teknologi komputasi berbantuan komputer dewasa ini telah demikian pesat. Dalam disiplin ilmu kimia, khususnya teknik kimia, penggunaannya telah demikian meluas mulai dari hal-hal sederhana sampai yang lebih kompleks misalnya pada proses pemodelan dan simulasi dari suatu sistem atau suatu alat proses seperti reaktor.

Reaktor adalah bagian yang sangat penting dalam berbagai proses kimia karena reaktor merupakan tempat proses reaksi kimia pembuatan suatu produk berlangsung. Oleh karena itu perancangan suatu reaktor yang sesuai dengan proses yang akan terjadi sangat penting dan memerlukan perhatian yang besar, sehingga bisa menghasilkan reaktor dengan konfigurasi yang optimum.

Dalam kaitannya dengan pemodelan dan simulasi, model suatu alat proses, dalam hal ini reaktor jenis unggun tetap (*fixed bed reaktor*) telah mengalami berbagai tahap pengembangan. Reaktor unggun tetap merupakan salah satu tipe reaktor yang banyak digunakan dalam industri, terutama dalam reaksi *multi phase*. Studi tentang reaktor unggun tetap telah berkembang dari skala mikro yang melibatkan fenomena reaksi dan difusi hingga skala makro yang berhubungan dengan geometri dan karakteristik reaktor yang melibatkan perpindahan massa dan perpindahan energi, serta dispersi. Dimulai dengan model sederhana satu dimensi homogen yang hanya memperhitungkan pengaruh parameter pada arah aksial saja dengan model skala reaktor dan skala partikel yang tidak dipisahkan, kemudian mulai dibuat model heterogen satu dimensi dan model homogen dua dimensi.

Pemodelan yang mutakhir tentunya memperhitungkan berbagai aspek yang terlibat pada setiap dimensi yang ditinjau. Akan tetapi untuk keperluan praktis komputasi, biasanya pengaruh yang kurang signifikan dieliminasi sehingga menghasilkan model yang lebih sederhana tetapi representatif dan dapat diterapkan pada keperluan praktis di industri.

Teknologi *Gas-To-Liquid (GTL)* merupakan salah satu teknologi yang saat ini tengah berkembang di dunia karena kemampuannya dalam mengolah gas alam guna menghasilkan bahan bakar cair sintetis yang mirip dengan produk-

produk turunan minyak bumi, bahkan dengan kualitas yang lebih baik. Tahapan proses dari teknologi GTL ini adalah : tahap pemurnian gas, proses pembuatan gas sintesis, proses Fischer-Tropsch, dan tahap peningkatan kualitas produk (*product upgrading*).

Dengan teknologi GTL, cadangan gas sebesar 1 TCF (Trillion Cubic Feet) dapat menghasilkan produk GTL berupa bahan bakar sintetis (diesel dan naphtha) sebesar 10.000 barrel/hari selama 30 tahun, dengan asumsi laju alir umpan gas alam sebesar 100 MMSCFD (Million Standard Cubic Feet per Day). Data terakhir BP Statistics mencatat jumlah cadangan gas Indonesia tahun 2002 sebesar 92.5 TCF; dengan demikian kita dapat menghitung sendiri berapa barrel/hari diesel dan naphtha yang dapat diproduksi guna mengurangi impor BBM (solar) yang selama ini dilakukan.

Berbagai proses produksi dilakukan untuk menghasilkan gas sintesis, yang merupakan campuran gas CO dan H₂. Diantara cara untuk menghasilkan gas sintesis ini adalah melalui proses reformasi kukus (*steam reforming*) dengan bahan baku metana (CH₄) melalui reaktor tubular unggun tetap, parsial oksidasi, autotermal reforming.

Sintesis Fischer-Tropsch (FT) merupakan proses penting dalam industri untuk mengubah gas sintesis (H₂/CO) yang berasal dari bahan yang mengandung karbon seperti batu bara, biomassa, dan gas alam menjadi senyawa hidrokarbon dan oksigenat. Saat ini sintesis Fischer-Tropsch merupakan suatu pilihan untuk memproduksi bahan bakar transportasi yang ramah lingkungan dan sebagai bahan baku kimia. Meskipun sintesis FT telah diketahui sejak lama namun mekanisme reaksi dan distribusi produk masih menjadi perdebatan, demikian pula dengan kinetiknya.

Reaktor unggun tetap merupakan salah satu reaktor yang digunakan untuk proses FT selain reaktor sluri kolom gelembung dan reaktor unggun terfluidisasi. Rancangan reaktor unggun tetap sederhana, fleksibel dan mudah di *scale-up*. Dalam melakukan perancangan reaktor perlu dilakukan prediksi dan estimasi untuk mengetahui berbagai parameter yang terlibat di dalam sistem sehingga kita dapat mempersiapkan konfigurasi sistem pada kondisi yang seefisien mungkin. Untuk keperluan ini dibuat sebuah model dan simulasi

komputer yang dapat mewakili karakteristik reaktor unggun tetap. Dengan cara ini biaya perancangan dapat lebih diminimalisasi.

1.2. Perumusan Masalah

Untuk mengetahui kinerja reaktor unggun tetap pada proses *Fischer Tropsch* kita harus melakukan pemodelan dan simulasi pada reaktor tersebut. Untuk itu diperlukan suatu alat bantu, berupa model yang diselesaikan dengan program komputer, yang bisa digunakan untuk memprediksi proses yang terjadi dengan kondisi kinetika reaksi dengan katalis tertentu serta mempertimbangkan neraca massa, neraca energi, neraca momentum, faktor hidrodinamika berupa konveksi, dispersi dan perubahan momentum yang diperhitungkan pada arah aksial maupun radial.

1.3. Tujuan

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Mendapatkan model reaktor unggun tetap untuk reaksi Fischer Tropsch.
2. Melakukan simulasi dan mencari model matematik yang valid untuk mengetahui perilaku dan fenomena yang terjadi di dalam reaktor tersebut.
3. Mendapatkan informasi antara variabel bebas/eksperimen dengan variabel terikat/respons.
4. Mengetahui secara tepat mekanisme kinetik yang berkaitan antara laju konsumsi gas sintesis dengan produk yang dihasilkan.

1.4. Batasan Masalah

- Pada reaksi Fischer Tropsch menggunakan katalis Fe-Mn.
- Seluruh reaksi berlangsung pada reaktor unggun tetap pada kondisi tunak.
- Menggunakan reaksi kinetika Bo-Tao Teng 2005.
- Variabel bebas/eksperimen T_{in} , P_{in} , v_{in} dan rasio umpan.
- Parameter berupa geometri katalis dan reaktor.
- Variabel terikat adalah profil konsentrasi, spesi, profil temperatur dan profil tekanan.

- Mempertimbangkan neraca massa, energi dan momentum.
- Faktor hidrodinamika berupa konveksi, dispersi dan perubahan momentum yang diperhitungkan pada arah aksial di reaktor dan katalis maupun arah radial di katalis.
- Validasi model dilakukan dengan membandingkan hasil model dengan nilai-nilai yang didapat dari percobaan yang dilakukan oleh peneliti lainnya.
- Penyelesaian model menggunakan 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 REAKTOR UNGGUN TETAP

Berisikan penurunan model matematis dan langkah-langkah pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics.

BAB V. SIMULASI DAN PEMBAHASAN

Berisikan analisa dari hasil simulasi dan variasi beberapa variabel.

BAB VI. KESIMPULAN

Berisikan kesimpulan dari penelitian yang dilakukan beserta saran-saran



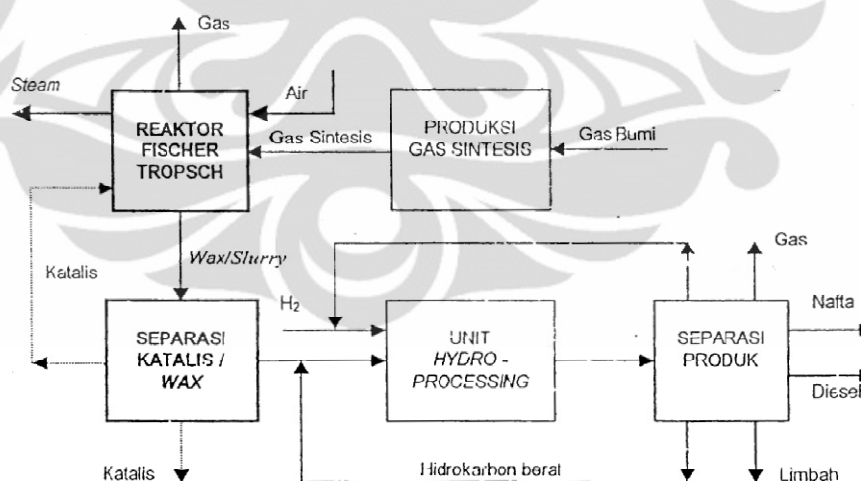
BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Proses Gas To Liquid (GTL)

Batu bara dan gas alam bisa dimanfaatkan sebagai feedstock untuk industri kimia dan bahan bakar kendaraan. Konversi gas alam menjadi hidrokarbon (*Gas-To-Liquid*) saat ini merupakan pembahasan yang menjanjikan dalam industri energi karena sangat menguntungkan secara ekonomi untuk memanfaatkan gas alam sebagai sumber bahan bakar yang ramah lingkungan, produk kimia kusus dan waxes. Batu bara dan gas alam dapat diubah menjadi gas sintesis melalui proses steam reforming dan parsial oksidasi.

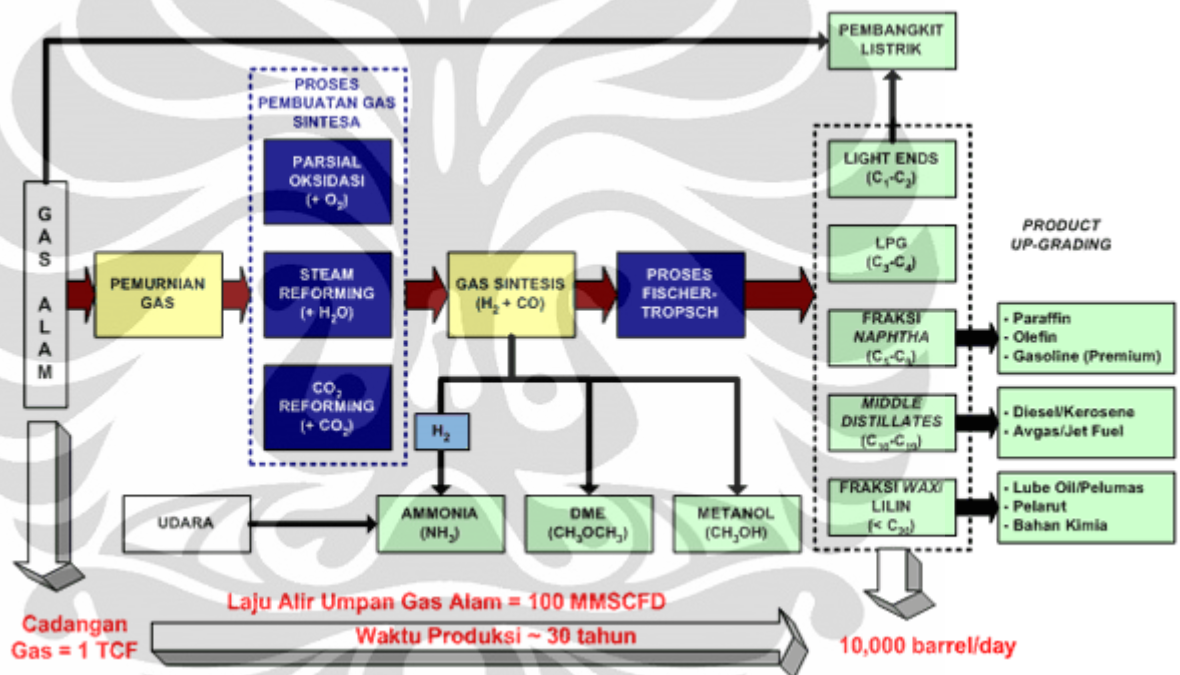
Salah satu pemanfaatan gas sintesis (campuran gas karbon monoksida dan hidrogen) adalah proses hidrogenasi karbon monoksida atau sintesis Fischer-Tropsch (F-T). Proses ini merupakan proses pemanfaatan gas alam secara tidak langsung untuk menghasilkan bahan bakar cair dan bahan-bahan petrokimia, biasa juga disebut dengan istilah *gas to liquid* (GTL). Skema proses GTL secara garis besar dapat digambarkan, sebagai berikut :



Gambar 2.1. Skema Proses GTL

Perkembangan teknologi GTL di dunia saat ini telah mencapai tahap komersial. Beberapa pemegang paten seperti *Sasol Ltd.*, *Shell*, *ExxonMobil*, *Rentech Inc.*, *Syntroleum Corp.*, *JNOC*, dll, telah berhasil mengoperasikan kilang-kilang GTL di berbagai penjuru dunia seperti Nigeria, Mesir, Argentina, Qatar, Iran, Malaysia, dan Australia. Produk yang dihasilkan dari teknologi GTL ini

meliputi: *naphtha*, *middle distillates*, dan lilin (*waxes*), namun dapat juga di arahkan ke produk dimetil eter (DME), dan metanol. Dari beberapa produk GTL tersebut, *middle distillates* (diesel dan bahan bakar jet) dapat mengganti langsung diesel berbasis minyak bumi yang digunakan selama ini dalam mesin diesel (*compression ignition engines*). Produk samping yang dihasilkan berupa hidrokarbon ringan (*tail gas*) masih dapat dimanfaatkan sebagai pembangkit tenaga (*power generation*), sedangkan hidrogen dapat diolah lanjut menjadi pupuk/urea atau dimanfaatkan sebagai sumber energi dalam merancang kilang GTL terintegrasi (lihat Gambar 2.2).



Gambar 2.2 Skema Teknologi Gas-To-Liquid (GTL) terintegrasi. (Sumber: Sasol, Ltd)

Dengan teknologi GTL, cadangan gas sebesar 1 TCF (*Trillion Cubic Feet*) dapat menghasilkan produk GTL berupa bahan bakar sintetis (*diesel* dan *naphtha*) sebesar 10,000 barrel/hari selama 30 tahun, dengan asumsi laju alir umpan gas alam sebesar 100 MMSCFD (*Million Standard Cubic Feet per Day*). Data terakhir *BP Statistics* mencatat jumlah cadangan gas Indonesia tahun 2002 sebesar 92.5 TCF; dengan demikian kita dapat menghitung sendiri berapa barrel/hari diesel dan naphtha yang dapat diproduksi guna mengurangi impor BBM (solar) yang selama ini dilakukan.

Tahapan proses dari teknologi GTL ini adalah: tahap pemurnian gas (*gas purification*), proses pembuatan gas sintesis (*synthesis gas process*), proses *Fischer-Tropsch* (*Fischer-Tropsch process*), dan tahap peningkatan kualitas produk (*product upgrading*).

1. Tahapan Pemurnian Gas (Gas Purification)

Pada tahap ini, gas alam yang keluar dari sumur dibersihkan dari senyawa-senyawa yang dapat mengganggu jalannya proses selanjutnya. Senyawa-senyawa tersebut diantaranya : H₂S, CO₂, H₂O, dll. Teknologi komersial yang dapat digunakan diantaranya proses absorpsi menggunakan pelarut tertentu, misalnya : MEA (monoetanolamin), DEA (dietanolamin), dan TEG (trietilen glikol).

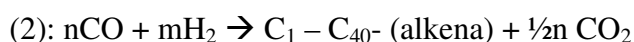
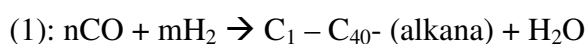
2. Tahapan Pembuatan Gas Sintesis (*Synthesis Gas Process*)

Pada tahapan ini, gas alam yang telah dibersihkan, direaksikan sehingga menghasilkan gas sintesis. Gas sintesis atau *SynGas* adalah istilah yang diberikan kepada campuran gas karbonmonoksida (CO) dengan hidrogen (H₂) yang digunakan untuk mensintesis berbagai macam zat seperti metanol dan ammonia. Proses pembuatan gas sintesis yang telah komersial adalah: proses *steam reforming*, oksidasi parsial, dan *CO₂ reforming*.

3. Tahapan Reaksi *Fischer-Tropsch* (*Fischer-Tropsch Process*)

Reaksi *Fischer-Tropsch* (FT) merupakan tahapan reaksi yang paling penting dalam teknologi GTL. Pada tahap reaksi FT ini, gas sintesis dikonversi menjadi hidrokarbon rantai panjang. Jenis katalis, jenis reaktor, rasio H₂/CO, dan kondisi operasi merupakan faktor yang menentukan jenis produk yang dihasilkan.

Reaksi FT keseluruhan secara umum :



Keterangan: harga n dan m sangat bergantung pada metode pembuatan gas sintesis dan jenis bahan baku yang digunakan, misalnya: rasio H₂/CO gas bumi = 1.8-2.3, batubara = 0.6-0.8. Jenis katalis yang banyak digunakan adalah katalis berbasis kobalt (Co) dan besi (Fe). Jenis reaktor FT yang

digunakan misalnya terdiri dari reaktor *slurry*, *fixed bed*, dan *fluidized*. Reaktor-reaktor tersebut dioperasikan pada rentang suhu antara 149°C-371°C dengan tekanan antara 0.7-41 bar.

4. Tahapan Peningkatan Kualitas Produk (*Product Upgrading*)

Tahap ini merupakan tahap untuk mendapatkan produk sesuai jenis dan spesifikasi yang diinginkan. Proses yang digunakan merupakan proses yang telah digunakan secara komersial pada kilang-kilang minyak umumnya, seperti: proses *catalytic reforming*, *fluid catalytic cracking*, isomerisasi, alkilasi, dll.

Semakin tingginya perhatian dunia akan kelestarian lingkungan membuat semakin ketatnya regulasi-regulasi yang dibuat berkaitan dengan spesifikasi bahan bakar. Produk GTL, khususnya diesel, telah terbukti memiliki karakteristik yang lebih baik bila dibandingkan dengan diesel yang dihasilkan dari minyak bumi (lihat Tabel 2.1); di samping itu diesel GTL juga lebih ramah lingkungan karena mampu mereduksi emisi dari gas buang yang dihasilkan. Reduksi emisi yang dihasilkan untuk hidrokarbon (HC), karbonmonoksida (CO), NO_x, dan partikulat masing-masing sebesar: 16%, 29%, 14%, dan 46%. Fraksi nafta yang dihasilkan dari kilang GTL memiliki angka oktan RON 40 (perbandingan: nafta dari minyak bumi memiliki angka oktan RON 50), sehingga tidak dapat langsung digunakan sebagai bahan bakar *gasoline* (premium), namun sangat baik sebagai bahan baku petrokimia terutama untuk memproduksi etilen. Kerosin yang dihasilkan juga memiliki karakteristik yang baik karena memiliki kandungan sulfur yang rendah serta *smoke point* sekitar 45 mm (perbandingan: kerosin dari minyak bumi memiliki *smoke point* sekitar 20 mm).

Tabel 2.1 Perbandingan spesifikasi diesel GTL dan diesel konvensional

| Spesifikasi | Unit | Diesel Konvensional (Minyak Bumi) | Sasol GTL Diesel | Shell GTL Diesel |
|-------------------|-------------------|-----------------------------------|------------------|------------------|
| Massa Jenis, 15°C | g/cm ³ | 0.83 | 0.78 | 0.78 |
| Viskositas | cSt | 2.0 – 4.1 | 2.0 | 2.8 |
| Sulfur | ppm | > 350 | < 5 | < 3 |

| | | | | |
|---------------|----------|---------|-----|-------|
| Aromatik | % volume | > 10 | < 3 | < 0.1 |
| Cetane Number | | 45 – 50 | 73 | 80 |

Sumber: Yuji Morita, IEEJ, November 2001

Selain lebih baik dalam hal karakteristik, teknologi GTL ini juga memiliki keunggulan karena dapat diaplikasikan tidak hanya pada sumur gas yang memiliki cadangan besar, tetapi juga pada sumur-sumur gas kecil/marginal (*stranded gas*). Teknologi GTL dapat diterapkan pada sumur gas dengan cadangan 1-3 TCF (bandingkan dengan LNG yang membutuhkan sumur gas dengan cadangan 6-8 TCF). Disamping itu, dengan biaya investasi yang relatif sama dengan pembangunan kilang lainnya, kilang GTL mampu memberikan pendapatan yang relatif lebih besar pertahunnya (lihat Tabel 2.2).

Tabel 2.2 Perbandingan biaya investasi dan pendapatan per tahun beberapa teknologi gas (Umpan Gas = 100 MMSCFD)

| Nama Senyawa | Produksi | Pendapatan/Tahun (Juta USD) | Biaya Investasi (Juta USD) |
|-----------------------|--------------------|--------------------------------|-------------------------------|
| Bahan Bakar GTL | 10,000 barrel/hari | 145* | 400 |
| Gas melalui pipa | 100 MMSCFD | 110 | 250 |
| LNG | 100 MMSCFD | 110 | > 600 |
| Metanol | 3,000 ton/hari | 220 | 475 |
| NH ₃ /Urea | 3,100 ton/hari | 180 | 485 |
| Pembangkit Listrik | 550 MW | 138 | 415 |

* termasuk penjualan listrik yang dihasilkan (Sumber : Rentech, Inc.)

2.2 Produksi Gas Sintesis

Gas sintesis (*syngas*) dapat diproduksi melalui proses *steam reforming* atau (*catalytic*) parsial *oksidasi* bahan bakar fosil: batu bara, gas alam, refinery residues, biomassa atau gas buang industri. Komposisi *syngas* dari berbagai sumber dan proses terdapat pada Tabel 2.3. Proses produksi *syngas* yang telah diterapkan di industri pada Tabel 2.4.

Tabel 2.3 Komposisi *Syngas*. (Laan, 1999)

| Feedstock | Proses | Komponen (vol%) | | | |
|---|-----------------------|-----------------|------|-----------------|---------|
| | | H ₂ | CO | CO ₂ | Lainnya |
| Gas alam, steam | Steam reforming (SR) | 73.8 | 15.5 | 6.6 | 4.1 |
| Gas alam, steam, CO ₂ | CO ₂ -SR | 52.3 | 26.1 | 8.5 | 13.1 |
| Gas alam, O ₂ , steam, CO ₂ | Autothermal Reforming | 60.2 | 30.2 | 7.5 | 2.0 |
| Batu bara/heavyoil, steam | Gasifikasi | 67.8 | 28.7 | 2.9 | 0.6 |
| Batu bara, steam, oksigen | Texacogasifier | 35.1 | 51.8 | 10.6 | 2.5 |
| Batu bara, steam, oksigen | Shell/Koppersgasifier | 30.1 | 66.1 | 2.5 | 1.3 |
| Batu bara, steam, oksigen | Lurgigasifier | 39.1 | 18.9 | 29.7 | 12.3 |

Synthesis gas yang dihasilkan dari reformasi gas alam, baik dengan uap air, karbon dioksida, atau parsial oksidasi. Reaksi yang terjadi adalah:

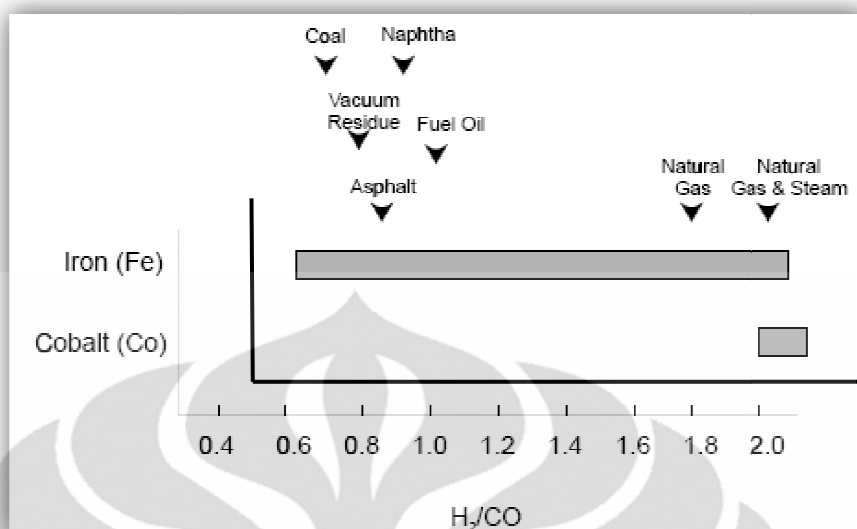


Kombinasi proses produksi synthesis gas biasanya digunakan untuk menghasilkan synthesis gas dengan rasio stoikiometri hydrogen dan carbon monoxide yang sesuai dengan kebutuhan. (Laan, 1999). Pada proses GTL, proses konversi FT membutuhkan rasio *syngas* tertentu tergantung pada produk yang diinginkan.

Syngas yang diproduksi dari proses *gasifier* batu bara modern (Shell/Koppers atau Texaco gasifier) dan dari residu heavy oil memiliki kandungan CO yang lebih tinggi dari pada *syngas* dari gas alam. Untuk mendapatkan rasio H₂/CO yang diinginkan, biasanya ≥ 2 , reaksi *water gas shift* (WGS) merupakan reaksi yang penting untuk diperhatikan terutama untuk katalis besi. Gambar 2.3 menunjukkan rentang aplikasi untuk katalis besi (aktivitas WGS tinggi) dan cobalt (tidak ada aktivitas WGS).

Table 2.4 Proses produksi *Syngas* di industri (Samuel, 2003)

| Proses | Diskripsi | Developers/ Licensors |
|------------------------------|---|---|
| Steam Reforming (SMR) | <p>Steam & gas alam direaksikan pada 800-900 °C dan tekanan 20-30 bar dengan katalis nickel</p> $\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 3\text{H}_2 + \text{CO}$ $\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$ | <ul style="list-style-type: none"> -Haldor Topsoe AS -Foster Wheeler Corp -Lurgi AG -International BV -Kinetics Technology |
| Parsial oksidasi (POX) | <p>Dapat digunakan untuk produksi syngas dari batu bara atau produk heavy oil. Gas alam dibakar pada temperatur tinggi (1200-1500 °C) dan tekanan (140+ bar). Tanpa katalis. Menghasilkan rasio H₂/CO yang ideal.</p> $2\text{CH}_4 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO} + 4\text{H}_2$ | <ul style="list-style-type: none"> -Texaco Inc. -Royal Dutch/Shell. |
| Auto-thermal reforming (ATR) | <p>Merupakan proses <i>hybrid</i>, gas alam direaksikan dengan uap air dan oksigen, kadang dengan tambahan CO₂. Parsial oksidasi berlangsung terlebih dahulu kemudian diikuti oleh <i>steam reforming</i> dalam bed katalis, dalam reaktor yang sama.</p> $2\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow 5\text{H}_2 + 2\text{CO}$ | <ul style="list-style-type: none"> - Lurgi -Haldor Topsoe |



Gambar 2.3 Feedstock dan katalis.

Katalis besi dapat mengubah *syngas* dengan rasio H₂/CO yang rendah tanpa reaksi pergeseran eksternal. Satu atau lebih proses produksi *syngas*, berjalan secara parallel, dengan kombinasi atau penambahan atau ekstraksi hidrogen, biasa dilakukan untuk mendapatkan rasio *syngas* yang diinginkan. (Samuel, 2003).

Basini dan Piovesan, 1998 [Laan, 1999] melakukan evaluasi perbandingan proses steam-CO₂ reforming, *autothermal reforming*, dan kombinasi proses reformasi, menyimpulkan bahwa secara ekonomi kombinasi proses reformasi memerlukan biaya produksi dan investasi yang paling rendah untuk menghasilkan *syngas* dengan rasio H₂/CO = 2.

2.3 Sintesis Fischer-Tropsch

Istilah *Gas To Liquids* sebenarnya mencakup berbagai aspek yang berhubungan dengan pencairan gas bumi baik melalui proses langsung (LNG) maupun tidak langsung (nafta, diesel, metanol, dll). Untuk proses pencairan tidak langsung menghasilkan produk bahan bakar cair (nafta, diesel), istilah ini selalu dikaitkan dengan proses sintesis FT.

Secara keseluruhan proses GTL ini terdiri dari unit produksi gas sintesis, sintesis FT dengan separasi *katalis/wax* dan *product work-up* atau *upgrading* yang terdiri dari *unit hydroprocessing* dan separasi produk (Gambar 2.2). Pada prosesnya, gas bumi yang telah dimurnikan dikonversi menjadi gas sintesis (H₂, CO) melalui teknologi reformasi (reformasi kukus, oksidasi parsial, *autothermal*

reformer). Gas sintesis yang terbentuk dengan rasio H_2/CO tertentu kemudian dikonversi menjadi bahan cair dengan teknologi sintesis FT. Panas hasil reaksi digunakan untuk menghasilkan *steam* di pipa pendingin internal. Produk gas dapat digunakan sebagai bahan bakar atau dikembalikan ke dalam reaktor. Produk keluaran reaktor berupa wax bercampur dengan padatan katalis.

Unit separasi digunakan untuk mendapatkan *wax* bersih (*syncrude/synthetic crude*), sementara itu padatan katalis yang diperoleh bisa langsung dibuang atau dikembalikan ke reaktor. Wax bersih diumpukan unit *upgrading (hydrocracking)* dan kemudian disepari/fraksionasi untuk mendapatkan produk akhir yang diinginkan (nafta, diesel). Hidrogen yang tidak terkonversi dan wax produk bagian bawah separasi produk/fraksionasi biasanya diumpukan kembali ke dalam *unit hydrocracking*. Produk gas (*light end*) dapat dikembalikan ke reaktor FT atau digunakan sebagai bahan bakar.

2.3.1 Sejarah Pengembangan FT

Pengembangan teknologi FT secara kronologis dapat diuraikan sebagai berikut :

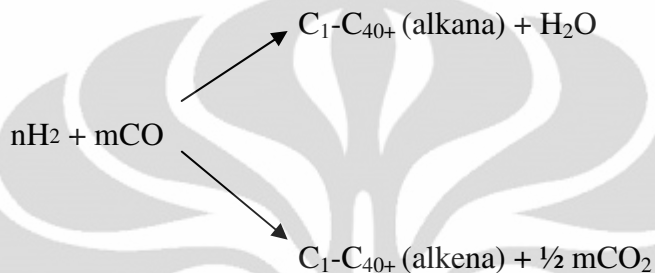
- 1903 P.Sabatier dan J.D.Senerens melakukan percobaan dengan hidrogenasi karbon monoksida (CO) dengan katalis Ni untuk memproduksi gas CH_4 .
- 1913 BASF mendapatkan paten dalam preparasi hidrokarbon dan oksigenat dengan hidrogenasi CO pada tekanan tinggi.
- 1922 Fischer dan Tropsch di Kaiser Wilhelm Institute fur Kohle Forschung (KWIK) memproduksi Synthol, bagian utama berupa oksigenat dari H_2 dan CO menggunakan katalis besi (Fe).
- 1925 Fischer dan Tropsch mensintesis hidrokarbon yang lebih tinggi pada tekanan atmosfer menggunakan katalis nikel (Ni) dan kobal (Co).
- 1931 Tropsch meninggalkan Jerman bergabung dengan UOP di USA.
- 1933 Ruhrchemie mengembangkan katalis Co untuk mengkonversi gas sintesis dengan bahan baku batu bara.
- 1935 Tropsch kembali ke Jerman, proses komersial dimulai dengan katalis Co
- 1937 Fischer dan Pichler meneliti katalis Fe pada tekanan sedang dan katalis Ru pada tekanan tinggi.

- 1939 Katalis Fe menggantikan Co dalam kilang komersial karena masalah harga. Kilang di Jerman memproduksi 15000 BPD dengan bahan baku batu bara untuk mendukung perang Jerman hingga tahun 1945.
- 1945 Catatan Jerman tentang teknologi FT dipindah ke USA.
- 1949 Kolbel dan Engelhardt mereaksikan CO dan H₂O untuk memproduksi hidrokarbon.
- 1950 Penelitian hidrokarbon dimulai dengan reaktor fluidized bed di Brownsville, Texas, menggunakan bahan baku gas bumi. Secara teknik sukses tetapi kemudian berhenti pada 1953 karena penemuan sumber minyak skala besar di timur tengah dan lainnya.
- 1953 Penelitian FT di Bureau of Mines (DOE) dimulai oleh R.B.Andarson dan J.F.Shultz.
- 1954 Perusahaan minyak Amerika memulai penelitian dalam mengkonversi gas bumi dengan sintesis FT. Hal ini tidak diteruskan karena penemuan sumber minyak dalam skala besar di dunia.
- 1955 Sasol, perusahaan di Afrika Selatan memulai Sasol I, konversi batu bara menjadi cairan menggunakan reaktor *fixed bed* dan *fluidized bed* dengan katalis Fe. Teknologi yang digunakan mengacu pada percobaan di Jerman sebelumnya.
- 1973 Kebangkitan FT dengan adanya krisis minyak tahun 1970-an. Pencairan batu bara secara tidak langsung menggunakan teknologi FT dipertimbangkan akan tetapi terlalu mahal.
- 1980 Pihak akademi menemukan "C1 Chemistry". Sasol meningkatkan operasi dengan Sasol II dan Sasol III menggunakan pengembangan teknologi *fluidized bed*.
- 1984 Syntroleum menemukan teknologi FT secara komersial.
- 1990 Konseptual aplikasi Gas To Liquids (GTL) muncul.
- 1993 Sasol meluncurkan proses slurry. Mossas, Afrika Selatan (25000 BPD) meluncurkan kilang GTL dengan bahan baku gas bumi. Shell membuka kilang GTL di Bintulu, Malaysia (12500 BPD).
- 1997 Pengembangan teknologi GTL modern dimulai.

2001 Pemain utama mulai bermunculan seperti Sasol, Shell, ExxonMobil, BP dan Conoco, dengan aktifitas yang didukung oleh Rentech dan Syntroleum, serta didukung pula oleh Statoil, Texaco, Philips, Chevron, dll.

2.3.2 Kimia sintesis FT

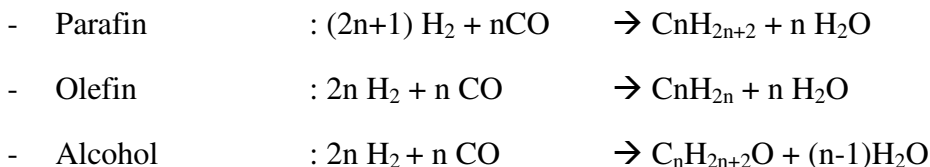
Reaksi keseluruhan secara umum dapat ditulis sebagai berikut :



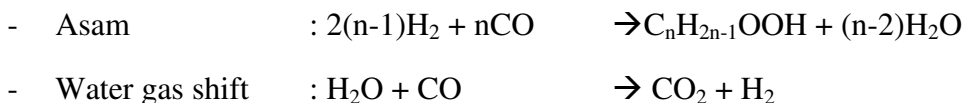
Harga n dan m sangat bervariasi tergantung pada metoda produksi, gas sintesis (reformasi) yang digunakan dan sumber bahan karbon. Coke, coal dan residu menghasilkan rasio gas sintesis H_2/CO 0.6 - 0.8; sedangkan nafta, minyak bakar dan gas Btu rendah menghasilkan rasio 0.9 - 1.1; gas bumi menghasilkan rasio 1,8 - 2.3. Hidrokarbon yang terbentuk melalui sintesis FT memiliki jumlah karbon $\text{C}_1 - \text{C}_{100+}$ baik alkana atau alkena tergantung pada rasio H_2/CO , katalis, jenis reaktor dan kondisi operasi. Alkana yang terbentuk didominasi oleh kandungan rantai lurus, sedangkan produk alkena banyak yang berjenis tersier.

Banyak reaksi terjadi, yang pada akhirnya dipermudah dengan reaksi rantai yang terbentuk seperti berikut ini (Bo-Tao Teng 2006):

✚ Reaksi utama



✚ Reaksi samping

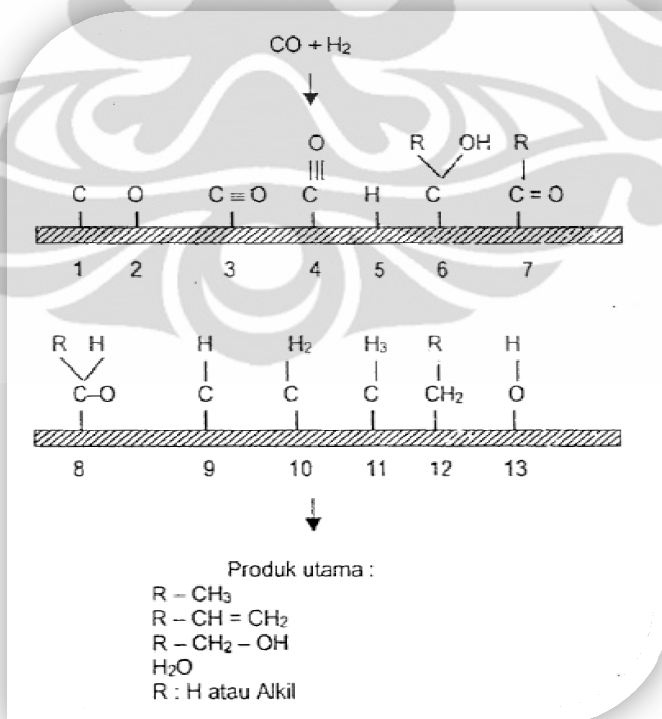


2.3.3 Mekanisme Reaksi Fischer-Tropsch

FT sintesis adalah reaksi polimerisasi dengan langkah sebagai berikut:

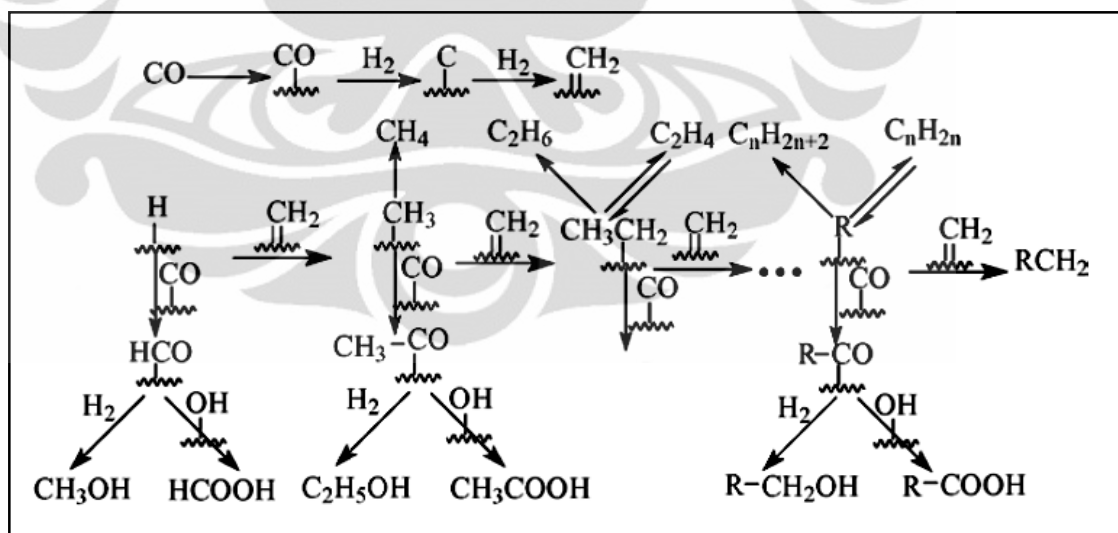
1. Reaksi adsorpsi
2. Inisiasi pembentukan rantai
3. Pertumbuhan rantai
4. Terminasi pertumbuhan rantai
5. Desorpsi produk
6. Readsorpsi dan reaksi lebih lanjut

Berbagai macam variasi spesi permukaan telah banyak diusulkan untuk menggambarkan inisiasi pembentukan dan pertumbuhan rantai. Gambar 2.4 yang diadaptasi dari Schulz dkk dan Roofer-De Pooter (1970) memberi gambaran pengamatan dan postulasi spesi di permukaan katalis selama sintesis FT. Pada gambar ini menunjukkan bagian berupa reaktan teradsorpsi: 1,2,3,4,5; intermediet dengan kandungan oksigen: 6,7,8; dari intermediet hidrokarbon: 9,10,11,12. Beberapa senyawa tersebut merupakan monomer yang lebih lanjut memungkinkan bereaksi sehingga pertumbuhan rantai terjadi.



Gambar 2.4 Pengamatan dan postulat kemisorpsi spesi selama sintesis FT (Laan, 1999)

Mekanisme pertumbuhan rantai yang sangat penting untuk pembentukan hidrokarbon dengan katalis Fe dan Mn adalah mekanisme karbida di permukaan dengan insersi/penyisipan CH_2 . Monomer dari mekanisme karbida adalah sebuah spesi metilen (CH_2) (Gambar 2.4 no.10). CO dan H_2 diasumsikan untuk diadsorb secara disosiasi. Beberapa spesi seperti CH (9), CH dengan insersi/penyisipan CH_2 . Monomer dari mekanisme karbida adalah sebuah spesi metilen (CH_2) (Gambar 2.4 no.10). CO dan H_2 (10) dan CH_3 (11) dapat terbentuk dengan cara ini. Pertumbuhan rantai terjadi dengan insersi dari monomer di spesi pertumbuhan alkil (12). Sedangkan terminasi dapat terjadi dengan pengurangan hidrogen membentuk sebuah olefin atau adisi spesi CH_3 (11) atau penambahan hidrogen membentuk sebuah parafin. Beberapa peneliti menyebutkan suatu mekanisme dimana CH_2 terbentuk oleh hidrogen dengan disosiasi CO. Sedangkan CO teradsorb yang tak terdisosiasi bereaksi dengan hidrogen membentuk spesi enolik (HCOH). Setelah itu spesi enolik terdisosiasi menjadi air dan sebuah spesi metilen. Pertumbuhan rantai berikutnya dapat berlangsung dalam jalur yang sama. Gambar 2.5 menunjukkan representasi dari skema inisiasi, pertumbuhan dan terminasi rantai sesuai dengan mekanisme di atas.



Gambar 2.5. Mekanisme reaksi pembentukan parafin, olefin, alkohol dan asam melalui mekanisme penyisipan CH_2 ; R berarti $\text{C}_{n-1}\text{H}_{2n-1}$. untuk sintesis FT (Bo-Tao Teng 2006):

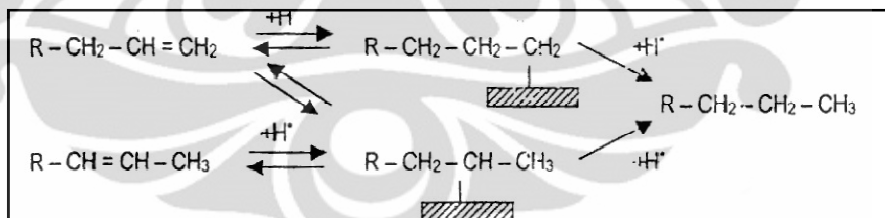
Mekanisme karbida oleh insersi CH_2 merupakan mekanisme yang masuk akal untuk reaksi pembentukan hidrokarbon dengan katalis Fe dan Mn. Akan

tetapi hal ini akan menjadi tidak menentu apakah pembentukan monomer berlangsung melalui hidrogenasi dari spesi yang terdisosiasi atau CO yang tidak terdisosiasi. Serangkaian reaksi dasar yang diusulkan untuk pembentukan hidrokarbon linier diberikan pada Tabel 2.3.

Reaksi sekunder terjadi ketika produk primer dilepas dari sebuah site dan saling berinteraksi dengan site yang lain sebelum meninggalkan reaktor. Beberapa reaksi sekunder yang mungkin terjadi dari α -olefin:

1. Hidrogenasi menghasilkan n-parafin
2. Isomerisasi
3. Cracking dan hidrogenolisis
4. Insersi menyebabkan pertumbuhan rantai, paling efektif untuk C_2H_4 dan C_3H_6
5. Adsorpsi kembali dan inisiasi rantai hidrokarbon.

Bo-Tao Teng menunjukkan sebuah mekanisme reaksi yang mungkin untuk readsorpsi olefin diikuti dengan hidrogenasi menghasilkan parafin atau isomerisasi di internal olefin melalui reaksi shift double bond (Gambar 2.6). Reaksi sekunder ini dapat mempengaruhi tipe dan berat molekul produk hidrokarbon yang dihasilkan.



Gambar 2.6. Reaksi sekunder dari olefin (Bo-Tao Teng 2006)

Adsorpsi

1. $\text{CO} + \text{s} \rightarrow \text{CO-s}$
2. $\text{COs} + \text{H-s} \rightarrow \text{C-s} + \text{OH-s}$
3. $\text{H}_2 + \text{C-s} \rightarrow \text{CH}_2\text{-s}$

Inisiasi pembentukan rantai

4. $\text{H}_2 + 2\text{s} \rightarrow 2\text{H-s}$
5. $\text{CH}_2\text{-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{CH}_3\text{-s} + \text{s}$
 $\text{CH}_2\text{-s} + \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{-s} \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CH}_2\text{-s} + \text{s}$

Reaksi permukaan, Pembentukan air

6. $\text{HO-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + 2\text{s}$
7. $\text{CO-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{HCO-s} + \text{s}$
 $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{-s} + \text{CO-s} \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CO-s} + \text{s}$
8. $\text{HCO-s} + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCHOH-s}$
 $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CO-s} + \text{H}_2 \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CHOH-s}$

Metanasi

9. $\text{HCHOH-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + 2\text{s}$
 $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CHOH-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CH}_2\text{OH} + 2\text{s}$

Pertumbuhan rantai

10. $\text{HCO-s} + \text{OH-s} \rightarrow \text{HCOOH} + 2\text{s}$
 $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CO-s} + \text{OH-s} \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{COOH} + 2\text{s}$

Hidrogenasi pembentukan paraffin

11. $\text{CH}_3\text{-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{CH}_4 + 2\text{s}$
 $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{-s} + \text{H-s} \rightarrow \text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{CH}_3 + 2\text{s}$

 β -dehidrogenasi membentuk olefin

12. $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{-s} = \text{C}_{n+1}\text{H}_{2n} + \text{H-s}$

Gambar 2.7 Usulan mekanisme reaksi sintesis FT (Bo-Tao Teng 2006)

2.3.4 Distribusi Produk Fischer Tropsch

Salah satu fungsi adanya mekanisme reaksi adalah untuk membangun ekspresi distribusi produk. Mekanisme reaksi yang diusulkan tersebut merupakan reaksi polimerisasi dengan persamaan laju yang telah ditemukan dalam reaksi

polimer klasik dapat digunakan. Ini mengacu kepada fungsi distribusi Anderson Flory Schultz (AFS) (Van Wechem, 1994):

$$\text{Log}(W_n/n) = n \log \alpha + \log((1-\alpha)^2/\alpha)$$

Dimana W_n adalah fraksi massa dari jumlah karbon n di produk dan α adalah kemungkinan pertumbuhan rantai dalam mekanisme tersebut. Tipikal kurva AFS untuk $\alpha = 0.8$. Terlihat bahwa metana dan etana selalu nampak menyimpang dari distribusi ini. Tambahan metana berasal dari reaksi metanasi paralel, dan menurunkan etana hasil dari readsorpsi dan penggabungan ke pertumbuhan rantai. Hasil penelitian mengindikasikan bahwa slope dari kurva pada nilai n yang lebih tinggi menjadi turun, sehingga memungkinkan menghasilkan reaksi sekunder.

