

**PEMODELAN *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS* (CFD)  
REAKTOR PELAT SEJAJAR UNTUK REAKSI  
DEKOMPOSISI KATALITIK METANA**

**SKRIPSI**

**HENDRO  
0706269810**



**UNIVERSITAS INDONESIA  
FAKULTAS TEKNIK  
PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA  
DEPOK  
JUNI 2011**

**PEMODELAN *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS* (CFD) REAKTOR  
PELAT SEJAJAR UNTUK REAKSI DEKOMPOSISI KATALITIK  
METANA**

**SKRIPSI**

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

**HENDRO  
0706269810**



**UNIVERSITAS INDONESIA  
FAKULTAS TEKNIK  
PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA  
DEPOK  
JUNI 2011**

## HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

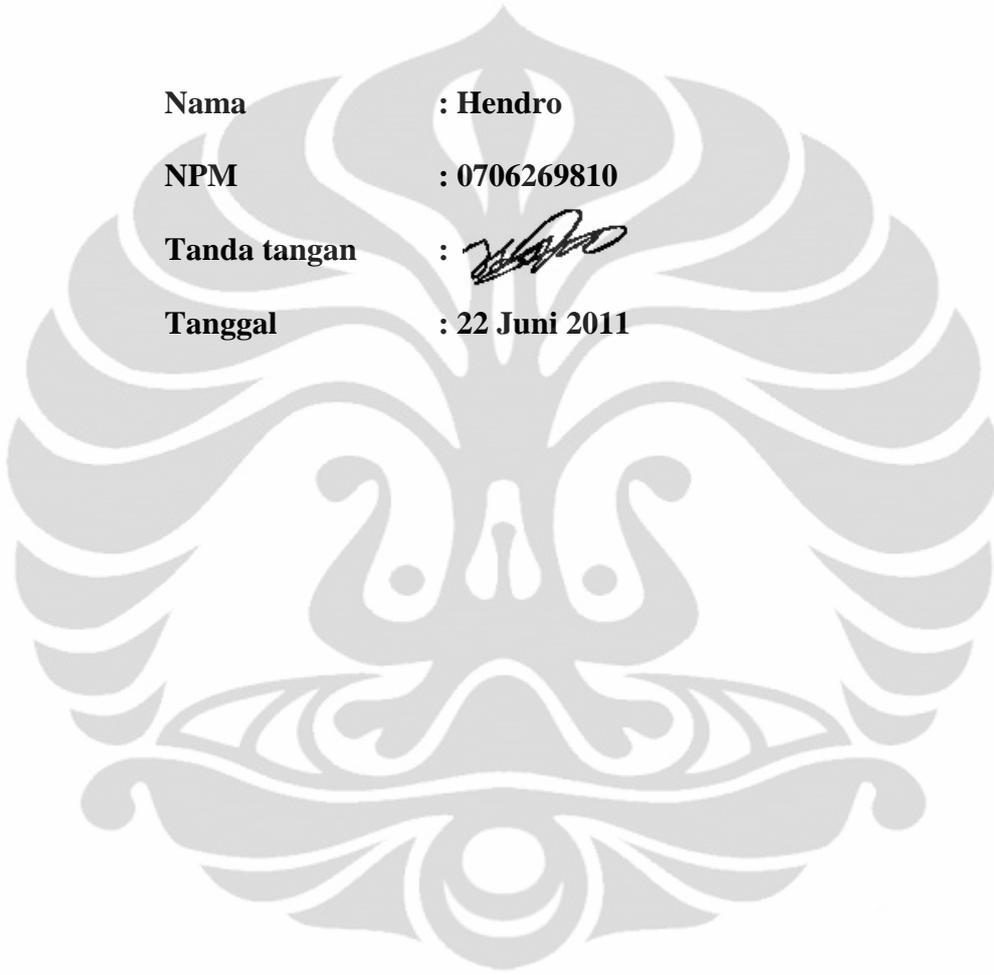
Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Hendro

NPM : 0706269810

Tanda tangan : 

Tanggal : 22 Juni 2011



## HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :  
Nama : Hendro  
NPM : 0706269810  
Program Studi : Teknik Kimia  
Judul Skripsi : *Pemodelan Computational Fluid Dynamics (CFD)*  
Reaktor Pelat Sejajar untuk Reaksi Dekomposisi  
Katalitik Metana

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

### DEWAN PENGUJI

Pembimbing I : Ir. Praswasti PDK Wulan, MT



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



Penguji I : Ir. Abdul Wahid, MT



Penguji II : Dr. Ir. Asep Handaya Saputra, M.Eng



Penguji III : Bambang Heru Susanto, ST, MT



Ditetapkan di : Depok

Tanggal : 22 Juni 2011

## KATA PENGANTAR

Pertama-tama saya mengucapkan puji dan syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas rahmat dan penyertaan-Nya, saya dapat menyelesaikan penulisan skripsi ini. Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian persyaratan akademis dalam meraih gelar Sarjana Teknik di Program Studi Teknik Kimia pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia. Dalam penyusunan skripsi ini, penulis mendapatkan banyak bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak. Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Ir. Praswasti PDK Wulan, MT dan Dr. rer. nat. Ir. Yuswan Muharam, MT selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan makalah seminar ini;
2. Seluruh dosen Departemen Teknik Kimia UI yang telah mengajar dan memberi saya wawasan sebagai mahasiswa teknik kimia;
3. Orang tua, atas semua doa dan dukungan yang telah diberikan;
4. Dewim, untuk dukungannya melalui semangat dan sarana dalam penyelesaian skripsi ini;
5. Brian , Elwi dan Erlina untuk semua bantuan dan dukungannya;
6. Haris, Herry, Peter, dan Sultan sebagai rekan satu pembimbing serta teman-teman angkatan 2007 atas bantuan dan semangatnya;
7. Seluruh karyawan Departemen Teknik Kimia FTUI, atas bantuannya selama ini
8. Pihak-pihak lain yang telah mendukung dan membantu, yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

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

Depok, Juni 2011

Penulis

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

---

---

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

Nama : Hendro  
NPM : 0706269810  
Program Studi : Teknik Kimia  
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 *COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS* (CFD) REAKTOR PELAT SEJAJAR UNTUK REAKSI DEKOMPOSISI KATALITIK METANA.

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

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada tanggal : 22 Juni 2011

Yang menyatakan,



(Hendro)

## ABSTRAK

Nama : Hendro  
Program Studi : Teknik Kimia  
Judul : Pemodelan Computational Fluid Dynamics (CFD) Reaktor Pelat Sejajar untuk Reaksi Dekomposisi Katalitik Metana

Menentukan karakteristik reaktor pelat sejajar dapat dilakukan dengan pemodelan dan simulasi dengan menggunakan pemrograman komputer, *Computational Fluid Dynamics* (CFD). COMSOL Multiphysics adalah salah satu program CFD. Fokus penelitian ini adalah mengenai pembuatan model yang dapat mengintegrasikan tiga persamaan (neraca massa, energi dan momentum). Sehingga dapat digunakan untuk memperoleh informasi mengenai hidrodinamik, pola aliran serta fenomena perpindahan dan mengetahui pengaruh kondisi operasi terhadap kinerja reaktor pelat sejajar. Kecepatan fluida dipengaruhi perbedaan tekanan, tekanan parsial hidrogen serta faktor friksi dengan dinding dan pelat. Konversi terbesar adalah 37.84% pada area pusat reaktor ( $y = -0.003$ ). Temperatur dipengaruhi akibat adanya reaksi dan panas *furnace*.

Kata kunci: *computational fluid dynamics*; dekomposisi katalitik metana; reaktor pelat sejajar

## ABSTRACT

Name : Hendro  
Study Program : Chemical Engineering  
Title : Computational Fluid Dynamics (CFD) Modeling of Parallel Plate Reactor for Catalytic Decomposition Reaction of Methane

Determining the characteristic of parallel-plate reactor can be done with modeling and simulation using computer programming, Computational Fluid Dynamics (CFD). COMSOL Multiphysics is one of CFD programs. The focus of this research is about creating a model that can integrate three equations (mass, energy and momentum balance). So it can be used to obtain information on the hydrodynamic, flow pattern, transport phenomenon and determine the influence of operating conditions on the performance of parallel-plate reactor. Fluid velocity is affected by pressure drop, the partial pressure of hydrogen and friction factor with the wall and the plate. The biggest conversion is 37.84% in the central area of the reactor ( $y = -0.003$ ). Temperature is affected due to the reaction and heat from the furnace.

Keywords: computational fluid dynamics; catalytic decomposition of methane; parallel plate reactor

## DAFTAR ISI

JUDUL .....	ii
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS.....	iii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iv
KATA PENGANTAR .....	v
HALAMAN PERNYATAAN .....	vi
ABSTRAK .....	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR .....	xi
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR SIMBOL.....	xv
BAB I.....	1
PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian .....	3
1.4 Batasan Masalah.....	4
1.5 Sistematika Penelitian .....	4
BAB II.....	6
TINJAUAN PUSTAKA .....	6
2.1 <i>Computational Fluid Dynamics</i> (CFD).....	6
2.2 Metode Elemen Hingga.....	7
2.3 Reaksi Dekomposisi Katalitik Metana.....	9
2.3.1 Kondisi Operasi Dekomposisi Metana.....	10
2.4 Reaktor Katalis Terstruktur.....	11
2.5 Katalis Terstruktur Pelat .....	13
2.6 Neraca Massa, Energi dan Momentum .....	15
2.6.1 Neraca Massa .....	15
2.5.2 Neraca Energi.....	16

2.5.3 Neraca Momentum.....	17
BAB III .....	20
METODE PENELITIAN.....	20
3.1 Rancangan Penelitian .....	20
BAB IV .....	23
PEMODELAN DAN SIMULASI.....	23
4.1 Penyusunan Model Matematis .....	23
4.1.1 Neraca Energi.....	23
4.1.2 Neraca Massa .....	25
4.1.3 Neraca Momentum.....	26
4.1.4 Kondisi Batas Skala Reaktor.....	28
4.1.5 Parameter Proses .....	29
4.2 Proses Pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics .....	31
4.2.1 Pembuatan Geometri.....	31
4.2.2 Pemasukkan model.....	36
4.3 Verifikasi Model dan Geometri .....	47
BAB V.....	49
HASIL SIMULASI .....	49
5.1 Profil Kecepatan.....	50
5.2 Profil Konsentrasi Metana-Hidrogen .....	62
5.3 Profil Temperatur .....	71
BAB VI .....	76
KESIMPULAN .....	76
6.1 Kesimpulan .....	76
6.2 Saran .....	77
DAFTAR PUSTAKA .....	78
LAMPIRAN .....	81
A. Pembuatan Geometri .....	81
B. Penentuan Kondisi Batas .....	85

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Program COMSOL .....	9
Gambar 2. 2 Substrat Anyaman Kawat (Gauze) Baja Sebelum (a) dan Setelah Dibentuk (b) (Muharam, 2007). .....	11
Gambar 2. 3 Hasil SEM Nanotube Karbon (Muharam,2007). .....	12
Gambar 2. 4 Berbagai Bentuk Material Monolit. ....	14
Gambar 3. 1 Diagram Alir Penelitian .....	20
Gambar 4. 1 Tampilan Awal COMSOL .....	32
Gambar 4. 2 Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan Multiphysics .....	33
Gambar 4. 3 Desain Reaktor .....	34
Gambar 4. 4 Desain Reaktor Dalam COMSOL.....	36
Gambar 4. 5 Subdomain Settings pada COMSOL .....	37
Gambar 4. 6 Constant pada COMSOL .....	38
Gambar 4. 7 Scalar pada COMSOL.....	39
Gambar 4. 8 Subdomain Settings Neraca Massa .....	40
Gambar 4. 9 Subdomain Settings Neraca Energi.....	41
Gambar 4. 10 Boundary Settings Neraca Energi .....	42
Gambar 4. 11 Boundary settings neraca massa.....	44
Gambar 4. 12 Subdomain Settings Neraca Momentum.....	45
Gambar 5. 1 Titik-Titik Sampel yang digunakan dalam Simulasi.....	49
Gambar 5. 2 Hasil Simulasi untuk Kecepatan Inlet (a), Outlet(b).....	50
Gambar 5. 3 Hasil Simulasi untuk Kecepatan secara Aksial .....	51
Gambar 5. 4 Pola Aliran Kecepatan Fluida (dari kanan menuju kiri) .....	52
Gambar 5. 5 Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekanan (b) pada Titik $z = 0,01$ .....	53
Gambar 5. 6 Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekanan (b) pada Titik $z = 0,05$ .....	54
Gambar 5. 7 Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a), (c), (e) dan Tekanan (b), (d), (f) di antara Pelat.....	57

Gambar 5. 8 Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekananan (b) pada Titik $y=0,02925$ .....	58
Gambar 5. 9 Perubahan Kecepatan terhadap Panjang Reaktor ( $z=0-0,32$ ; $T=800K$ ; $P=1atm$ ) .....	59
Gambar 5. 10 Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ( $y=0-0,04$ ; $T=800K$ ; $P=1atm$ ) .....	60
Gambar 5. 11 Fluks Momentum dan Distribusi Kecepatan pada Aliran dalam Tabung.....	60
Gambar 5. 12 Peningkatan Boundary Layer pada Aliran Laminar.....	61
Gambar 5. 13 Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metana Inlet (a), Outlet (b).....	62
Gambar 5. 14 Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Hidrogen Inlet (a), Outlet (b)...	63
Gambar 5. 15 Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metana (a) dan Hidrogen (b) secara Aksial .....	64
Gambar 5. 16 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Panjang Reaktor	65
Gambar 5. 17 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Panjang Reaktor .....	65
Gambar 5. 18 Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor.....	67
Gambar 5. 19 Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor.....	67
Gambar 5. 20 Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metaba (a) dan Hidrogen (b) pada Titik $z = 0,01$ .....	69
Gambar 5. 21 Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metaba (a) dan Hidrogen (b) pada Titik $z = 0,05$ .....	70
Gambar 5. 22 Selektivitas Model Reaktor .....	70
Gambar 5. 23 Hasil Simulasi untuk Temperatur Inlet(a), Outlet (b) .....	71
Gambar 5. 24 Hasil Simulasi untuk Temperatur secara Aksial .....	72
Gambar 5. 25 Perubahan Temperatur Terhadap Panjang Reaktor ( $z=0-0,32$ ; $T=800K$ ; $P=1atm$ ) .....	73
Gambar 5. 26 Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor ( $y=0-0,04$ ; $T=800K$ ; $P=1atm$ ) .....	74
Gambar 5. 27 Patahan-Patahan pada Grafik Perubahan Temperatur.....	74
Gambar 5. 28 Profil Temperatur diantara Dua Pelat pada Keadaan Steady State.	75

Gambar A. 1 Awal Geometri Reaktor .....	81
Gambar A. 2 Awal Geometri Pelat .....	81
Gambar A. 3 Awal Geometri Simetris .....	82
Gambar A. 4 Awal Geometri $\frac{1}{4}$ yang Simetris .....	82
Gambar A. 5 Meshing Geometri $\frac{1}{4}$ .....	83
Gambar A. 6 Proses Perubahan Menjadi 3 Dimensi.....	83
Gambar A. 7 Geometri Reaktor 3 Dimensi.....	84
Gambar B. 1 Kondisi Batas untuk Skala Gas dan Padat.....	85
Gambar B. 2 Kondisi Batas untuk Input dan Output .....	85
Gambar B. 3 Kondisi Batas untuk pelat, simetri dan wall .....	86
Gambar B. 4 Kondisi Batas untuk Input dan Output .....	86
Gambar B. 5 Kondisi Batas untuk pelat dan simetri.....	87
Gambar B. 6 Kondisi Batas untuk Input dan Output .....	87
Gambar B. 7 Kondisi Batas untuk pelat, simetri dan wall .....	88

## DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Perbandingan Kinerja Reaktor .....	12
Tabel 4. 1 Dimensi Pelat .....	35
Tabel 4. 2 Pengaturan Subdomain Neraca Massa .....	39
Tabel 4. 3 Pengaturan Subdomain Neraca Energi .....	40
Tabel 4. 4 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Energi .....	41
Tabel 4. 5 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa.....	43
Tabel 4. 6 Pengaturan Subdomain Neraca Momentum .....	45
Tabel 4. 7 Pengaturan Kondisi Batas Neraca Momentum .....	46
Tabel 4. 8 Kategori Error Menurut COMSOL.....	47
Tabel 5. 1 Hasil Simulasi Konversi Metana .....	66

## DAFTAR SIMBOL

$c_A$ = konsentrasi A	$\mu_m$ = viskositas campuran
$v$ = kecepatan superficial	$\mu_i$ = viskositas komponen $i$
$\mathcal{D}_{AB}$ = koefisien difusivitas gas A terhadap B	$y_i$ = fraksi mol komponen $i$
$x, y, z, r, \theta, \phi$ = arah	$M_i$ = massa molekul relatif komponen $i$
$C_v$ = kapasitas panas	$k$ = konduktivitas termal
$\rho$ = massa jenis campuran	$C_p$ = kapasitas panas
$T$ = temperatur	$M$ = massa molekul relatif
$k$ = konduktivitas termal	$\rho_b$ = densitas
$\mu$ = viskositas	$R$ = konstanta ksetimbangan gas
$p$ = tekanan	$Cp_{mix}$ = kapasitas panas campuran
$p_{cA,B}$ = tekanan kritis senyawa	$Cp_{i,j}$ = kapasitas panas komponen
$T$ = suhu	$x_{i,j}$ = fraksi mol komponen
$T_{cA,B}$ = temperatur kritis senyawa	$Mr_{mix}$ = massa molekul relatif campuran
$M_{A,B}$ = massa molekul relatif	

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Perkembangan nanoteknologi secara global telah berkembang pesat sejak tahun 1997. Salah satu nanoteknologi yang paling berkembang adalah nanokarbon. Nanokarbon adalah material padat yang terdiri atas ikatan rantai karbon berbentuk bulat maupun pipa dan memiliki ukuran kecil yaitu dalam skala nanometer. Nanokarbon dapat diperoleh melalui beberapa cara yaitu *arc discharge*, penguapan *graphite*, *laser ablation*, perengkahan langsung metana atau dengan teknologi plasma (Ermakova, 2002).

Nanokarbon yang paling banyak diteliti dan dikembangkan dari semua jenis karbon yang dihasilkan adalah karbon *nanotube* (CNT). Hal ini dikarenakan struktur dan sifat fisiknya yang unik dan dapat digunakan sebagai penyimpan hidrogen, *nanoscale transistor*, *flat-panel display*, superkapasitor, *nanoprobes*, sensor (Daenan, 2003), dan katalis.

Proses produksi CNT secara komersial umumnya menggunakan proses *arc-discharge* penguapan *graphite* dan dekomposisi plasma yang menghasilkan karbon berbentuk amorph akan tetapi proses ini membutuhkan energi yang sangat besar dan memerlukan pemurnian produk sehingga biaya produksinya sangat mahal dan sulit di *scale-up* (Li, 2000). Salah satu rute alternatif untuk memproduksi hidrogen dan karbon nanotube bermutu tinggi secara ekonomis dan simultan adalah melalui proses dekomposisi katalitik metana dengan reaksi sebagai berikut (Grujicic, 2002):



Pengembangan reaktor merupakan hal penting untuk mencapai hasil reaksi yang diinginkan, termasuk reaksi dekomposisi katalitik metana. Beberapa penelitian telah dilakukan dalam merancang reaktor untuk produksi skala besar

diantaranya dengan menggunakan jenis reaktor *fixed bed*, *spouted bed* atau *fluidized bed* atau reaktor katalis terstruktur. Namun, terdapat beberapa kendala dalam penggunaan jenis reaktor-reaktor tersebut, seperti kenaikan pressure drop pada penggunaan reaktor jenis *fixed bed* (Purwanto, 2005) serta konversi metana yang rendah untuk penggunaan reaktor *spouted bed* (Muradov, 2001) dan reaktor *fluidized bed* (Muradov, 2001; Wang, 2002; Weizhong, 2004; Morancais, 2007). Produksi CNT melalui metode dekomposisi metana dengan menggunakan reaktor katalis terstruktur juga dapat memproduksi hidrogen dengan kemurnian tinggi.

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

Namun, untuk mendapatkan dimensi reaktor berstruktur katalis pelat sejajar yang optimal terkendala berbagai hal, yaitu dalam hal biaya dan waktu. Hal biaya meliputi penyediaan umpan dan perancangan reaktor. Sedangkan hal waktu meliputi lamanya waktu penelitian yang dibutuhkan. Untuk mengatasi permasalahan ini, diperlukan suatu cara yang dikenal dengan pemodelan dan simulasi dengan menggunakan pemrograman komputer.

Sejak pertengahan tahun 2008, tim riset CNT Universitas Indonesia sudah mulai melakukan penelitian dengan reaksi pelat sejajar untuk reaksi dekomposisi katalitik metana dan penelitian pada tahap studi kinetika agar dapat digunakan pada range kondisi operasi yang lebih lebar. Kemudian persamaan yang diperoleh dari penelitian kinetika dikombinasikan dengan prinsip peristiwa perpindahan dengan *Computational Fluid Dynamics* (CFD), salah satu cara melakukan simulasi agar dapat dilihat fenomena-fenomena yang terjadi pada suatu sistem.

CFD telah banyak digunakan dan teruji mampu menyelesaikan pemodelan yang rumit. Salah satu contoh aplikasi CFD adalah COMSOL, suatu program yang menggunakan metode elemen hingga (*finite element method* = FEM) untuk

menyelesaikan model. FEM adalah sebuah teknik numeris untuk menyelesaikan persamaan differensial parsial dan persamaan integral.

Penerapan program COMSOL telah dilakukan pada penelitian sebelumnya (Firstian, 2010), tetapi masih memiliki beberapa hambatan sehingga hasil yang dicapai belum optimal, yaitu perihal kinerja reaktor yang dikehendaki (konversi  $\text{CH}_4$ , selektivitas  $\text{H}_2$ , yield  $\text{H}_2$ ). Hambatan yang ada disebabkan sulitnya untuk mengintegrasikan tiga persamaan (neraca massa, energi dan momentum) sehingga dibuat asumsi dalam dua bentuk model terpisah, yaitu neraca massa dengan neraca energi dan neraca massa dengan neraca momentum. Penyebab lainnya berupa tingkat kehalusan *meshing* pada geometri reaktor yang digunakan. Hal tersebut dapat terjadi dikarenakan keterbatasan *hardware* pada komputer yang digunakan untuk simulasi CFD tersebut.

Pada penelitian kali ini, fokus diarahkan pada pembuatan model yang dapat mengintegrasikan tiga persamaan (neraca massa, energi dan momentum) sehingga diharapkan akan menghasilkan kinerja konversi  $\text{CH}_4$ , selektivitas  $\text{H}_2$ , yield  $\text{H}_2$  yang lebih tinggi.

## 1.2 Rumusan Masalah

Perumusan masalah pada penelitian ini adalah:

Bagaimana mendapatkan model reaktor yang valid dengan menggunakan COMSOL terhadap reaksi dekomposisi katalitik metana pada reaktor pelat sejajar yang selanjutnya dapat digunakan untuk memperoleh kondisi operasi optimumnya.

## 1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan utama dari penelitian ini adalah:

- Mendapatkan model reaktor yang valid dalam reaksi dekomposisi katalitik metana reaktor pelat sejajar
- Mengetahui kinerja reaktor yang dapat digunakan sebagai dasar *scale-up*

## 1.4 Batasan Masalah

Batasan masalah yang akan dibahas pada tulisan ini adalah sebagai berikut.

1. Reaktor yang digunakan adalah reaktor dengan katalis terstruktur pelat sejajar.
2. Sistem yang digunakan *steady-state*.
3. Kinerja reaktor yang dipertimbangkan adalah konversi ( $\text{CH}_4$ ), selektivitas ( $\text{H}_2$ ), yield ( $\text{H}_2$ ).
4. Pemodelan mengintegrasikan tiga persamaan (neraca massa, energi dan momentum)
5. Data kinetika intrinsik yang didapatkan dari penelitian kinetika bubuk yang dilakukan melalui pendekatan reaktor diferensial (Wulan, 2010.)
6. Metode numerik yang digunakan adalah metode elemen hingga yang dibantu dengan software COMSOL.
7. Validasi dengan membandingkan terhadap data eksperimen yang telah berjalan (Iskandar, 2009).

## 1.5 Sistematika Penelitian

### BAB I Pendahuluan

Berisi latar belakang, rumusan masalah, tujuan penulisan, batasan masalah, dan sistematika penulisan.

### BAB II Tinjauan Pustaka

Berisi studi literatur secara umum dan secara khusus mengenai hal-hal yang berkaitan dengan penelitian.

### BAB III Metode Penelitian

Berisi penjelasan mengenai prosedur penelitian secara umum seperti diagram alir penelitian, penjelasan diagram alir, serta langkah-langkah yang diperlukan dalam pembuatan model menggunakan COMSOL.

#### BAB IV PEMODELAN DAN ANALISIS

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

#### BAB V HASIL SIMULASI

Berisi analisis dari hasil simulasi dan variasi beberapa variabel.

#### BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN

Berisi kesimpulan dari hasil penelitian serta saran untuk penelitian selanjutnya.



## BAB II TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 *Computational Fluid Dynamics (CFD)*

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

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

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

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

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

Elemen kedua yaitu *solver*, atau penyelesaian masalah (perhitungan). Ada tiga metode numerik yang digunakan oleh CFD, yaitu metode *finite different*,

metode elemen hingga, dan metode spektral. Dalam melakukan perhitungan, ketiga metode ini mengikuti langkah-langkah berikut :

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

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

## 2.2 Metode Elemen Hingga

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

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

Metode elemen hingga pertama kali dibuat untuk menyelesaikan masalah elastisitas kompleks dan analisis struktur dalam teknik sipil dan *aeronautical*.

Metode elemen hingga dikembangkan oleh Alexander Hrennikoff (1941) dan Richard Courant (1942).

Berbagai macam spesialisasi dalam teknik mesin (seperti *aeronautical*, biomekanikal dan industri otomotif biasanya menggunakan metode elemen hingga terintegrasi dalam mendesain dan mengembangkan produk mereka. Metode elemen hingga dapat menggunakan visualisasi detil ketika strukturnya bengkok ataupun diputar dan menunjukkan distribusi tegangannya. Perangkat lunak metode elemen hingga menyediakan pilihan simulasi yang luas untuk mengontrol kompleksitas model dan analisis dari suatu sistem.

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

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

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

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

Salah satu perangkat lunak yang menggunakan metode *finite element* sebagai dasar perhitungan adalah COMSOL Multiphysics, dengan tampilan COMSOL ditunjukkan pada Gambar 2.1. COMSOL Multiphysics adalah perangkat

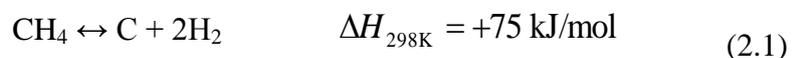
lunak yang dapat menganalisis dan menyelesaikan berbagai aplikasi fisika dan teknik, terutama yang berfenomena ganda, yang dikenal sebagai multiphysics. COMSOL dapat dijalankan dalam berbagai sistem operasi (Windows, Mac, Linux, Unix). COMSOL Multiphysics juga dapat memasukkan sistem persamaan diferensial parsial ganda. Ada beberapa alasan yang mendasari penggunaan COMSOL dalam penelitian ini, yaitu: program ini merupakan program *user friendly* yang membuat penggunaanya mudah dalam memasukkan modelnya sendiri dan parameter-parameter koefisien lainnya, kondisi batas, kondisi awal dan hubungannya dengan fenomena fisika lain. Kedua, program ini dibuat berdasarkan MATLAB, sehingga seluruh kegunaan pemrograman yang diperlukan untuk menyusun model bertingkat kesulitan tinggi tersedia. Ketiga, program ini berdasar pada gambar geometri dan fenomena-fenomena yang terjadi pada model tersebut.



Gambar 2. 1 Program COMSOL

### 2.3 Reaksi Dekomposisi Katalitik Metana

Reaksi dekomposisi katalitik metana adalah reaksi pemutusan ikatan C-H dari metana menjadi komponen yang lebih sederhana yaitu hidrogen dan karbon dengan reaksi (Grujicic, 2002):



Nilai energi bebas Gibbs ( $\Delta G_r^o$ ) untuk reaksi perengkahan metana berkurang dengan kenaikan temperatur dari positif menuju negatif. Pada temperatur yang lebih besar dari 800 K, harga  $\Delta G_r^o$  menjadi negatif (Stenfield, 1995). Nilai  $\Delta H_r^o$  yang positif pada Persamaan 2.1 menandakan reaksi bersifat endotermis. Akan tetapi, suhu yang tinggi memerlukan energi yang tinggi pula sehingga kurang efisien. Temperatur reaksi memegang peranan penting dalam

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

Perkembangan penelitian dekomposisi katalitik metana secara umum dapat dibagi menjadi 2 jenis, yaitu:

1. Dekomposisi metana secara termal (*thermal cracking*) yang menghasilkan hidrogen dan karbon hitam.
2. Dekomposisi katalitik metana dengan menggunakan katalis logam transisi (Fe, Co, dan Ni) yang menghasilkan jenis material karbon yang memiliki ukuran partikel nanometer yang biasa disebut dengan nanokarbon.

### 2.3.1 Kondisi Operasi Dekomposisi Metana

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

#### 1. Temperatur Operasi

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

Meskipun memiliki dampak negatif, penggunaan temperatur tinggi menyebabkan jumlah karbon yang terbentuk menjadi lebih banyak. Hasil uji produk membuktikan bahwa CNT hanya akan terbentuk pada temperatur lebih tinggi daripada temperatur terbentuknya karbon *nanofiber* pada umumnya. Karbon yang terbentuk pada temperatur yang lebih tinggi juga akan mempunyai bentuk yang lebih teratur dengan ketebalan yang seragam

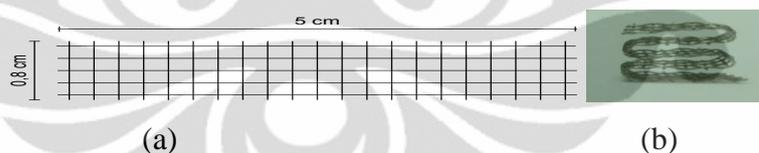
(Resketenko, 2003), tetapi penambahan temperatur juga akan menyebabkan diameter dan ketebalan dinding dari *nanotube* yang telah terbentuk semakin mengecil (Sinnots, 1999), sedangkan yang diharapkan adalah *nanotube* karbon dengan dinding yang tebal. Semua hal ini membuat tidak ada temperatur tertentu yang mutlak untuk reaksi ini. Temperatur optimal untuk reaksi dekomposisi metana agar terbentuk produk CNT yang diharapkan berada pada temperatur antara 650-750°C.

## 2. Tekanan Operasi

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

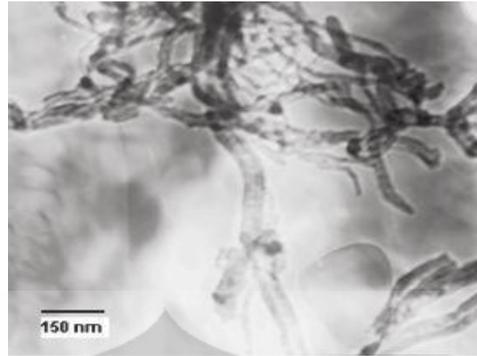
### 2.4 Reaktor Katalis Terstruktur

Muharam dan Widodo, 2007 telah melakukan riset menggunakan reaktor katalitik terstruktur (*wire mesh*) skala kecil (1 cm diameter) untuk reaksi dekomposisi metana, seperti terlihat pada gambar 2.2. Kemudian dengan metode *dip-coating*, Ni, Cu dan Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dilapiskan sebagai katalis. Ni berfungsi sebagai inti aktif, Cu sebagai promotor dan Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> sebagai penyangga.



**Gambar 2. 2** Substrat Anyaman Kawat (Gauze) Baja Sebelum (a) dan Setelah Dibentuk (b) (Muharam, 2007).

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



**Gambar 2. 3** Hasil SEM Nanotube Karbon (Muharam,2007).

Kualitas CNT yang dihasilkan dari metode ini cukup baik dengan diameter 30-50 nm dan ketebalan dinding 10-20 nm (Gambar 2.3) dan kemurnian hidrogen mencapai lebih dari 99%. Untuk reaktor skala lab mampu beroperasi selama 33 jam dengan yield CNT sebesar 200 gr C/gr katalis dan kemurnian hidrogen 95%.

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

**Tabel 2. 1** Perbandingan Kinerja Reaktor

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

Berdasarkan keunggulan-keunggulannya, dipilih reaktor katalis terstruktur untuk dekomposisi metana menjadi CNT dan hidrogen. Meskipun penelitian yang dilakukan baru sampai tahap skala *bench*, metode ini sangat berpotensi untuk menghasilkan CNT dan hidrogen. Konversi reaktor jenis ini juga paling besar

dibandingkan reaktor lainnya. Selain itu, *pressure drop* reaktor rendah dan kualitas CNT yang dihasilkan cukup baik.

## 2.5 Katalis Terstruktur Pelat

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

Ada beberapa jenis katalis terstruktur yang sering digunakan, diantaranya (1) katalis monolitik yang terdiri dari struktur yang mempunyai kesatuan yang seragam, dengan saluran-saluran sempit yang teratur baik paralel maupun *zig-zag*, (2) katalis membran yang tidak hanya mempunyai interaksi terhadap dinding akan tetapi terjadi juga perpindahan massa melewati dinding yang permeabel (difusi) yang memiliki pori-pori yang kecil, dan (3) *arranged catalyst*, yaitu katalis terstruktur yang memberikan perpindahan massa yang relatif cepat melalui zona reaksi yang tegak lurus terhadap aliran dan biasanya untuk reaksi katalitik dua fasa.

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

Untuk memperbaiki kekurangan dari katalis terstruktur *wire mesh* (gauze), digunakan katalis terstruktur bentuk pelat dari jenis katalis monolitik. Kata

monolit berasal dari bahasa Yunani dimana mono berarti tunggal dan lithos berarti batu (Heiszwolf, 2010).

Dalam ruang lingkup teknik kimia, monolit adalah sebuah blok keramik yang berisi sejumlah saluran kecil dan paralel, seperti ditunjukkan pada Gambar 2.4. Pada bagian dinding dari katalis monolit tersebut dapat dimasukan sebuah lapisan aktif sebagai tempat terjadinya reaksi kimia. Semakin banyak saluran yang terdapat pada katalis monolit tersebut, semakin besar pula area kontak antara lapisan katalis dan fluida yang mengalir pada saluran tersebut. *Pressure drop* pada katalis monolit ini juga sangat rendah karena salurannya lurus dan paralel.



**Gambar 2. 4** Berbagai Bentuk Material Monolit.

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

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

## 2.6 Neraca Massa, Energi dan Momentum

### 2.6.1 Neraca Massa

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

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

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

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left( v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_{4} \quad (2.1)$$

dengan,

\*1 = suku akumulasi

$z$  = arah  $z$

\*2 = suku konveksi

$r$  = arah  $r$

\*3 = suku difusi

$\theta$  = arah  $\theta$

\*4 = suku reaksi

$c_A$  = konsentrasi A

$v$  = kecepatan superficial

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

terhadap B

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat persegi:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left( v_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial c_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) = \mathfrak{D}_{AB} \left( \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + R_A \quad (2.2)$$

- Koordinat bola:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_A}{\partial t} + \left( v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial C_A}{\partial \phi} \right) = \\ \mathfrak{D}_{AB} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \phi^2} \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

### 2.5.2 Neraca Energi

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

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca energi adalah konveksi dan konduksi dengan persamaan pada koordinat silinder:

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left( v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{k \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 + \\ 2\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left[ \frac{1}{r} \left( \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_r \right) \right]^2 + \right. \\ \left. \left( \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \underbrace{\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right\}}_4 \end{aligned} \quad (2.4)$$

dengan,

\*1 = suku akumulasi

\*2 = suku konveksi

\*3 = suku konduksi

\*4 = suku transformasi kecepatan aliran menjadi panas

$c_v$  = kapasitas panas

$\rho$  = massa jenis campuran

$T$  = temperatur

$k$  = konduktivitas termal

$\mu$  = viskositas campuran

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat persegi:

$$\rho C_v \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left[ \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + 2\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_x}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_y}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \mu \left\{ \left( \frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_x}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_y}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial y} \right)^2 \right\} \quad (2.5)$$

- Koordinat bola:

$$\rho C_v \left( \frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) = k \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \right] + 2\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right)^2 + \left( \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r}{r} + \frac{v_\theta \cot \theta}{r} \right)^2 \right\} + \mu \left\{ \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right]^2 + \left[ \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\phi}{r} \right) \right]^2 + \left[ \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{\partial v_\phi}{\sin \theta} \right) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right]^2 \right\} \quad (2.6)$$

### 2.5.3 Neraca Momentum

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

Fenomena-fenomena yang terjadi pada neraca momentum digambarkan dengan persamaan pada koordinat silinder:

▪ Komponen r

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_r}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left( v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 + \underbrace{\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 \\ + \underbrace{\rho g_r}_5 \end{aligned} \quad (2.7)$$

▪ Komponen  $\theta$

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

▪ Komponen z

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

dengan,

\*1 = suku akumulasi

$k$  = konduktivitas termal

\*2 = suku konveksi

$\mu$  = viskositas campuran

\*3 = suku gaya tekanan

\*4 = suku gaya viskositas

\*5 = suku gaya gravitasi

$\rho$  = massa jenis campuran

$C_v$  = kapasitas panas

$T$  = temperatur

Sedangkan untuk koordinat lainnya,

- Koordinat persegi:

- Komponen x

$$\rho \left( \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left( \frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \quad (2.10)$$

- Komponen y

$$\rho \left( \frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left( \frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial z^2} \right) + \rho g_y \quad (2.11)$$

- Komponen z

$$\rho \left( \frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_z}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_z}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left( \frac{\partial^2 v_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \quad (2.12)$$

- Koordinat bola:

- Komponen r

$$\rho \left( \frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} - \frac{v_\theta^2 + v_\phi^2}{r} \right) = -\frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 v_r) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \phi^2} \right) + \rho g_r \quad (2.13)$$

- Komponen  $\theta$

$$\rho \left( \frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} + \frac{v_r v_\theta}{r} - \frac{v_\phi^2 \cot \theta}{r} \right) = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial v_\theta}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\theta \sin \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} \right) + \rho g_\theta \quad (2.14)$$

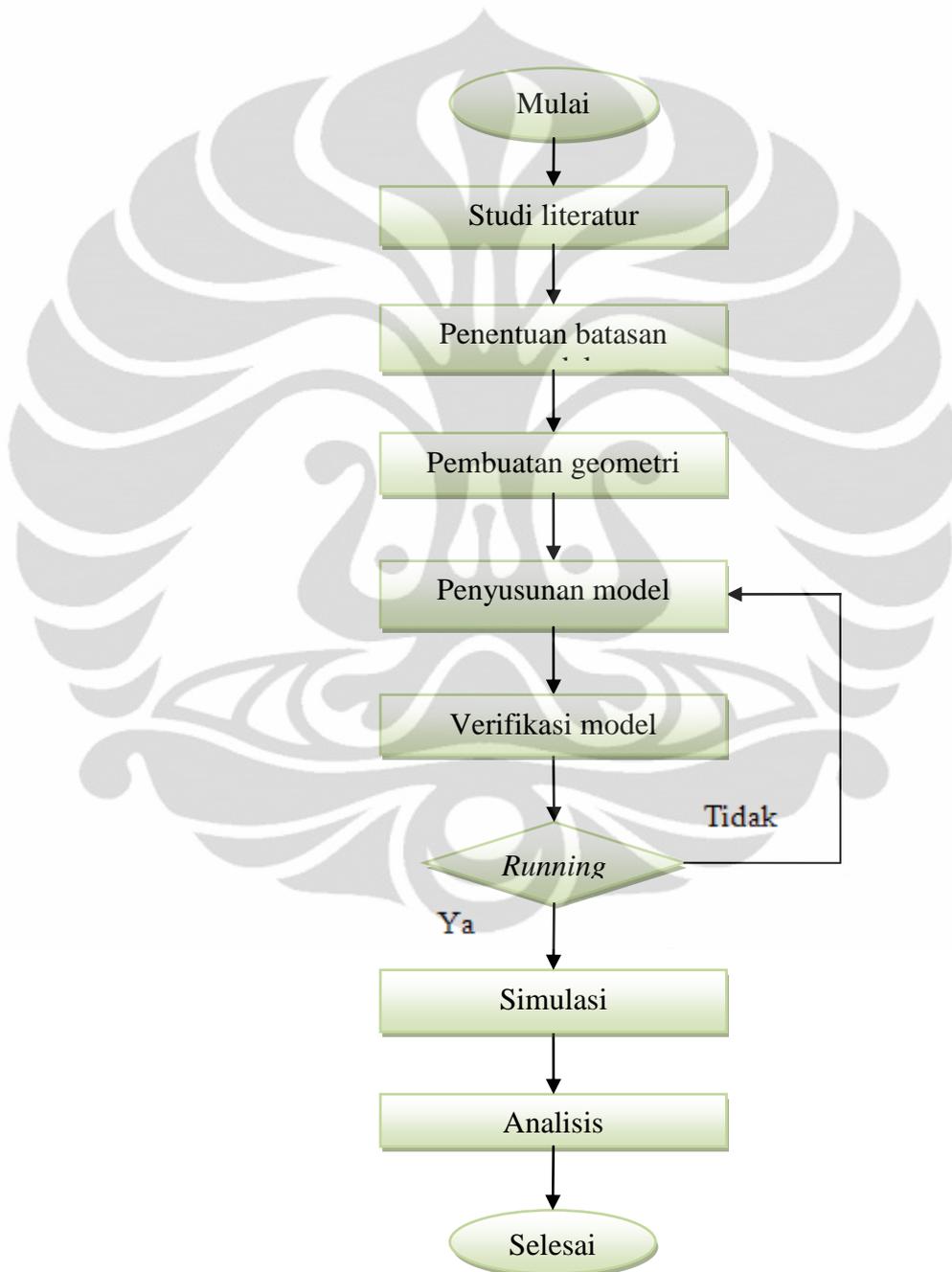
- Komponen z

$$\rho \left( \frac{\partial v_\phi}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\phi}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\phi}{\partial \theta} + \frac{v_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial v_\phi}{\partial \phi} + \frac{v_r v_\phi}{r} - \frac{v_\theta v_\phi}{r} \cot \theta \right) = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial p}{\partial \phi} + \mu \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial v_\phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (v_\phi \sin \theta) \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 v_\phi}{\partial \phi^2} + \frac{2}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial v_r}{\partial \phi} + \frac{2 \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial v_\theta}{\partial \phi} \right) + \rho g_\phi \quad (2.15)$$

## BAB III METODE PENELITIAN

### 3.1 Rancangan Penelitian

Diagram alir pada penelitian ini ditunjukkan oleh Gambar 3.1.



**Gambar 3. 1** Diagram Alir Penelitian

Beberapa langkah yang dilakukan dalam penelitian ini yang meliputi:

1. Studi literatur mengenai reaksi dekomposisi katalitik metana, reaktor pelat sejajar beserta katalis, dan *Computational Fluid Dynamics* (CFD) - program COMSOL.
2. Penentuan batasan model untuk reaktor katalis terstruktur yang terdiri dari neraca massa, neraca energi dan neraca momentum. Penentuan batasan model ini bertujuan untuk menyederhanakan pemodelan dengan memasukkan asumsi-asumsi yang telah ditetapkan sebelumnya, yaitu persamaan-persamaan neraca dalam kondisi *steady*/tunak karena pemodelan hanya menyimulasikan keadaan fluidanya saja yang berupa dekomposisi terhadap gas metana.
3. Pembuatan geometri, yaitu geometri reaktor dan geometri pelat sejajar. Geometri reaktor terbuat dari silinder sedangkan geometri pelat sejajar terbuat dari susunan balok. Kedua geometri ini dibuat se-riil mungkin dimana seluruh ukuran mengacu pada reaktor hasil scale-up (Iskandar, 2009) yang memiliki panjang efektif sebesar 32 cm.
4. Penyusunan model dari hasil penurunan rumus pada langkah penentuan batasan model. Model ini dimasukkan ke dalam ruang kerja COMSOL Multiphysics sehingga model hasil penurunan tersebut dapat dijalankan pada program COMSOL Multiphysics. Persamaan-persamaan ini dimasukkan dalam beberapa bagian dalam COMSOL Multiphysics, yaitu subdomain settings untuk persamaan neraca massa, energi dan momentum, boundary settings untuk kondisi batas neraca massa energi dan momentum, serta constants dan scalar expressions untuk persamaan-persamaan lainnya seperti koefisien difusi, konduktivitas termal dan lainnya.
5. Verifikasi model. Setelah geometri dan model dimasukkan, langkah berikut yang dilakukan adalah verifikasi model, yang terbagi menjadi dua tahap, yaitu pada tahap pertama dipastikan apakah dengan model yang telah dimasukkan program COMSOL Multiphysics dapat dirunning. Jika ya, maka langkah-langkah dalam metodologi penelitian ini dapat dilanjutkan. Namun jika tidak, maka kembali ke langkah penyusunan model (4) untuk memperbaiki kesalahan dalam pemasukan model ke dalam COMSOL. Kesalahan-kesalahan ini biasanya terjadi karena kesalahan tanda model, adanya variabel yang

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

Pada tahap selanjutnya dilakukan verifikasi terhadap data eksperimen yang telah dilakukan (Iskandar, 2009), yaitu data konversi metana ketika sudah steady (saat telah mencapai kestabilan dalam eksperimen). Verifikasi menggunakan kriteria konversi karena hal tersebut merupakan data yang paling mudah diperoleh pada tahap eksperimen. Karena pada tahap eksperimen terbentur dengan masalah biaya dan waktu.