Ketergantungan distribusi terhadap α mengindikasikan bahwa nafta ringan (gasoline) menonjol pada $\alpha = 0.8$ dan nilai α di atas 0.9 diperlukan untuk menghasilkan produk berat (diesel). Kilang GTL biasanya berusaha menggunakan nilai α lebih dari 0.95.

2.3.5 Katalis Fischer Tropsch

Kilang GTL merupakan serangkaian proses katalitik. Karena reaksi terjadi di permukaan katalis pada antar molekul, fenomena antarmuka seperti adsorpsi, difusi fisik ke dan dari permukaan akan terlibat di dalam proses. Bahan katalitik tersebut mempercepat laju reaksi dengan mengabsorpsi reaktan secara kimia ke dalam inti aktif yang spesifik atau pusat. Molekul diaktifasi oleh ikatan yang terbentuk oleh komponen permukaan dan menjadi lebih reaktif terhadap senyawa yang ada disekitarnya juga diadsorb. Dengan reaksi yang berkali-kali, permukaan katalis dapat dirancang untuk memilih bagian yang diinginkan. Sebagai contoh, CO dan H₂ bereaksi untuk membentuk produk dalam jumlah besar, tetapi dengan Ni, Cu, atau katalis Fe produk utamanya adalah metana, metanol atau hidrokarbon tertentu. Ini karena masing-masing logam mempunyai karakteristik kimia yang berbeda-beda yang mana reaksi permukaan secara langsung membentuk produk yang spesifik.

Kegunaan lain dengan adanya mekanisme reaksi seperti ditunjukkan sebelumnya adalah membantu mendefinisikan fungsi katalis sehingga mempermudah dalam perancangan katalis. Mekanisme ini mengindikasikan

apakah katalis digunakan atau tidak. Sebagai contoh untuk reaksi FT katalis memperlihatkan:

1. Laju aktifitas CO : Ru > Fe > Ni > Co > Rh > Pd > Pt
2. Hidrogenolisis : Ru > Ni > Rh > Co > Pt > Pd > Fe
3. Aktifitas Shift/WGSR : Fe > Ru > Ni > Pt > Co > Pd > Rh
4. Aktifitas hidrogenasi : Rh > Ru > Pd > Pt > Ni > Co > Fe

Hingga saat ini teknologi modern memusatkan seluruhnya pada pengembangan katalis berbasis Fe dan Co. Penggunaan katalis lainnya seperti nikel (Ni) dan Rutenium (Ru) memang sangatlah dimungkinkan, akan tetapi sangat sukar mengontrol kelebihan hidrogenolisis yang menghasilkan gas metana disamping harga katalis yang mahal (Ru, Pt, Rh).

2.3.6 Perbandingan Katalis Fe dan Co

Baik katalis Fe atau Co keduanya digunakan dalam sintesis FT. Sebagai gambaran, katalis Fe lebih fleksibel, lebih mudah pecah dan lebih murah dari Co, akan tetapi Co lebih mudah dalam meningkatkan selektifitas dan umur katalis jauh lebih panjang. Perbandingan antara katalis Fe dan Co bisa dilihat pada Tabel 2.5 berikut:

Tabel 2.5. Perbedaan katalis besi (Fe) dan kobal (Co)

| | Fe | Co |
|---------------------------|--|--------------------------|
| Pembuatan | Presipitasi, | Presipitasi |
| Penyangga | TiO ₂ , Al ₂ O ₃ , SiO ₂ , MgO | |
| Daya tahan | Rendah | Tinggi |
| Syngas H ₂ /CO | 0.7-2 | 2 (tanpa reaksi shift) |
| Fasa aktif | Fe → Fe ₃ C → Fe ₅ C ₂ | Logam Co |
| Selektifitas | Lebih bersifat olifinik | Lebih bersifat parafinik |
| Produk | α rendah | α lebih tinggi |
| Produk samping | H ₂ O , CO ₂ | H ₂ O |
| Fleksibilitas | Luas tergantung | Terbatas (tanpa reaktor) |
| Regenerasi | Tidak/Jarang | Ya |
| Pembuangan | Mudah | Biasanya diregenerasi |
| Harga | Murah | Mahal |

Penyangga (TiO_2 , Al_2O_3) pada katalis Co berfungsi untuk menambah luas permukaan, mengurangi deaktivasi katalis, mencegah terjadinya sintering/penggabungan dan menambah gasoline (SiO_2). Sedangkan efek promotor terhadap katalis FT diuraikan dalam tabel 2.6 dan 2.7 berikut (Anderson and Boudord, 1981; Thomas, 1999; Oukaci, 1999; Bukur, 2002; M.E.Dry, 2002):

Tabel 2.6. Efek promotor pada katalis besi (Fe)

| Promotor | Efek | Alasan |
|-------------------------|---|--|
| K_2O | Meningkatkan α Menurunkan C1 Meningkatkan Olefin | Menyumbang elektron ke Fe Meningkatkan adsorpsi CO Menurunkan disosiasi H_2 |
| MnO_2 | Meningkatkan parafin ringan | Menurunkan konsentrasi permukaan HICK |
| V_2O_5 | | Meningkatkan disosiasi CO pada interface/logam |
| TiO_2 | | Menurunkan pengurangan campuran oksida |
| La_2O_3 | Meningkatkan laju reaksi | Menandai permukaan logam |
| Y_2O_3 | | Meningkatkan adsorpsi CO |
| ThO_2 | | Menurunkan keasaman support |
| Cu | Meningkatkan laju pengurangan Fe | Mendisosiasi H_2 |

Tabel 2.7. Efek promotor pada katalis kobal (Co)

| Promotor | Efek | Alasan |
|-------------------------|---|--|
| K_2O | Meningkatkan α Menurunkan C, Meningkatkan <i>wax</i> | Menyumbang elektron ke Co Meningkatkan adsorpsi CO Menurunkan disosiasi H_2 |
| ZrO_2 | Meningkatkan α | Menurunkan konsentrasi permukaan H/CO |
| V_2O_5 | | Meningkatkan disosiasi CO |
| TiO_2 | | |
| Cr_2O_3 | | |

| | | |
|--------------------------------|------------------------|---------------------------------|
| La ₂ O ₃ | | pada interface / logam |
| Ru | Meningkatkan aktifitas | Menurunkan peracunan karbon |
| Fe | | |
| Re | Mengurangi keausan | Meningkatkan <i>active site</i> |
| Au | | |

2.3.7 Kinetika Fischer Tropsch

Mekanisme reaksi FT sangat kompleks yang melibatkan spesies dalam jumlah besar. Hal ini menyebabkan kesulitan dalam menjelaskan kinetika reaksi Fischer Tropsch. Secara umum para peneliti membuat postulat orde rendah untuk memodelkan laju konsumsi karbon monoksida (Beenackers, 2000).

$$-R_{CO} = kP_{H_2}^a P_{CO}^b$$

Anderson (1956) mengusulkan persamaan laju reaksi berdasarkan mekanisme Eley-Rideal yang terjadi melalui intermediate hydroxy-carbene:

$$-R_{H_2+CO} = \frac{kP_{H_2}P_{CO}}{P_{CO} + aP_{H_2O}}$$

Bo-Tao Teng menyusun laju reaksi pembentukan produk sintesis Fischer Tropsch yang sesuai dengan mekanisme reaksi Gambar 2.7 didapatkan :

✚ Reaksi utama

- Parafin : $3H_2 + CO \rightarrow CH_4 + H_2O$ $\Delta H = -204KJ$
- Olefin : $6H_2 + 3CO \rightarrow C_3H_6 + 3H_2O$ $\Delta H = -395KJ$
- Alcohol : $6H_2 + 2CO \rightarrow C_2H_6O + H_2O$ $\Delta H = -282KJ$

✚ Reaksi samping

- Asam : $2H_2 + 2CO \rightarrow C_2H_3OOH$ $\Delta H = -197KJ$
- Water gas shift : $2H_2O + CO \rightarrow CO_2 + H_2$ $\Delta H = -34KJ$

$$R_{CH_4} = k_{11,1} [CH_3-s][H-s] = k_{11,1} \alpha_{T,1} K_2 P_{H_2} [s]^2 \quad (R1)$$

$$R_{C_3H_6} = k_{12} [C_3H_7-s] - k_{12} P_{C_3H_6} [H-s] \quad (R2)$$

$$R_{C_2H_6O} = k_9 K_1 K_4 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2}^2 \prod_{i=1}^n \alpha_{T,1} [s]^2 \quad (R3)$$

$$R_{C_2H_3OOH} = \frac{k_{10} K_1 K_7 P_{CO} P_{H_2O} \prod_{i=1}^{n-1} \alpha_{T,i} [s]^2}{K_6} \quad (R4)$$

$$R_{WGS} = \frac{k_{w2} K_{w1} K_{w3} P_{CO} P_{H_2O} - k_{w-2} P_{H_2} P_{CO_2}}{\sqrt{K_{w3} P_{H_2}} + P_{H_2}} + \frac{K_{w1} P_{CO} P_{H_2O}}{P_{H_2}} \quad (R5)$$

Dimana :

$$[s] = \frac{1}{[1 + K_1 P_{CO} + \sqrt{K_4 P_{H_2}} + K_1 K_7 P_{CO} \sqrt{K_4 P_{H_2}} + K_1 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2} \sqrt{K_4 P_{H_2}} + \frac{K_1 K_2 K_4 K_6 P_{CO} P_{H_2}}{P_{H_2O}} + \frac{K_1 K_2 K_3 K_4 K_6 P_{CO} P_{H_2}^2}{P_{H_2O}} + \frac{P_{H_2O}}{K_6 \sqrt{K_4 P_{H_2}}} + \sum_{n=1}^n \prod_{i=1}^i \alpha_{T,i} (1 + K_1 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2} \sqrt{K_4 P_{H_2}} + K_1 K_7 P_{CO} \sqrt{K_4 P_{H_2}})] \sqrt{K_4 P_{H_2}}}$$

$$[H-s] = \sqrt{K_4 P_{H_2}} [s]$$

$$[CH_3-s] = \alpha_{T,1} [H-s]$$

$$[C_2H_5-s] = \alpha_{T,2} [H-s]$$

$$[C_3H_7-s] = \alpha_{T,1} \alpha_{T,2} \alpha_{T,3} \sqrt{K_4 P_{H_2}} [s]$$

$$\alpha_{T,1} = \frac{k_5 [CH_2-s] [H-s]}{k_5 [CH_2-s] + k_{9,1} K_1 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2} [H-s] + k_{11,1} [H-s]}$$

$$\alpha_{T,2} = \frac{k_5 [CH_2-s]}{k_5 [CH_2-s] + k_9 K_1 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2} [H-s] + k_{10} K_1 K_7 P_{CO} [OH-s] + k_{11} [H-s] + k_{12} (1 - \beta_2)}$$

$$\alpha_{T,3} = \frac{k_5 [CH_2-s]}{k_5 [CH_2-s] + k_9 K_1 K_7 K_8 P_{CO} P_{H_2} [H-s] + k_{10} K_1 K_7 P_{CO} [OH-s] + k_{11} [H-s] + k_{12} (1 - \beta_3)}$$

$$\beta_2 = \frac{k_{12} P_{C_2H_4} [H-s]}{k_{12} [C_2H_5-s]}$$

$$\beta_3 = \frac{k_{12} P_{\text{C}_3\text{H}_6} [\text{H-s}]}{k_{12} [\text{C}_3\text{H}_7\text{-s}]}$$

$$[\text{CH}_2\text{-s}] = \frac{K_1 K_2 K_3 K_4 K_6 P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2}^2}{P_{\text{H}_2\text{O}}} [\text{s}]$$

$$[\text{OH-s}] = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{K_6 \sqrt{K_4 P_{\text{H}_2}}} [\text{s}]$$

$$k_{\text{w-2}} = \frac{k_{\text{w2}} K_{\text{w1}} K_{\text{w3}}}{K_{\text{p}}}$$

$$K_{\text{p}} = \text{konstanta reaksi WGS} = \exp \left(18.01 - 5.87 \frac{1}{T} - 1.86 \log T + 2.70 T + \frac{1}{T^2} 58.2 \right)$$

Ketergantungan temperatur dari konstanta reaksi dievaluasi sesuai dengan persamaan Arrhenius tipe:

$$k_i(T) = k_{i,0} \exp \left(\frac{-E_i}{RT} \right)$$

$$k_{5,0} = 1.28 \times 10^6 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_5 = 79.9 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{9,1,0} = 7.38 \times 10^7 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{9,1} = 103 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{9,0} = 2.09 \times 10^7 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_9 = 94.7 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{10,0} = 6.28 \times 10^7 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{10} = 108 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{11,1,0} = 2.64 \times 10^6 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{11,1} = 86.8 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{11,0} = 4.75 \times 10^6 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{11} = 94.5 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{12} = 6.76 \times 10^5 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

$$E_{12} = 87.6 \text{ kJmol}^{-1}$$

$$k_{12}^{-1} = 2.17 \times 10^{-7} \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ bar}^{-1}$$

$$\begin{aligned}
 K_1 &= 0.199 \text{ bar}^{-1} \\
 K_2 &= 0.203 \\
 K_3 &= 0.407 \text{ bar}^{-1} \\
 K_4 &= 0.804 \text{ bar}^{-1} \\
 K_6 &= 0.812 \text{ bar} \\
 K_7 &= 3.55 \times 10^{-2} \\
 K_8 &= 0.102 \text{ bar}^{-1} \\
 k_{w2} &= 7.62 \times 10^5 \text{ mol kg}^{-1} \text{ s}^{-1} \\
 K_{w1} &= 0.383 \text{ bar}^{-2} \\
 K_{w3} &= 3.97 \times 10^2 \text{ bar}
 \end{aligned}$$

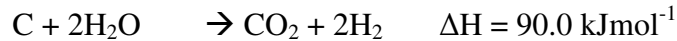
Dalam menyusun model kinetika sintesis FT Bo-Tao Teng menggunakan pendekatan dengan asumsi-asumsi sebagai berikut:

1. Reaksi konsumsi CO menjadi monomer metilen, CH_2 , hanya ada satu *irreversible rate determining step*.
2. konsentrasi intermediate pada permukaan katalis dalam keadaan tunak.
3. Katalis site aktif terhadap pembentukan hidrokarbon, yang terdistribusi secara seragam dan homogen.
4. Adsorpsi awal hidrogen dan karbon monoksida dalam quasi-equilibrium dengan konsentrasi fasa gas.
5. Air dipindahkan secara irreversibel setelah disosiasi CO.
6. CO teradsorb lebih kuat dari pada H_2 pada katalis besi, sehingga konsentrasi CO dipermukaan sangat tinggi atau CO terdisosiasi relatif terhadap H_2 .
7. H_2O teradsorb sangat kuat sehingga bisa menghambat laju reaksi FT.

2.3.8 Water Gas Shift Reaction (WGSR)

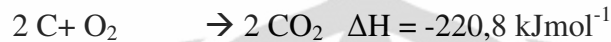
Water gas merupakan campuran antara Hidrogen (H_2) dan karbon monoksida (CO) yang equimolar. Water gas terbentuk ketika steam melewati pijar coke dan air gas pembuatanya menggunakan town-gas. Pada temperatur 1000^0 C steam bereaksi dengan coke sesuai dengan pers. 1, sedangkan pada temperatur rendah CO_2 diproduksi sesuai dengan pers.1.





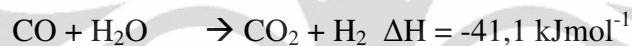
Kedua reaksi adalah reaksi endotermis oleh karena itu temperatur saat melewati coke akan memutus reaksi produk.

Panas untuk mendukung produk water gas telah disalurkan pada interval reguler dengan memutus steam dan kemudian meniupkan udara pada bed untuk proses oksidasi coke menjadi CO dengan reaksi



Segera setelah temperatur dari bed cukup tinggi siklus aliran steam kembali dimulai. Karena adanya pengaruh proses oksidasi tersebut maka water gas mengandung sedikit CO₂ dan nitrogen karena terkontaminasi dari tiupan udara.

Proses katalitik digunakan untuk mengkonversi CO menjadi CO₂ (dengan penambahan Hidrogen) melalui reaksi berikut :



Reaksi ini disebut “Water Gas Shift Reaction (WGSR)”, tetapi secara teknik proses WGSR jauh lebih rendah jika dibandingkan proses Haber.

Berdasarkan data, reaksi WGS sistematis, Studi kinetik dalam kondisi reaksi FTS dan WGS model kinetika dengan formasi desorpsi yang terjadi di spesies CO₂ sebagai RDS, diadopsi dalam reaksi ini. Kinetika ekspresi untuk reaksi WGS ditulis sebagai berikut :

$$R_{\text{CO}_2} = \frac{k_{w2} K_{w1} K_{w3} P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2\text{O}} - k_{w-2} P_{\text{H}_2} P_{\text{CO}_2}}{\sqrt{K_{w3} P_{\text{H}_2}} + P_{\text{H}_2} + \frac{K_{w1} P_{\text{CO}} P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{H}_2}}}$$

Dan

$$k_{w-2} = \frac{k_{w2} K_{w1} K_{w3}}{K_p}$$

2.3.9 Reaktor Fischer Tropsch

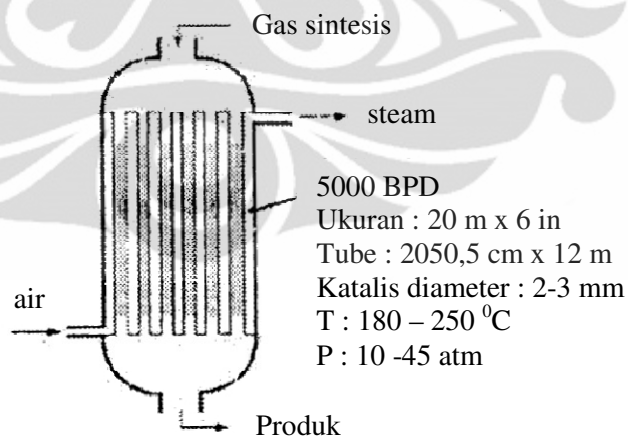
Tipe reaktor yang banyak dikenal dan digunakan dalam proses FT (Davis, 2002; Sie, 1999):

1. Reaktor *Fixed bed*

Reaktor Fixed bed pada awalnya digunakan oleh Fischer dan Tropsch dalam penelitiannya dan Sasol. Gambar 2.8 menunjukkan tipikal reaktor vessel

(diameter 6 m, tinggi 20 m) berisi 2000 tube, masing-masing diameter 5 cm dan panjang 12 m. Ukuran partikel katalis 2 - 3 mm dan beroperasi pada range suhu 180 sampai 250°C dengan tekanan 10 sampai 40 atm. Panas dan hasil reaksi dibuang untuk menghasilkan steam dalam shell. Unit ini menghasilkan produk 5000 BPD.

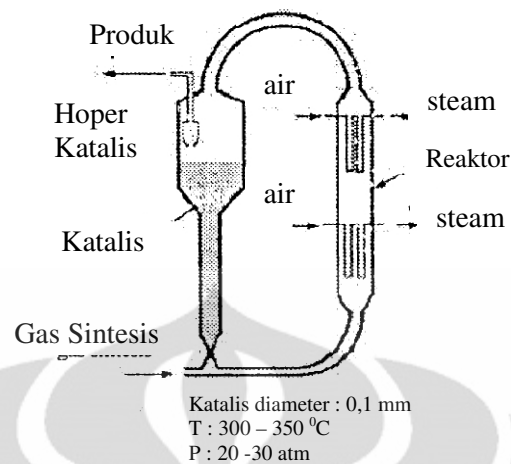
Rancangan Fixed Bed sederhana, fleksibel dan mudah di *scale-up*. Akan tetapi konstruksinya mahal dan banyak membutuhkan paralel vessel untuk kilang besar. Tube yang sempit menimbulkan kehilangan tekanan (pressure drop) pada reaktor sehingga katalis yang besar banyak digunakan sebagai alternatif walaupun menghasilkan faktor efektifitas yang rendah. Transfer panas radikal dari katalis menjadi rendah dan menimbulkan gradien temperatur di dalam tube. Hal ini mengakibatkan: (1) kondisi menjadi tidak isothermal yang mengakibatkan kontrol terhadap komposisi produk menjadi sukar, karena nilai α menurun dengan meningkatnya temperatur, (2) hot spot dapat terbentuk dalam bed menimbulkan sintering katalis dan reaktor menjadi tidak stabil, (3) keterbatasan konversi 35 - 50% *lpass* (membatasi kenaikan temperatur) dan membutuhkan recycle reaktan yang tidak terkonversi. Walaupun demikian reaktor ini masih merupakan pilihan untuk kilang GTL terutama untuk skala kecil.



Gambar 2.8. Reaktor *fixed bed* (Sie, 1999)

2. Reaktor circulating dan *entrained fluidized bed*

Sasol memberikan pemecahan masalah penghilangan panas dalam reaktor *fixed bed* dengan memperkenalkan reaktor circulating fluidized bed pada tahun 1950-an (Gambar 2.12).



Gambar 2.9. Reaktor *circulating fluidized bed* (Sie,1999)

Katalis yang digunakan berukuran kecil ($100\ \mu\text{m}$) bersirkulasi dengan umpan, panas dibuang menggunakan gulungan pendingin internal. Katalis dan produk keluar dari konverter dan melewati unit pengendapan katalis dimana produk dipisahkan. Proses beroperasi pada $300 - 350^{\circ}\text{C}$ dan tekanan 20 - 30 atm.

Dengan pembuangan panas yang baik dan operasi yang isothermal maka produknya dapat dikontrol dengan lebih baik. Pressure drop menjadi lebih rendah dan penggunaan ukuran katalis yang kecil menghasilkan faktor efektifitas dan produktifitas yang lebih tinggi. Keseluruhan unit lebih kecil dan sirkulasi katalis memungkinkan penambahan katalis baru selama terjadi deaktivasi katalis. Akan tetapi rancangannya menjadi kompleks dan *scale-up* susah dilakukan. Adapun kesukaran utama yang dihadapi adalah terjadinya aglomerasi katalis yang disebabkan oleh produk cair yang melekatkan partikel. Hal ini memerlukan temperatur operasi di atas titik beku produk sehingga operasi dengan temperatur rendah dengan nilai α tinggi menjadi tidak mungkin. Perbedaan antara reaktor *fixed bed* dengan *circulating bed* dapat dilihat pada Tabel 2.8.

Tabel 2.8. Perbedaan reaktor *fixed bed* dan *circulating bed* (Sie, 1999)

| Selektifitas reaktor <i>fixed bed</i> dan <i>circulating bed</i> | | |
|--|------------------|------------------------|
| Produk | <i>fixed bed</i> | <i>circulating bed</i> |
| Temperatur, °C | 180 -250 | 330-350 |
| CH ₄ | 4 | 7 |
| C ₂ – C ₄ alkena | 4 | 24 |
| C ₂ - C ₄ alkana | 4 | 6 |
| Nafta | 18 | 35 |
| Diesel | 19 | 12 |
| Wax | 48 | 9 |
| Oksigenat | 3 | 6 |
| Alfa (α) | 0,95 | 0,85 |

Sasol mengembangkan rancangannya pada tahun 1989 menggunakan reaktor entrained fluidized bed. Hal ini menghasilkan keuntungan yang dapat dipertimbangkan. Kapasitas unit menjadi lebih besar (20000 BPD dibandingkan 7500 untuk circulating bed), harga 60% lebih rendah dan konsumsi katalis 40 % lebih rendah, ukuran dan kompleksitas menurun. Akan tetapi dikarenakan temperatur yang tinggi produknya hanya cocok untuk gasoline dan pasar bahan kimia.

3. Reaktor *Slurry*

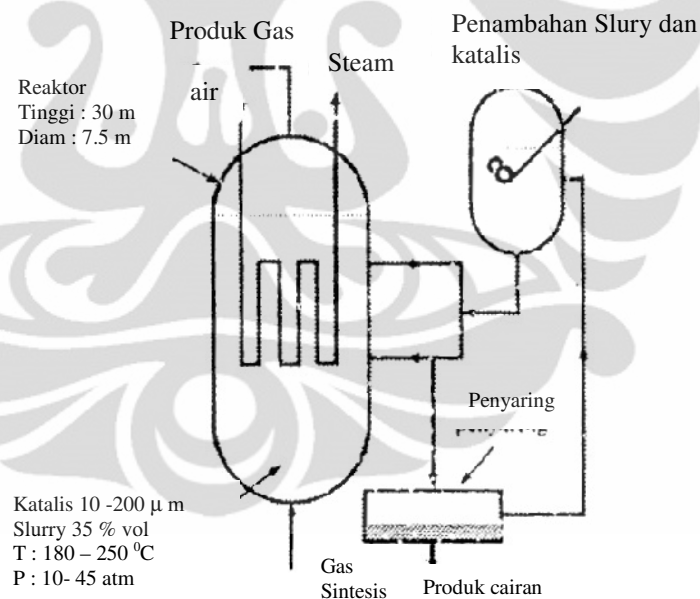
Reaktor slurry Gambar 2.13 telah muncul sebagai favorit untuk rancangan FT skala besar. Ukuran katalis 1 - 200 μm bersama dengan produk hidrokarbon cair kira-kira 35% dalam sebuah reaktor vessel diameter 7.5 m dan tinggi 30 m. Unit ini beroperasi pada temperatur 180 – 350⁰C (α tinggi) dengan tekanan 10-45 atm, biasanya dilengkapi pendinginan internal untuk membuang panas. Pada produk yang diperoleh, bagian slurry dipisahkan dari katalis secara kontinyu.

Selama reaksi berlangsung pencampuran terjadi dengan baik di reaktor dan dengan penggunaan partikel katalis yang kecil maka faktor efektifitasnya menjadi tinggi. Karena kontrol temperatur yang efisien, pressure drop yang

rendah, konversi per pass yang tinggi, dan proses *recycle* yang sedikit jumlahnya maka nilai α yang tinggi (0.95 - 0.98) dapat diperoleh dengan mudah.

Keuntungan lain seperti katalis dan slurry yang dengan mudah dapat diganti atau ditambah selama proses pemisahan/penyaringan, transfer panas yang efektif, temperatur reaksi seragam, bebas dari hot spot, konstruksi reaktor sederhana dan biaya kapital rendah dengan kapasitas besar. Kapasitas reaktor ini dapat mencapai 20000 BPD. Secara keseluruhan, unit ini lebih kecil, mudah di scale-up dengan biaya 25 % dari satu *train fixed bed*.

Beberapa masalah yang dihadapi mencakup viskositas *slurry* yang tinggi, pengendapan partikel dan terjadinya erosi/aus dari katalis, laju tranfser massa di fasa cairan yang rendah dan penyaringan/pemisahan katalis yang agak sukar dilakukan.



Gambar 2.10. Reaktor *slurry* (Sie, 1999)

2.3.10 Kondisi Operasi

Pada proses sintesis Fischer Tropsch, gas dan cairan hidrokarbon yang terbentuk terjadi dengan mengontakkan gas sintesis yang terdiri dari campuran gas hidrogen dan karbon monoksida dengan katalis FT pada suhu dan tekanan operasi yang cocok untuk bereaksi. Reaksi FT terjadi pada suhu 300⁰ sampai 700⁰

F (149 – 371⁰ C). Sedangkan tekanan yang digunakan berada dalam rentang 10 sampai 600 psia (0.7 - 41 bar).

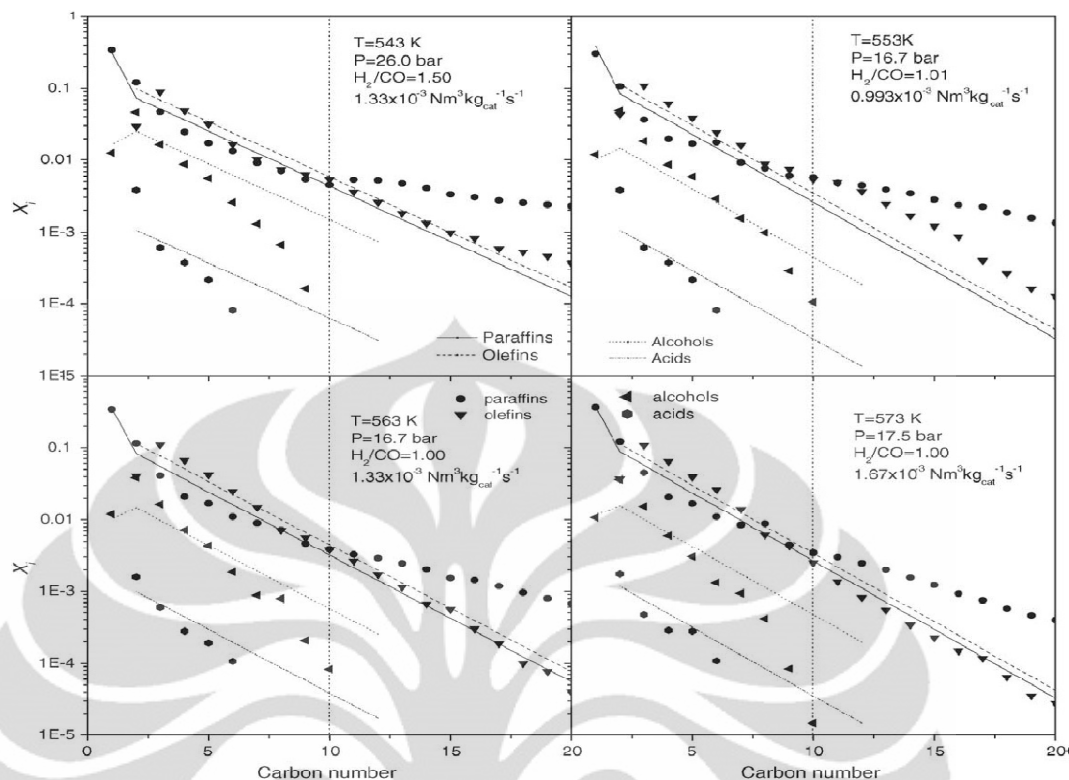
Terdapat dua metode operasi dalam skala komersial yaitu proses FT suhu rendah (*Low Temperature Fischer Tropsch/LTFT*) yang lebih mengarah ke produk wax/diesel dan proses FT suhu tinggi (*High Temperature Fischer Tropsch/HTFT*) untuk memproduksi alkena dan gasoline. Biasanya proses LTFT dilakukan pada suhu dibawah 250⁰ C dan lebih efisien menggunakan reaktor *slurry* dengan katalis Fe atau Co. Sedangkan proses HTFT beroperasi pada suhu lebih dari 330⁰ C menggunakan reaktor fluidized bed dengan katalis Fe.

2.3.11 Produk Sintesis FT

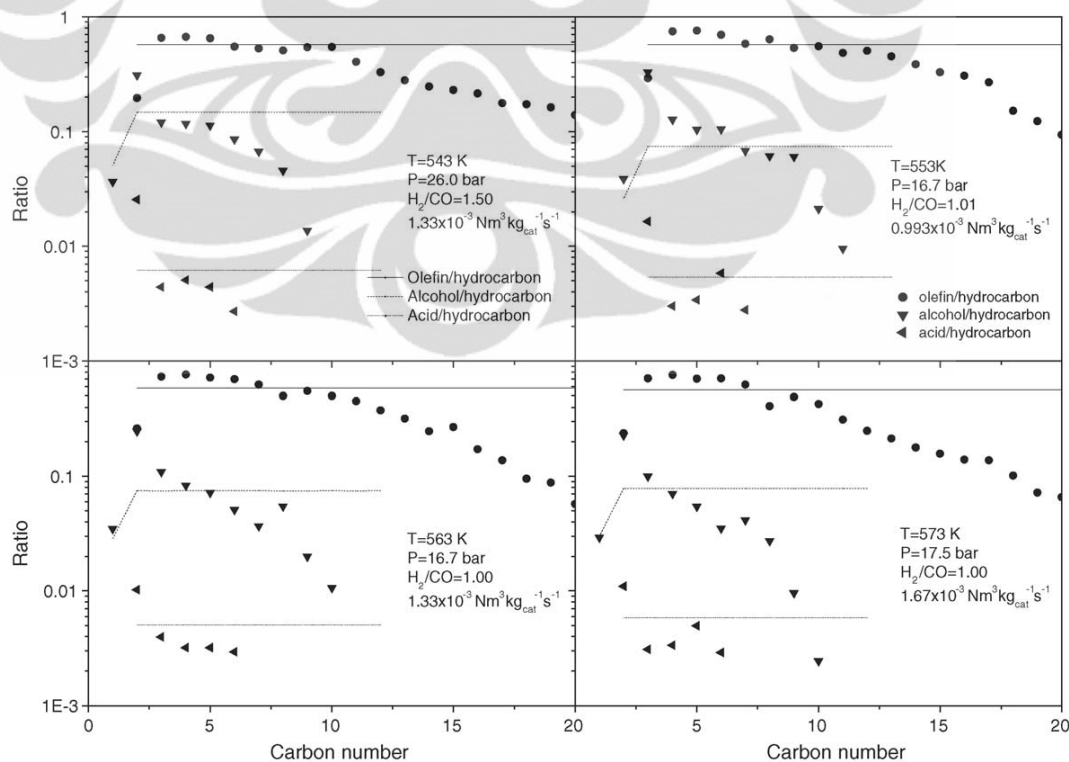
Produk hidrokarbon dari sintesis FT terutama untuk reaktor slury adalah produk ringan dan berat (wax) dengan kandungan terbesar parafin (dengan nilai α tinggi). Produk ringan yang dihasilkan berupa fraksi hidrokarbon C₅₋₂₀ dan termasuk juga hidrokarbon dengan titik didih dibawah 700⁰ F seperti tail gas sampai *middle distillate* dengan penurunan jumlah sampai C₃₀. Produk berat (wax) berupa C₂₀₊ termasuk juga hidrokarbon dengan titik didih di atas 600⁰ F seperti vacuum gas oil sampai *heavy paraffin* dengan penurunan jumlah sampai C₁₀. Produk berat/wax biasanya mengandung lebih dari 70% normal parafin dan bahkan lebih dari 80% untuk reaktor *slurry*. Sedangkan produk ringan terdiri dari parafin, olefin dan alkohol dengan jumlah yang relatif sama. Dalam beberapa kasus dengan reaktor tertentu, kandungan alkohol dan olefin bisa mencapai lebih dari 50%. Secara umum, produk keluaran reaktor sintesis FT ditunjukkan oleh tabel berikut :

Tabel 2.9. Produk reaktor sintesis FT

| Fraksi | % Berat | Penggunaan |
|---|---------|---|
| C ₁ -C ₄ (Gas) | 5-10 | Bahan baku petrokimia, BBG |
| C ₅ – C ₉ (Nafta) | 15 - 20 | Bahan baku petrokimia, pabrik olefin |
| C ₁₀ – C ₁₆ (Kerosin) | 20-30 | <i>Jet fuel</i> , bahan kimia (n-parafin) |
| C ₁₇ - C ₂₂ (Diesel) | 10 -15 | Diesel, <i>drilling fluid</i> |
| (Wax) | 30-40 | <i>Wax</i> , pelumas, pembungkus makanan |



Gambar 2.11. Perbandingan prediksi dan eksperimen distribusi produk. Bo Tao-Teng 2006 (garis adalah prediksi dan simbol adalah data eksperimen)



Gambar 2.11. Perbandingan prediksi dan eksperimen rasio olefin, alkohol dan asam. Bo Tao-Teng 2006 (garis adalah prediksi dan simbol adalah data eksperimen)

2.3.12 Metoda Pengontrolan Produk

Nilai α menentukan distribusi produk sesuai dengan distribusi AFS dan merupakan fungsi dari banyak parameter. Semakin tinggi nilai $\alpha > 9$ maka produk yang dihasilkan lebih mengarah ke diesel dan sebaliknya, semakin rendah nilai $\alpha (< 9)$ maka produk yang dihasilkan lebih mengarah ke nafta/gasoline. Penelitian menunjukkan bahwa faktor-faktor seperti diuraikan di bawah ini sangat penting untuk mendapatkan nilai α yang tinggi terutama untuk mendapatkan produk *middle distillate* (diesel) dalam jumlah besar.

1. Katalis. Nilai α yang tinggi diperoleh dari:
 - Pemilihan logam : $\text{Co} > \text{Ru} > \text{Fe}$
 - Penyangga : $\text{Al}_2\text{O}_3 > \text{SiO}_2$ (skala komersial)
 - Promotor : promotor membuat nilai α meningkat
 - Konsentrasi logam : loading lebih tinggi meningkatkan nilai α
 - Ukuran pelet : ukuran lebih kecil meningkatkan nilai α
2. Kondisi Proses. Parameter utama proses yang mempengaruhi nilai α :
 - Rasio H_2/CO : semakin tinggi rasio H_2/CO menurunkan nilai α
 - Suhu (T) : semakin tinggi suhu menurunkan nilai α
 - Tekanan (P) : semakin tinggi tekanan meningkatkan nilai α
3. Reaktor. Kontrol suhu di reaktor adalah faktor yang paling penting untuk mendapatkan produk yang diinginkan
 - *Fixed bed* : hot spot menurunkan nilai α .
 - *Fluidized bed* : suhu tinggi menurunkan nilai α .
 - *Slurry* : suhu rendah meningkatkan nilai α .

2.4 Reaktor Unggun Tetap (Fixed Bed)

Fixed Bed Reactor katalitik dapat didefinisikan sebagai suatu *tube* silindrikal yang dapat diisi dengan partikel-partikel katalis. Selama operasi, gas atau liquid atau keduanya akan melewati *tube* dan partikel-partikel katalis, sehingga akan terjadi reaksi.

1. *Fixed bed reactor* merupakan reaktor yang dalam prosesnya mempunyai prinsip kerja pengontakan langsung antara pereaktan dengan partikel-partikel katalis.
2. *Fixed bed reactor* biasanya digunakan untuk umpan (pereaktan) yang mempunyai viskositas kecil.

Kelebihan

- Dapat digunakan untuk mereaksikan dua macam gas sekaligus.
- Kapasitas produksi cukup tinggi.
- Pemakaian tidak terbatas pada kondisi reaksi tertentu (eksoterm atau endoterm) sehingga pemakaian lebih fleksibel.
- Aliran fluida mendekati *plug flow*, sehingga dapat diperoleh hasil konversi yang tinggi.
- *Pressure drop* rendah.
- Oleh karena adanya *hold-up* yang tinggi, maka menghasilkan pencampuran radial yang lebih baik dan tidak ditemukan pembentukan saluran (*channeling*).
- Pemasokan katalis per unit volum reaktor besar.
- *Hold up* liquid tinggi.
- Katalis benar-benar dibasahi.
- Kontrol temperatur lebih baik.
- Transfer massa gas-liquid lebih tinggi daripada reaktor *trickle bed* karena interaksi gas-liquid lebih besar.

Kekurangan

- Resistansi difusi intra partikel sangat besar.
- *Rate* transfer massa dan transfer panas rendah.
- Pemindahan katalis sangat sulit dan memerlukan *shut down* alat.
- Konversi lebih rendah.
- Ada kemungkinan terjadi reaksi samping homogen pada liquid.
- *Pressure drop* tinggi.

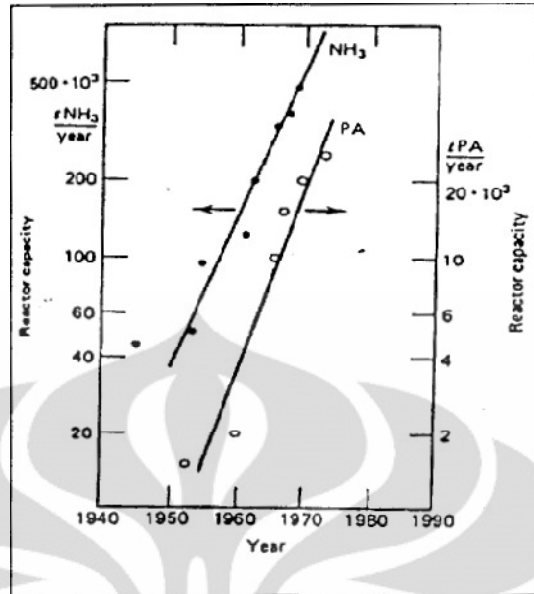
Penerapan teknologi katalisis dengan katalis padat pada teknik proses kimia telah membawa perubahan yang cukup besar dalam dunia industri saat ini. Bagian utama dalam proses katalitik diantaranya berlangsung dalam reaktor

unggun tetap (*fixed bed*). Penggunaan reaktor ungunn tetap telah berkembang dari industri kimia dasar, industri petrokimia sampai proses penyulingan atau pemurnian minyak bumi, seperti terlihat dalam Tabel 2.10.

Table 2.10. Aplikasi reaktor ungunn tetap (Froment and Bischoff, 1990)

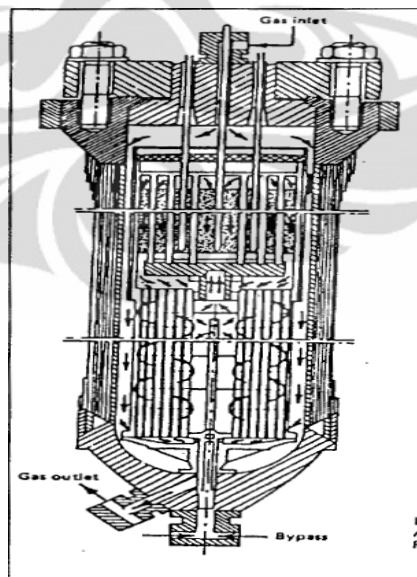
| Industri kimia dasar | Industri Petrokimia | Pemurnian minyak bumi |
|-----------------------------|---------------------|-----------------------|
| Reformasi kukus: primer | Etilen oksida | Katalisis |
| sekunder | Etilen diclorida | Isomerisasi |
| Konversi karbon monoksida | Vinilasetat | Polimerisasi |
| Carbon monoxide methanation | Butadiena | (Hydro)desulfurisasi |
| Sintesis: - Ammonia | Maleic anhydride | Hydrocracking |
| - Asam sulfat | Phthalic anhydride | |
| - Metanol | Cyclohexane | |
| - Okso | Stirena | |
| | Hydrodealkylation | |

Teknologi reaktor ungunn tetap semakin berkembang seiring dengan semakin meningkatnya produksi akibat semakin besarnya permintaan pasar. Hal ini menyebabkan kapasitas reaktor ungunn tetap menjadi besar sesuai dengan target produksi. Sebagai gambaran dapat dilihat pada Gambar 2.11 yang menunjukkan perkembangan kapasitas reaktor ungunn tetap untuk proses sintesis amonia dan *phthalic anhydride*. Dari Gambar 2.11 terlihat peningkatan kapasitas reaktor ungunn tetap pada industri kimia yang menggunakan katalis padat. Perkembangan ini pada akhirnya membawa pada inovasi-inovasi baru untuk menciptakan desain reaktor ungunn 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 2.12 menunjukkan reaktor ungunn tetap yang digunakan pada sintesis amonia dengan menggunakan penukar panas berbentuk silinder.

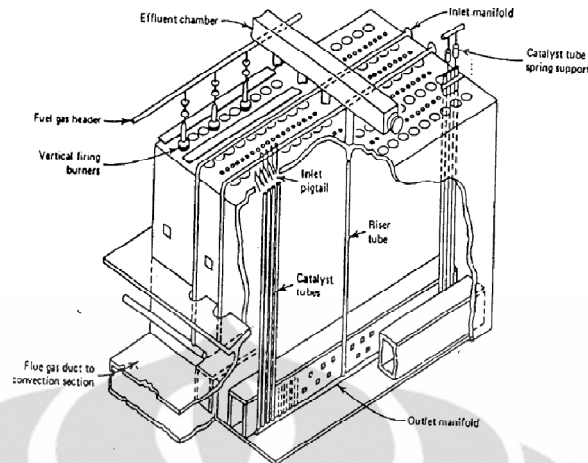


Gambar 2.11 Grafik peningkatan kapasitas reaktor untuk sintesis amonia dan *phthalic anhydride* (Froment and Bischoff, 1990)

Jenis reaktor unggul 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 800⁰C. Jumlah pipa dengan diameter 10 cm yang berada dalam satu reaktor bisa mencapai 300 buah.



Gambar 2.12. Reaktor sintesis amonia (Froment and Bischoff, 1990)



Gambar 2.13. Reaktor reformasi kukus multitubular (Froment and Bischoff, 1990)

2.5 Prinsip *Scale up* Reaktor

2.5.1 Prinsip *Scale up*

Scale-up dan analisis tanpa dimensi sangat penting dalam perangkat matematis yang sangat dibutuhkan untuk perencana industri proses, dimana konversi kimia dari masukan, bersama dengan terjadinya berbagai proses perpindahan seperti momentum, massa atau panas. Proses-proses ini bergantung pada skala (*scale-dependent*), menyiratkan sifat berbeda pada laboratorium dan *full scale* plants. Contohnya adalah reaksi-reaksi homogen dan heterogen. Optimalisasi proses kimia sering membutuhkan pengetahuan yang mendalam akan elemen teknis dan fisis proses yang bersangkutan. Efek dari tiap parameter yang mempengaruhi proses harus diuji dimana terkadang solusi matematis tidak bisa digunakan. Pada beberapa kasus, perencana harus bergantung pada baik model eksperimen maupun teori similaritas antara model dan *full scale* plant. Teori ini meningkatkan nilai perencanaan dan eksekusi percobaan dan analisa data untuk menghasilkan informasi yang cukup dan terpercaya pada parameter proses dan ukuran plant.