6. Simulasi. Metode penyelesaian yang digunakan oleh *solver* pada COMSOL umumnya secara *simultaneous* dan untuk simulasi dengan geometri reaktor bentuk katalis trstruktur pelat tidak dilakukan *running* terhadap fraksi jarak. Untuk metode *sequential* juga dapat diterapkan, tetapi harus menggunakan/membuat program yang kemudian dimasukan pada bagian *solver script* sehingga persamaan dapat diselesaikan secara bertahap dimulai dari neraca massa → neraca energi → neraca momentum yang di-*looping* hingga program berhenti pada saat kriteria konvergensi yang diinginkan telah tercapai (dimana hasil output persamaan sebelumnya menjadi dasar pada input persamaan selanjutnya).
7. Analisis. Setelah menjalankan seluruh variasi, grafik hubungan antara konsentrasi metana, hidrogen, temperatur dan laju alir di-plot untuk kemudian di analisis dengan menggunakan teori-teori yang telah ada.

## BAB IV PEMODELAN DAN SIMULASI

### 4.1 Penyusunan Model Matematis

Pemodelan dilakukan untuk mensimulasikan fenomena yang terjadi pada reaktor pelat sejajar mengenai reaksi dekomposisi katalitik metana. Model-model yang digunakan merupakan penurunan dari persamaan umum yang telah dibahas pada bab sebelumnya serta dengan asumsi yang digunakan, pembuatan geometri pada program COMSOL dan mengintegrasikan model-model tersebut dalam COMSOL.

Persamaan model matematis ini terbagi menjadi tiga bagian neraca yaitu massa, energi dan momentum yang kemudian disederhanakan dengan mengikuti fenomena-fenomena yang terjadi dalam reaktor pelat sejajar.

#### 4.1.1 Neraca Energi

Neraca terbagi menjadi dua bagian yaitu untuk skala reaktor dan skala katalis, yang dihubungkan dengan transfer energi antar fasa pada lapisan batas.

##### 4.1.1.1 Skala Reaktor

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

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho C_v \left( v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right)}_2 \\
 & = k \underbrace{\left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right]}_3 \\
 & + 2\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left[ \frac{1}{r} \left( \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_r \right) \right]^2 + \left( \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} \\
 & + \underbrace{\mu \left\{ \left( \frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} \right)^2 + \left( \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right\}}_4 + \underbrace{Q}_{5}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

dimana \*1 adalah suku akumulasi, \*2 adalah suku konveksi, \*3 adalah suku konduksi, \*4 adalah suku disipasi panas dan \*5 adalah generasi panas. Penyederhanaan persamaan di atas dilakukan dengan menetapkan asumsi berikut:

- *Steady state* (tidak ada akumulasi), pengaruh penambahan transformasi energi kinetik menjadi energi panas pada sistem dianggap terlalu kecil sehingga dapat diabaikan, dan tidak ada generasi panas. Setelah mengaplikasikan asumsi maka suku \*1, \*4 dan \*5 dapat diabaikan, sehingga persamaan tersebut menjadi:

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

#### 4.1.1.2 Skala Katalis

Skala katalis juga diturunkan dari persamaan 4.1. Dengan memasukkan aliran *steady state*, tidak ada konveksi pada skala katalis, pengaruh penambahan transformasi energi kinetik menjadi energi panas pada sistem dianggap terlalu kecil, dan tidak ada generasi energi di dalam padatan katalis, maka persamaan neraca energi skala katalis menjadi:

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

#### 4.1.1.3 Neraca Energi pada Lapisan Batas

Pada lapisan batas, neraca mewakili transfer energi antara skala reaktor dan skala partikel katalis. Persamaan inilah yang menyebabkan profil di skala reaktor juga dipengaruhi oleh perubahan profil di skala katalis. Dalam persamaan matematis, fluks energi pada lapisan film adalah sebagai berikut :

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

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

$$q_0 = flux \times \Delta H = \left( rate \times \frac{W}{A} \right) \times \Delta H \quad (4.5)$$

### 4.1.2 Neraca Massa

Neraca terbagi menjadi dua bagian yaitu untuk skala reaktor dan skala katalis, yang dihubungkan dengan transfer massa antar fasa pada lapisan batas.

#### 4.1.2.1 Skala Reaktor

Persamaan untuk koordinat silinder adalah:

$$\underbrace{\frac{\partial c_A}{\partial t}}_1 + \underbrace{\left( v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \mathcal{D}_{AB} \underbrace{\left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.6)$$

dimana \*1 adalah suku difusi, \*2 adalah suku konveksi, \*3 adalah suku difusi dan \*4 adalah suku generasi massa. Sama seperti persamaan energi, penyederhanaan persamaan di atas dilakukan dengan menetapkan asumsi berikut:

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

$$\underbrace{\left( v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \mathcal{D}_{AB} \underbrace{\left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 \quad (4.7)$$

#### 4.1.2.2 Skala Katalis

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

$$\underbrace{R_A}_4 = 0 \quad (4.9)$$

#### 4.1.2.3 Neraca Massa pada Lapisan Batas

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

$$N = -D \left( \frac{\partial c_A}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + \frac{\partial c_A}{\partial z} \right) + c_A \cdot v \quad (4.10)$$

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

$$N = \text{flux} = \text{rate} \cdot \frac{W}{A} \quad (4.11)$$

dimana  $W/A$  merupakan *loading* katalis.

Untuk persamaan laju reaksi, digunakan persamaan kinetika intrinsik hasil penelitian tim CNT Teknik Kimia (2010) yaitu:

$$r_{C,M} = r_{CH_4} = \frac{\left( k_M^+ \cdot p_{CH_4} - \frac{k_M^-}{K_r \cdot K_2} \cdot p_{H_2}^2 \right)}{\left( 1 + \frac{1}{K_r} \cdot p_{H_2}^{3/2} + \frac{1}{K_r \cdot K_H^{1/2} \cdot K_2} \cdot p_{H_2}^2 \right)} \quad (4.12)$$

### 4.1.3 Neraca Momentum

Pada persamaan momentum, hanya terjadi untuk skala reaktor karena katalis berada dalam keadaan diam. Persamaan untuk neraca momentum pada silinder adalah:

- Komponen r

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_r}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left( v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} - \frac{v_\theta^2}{r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial r}}_3 \\ + \underbrace{\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_r}_5 \end{aligned} \quad (4.17)$$

- Komponen  $\theta$

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_\theta}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left( v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 \\ + \underbrace{\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_\theta}_5 \end{aligned} \quad (4.18)$$

- Komponen z

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \frac{\partial v_z}{\partial t}}_1 + \underbrace{\rho \left( v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \underbrace{\mu \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]}_4 + \underbrace{\rho g_z}_5 \end{aligned} \quad (4.19)$$

Persamaan ini dapat disederhanakan dengan asumsi sebagai berikut.

- *Steady state* (tidak ada akumulasi) dan pengaruh gravitasi terhadap kecepatan terlalu kecil serta tidak ada faktor gaya lainnya. Setelah mengaplikasikan asumsi maka suku \*1 dan \*5 dapat diabaikan sehingga persamaan menjadi:

- Komponen r

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

- Komponen  $\theta$

$$\begin{aligned} \underbrace{\rho \left( v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r v_\theta}{r} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)}_2 \\ = \underbrace{-\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta}}_3 \\ + \underbrace{\mu \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right]}_4 \end{aligned} \quad (4.21)$$

- Komponen z

$$\rho \underbrace{\left( v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial z}}_3 + \mu \underbrace{\left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right]}_4 \quad (4.22)$$

#### 4.1.4 Kondisi Batas Skala Reaktor

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

$$C = C_0 \quad (4.23)$$

$$T = T_0 \quad (4.24)$$

$$u, v, w = u_0 \quad (4.25)$$

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

$$\frac{dC}{dr} = 0 \quad (4.26)$$

$$T = T_{wall} \quad (4.27)$$

$$u, v, w = 0 \quad (4.28)$$

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

$$\frac{dC}{dL} = 0 \quad (4.29)$$

$$\frac{dT}{dL} = 0 \quad (4.30)$$

$$P = P_0 \quad (4.31)$$

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

#### 4.1.5 Parameter Proses

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

- Koefisien difusi (Bird, 1994)

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

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{cA}p_{cB})^{\frac{1}{3}}(T_{cA}T_{cB})^{\frac{5}{12}}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{\frac{1}{2}}} = a \left(\frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}\right)^b \quad (4.32)$$

dimana,

$p$  = tekanan

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

$D_{AB}$  = koefisien difusivitas

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

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

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

$T$  = suhu

$b = 1,823$

- Viskositas (Coulson, 2005)

Viskositas adalah pengukuran dari ketahanan fluida yang dapat dideformasi oleh tegangan geser dan tegangan tensil. Semakin besar viskositasnya, suatu bahan akan lebih sulit mengalir dibandingkan dengan bahan yang memiliki viskositas rendah.

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.33)$$

dimana,

$\mu_m$  = viskositas campuran

$M_i$  = massa molekul relatif

$\mu_i$  = viskositas komponen  $i$

komponen  $i$

$y_i$  = fraksi mol komponen  $i$

- Konduktivitas Termal (Coulson, 2005)

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

$$k = \mu_m \left( C_p + \frac{5R}{4M} \right) \quad (4.34)$$

dimana,

$k$  = konduktivitas termal

$R$  = konstanta gas

$\mu_m$  = viskositas campuran

$M$  = massa molekul relatif

$C_p$  = kapasitas panas

- Densitas (Persamaan Gas Ideal)

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

$$\rho_b = \frac{pM}{RT} \quad (4.35)$$

dimana,

$\rho_b$  = densitas

$M$  = massa molekul relatif

$R$  = konstanta ksetimbangan gas

- 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.

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i x_i + Cp_j x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.36)$$

dimana,

$Cp_{mix}$  = kapasitas panas campuran

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

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

$Mr_{mix}$  = massa molekul relatif campuran

## 4.2 Proses Pengerjaan dalam COMSOL Multiphysics

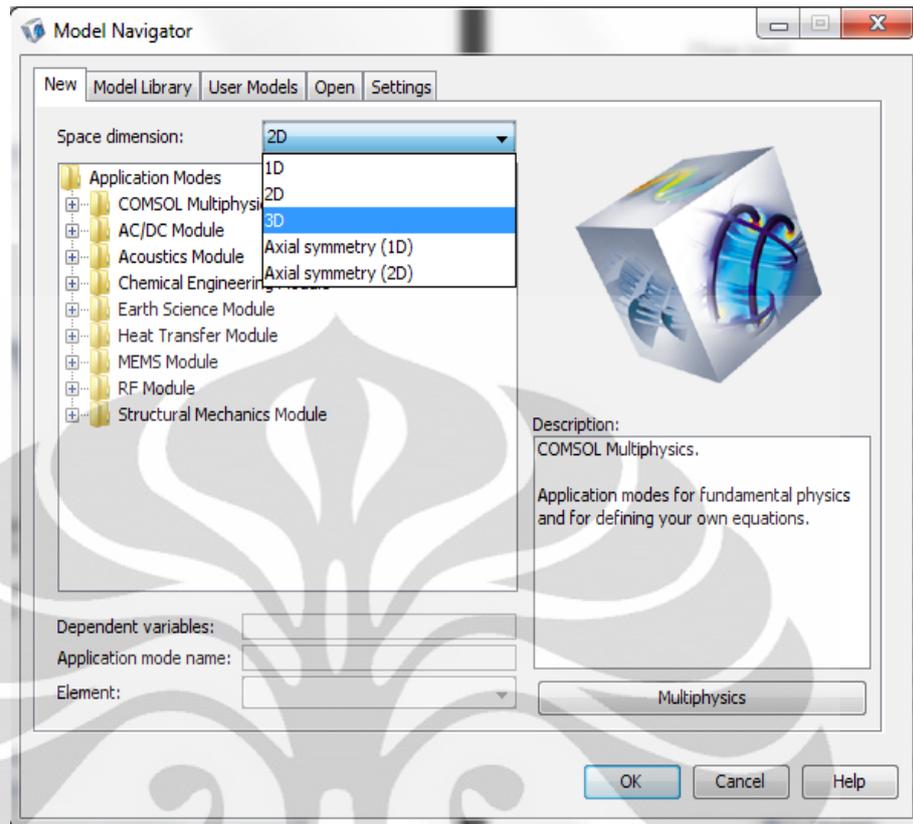
Didalam pengerjaan dengan COMSOL, terbagi menjadi beberapa tahap seperti pembuatan geometri dari reaktor, pemasukkan persamaan (neraca energi, massa, dan momentum) dan penentuan kondisi batas.

### 4.2.1 Pembuatan Geometri

COMSOL merupakan suatu program yang digunakan untuk melakukan simulasi sehingga dalam proses pengerjaannya dibutuhkan geometri yang sesuai dengan keadaan sesungguhnya. Dalam membuat geometri, langkah-langkah yang harus dilakukan adalah sebagai berikut.

1. Menentukan dimensi dari geometri dari model yang akan digunakan.

Pemodelan ini menggunakan sistem tiga dimensi dengan tujuan agar model yang dibuat menjadi lebih akurat. Untuk itu dalam *space dimension* pada tampilan awal COMSOL, penulis memilih 3D seperti ditunjukkan pada Gambar 4.1.



Gambar 4. 1 Tampilan Awal COMSOL

2. Menentukan fenomena-fenomena yang terjadi dalam model tersebut.

Pada model yang akan dibuat, fenomena dominan yang terjadi adalah perpindahan massa dan energi serta momentum. Persamaan energi hasil penurunan model seperti pada persamaan 4.2, sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module* >> *energy transport*>>*convection and conduction*>>*steady state analysis*, yaitu:

$$Q - \rho C_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (-k \nabla T) \quad (4.37)$$

Untuk perpindahan massa hasil penurunan model seperti pada persamaan 4.7, sesuai dengan persamaan yang digunakan pada modul *chemical engineering module* >> *mass transport*>>*convection and diffusion*>>*steady state analysis*, yaitu:

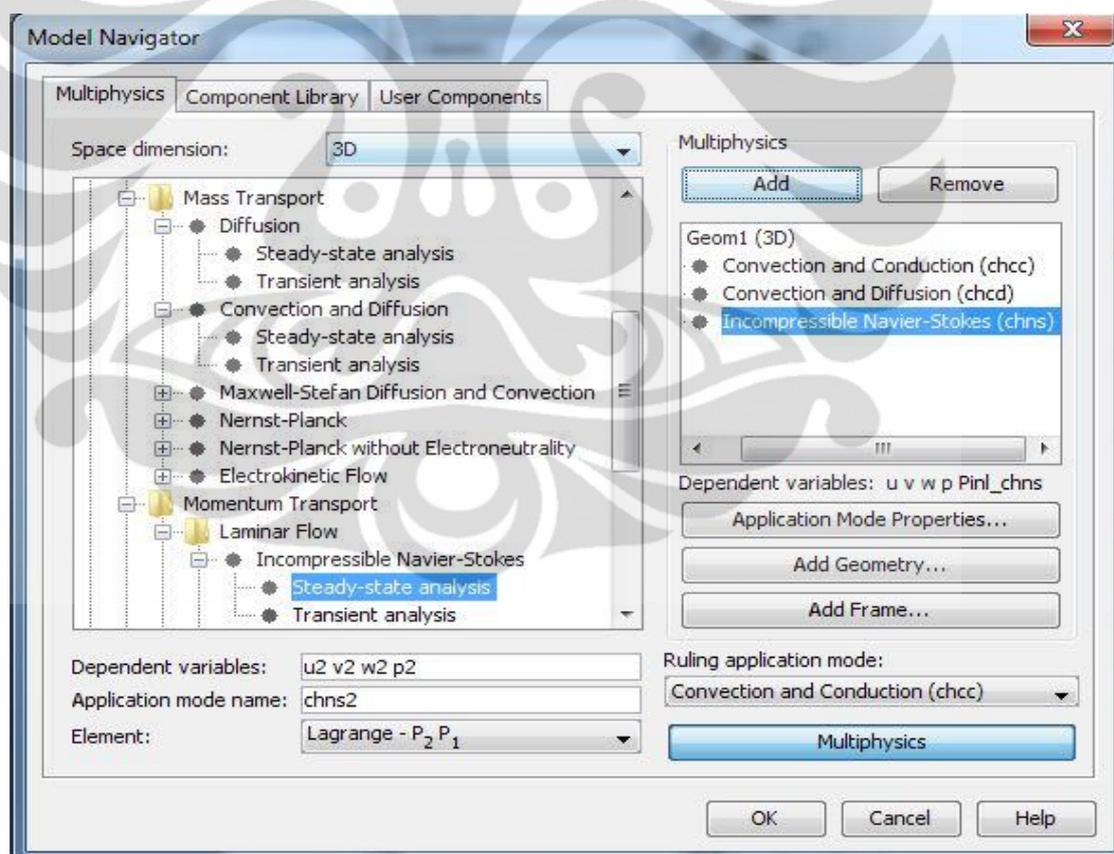
$$R - u \cdot \nabla c = \nabla \cdot (-D \nabla c) \quad (4.38)$$

Sedangkan untuk persamaan neraca momentum hasil penurunan model seperti pada persamaan 4.20 (komponen r); 4.21 (komponen  $\Theta$ ); dan 4.22

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

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pI + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)] + F \quad (4.39)$$

*Dependent variable* (variabel terikat) perlu menjadi perhatian karena akan mempengaruhi hasil yang diperoleh. Untuk modul *convection and conduction*, variabel terikatnya adalah  $T$  (temperatur), untuk modul *convection and diffusion* yang menjadi variabel terikat adalah  $c_{ch4}$  (konsentrasi  $CH_4$ ) dan  $c_{h2}$  (konsentrasi  $H_2$ ), sedangkan untuk modul *Incompressible Navier-Stokes* yang menjadi variabel terikat adalah  $u$ ,  $v$ ,  $w$ , dan  $p$ . Pengaturan tersebut dapat dilihat pada Gambar 4.2.



**Gambar 4. 2** Tampilan COMSOL Setelah Dimasukkan Multiphysics

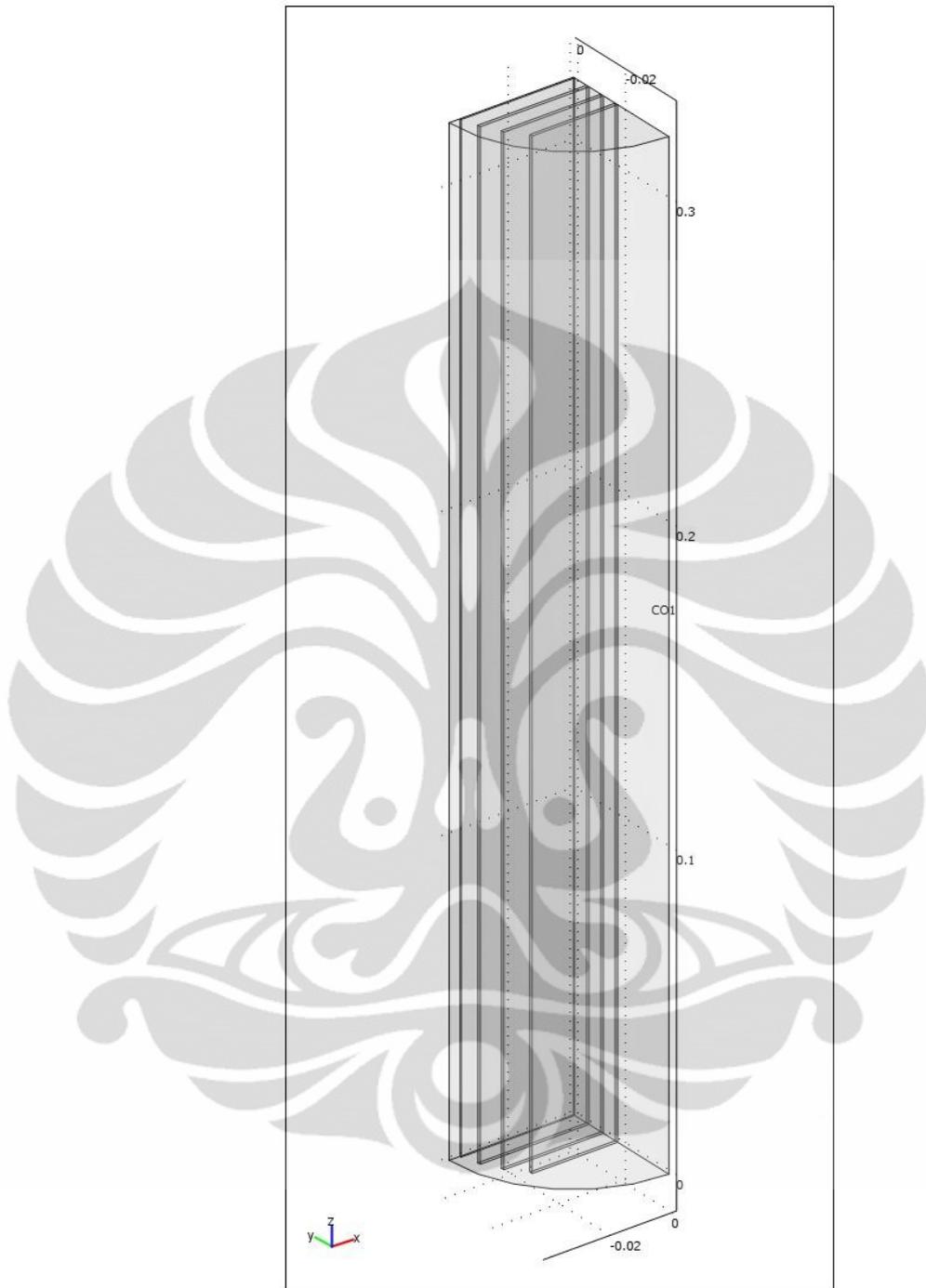


Berikut adalah dimensi-dimensi yang dimasukkan dalam pembuatan geometri pelat pada Tabel 4.1.

**Tabel 4. 1** Dimensi Pelat

No.	Dimensi			Vektor arah aksis		
	Panjang	Lebar	Tinggi	x	y	z
1	0,055	0,32	0,001	-0,0275	0	0,0175
2	0,064	0,32	0,001	-0,0320	0	0,0115
3	0,070	0,32	0,001	-0,0350	0	0,0055
4	0,072	0,32	0,001	-0,0360	0	-0,0005
5	0,070	0,32	0,001	-0,0350	0	-0,0065
6	0,064	0,32	0,001	-0,0320	0	-0,0125
7	0,055	0,32	0,001	-0,0275	0	-0,0185

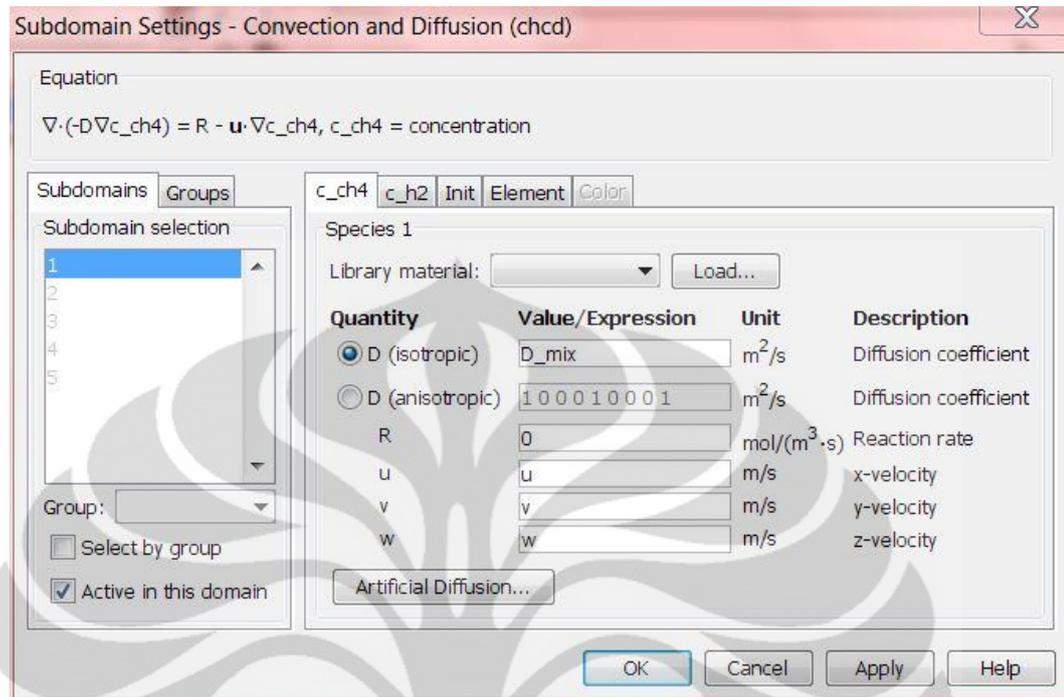
Karena keterbatasan komputer dalam menggunakan perangkat lunak COMSOL, penulis membagi reaktor menjadi empat dalam rangka mencegah *meshing* (suatu cara yang digunakan COMSOL untuk memetakan dan menghitung persamaan pada suatu geometri) menjadi sangat lama yang dikarenakan keterbatasan *memory*. Gambar 4.4 menunjukkan reaktor yang akan dibagi menjadi 4 bagian. Untuk pembuatan geometri secara detil dapat dilihat pada bagian lampiran.



**Gambar 4. 4** Desain Reaktor Dalam COMSOL

#### 4.2.2 Pemasukkan model

Langkah selanjutnya adalah memasukkan variabel-variabel sifat fisik fluida dalam *subdomain settings*. Pada modul *convection and diffusion*, data fisik yang diperlukan adalah koefisien difusi, seperti terlihat pada Gambar 4.5.



Gambar 4.5 Subdomain Settings pada COMSOL

Kemudian persamaan yang digunakan untuk mencari nilai difusivitas adalah:

$$\frac{pD_{AB}}{(p_{CA}p_{CB})^{\frac{1}{3}}(T_{CA}T_{CB})^{\frac{5}{12}}\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{\frac{1}{2}}} = a\left(\frac{T}{\sqrt{T_{CA}T_{CB}}}\right)^b \quad (4.40)$$

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

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

$$k = \mu_m \left( C_p + \frac{5R}{4M} \right) \quad (4.41)$$

Sedangkan untuk persamaan  $\mu_m$  sendiri berlaku persamaan

$$\mu_m = \frac{\sum \mu_i y_i \sqrt{M_i}}{\sum y_i \sqrt{M_i}} \quad (4.42)$$

Variabel ketiga yaitu  $\rho$  memiliki persamaan berikut,

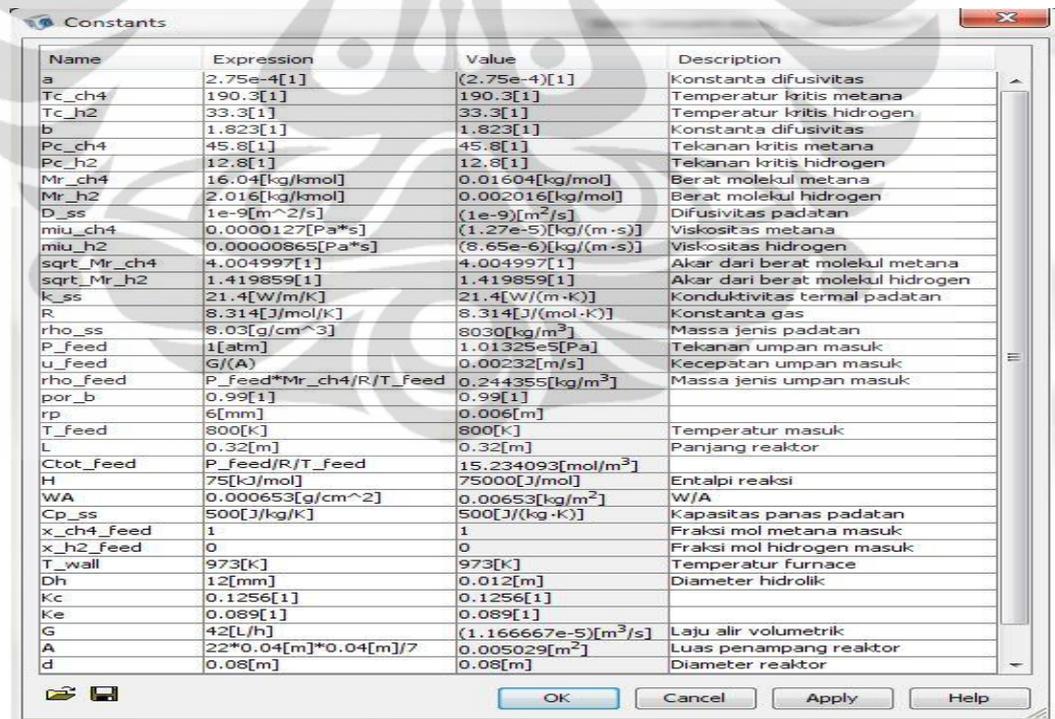
$$\rho_b = \frac{PM}{RT} \quad (4.43)$$

Variabel keempat yaitu kapasitas panas memiliki bentuk persamaan

$$Cp_{mix} = \frac{Cp_i x_i + Cp_j x_j}{Mr_{mix}} \quad (4.44)$$

Variabel kelima yaitu laju reaksi,  $rate$ , sesuai dengan Persamaan 4.12.

Berikut adalah data-data dan persamaan yang dimasukkan kedalam *constant* dan *scalar* dalam COMSOL seperti terlihat pada Gambar 4.6 dan Gambar 4.7.



Name	Expression	Value	Description
a	2.75e-4[1]	(2.75e-4)[1]	Konstanta difusivitas
Tc_ch4	190.3[1]	190.3[1]	Temperatur kritis metana
Tc_h2	33.3[1]	33.3[1]	Temperatur kritis hidrogen
b	1.823[1]	1.823[1]	Konstanta difusivitas
Pc_ch4	45.8[1]	45.8[1]	Tekanan kritis metana
Pc_h2	12.8[1]	12.8[1]	Tekanan kritis hidrogen
Mr_ch4	16.04[kg/kmol]	0.01604[kg/mol]	Berat molekul metana
Mr_h2	2.016[kg/kmol]	0.002016[kg/mol]	Berat molekul hidrogen
D_ss	1e-9[m^2/s]	(1e-9)[m^2/s]	Difusivitas padatan
miu_ch4	0.0000127[Pa*s]	(1.27e-5)[kg/(m.s)]	Viskositas metana
miu_h2	0.00000865[Pa*s]	(8.65e-6)[kg/(m.s)]	Viskositas hidrogen
sqrt_Mr_ch4	4.004997[1]	4.004997[1]	Akar dari berat molekul metana
sqrt_Mr_h2	1.419859[1]	1.419859[1]	Akar dari berat molekul hidrogen
k_ss	21.4[W/m/K]	21.4[W/(m.K)]	Konduktivitas termal padatan
R	8.314[J/mol/K]	8.314[J/(mol.K)]	Konstanta gas
rho_ss	8.03[g/cm^3]	8030[kg/m^3]	Massa jenis padatan
P_feed	1[atm]	1.01325e5[Pa]	Tekanan umpan masuk
u_feed	G/(A)	0.00232[m/s]	Kecepatan umpan masuk
rho_feed	P_feed*Mr_ch4/R/T_feed	0.244355[kg/m^3]	Massa jenis umpan masuk
por_b	0.99[1]	0.99[1]	
rp	6[mm]	0.006[m]	
T_feed	800[K]	800[K]	Temperatur masuk
L	0.32[m]	0.32[m]	Panjang reaktor
Ctot_feed	P_feed/R/T_feed	15.234093[mol/m^3]	
H	75[kJ/mol]	75000[J/mol]	Entalpi reaksi
WA	0.000653[g/cm^2]	0.00653[kg/m^2]	W/A
Cp_ss	500[J/kg/K]	500[J/(kg.K)]	Kapasitas panas padatan
x_ch4_feed	1	1	Fraksi mol metana masuk
x_h2_feed	0	0	Fraksi mol hidrogen masuk
T_wall	973[K]	973[K]	Temperatur furnace
Dh	12[mm]	0.012[m]	Diameter hidrolik
Kc	0.1256[1]	0.1256[1]	
Ke	0.089[1]	0.089[1]	
G	42[L/h]	(1.166667e-5)[m^3/s]	Laju alir volumetrik
A	22*0.04[m]*0.04[m]/7	0.005029[m^2]	Luas penampang reaktor
d	0.08[m]	0.08[m]	Diameter reaktor

Gambar 4. 6 Constant pada COMSOL

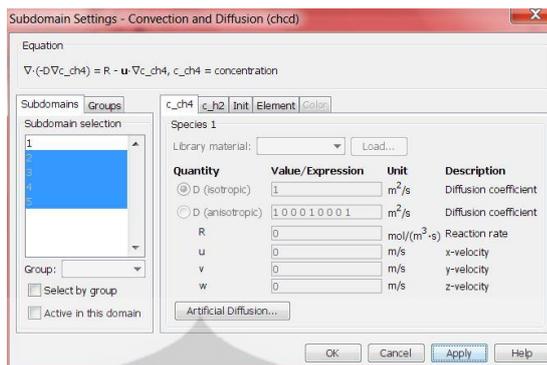
Name	Expression	Unit	Description
D_mix	$\left(\frac{a \cdot (T/1[K])}{\sqrt{(Tc_{ch4} \cdot Tc_{h2})}}\right)^b \dots$	m <sup>2</sup> /s	Difusivitas gas
k	$(Cp_{mix} + (5 \cdot R)) / (4 \cdot Mr_{mix}) \cdot miu_{mix}$	W/(m·K)	Konduktivitas termal fluida
Mr_mix	$(Mr_{ch4} \cdot x_{ch4}) + (Mr_{h2} \cdot x_{h2})$	kg/mol	Berat molekul fluida
miu_mix	$(miu_{ch4} \cdot x_{ch4} \cdot \sqrt{Mr_{ch4}}) + (miu_{h2} \dots)$	kg/(m·s)	Viskositas campuran
rho	$p \cdot Mr_{mix} / R \cdot T$	kg/m <sup>3</sup>	Massa jenis campuran
Cp_mix	$((Cp_{ch4} \cdot x_{ch4}) + (Cp_{h2} \cdot x_{h2})) / Mr_{mix}$	J/(kg·K)	Kapasitas panas campuran
Cp_ch4	$(19.87 + 5.021e-2 \cdot (T/1[K]) + 1.268e-5 \cdot (\dots)$	J/(mol·K)	Kapasitas panas metana
Cp_h2	$(28.84 + 0.00765e-2 \cdot ((T/1[K]) - 273.15) + \dots)$	J/(mol·K)	Kapasitas panas hidrogen
x_ch4	$(c_{ch4} / (c_{ch4} + c_{h2}))$	1	Fraksi mol metana
x_h2	$(c_{h2} / (c_{ch4} + c_{h2}))$	1	Fraksi mol hidrogen
rate_snoeck	$((kMplus \cdot KCH4 \cdot (P_{ch4}/1[bar])) - (kMminus \dots))$	mol/(kg·s)	Laju reaksi Snoeck
P_ch4	$x_{ch4} \cdot p$	Pa	Tekanan parsial metana
P_h2	$x_{h2} \cdot p$	Pa	Tekanan parsial hidrogen
rate	$rate\_snoeck \cdot WA$	mol/(m <sup>2</sup> ·s)	Laju reaksi simulasi
rate_buwulan	$(0.1894 \cdot ((P_{ch4}/1[atm])) / ((P_{h2}/1[atm]) \dots))$	mol/(kg·s)	Laju reaksi Wulan1
rate_baru	$(1.161 \cdot (10^8) \cdot \exp(-48000[J/mol]/R/T)) \dots$	mol/(kg·s)	Laju reaksi Wulan2
Q	$rate \cdot H$	W/m <sup>2</sup>	Panas yang dikonsumsi
kMplus	$2344 \cdot \exp(-59033[J/mol]/R/T)$		
KCH4	$0.21 \cdot \exp(-143[J/mol]/R/T)$		
kMminus	$4389 \cdot \exp(-60522[J/mol]/R/T)$		
Kr	$1.109e8 \cdot \exp(-137314[J/mol]/R/T)$		

Gambar 4. 7 Scalar pada COMSOL

Untuk *subdomain settings* (Gambar 4.8) neraca massa dapat dilihat pada Tabel 4.2.

Tabel 4. 2 Pengaturan Subdomain Neraca Massa

Subdomain	Quantity	c_ch4	c_h2
1 (skala reaktor)	D	D_mix	D_mix
	R	0	0
	U	u	u
	V	v	v
	W	w	w
2, 3, 4, 5 (skala pelat)	D	D_ss	D_ss
	R	0	0
	U	0	0
	V	0	0
	W	0	0



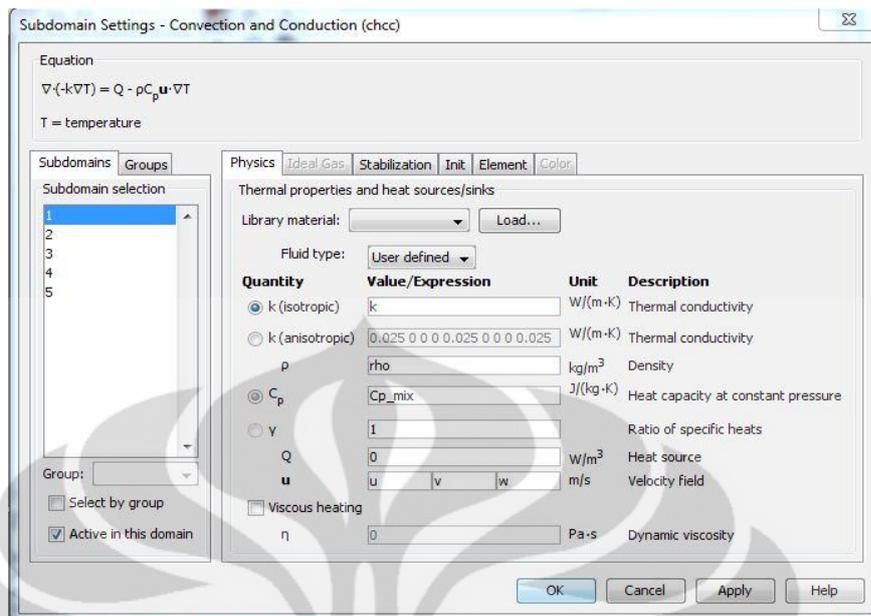
**Gambar 4. 8** Subdomain Settings Neraca Massa

Seperti yang disebutkan sebelumnya, reaksi terjadi di permukaan katalis, yaitu tepat ketika gas menyentuh permukaan katalis bukan di fasa gas ataupun di dalam fasa padatan, sehingga pada persamaan laju reaksi fasa gas dan padatan diisikan angka 0. Sebenarnya untuk katalis yang digunakan juga tidak memiliki pori sehingga tidak memiliki nilai difusivitas (massa tidak bertansportasi ke dalam pelat). Untuk merepresentasikan peristiwa ini, maka *domain*/bagian pelat dibuat menjadi tidak aktif

Selain *subdomain settings* pada neraca massa, peneliti juga memasukkan *subdomain settings* pada neraca energi seperti pada Tabel 4.3.

**Tabel 4. 3** Pengaturan Subdomain Neraca Energi

<i>Subdomain</i>	<i>Quantity</i>	<i>Properties</i>
1 (skala reaktor)	K	k
	$\rho$	rho
	$C_p$	Cp_mix
	U	u
	V	v
	W	w
2, 3, 4, 5 (skala pelat)	K	k_ss
	$\rho$	rho_ss
	$C_p$	Cp_ss
	U	0
	V	0
	W	0



**Gambar 4. 9** Subdomain Settings Neraca Energi

Selain *subdomain settings* (Gambar 4.9), variabel-variabel yang telah diketahui sebelumnya juga harus dimasukkan ke dalam *boundary settings* (Gambar 4.10) sebagai kondisi batas. Pada kondisi batas penelitian ini, terdapat 41 boundary yang dapat dibagi menjadi 4 kelompok (*convection and conduction*), seperti pada Tabel 4.4.

**Tabel 4. 4** Pengaturan Kondisi Batas Neraca Energi

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

*Boundary condition* yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Thermal insulation*

$$-n(-k\nabla T) = 0 \quad (4.45)$$

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

- *Temperature*

$$T = T_0 \quad (4.46)$$

dimana  $T_0$  adalah variabel yang dapat diisikan.

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

- *Convective Flux*

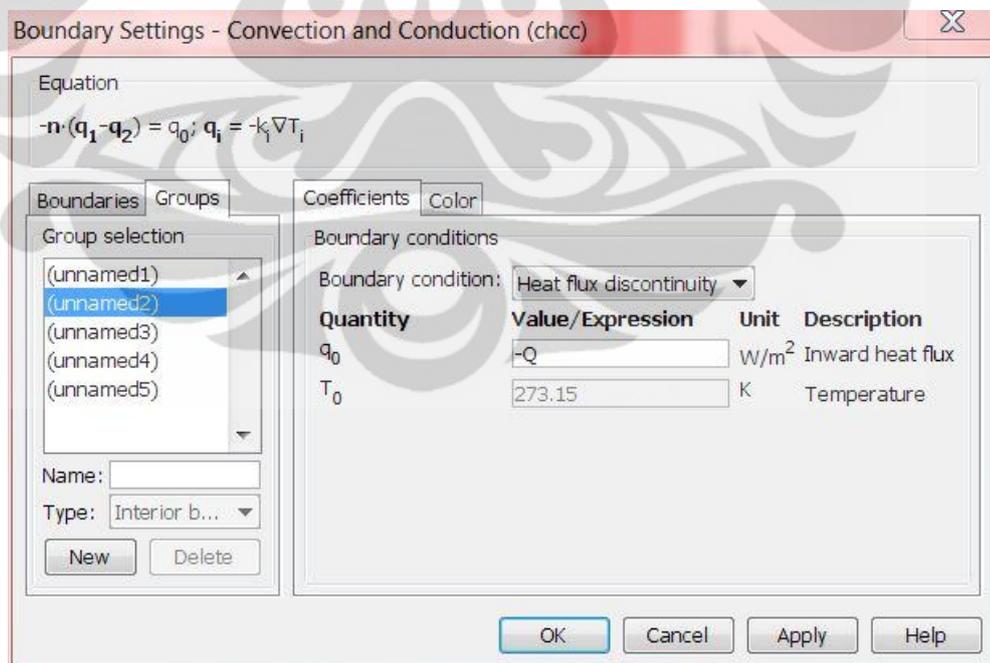
$$n(-k\nabla T) = 0 \quad (4.47)$$

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

- *Heat Flux Discontinuity*

$$-n(q_1 - q_2) = q_0; q_i = -k_i \nabla T_i \quad (4.48)$$

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



**Gambar 4. 10** Boundary Settings Neraca Energi

Sementara pada *boundary condition* (Gambar 4.11) untuk *convection and diffusion*, dibagi menjadi 4 kelompok, seperti terlihat pada Tabel 4.5.

**Tabel 4. 5** Pengaturan Kondisi Batas Neraca Massa

<i>Boundary</i>	<i>Boundary condition</i>	Nilai (c_ch4)	Nilai (c_h2)
1, 2, 33, 34 (bagian simetris)	<i>Insulation/Symmetry</i>		
3 (masukan)	<i>Concentration</i>	40,6[mol/m <sup>3</sup> ]	0 [mol/m <sup>3</sup> ]
4 (keluaran)	<i>Convective Flux</i>		
5-32, 35-41 (katalis)	<i>Flux</i>	-rate	2*rate

*Boundary condition* yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Insulation/Symmetry*

$$n \cdot N = 0; N = -D\nabla C + C \cdot u \quad (4.49)$$

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

- *Concentration*

$$C = C_0 \quad (4.50)$$

dimana  $C_0$  adalah konsentrasi awal. Persamaan ini digunakan ketika pengguna COMSOL menginginkan konsentrasi tertentu pada suatu bagian.

- *Convective Flux*

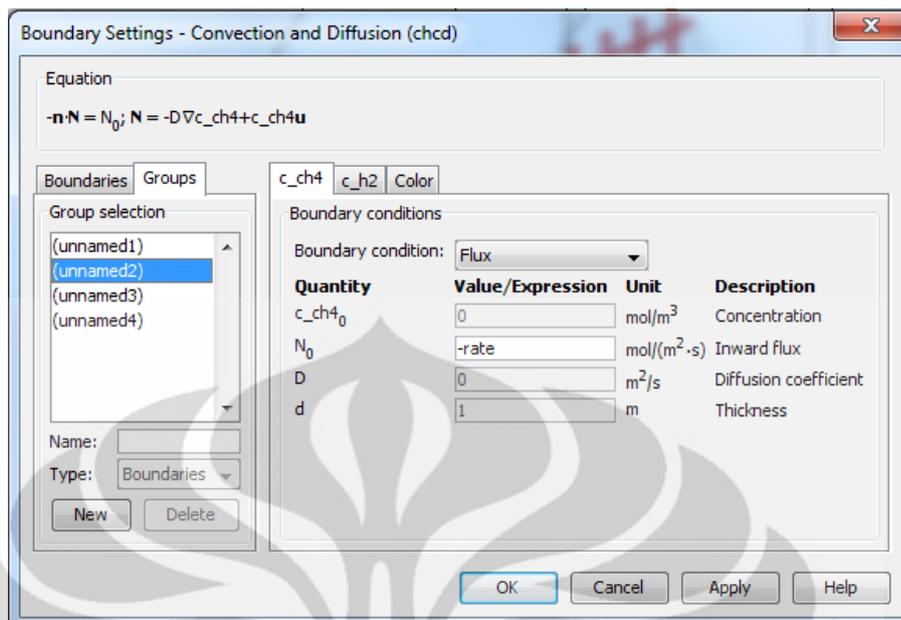
$$n(-D\nabla C) = 0 \quad (4.51)$$

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

- *Flux*

$$-n \cdot N = N_0; N = -D\nabla C + C \cdot u \quad (4.52)$$

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



Gambar 4. 11 Boundary settings neraca massa

Neraca momentum memiliki dua buah pola aliran yang berbeda sehingga perlu dilakukan perhitungan bilangan Reynold terlebih dahulu untuk dapat mengetahui pola aliran yang terjadi pada model.