Reaksi-reaksi kimia mengikuti aturan-aturan kinetika dan termodinamika kimia jika reaksi berlangsung lambat dan tidak ada panas reaksi yang signifikan dalam sistem homogen (mikrokinetik). Termodinamika memiliki peran penting dalam *scaling up* reaktor, dapat dilihat pada persamaan laju reaksi harus mempertimbangkan batasan dimana reaksi telah mencapai kesetimbangan. Kebanyakan reaksi di industri kimia terjadi dalam sistem heterogen, yang

menghasilkan panas reaksi yang sangat besar. Sehingga transfer massa dan panas, yang tergantung pada skala, sangat mempengaruhi reaksi kimia. Alur reaksi kimia akan identik untuk skala pilot dan *full scale* plant jika baik proses transfer dan proses kimianya identik. Eksperimen skala pilot merupakan langkah penting untuk menginvestigasi proses dalam merumuskan spesifikasi plant komersial. Sebuah pilot plant menggunakan data mikrokinetik yang diperoleh dari uji laboratorium dan memberikan informasi tentang makrokinetik suatu proses. Dalam proses reaksi berkelanjutan, waktu tinggal sesungguhnya dari sistem reaksi dalam reaktor memainkan peran utama. Hal ini diatur oleh karakteristik distribusi waktu tinggal reaktor, yang memberikan informasi tentang *backmixing* (*macromixing*) dari aliran. Tujuan utama mempelajari makrokinetik suatu proses adalah untuk memperkirakan koefisien model matematis dari proses dan untuk memvalidasi model. Untuk tujuan ini, sebuah pilot plant harus memberikan hal-hal sebagai berikut :

- Identifikasi pola aliran prototipe sistem dengan memberikan masukan berupa gangguan impulse, step, atau sinusoidal. Hasilnya bisa diklasifikasikan sebagai aliran yang tercampur dengan baik (*complete mixing*), aliran sumbat, dan antara dispersi, cascade, atau model gabungan.
- Menginvestigasi dan menentukan parameter termal yang melibatkan kondisi di mana terjadi perpindahan panas dan nilai akurat dari area permukaan transfer panas. Selain itu, tinjauan proses diperlukan untuk stabilitas termal.
- Membuat perkiraan yang akurat dari efek yang dihasilkan oleh parameter difusi dan mengarahkan apakah proses berada dalam region kinetik atau. Efisiensi reaktor ditentukan berdasarkan model yang dipilih
- Menyelidiki sistem pada kondisi dinamis dengan gangguan terjadi pada banyak sirkuit dan memantau bagaimana variabel proses berubah terhadap waktu, menghasilkan rekomendasi yang baik tentang pengendalian sistem.

- Mengembangkan model matematis dari sistem, yang diuji dan disesuaikan dengan sistem komputer
- Mengoptimalkan model matematis dengan tujuan untuk meningkatkan kinerja sistem.

Tujuan scale-up dalam desain reaktor adalah untuk menentukan kriteria atau kriteria yang menjadi dasar pengalihan skala dari skala laboratorium menjadi unit komersial skala penuh. Sebelum scaling up dilakukan, investigasi tambahan sangat diperlukan. Namun, sulit untuk menentukan langkah-langkah tambahan untuk mengumpulkan semua informasi dengan segera dan biaya yang rendah. Metodologi pengembangan proses menuju scale-up menjadi faktor utama penentu keberhasilan operasi. Dalam mencapai tujuan ini, eksperimen diklasifikasikan menjadi tiga jenis utama : laboratorium, pilot plant, dan unit demonstrasi.

Dalam percobaan tipe laboratorium, aspek-aspek tertentu dari proses tersebut diinvestigasi oleh penanganan sejumlah kecil bahan baku untuk mengurangi batasan material menjadi minimum. Dalam percobaan laboratorium, serangkaian pengukuran mengenai mekanisme yang independen terhadap ukuran (termodinamika dan kinetika kimia) dilakukan. Sejumlah sifat fisik, seperti kerapatan, viskositas, panas spesifik, dan kesetimbangan fasa, yang terlibat dalam model harus dipastikan untuk keseluruhan kondisi operasi proses. Percobaan pilot bervariasi pada kisaran luas, batasan-batasan skala industrial (misalnya, lama operasi, parameter pengendalian, kehandalan peralatan, dan pengotor dalam bahan baku). Permasalahan scale up diteliti selama percobaan skala pilot. Sebuah pilot plant sangat diperlukan untuk mengukur sejauh mana interaksi yang mungkin antara kedua jenis mekanisme. Dapat dikatakan mudah untuk meminimalisasi biaya tambahan seperti biaya total operasional serta kendala lainnya. Percobaan di tingkat unit demonstrasi (*full scale plant*) diperlukan untuk konstruksi unit industri pertama, tetapi pada skala yang sederhana (misalnya, sepersepuluh produksi skala penuh). Langkah ini bisa sangat mahal, namun telah terbukti sangat diperlukan.

2.5.2 Kriteria Similaritas

Beberapa proses-proses fisik yang terjadi dalam fase tunggal dapat di-

scaling up menggunakan prinsip-prinsip pemodelan fisik. Hal ini didasarkan pada kesamaan kriteria geometrik dan kimia dari persamaan diferensial, yang menggambarkan proses, atau dari analisis dimensional dari variabel proses. Dalam pemodelan fisik, proses direproduksi dalam skala yang berbeda, dan efek fitur fisik dan dimensi linear dianalisis. Data eksperimental dikurangi menjadi hubungan yang melibatkan kelompok tak berdimensi yang disusun dari berbagai kombinasi besaran fisika dan dimensi linier. Hubungan ini dapat diklasifikasikan ke dalam kelompok tak berdimensi atau kriteria similaritas. Pemodelan fisik melibatkan penelusuran kriteria similaritas yang sama atau mendekati untuk model dan proses riil-nya. Proses *full-scale* dimodelkan pada skala yang meningkat dengan prinsip skala dimensi-linear dengan proporsional, berdasarkan prinsip similaritas. Untuk sistem yang relatif sederhana, kriteria similaritas dan pemodelan fisik dapat diterima karena jumlah kriteria yang terlibat terbatas. Untuk sistem yang kompleks dan proses yang melibatkan sistem yang persamaan kompleks, seperangkat besar kriteria similaritas diperlukan, yang tidak kompatibel secara simultan, sebagai akibatnya, tidak dapat direalisasikan.

Tujuan tidak dapat direalisasikan bila diterapkan pemodelan fisik untuk proses yang kompleks. Namun, pertimbangan untuk pendekatan persamaan diferensial pada kondisi tunak untuk hukum kekekalan massa, momentum, dan energi panas telah dihasilkan dalam berbagai kelompok tak berdimensi. Kelompok-kelompok ini harus sama baik untuk model maupun prototipe untuk similaritas kompleks dalam *scaling up*.

Tujuan utama dari scaleup adalah untuk mempertahankan kualitas produk. Dengan kata lain, membuat produk yang tepat sama dalam unit yang lebih besar. Mungkin diperlukan untuk mengubah kondisi operasi di plant pilot untuk mencapai tujuan tersebut. Jika unit yang lebih besar mendekati kondisi aliran piston isothermal, akan sangat sulit melakukan scaling up. Alternatif yang bisa dilakukan adalah membuat unit tersebut lebih tidak ideal tapi lebih *scaleable*.

Kriteria scale up bisa diperoleh berdasarkan mekanisme reaksi dan persamaan umum. Sebagai contoh, konversi dari reaktan A pada reaktor aliran sumbat dideskripsikan dengan $X_A = 1 - \exp(-ak_L\tau)$. Untuk memperoleh konversi yang sama pada reaktor yang lebih besar dari sebelumnya, harga ak_L

harus diperbaiki secara konstan.

Ada tiga cara dalam meningkatkan kapasitas reaktor tubular :

1. Menambah reaktor identik secara parallel. Desain penukar panas shell and tube adalah metode yang umum dan murah dalam meningkatkan kapasitas
2. Memperpanjang tube. Menambah panjang tube tidak bertujuan secara langsung meningkatkan kapasitas, tetapi ini berguna. Reaktor tube tunggal eksis dengan panjang beberapa mil
3. Memperbesar diameter, baik untuk menjaga pressure drop konstan atau untuk memperbesar skala dengan similaritas geometri. Similaritas geometri berarti menetapkan rasio L/d_i dalam scaling up. Scaling dengan pressure drop konstan akan memperkecil rasio L/d_i jika alirannya turbulen.

Metode kedua pertama lebih sesuai jika transfer panas penting. Metode ketiga lebih murah untuk reaktor adiabatik.

Metode scaling up bisa dilakukan dengan memperhatikan hal-hal yang relatif sederhana seperti pressure drop dan parameter proses. Permasalahan scale up sangat spesifik tergantung dari kondisi dan fenomena yang terjadi dalam reaktor. Sebagai contoh, scaling up untuk reaktor adiabatik dan reaktor non-isothermal akan berbeda pengerjaannya. Scaling up untuk reaksi eksotermis juga membutuhkan pendekatan berbeda.

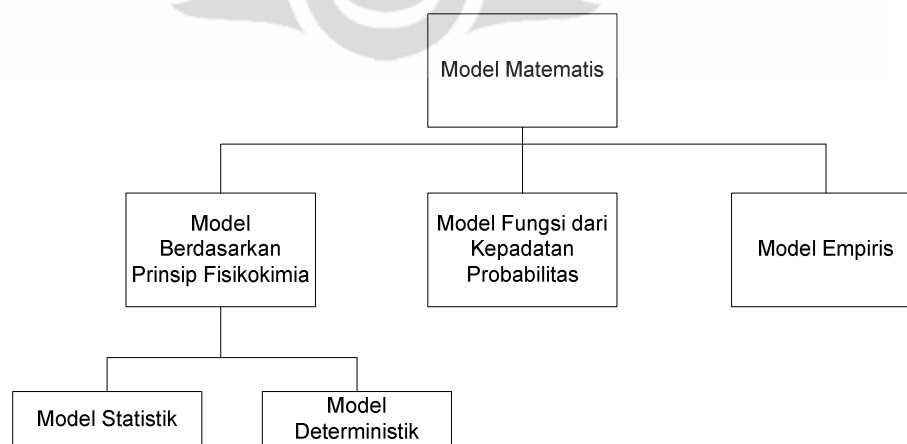
2.5.3 Pemodelan

Model adalah rencana, representasi, atau deskripsi yang menjelaskan suatu objek, sistem, atau konsep, yang seringkali berupa penyederhanaan atau idealisasi. Secara fundamental, pemodelan di dalam kajian-kajian proses teknik kimia dan proses adalah

- Penggambaran kinerja suatu aktivitas, sistem atau proses.
- Membangun persamaan matematis yang dapat menggambarkan kinerja suatu proses (secara fisik).

Ilmu sains dan rekayasa modern memerlukan logika kualitatif yang baik sebelum formulasi awal dari permasalahan dapat dilakukan. Dengan demikian, dikenal sebagai problem pendahuluan fisikokimia, yang diperoleh dari pengalaman atau eksperimen (empiris). Lebih sering, teori dikembangkan setelah

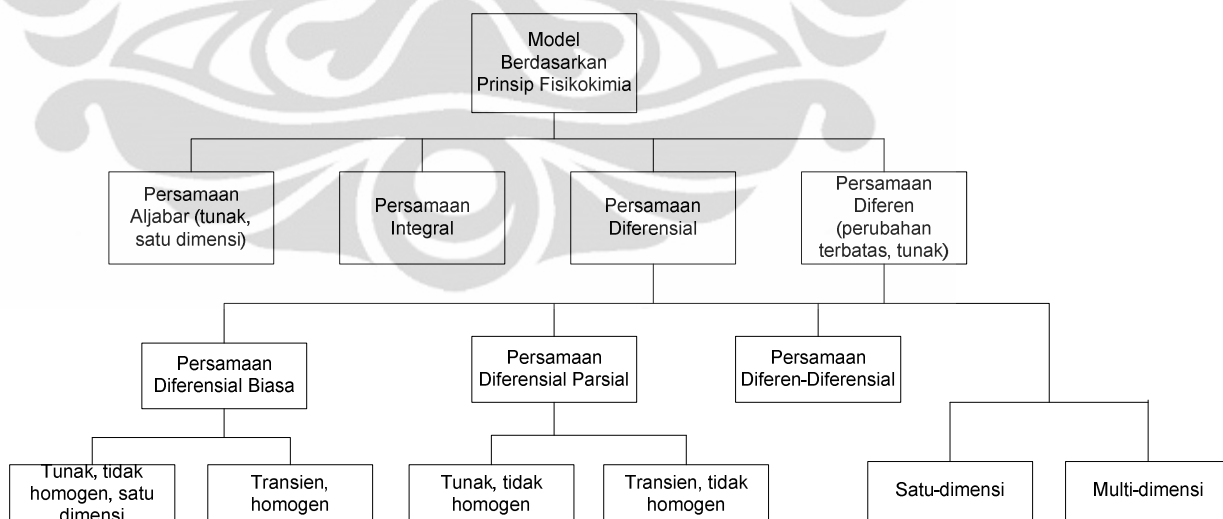
observasi detail dari suatu permasalahan. Dengan demikian, langkah pertama dalam formulasi masalah adalah kualitatif penting (*fuzzy logic*). Langkah pertama ini biasanya meliputi menggambar sistem yang akan dipelajari/diselesaikan. Langkah kedua adalah mengumpulkan semua informasi fisika dan kimia, hukum-hukum kekekalan dan ekspresi laju. Pada langkah ini, seorang insinyur harus membuat serangkaian keputusan-keputusan penting tentang konversi dari imej mental ke simbol-simbol, dan pada waktu yang sama, seberapa detail model dari sistem harus dibuat. Seorang insinyur juga harus mengklasifikasikan tujuan riil dari pemodelan. Apakah model hanya digunakan untuk tren yang terjadi dalam performa operasional suatu alat? Apakah model digunakan untuk tujuan perancangan dan prediktif? Apakah kita menginginkan kondisi tunak atau transien? Ruang lingkup dan pendalaman dari keputusan awal akan menjelaskan kompleksitas akhir deskripsi matematis. Langkah ketiga memerlukan penentuan elemen sistem finite atau diferensial, yang diikuti oleh penyusunan hukum kekekalan. Berikutnya, problem dari kondisi batas harus ditetapkan, dan aspek ini harus dilakukan dengan pertimbangan-pertimbangan yang teliti. Ketika permasalahan sudah ditetapkan secara kuantitatif, solusi matematis yang sesuai ditentukan, hasil akhir dari pekerjaan ini bisa berupa formula matematis elementer, atau solusi numeris berupa sederetan angka. Banyak model dinamis melibatkan neraca massa komponen *unsteady-state* dan/atau neraca energi dengan volume tak konstan. Neraca massa overall biasanya disubstitusikan, seperti dalam contoh diatas, untuk menyederhanakan neraca komponen dan energi.



Gambar 2.14 Klasifikasi Model Matematika

Tahap-tahap pemodelan :

1. Formulasi persoalan, pengumpulan objektif dan kriteria keputusan;
2. Pengamatan terhadap proses dan klasifikasinya untuk membagi proses menjadi beberapa subsistem (elemen proses);
3. Penentuan hubungan antara subsistem;
4. Analisis variabel dan hubungan antar variabel pada setiap elemen proses
5. Pembentukan persamaan matematika dengan menggunakan variabel dan parameter; Pengumpulan data;
6. Pengamatan representasi proses oleh model; perbandingan hasil simulasi dengan data proses nyata;
7. Instalasi model; interpretasi dan pemeriksaan hasil
8. Analisis sensitivitas model untuk mengidentifikasi parameter yang berpengaruh kuat dan lemah terhadap respons model;
9. Penyederhanaan model.
10. Tahap 4 – 9 diulang, sampai interpretasi hasil model sesuai dengan kriteria objektif dan solusi yang diharapkan

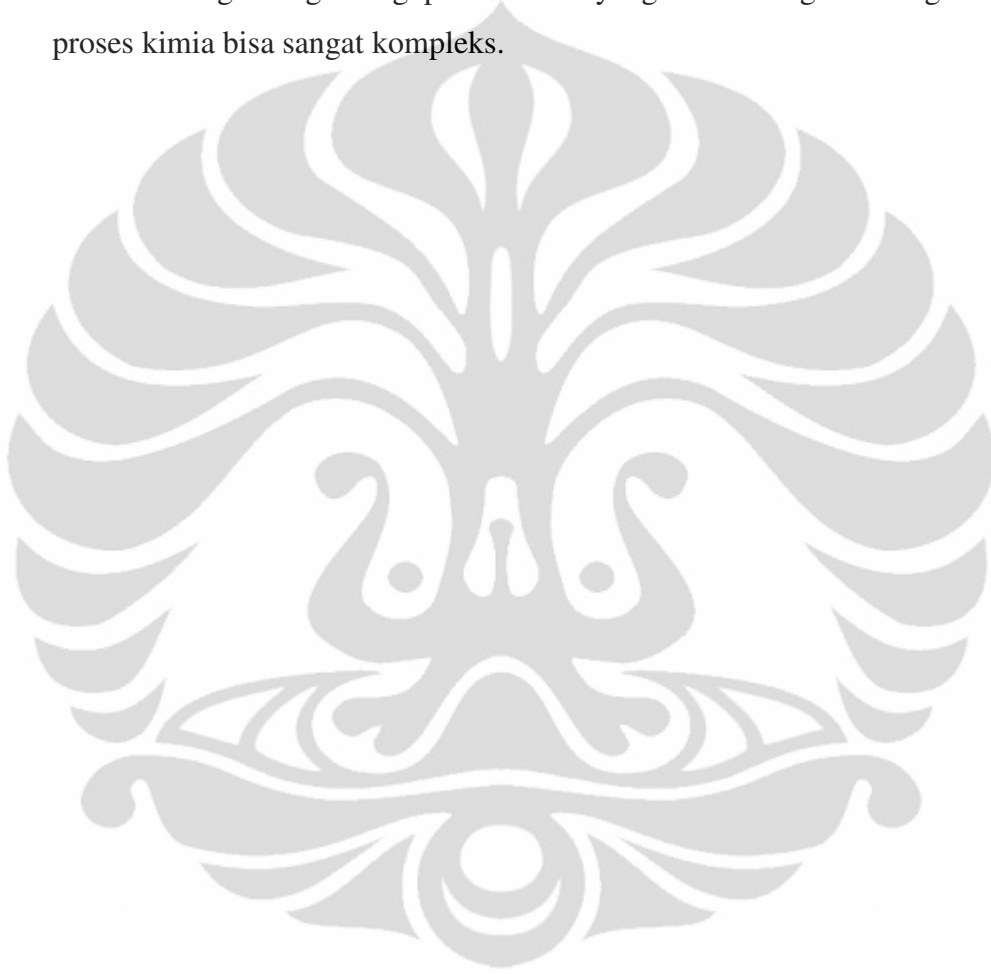


Gambar 2.15 Model Berdasarkan Jenis Persamaan

2.6 Simulasi

Simulasi adalah manipulasi model dengan berbagai pendekatan dalam ruang

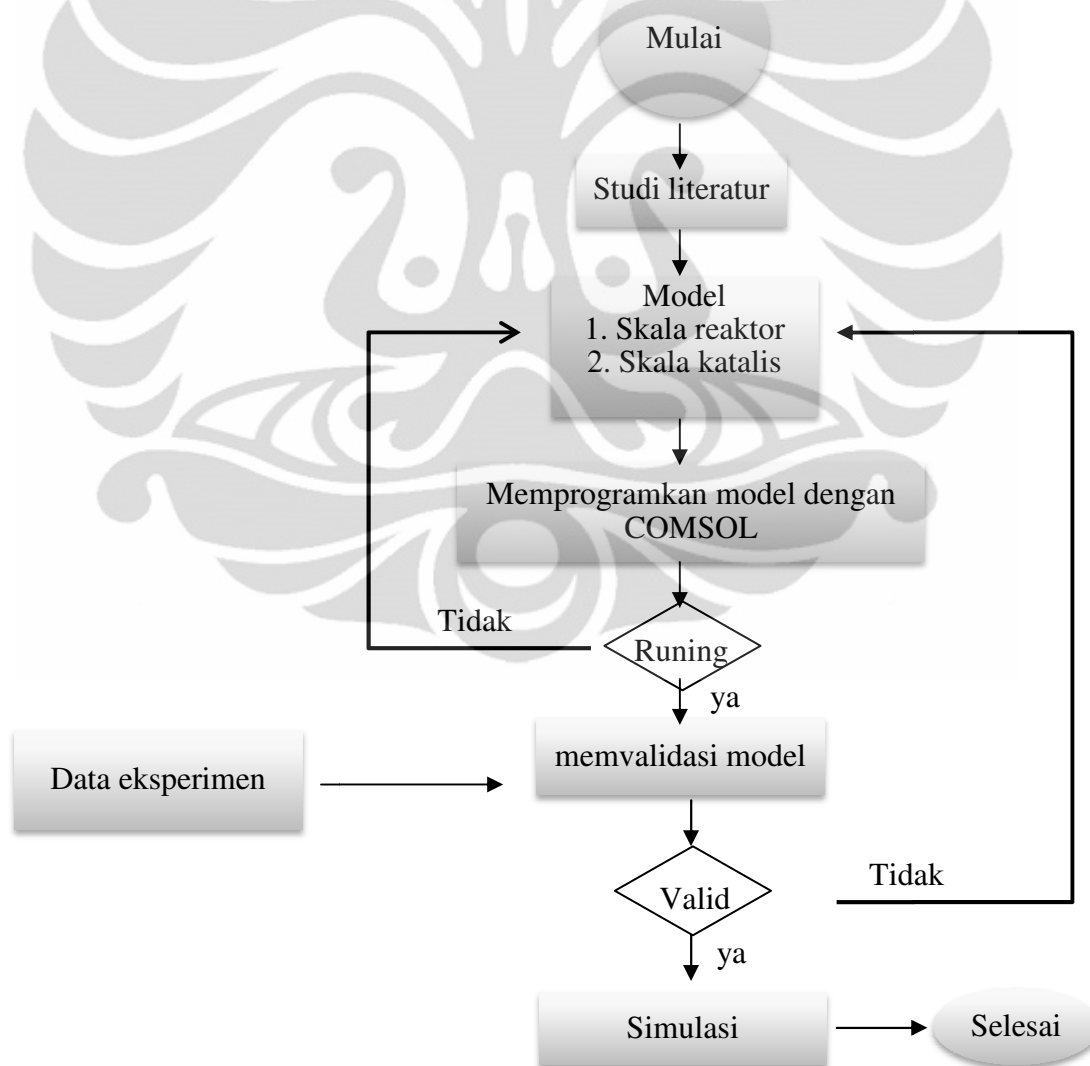
dan waktu, yang memungkinkan seseorang memprediksi karakteristik suatu sistem tanpa berinteraksi langsung dengan sistem karena keterbatasan jarak dengan ruang dan waktu. Pemodelan dan simulasi adalah salah satu metode untuk mengembangkan pemahaman terhadap sistem, secara parsial dan keseluruhan. Level pemahaman via metode ini jarang bisa dicapai dengan metode lain. Hasil simulasi sangat tergantung pada model yang dikembangkan. Dugaan terhadap proses kimia bisa sangat kompleks.



BAB III METODE PENELITIAN

3.1 Diagram Penelitian

Untuk mencapai tujuan yang diharapkan dalam penelitian ini maka pada bab ini akan dijelaskan mengenai langkah-langkah yang dilakukan. Dengan demikian diharapkan mempermudah untuk menyelesaikan permasalahan yang dihadapi dan bisa digunakan sebagai acuan penelitian yang akan datang agar didapatkan hasil yang lebih baik. Langkah-langkah yang dilakukan dalam penelitian ini meliputi:



Gambar 3.1 Prosedur 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

Dalam studi literatur dilakukan pengumpulan data-data dan parameter yang diperlukan dalam menyusun model diantaranya teori pendukung tentang reaksi Fischer Tropsch, persamaan kinetika reaksi Fischer Tropsch, teori pemodelan reaktor unggun tetap, data percobaan sebagai bahan untuk melakukan validasi model yang didapatkan.

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. Model dikembangkan baik skala reaktor, skala katalis dan antar fasa.

3.2.3 Pemrograman dengan COMSOL

3.2.3.1 Pembuatan Geometri di Comsol

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

3.2.3.2 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.

3.2.4 Validasi 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 pemasukan tanda model dapat dilihat dari hasil output pada COMSOL, contohnya seperti pemasukkan laju reaksi, ketika salah pemasukkan tanda maka yang terjadi adalah penambahan konsentrasi 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.

Melakukan validasi program. Ini dilakukan untuk mengetahui adanya kesalahan pada aplikasi model kedalam program COMSOL. Kesalahan ini bisa diketahui dengan melakukan eksekusi terhadap program setelah memasukan semua parameter yang diperlukan. Jika ada pesan kesalahan baik dari input konstanta, kondisi batas ataupun penulisan script program berarti program belum valid.

Jika validasi program belum berhasil maka dilakukan koreksi terhadap parameter-parameter model yang diaplikasikan pada program (persamaan skalar, konstanta, kondisi batas) ataupun penulisan script program hingga model yang diaplikasikan dapat berjalan yang bisa diketahui dengan tidak munculnya pesan kesalahan ketika model yang telah diaplikasikan ke dalam program COMSOL

dijalankan, sehingga dapat digunakan untuk langkah berikutnya.

Jika validasi program berhasil, yang bisa diketahui dengan berhasilnya eksekusi program tanpa ada pesan kesalahan, maka dilakukan validasi model dengan membandingkan data-data yang didapat dari hasil simulasi dengan data-data percobaan yang dilakukan oleh Bo-Tao Teng pada kondisi operasi yang sama.

3.2.5 Analisis

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

Jika data hasil simulasi belum sesuai dengan data percobaan maka dilakukan koreksi terhadap model dan mengulangi langkah-langkah no 2 – 6. Dan jika data hasil simulasi telah sesuai dengan data percobaan (kesalahan < 10%) maka dilakukan simulasi untuk mengetahui pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor.

BAB IV

PEMODELAN REAKTOR UNGGUN TETAP

4.1 Tinjauan Umum

Dalam tahap pemodelan ini akan diturunkan persamaan matematis dari sistem reaktor tubular unggun tetap. 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 untuk skala reaktor dan dua dimensi arah radial dan arah aksial untuk skala katalis. Pemilihan model satu dimensi pada reaktor 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 Bo-Tao Teng 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 Neraca Massa

Neraca massa merupakan aplikasi dari hukum kekekalan massa, yaitu massa tidak dapat diciptakan ataupun dihancurkan. Kesetimbangan massa hampir selalu menjadi syarat untuk perhitungan lain dalam masalah teknik kimia baik yang sederhana maupun yang kompleks. Untuk membuat sebuah kesetimbangan massa, pertama-tama kita harus menentukan sistem yang akan kita buat kesetimbangannya, kemudian menguraikan batas-batasnya. Pada neraca massa, ada beberapa istilah yang digunakan, yaitu (1) sistem, merupakan bagian atau keseluruhan proses untuk analisis; (2) kondisi batas merupakan suatu kumpulan kondisi yang ditentukan untuk menyelesaikan suatu persamaan diferensial di batas domain; (3) sistem terbuka merupakan sistem dengan adanya massa yang keluar dan masuk melalui kondisi batas; (4) sistem tertutup merupakan sistem tanpa adanya perpindahan massa selama jangka waktu yang diinginkan.

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

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

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.1)$$

dimana,

*1 = suku akumulasi

*2 = suku konveksi

*3 = suku dispersi

*4 = suku reaksi

c_A = konsentrasi A

v = kecepatan superficial

\mathcal{D}_e = koefisien dispersivitas

z = arah z

r = arah r

θ = arah θ

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat persegi:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = \mathcal{D}_e \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) \quad (4.2)$$

- Koordinat bola:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial c_A}{\partial \phi} \right) \\ = \mathcal{D}_e \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Untuk menyederhanakan persamaan diatas perlu ditetapkan beberapa asumsi, meliputi:

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

$$\underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \mathcal{D}_e \underbrace{\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.4)$$

- Kecepatan yang diperhatikan hanya kecepatan ke arah z , sehingga kecepatan ke arah r dan θ dalam persamaan dapat diabaikan. Hal ini membuat bentuk akhir persamaan menjadi:

$$\underbrace{\left(v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right)}_2 = \mathcal{D}_e \underbrace{\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.5)$$

4.1.2 Neraca Energi

Sama dengan neraca massa, neraca energi merupakan aplikasi dari hukum kekekalan energi yang berbunyi energi tidak dapat diciptakan dan tidak dapat dihilangkan. Menurut Himmelblau, ada enam jenis energi, yaitu (1) kerja (*work*) adalah suatu bentuk yang menunjukkan perpindahan antara sistem dan sekitarnya.

Kerja bernilai positif ketika dilakukan pada sistem. (2) Kalor (*heat*) adalah bagian dari aliran energi total yang mengalir melewati kondisi batas yang disebabkan oleh perbedaan suhu antara sistem dan sekitarnya. (3) Energi kinetik adalah energi yang dimiliki oleh suatu sistem karena kecepatannya relatif terhadap sekitarnya. (4) Energi potensial adalah energi yang dimiliki oleh suatu sistem karena gaya yang disesakkan pada massanya oleh medan gravitasi atau elektromagnetik terhadap permukaan referensi. (5) Energi internal adalah pengukuran makroskopik dari energi molekuler, atomik, dan subatomik yang semuanya mengikuti kaidah konservasi tertentu. (6) Entalpi merupakan kombinasi dari dua variabel pada kesetimbangan energi.

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca massa adalah konveksi, dispersi dan reaksi dengan persamaan pada koordinat silinder:

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

$$+ 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left[\frac{1}{r} \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_r \right) \right]^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \underbrace{\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right\}}_4$$

(4.6)

dimana,

*1 = suku akumulasi

*2 = suku konveksi

*3 = suku konduksi

*4 = suku transformasi kecepatan aliran menjadi energi

ρ = massa jenis campuran

C_v = kapasitas panas

T = temperatur

k = konduktivitas termal

μ = viskositas campuran

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat persegi:

$$\rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \right.$$

$$\left(\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)^2\} + \mu \left\{ \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y}\right)^2 \right\} \quad (4.7)$$

- Koordinat bola:

$$\begin{aligned} \rho C_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) &= k \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \right] + 2\mu \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta \cot \theta}{r} \right)^2 \right\} + \\ \mu \left\{ \left[r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right]^2 + \left[\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\phi}{r} \right) \right]^2 + \left[\frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v_\phi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Untuk menyederhanakan persamaan di atas, maka perlu ditetapkan beberapa asumsi meliputi:

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

$$\underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.9)$$

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

$$\underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.10)$$

- Kecepatan yang diperhatikan hanyalah kecepatan ke arah z, sehingga kecepatan ke arah r dan Θ dalam persamaan dapat diabaikan. Hal ini membuat bentuk akhir persamaan menjadi:

$$\underbrace{\rho C_v \left(v_r \frac{\partial T}{\partial r} \right)}_2 = k \underbrace{\left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \quad (4.11)$$

4.1.3 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 :

4.1.3.1 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 $z = 0$ (untuk $0 < r < R$)

$$C_A = C_{A,in} \quad (4.12)$$

$$T_A = T_{in} \quad (4.13)$$

Kondisi batas untuk neraca energi dan massa pada skala reaktor analog kecuali pada dinding reaktor di mana terjadi perpindahan massa akibat pemanasan eksternal dari *furnace*.

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 $z = L$:

$$dC_A/dz = 0 \quad (4.14)$$

$$dT/dz = 0 \quad (4.15)$$

Pada $r = 0$ (untuk $0 < z < L$) :

$$dC_A/dr = 0 \quad (4.16)$$

$$dT/dr = 0 \quad (4.17)$$

Pada dinding luar reaktor pada arah radial terjadi perpindahan panas akibat pemanasan eksternal dari *furnace*. Kondisi ini dapat dinyatakan dengan :

Pada $r = R$:

$$dC_A/dr = 0 \quad (4.18)$$

$$k_r(dT/dr) = h_g(T_w - T) \quad (4.19)$$

4.1.3.2 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 $r_p = 0$:

$$dC_{A,s}/dr_p = 0 \quad (4.20)$$

$$dT/dr_p = 0 \quad (4.21)$$

pada $r_p = R_p$

$$C = C_{A,s} \quad (4.22)$$

$$k_c(dT/dr) = h_g(T_g - T_s) \quad (4.23)$$

4.2 Model Reaktor Unggun Tetap untuk Sintesis Fischer Tropsch

4.2.1 Neraca Massa Skala Reaktor

Dalam persamaan neraca massa kondisi tunak berlaku persamaan umum :

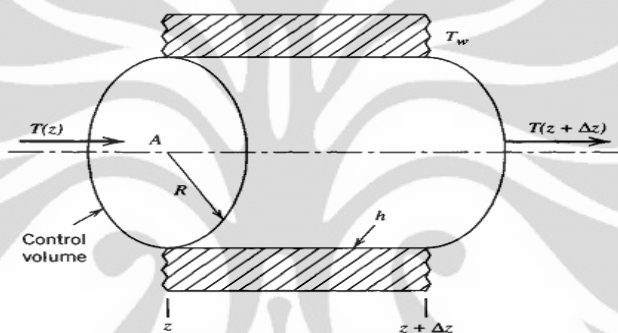
$$\begin{aligned} [\text{Laju Massa}]_{\text{Masuk}} - [\text{Laju Massa}]_{\text{Keluar}} \\ - [\text{Laju Generasi massa}] = 0 \end{aligned} \quad (4.23)$$

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 dispersif dan konvektif dalam aliran fluida pada arah aksial, maka persamaan matematis dengan memperhitungkan arah aksial dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\begin{aligned}
 & \left[\begin{array}{c} \text{[Laju Massa]} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - & (4.24) \\
 & \left[\begin{array}{c} \text{[Laju Massa]} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{konvektif aksial}} + \left[\begin{array}{c} \text{[Laju Massa]} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] - \\
 & \left[\begin{array}{c} \text{[Laju Massa]} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{dispersif aksial}} - \left[\begin{array}{c} \text{[Laju Generasi]} \\ \text{Massa} \end{array} \right] = 0
 \end{aligned}$$

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:

$$\begin{aligned}
 & \left[\pi r^2 C_i v_z \right]_z + \left[\pi r^2 J_i \right]_z - \left[\pi r^2 C_i v_z \right]_{z+\Delta z} - & (4.25) \\
 & \left[2 \pi r^2 J_i \right]_{z+\Delta z} + \pi r^2 \Delta z k_g a_p (C_i - C_{i,s})
 \end{aligned}$$

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 Δz . 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 :

$$\text{Fluks Massa} = (\text{Kecepatan Aliran Massa} / \text{Luas Bidang}).$$

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

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \left[\frac{\pi r^2 (C_{i,v_z}|_{z+\Delta z} - C_{i,v_z}|_z)}{\pi r^2 \Delta z} \right] + \left[\frac{\pi r^2 (J_{i,z}|_{z+\Delta z} - J_{i,z}|_z)}{\pi r^2 \Delta z} \right] + \left[\frac{\pi r^2 \Delta z k_g a_p \Delta C}{\pi r^2 \Delta z} \right] = 0 \quad (4.26)$$

Dengan menggunakan teori limit di mana Δz mendekati nol maka persamaan di atas dapat dituliskan dalam persamaan diferensial sebagai berikut :

$$\frac{\partial C_{i,v_z}}{\partial z} + \frac{\partial J_{i,z}}{\partial z} + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) = 0 \quad (4.27)$$

Lalu substitusi nilai,

$$J_{i,z} = -D_e \frac{dC_i}{dz} \quad (4.28)$$

Maka persamaan menjadi :

$$v_s \frac{\partial C_i}{\partial z} + D_e \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) = 0 \quad (4.29)$$

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 ω persamaan di atas menjadi :

$$\omega \frac{\partial C_i v_s}{\partial z} - \omega D_e \left[\frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \right] + k_g a_p (C_i - C_{i,s}) = 0 \quad (4.30)$$

dengan, ω = panjang reaktor model/ 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 unggun tetap, koefisien difusivitas molekuler campuran, kecepatan interstisi serta koefisien transfer massa di lapisan film.

- Koefisien dispersi aksial unggun tetap (Wen dkk 1975)

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

$$D_e = \left(\frac{0.5}{1 + 9.5 \frac{\varepsilon_{bed}}{Re Sc}} + \frac{0.75 \varepsilon_{bed}}{Re Sc} \right) v d_p \quad (4.31)$$

dimana,

D_e = koefisien dispersi

ε_{bed} = porositas unggun

v = viskositas kinematik

d_p = diameter katalis

$Re Sc$ = perkalian bilangan Reynold dan Schmidt fluida

- Koefisien difusi molekuler 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.

$$D_{i,m} = \frac{1 - y_i}{\sum_j D_{i,j}} \quad (4.32)$$

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.

$$u_{\text{intfeed}} = u_{\text{supfeed}} / \varepsilon_{\text{bed}} \quad (4.33)$$

$$u = u_{\text{intfeed}} \frac{C}{C_{\text{feed}}} \frac{P_{\text{feed}}}{P} \quad (4.34)$$

dimana,

u = kecepatan fluida interstisi

u_{intfeed} = kecepatan intersiti umpan

- Koefisien difusi molekular biner (Fuller)

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

$$D_{i,j} = \frac{0.0103T^{1.75} \left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right)^{0.5}}{P \left(V_i^{\frac{1}{3}} + V_j^{\frac{1}{3}} \right)^2} \quad (4.35)$$

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 ruang reaktor maupun sebaliknya. Untuk menghitung nilai ini diperlukan bilangan Reynold, Sherwood dan Nusselt. Bilangan Reynold menyatakan rasio gaya inersia akibat kecepatan terhadap gaya viskos. Sedangkan bilangan Schmidt menyatakan rasio difusivitas momentum dan difusivitas massa. Lalu kita memerlukan bilangan Sherwood untuk menghitung koefisien transfer massa lapisan film.

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_{im}} = 2 + 0.6Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (4.36)$$

$$Re = \frac{\rho d_p u}{\mu} \quad (4.37)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_{im}} \quad (4.38)$$

- 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.

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.39)$$

dimana,

μ_m = viskositas campuran

μ_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

$$\rho_b = \frac{pM}{RT} \quad (4.40)$$

dimana,

ρ_b = densitas

M = massa molekul relatif

R = konstanta kesetimbangan gas

4.2.2 Neraca Energi Skala Reaktor

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

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} \text{Laju Energi} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] \\ & - \left[\begin{array}{c} \text{Laju Energi} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{konvektif aksial}} + \left[\begin{array}{c} \text{Laju Energi} \\ \text{Masuk} \end{array} \right] \\ & - \left[\begin{array}{c} \text{Laju Energi} \\ \text{Keluar} \end{array} \right]_{\text{dispersif aksial}} - \left[\begin{array}{c} \text{Laju Generasi} \\ \text{Energi} \end{array} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.40)$$

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

$$\begin{aligned} & \left[\pi r^2 (\rho c_p T) v_z \right]_z + \left[\pi r^2 q_i \right]_z - \left[\pi r^2 (\rho c_p T) v_z \right]_{z+\Delta z} - \left[2\pi r^2 q_i \right]_{z+\Delta z} \\ & + \pi r^2 \Delta z h_g a_p (T_f - T_s) \end{aligned} \quad (4.41)$$

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 Δz . 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 :

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\pi r^2 \left((\rho c_p T) v_z \Big|_{z+\Delta z} - (\rho c_p T) v_z \Big|_z \right)}{\pi r^2 \Delta z} \right] + \left[\frac{\pi r^2 \left(q_{i,z} \Big|_{z+\Delta z} - q_{i,z} \Big|_z \right)}{\pi r^2 \Delta z} \right] \\ & + \left[\frac{\pi r^2 \Delta z h_g a_p \Delta T}{\pi r^2 \Delta z} \right] = 0 \end{aligned} \quad (4.42)$$

Dengan menggunakan teori limit di mana Δz mendekati nol maka persamaan di atas dapat dituliskan dalam persamaan diferensial sebagai berikut :

$$\left(\frac{\partial (\rho c_p T) v_z}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial q_{i,z}}{\partial z} \right) + h_g a_p \Delta T = 0 \quad (4.43)$$

Lalu substitusi nilai,

$$q_{i,z} = -k_{dis} \frac{\partial T_f}{\partial z} \quad (4.44)$$

Maka persamaan menjadi :

$$\frac{\partial T_f u_{int}}{\partial z} + k_{dis} \left[\frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} \right] + h_g a_p (T_f - T_s) = 0 \quad (4.45)$$

1 2 3

Di mana :

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

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

$$\omega \frac{\partial T_f u_{mt}}{\partial z} + \omega k_{dis} \left[\frac{\partial^2 T_f}{\partial z^2} \right] + h_s a_p (T - T_s) = 0 \quad (4.46)$$

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

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

$$k_{dis} = \left(\frac{k_f}{u \rho_f c_{pf} d_p} + \frac{k_{as}}{k_f} + \frac{u \rho_f c_{pf}}{a h_g d_p} \right) u \rho_f c_{pf} d_p \quad (4.47)$$

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.

$$k = \mu_m \left(C_p + \frac{5R}{4M} \right) \quad (4.48)$$

dimana,

k = konduktivitas termal

μ_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.

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i x_i + Cp_j x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.49)$$

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 ruang reaktor maupun sebaliknya. Untuk menghitung nilai ini diperlukan bilangan Reynold, Prandtl dan Nusselt. Bilangan Reynold menyatakan rasio gaya inersia akibat kecepatan terhadap gasa viskos. Sedangkan bilangan Prandtl menyatakan rasio difusifitas momentum dan difusifitas termal. Lalu kita memerlukan bilangan Nusselt untuk menghitung koefisien transfer energi lapisan film.

$$Nu = \frac{h_g d_p}{k} = 2 + 0.6Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (4.50)$$

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k} \quad (4.51)$$

4.2.3 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

$$\frac{dP}{dx} = \left(-\frac{\rho u}{\rho g_c D_p} \right) \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \left[\frac{150(1-\varepsilon)\mu}{D_p} + 1.75\rho\mu \right] \quad (4.52)$$

Persamaan ini setelah dimasukkan bilangan pentakdimensial menjadi

$$\frac{dP}{dx} = \left(-\frac{\rho u}{\rho g_c D_p} \right) \frac{(1-\varepsilon)}{\varepsilon^3} \left[\frac{150(1-\varepsilon)\mu}{D_p} + 1.75\rho\mu \right] \frac{1}{\omega} \quad (4.53)$$

4.3 Lapisan Film (Kondisi Batas pada consol gas-padat)

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.

4.3.1 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 :

$$\underbrace{k_g a (C_i - C_{i,s})}_1 = \underbrace{-D_{eff} \frac{dC_{i,s}}{dr}}_2 \quad (4.54)$$

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

Keterangan :

1. Transfer massa antar fasa
2. Fluks difusif

4.3.2 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 :

$$\underbrace{h a (T - T_s)}_1 = \underbrace{-K_e a \frac{dT_s}{dr}}_2 \quad (4.55)$$

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

keterangan :

1. Transfer energi antar fasa
2. Fluks konduktif

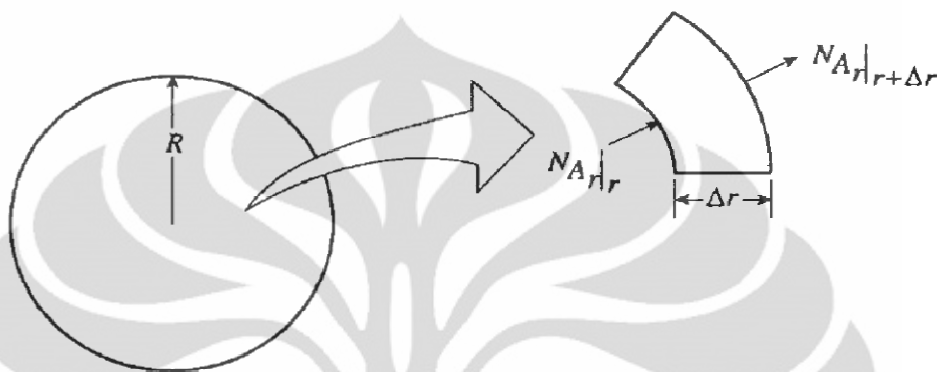
4.4 Skala Partikel Katalis

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.