Perhitungan bilangan Reynold:

$$Re = \frac{\rho \cdot V \cdot D_h}{\mu} \quad (4.53)$$

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

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

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

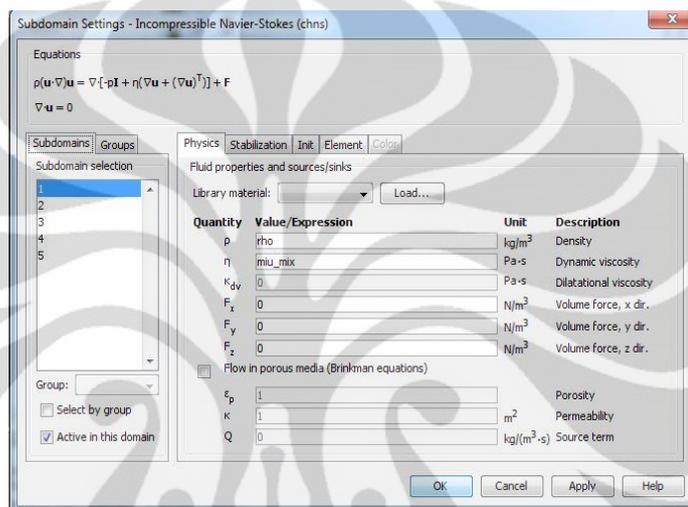
$$Re_{H_2} = \frac{0,08988 \left[ \frac{kg}{m^3} \right] \cdot 2,32 \cdot 10^{-3} \left[ \frac{m}{s} \right] \cdot 12 \cdot 10^{-3} [m]}{0,00000865 [Pa \cdot s]}$$

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

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

$$\underbrace{\left( v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial c_A}{\partial z} \right)}_2 = \underbrace{\mathcal{D}_{AB} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 c_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right)}_3 + \underbrace{R_A}_4 \quad (4.54)$$

Sedangkan untuk modul *incompressible navier-stokes*, data fisik yang diperlukan adalah viskositas dan massa jenis, seperti terlihat pada Gambar 4.12.



**Gambar 4. 12** Subdomain Settings Neraca Momentum

Untuk persamaan dan data yang dimasukkan pada *constant* dan *scalar expression* ini sama dengan asumsi pertama dengan menambahkan *constant*  $T = 973[\text{K}]$  dan menghilangkan persamaan  $P$ . Setelah memasukkan *constant* dan *scalar expression*, peneliti memasukkan data fisik ke dalam subdomain seperti pada Tabel 4.6.

**Tabel 4. 6** Pengaturan Subdomain Neraca Momentum

<i>Subdomain</i>	<i>Quantity</i>	<i>Properties</i>
1	$\rho$	rho
	$\eta$	miu_mix
	$F_x$	0
	$F_y$	0
	$F_z$	0
2,3,4,5	<i>non – active</i>	

*Non-active* pada Tabel 4.6 merupakan kondisi tidak aktif neraca momentum yang digunakan untuk geometri pelat pada reaktor karena adanya asumsi tidak adanya kecepatan di dalam pelat ( $u = 0$ ).

*Boundary condition* yang digunakan pada neraca momentum berikut persamaannya dapat dilihat pada Tabel 4.7.

**Tabel 4. 7** Pengaturan Kondisi Batas Neraca Momentum

<i>Boundary</i>	<i>Boundary condition</i>	<b>Nilai</b>
3 (masukan)	<i>Inlet, velocity</i>	u_feed
4 (keluaran)	<i>Outlet, pressure</i>	1[atm]
2 (dinding)	<i>Wall, no slip</i>	
5,8,10,12,13,15,17,18,20,22,23 (permukaan katalis)	<i>no slip</i>	
1,6,7,9,11,14,16,19,21,24-32 (bagian simetris)	<i>Symmetry boundary</i>	

*Boundary condition* yang digunakan berikut persamaannya adalah:

- *Wall, no slip*

$$u = 0 \quad (4.55)$$

Persamaan ini menunjukkan bahwa tidak ada kecepatan pada suatu bagian.

- *Inlet, velocity*

$$u = -U_0 n \quad (4.56)$$

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

- *Outlet, pressure*

$$p = p_0 \quad (4.57)$$

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

- *Symmetry boundary*

$$n \cdot u = 0, t \cdot [-pI + \eta(\nabla u + (\nabla u)^T)]n = 0 \quad (4.58)$$

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

### 4.3 Verifikasi Model dan Geometri

Verifikasi model merupakan langkah yang dibutuhkan agar program COMSOL Multiphysics ini dapat dijalankan. Ada banyak hal-hal teknis yang dapat mengganggu program COMSOL untuk dijalankan. 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, dapat dilihat pada Tabel 4.8.

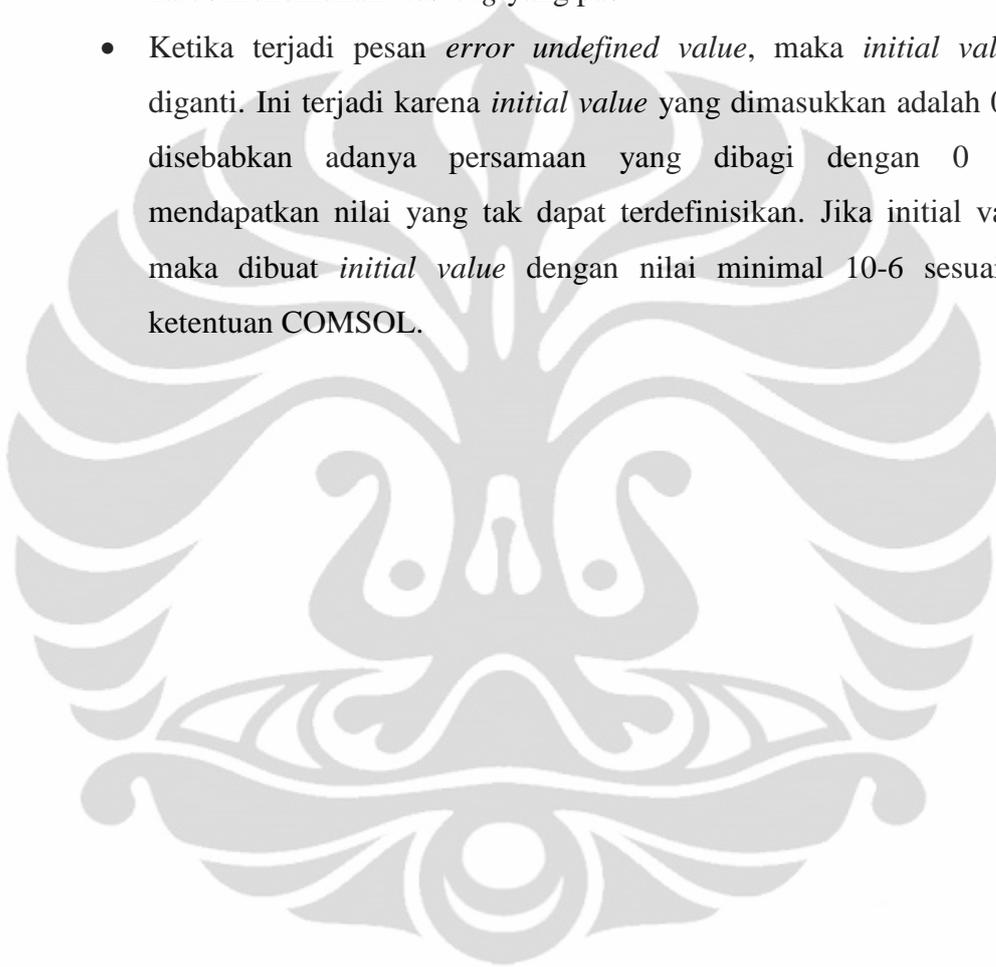
**Tabel 4. 8** Kategori Error Menurut COMSOL

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

Beberapa *error* yang dihadapi beserta pemecahannya adalah:

- Ketika terjadi pesan *error failed to find a solution*, maka yang harus dilakukan adalah mengganti initial value. Hal ini terjadi karena *initial value* yang dimasukkan melebihi dari *range* tertentu sehingga program tidak dapat mencari solusi.

- Ketika terjadi *error 4001*, maka dari *mesh*, harus dipilih jenis *meshing* yang sesuai (*extremely fine, extra fine, fine, normal, coarse, extra coarse, extremely coarse*). 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 *initial value* harus diganti. Ini terjadi karena *initial value* yang dimasukkan adalah 0. Hal ini disebabkan adanya persamaan yang dibagi dengan 0 sehingga mendapatkan nilai yang tak dapat terdefinisikan. Jika *initial value*  $\approx 0$ , maka dibuat *initial value* dengan nilai minimal  $10^{-6}$  sesuai dengan ketentuan COMSOL.



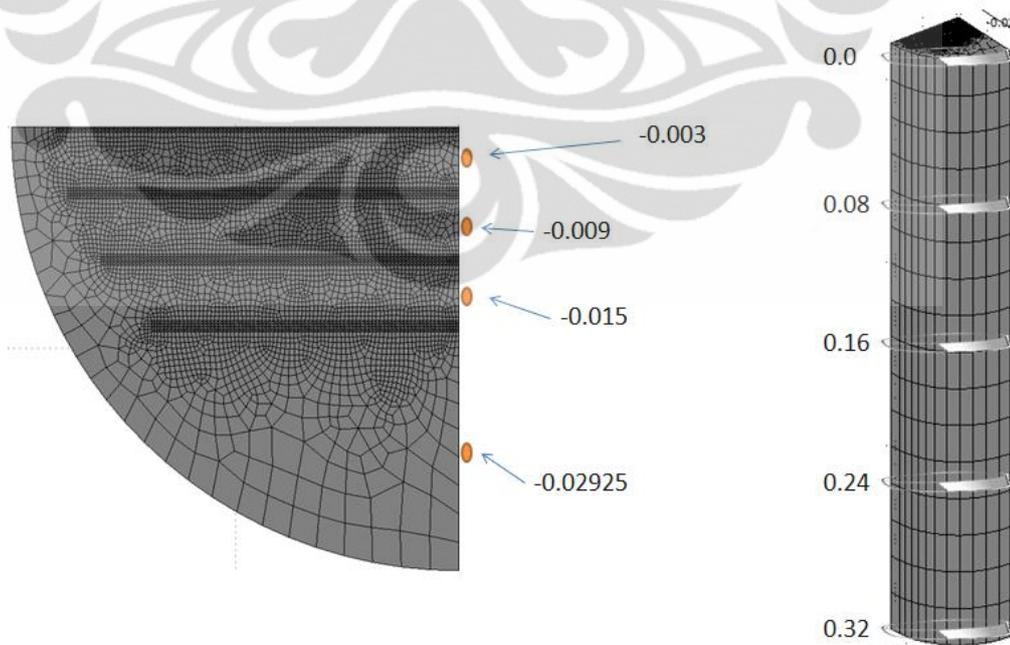
## BAB V

### HASIL SIMULASI

Bab ini bertujuan untuk menjelaskan hasil simulasi yang telah diperoleh melalui COMSOL dalam bentuk gambar dan grafik-grafik yang menunjukkan profil kecepatan, konsentrasi metana – hidrogen, dan temperatur ke arah panjang/aksial reaktor (sumbu-z) serta jari-jari reaktor.

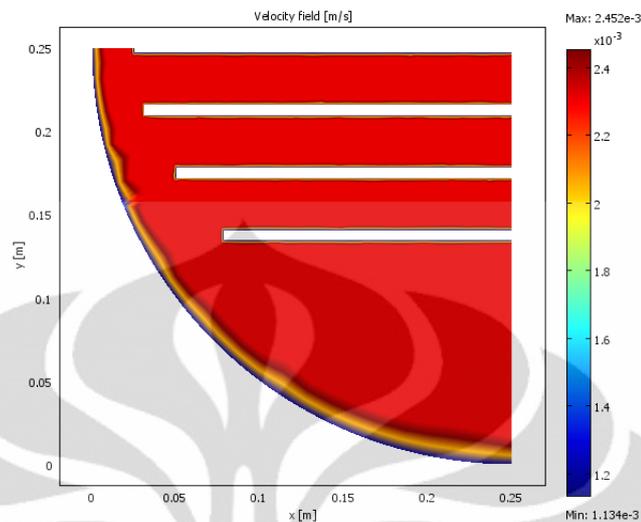
Dipilihnya kriteria-kriteria di atas berdasarkan alasan seperti dari profil kecepatan dapat diketahui pola aliran fluida serta hubungannya dengan pola pertumbuhan CNT, dari profil konsentrasi dapat daerah yang mengalami reaksi, dari profil temperatur dapat diketahui akibat adanya pemanasan yang dilakukan oleh *furnace*, serta konsumsi energi yang disebabkan oleh reaksi endotermis.

Hasil *output* COMSOL adalah dalam bentuk pemetaan pada geometri reaktor yang telah dibuat sebelumnya. Titik-titik sampel yang digunakan dapat dilihat pada Gambar 5.1. Tujuan digunakannya suatu model adalah untuk membuat persamaan matematis dari suatu fenomena. Dan validasi terhadap data eksperimen dilakukan untuk melihat apakah suatu model valid. Tetapi karena ketiadaan data, model ini tidak dapat dievaluasi.

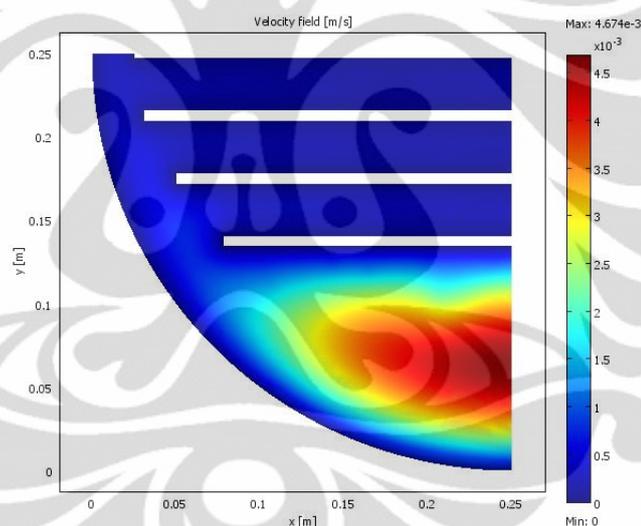


**Gambar 5. 1** Titik-Titik Sampel yang digunakan dalam Simulasi

## 5.1 Profil Kecepatan



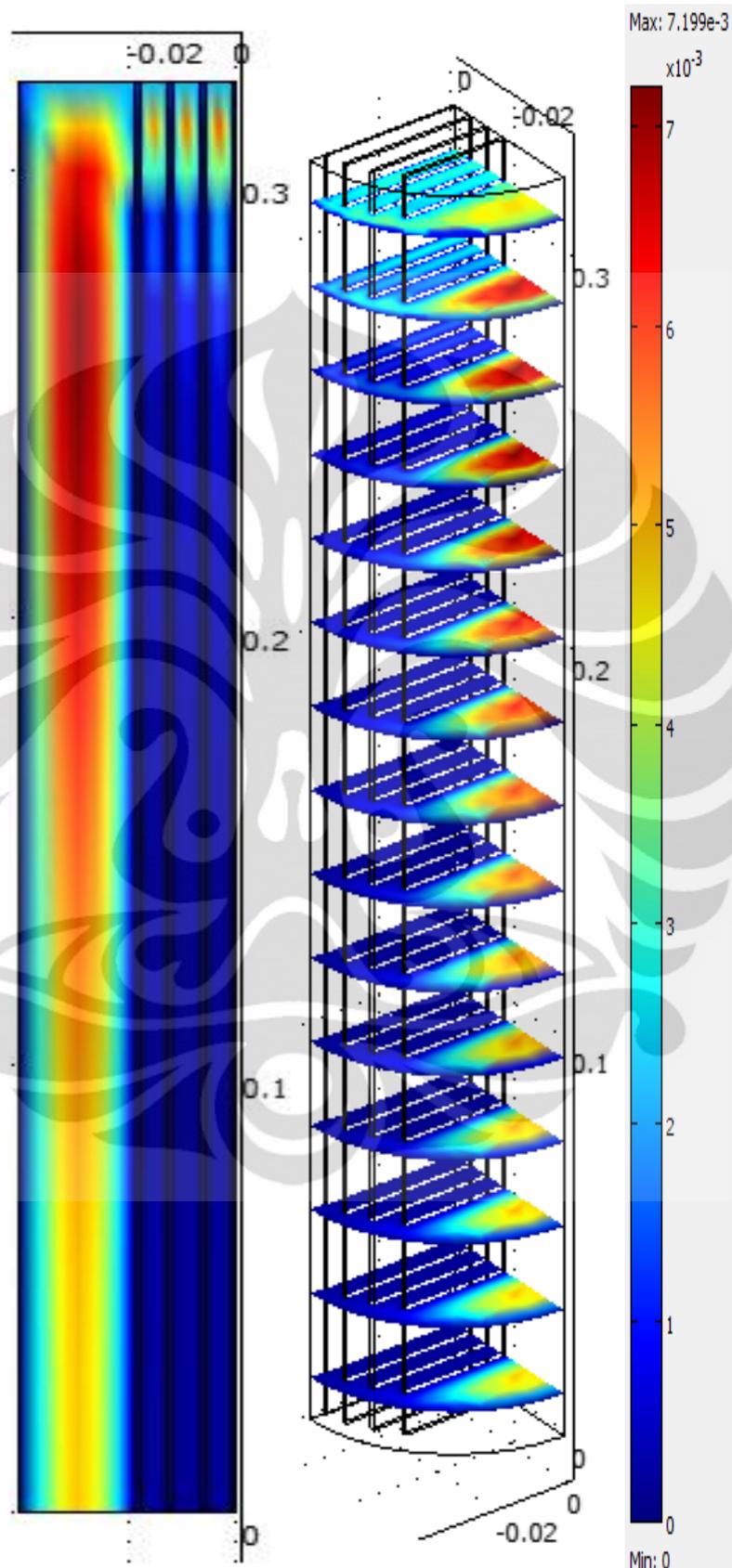
(a)



(b)

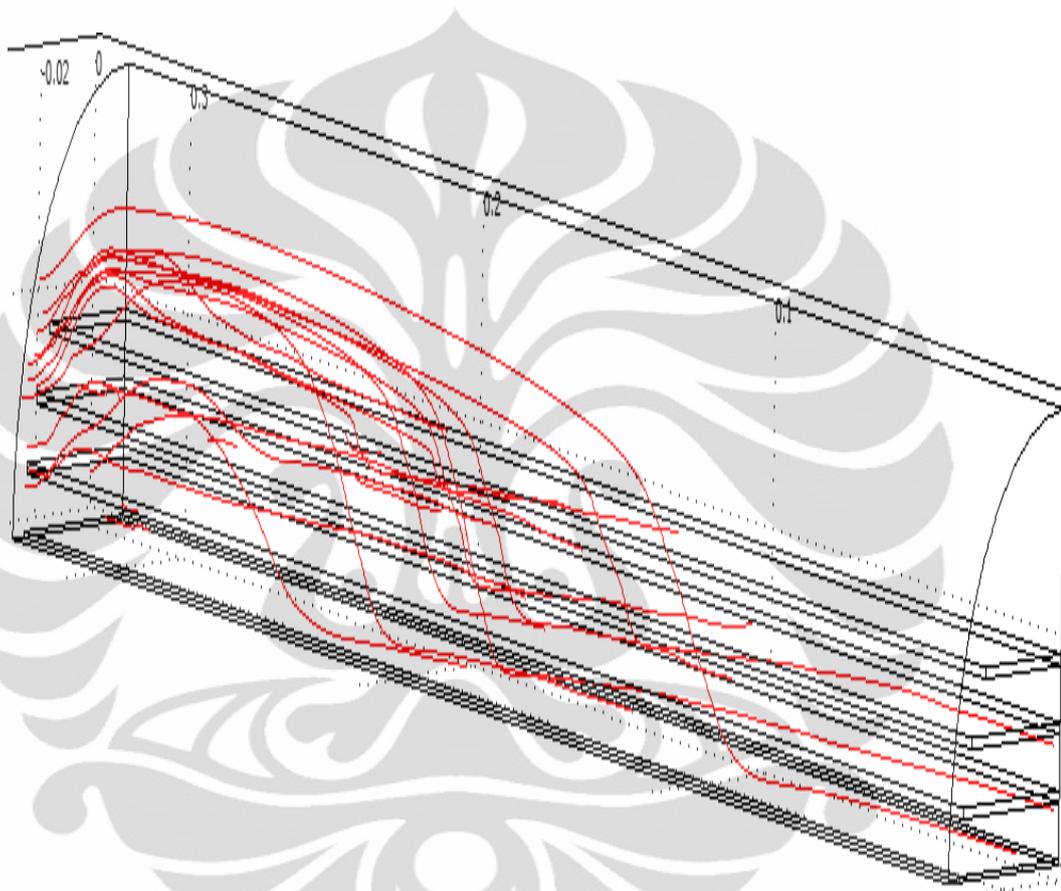
**Gambar 5. 2** Hasil Simulasi untuk Kecepatan Inlet (a), Outlet(b)

Dari Gambar 5.2 (a) dapat dilihat bahwa besar kecepatan merata pada seluruh bagian kecuali untuk bagian yang dekat dengan dinding reaktor (pada dinding reaktor besar kecepatan adalah nol) hal ini dikarenakan keadaan tersebut berada pada posisi masukan awal reaktor (kecepatan awal fluida), sedangkan Gambar 5.2 (b) memperlihatkan keadaan kecepatan pada bagian akhir reaktor dimana kecepatan terbesar berada pada bagian dekat dinding reaktor, yang diperjelas pada Gambar 5.3.