4.4.1 Neraca Massa Skala Partikel Katalis

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

$$\left[\left(\text{Massa} \right)_{\text{Masuk}} - \left(\text{Massa} \right)_{\text{Keluar}} \right]_{\text{difusi radial}} - \left[\text{Generasi} \right]_{\text{Massa}} = 0 \quad (4.56)$$



Gambar 4.2 Kontrol Volume Skala Katalis

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

$$\left[4\pi r^2 J_{i,p} \right]_r - \left[4\pi (r + \Delta r)^2 J_{i,p} \right]_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 \Delta r \Sigma R_j \quad (4.57)$$

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

Persamaan di atas menjadi :

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\left[r^2 J_{i,p} \right]_r - \left[r^2 J_{i,p} \right]_{r+\Delta r}}{\Delta r} + r^2 \Sigma R_j \quad (4.58)$$

$$\frac{d(r^2 J_{i,p})}{dr} + r^2 \Sigma R_j \quad (4.59)$$

Setelah itu substitusi,

$$J_{i,p} = -D_{eff} \frac{\partial C_{i,p}}{\partial r} \quad (4.60)$$

persamaan menjadi :

$$\frac{1}{r^2} D_{eff} \left(\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC_{i,p}}{dr} \right) \right) + \Sigma R_i = 0 \quad (4.61)$$

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.

$$D_{eff} = \frac{u_{int} d_p}{8.65[1+19.4\left(\frac{d_p}{d_r}\right)^2]} \quad (4.62)$$

4.4.2 Neraca Energi Panas Skala Partikel Katalis

Persamaan umum neraca massa skala partikel katalis adalah sebagai berikut :

$$\left[\left(\text{Energi} \right)_{\text{Masuk}} - \left(\text{Energi} \right)_{\text{Keluar}} \right]_{\text{difusi radial}} - \left[\text{Generasi} \right]_{\text{Energi}} = 0 \quad (4.63)$$

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

$$\left[4\pi r^2 q_{i,p} \right]_r - \left[4\pi (r + \Delta r)^2 q_{i,p} \right]_{r+\Delta r} + 4\pi r^2 \Delta r \Sigma \Delta H_j R_j \quad (4.64)$$

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

Persamaan di atas menjadi

$$\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{\left[r^2 q_{i,p} \right]_r - \left[r^2 q_{i,p} \right]_{r+\Delta r}}{\Delta r} + r^2 \Sigma \Delta H_j R_j \quad (4.65)$$

$$\frac{d(r^2 q_{i,p})}{dr} + r^2 \Sigma \Delta H_j R_j \quad (4.66)$$

Setelah itu substitusi,

$$q_{i,p} = -k_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} \quad (4.67)$$

persamaan menjadi :

$$\frac{1}{r^2} k_{eff} \left(\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT_p}{dr} \right) \right) + \Sigma \Delta H_j R_j = 0 \quad (4.68)$$

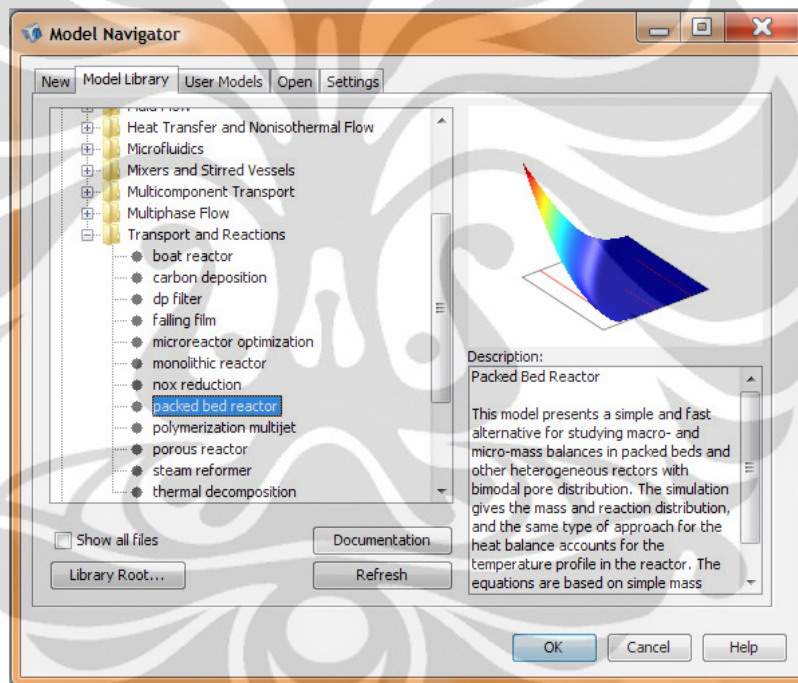
Supaya model ini dapat diselesaikan maka diperlukan persamaan fisik

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).

$$k_{eff} = k(130.11PrRe) \quad (4.69)$$

4.5 Persamaan Geometri Reaktor Unggun Tetap dalam Comsol

Setelah didapatkan persamaan model maka langkah selanjutnya adalah mengaplikasikan model pada program COMSOL. Langkah-langkah dalam mengaplikasikan model ke dalam program COMSOL adalah sebagai berikut:



Gambar 4.3. Pemilihan Modul COMSOL

1. Menentukan dimensi sistem. Karena yang ditinjau hanya gradien pada arah aksial maka dipilih sistem 2 dimensi (Gambar 4.3).
2. Dari modul Chemical Engineering dipilih modul Transport and reaction dengan fenomena pack bed reactor (Gambar 4.3).
3. Setelah membuka program pilih Multiphysics space pada

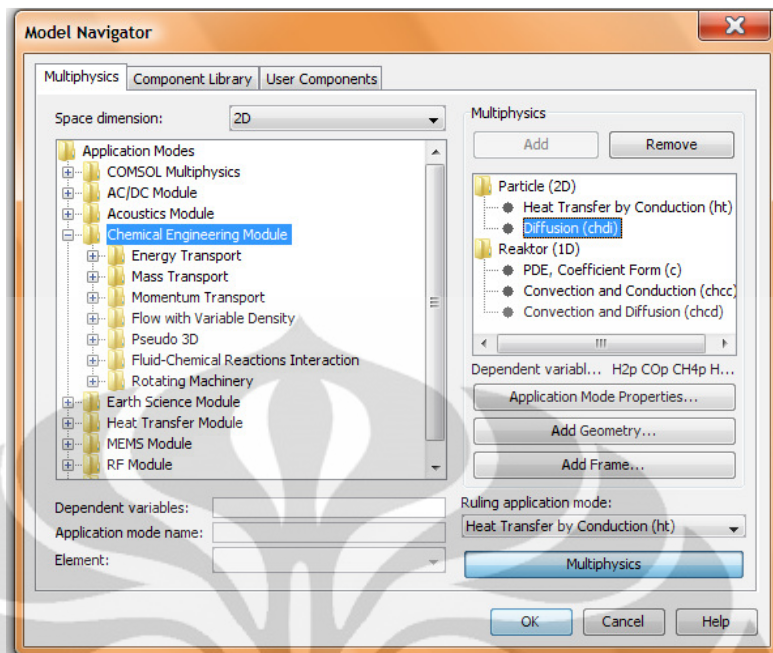
Pemodelan Navigator :

- a. Mulai COMSOL Multiphysics
- b. Dalam Model Navigator, klik tombol Multiphysics dan 2D pilih dalam daftar dimensi Space.

- c. Klik tombol Add Geometri dan masukkan Partikel dalam nama Geometri.
- d. Mengubah variabel independen untuk x_rz , kemudian klik OK untuk menutup kotak dialog.
- e. Pilih modus aplikasi COMSOL Multiphysics> Modul Rekayasa Kimia> Mass Transport> Difusi. Masukkan H_2p C_3H_6p COp CO_2p H_2Op C_2H_3OOHp CH_4p C_2H_6Op dalam variabel Dependent. Klik tombol Add.
- f. Klik tombol Add geometri dan jenis Reaktor dalam nama Geometri sunting lapangan. Juga mengatur dimensi Ruang untuk 1D. Tutup kotak dialog dengan mengklik OK.
- g. Sorot modus aplikasi COMSOL Multiphysics> Modul Rekayasa Kimia> Misa Transportasi> Konveksi dan Difusi. Masukkan H_2 C_3H_6 CO CO_2 H_2O C_2H_3OOH CH_4 C_2H_6O dalam variabel Dependent sunting lapangan.
- h. Klik tombol Add.
- i. Pilih modus aplikasi COMSOL Multiphysics> PDE Mode> PDE, Koefisien Formulir. Pada variabel dependen sunting lapangan, jenis P.
- j. Klik OK untuk menutup Navigator Model.

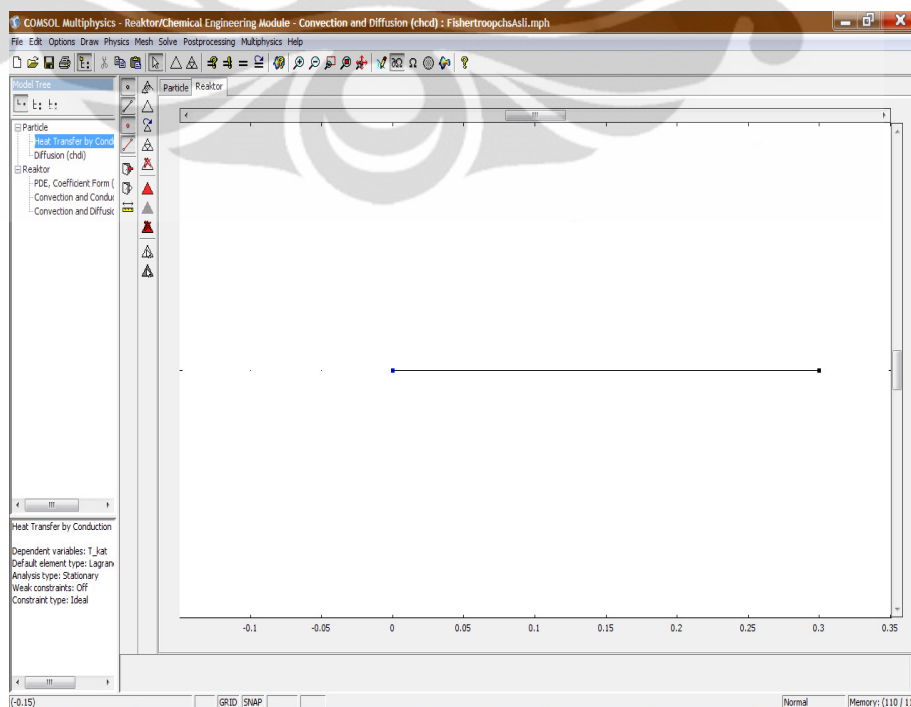
Pemodelan Geometri

- a. Dari menu Multiphysics, pilih Reaktor: Konveksi dan Difusi (chcd).
- b. 2 Tahan tombol Shift dan klik tombol Line pada toolbar Draw untuk membuka kotak dialog Line.
- c. Pada x sunting lapangan, tipe 0 0,3, kemudian klik OK untuk menutup kotak dialog.
- d. Klik tombol Zoom luasan pada toolbar utama.

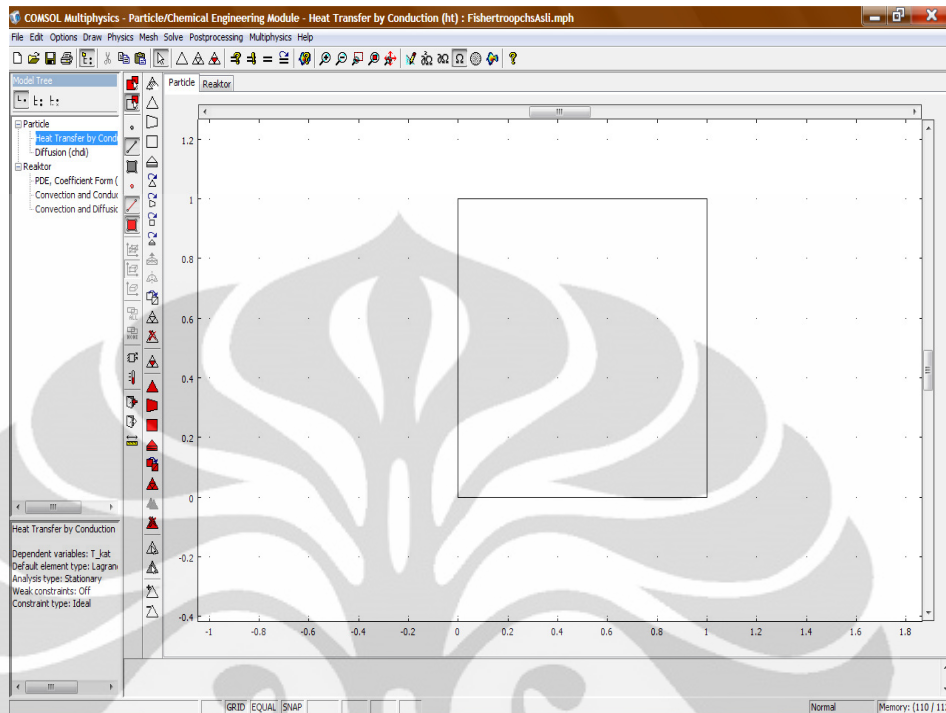


Gambar 4.4. Model Navigator

4. Setelah selesai maka masuk ke langkah selanjutnya dengan menekan tombol OK.
5. Langkah selanjutnya adalah menentukan bentuk geometri sistem reaktor dan partikel. Karena sistem yang ditinjau 1 dimensi maka geometrinya hanya berupa garis lurus sepanjang reaktor dan berbentuk persegi untuk partikel karena dimensinya 2D (Gambar 4.5).



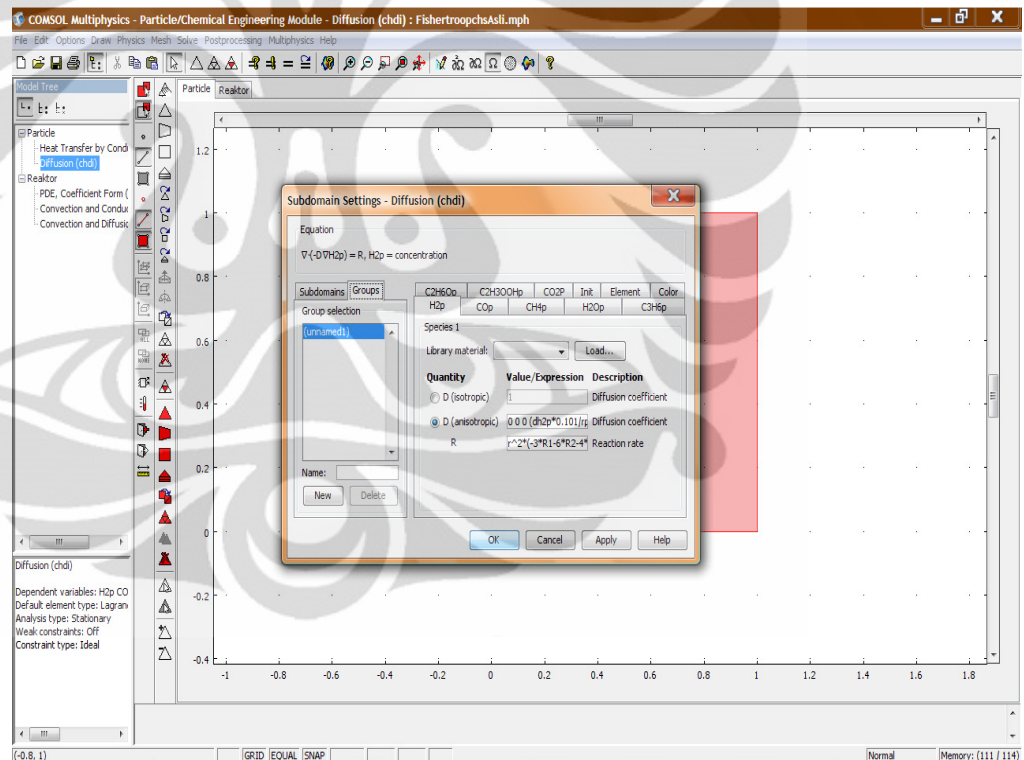
Gambar 4.5. Geometri sistem reaktor



Gambar 4.6. Geometri sistem partikel

6. Setelah menentukan bentuk geometri sistem dilanjutkan dengan menentukan properti sistem yang terdiri dari koefisien difusi yang diganti dengan koefisien dispersi, laju reaksi dan kecepatan superfisial. Disini tidak dimasukan nilainya karena telah didefinisikan dalam konstanta dan persamaan skalar untuk memudahkan dalam melakukan simulasi selanjutnya. Pada tahap ini juga ditentukan nilai awal tiap-tiap variabel pada tab Init
7. Pada menu partikel pilih diffusion (chdi)-subdomain setting :
 - a. Pada subdomain pilih 1
 - b. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dh_{2p} \cdot 0.101/rp^2) \cdot r^2$ pada H_{2p} dan ketik $r^2 \cdot (-3 \cdot R1 - 6 \cdot R2 - 4 \cdot R3 - 2 \cdot R4 + R5)$ pada laju reaksi.
 - c. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dcop \cdot 0.101/rp^2) \cdot r^2$ pada COp dan ketik $r^2 \cdot (-R1 - 3 \cdot R2 - 2 \cdot R3 - 2 \cdot R4 - R5)$ pada laju reaksi.
 - d. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dh_{2op} \cdot 0.101/rp^2) \cdot r^2$ pada H_{2Op} dan ketik $r^2 \cdot (R1 + 3 \cdot R2 + R3 - R5)$ pada laju reaksi.

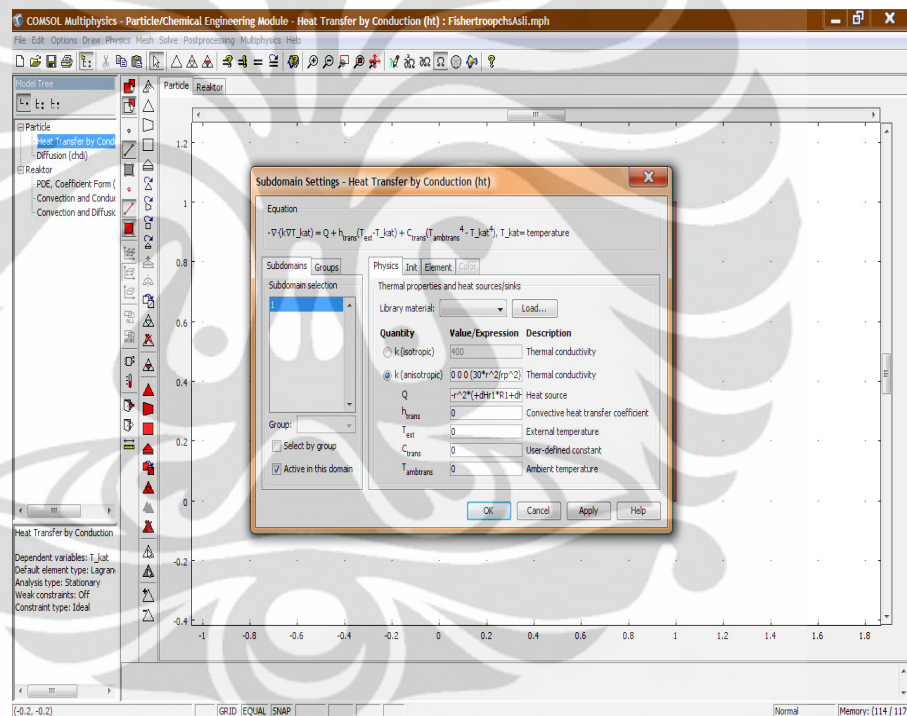
- e. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dch4p*0.101/rp^2)*r^2$ pada CH_4p dan ketik $r^2*(R1)$ pada laju reaksi.
- f. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dCO2p*0.101/rp^2)*r^2$ pada CO_2p dan ketik $r^2*(R5)$ pada laju reaksi.
- g. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dch3oohp*0.101/rp^2)*r^2$ pada CH_3OOHp dan ketik $r^2*(R4)$ pada laju reaksi.
- h. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dc3h6p*0.101/rp^2)*r^2$ pada C_3H_6p dan ketik $r^2*(R2)$ pada laju reaksi.
- i. Pada diffusion coefficient ketik $0\ 0\ 0\ (dc2h6op*0.101/rp^2)*r^2$ pada C_2H_6Op dan ketik $r^2*(R3)$ pada laju reaksi.
- j. Masukkan konsentrasi $H_2p\ C_3H_6p\ COp\ CO_2p\ H_2Op\ C_2H_3OOHp\ CH_4p\ C_2H_6Op$ sebesar 1 M pada $t = 0$ (Gambar 4.8).



Gambar 4.7. Subdomain settings-Diffusion Particle

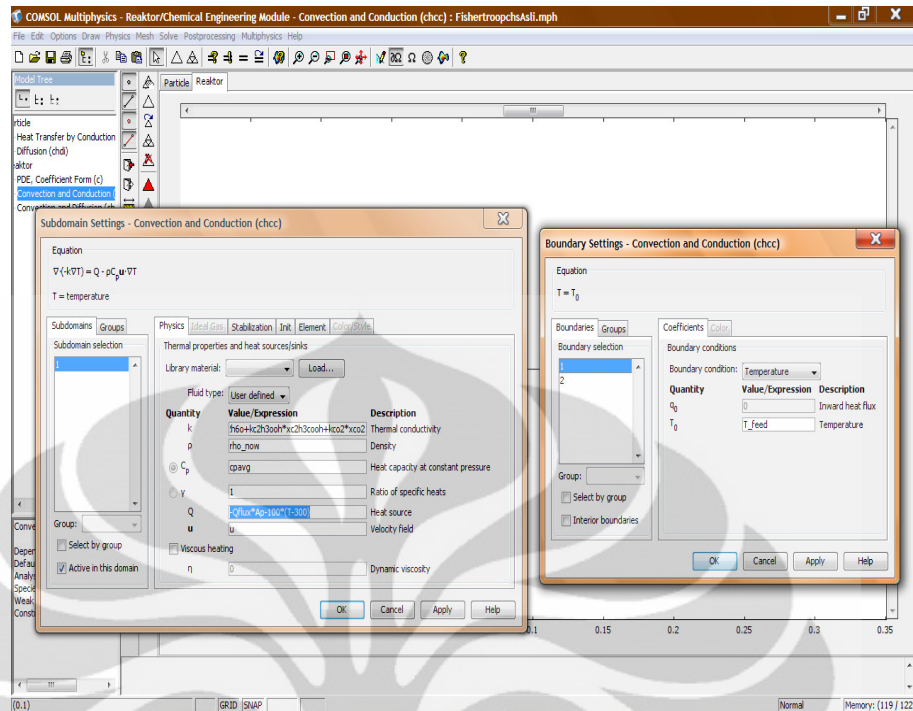
8. Pada menu partikel pilih *diffusion (chdi)-boundary setting* :
 - a. Pada boundary pilih 3
 - b. Pada C_3H_6p boundary condition pilih *flux* > *kc* (koefisien mass transfer) ketik kcC_3H_6p , pada konsentrasi bulk ketik $C3H6bulk$.

- c. Begitu seterusnya untuk H_2p COp CO_2p H_2Op C_2H_3OOHp CH_4p C_2H_6Op .
9. Pada menu partikel pilih *heat transfer by conduction (ht) subdomain setting* :
- Pada subdomain pilih 1.
 - Pada physics pilih k (anisotropic) dan ketik $0\ 0\ 0\ (30*r^2/rp^2)$ pada *thermal conductivity* dan $r^2*(dHr1*R1+dHr2*R2+dHr3*R3+dHr4*R4+dHr5*R5)$ pada *heat source*.
 - Pada init ketik T_feed untuk $T_kat\ t=0$. (Gambar 4.9)



Gambar 4.8. *Heat transfer by conduction subdomain setting*

10. Pada menu partikel pilih *heat transfer by conduction (ht) boundary setting* :
- Pada boundary pilih 3.
 - Pilih *heat flux*, pada kondisi boundary.
 - Ketik hip pada h (*heat transfer coefficient*) dan T_{bulk} pada *external temperatur*.
11. Pada menu reactor pilih *PDE, coefficient form (c)-subdomain setting* :
- Pada subdomain pilih 1.



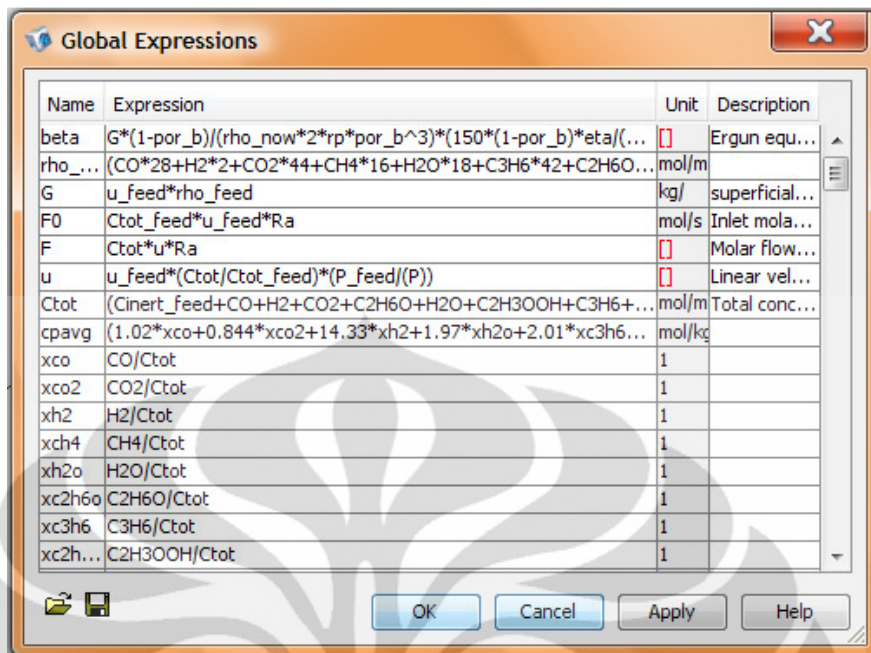
Gambar 4.10. convection and conduction (chcc) subdomain setting

13. Untuk besaran yang tetap selama proses perhitungan maka dimasukkan pada persamaan skalar (Gambar 4.12), yang terdapat pada menu Option, constants.

| Name | Expression | Value | Description |
|----------|----------------|---------|----------------------------------|
| R | 8.314 | 8.314 | Gas constant |
| P_feed | 7e6[Pa] | 7e6 | Feed Pressure |
| T_feed | 400[K] | 400 | Temperature |
| D_CH4 | 5.62e-8[m^2/s] | 5.62... | |
| D_CO | 4.87e-8[m^2/s] | 4.87... | Diffusion coefficient for CO |
| D_H2 | 4.69e-8[m^2/s] | 4.69... | Diffusion coefficient for O2 |
| D_C2H... | 4.87e-8[m^2/s] | 4.87... | Diffusion coefficient for C3H6 |
| D_C3H6 | 4.87e-8[m^2/s] | 4.87... | |
| D_H2O | 7.67e-8[m^2/s] | 7.67... | |
| D_C2H... | 8e-7[m^2/s] | 8e-7 | |
| u_feed | 0.001[m/s] | 0.001 | Linear inflow velocity |
| por_b | 1-rho_b/rho_p | 0.745 | Porosity of the bed (void/total) |
| rho_b | 510[kg/m^3] | 510 | Density of bed |
| rho_p | 2000[kg/m^3] | 2000 | Density of pellet |
| Rr | 0.05[m] | 0.05 | Reactor radius |
| Ra | pi*Rr^2 | 0.00... | Reactor area |

Gambar 4.11. konstants

14. Untuk besaran yang berubah selama proses perhitungan maka dimasukkan pada persamaan skalar (Gambar 4.13), yang terdapat pada menu Option, Expression.



Gambar 4.12 Expression

15. Setelah semua parameter model dimasukkan maka model bisa langsung diselesaikan dengan menekan tombol *Solve* pada *taskbar* dan setelah beberapa saat akan didapatkan profil konsentrasi sepanjang reaktor.

4.6 Validasi Model

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

Tabel 4.1. Pesan Error pada COMSOL

| Numbers | Category |
|-----------|-------------------|
| 1000-1999 | Importing models |
| 2000-2999 | Geometry Modeling |
| 3000-3999 | CAD Import |
| 4000-4999 | Mesh Generation |

| | |
|-----------|--|
| 5000-5999 | Point, Edge, Boundary, and Subdomain Specification |
| 6000-6999 | Assembly and Extended Mesh |
| 7000-7999 | Solvers |
| 8000-8999 | Postprocessing |
| 9000-9999 | General |

Beberapa error yang penyusun hadapi beserta pemecahannya adalah:

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

BAB V

SIMULASI DAN PEMBAHASAN

5.1 Data Eksperimen

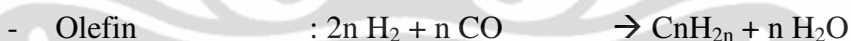
Untuk mengetahui suatu model bisa digunakan untuk memprediksi kinerja suatu reaktor perlu dilakukan validasi model dengan data hasil eksperimen. Pada bab ini dibahas mengenai validasi model dan simulasi pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor. Dalam validasi ini model dibandingkan dengan data-data berdasarkan pada hasil eksperimen mahasiswa Ika Sumanti 2011.

Pemodelan dan simulasi menggunakan program Comsol Multifisycs didasarkan atas persamaan reaksi yang diajukan oleh Bo-Tao Teng. Hasil dari simulasi dan eksperiment yang dilakukan didapatkan hasil produk yang terbesar fraksi molnya dari setiap spesi sebagai berikut :

✚ Reaksi utama



Dimana parafin diwakili oleh C_2



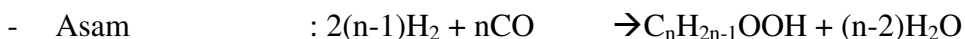
Dimana olefin diwakili oleh C_3



Dimana alkohol diwakili oleh C_2

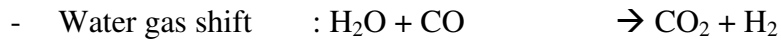


✚ Reaksi samping



Dimana asam diwakili oleh C_2





Data kondisi operasi untuk reaksi Fisher Tropsch sebagai berikut :

Tabel 5.1. Data kondisi operasi eksperimen

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 280 ⁰ C |
| Tekanan Umpan | 2x10 ⁶ Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4x10 ⁻⁴ m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,5 ; 0,5 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 1 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis (10%(3Fe:Mn)/γAl₂O₃) | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

Tabel 5.2. Data kondisi operasi Comsol untuk validasi data eksperimen

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 450 K |
| Tekanan Umpan | 2x10 ⁶ Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4x10 ⁻⁴ m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,5 ; 0,5 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 1 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

Tabel 5.3. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-1

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 400 K |
| Tekanan Umpan | 1×10^5 Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4×10^{-4} m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,6 ; 0,3 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 2 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

Tabel 5.4. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-2

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 400 K |
| Tekanan Umpan | 1×10^5 Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4×10^{-4} m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,6 ; 0,4 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 1,5 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

Tabel 5.5. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-3

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 400 K |
| Tekanan Umpan | 1×10^5 Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4×10^{-4} m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,3 ; 0,3 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 1 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

Tabel 5.6. Data kondisi operasi Comsol untuk simulasi ke-4

| Kondisi Operasi | |
|--|------------------------|
| Temperatur umpan | 410 K |
| Tekanan Umpan | 1×10^5 Pa |
| Laju Alir Superfisial Umpan | 4×10^{-4} m/s |
| Fraksi mol H ₂ dan CO Umpan | 0,3 ; 0,3 |
| Rasio H ₂ /CO Umpan | 1 |
| Geometri Reaktor | |
| Diameter Reaktor | 0.008 m |
| Panjang Reaktor | 0.3 m |
| Data Katalis | |
| Jari-jari Katalis | 0.0001m |
| Porositas | 0.25 |

5.2 Data Hasil Eksperimen dan Hasil Simulasi Program Comsol

Simulasi reaktor unggun tetap menghasilkan profil konsentrasi berbagai spesi yang terlibat dalam reaksi sepanjang reaktor baik di fluida ruah maupun di dalam katalis. Dengan kondisi operasi yang sama dengan kondisi operasi eksperimen

maka didapat hasil sebagai berikut :

Tabel 5.7. Data hasil eksperimen dan kondisi sesuai tabel 5.1

| Reaktan | Konversi % |
|----------------|------------|
| CO | 24.7 |
| H ₂ | 39.4 |

Tabel 5.8. Data hasil eksperimen dan kondisi sesuai tabel 5.2

| Reaktan | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
|-----------------------------------|-------------------------|-----------------------|--------------|--------------|---------------------------|-----------|
| | r = 0 | r = 1 | Konversi (%) | z = 0 | z = 0.3 | Konversi |
| CO | 32.552 | 44.978 | 18.5 | 45.091469 | 32.562488 | 27.78 |
| H ₂ | 24.115 | 44.792 | 26 | 45.065578 | 24.137067 | 46.44 |
| Produk | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
| | r = 0 | r = 1 | | z = 0 | z = 0.3 | Yield (%) |
| CH ₄ | 0.423 | 17.248 | | 0 | 17.238865 | 49.538 |
| C ₃ H ₆ | 3.22×10^{-8} | 3.06×10^{-6} | | 0 | 3.058622×10^{-6} | 0 |
| C ₂ H ₃ OOH | 2.542×10^{-12} | 2.64×10^{-9} | | 0 | 2.638742×10^{-9} | 0 |
| CO ₂ | 7.089×10^{-5} | 0.321 | | 0 | 0.320655 | 0.99 |
| H ₂ O | 0.328 | 17.247 | | 0 | 17.238865 | 49.538 |
| C ₂ H ₆ O | 4.88×10^{-11} | 1.47×10^{-9} | | 0 | 1.416522×10^{-9} | 0 |

Tabel 5.9. Data hasil simulasi ke-1 dan kondisi sesuai tabel 5.3

| Reaktan | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
|-----------------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------|--------------|----------------------------|--------------|
| | r = 0 | r = 1 | Konversi (%) | z = 0 | z = 0.3 | Konversi (%) |
| CO | 9.0001 | 7.189 | 20.1 | 9.019495 | 7.197118 | 20.2 |
| H ₂ | 17.989 | 14.353 | 26 | 18.038114 | 14.377086 | 26 |
| Produk | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
| | r = 0 | r = 1 | | z = 0 | z = 0.3 | Yield (%) |
| CH ₄ | 0.0423 | 2.235 | | 0 | 2.227417 | 49.73 |
| C ₃ H ₆ | 3.151x10 ⁻⁹ | 2.749x10 ⁻⁷ | | 0 | 2.745233x10 ⁻⁷ | 0 |
| C ₂ H ₃ OOH | 2.257x10 ⁻¹⁴ | 1.936x10 ⁻¹¹ | | 0 | 1.932486x10 ⁻¹¹ | 0 |
| CO ₂ | 1.667x10 ⁻⁵ | 0.0238 | | 0 | 0.023733 | 0.54 |
| H ₂ O | 0.0314 | 2.235 | | 0 | 2.227416 | 49.73 |
| C ₂ H ₆ O | 3.624x10 ⁻¹³ | 1.95x10 ⁻¹¹ | | 0 | 1.947573x10 ⁻¹¹ | 0 |

Tabel 5.10. Data hasil simulasi ke-2 dan kondisi sesuai tabel 5.4

| Reaktan | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
|-----------------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------|--------------|----------------------------|--------------|
| | r = 0 | r = 1 | Konversi (%) | z = 0 | z = 0.3 | Konversi (%) |
| CO | 12.003 | 9.78 | 18.5 | 12.026 | 9.787355 | 18.61 |
| H ₂ | 17.966 | 13.289 | 26 | 18.036524 | 13.30506 | 26.23 |
| Produk | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
| | r = 0 | r = 1 | | z = 0 | z = 0.3 | Yield (%) |
| CH ₄ | 0.0554 | 2.781 | | 0 | 2.776033 | 49.68 |
| C ₃ H ₆ | 4.219x10 ⁻⁹ | 3.643x10 ⁻⁷ | | 0 | 3.64007x10 ⁻⁷ | 0 |
| C ₂ H ₃ OOH | 4.696x10 ⁻¹⁴ | 4.227x10 ⁻¹¹ | | 0 | 4.234772x10 ⁻¹¹ | 0 |
| CO ₂ | 2.058x10 ⁻⁵ | 0.0357 | | 0 | 0.035626 | 0.64 |
| H ₂ O | 0.0415 | 2.781 | | 0 | 2.776033 | 49.68 |
| C ₂ H ₆ O | 6.381x10 ⁻¹³ | 3.082x10 ⁻¹¹ | | 0 | 3.079782x10 ⁻¹¹ | 0 |

Tabel 5.11. Data hasil simulasi ke-3 dan kondisi sesuai tabel 5.5

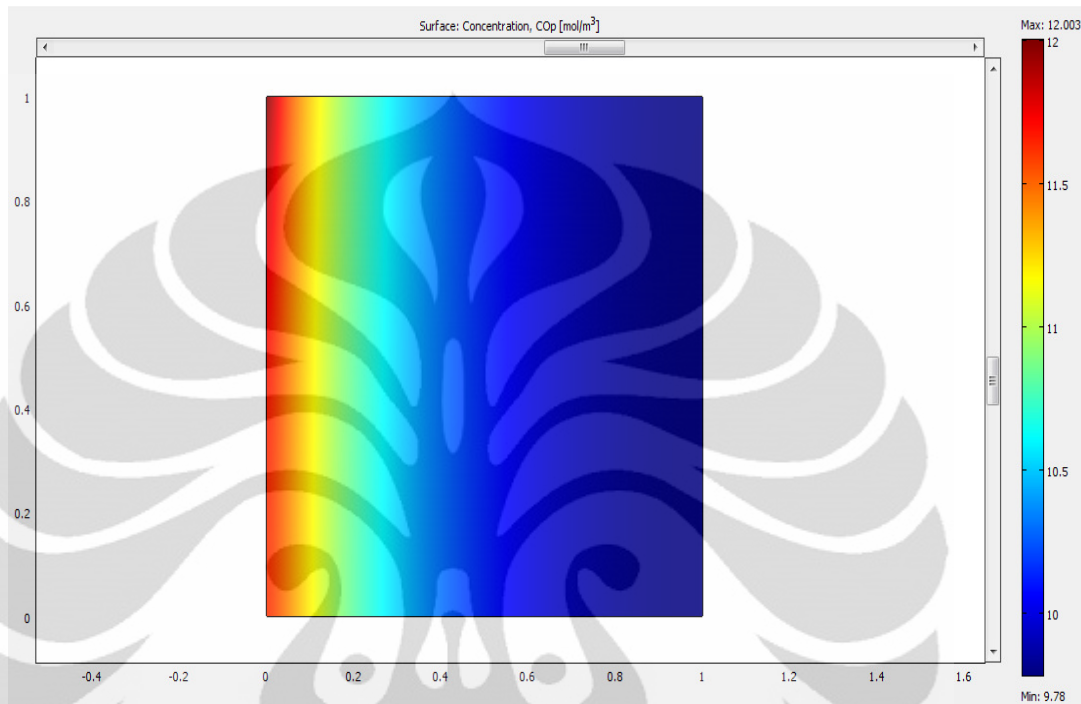
| Reaktan | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
|-----------------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------|--------------|----------------------------|--------------|
| | r = 0 | r = 1 | Konversi (%) | z = 0 | z = 0.3 | Konversi (%) |
| CO | 9.015 | 8.388 | 6.9 | 9.020584 | 8.394579 | 6.9 |
| H ₂ | 9.004 | 7.583 | 15.7 | 9.019904 | 7.602152 | 15.7 |
| Produk | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
| | r = 0 | r = 1 | | z = 0 | z = 0.3 | Yield (%) |
| CH ₄ | 0.0195 | 1.217 | | 0 | 1.209979 | 49.56 |
| C ₃ H ₆ | 1.727x10 ⁻⁹ | 1.728x10 ⁻⁷ | | 0 | 1.723553x10 ⁻⁷ | 0 |
| C ₂ H ₃ OOH | 1.082x10 ⁻¹⁴ | 1.254x10 ⁻¹¹ | | 0 | 7.278547x10 ⁻¹¹ | 0 |
| CO ₂ | 1.421x10 ⁻⁵ | 0.0125 | | 0 | 0.021437 | 0.88 |
| H ₂ O | 0.0147 | 1.216 | | 0 | 1.209979 | 49.56 |
| C ₂ H ₆ O | 8.632x10 ⁻¹⁴ | 6.258x10 ⁻¹² | | 0 | 6.242834x10 ⁻¹¹ | 0 |

Tabel 5.12. Data hasil simulasi ke-4 dan kondisi sesuai tabel 5.6

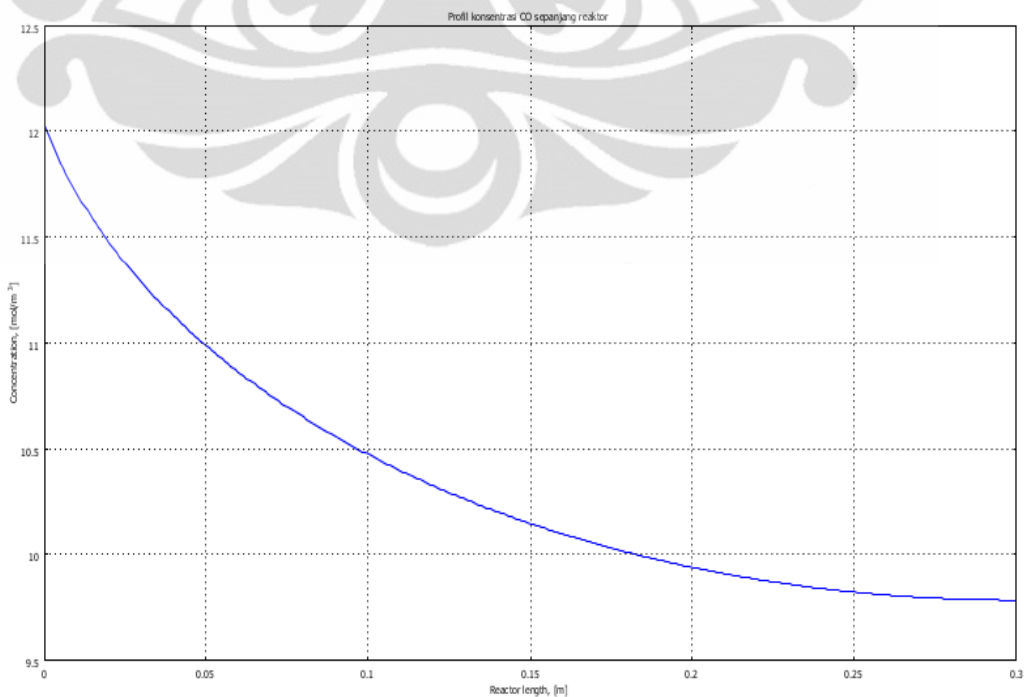
| Reaktan | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
|-----------------------------------|-------------------------|-------------------------|--------------|--------------|----------------------------|--------------|
| | r = 0 | r = 1 | Konversi (%) | z = 0 | z = 0.3 | Konversi (%) |
| CO | 8.793 | 8.055 | 8.3 | 8.797434 | 8.060787 | 8.3 |
| H ₂ | 8.778 | 7.16 | 18.4 | 8.790577 | 7.178258 | 18.35 |
| Produk | Fasa Katalis | | | Fasa Reaktor | | |
| | r = 0 | r = 1 | | z = 0 | z = 0.3 | Yield (%) |
| CH ₄ | 0.0259 | 1.389 | | 0 | 1.384038 | 49.67 |
| C ₃ H ₆ | 2.307x10 ⁻⁹ | 2.065x10 ⁻⁷ | | 0 | 2.061222x10 ⁻⁷ | 0 |
| C ₂ H ₃ OOH | 2.226x10 ⁻¹⁴ | 2x10 ⁻¹¹ | | 0 | 1.996128x10 ⁻¹¹ | 0 |
| CO ₂ | 1.361x10 ⁻⁵ | 0.0182 | | 0 | 0.01811 | 0.66 |
| H ₂ O | 0.0196 | 1.389 | | 0 | 1.384038 | 49.67 |
| C ₂ H ₆ O | 1.201x10 ⁻¹³ | 7.317x10 ⁻¹² | | 0 | 7.306225x10 ⁻¹¹ | 0 |

5.2.1 Profil Spesi Karbon Monoksida

Berikut ini adalah profil konsentrasi karbon monoksida di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :

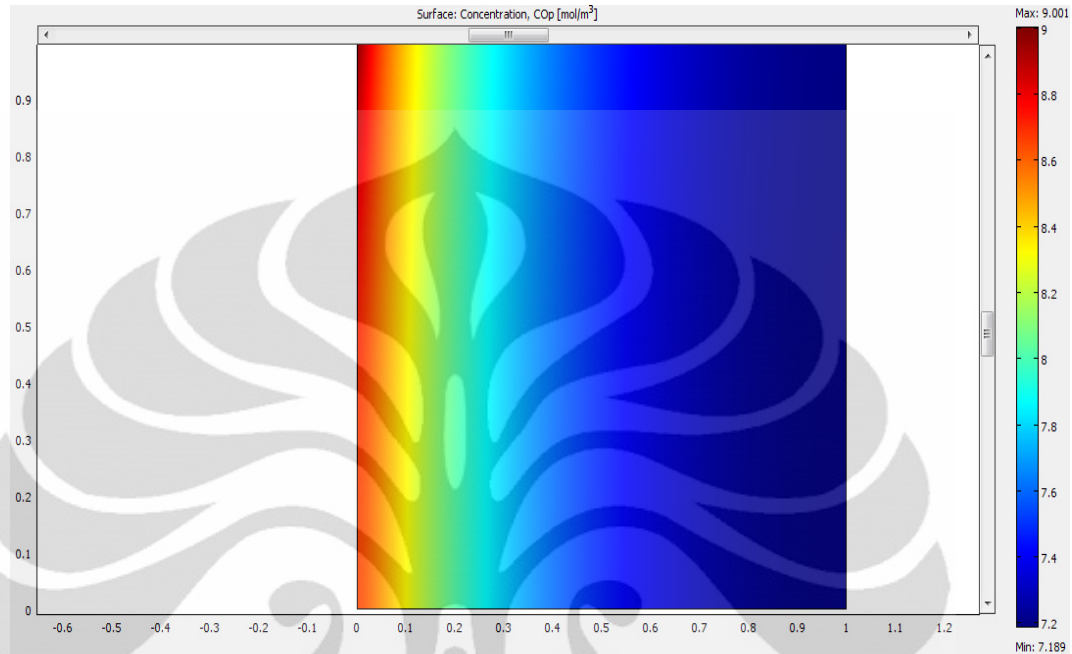


(a) Di Katalis

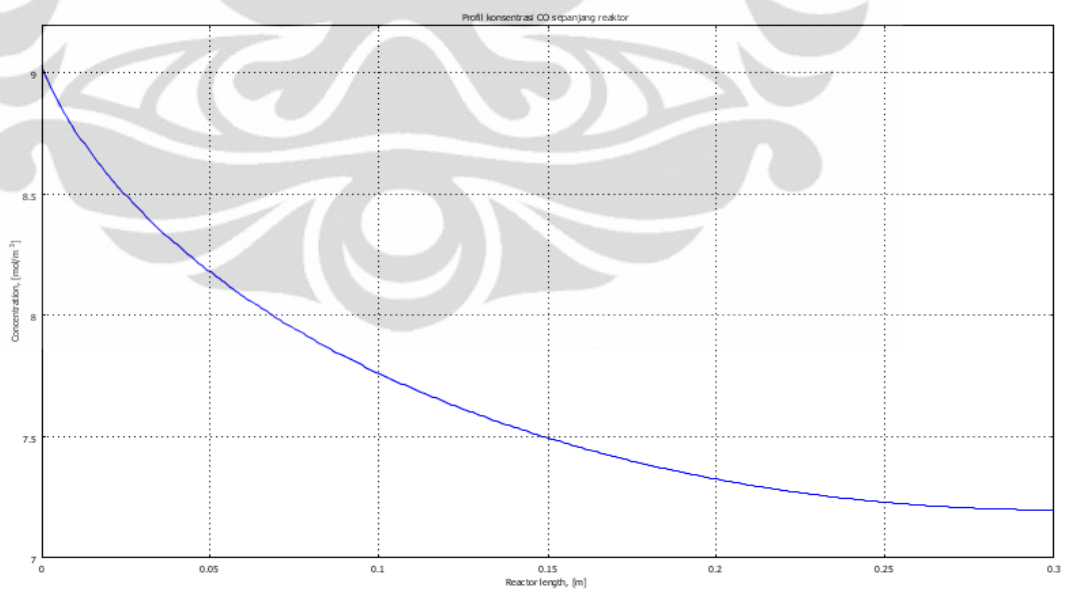


(b) Di Fluida Ruang

Gambar 5.1. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

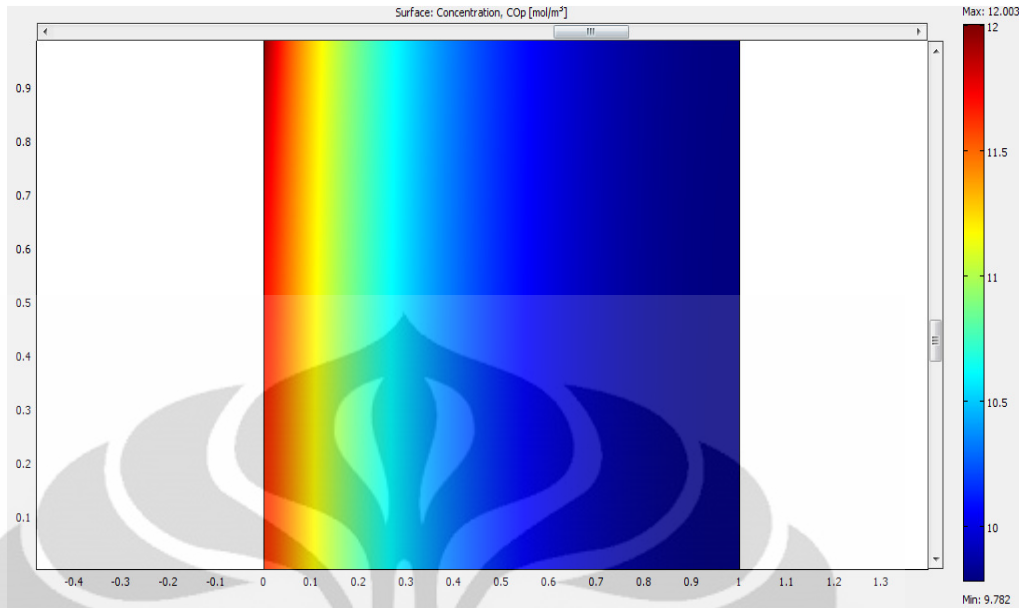


(a) Di Katalis

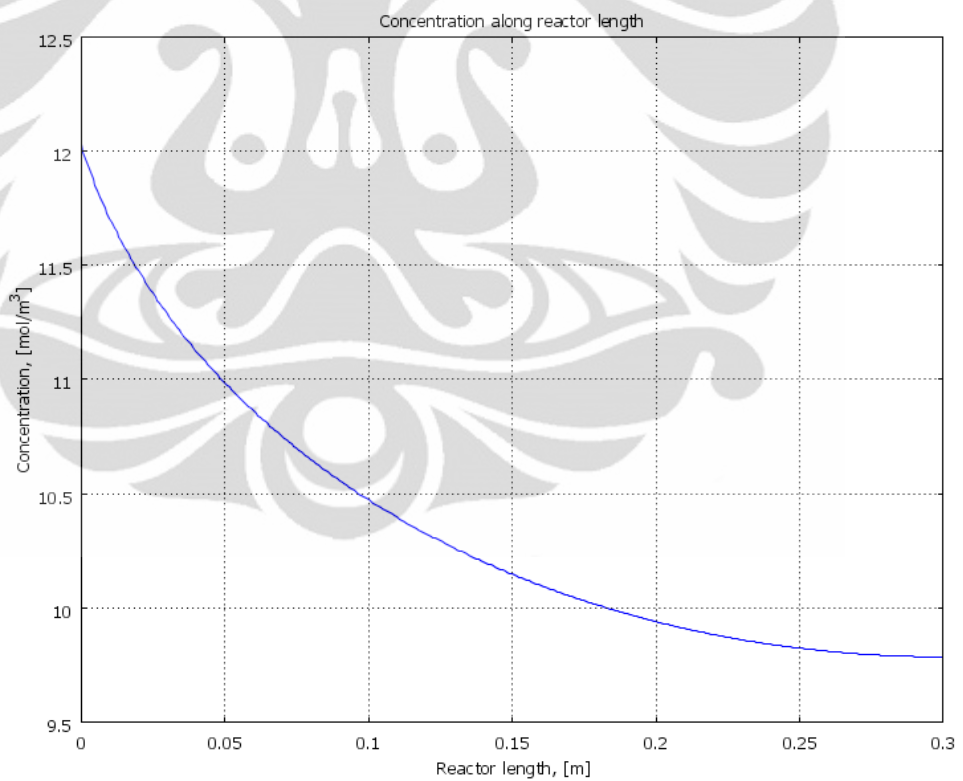


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.2. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

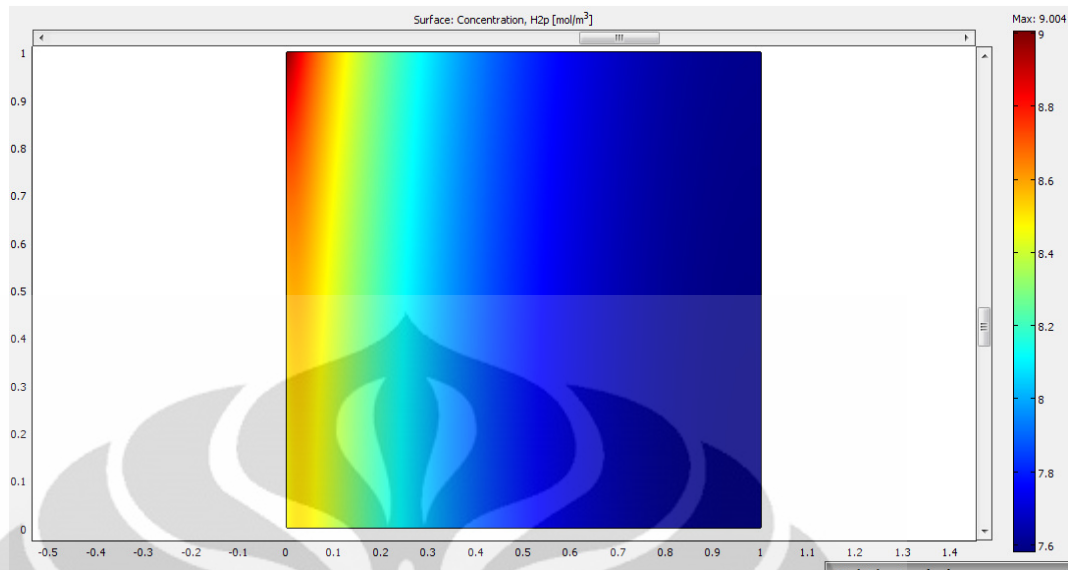


(a) Di Katalis

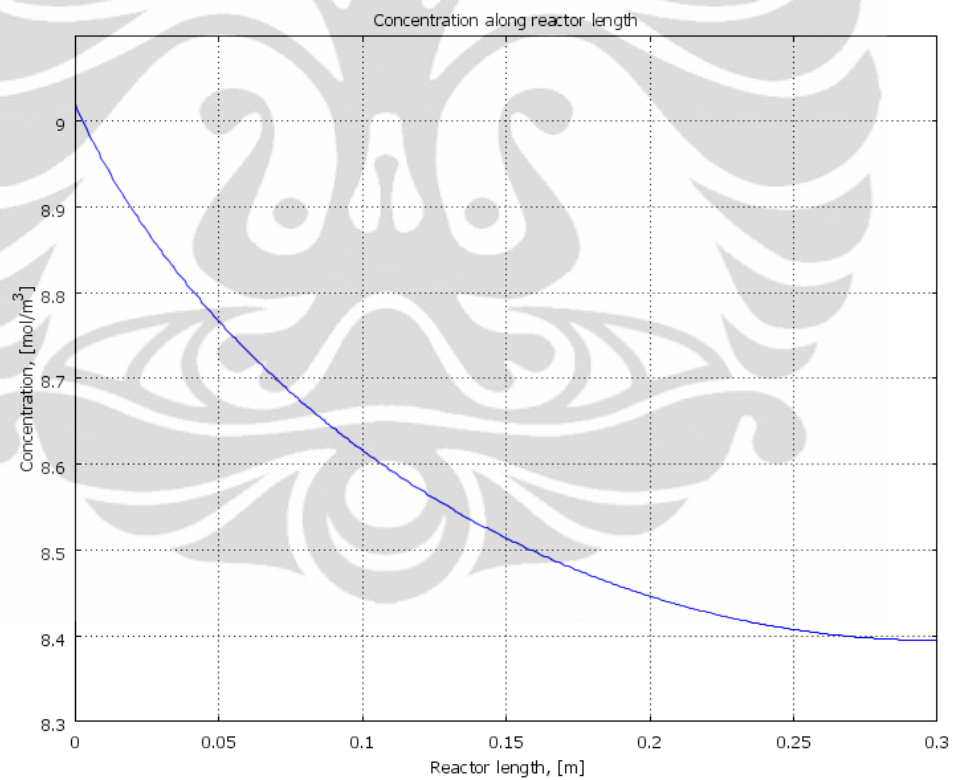


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.3. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

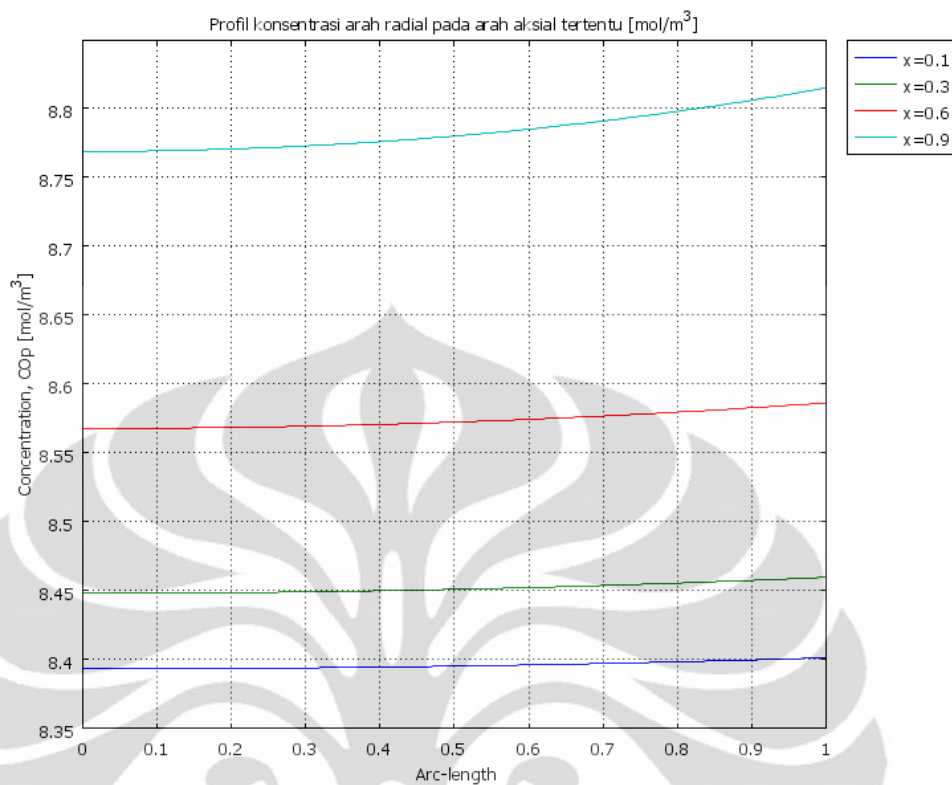


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.4. Profil Konsentrasi Karbon Monoksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida



Gambar 5.5. Profil konsentrasi CO arah radial pada arah aksial tertentu

Reaktan dalam sistem reaksi ini adalah karbon monoksida dan gas hidrogen. Reaktan CO umumnya terkonversi sekitar 10-30% sepanjang reaktor. Konversi ini tidak terlalu besar dan hampir sesuai dengan data eksperimen 24%. Hal ini karena sangat banyaknya uap air yang dihasilkan. Banyaknya uap air yang dihasilkan akan menghambat reaksi keseluruhan. Konversi gas karbon monoksida ini bisa mengikuti lima jalur yang ada yaitu karbon monoksida bereaksi menjadi alkana, alkena, asam karboksilat dan alkohol melalui reaksi hidrogenasi karbon monoksida atau terkonversi menjadi gas karbon dioksida dan hidrogen melalui reaksi *rwgs*.

Profil karbon monoksida secara data eksperimen terkonversi sebanyak 24% dan secara simulasi dengan beberapa variabel terikat yang di masukkan menghasilkan konversi berkisar antara 5-20%. Faktor-faktor non teknis yang terjadi selama eksperimen masih menjadi pengaruh yang kuat untuk menghasilkan data eksperimen yang berbeda dengan data validasi.

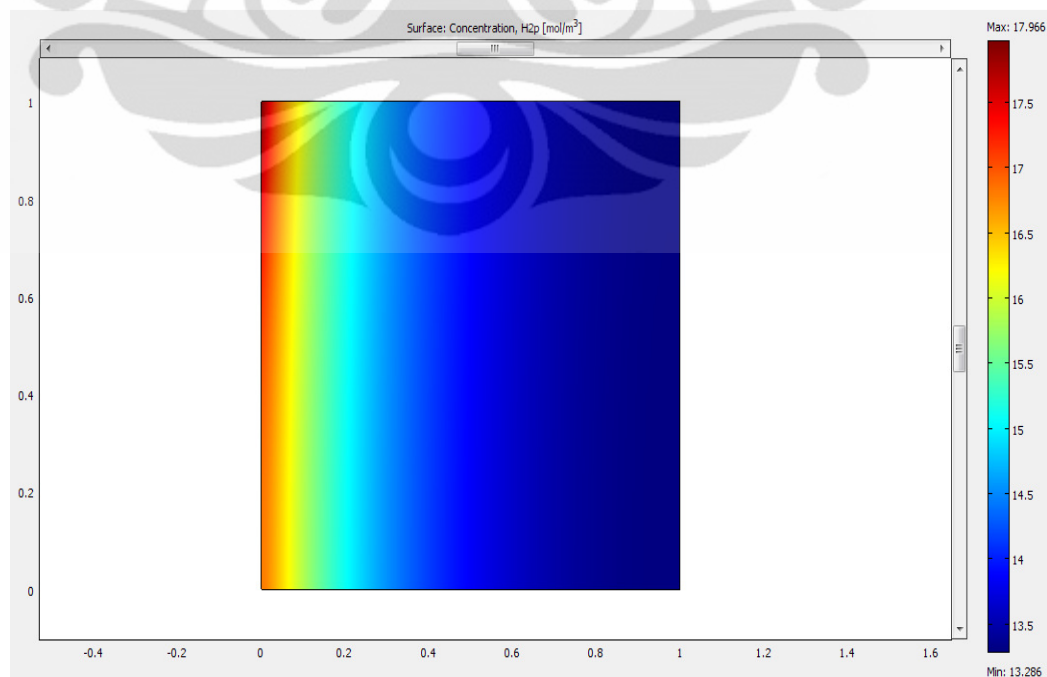
Profil karbon monoksida baik di reaktor maupun di katalis memiliki nilai yang menurun sepanjang reaktor. Hal ini disebabkan karena karbon monoksida

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 dispersi lapisan film yang menghambat aliran spesi ke dalam atau ke luar katalis. Grafik di atas menunjukkan bahwa variasi konsentrasi karbon monoksida di arah radial katalis sangat kecil. Hal ini menunjukkan bahwa hambatan dispersi lapisan film lebih besar daripada dispersi intrakatalis.

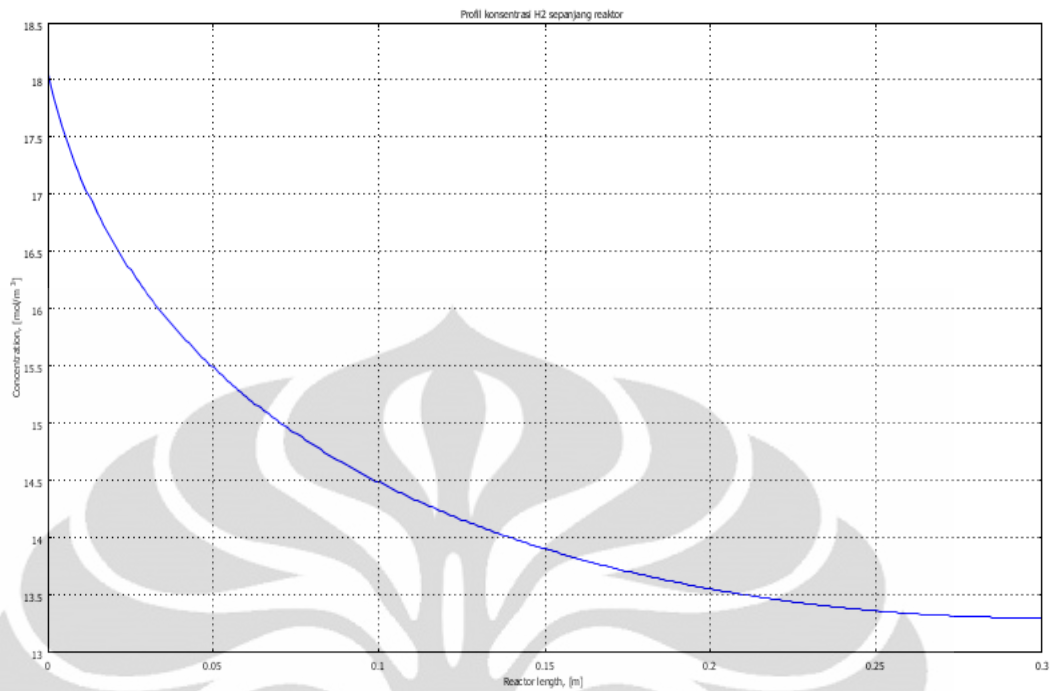
Dari gambar 5.5 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi karbon monoksida pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka semakin kecil perubahan profil konsentrasi karbon monoksida. Hal ini disebabkan karena konsentrasi karbon monoksida pada $x = 0.1$ masih tinggi dibandingkan dengan x yang lebih besar. Pada $r = 0$ tempat terjadinya reaksi di dalam katalis lebih tinggi dibandingkan dengan pada r yang lebih besar sehingga perubahan konsentrasi menjadi lebih signifikan. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal mengakibatkan perubahan konsentrasi semakin besar pula.

5.2.2 Profil Spesi Hidrogen

Berikut ini adalah profil konsentrasi hidrogen di katalis dan sepanjang reaktor :

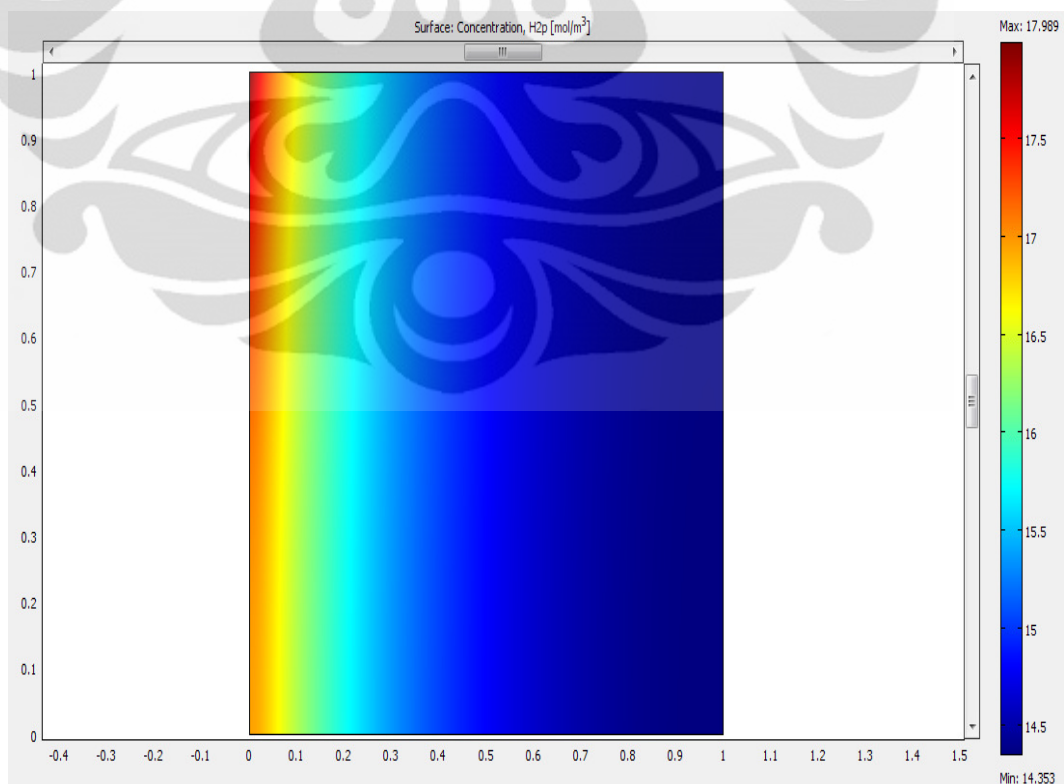


(a) Di Katalis

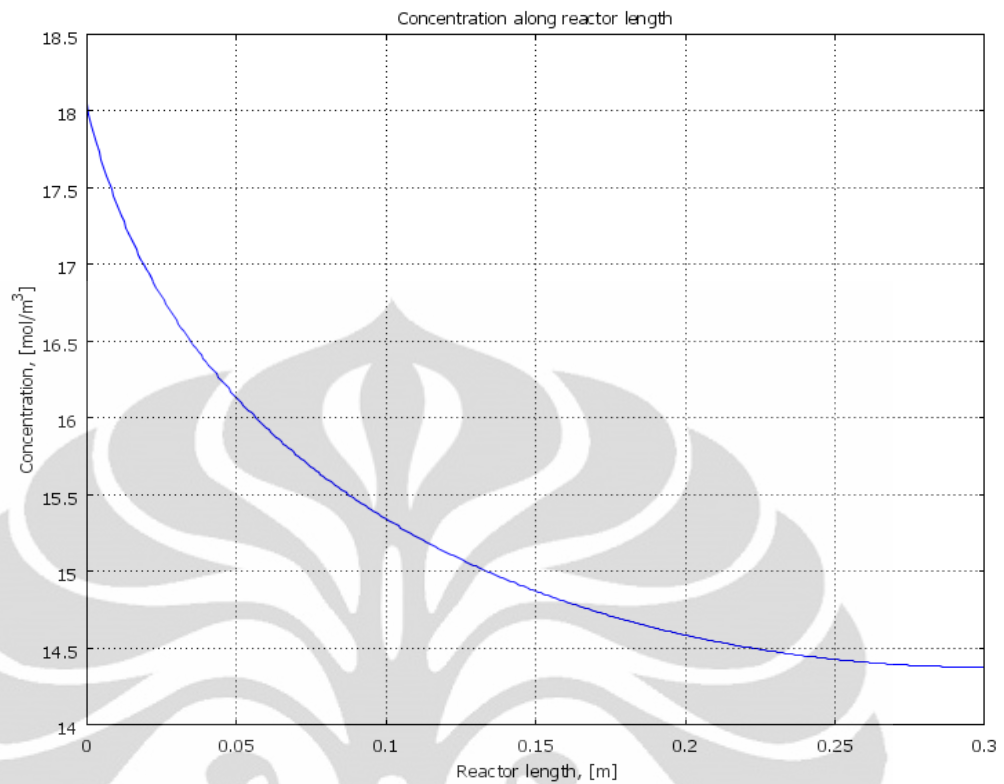


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.6. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

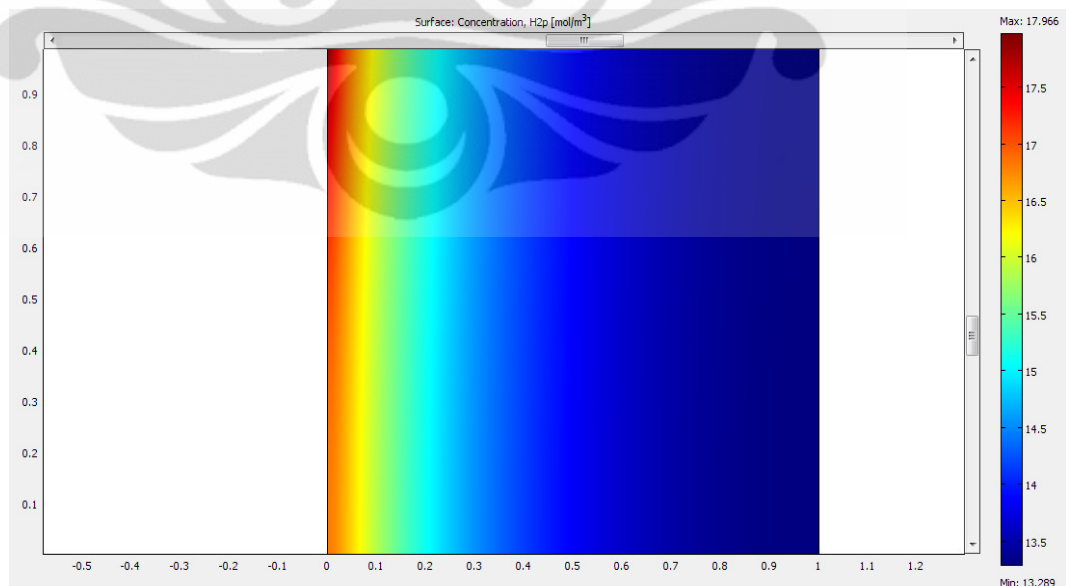


(a) Di Katalis

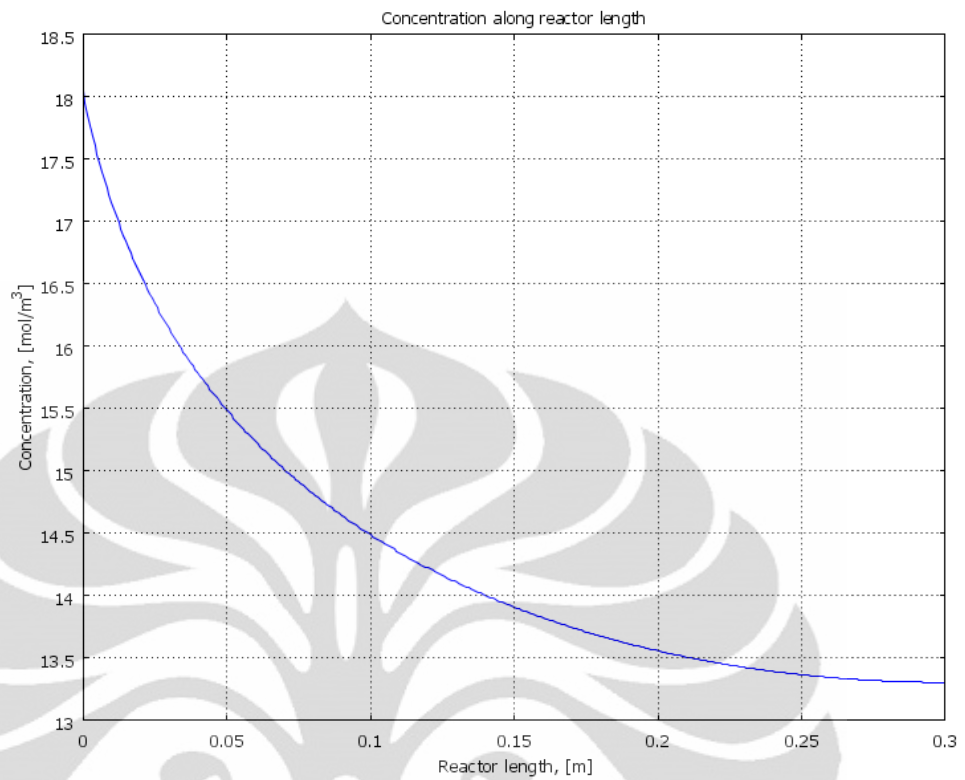


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.7. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

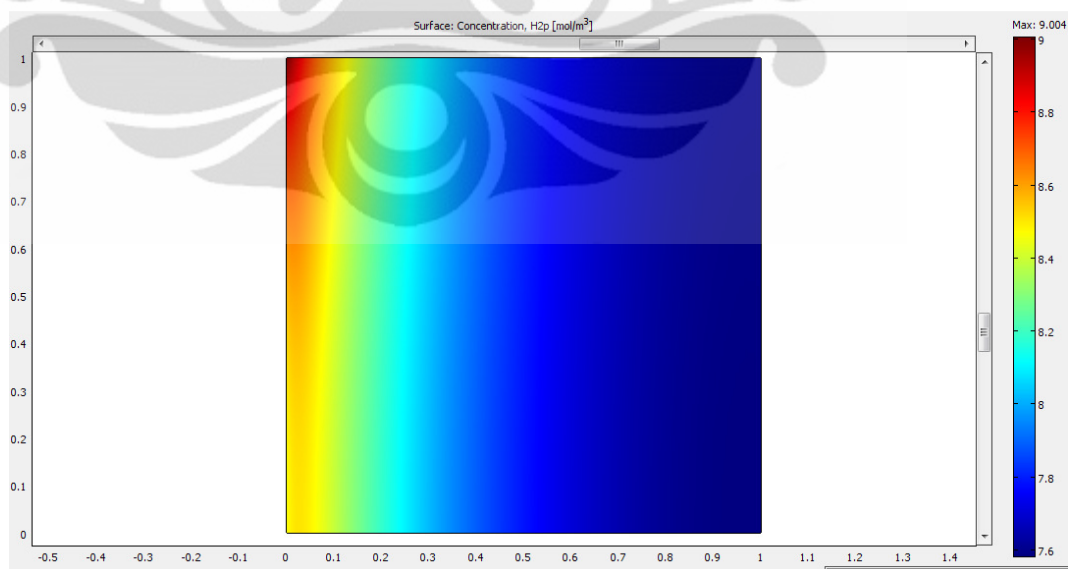


(a) Di Katalis

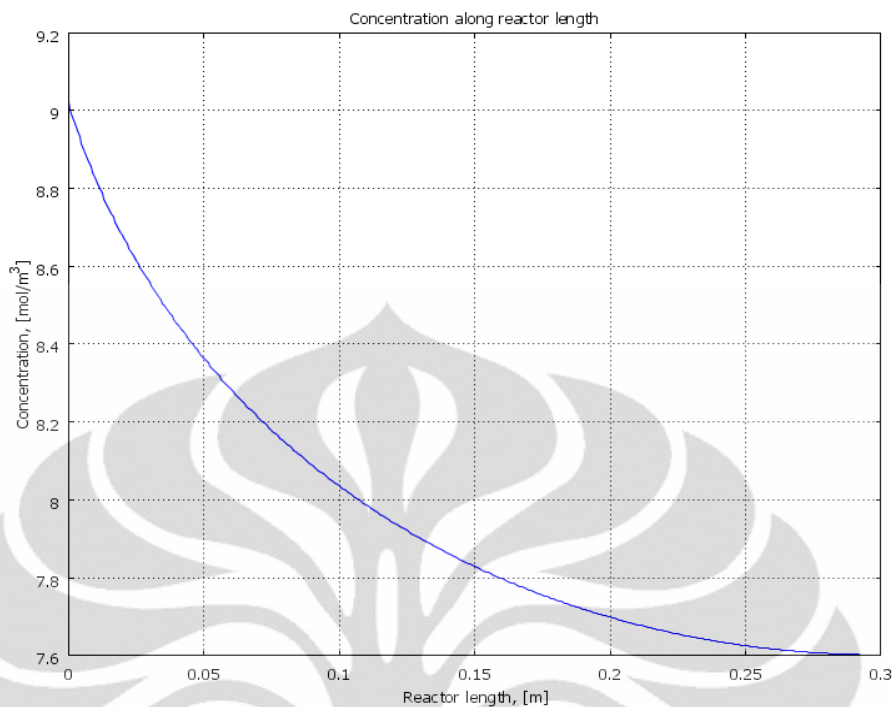


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.8. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

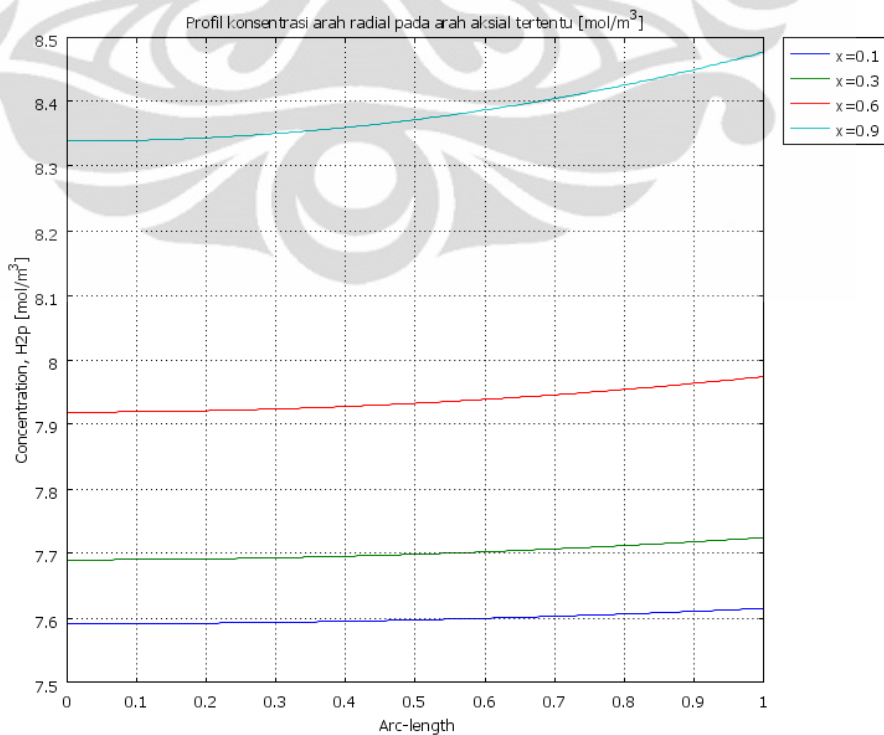


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.9. Profil Konsentrasi Hidrogen dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4.10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



Gambar 5.10. Profil konsentrasi H_2 arah radial pada arah aksial tertentu

Profil gas hidrogen baik di reaktor maupun di katalis mirip seperti karbon monoksida 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.

Profil hidrogen secara data eksperimen terkonversi sebanyak 39.4 % dan secara simulasi dengan beberapa variabel terikat yang di masukkan menghasilkan konversi berkisar antara 5-20 %. Faktor-faktor non teknis yang terjadi selama eksperimen masih menjadi pengaruh yang kuat untuk menghasilkan data eksperimen yang berbeda dengan data validasi.

Sama seperti CO yang bereaksi pada 5 tahap reaksi, H_2 memiliki reaksi yang lebih sedikit yaitu 4 reaksi, sama seperti CO namun tidak adanya reaksi "*water gas shift*". Sehingga H_2 terkonversi lebih banyak.

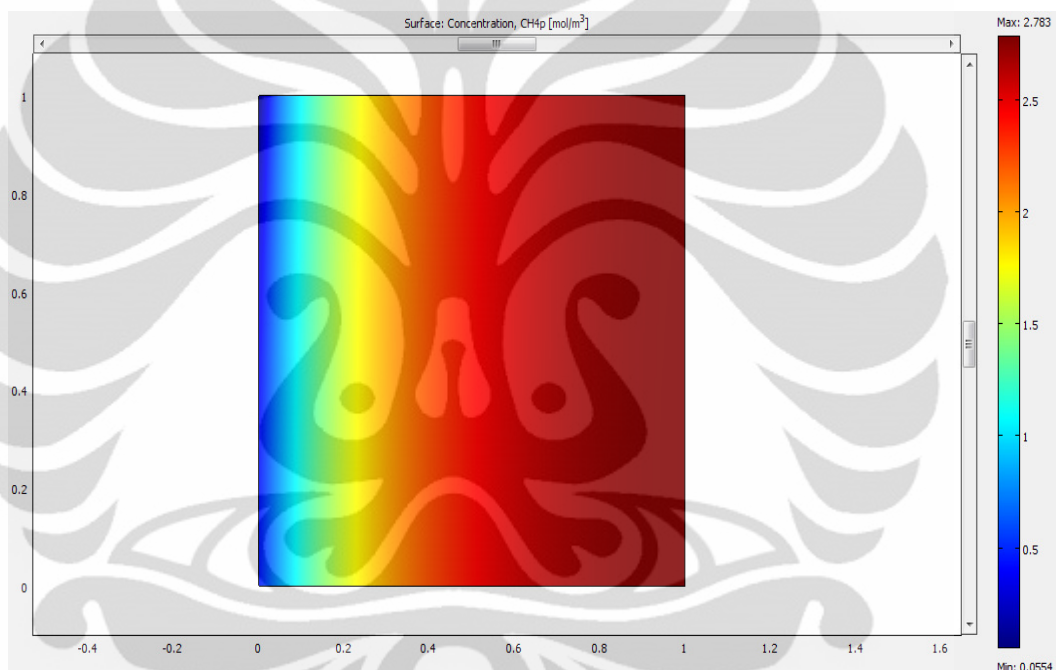
Profil hidrogen baik di reaktor maupun di katalis memiliki nilai yang menurun sepanjang reaktor. Hal ini disebabkan karena hidrogen terkonversi dengan berbagai reaksi. Dari grafik di atas juga terlihat bahwa konsentrasi di katalis lebih kecil daripada di reaktor. Hal ini terjadi karena terjadi hambatan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

Dari gambar 5.10 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi hidrogen pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka semakin kecil perubahan profil konsentrasi hidrogen. Hal ini disebabkan karena konsentrasi hidrogen pada $x = 0.1$ masih tinggi dibandingkan dengan x yang lebih besar. Pada $r = 0$ tempat terjadinya reaksi di dalam katalis lebih tinggi

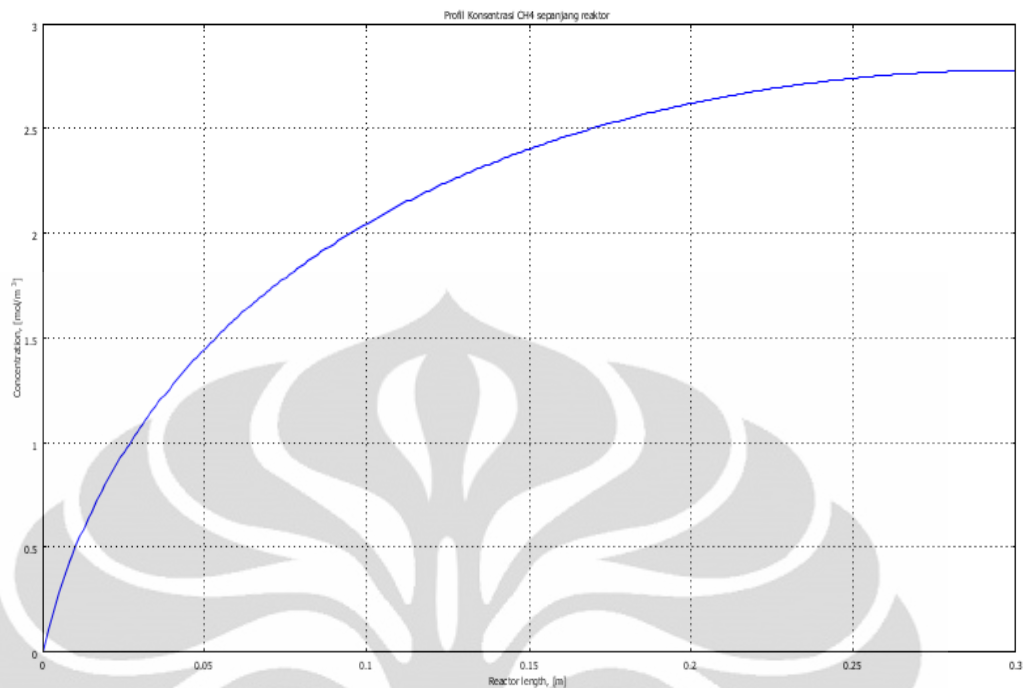
dibandingkan dengan pada r yang lebih besar sehingga perubahan konsentrasi menjadi lebih signifikan. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal mengakibatkan perubahan konsentrasi semakin besar pula.