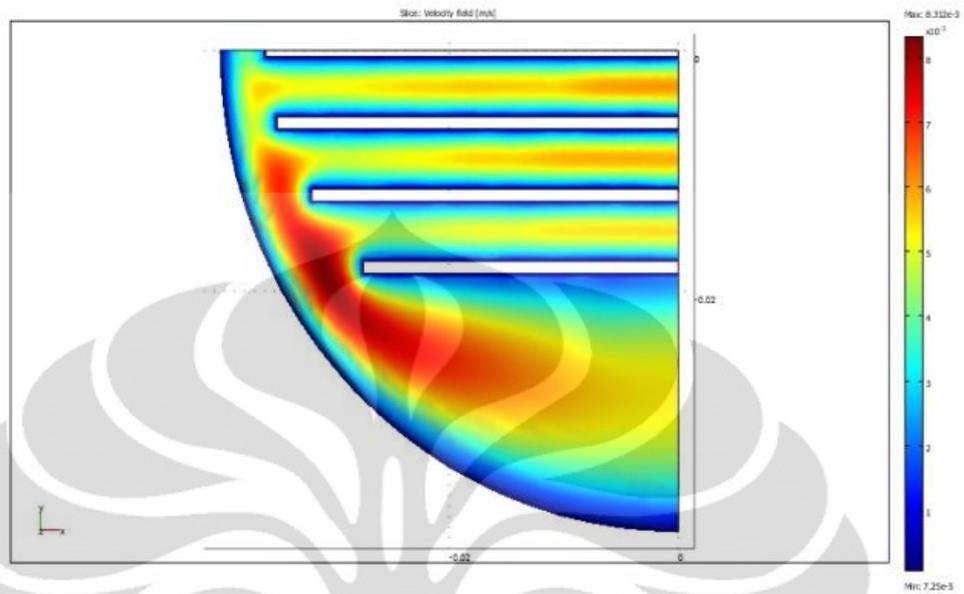
Gambar 5.3 Hasil Simulasi untuk Kecepatan secara Aksial

Gambar 5.3 menunjukkan perubahan kecepatan sepanjang arah aksial dari reaktor, dimana kecepatan terbesar terjadi pada bagian yang jauh dari pelat. Hal tersebut terjadi karena bentuk pola aliran fluida yang terjadi seperti ditunjukkan pada Gambar 5.4. Dimana aliran fluida yang terbentuk lebih banyak mengalir ke bagian yang jauh dari pelat.

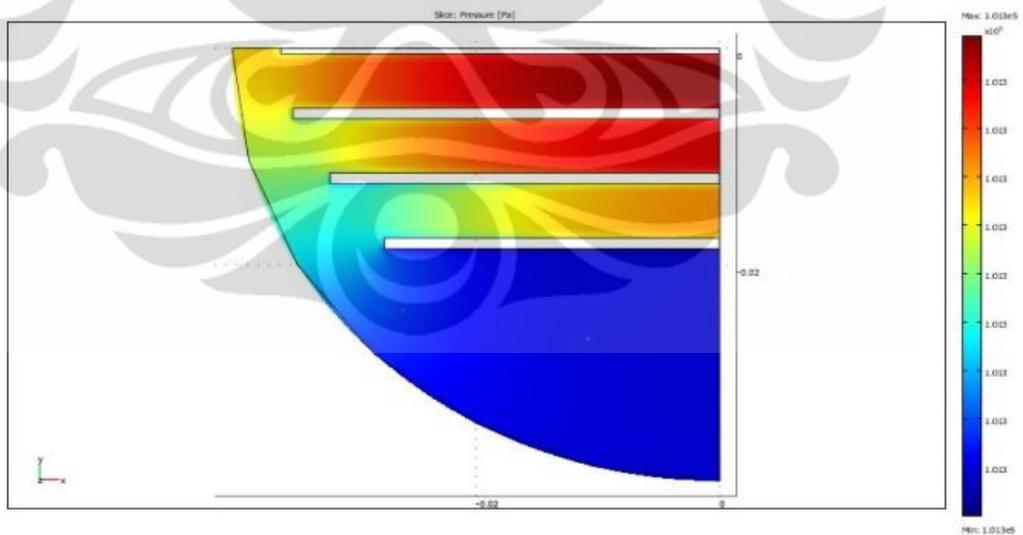


**Gambar 5. 4** Pola Aliran Kecepatan Fluida (dari kanan menuju kiri)

Aliran fluida dapat mengalir ke bagian yang jauh dari pelat dikarenakan adanya perbedaan tekanan pada setiap bagian dalam reaktor tersebut. Seperti diketahui dalam Hukum Bernoulli, bahwa fluida akan mengalir apabila terjadi perbedaan tekanan/*pressure drop*. Area di dalam reaktor memiliki perbedaan tekanan tersebut yang dapat dilihat pada Gambar 5.5 (a) dan (b) di bawah ini.



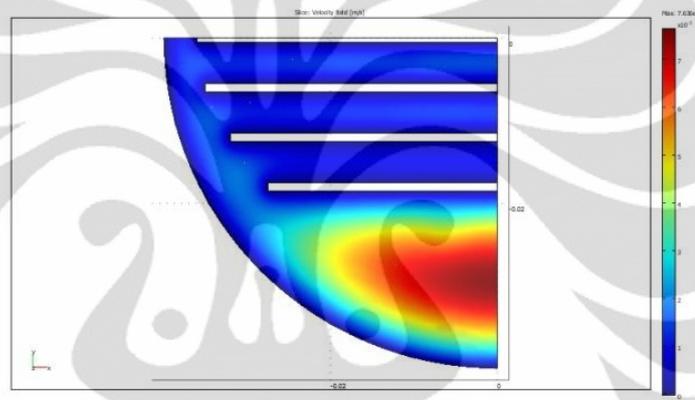
(a)



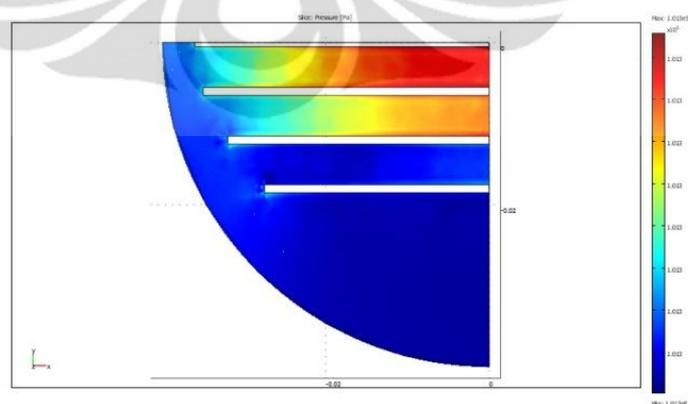
(b)

**Gambar 5. 5** Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekanan (b) pada Titik  $z = 0,01$

Pada Gambar 5.5 (a) dapat dilihat nilai kecepatan fluida memiliki nilai terbesar pada bagian pinggir reaktor menuju arah radial sumbu-y (bagian reaktor yang tidak ditempati oleh pelat-pelat). Hal ini dapat diperjelas melalui Gambar 5.5 (b) yang memperlihatkan adanya perbedaan tekanan, dimana tekanan paling besar berada di antara pelat dan semakin menurun pada bagian dekat dinding hingga arah radial sumbu-y dari penjelasan sebelumnya yang memiliki tekanan paling rendah. Kemudian aliran tersebut semakin mengarah ke bagian arah radial sumbu-y akibat adanya perbedaan tekanan yang semakin besar seperti ditunjukkan pada Gambar 5.6 (a) dan (b) berikut.



(a)



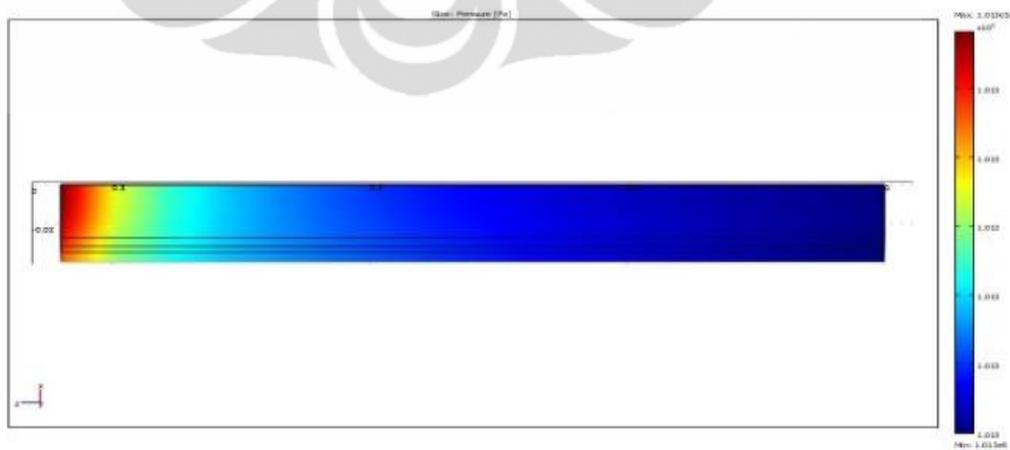
(b)

**Gambar 5. 6** Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekanan (b) pada Titik  $z = 0,05$

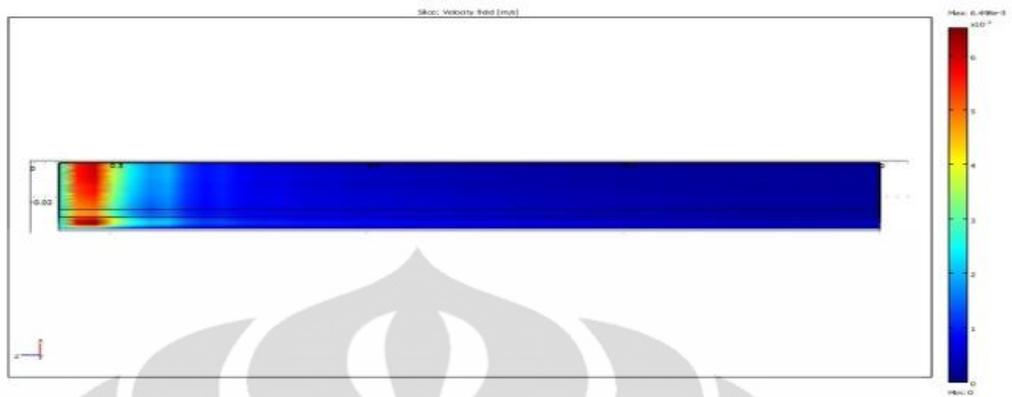
Pada arah aksial sumbu-z, aliran fluida dari awal hingga keluaran reaktor jelas memperlihatkan akibat adanya perbedaan tekanan maka nilai terbesar kecepatan berada pada awal reaktor (untuk bagian di antara pelat sesuai penjelasan sebelumnya untuk arah radial sumbu-y) dan pada bagian yang jauh dari pusat reaktor akibat adanya perubahan tekanan pada daerah tersebut yang terjadi sepanjang reaktor (pada bagian di antara pelat perubahan tekanan hanya terjadi di awal reaktor). Untuk lebih jelasnya dapat dilihat pada gambar-gambar di bawah ini.



(a)



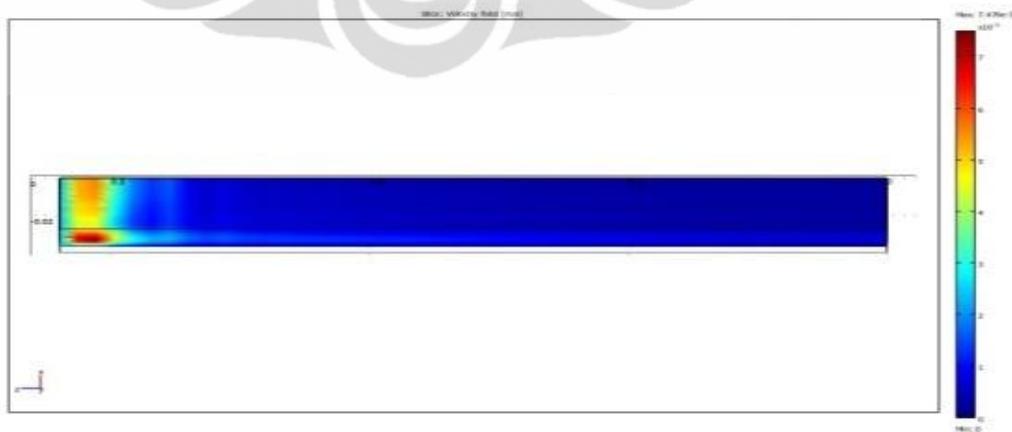
(b)



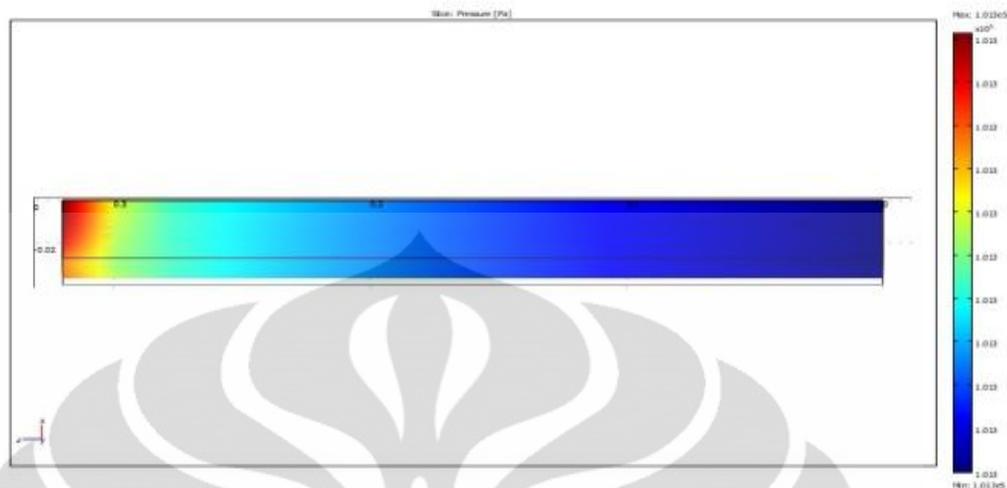
(c)



(d)



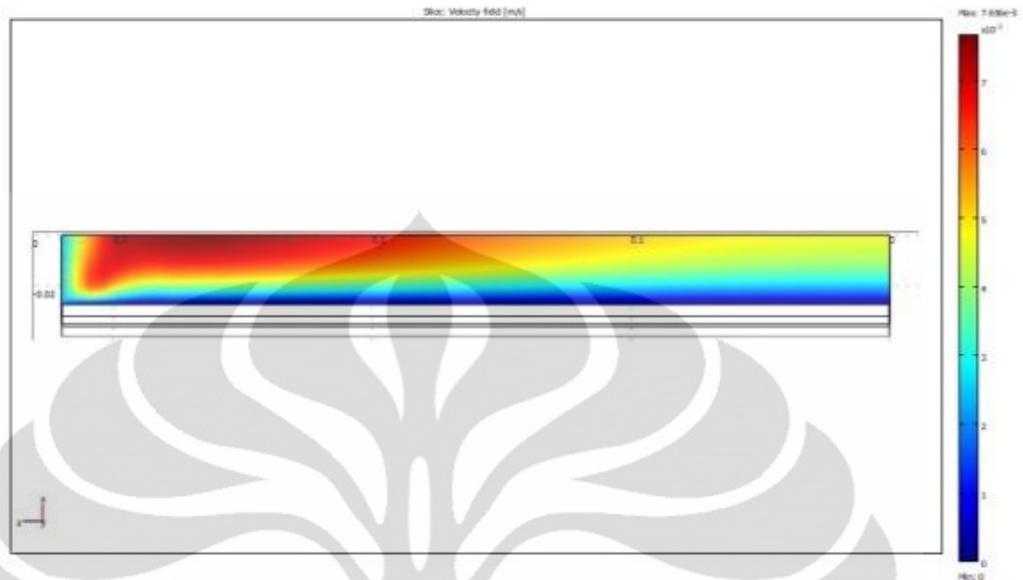
(e)



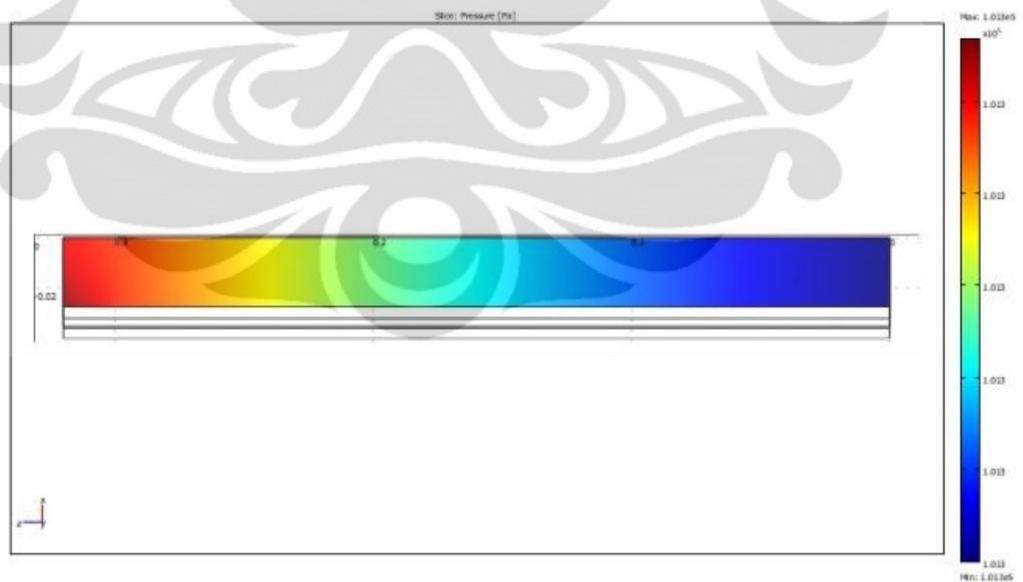
(f)

**Gambar 5. 7** Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a), (c), (e) dan Tekanan (b), (d), (f) di antara Pelat

Terlihat pada Gambar 5.7 untuk daerah di antara pelat pertama ( $y=0,003$ ), kedua ( $y=0,009$ ), dan ketiga ( $y=0,015$ ) memiliki profil yang hampir sama, hal ini dikarenakan perbedaan tekanan yang terjadi di daerah tersebut tidak jauh berbeda. Demikian halnya untuk distribusi besar kecepatan sepanjang reaktor hanya besar di bagian awal kemudian merata hingga akhir diakibatkan perbedaan tekanan yang besar hanya terjadi di awal-awal. Hal berbeda terjadi untuk daerah yang tidak ditempati oleh pelat-pelat ( $y=0,02925$ ) seperti ditunjukkan oleh Gambar 5.8 di bawah. Dimana kecepatan (a) lebih besar secara signifikan disbanding daerah-daerah di atas, yang disebabkan adanya perbedaan tekanan (b) yang lebih jelas sepanjang reaktor dan juga akibat adanya aliran dari bagian pusat reaktor yang telah dijelaskan sebelumnya pada bagian arah radial.



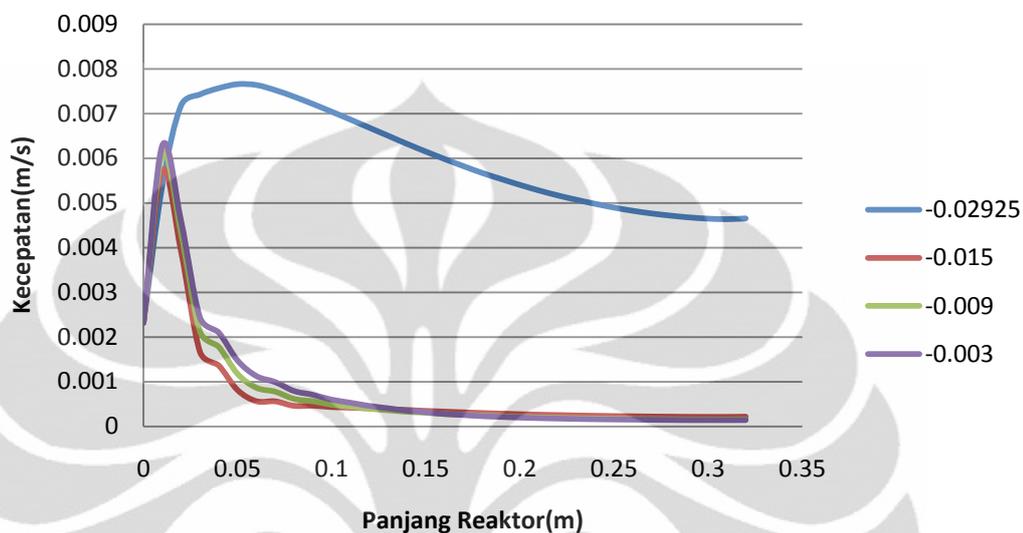
(a)



(b)

**Gambar 5. 8** Hasil Simulasi untuk Kecepatan (a) dan Tekanan (b) pada Titik  $y=0,02925$

Untuk mengevaluasi kecepatan lebih mendalam terhadap arah aksial, dibuat grafik kecepatan terhadap panjang reaktor pada posisi tertentu seperti terlihat pada Gambar 5.5.

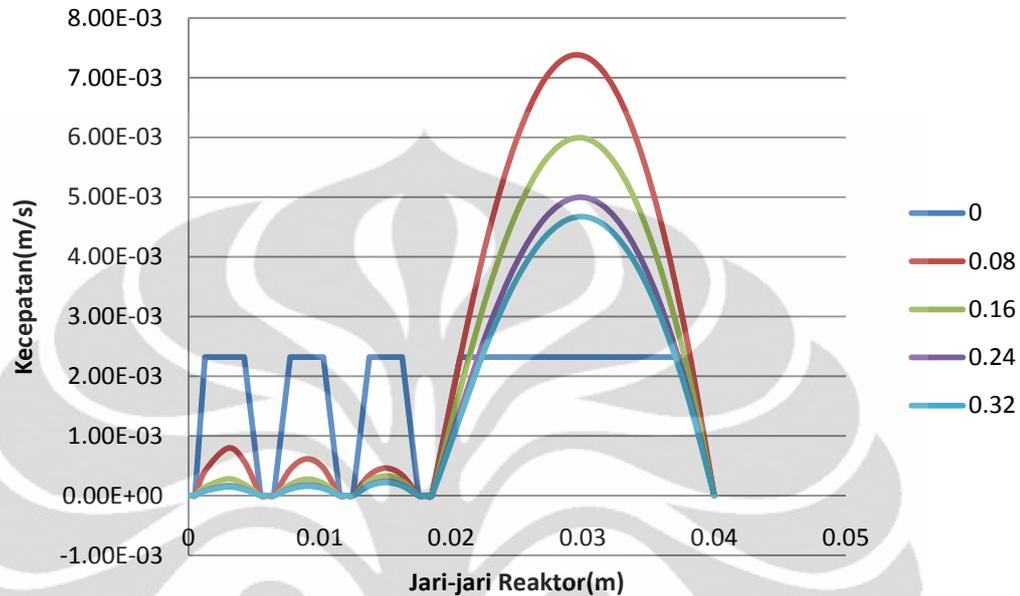


**Gambar 5. 9** Perubahan Kecepatan terhadap Panjang Reaktor ( $z=0-0,32$ ;  $T=800K$ ;  $P=1atm$ )

Pada Gambar 5.9 terlihat bahwa kecepatan fluida paling besar ada pada bagian yang jauh dari pelat dan terjadi di awal reaktor yang kemudian semakin menurun dikarenakan adanya faktor friksi dengan dinding reaktor serta permukaan pelat.