5.2.3 Profil Spesi Metana (CH_4)

Berikut ini adalah profil konsentrasi metana di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :

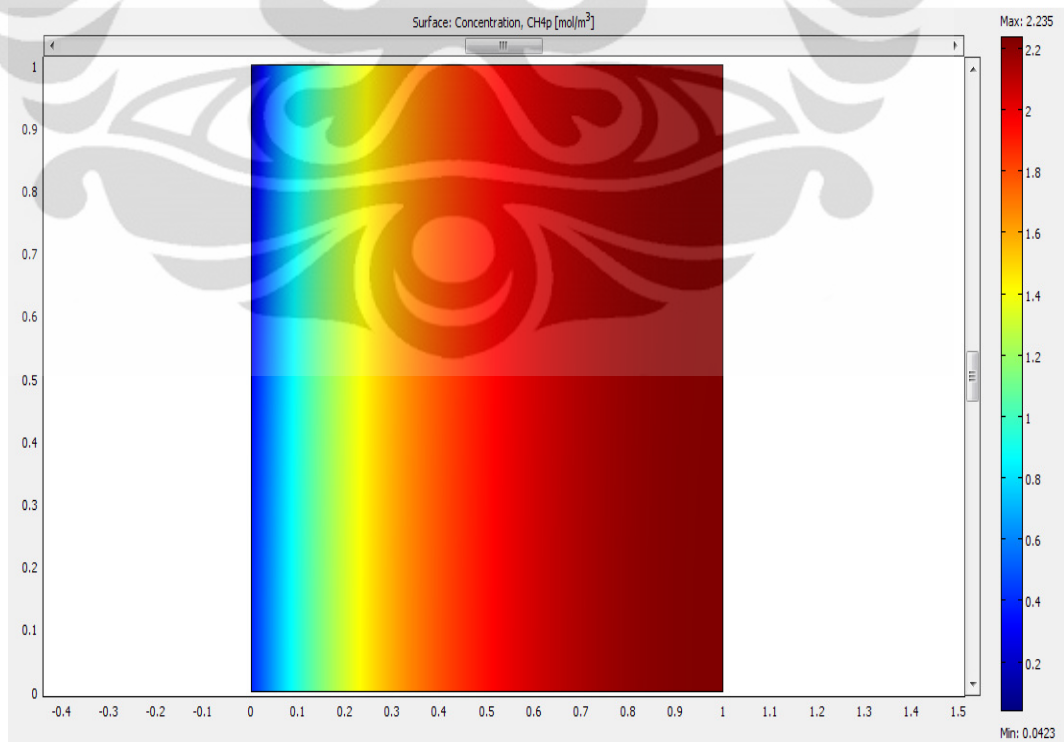


(a) Di Katalis

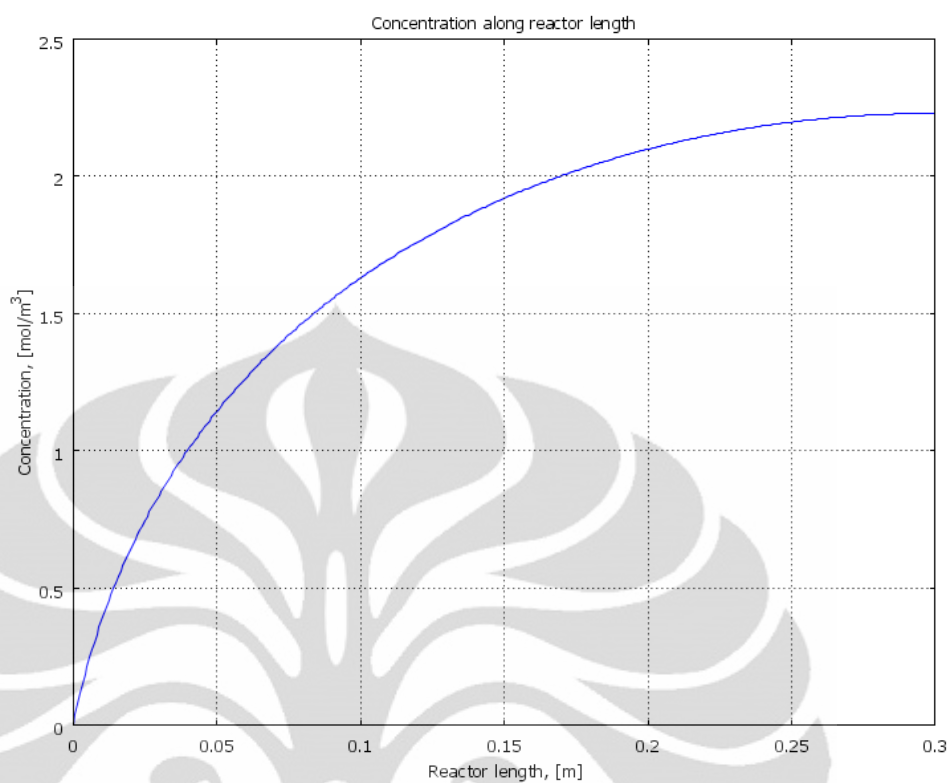


(b) Di Reaktor

Gambar 5.11. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

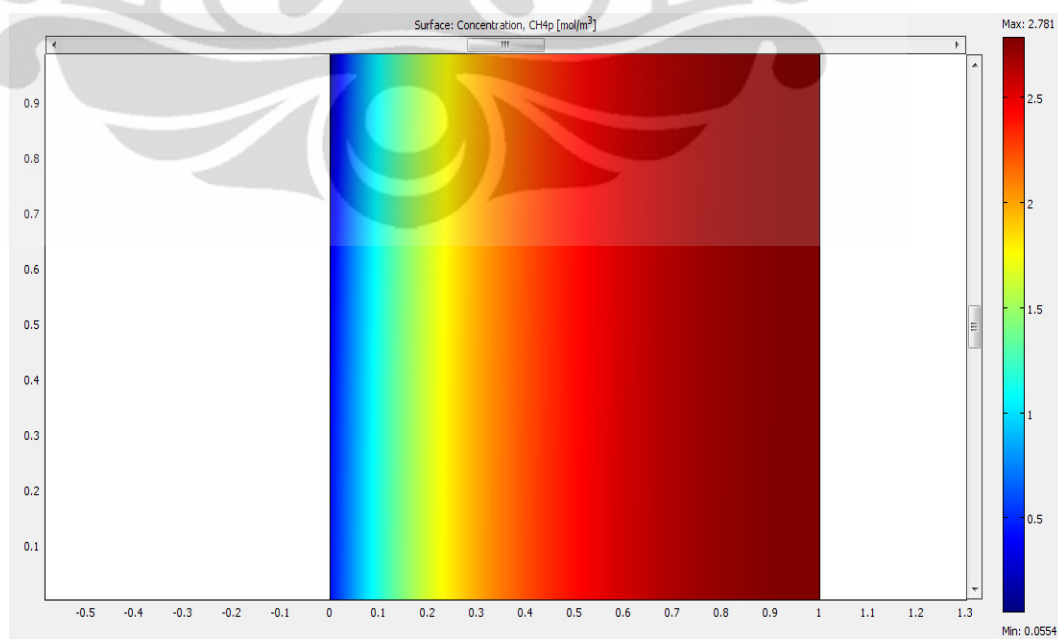


(a) Di Katalis

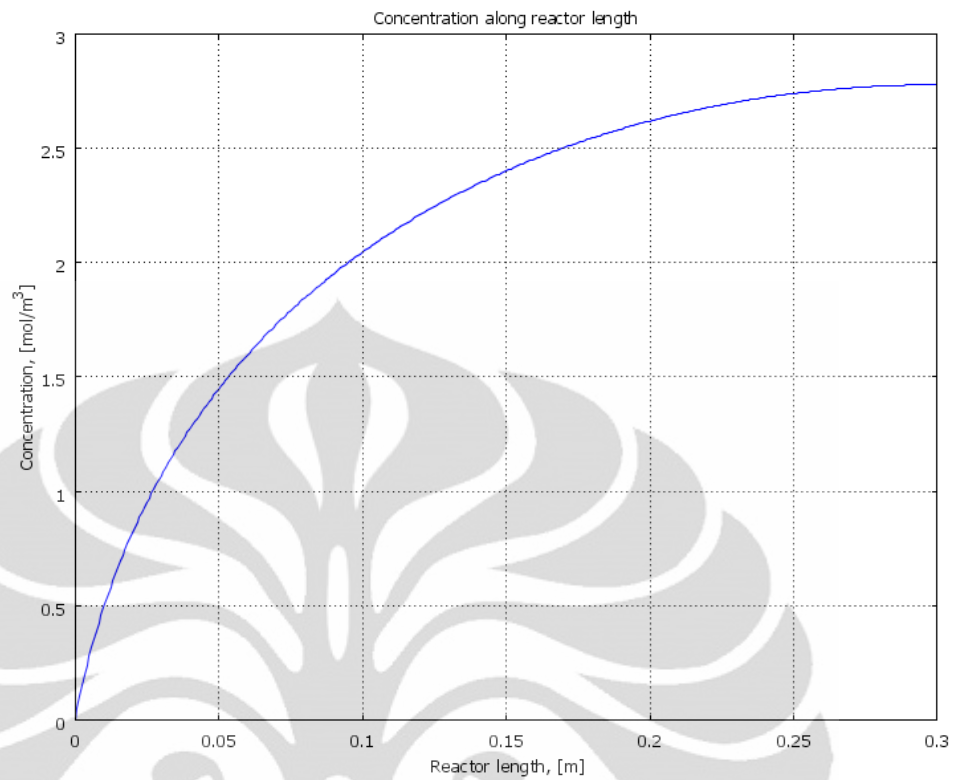


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.12. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

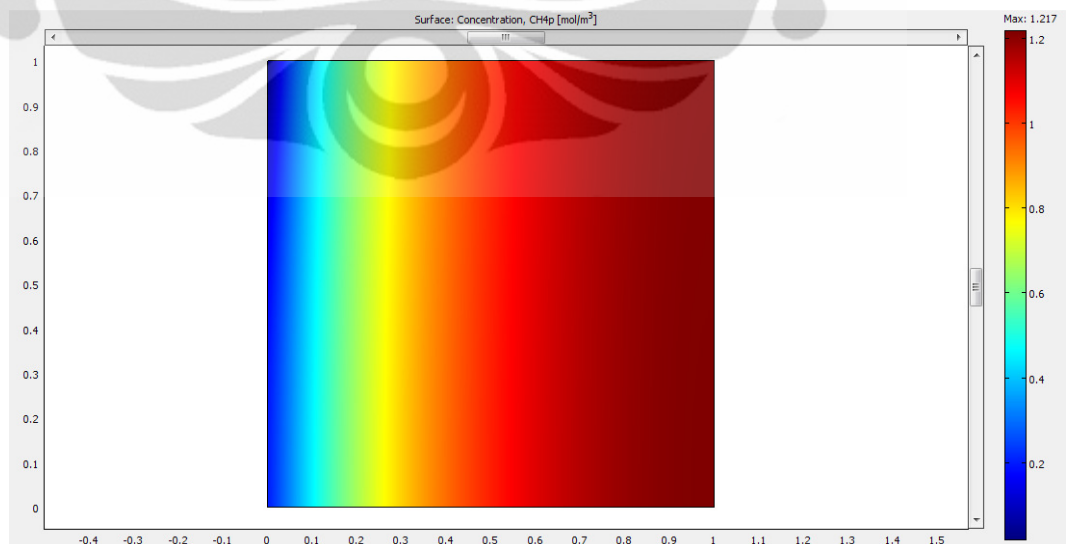


(a) Di Katalis

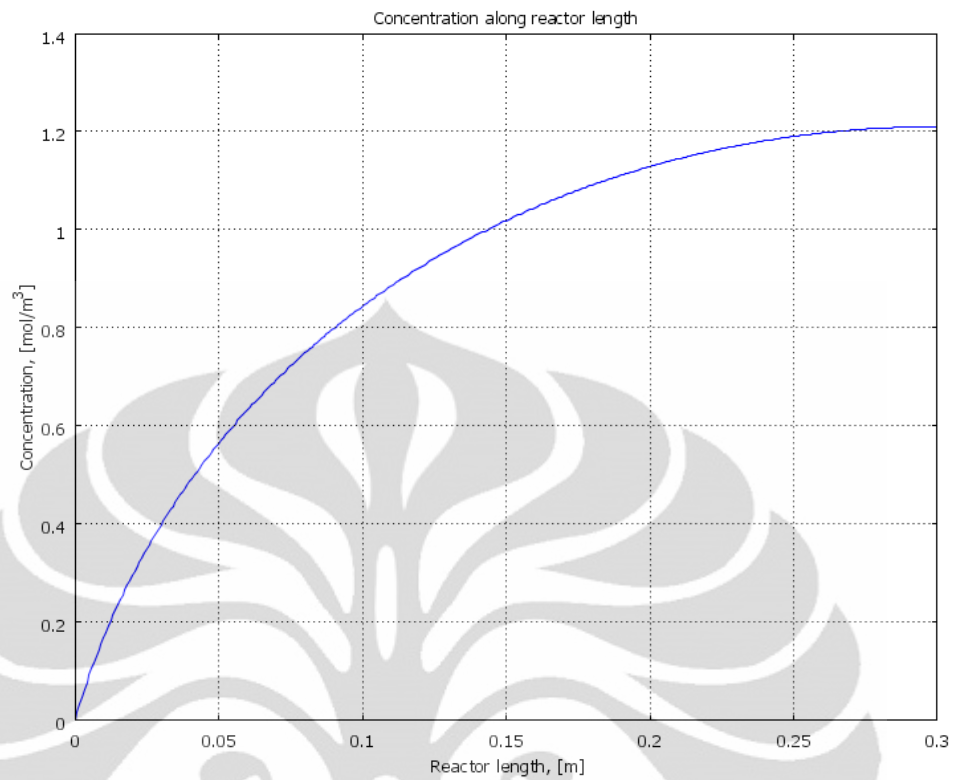


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.13. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1,5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

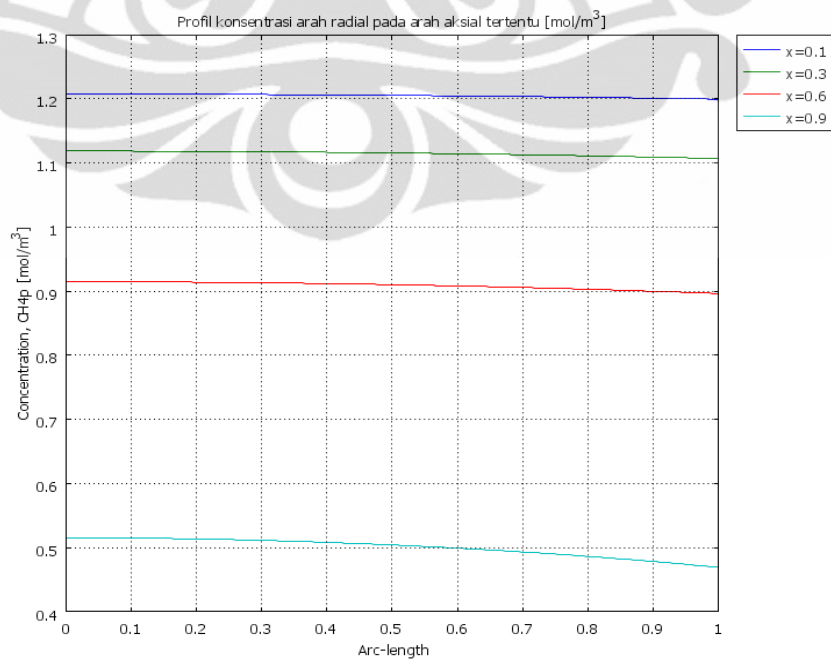


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.14. Profil Konsentrasi metana dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



Gambar 5.15. Profil konsentrasi CH_4 arah radial pada arah aksial tertentu

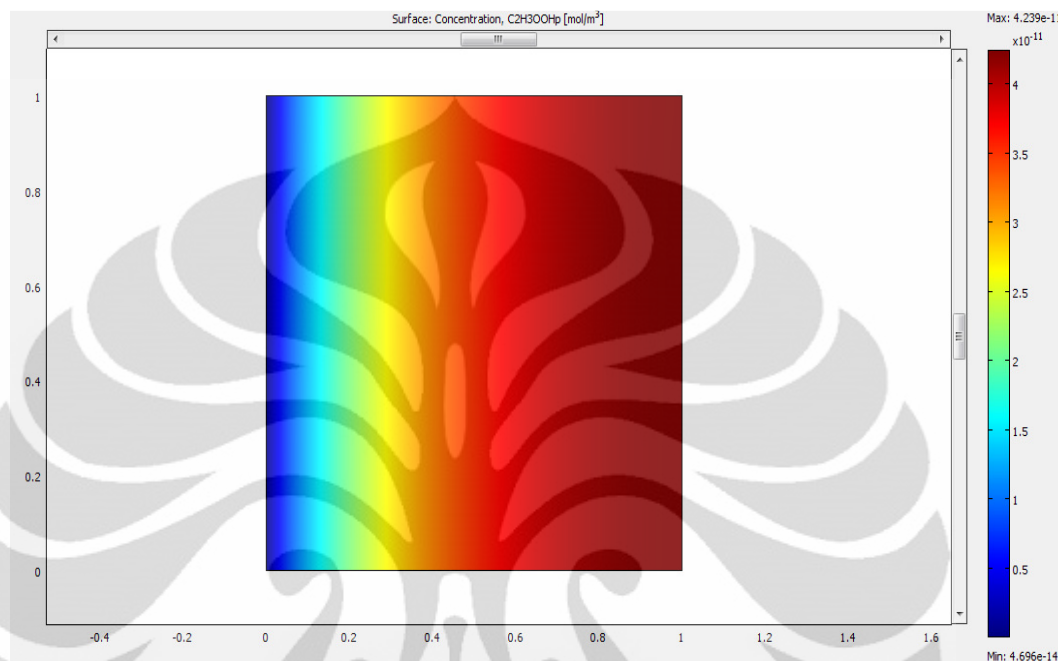
Metana merupakan produk terbanyak yang dihasilkan. Produksi metana tidak sebanyak uap air karena metana hanya dihasilkan oleh satu reaksi. Produksi metana juga lebih banyak dibandingkan etanol karena etanol yang terbentuk akan terdehidrasi menjadi metana. Reaksi pembentukan metana secara langsung merupakan kelebihan sintesis metana secara satu tahap. Hal ini mengakibatkan metana yang diproduksi langsung terkonversi sehingga tidak menghambat reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi etanol secara termodinamika.

Gambar di atas menunjukkan tipikal profil metana di dalam pori-pori katalis. Gambar di atas menunjukkan bahwa konsentrasi metana di katalis lebih besar daripada di reaktor. Hal ini diakibatkan karena produk terhambat keluar dari katalis karena terhambat oleh difusi lapisan film. Profil metana dari gambar di atas menunjukkan tren yang menaik 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 akibat dominannya reaksi hidrogenasi karbon dioksida menjadi etanol. 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.

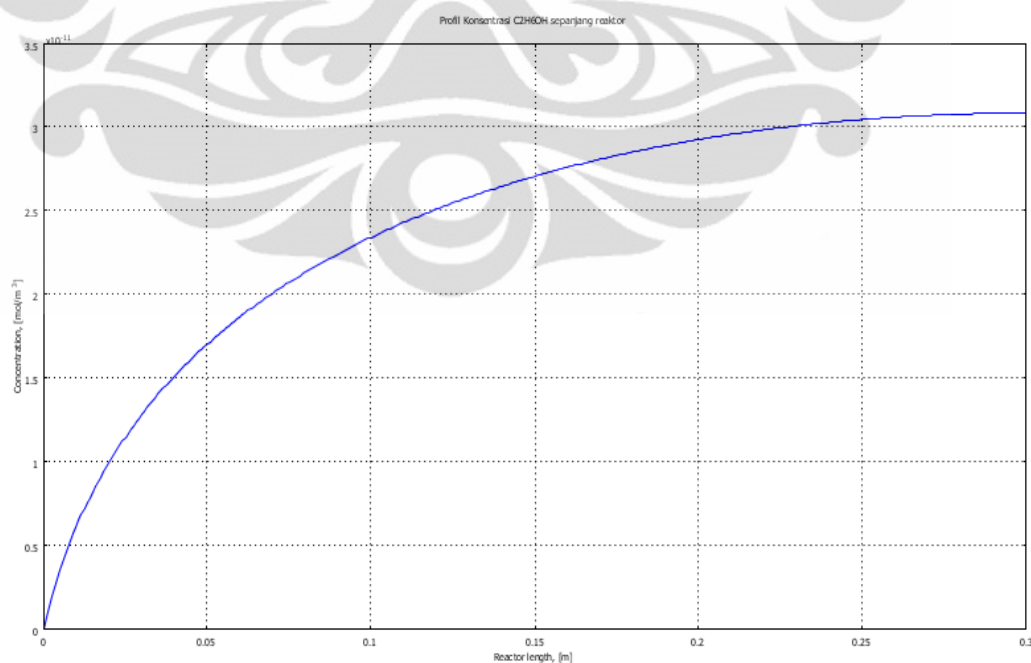
Dari gambar 5.15 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi hidrogen pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka semakin besar perubahan profil konsentrasi etanol. Hal ini disebabkan karena konsentrasi etanol pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Pada $r = 0$ tempat terjadinya reaksi di dalam katalis lebih tinggi dibandingkan dengan pada r yang lebih besar sehingga perubahan konsentrasi menjadi lebih signifikan. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

5.2.4 Profil Spesi etanol

Berikut ini adalah profil konsentrasi etanol di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperiment menggunakan program Comsol :

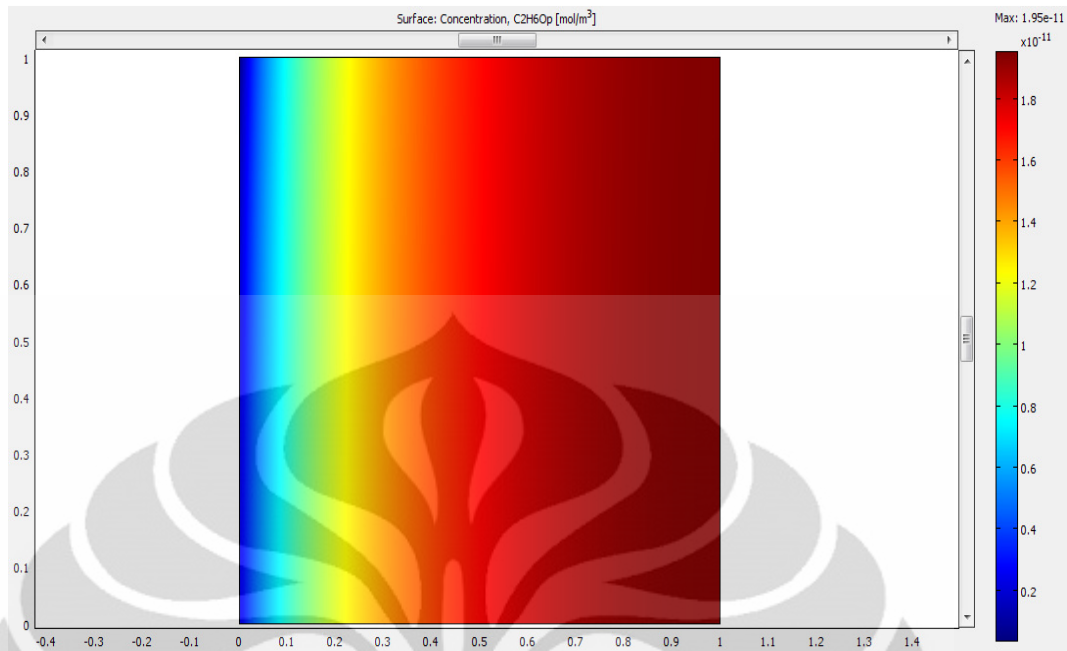


(a) Di Katalis

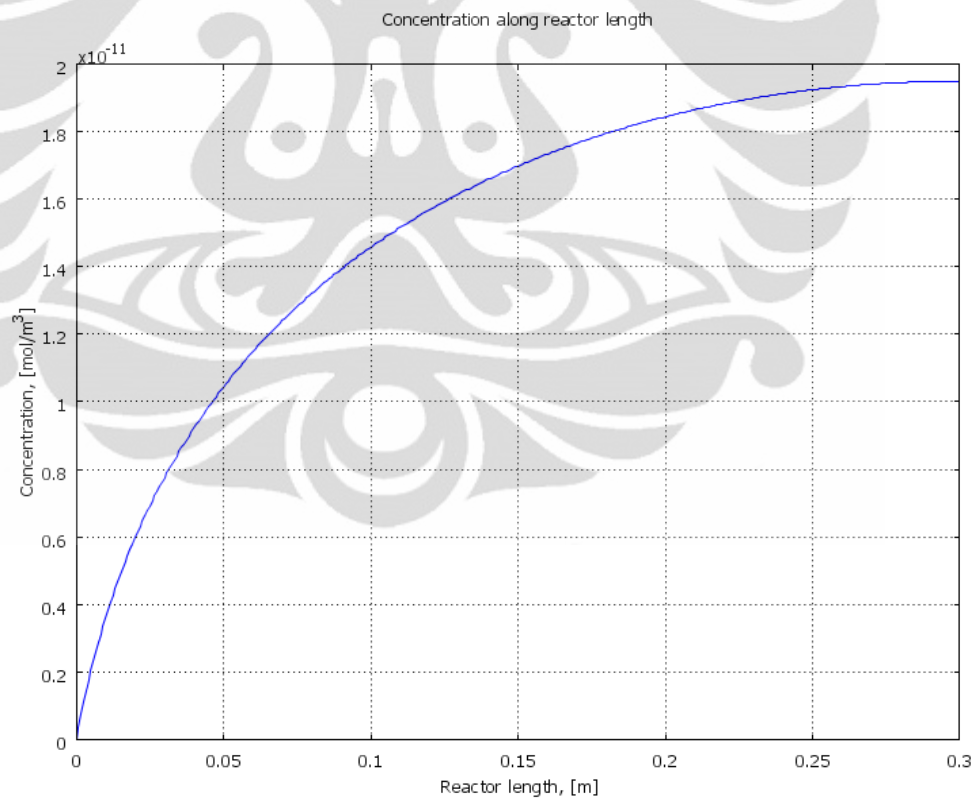


(b) Di Fluida Ruang

Gambar 5.16. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruang/sepanjang reaktor

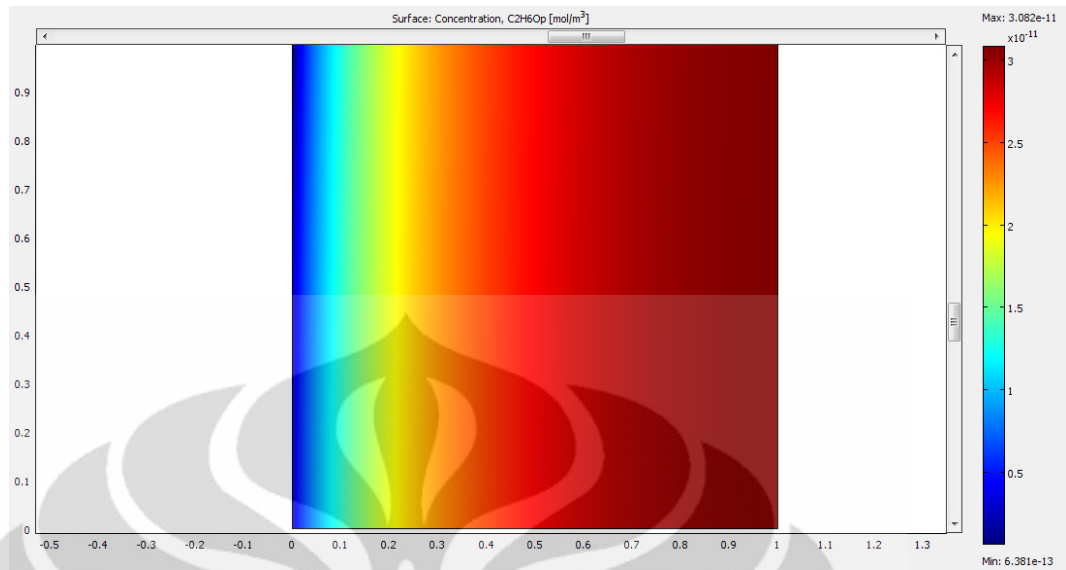


(a) Di Katalis

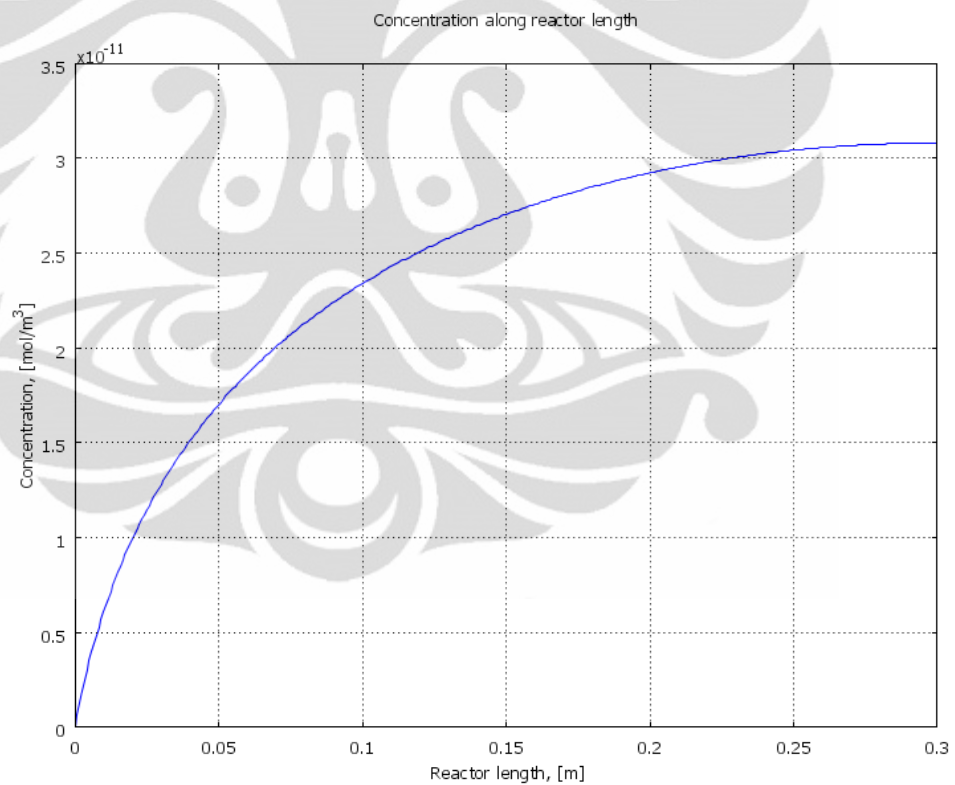


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.17. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

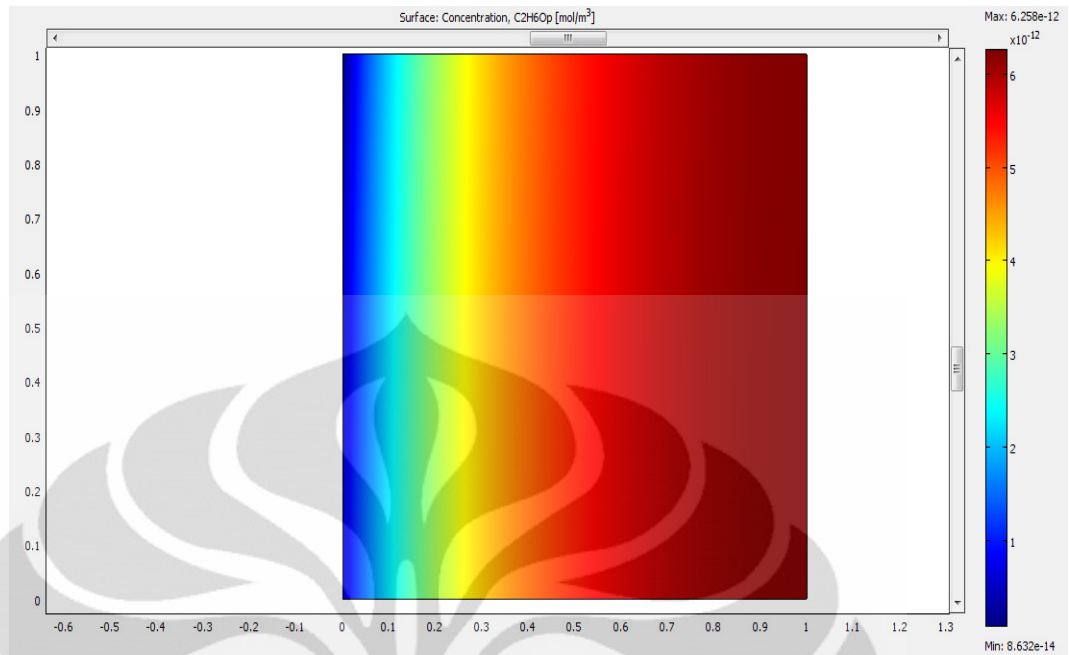


(a) Di Katalis

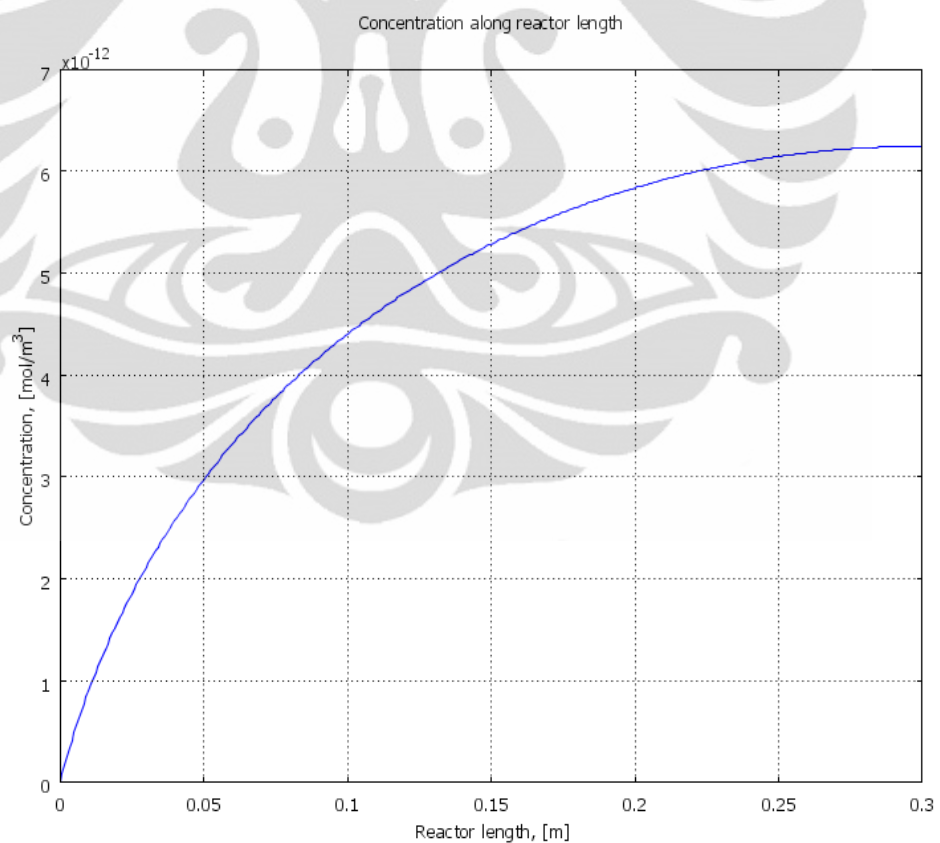


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.18. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1,5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

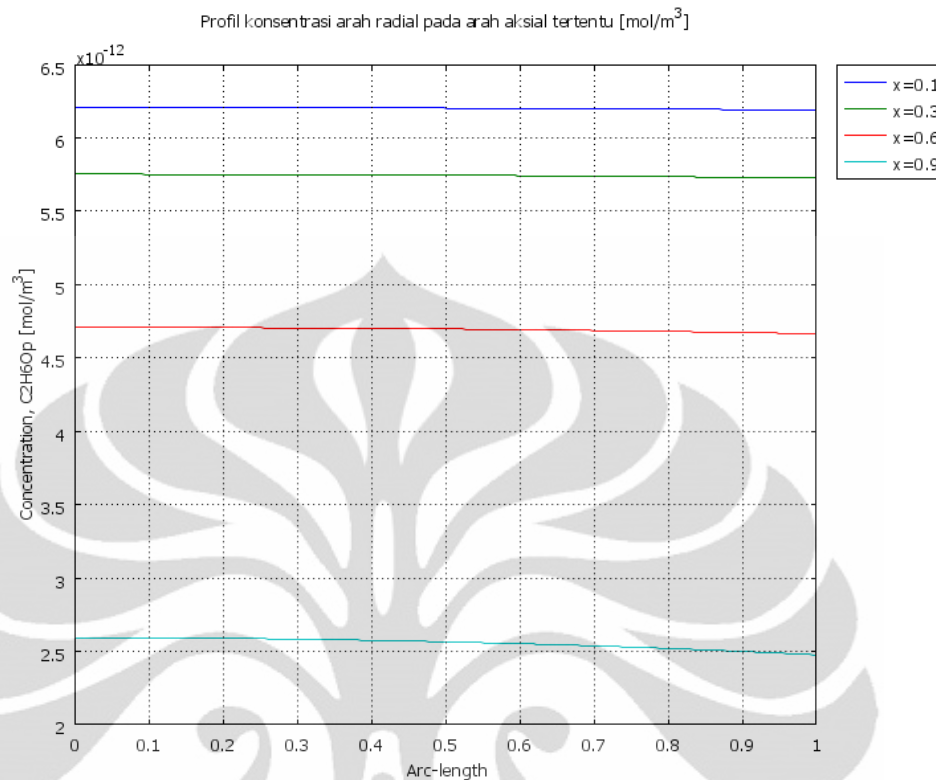


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.19. Profil Konsentrasi etanol dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



Gambar 5.20. Profil konsentrasi etanol arah radial pada arah aksial tertentu

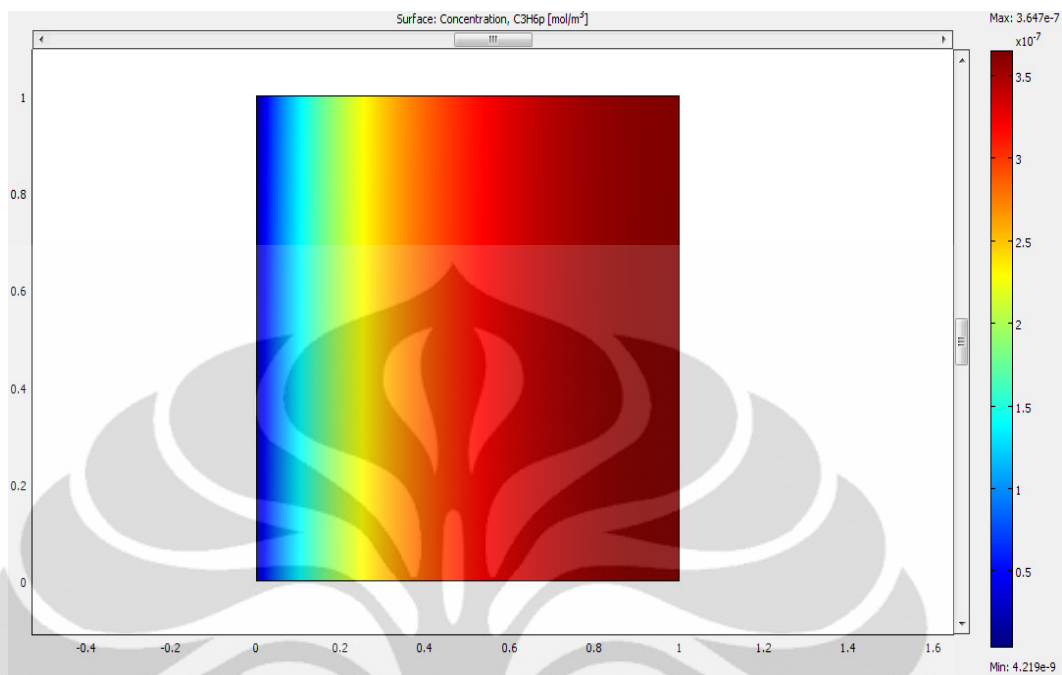
Profil etanol di fluida ruah memiliki tren menaik di awal reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi hidrogenasi karbon monoksida menjadi etanol yang sangat kecil karena konsentrasi karbon monoksida yang besar telah bereaksi menghasilkan metana serta konsentrasi etanol yang kecil.

Dari gambar 5.20 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi etanol pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka terjadi sedikit perubahan profil konsentrasi etanol jika dibandingkan dengan di awal. Hal ini disebabkan karena konsentrasi etanol pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

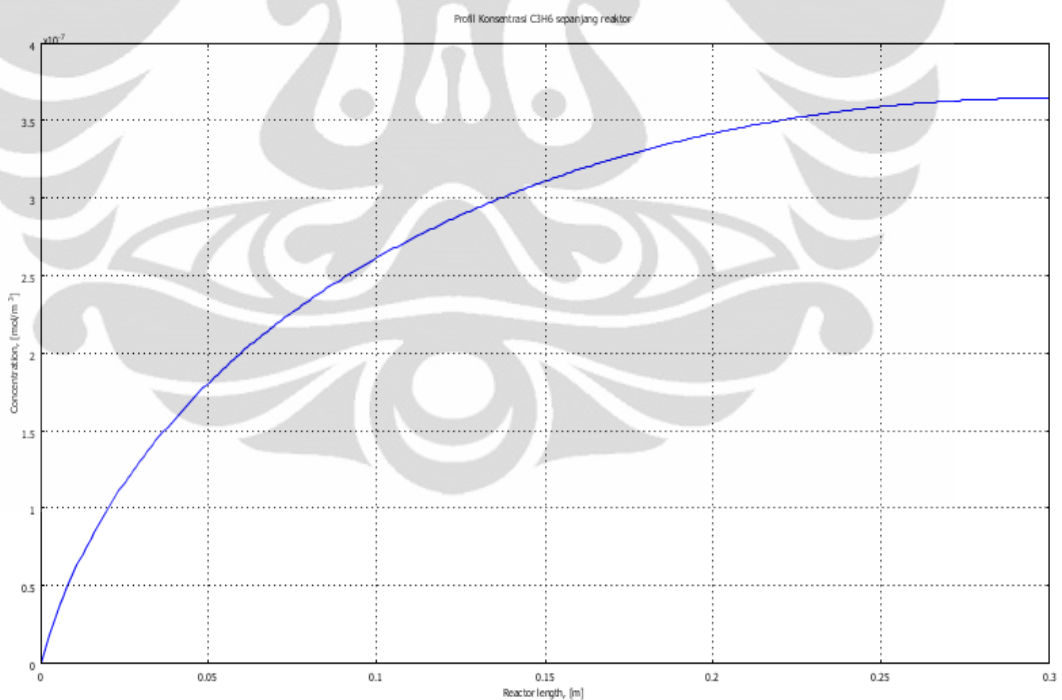
5.2.5 Profil Spesi Propena

Berikut ini adalah profil konsentrasi propena di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program

Consol :

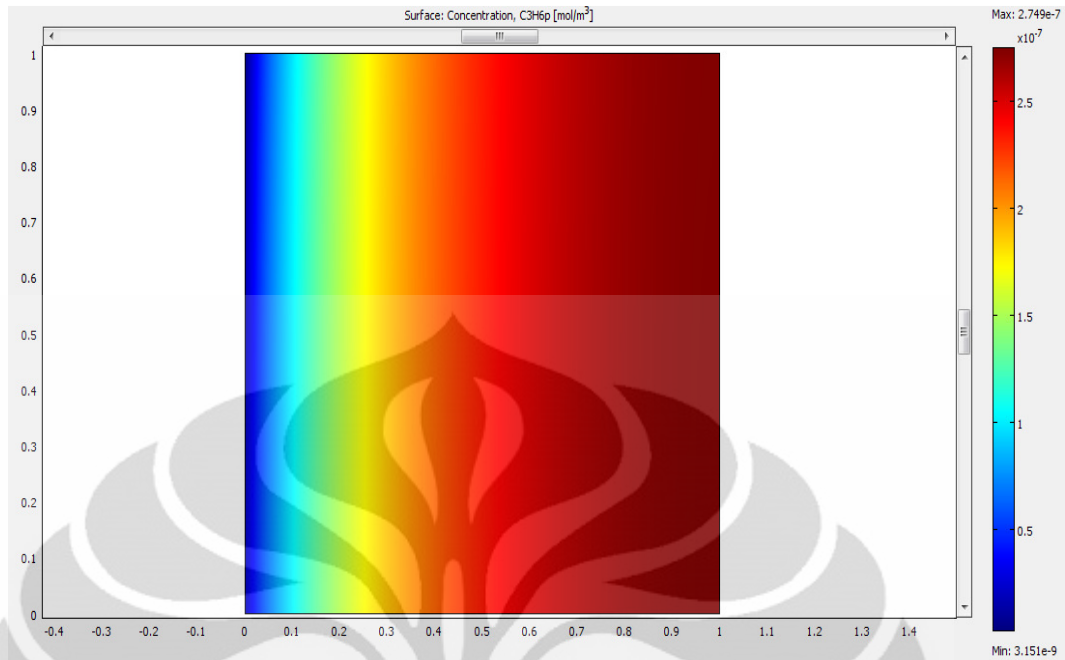


(a) Di Katalis

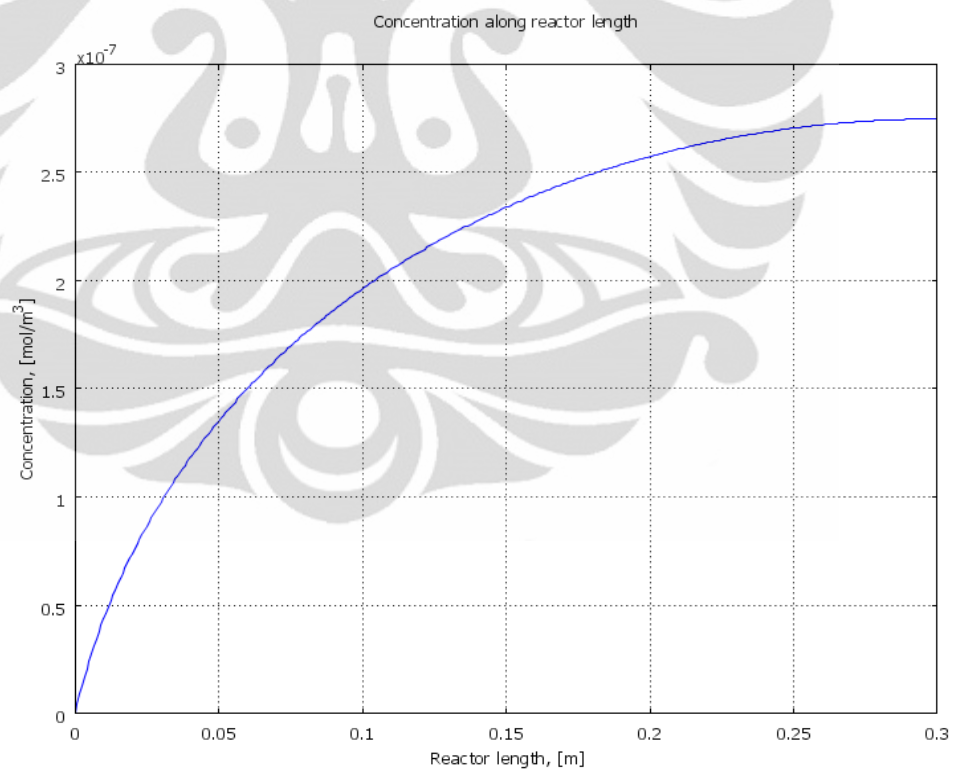


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.21. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

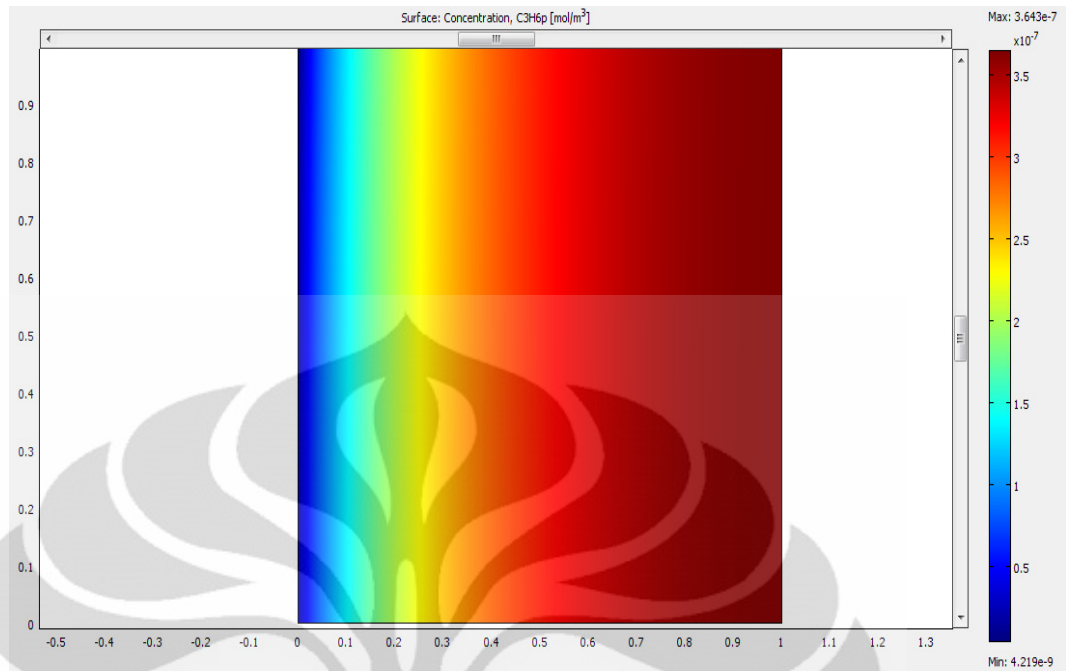


(a) Di Katalis

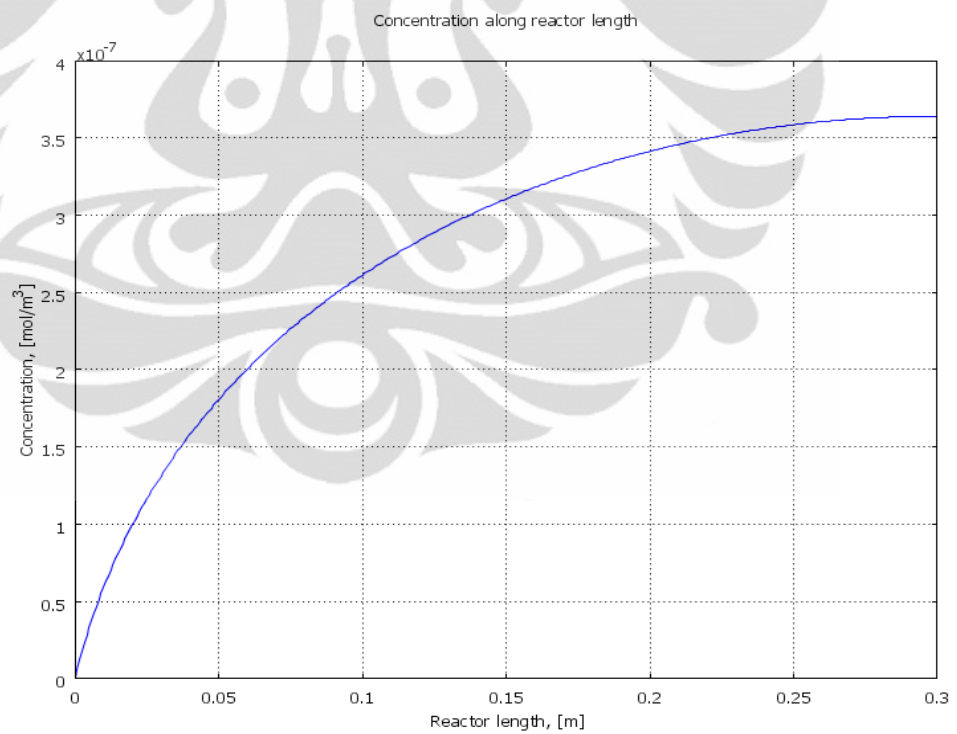


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.22. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