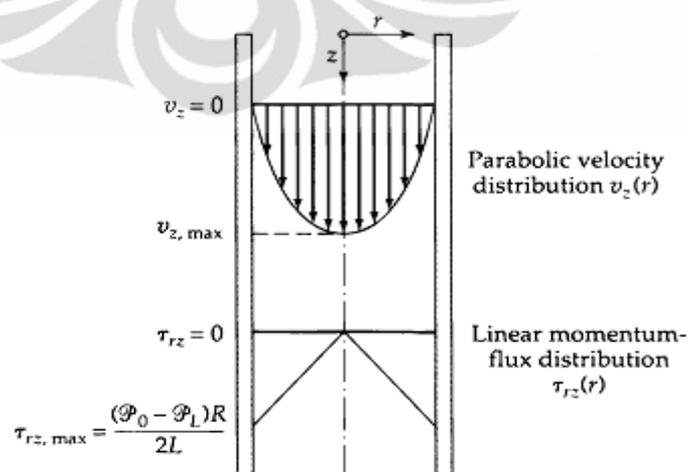
Hal ini juga dapat dilihat lebih jelas dari persamaan laju reaksi pada Persamaan 4.12. Dari persamaan terlihat bahwa tekanan parsial hidrogen yang merupakan fraksi mol hidrogen dikali tekanan total, bersifat mengurangi laju reaksi. Pada masukan awal dimana masukan berupa metana murni, laju reaksi memang semakin tinggi ketika karena tidak adanya hidrogen. Namun ketika hidrogen mulai terbentuk, pengaruh tekanan parisal metana kurang dibanding pengaruh tekanan parsial hidrogen sehingga membuat laju reaksi tersebut menjadi lebih rendah. Semakin tinggi tekanan, akan membuat laju reaksi bergradien lebih negatif (lebih curam) dengan perbandingan komposisi antara metana dan hidrogen yang sama.

Selanjutnya untuk membahas profil kecepatan yang lebih detail, dapat dilihat pada grafik antara kecepatan terhadap radial reaktor seperti yang ditunjukkan Gambar 5.10.



**Gambar 5. 10** Perubahan Kecepatan Terhadap Jari-jari Reaktor ( $y=0-0,04$ ;  $T=800K$ ;  $P=1atm$ )

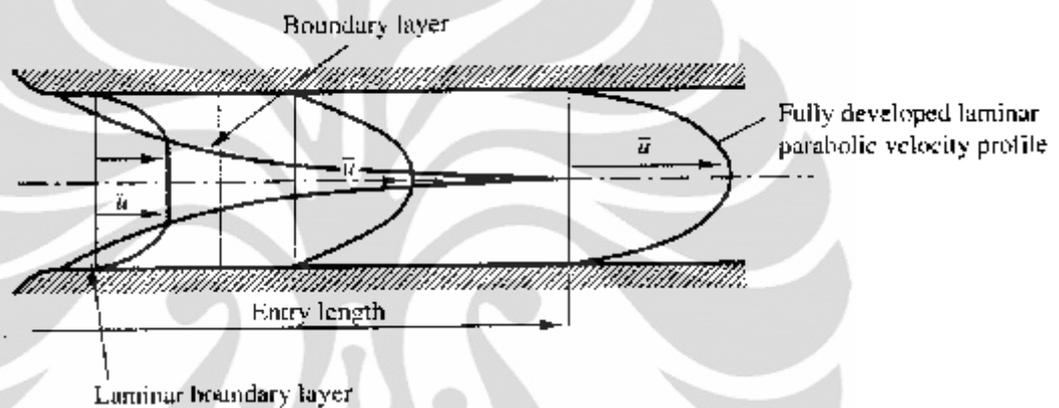
Gambar 5.10 juga menunjukkan semakin fluida mengalir, maka akan terbentuk pola aliran yg tinggi pada bagian tengah ruang kosong antar pelat (terbentuk *fully developed flow*). Bila dihubungkan dengan fluks momentum dan distribusi kecepatan pada aliran dalam tabung seperti ditunjukkan Gambar 5.11 serta Persamaan 5.1.



**Gambar 5. 11** Fluks Momentum dan Distribusi Kecepatan pada Aliran dalam Tabung

$$v_z = \frac{(\mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_L)R^2}{4\mu L} \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

Dapat dilihat pengaruh suatu daerah antara  $r = 0$  hingga  $r = R$  terhadap besar kecepatan yang dihasilkan. Dimana pada  $r = 0$  diperoleh kecepatan maksimum dan pada  $r = R$ , kecepatan akan bernilai 0. Sehingga dari persamaan tersebut akan membentuk suatu pola kecepatan berbentuk parabola, dengan titik puncak pada  $r = 0$ .

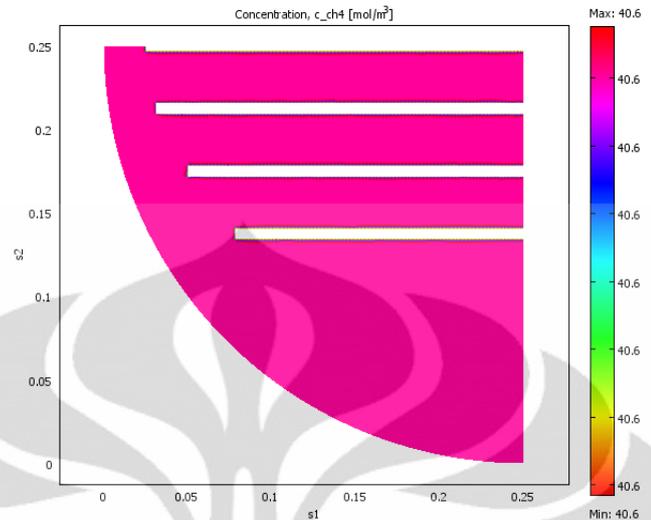


Gambar 5. 12 Peningkatan Boundary Layer pada Aliran Laminar

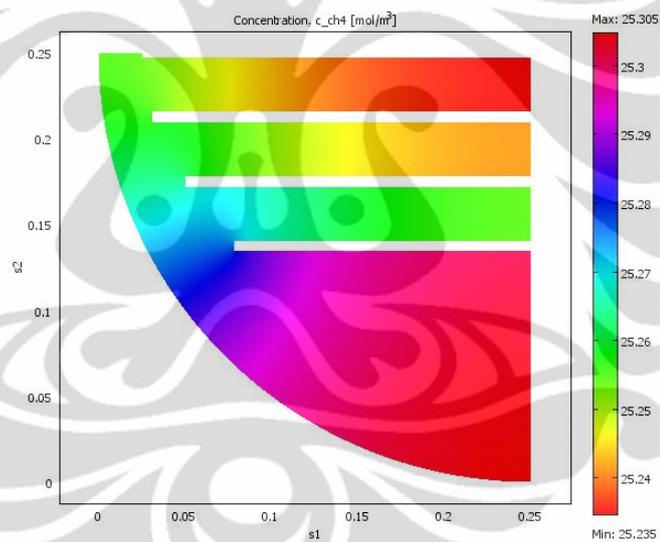
Hal ini juga sesuai dengan teori kecepatan antara dua pelat seperti ditunjukkan Gambar 5.12. Kecepatan yang naik disebabkan oleh adanya *boundary layer*. *Boundary layer* menyebabkan aliran pada posisi dekat pelat menjadi melambat akibat friksi yang disebabkan oleh gesekan antara pelat dan aliran fluida. Namun pada posisi tengah (tepat antara dua buah pelat), kecepatan akan naik akibat resultan fluks momentum dari *boundary layer*.

Sedangkan untuk fenomena kecepatan yang semakin mengecil dari pusat reaktor ( $y=0,0175$ ) kemudian membesar ( $y=0,185-0,04$ ) pada Gambar 5.10 (dari kiri ke kanan) disebabkan oleh adanya perbedaan tekanan/*pressure drop* seperti yang telah dijelaskan sebelumnya.

## 5.2 Profil Konsentrasi Metana-Hidrogen



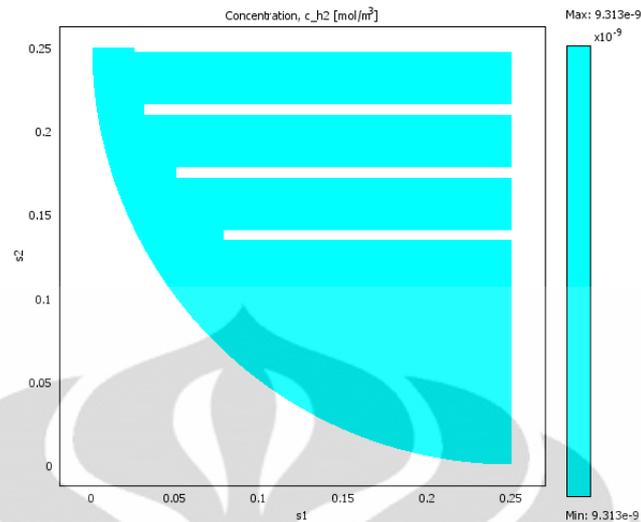
(a)



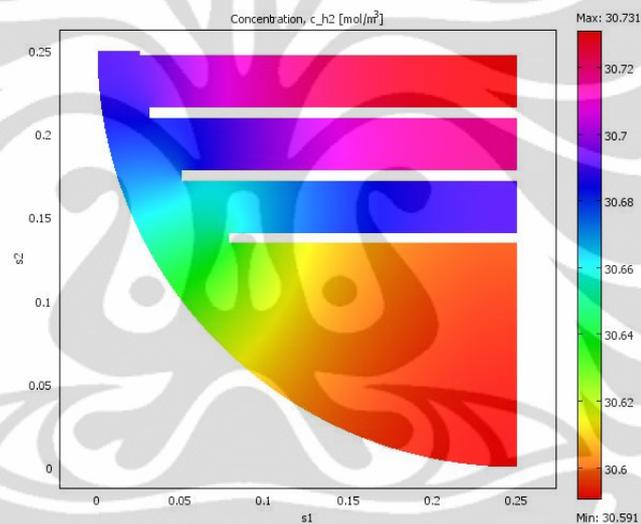
(b)

**Gambar 5. 13** Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metana Inlet (a), Outlet (b)

Dari Gambar 5.13 (a) dapat dilihat bahwa besar konsentrasi metana merata pada seluruh bagian, hal ini dikarenakan keadaan tersebut berada pada posisi masukan awal reaktor dimana reaksi tepat baru akan terjadi sehingga metana tidak terkonsumsi, sedangkan Gambar 5.13 (b) memperlihatkan keadaan konsentrasi metana pada bagian akhir reaktor dimana dapat terlihat konsentrasi metana yang paling sedikit berada pada bagian tengah reaktor.



(a)

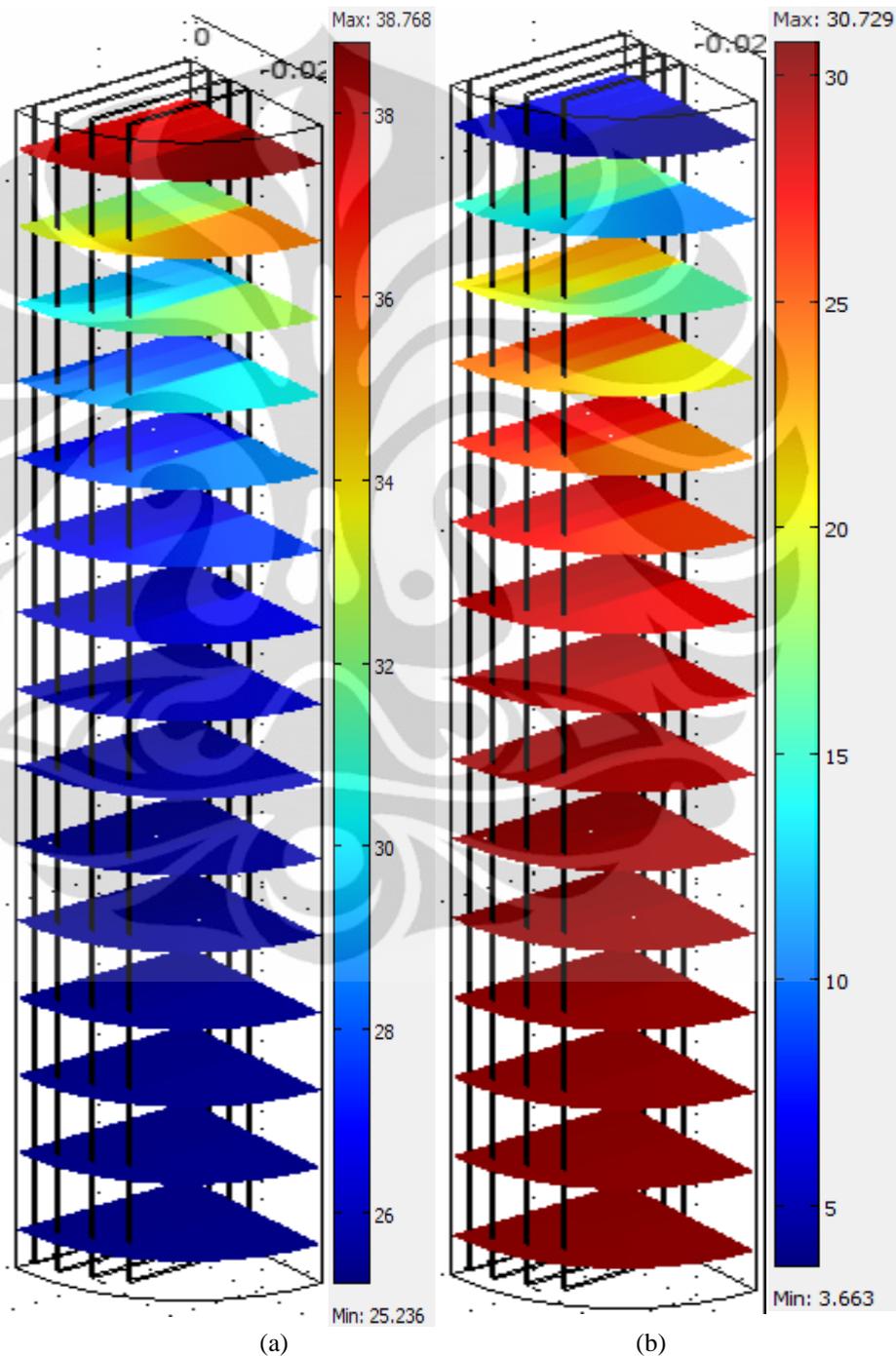


(b)

**Gambar 5. 14** Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Hidrogen Inlet (a), Outlet (b)

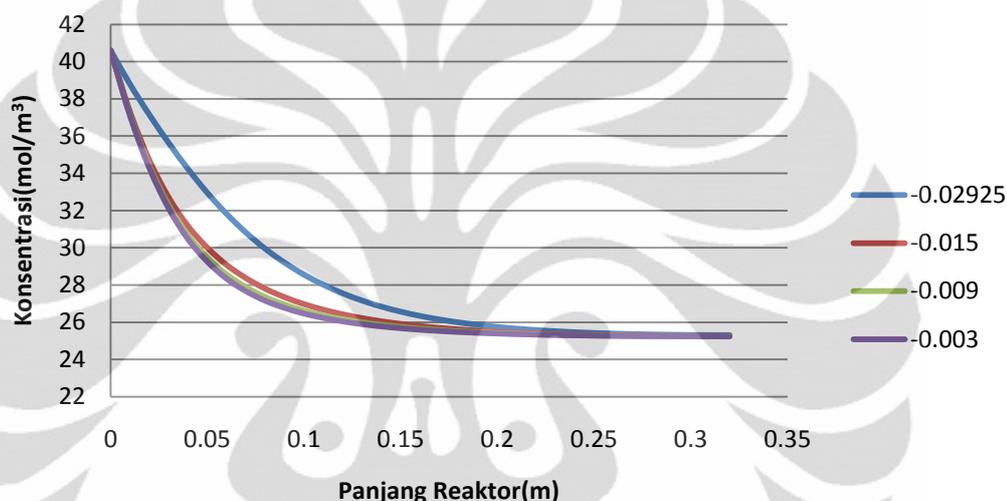
Kemudian pada Gambar 5.14 (a) dapat dilihat bahwa besar konsentrasi hidrogen merata pada seluruh bagian, hal ini dikarenakan keadaan tersebut berada pada posisi masukan awal reaktor dimana reaksi belum terjadi sehingga tidak terbentuk hidrogen, sedangkan Gambar 5.14 (b) memperlihatkan keadaan konsentrasi hidrogen pada bagian akhir reaktor dimana dapat terlihat konsentrasi hidrogen yang paling banyak berada pada bagian tengah reaktor. Hal ini dikarenakan adanya luas permukaan pelat yang meningkat ke arah pusat reaktor menyebabkan reaksi yang terjadi semakin banyak sehingga jumlah reaktan (metana) yang diperlukan semakin banyak juga sehingga konsentrasi metana pada bagian tersebut menjadi lebih sedikit dibandingkan bagian-bagian lain dan sebagai

produk reaksi maka konsentrasi hidrogen pada bagian tersebut menjadi lebih banyak dibandingkan bagian-bagian lain. Semakin menjauhi pelat maka konsentrasi metana yang tersisa semakin banyak sebaliknya untuk konsentrasi hidrogen yang terbentuk semakin sedikit karena reaksi yang terjadi semakin sedikit. Hal ini diperjelas oleh Gambar 5.15 (a) dan (b).

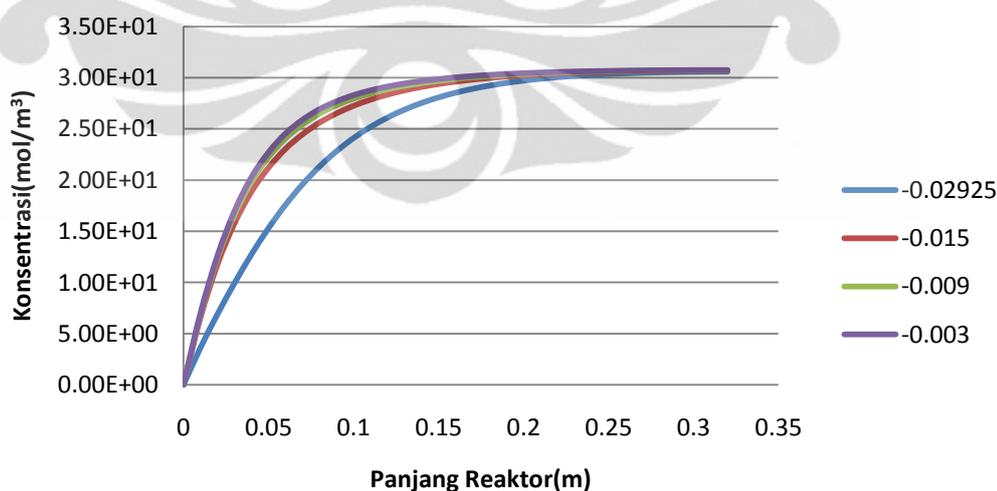


**Gambar 5. 15** Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metana (a) dan Hidrogen (b) secara Aksial

Gambar 5.15 (a) memperlihatkan perubahan konsentrasi dari metana berdasarkan panjang reaktor di beberapa titik. Disini dapat dilihat bahwa konsentrasi metana yang berkurang yang disebabkan oleh faktor-faktor seperti laju difusi, konveksi, konduksi dan laju reaksinya. Gambar 5.15 (b) menunjukkan bahwa kenaikan hidrogen terhadap panjang reaktor di beberapa titik. Pada gambar ini terlihat bahwa konsentrasi hidrogen terus meningkat. Untuk mengevaluasinya lebih mendetail, dibuat grafik antara konsentrasi berdasarkan posisi panjang reaktor ( $z$ ) yang dapat terlihat pada Gambar 5.16 dan Gambar 5.17.



**Gambar 5. 16** Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Panjang Reaktor



**Gambar 5. 17** Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Panjang Reaktor

Pada Gambar 5.16 terlihat bahwa ketika suatu titik semakin mendekati bagian tengah reaktor, semakin besar pula konversi metana menjadi hidrogen

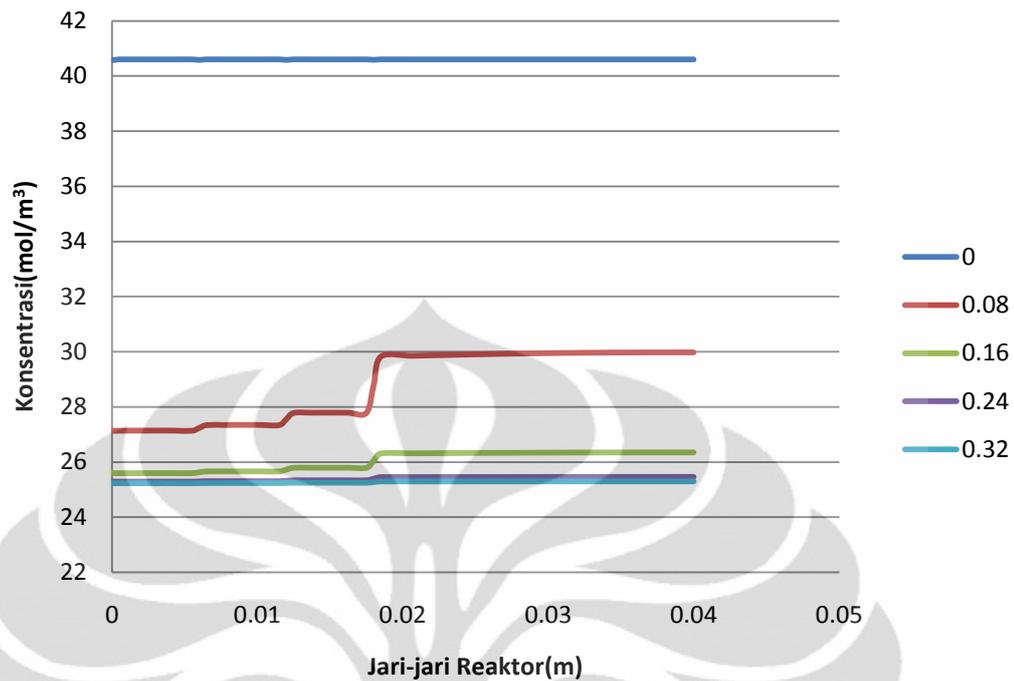
yang dipengaruhi oleh luas permukaan pelat bagian tengah dimana luas permukaannya lebih besar dibandingkan pelat-pelat lainnya. Sedangkan ketika suatu titik semakin mendekati bagian dinding terlihat bahwa konsentrasi metana memiliki konversi yang lebih kecil karena pada bagian atas jauh dari daerah pelat katalis sehingga masih banyak metana yang tidak terkena katalis yang menyebabkan tidak terkonversi. Hasil konversi metana pada titik-titik tertentu yang diperoleh dari simulasi dapat dilihat pada Tabel 5.1 berikut ini.