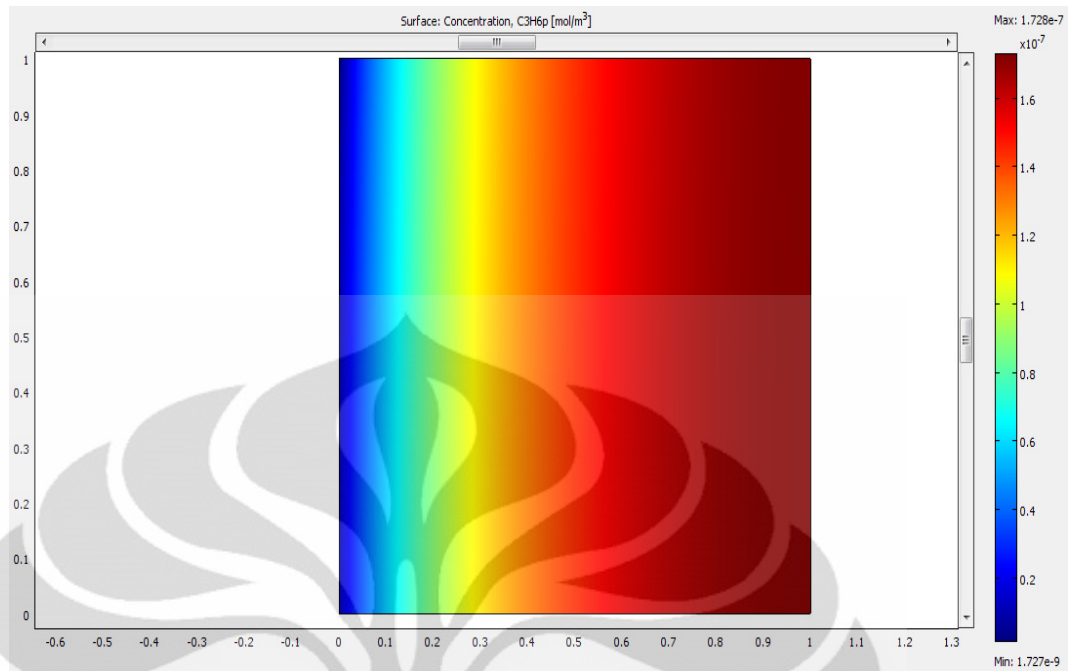


(a) Di Katalis



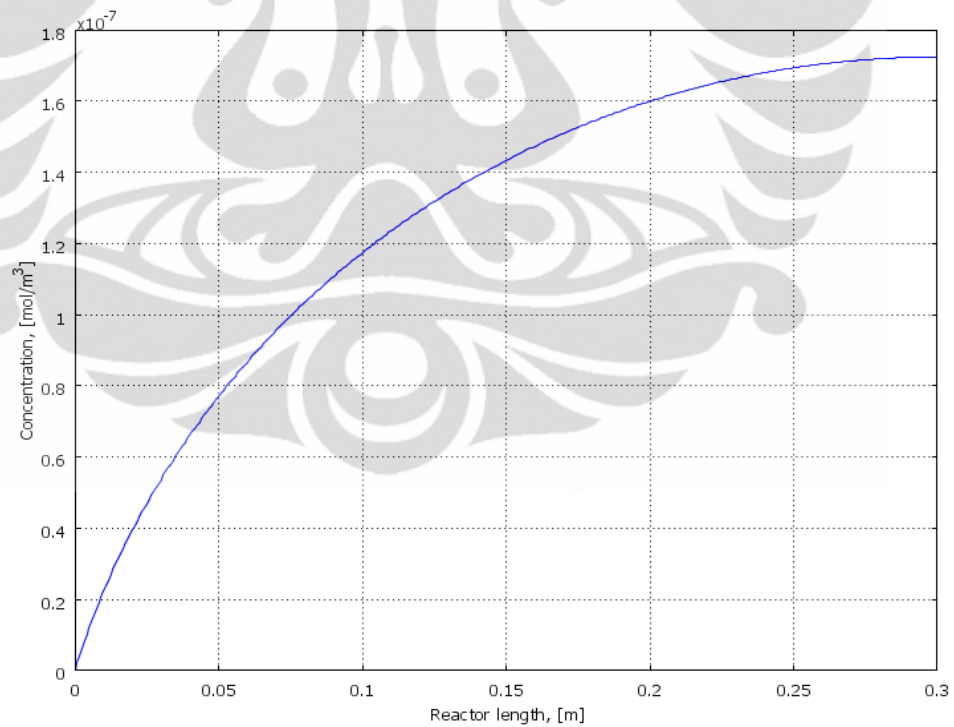
(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.23. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



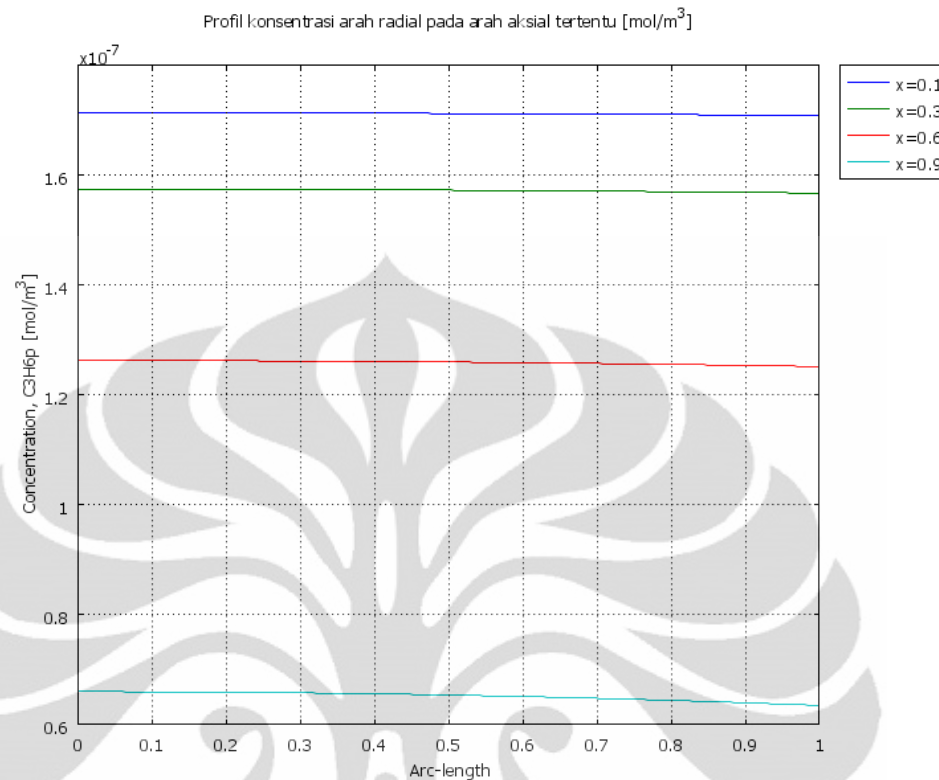
(a) Di Katalis

Concentration along reactor length



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.24. Profil Konsentrasi Propena dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



Gambar 5.25. Profil konsentrasi Propena arah radial pada arah aksial tertentu

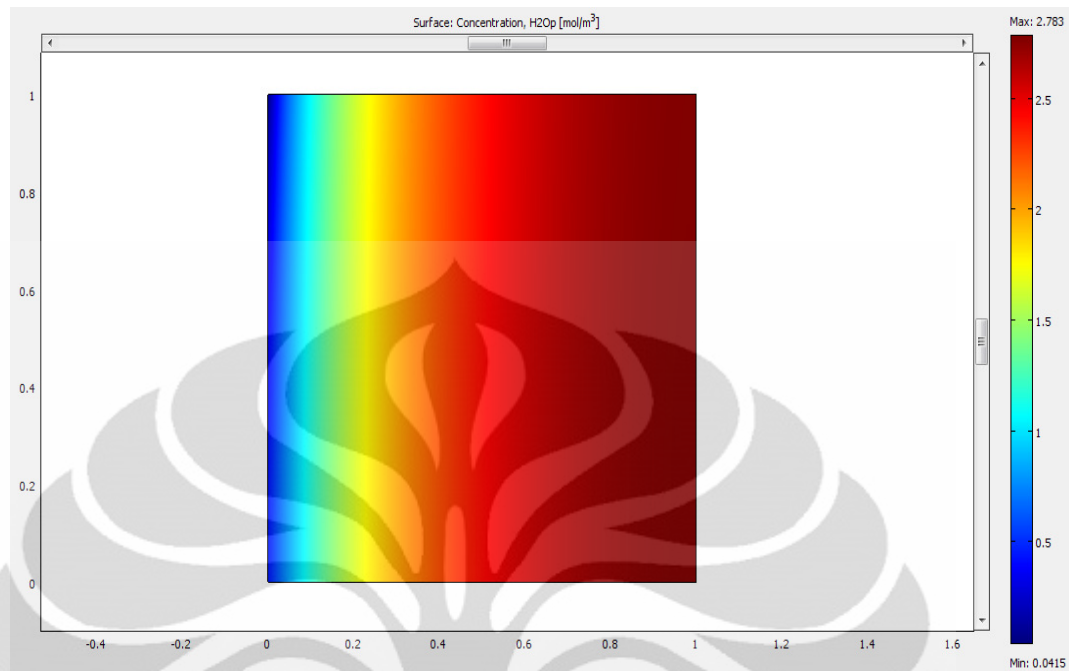
Profil propena di fluida ruah memiliki tren menaik di awal reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi hidrogenasi karbon monoksida menjadi propena yang sangat kecil karena konsentrasi karbon monoksida yang besar telah bereaksi menghasilkan metana serta konsentrasi propena yang kecil.

Dari gambar 5.25 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi propena pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka terjadi sedikit perubahan profil konsentrasi propena jika dibandingkan dengan di awal. Hal ini disebabkan karena konsentrasi propena pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

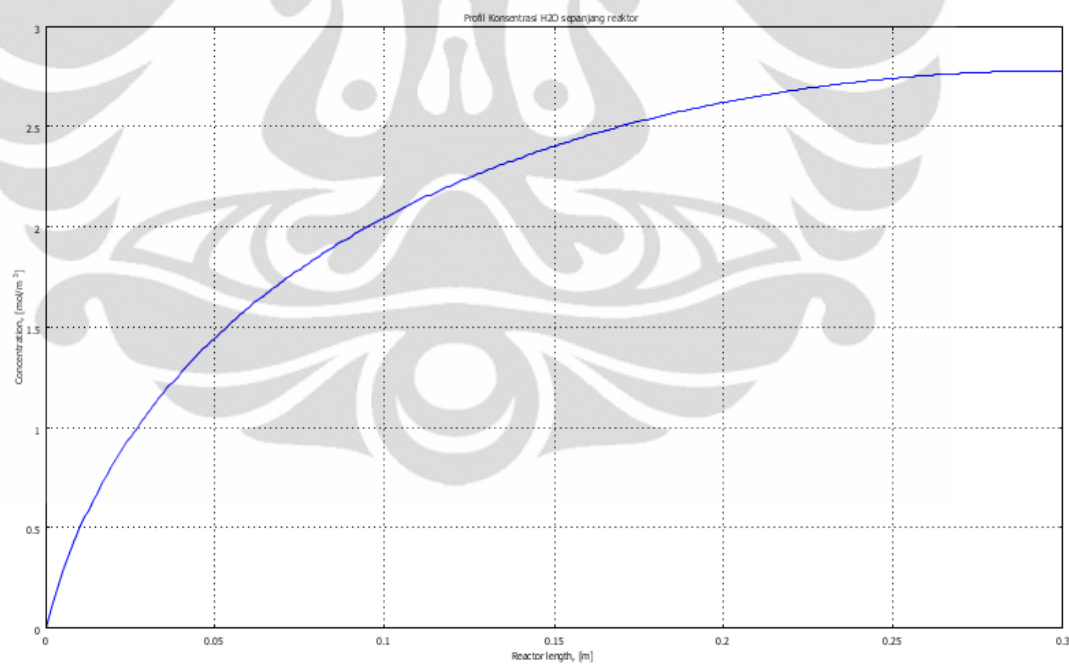
5.2.6 Profil Spesi Uap Air

Berikut ini adalah profil konsentrasi uap air di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program

Consol :

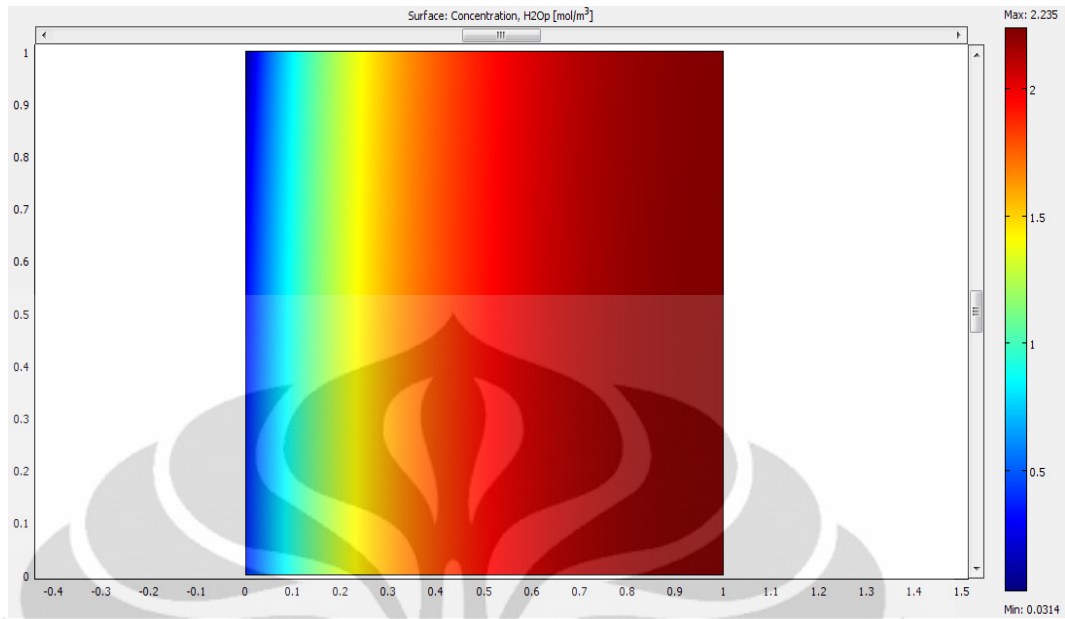


(a) Di Katalis

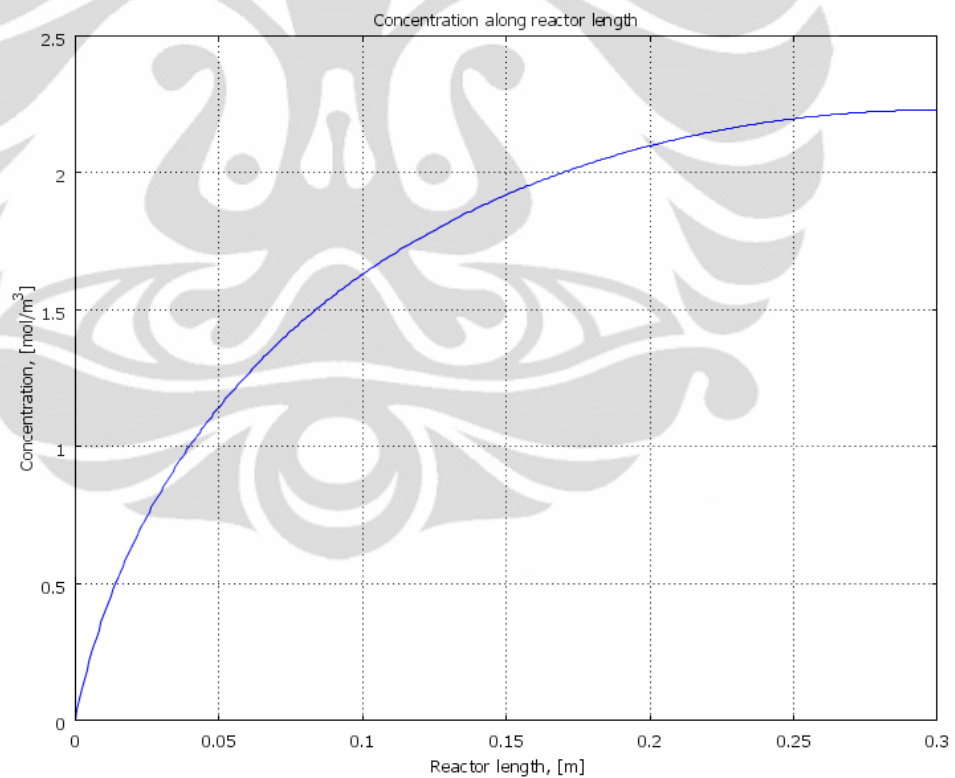


(b) Di Reaktor

Gambar 5.26. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

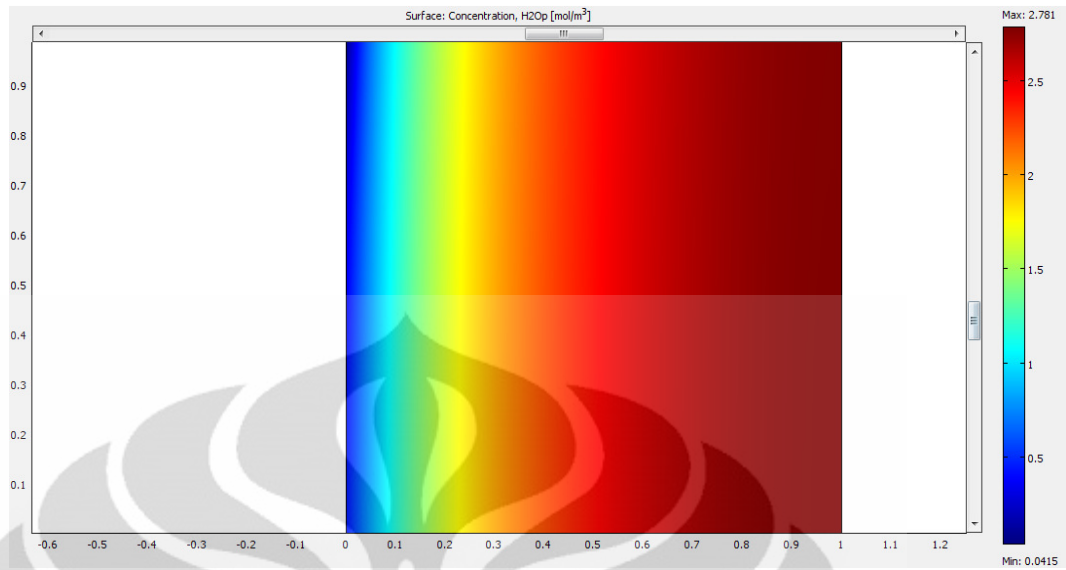


(a) Di Katalis

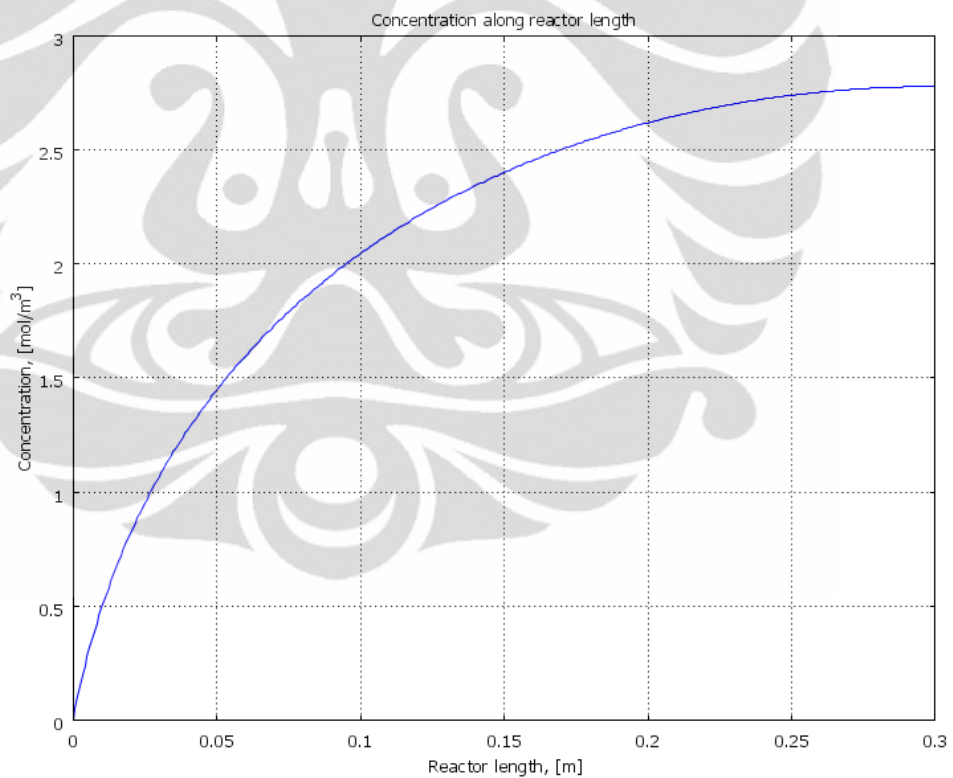


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.27. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

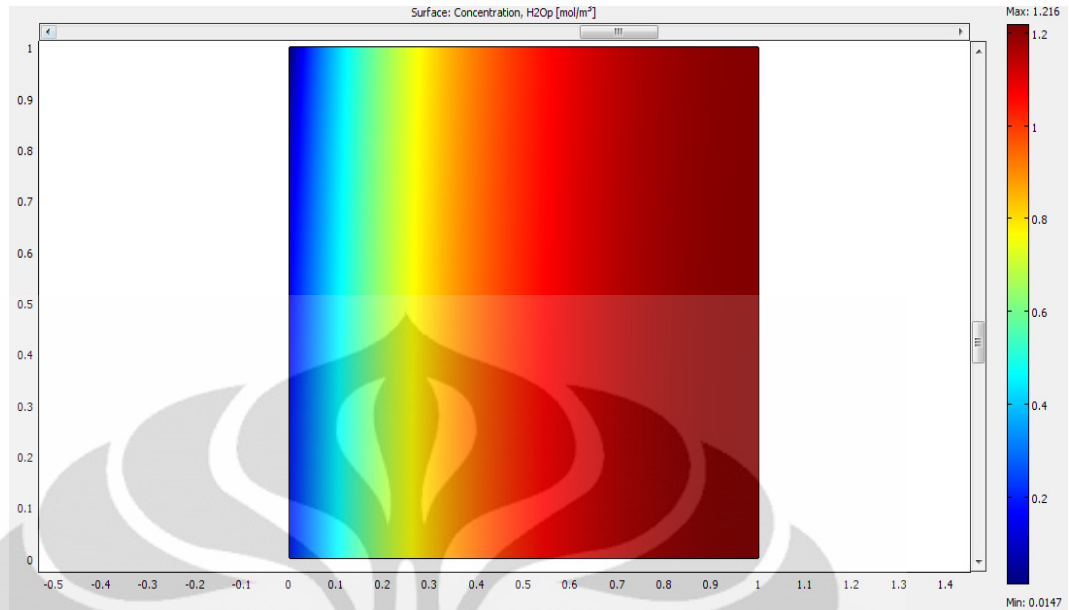


(a) Di Katalis

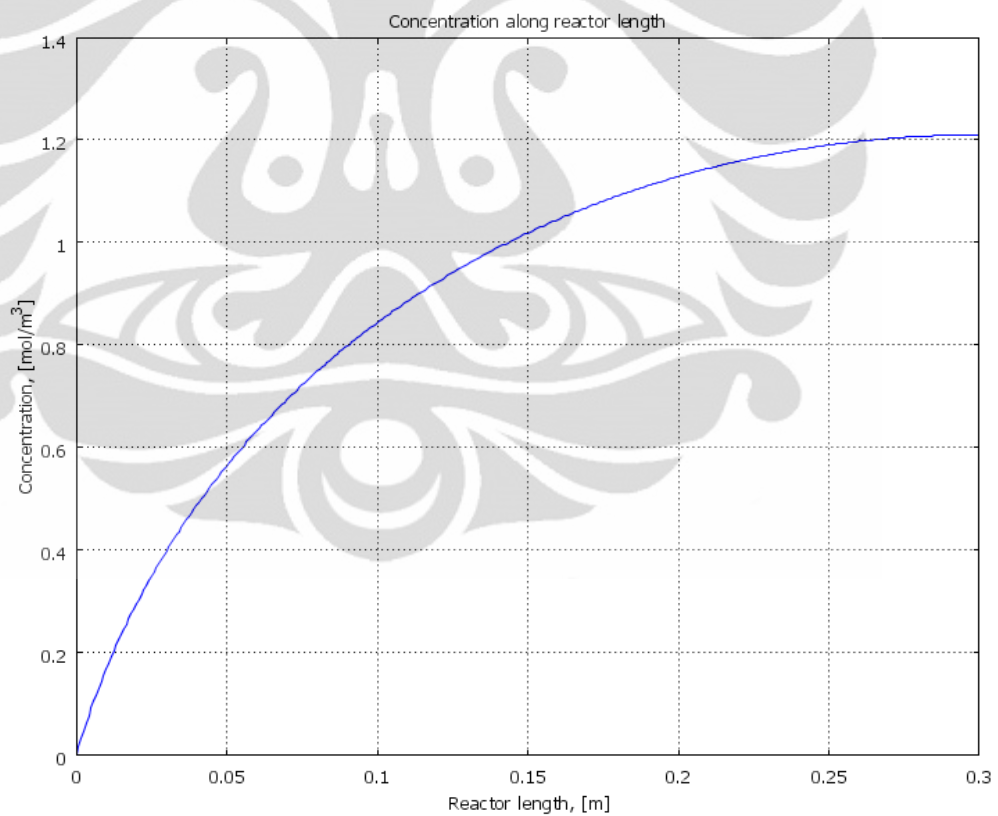


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.28. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

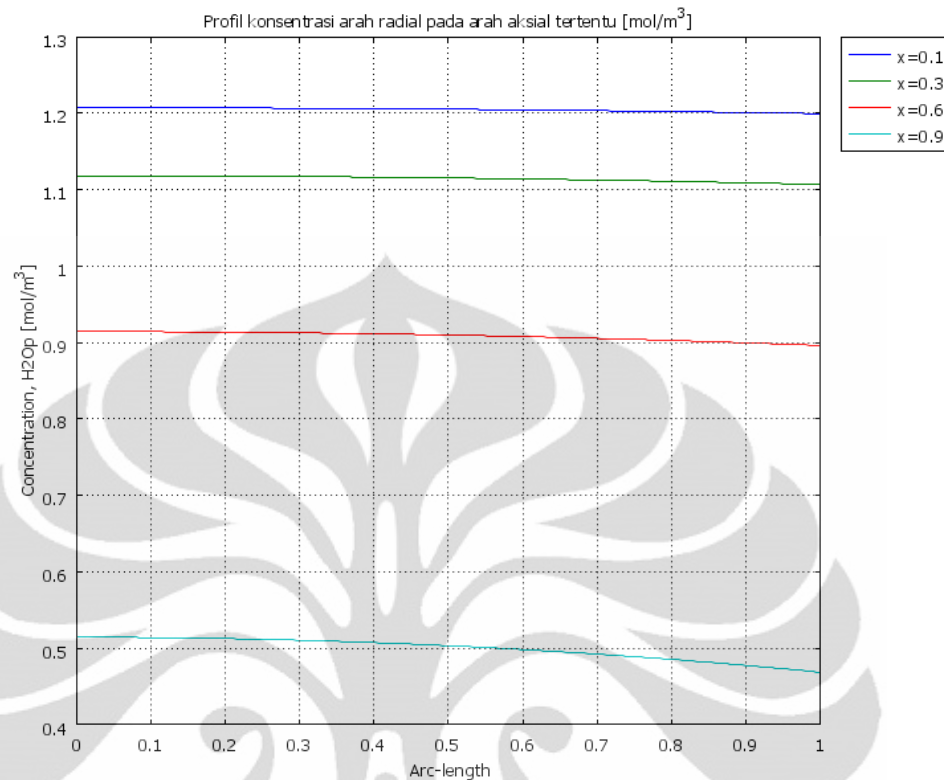


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.29. Profil Konsentrasi uap air dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO $0,3:0,3 = 1$, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor



Gambar 5.30. Profil konsentrasi Uap air arah radial pada arah aksial tertentu

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.

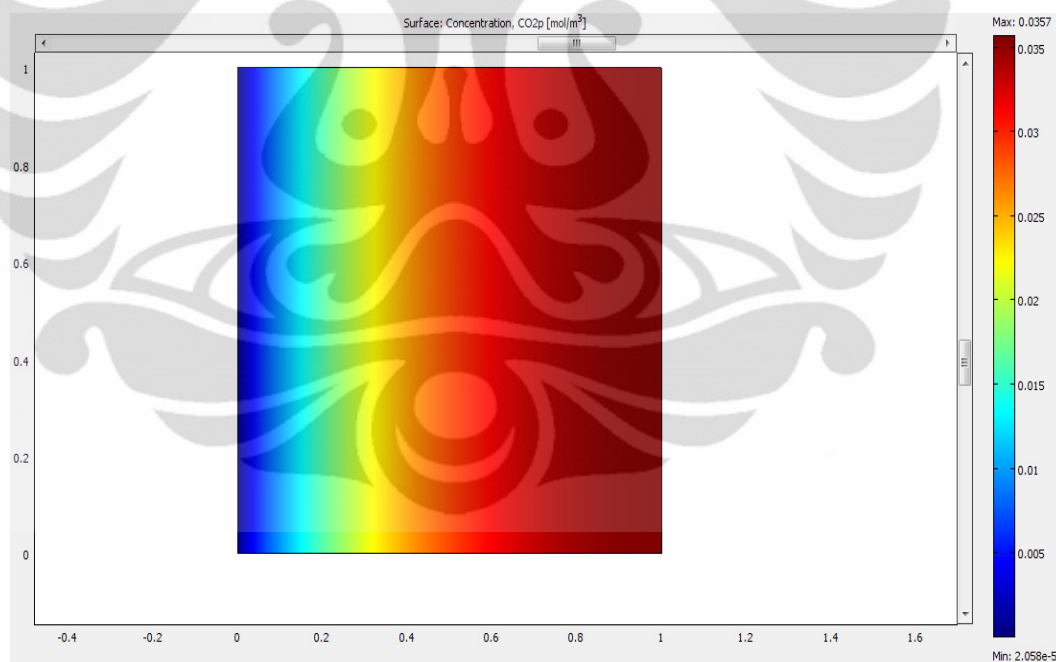
Terlihat dari profil uap air di katalis memiliki tren yang sama dengan di reaktor yaitu meningkat sepanjang arah reaktor. Profil menunjukkan bahwa hambatan intrapartikel tidak menghambat laju transportasi keseluruhan karena tidak terlihat gradien konsentrasi di arah radial katalis. Faktor penghambat 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.

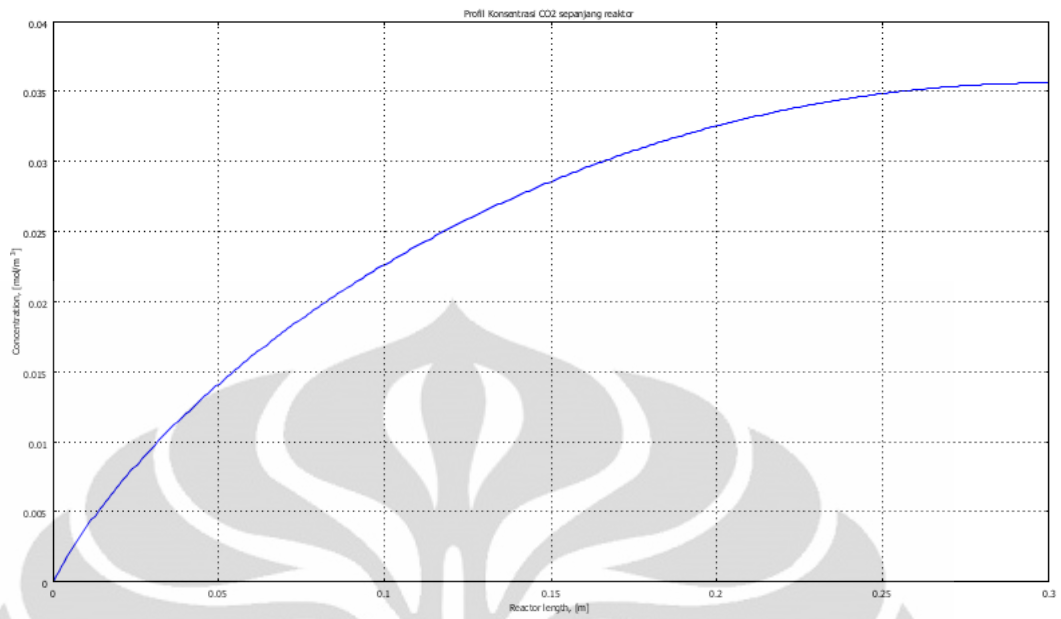
Dari gambar 5.30 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi uap air pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka terjadi sedikit perubahan profil konsentrasi uap air jika dibandingkan dengan di awal. Hal ini disebabkan karena konsentrasi uap air pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

5.2.7 Profil Karbon dioksida

Berikut ini adalah profil konsentrasi karbon dioksida di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :

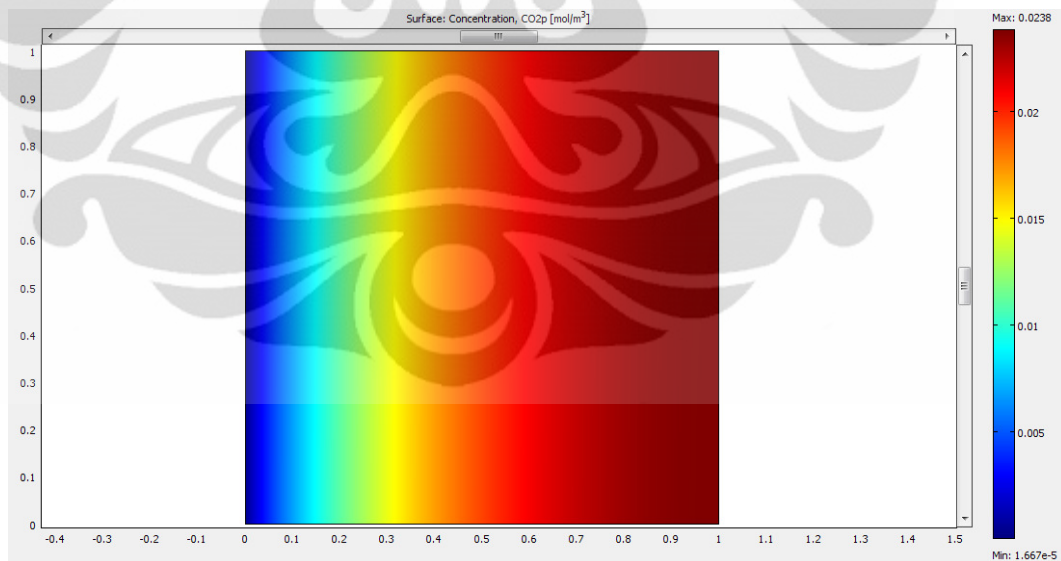


(a) Di Katalis

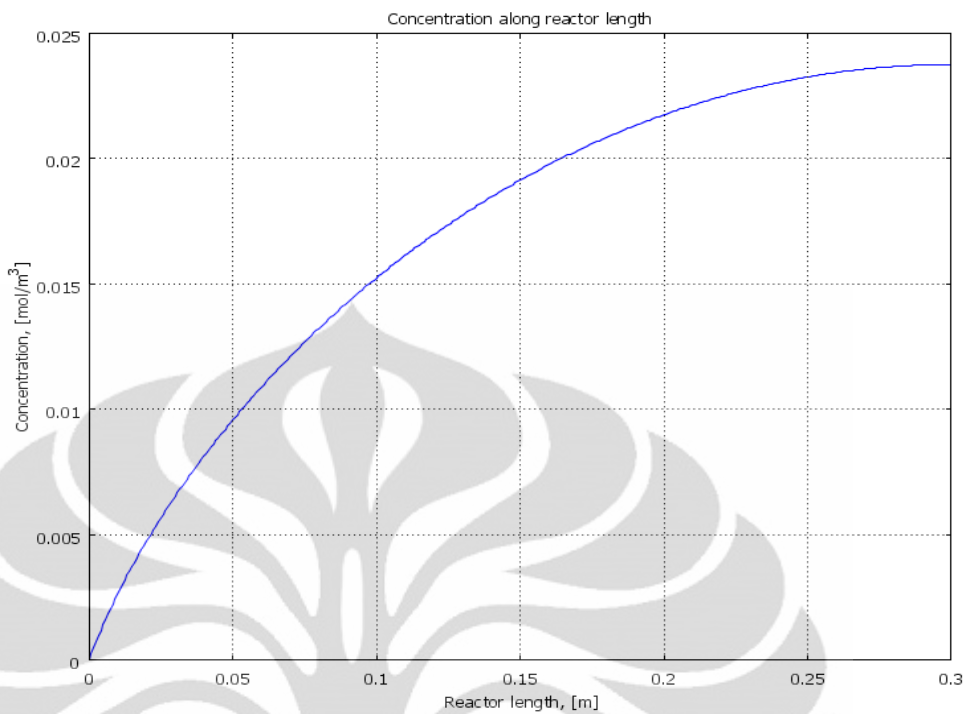


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.31. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

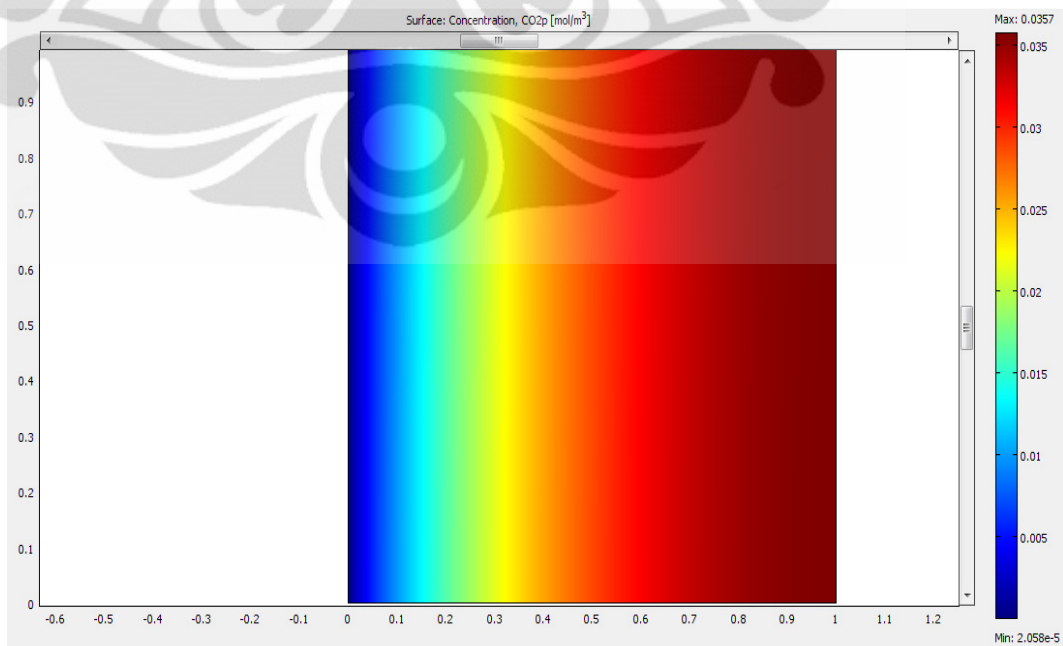


(a) Di Katalis

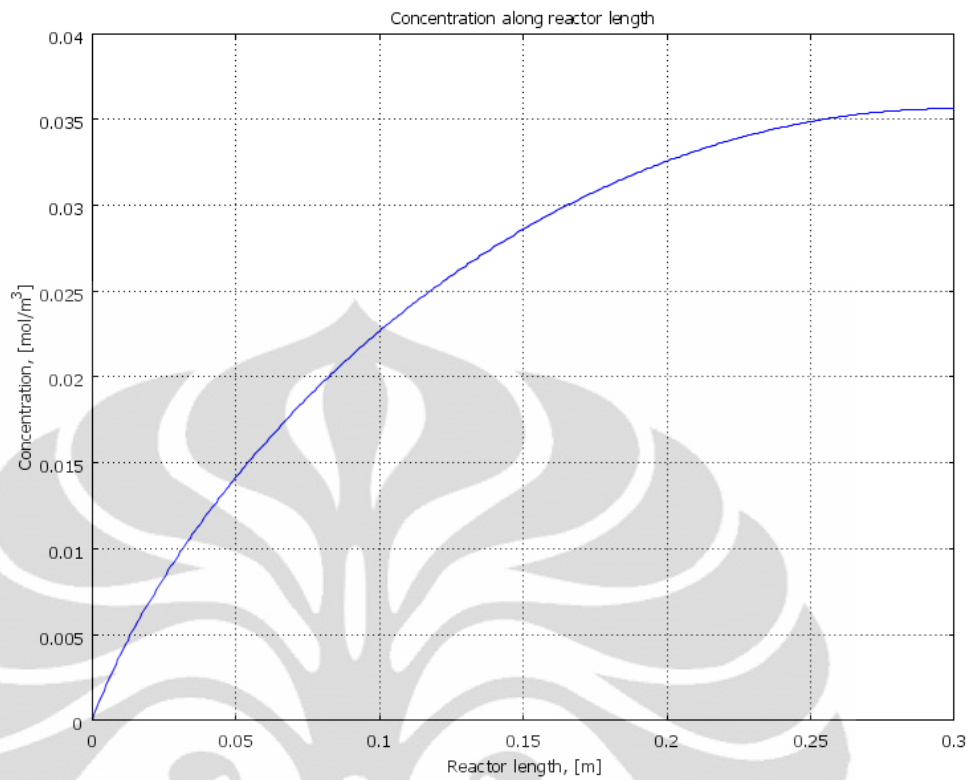


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.32. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

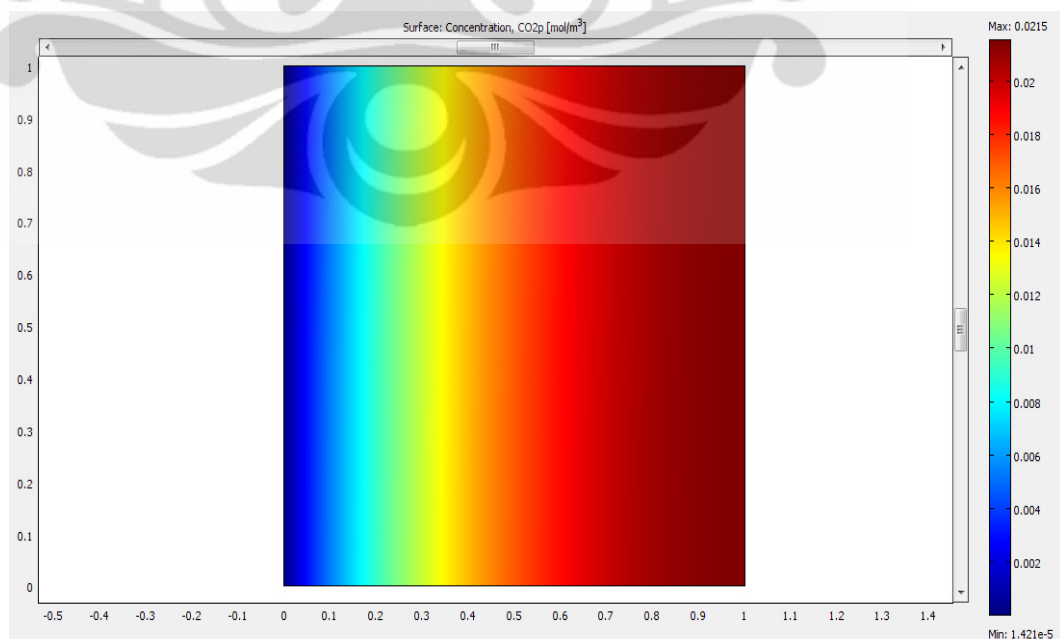


(a) Di Katalis

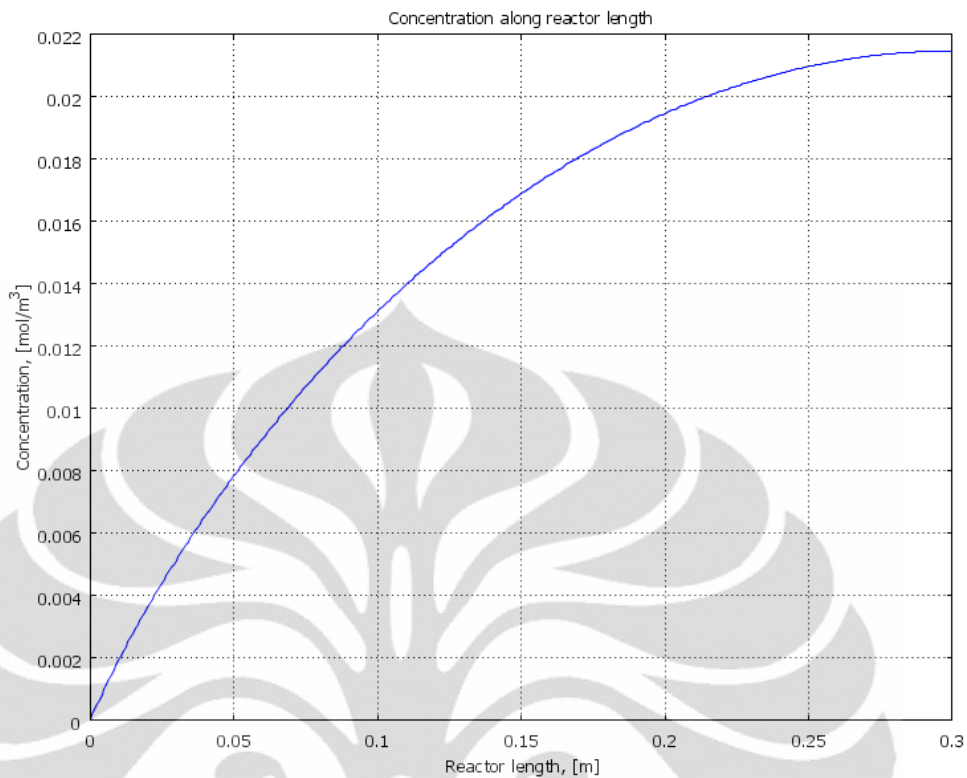


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.33. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

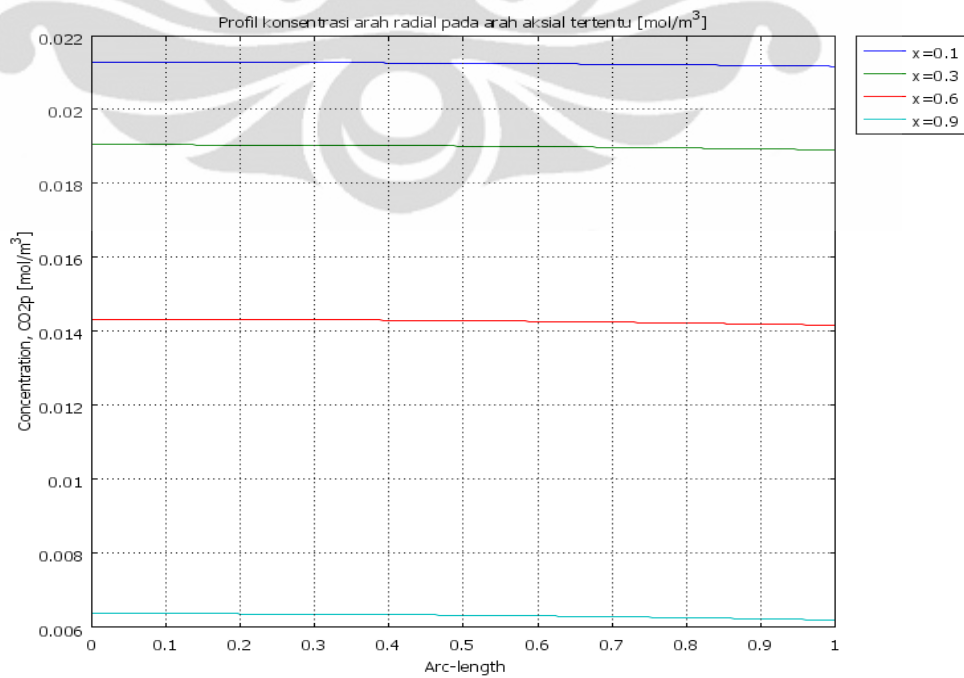


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.34. Profil Konsentrasi Karbon Dioksida dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida



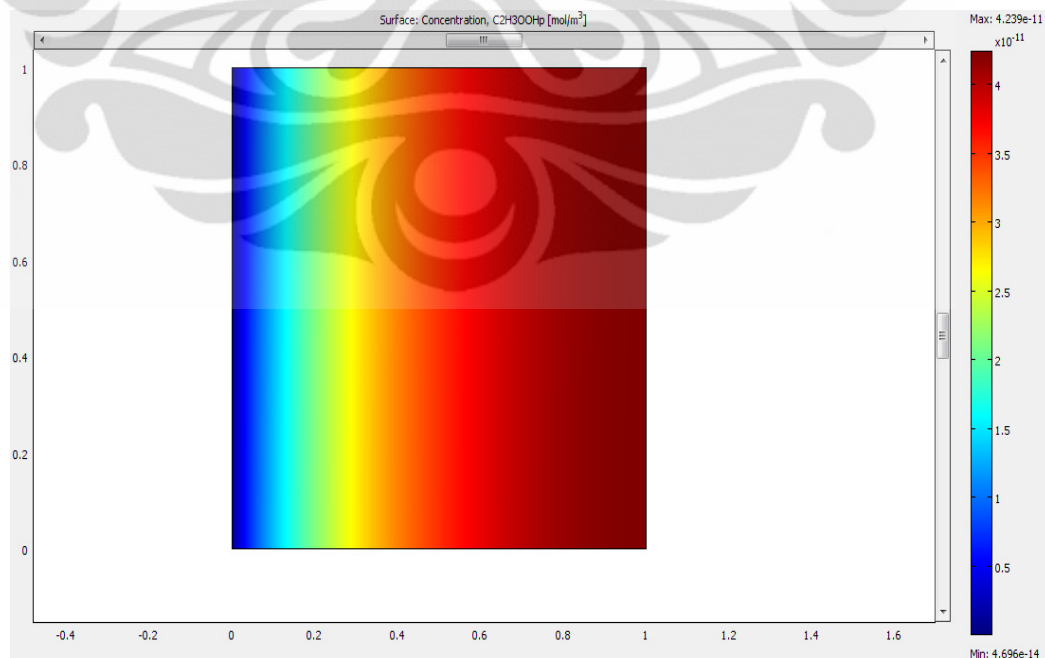
Gambar 5.35. Profil konsentrasi Karbon Dioksida arah radial pada arah aksial tertentu

Profil karbon dioksida di fluida ruah memiliki tren menaik di awal reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi hidrogenasi karbon monoksida menjadi karbon dioksida yang sangat kecil karena konsentrasi karbon monoksida yang besar telah bereaksi menghasilkan metana serta konsentrasi karbondioksida yang kecil.

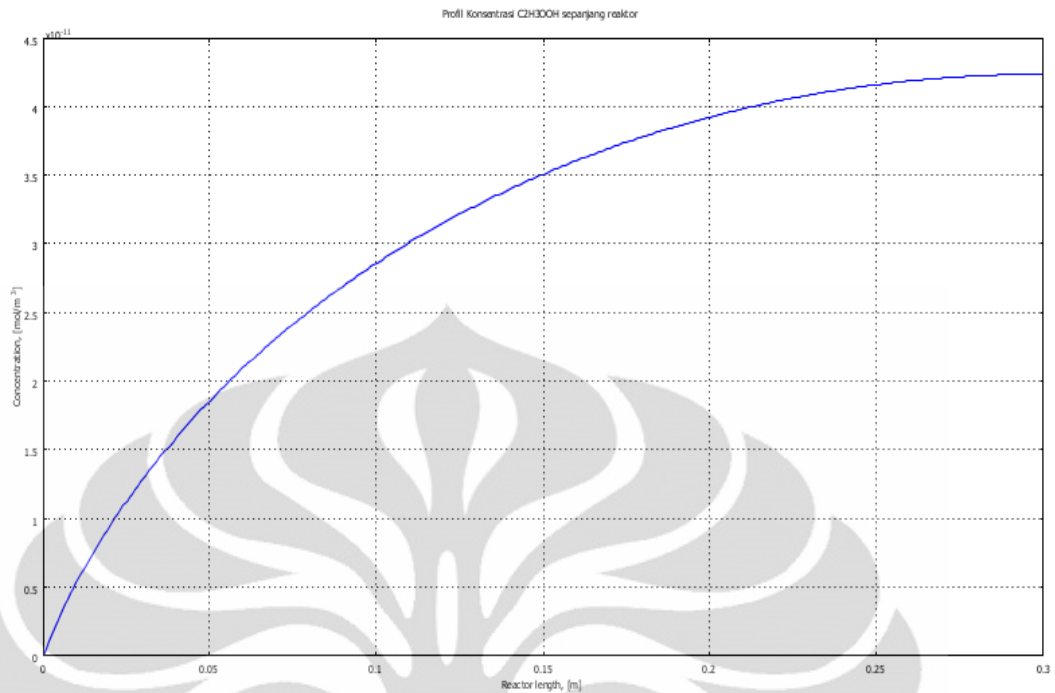
Dari gambar 5.35 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi karbon dioksida pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka terjadi sedikit perubahan profil konsentrasi karbon dioksida jika dibandingkan dengan di awal. Hal ini disebabkan karena konsentrasi karbon dioksida pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

5.2.8 Profil Asam karboksilat (etoksi karboksilat-C₂H₃OOH)

Berikut ini adalah profil konsentrasi etoksi karboksilat di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :

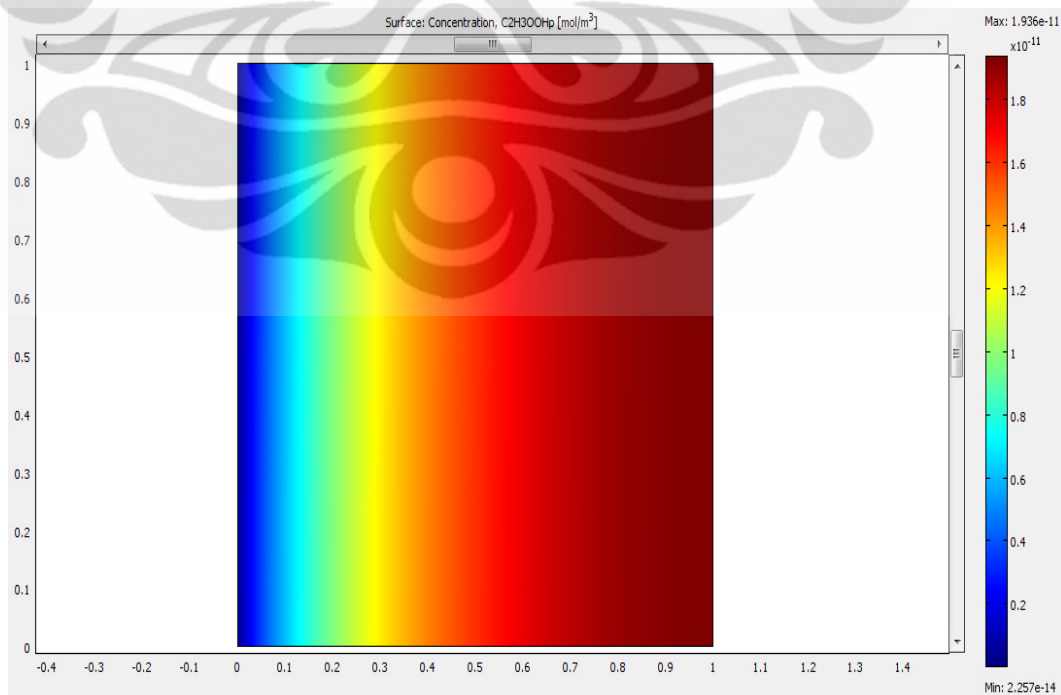


(a) Di Katalis

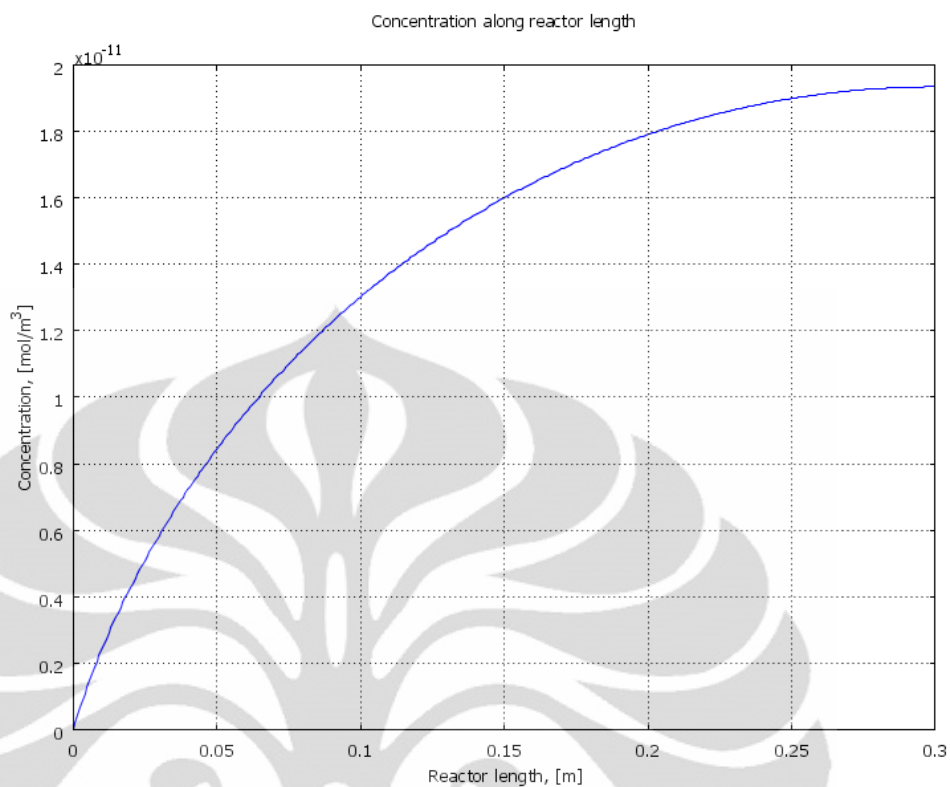


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.36. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 20$ bar, $T_{\text{feed}} = 450$ K, rasio H_2/CO 0,5:0,5 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

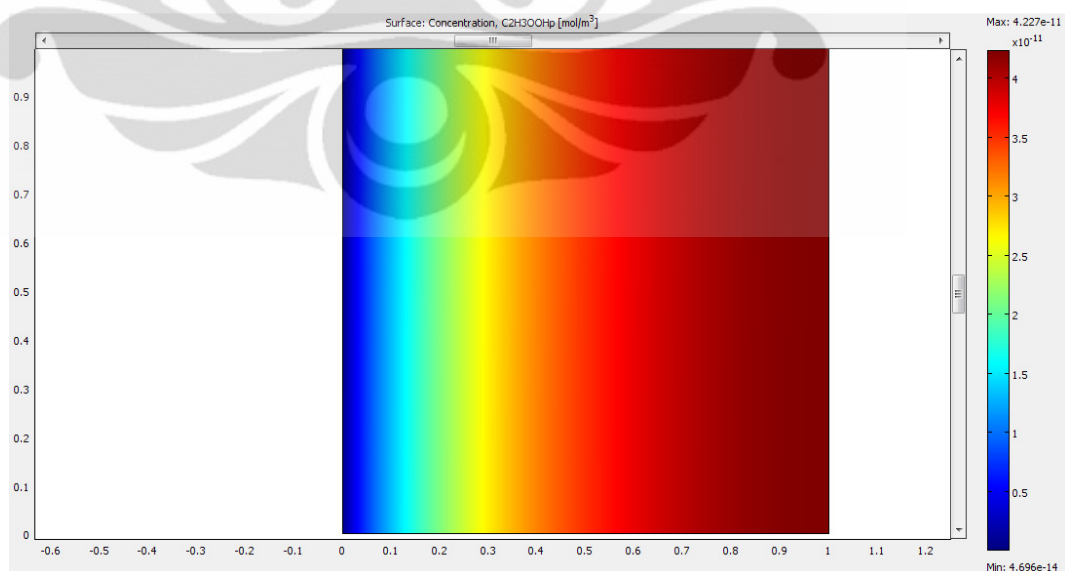


(a) Di Katalis

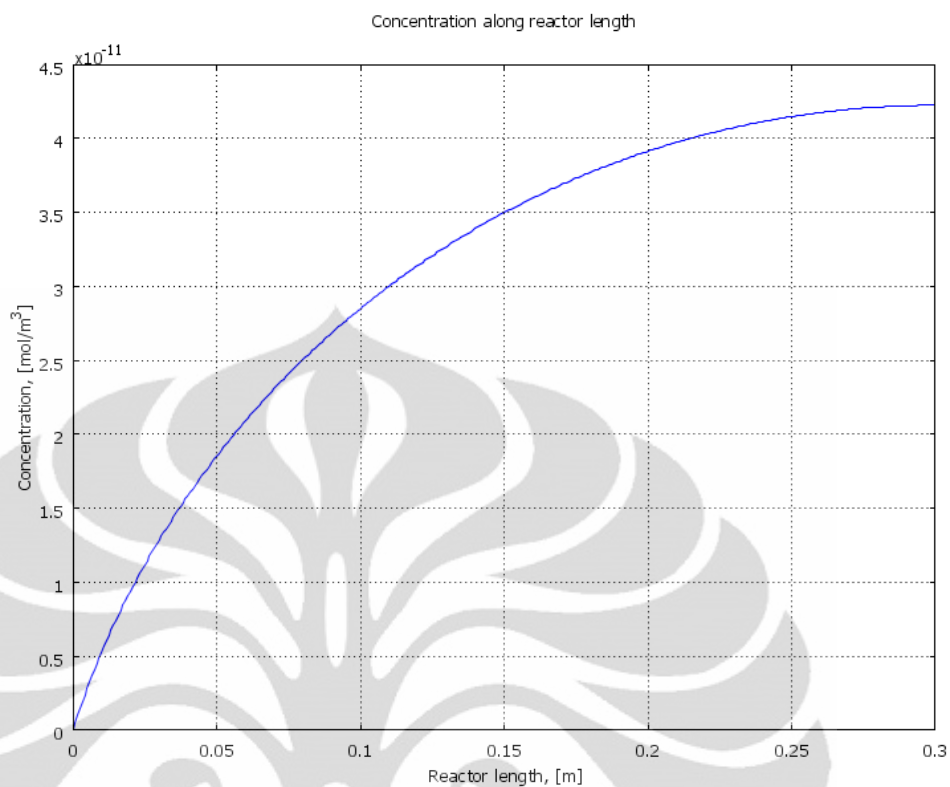


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.37. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,3 = 2, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

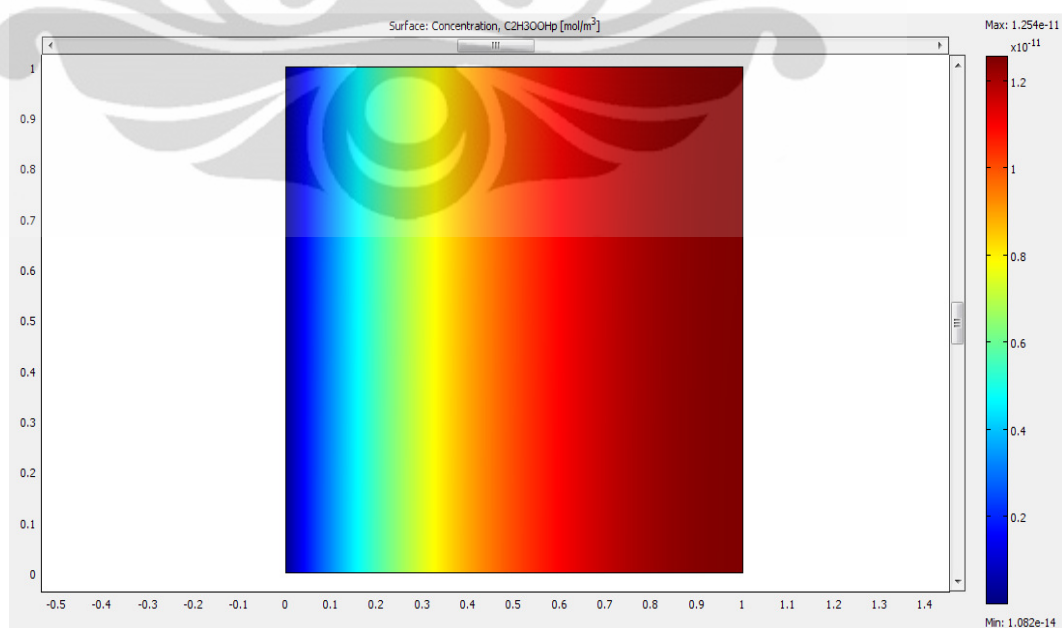


(a) Di Katalis

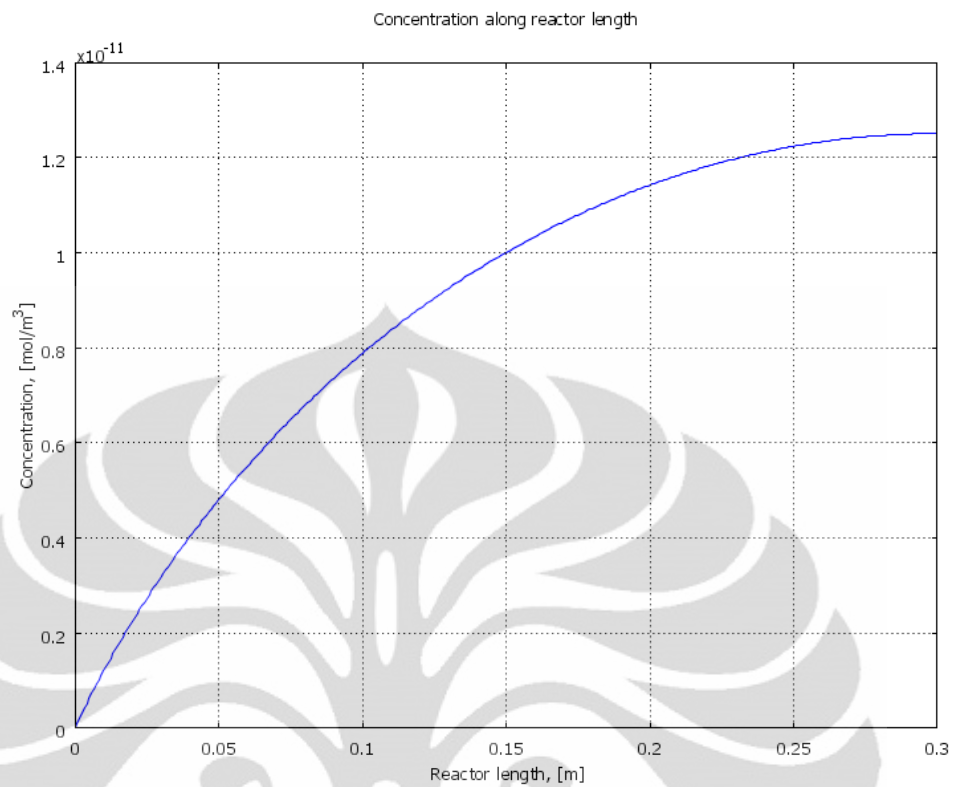


(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.38. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,6:0,4 = 1.5, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

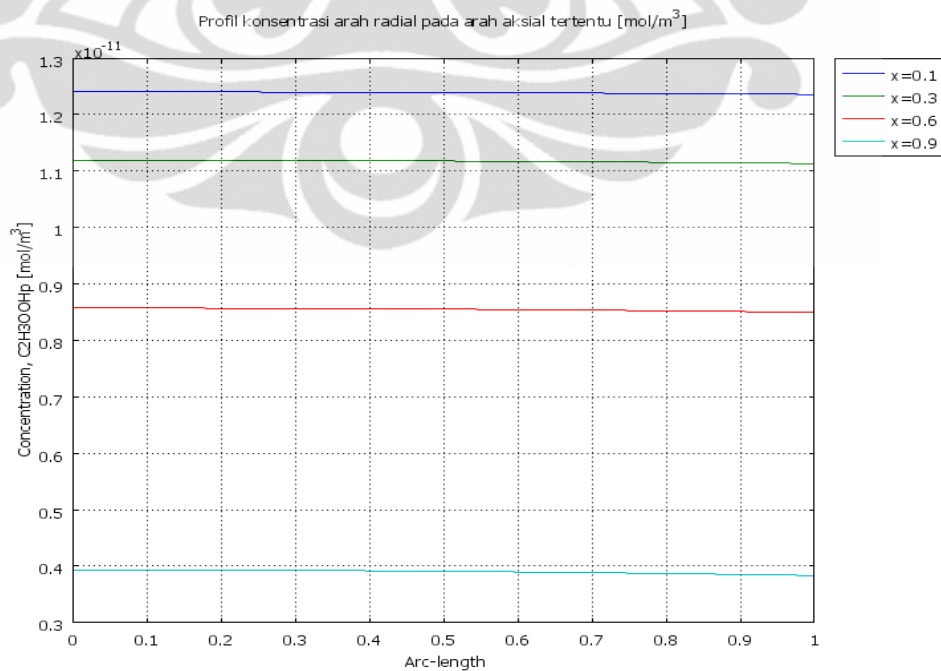


(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.39. Profil Konsentrasi etoksi karboksilat dengan kondisi operasi $P_{\text{feed}} = 1$ bar, $T_{\text{feed}} = 400$ K, rasio H_2/CO 0,3:0,3 = 1, $u_{\text{feed}} = 4 \cdot 10^{-4}$ di (a) katalis, (b) fluida



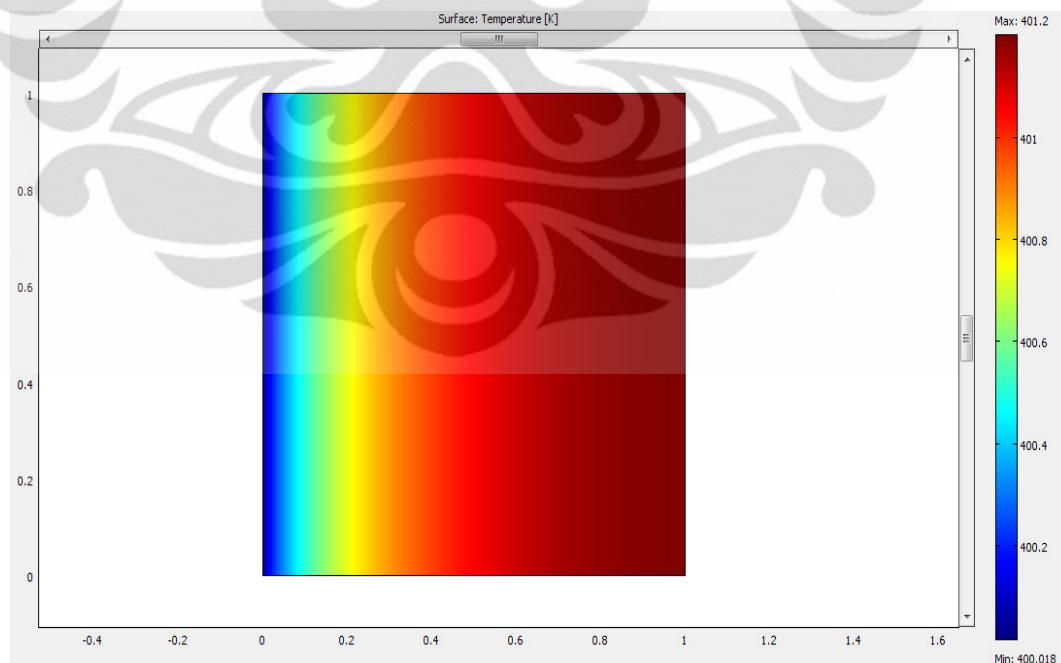
Gambar 5.40. Profil konsentrasi etoksi karboksilat arah radial pada arah aksial tertentu

Profil etoksi karboksilat di fluida ruah memiliki tren menaik di awal reaktor. Hal ini terjadi karena pada awal reaktor, reaksi hidrogenasi karbon monoksida menjadi etoksi karboksilat yang sangat kecil karena konsentrasi karbon monoksida yang besar telah bereaksi menghasilkan metana serta konsentrasi etoksi karboksilat yang kecil.

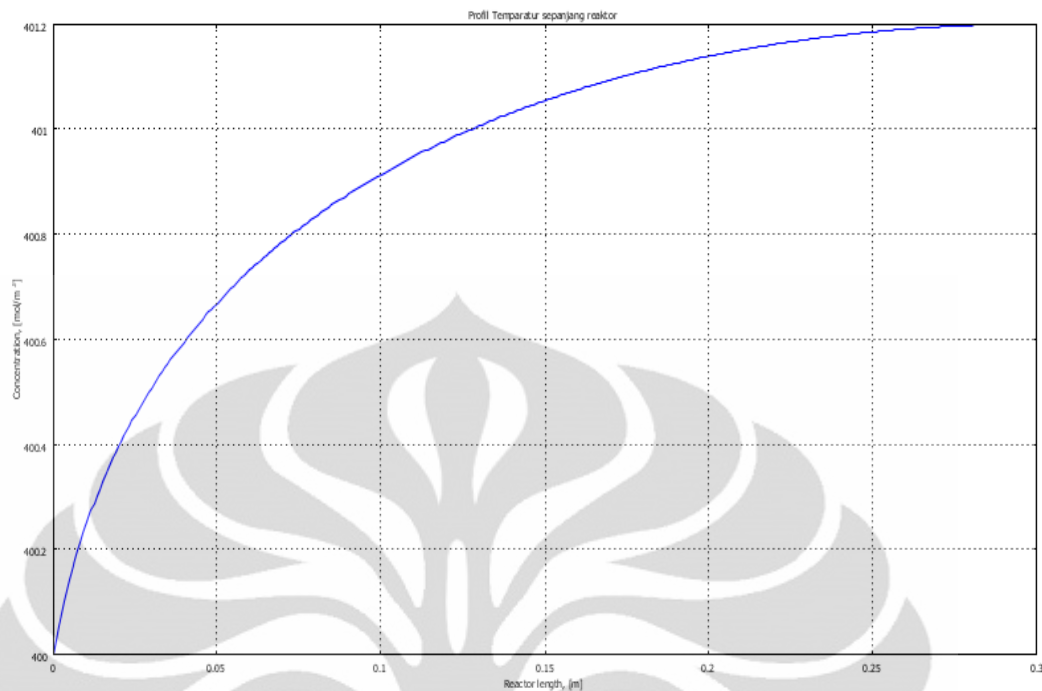
Dari gambar 5.35 terlihat terjadi perbedaan perubahan profil konsentrasi etoksi karboksilat pada arah radial (dari $r = 0$ sampai $r = r_p$) di daerah aksial tertentu. Seperti pada $x = 0.1$, $x = 0.3$, $x=0.6$, $x=0.9$ terlihat semakin besar x maka terjadi sedikit perubahan profil konsentrasi etoksi karboksilat jika dibandingkan dengan di awal. Hal ini disebabkan karena konsentrasi etoksi karboksilat pada $x = 0.1$ masih rendah dibandingkan dengan x yang lebih besar. Tingginya laju alir dan tekanan yang terjadi di posisi awal tidak mengakibatkan perubahan konsentrasi.

5.2.9 Profil Suhu

Berikut ini adalah profil suhu di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :



(a) Di Katalis



(b) Di Fluida Ruah

Gambar 5.41. Profil Suhu (a) katalis, (b) fluida ruah/sepanjang reaktor

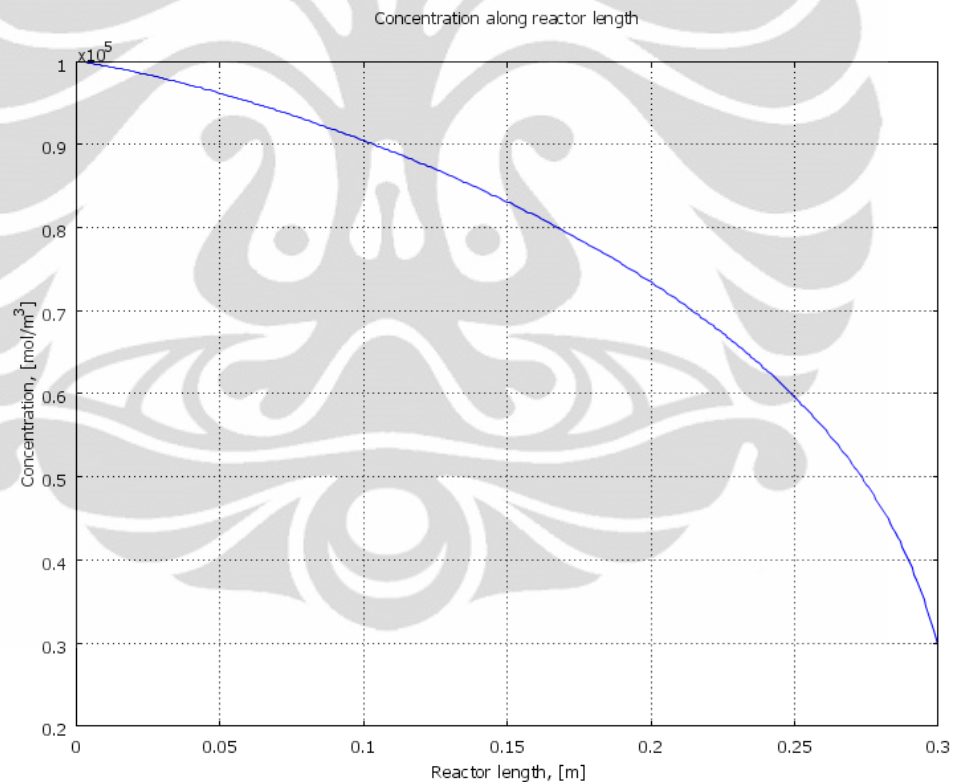
Profil suhu sepanjang reaktor menunjukkan tren menaik di awal reaktor lalu tidak bertambah di akhir reaktor. Hal ini disebabkan di awal reaktor reaksi yang dominan adalah reaksi hidrogenasi karbon monoksida. Reaksi ini bersifat eksotermis sehingga menyebabkan suhu reaktor naik. Sedangkan di akhir reaktor, konsentrasi metana sudah banyak sehingga menyebabkan reaksi dehidrasi metana pun meningkat. Reaksi ini bersifat endotermis sehingga reaksi ini bisa mengimbangi kenaikan suhu akibat reaksi hidrogenasi karbon monoksida menjadi etanol. Reaksi *rwgs* yang bersifat endotermis juga berperan meredam kenaikan suhu reaksi hidrogenasi karbon dioksida sehingga kenaikan suhu reaktor hanya sekitar 1 K. Reaktor ini tidak terlalu memerlukan pendingin atau pemanas karena perubahan suhu di reaktor hanya sekitar 1 K.

Profil suhu di katalis agak memiliki tren yang sama 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 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.

5.2.10 Profil Tekanan

Berikut ini adalah profil tekanan di katalis dan sepanjang reaktor hasil simulasi dan validasi data eksperimen menggunakan program Comsol :



Di Fluida Ruah

Gambar 5.42. Profil tekanan di fluida ruah/sepanjang reaktor

Sepanjang reaktor tekanan mengalami penurunan yang cukup besar dari 1 bar menjadi 0.3 bar. Hal ini terjadi karena adanya energi tahan partikel, energi potensial dan viskositas larutan.

5.2.11 Pengaruh Tekanan awal

Untuk mensimulasikan pengaruh tekanan awal terhadap kinerja reaktor, tekanan reaktor divariasikan dari 1 bar, 2 bar dan 5 bar, pada temperatur 400 K dan rasio $H_2/CO = 1$ yaitu fraksi mol H_2 fraksi mol $CO = 0,3 ; 0,3$.

Tabel 5.13. Data hasil simulasi pengaruh tekanan awal $P = 1, 2$ dan 5 bar

| Panjang reaktor | 0,00 | 0,01 | 0,10 | 0,15 | 0,20 | 0,25 | 0,30 |
|-----------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 1 | 9,0209285542 | 8,7672733368 | 8,6163854122 | 8,5139161705 | 8,4461801814 | 8,4072901757 | 8,3945790625 |
| 2 | 18,0418571085 | 16,9257241730 | 16,3267127678 | 15,9344479938 | 15,6804643638 | 15,5363250591 | 15,4894497177 |
| 5 | 45,1046427712 | 38,8030541780 | 36,0552438769 | 34,3818706852 | 33,3363577413 | 32,7520706760 | 32,5624882206 |

| Tekanan | Konversi (%) |
|---------|---------------|
| 1 | 6,9432928991 |
| 2 | 14,1471433650 |
| 5 | 27,8067927824 |

Dari hasil simulasi didapatkan bahwa kenaikan tekanan akan menyebabkan konversi naik dan konsentrasi CO yang bereaksi juga meningkat. Hal ini sesuai dengan konsep Le Chatier bahwa semakin tinggi tekanan maka raksi akan bergeser ke arah yang memiliki jumlah koefisien terbesar. Dari persamaan reaksi yang terjadi produk memiliki jumlah koefisien yang besar dibandingkan reaktan, maka reaksi akan mengarah ke produk sehingga konversi menjadi meningkat untuk tekanan yang semakin besar.

5.2.12 Pengaruh Penjagaan Suhu Dinding Reaktor

Reaksi fishertropsch adalah reaksi eksoterm dimana menghasilkan panas di dinding reaktor. Oleh sebab itu dinding reaktor perlu dijaga agar reaksi berjalan baik. Untuk mensimulasikan pengaruh penjagaan suhu dinding reaktor terhadap kinerja reaktor, suhu reaktor dijaga suhunya dan divariasikan dari 300 K, 320 K, 340 K dan 400 K pada tekanan 1 bar, temperatur 400 K dan rasio $H_2/CO = 2$ yaitu fraksi mol H_2 fraksi mol $CO = 0,6 ; 0,3$.

Tabel 5.14. Data hasil simulasi pengaruh penjagaan suhu dinding reaktor dan divariasikan dari 300 K, 320 K, 340 K dan 400 K

| Panjang reaktor | Suhu dinding | | | | | | |
|-----------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| | 0,00 | 0,01 | 0,10 | 0,15 | 0,20 | 0,25 | 0,30 |
| 300 | 9,0209285542 | 8,1773807157 | 7,7589667783 | 7,4922291794 | 7,3219273598 | 7,2260313621 | 7,1949515783 |
| 320 | 9,0209285542 | 8,1775511775 | 7,7592424981 | 7,4925771025 | 7,3223228311 | 7,2264539690 | 7,1953830579 |
| 340 | 9,0209285542 | 8,1782389938 | 7,7603521614 | 7,4939751681 | 7,3239109190 | 7,2281507841 | 7,1971154903 |
| 400 | 9,0209285542 | 8,1782396310 | 7,7603529316 | 7,4939759722 | 7,3239117597 | 7,2281516881 | 7,1971164461 |

| Suhu dinding | Konversi (%) |
|--------------|---------------|
| 300 | 20,2415634369 |
| 320 | 20,2367803417 |
| 340 | 20,2175757512 |
| 400 | 20,2175651566 |

5.2.13 Pengaruh Suhu Awal Reaksi

Untuk mensimulasikan pengaruh temperatur awal terhadap kinerja reaktor, temperatur divariasikan pada suhu 400 K, 410 K, 430 K dan 450 K, pada tekanan 1 bar dan rasio $H_2/CO = 2$ yaitu fraksi mol H_2 fraksi mol $CO = 0,6 ; 0,3$.

Tabel 5.15. Data hasil simulasi pengaruh suhu awal reaksi pada suhu 400 K, 410 K, 430 K dan 450 K

| Panjang reaktor | Suhu awal | | | | | | |
|-----------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| | 0,00 | 0,01 | 0,10 | 0,15 | 0,20 | 0,25 | 0,30 |
| 400 | 9,0209285542 | 8,7672733368 | 8,6163854122 | 8,5139161705 | 8,4461801814 | 8,4072901757 | 8,3945790625 |
| 410 | 8,8009059066 | 8,4973449738 | 8,3195874529 | 8,1997040647 | 8,1207787716 | 8,0755615174 | 8,0607870676 |
| 430 | 8,3915614458 | 7,9790907831 | 7,7440645316 | 7,5878063545 | 7,4858370845 | 7,4277014268 | 7,4087305810 |
| 450 | 8,0186031593 | 7,4914329602 | 7,1979331302 | 7,0056098845 | 6,8812516267 | 6,8106957298 | 6,7876913119 |

| Suhu awal | Konversi (%) |
|-----------|---------------|
| 400 | 6,9432928991 |
| 410 | 8,4095756368 |
| 430 | 11,7121333278 |
| 450 | 15,3507016498 |

Dari hasil simulasi didapatkan semakin tinggi temperatur operasi semakin besar jumlah konversi. Hal ini berkaitan dengan laju reaksi yang berbanding lurus

dengan temperatur, kenaikan temperatur akan meningkatkan laju reaksi, sesuai dengan persamaan Arrhenius.

5.2.14 Pengaruh Rasio CO dan H₂

Untuk mensimulasikan pengaruh Rasio CO dan H₂ terhadap kinerja reaktor, tekanan reaktor 1 bar, pada temperatur 400 K dan variasi rasio H₂/CO = 1 ; 1,5 ; 2, yaitu fraksi mol H₂ fraksi mol CO = 0,3/0,3 ; 0,6/0,4 ; 0,6/0,3.

Tabel 5.16. Data hasil simulasi pengaruh variasi rasio H₂/CO = 1 ; 1,5 ; 2, yaitu fraksi mol H₂ fraksi mol CO = 0,3/0,3 ; 0,6/0,4 ; 0,6/0,3.

| Panjang reaktor | 0,00 | 0,01 | 0,10 | 0,15 | 0,20 | 0,25 | 0,30 |
|---------------------|---------------|---------------|---------------|---------------|--------------|--------------|--------------|
| Rasio 0,6/0,3 (2) | 9,0209285542 | 8,1782396310 | 7,7603529316 | 7,4939759722 | 7,3239117597 | 7,2281516881 | 7,1971164461 |
| Rasio 0,6/0,4 (1,5) | 12,0279047390 | 10,9867757413 | 10,4740432602 | 10,1486498166 | 9,9415097973 | 9,8250655361 | 9,7873484101 |
| Rasio 0,3/0,3 (1) | 9,0209285542 | 8,7672733368 | 8,6163854122 | 8,5139161705 | 8,4461801814 | 8,4072901757 | 8,3945790625 |

| Rasio | Konversi (%) |
|---------------|---------------|
| 0,6/0,3 (2) | 20,2175651566 |
| 0,6/0,4 (1,5) | 18,6279853181 |
| 0,3/0,3 (1) | 6,9432928991 |

Secara umum konversi berbanding lurus dengan rasio H₂/CO. Dengan bertambahnya rasio H₂/CO maka jumlah singas yang terkonversi melalui reaksi FT dan *water gas shift* (WGS) semakin besar. Kenaikan rasio H₂/CO dari 1 hingga 2 menunjukkan peningkatan konversi CO yang besar. Berdasarkan stokiometri reaksi, terlihat bahwa CO menjadi reaktan pembatas, sehingga semakin besar rasio singas maka CO memiliki kesempatan untuk bereaksi dengan H₂ yang berlimpah sehingga CO yang terkonversi menjadi besar. Ketika konversi bertambah, reaksi WGS juga meningkat karena bertambahnya jumlah H₂O hasil reaksi FT. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen, ketika rasio H₂/CO diperbesar maka konversi CO juga meningkat.

BAB VI

KESIMPULAN dan SARAN

6.1 Kesimpulan

Model heterogen reaktor unggul tetap untuk reaksi Fischer Tropsch dapat digunakan untuk memprediksi kinerja reaktor dengan baik.

Dari hasil simulasi diketahui hasil konversi dan selektivitas pada validasi dan simulasi Fischer Tropsch:

Tabel 6.1. Hasil Validasi dan Simulasi

| | Kondisi Operasi | | | | Konversi | | Selektivitas | | | | |
|------------|-------------------|----------------------|----------------------------------|-----------------------------|----------|----------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|-----------------|
| | T _{feed} | P _{feed} | Fraksi mol H ₂ /CO | Rasio H ₂ /CO | CO | H ₂ | CH ₄ | CO ₂ | H ₂ O | C ₂₊ | C ₃₊ |
| Eksperimen | 450 K | 2x10 ⁶ Pa | 0,5 ; 0,5 | 1 | 24.7 | 39.4 | 15.9 | 1.4 | - | 3.6 | 4.8 |
| Validasi | 450 K | 2x10 ⁶ Pa | 0,5 ; 0,5 | 1 | 18.63 | 26.25 | 49.68 | 0.64 | 49.68 | 0 | 0 |
| Simulasi-1 | 400 K | 1x10 ⁵ Pa | 0,6 ; 0,3 | 2 | 20.2 | 26 | 49.73 | 0.54 | 49.73 | 0 | 0 |
| Simulasi-2 | 400 K | 1x10 ⁵ Pa | 0,6 ; 0,4 | 1,5 | 18.61 | 26.23 | 49.68 | 0.64 | 49.68 | 0 | 0 |
| Simulasi-3 | 400 K | 1x10 ⁵ Pa | 0,3 ; 0,3 | 1 | 6.9 | 15.7 | 49.56 | 0.88 | 49.56 | 0 | 0 |
| Simulasi-4 | 410 K | 1x10 ⁵ Pa | 0,3 ; 0,3 | 1 | 8.3 | 18.35 | 49.67 | 0.66 | 49.67 | 0 | 0 |

Tabel 6.2. Konversi hasil simulasi berdasarkan tekanan, suhu dinding reaktor, temperatur dan rasio H₂/CO

| Tekanan (Bar) | Konversi (%) | Rasio | Konversi (%) | Suhu awal (K) | Konversi (%) | Suhu dinding (K) | Konversi (%) |
|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|---------------|------------------|---------------|
| 1 | 6,9432928991 | 0,6/0,3 (2) | 20,2175651566 | 400 | 6,9432928991 | 300 | 20,2415634369 |
| 2 | 14,1471433650 | 0,6/0,4 (1,5) | 18,6279853181 | 410 | 8,4095756368 | 320 | 20,2367803417 |
| 5 | 27,8067927824 | 0,3/0,3 (1) | 6,9432928991 | 430 | 11,7121333278 | 340 | 20,2175757512 |
| | | | | 450 | 15,3507016498 | 400 | 20,2175651566 |

6.2 Saran

Saran untuk penelitian selanjutnya adalah dilakukan eksperimen skala banch dan skala komersial untuk memvalidasi model ini. Dan dikembangkan lagi eksperimen skala pilot dengan memvalidasi data dengan simulasi. Model juga bisa dikembangkan lebih lanjut menjadi model heterogen dua dimensi.

DAFTAR PUSTAKA

1. Jatmiko Tri Hadi, PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR FIXED BED UNTUK REAKSI FISCHER TROPSCH, Tesis Universitas Indonesia 2008
2. Ismail Afif, PEMODELAN DAN SIMULASI REAKTOR FIXED BED UNTUK REAKSI HIDROGENASI KARBONDIOKSIDA MENJADI DIMETIL ETHER, Skripsi Universitas Indonesia 2011.
3. De Swart, J.W.A., Krishna, R. and Sie, S.T., Selection, Design and Scale Up of the Fischer-Tropsch Reactor, Department of Chemical Engineering, University of Amsterdam, Nieuwe Achtergracht 166, 1018 WV Amsterdam, The Netherlands
4. Sh. Shahhosseini, S. Alinia, and M. Irani, CFD Simulation of Fixed Bed Reactor in Fischer-Tropsch Synthesis of GTL Technology. World Academy of Science, Engineering and Technology 60 2009
5. Rostrup-Nielsen, Jens R. 2000. New Aspects of Syngas Production and Use. *Catalysis Today* : 63, 159–164
6. Rice dan Do. 1995. *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers*. Canada : John Wiley & Sons, Inc.
7. Kim^{1,2}, Heoung Yeoun Lee¹, Ki-Won Jun³, Hyunku Joo⁴, Chonghun Han¹ and In Kyu Song^{1*}, *GTL Process optimization Simulation Study Yong Heon*
(1)School of Chemical and Biological Engineering, Seoul National University, Seoul National University, Shinlim-dong, Kwanak-ku, Seoul, 151-744, South Korea , (2)Petroleum Technology Institute, Korea National Oil Corporation, 1588-14 Gwanyang Dong, An Yang, 431-711, South Korea,