**Tabel 5. 1** Hasil Simulasi Konversi Metana

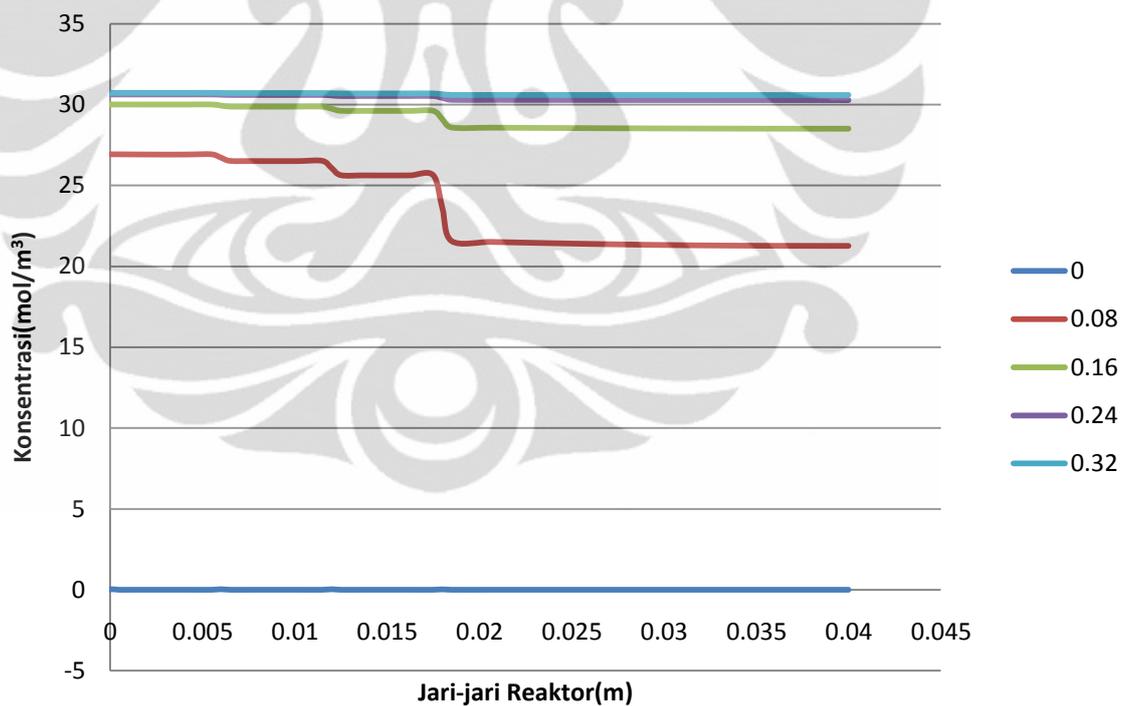
Koordinat (x,y)	% Koneversi CH <sub>4</sub>
0,-0.02925	37.6758257
0,-0.015	37.7964802
0,-0.009	37.8284587
0,-0.003	37.8451516

Gambar 5.17 menunjukkan perubahan konsentrasi hidrogen. Terlihat bahwa metana telah terkonversi menjadi hidrogen. Konsentrasi hidrogen yang terbentuk mendekati dua kali lipat konsentrasi metana yang terkonsumsi yang disebabkan oleh kesetaraan reaksi dimana satu mol metana akan menghasilkan dua mol hidrogen sesuai reaksi dekomposisi metana ( $\text{CH}_4 \rightarrow \text{C} + 2\text{H}_2$   $\Delta H_{298\text{K}} = +75\text{kJ/mol}$ ). Sama seperti metana, hidrogen juga lebih banyak terbentuk pada bagian tengah yang disebabkan luas permukaan yang lebih besar.

Untuk perubahan konsentrasi terhadap jari-jari reaktor dapat dilihat pada Gambar 5.18 dan Gambar 5.19.



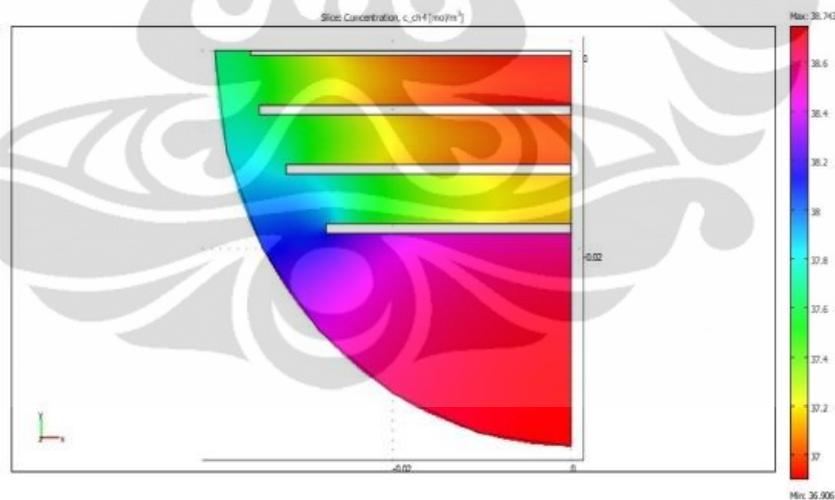
**Gambar 5. 18** Perubahan Konsentrasi Metana Terhadap Jari-jari Reaktor



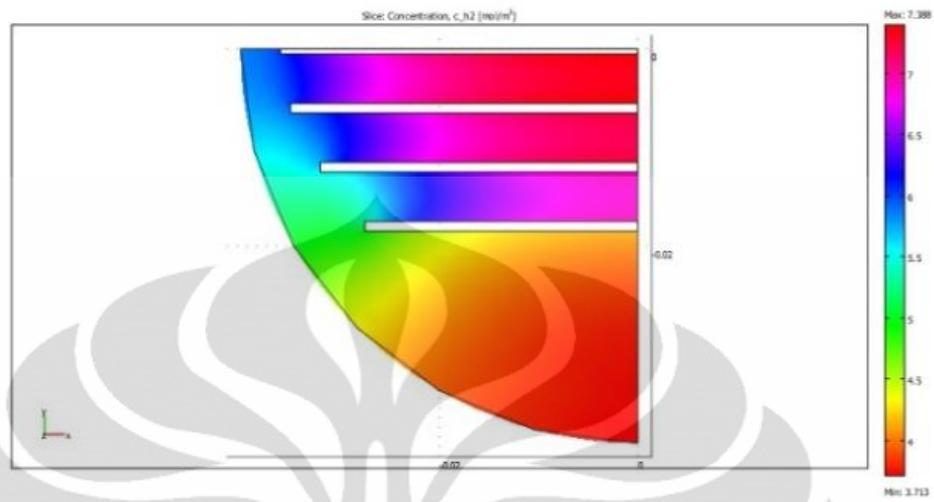
**Gambar 5. 19** Perubahan Konsentrasi Hidrogen Terhadap Jari-jari Reaktor

Dari Gambar 5.18 dan Gambar 5.19 terlihat bahwa konsentrasi antara dua buah pelat bagian paling tengah selalu paling rendah (untuk metana) dan paling besar (untuk hidrogen) jika dibandingkan dengan pelat-pelat di atasnya yang

disebabkan juga oleh luas permukaan katalis pada bagian tengah lebih besar dibandingkan pelat-pelat lainnya. Pada grafik dapat terlihat ada bagian dengan gradien yang besar merupakan gambaran COMSOL akan adanya pelat di dalam reaktor tersebut. Gradien yang besar tersebut dikarenakan adanya lapisan film yang bersifat sebagai tahanan terhadap reaksi/konversi sehingga reaksi dan konversi terhadap reaktan menjadi berkurang dan produksi hidrogen pun menjadi lebih sedikit pada daerah pelat dengan posisi lebih atas terhadap pelat dibawahnya. Pada gambar terlihat tahanan paling besar tersebut ( $z = 0,08$ ;  $y = 0,0175-0,0185$ ) dipengaruhi oleh nilai kecepatan yang besar sehingga membuat lapisan film pada daerah tersebut memiliki tahanan yang sangat besar. Untuk lebih jelasnya dapat dilihat pada Gambar 5.20 dan 5.21 di bawah ini. Gambar-gambar tersebut memperlihatkan penyebaran konsentrasi metana dan hidrogen pada beberapa bagian reaktor dimana penurunan konsentrasi metana berbanding lurus dengan peningkatan konsentrasi hidrogen.

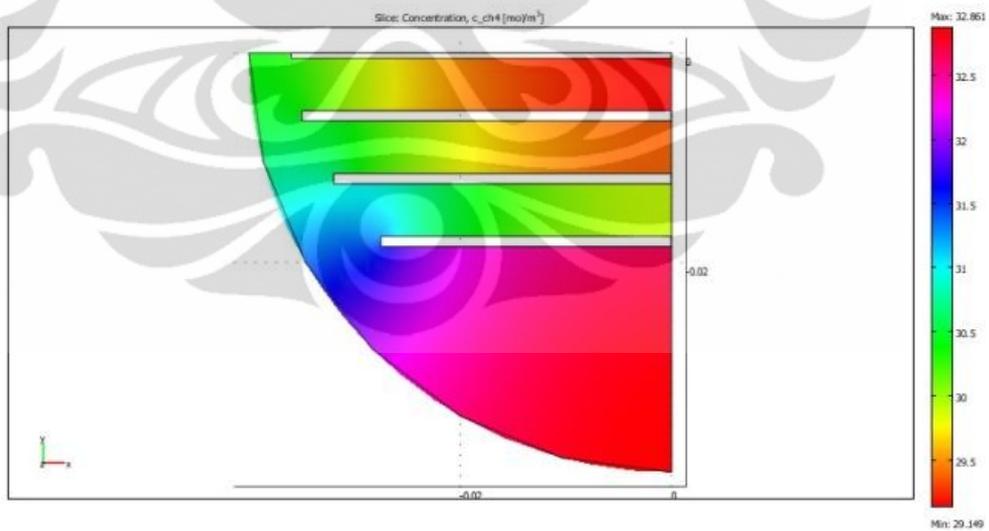


(a)

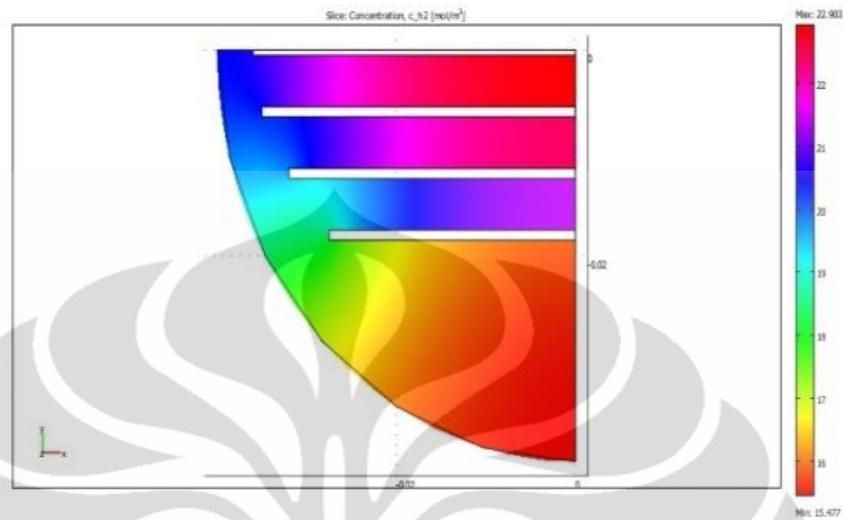


(b)

**Gambar 5. 20** Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metaba (a) dan Hidrogen (b) pada Titik  $z = 0,01$



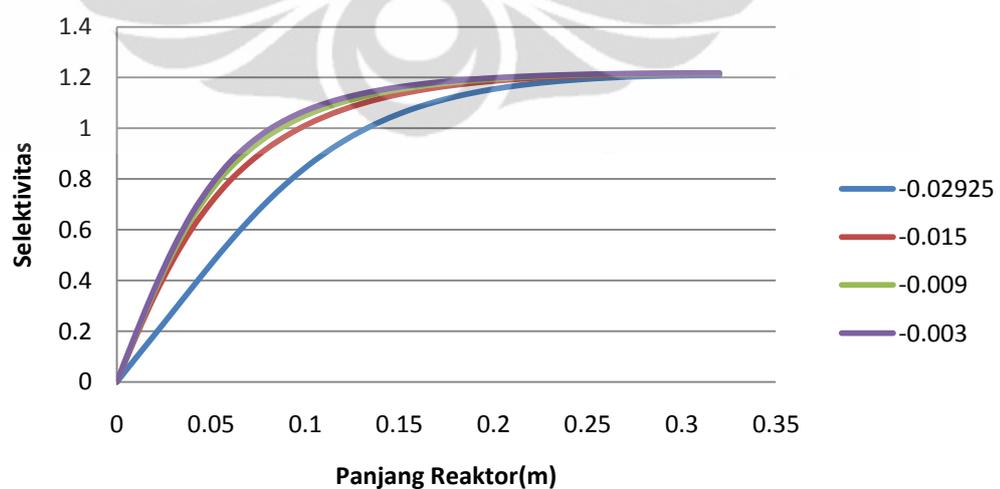
(a)



(b)

**Gambar 5. 21** Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Metana (a) dan Hidrogen (b) pada Titik  $z = 0,05$

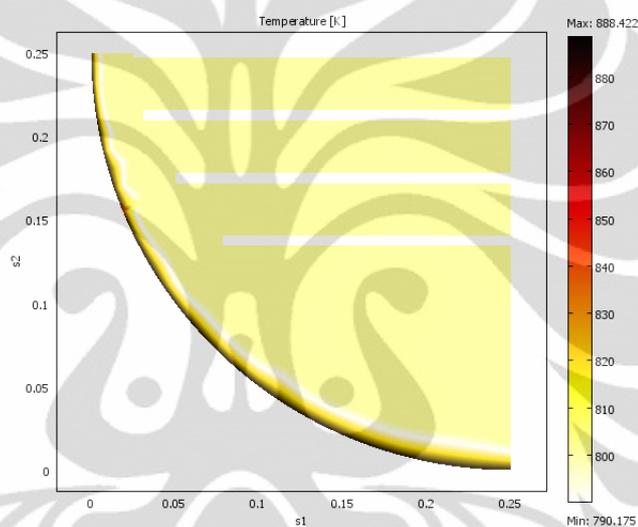
Setelah melihat perubahan konsentrasi metana dan hidrogen, grafik selektivitas dapat dibuat dengan cara membagi mol hidrogen dengan mol metana ( $\frac{\text{mol hidrogen}}{\text{mol metana yang tersisa}}$ ) seperti terlihat pada Gambar 5.22.



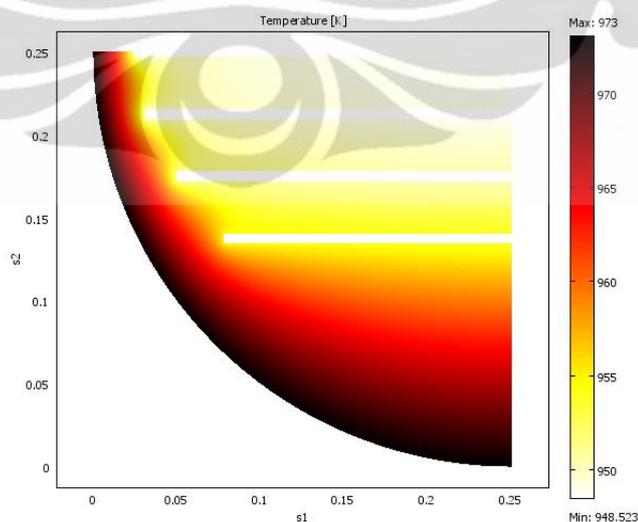
**Gambar 5. 22** Selektivitas Model Reaktor

Pada grafik ini terlihat bahwa pada keluaran reaktor, mol hidrogen hampir sama dengan mol metana sisa reaksi dengan perbandingan 1:1. Dari seluruh grafik ini terlihat bahwa model hanya menghasilkan konversi rata-rata sebesar 37%. Konversi ini terbilang kecil disebabkan dalam simulasi permukaan pelat dianggap sebagai permukaan yang licin (seperti kaca) sehingga koefisien perpindahan massa dan energi pada lapisan batas menjadi sangat kecil. Selain itu model juga tidak mempertimbangkan kemungkinan adanya reaksi pada bagian dalam padatan (berpori).

### 5.3 Profil Temperatur



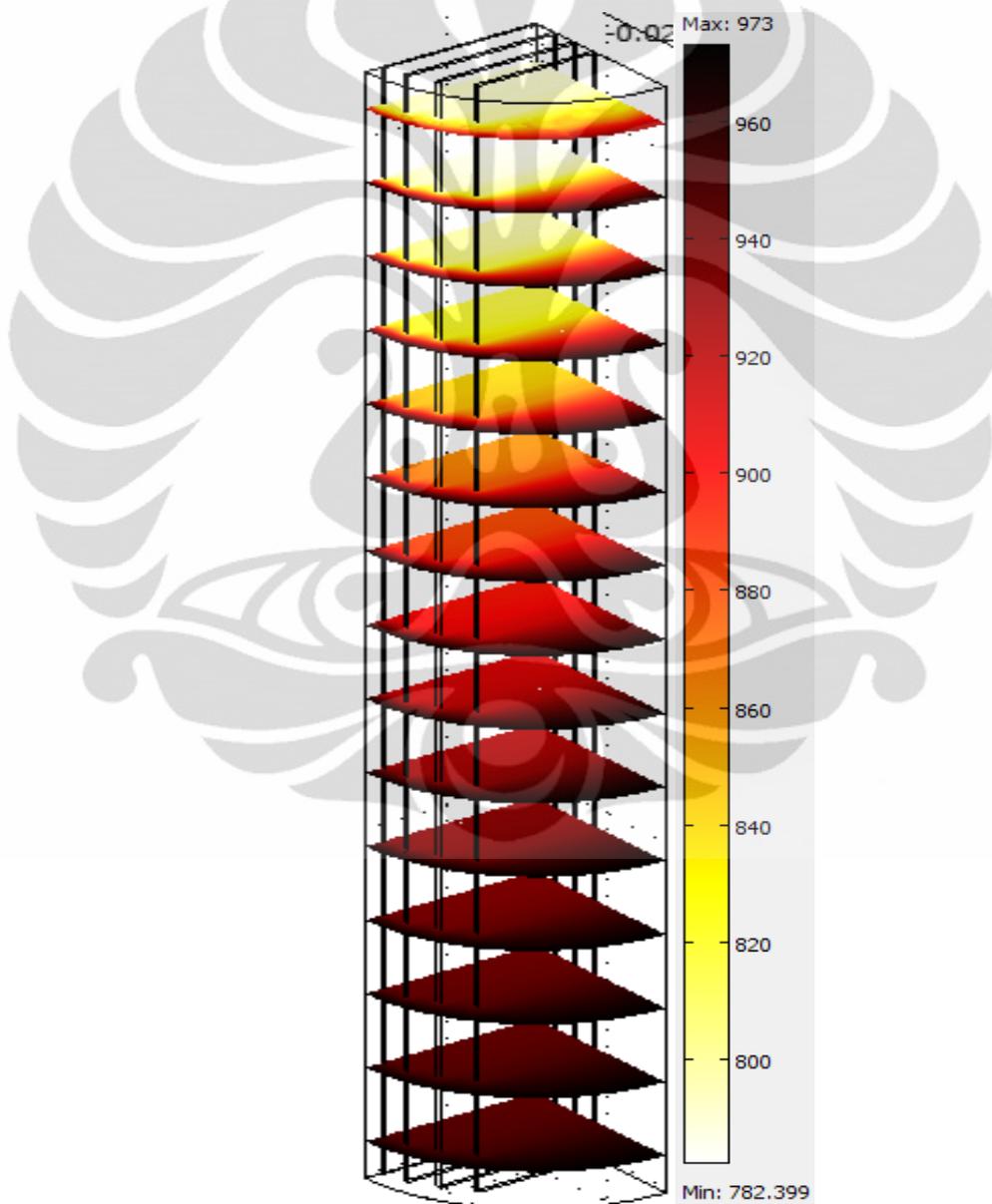
(a)



(b)

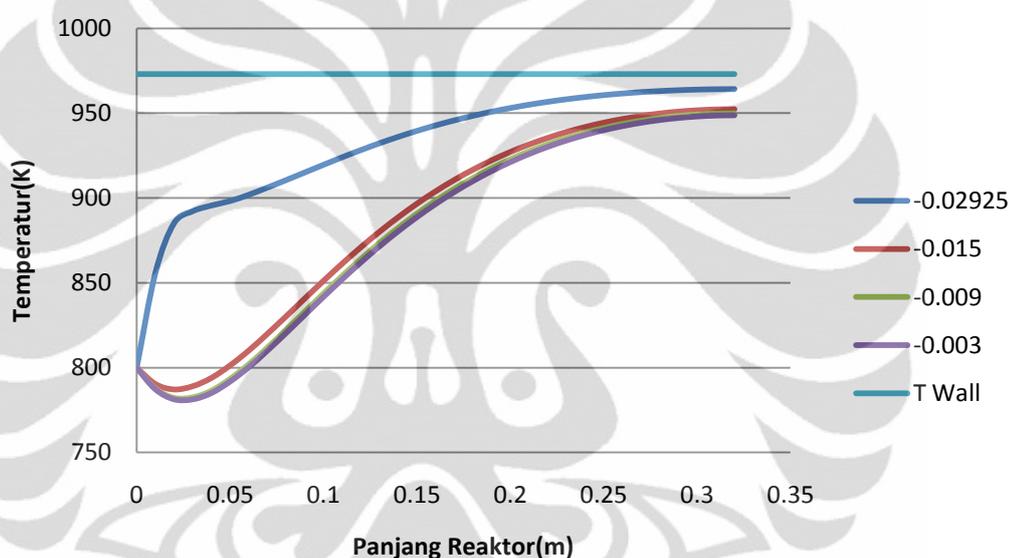
**Gambar 5. 23** Hasil Simulasi untuk Temperatur Inlet(a), Outlet (b)

Dari Gambar 5.23 (a) dapat dilihat bahwa besar temperatur merata pada seluruh bagian kecuali untuk bagian yang dekat dengan dinding reaktor (terpengaruh oleh panas yang dihasilkan oleh *furnace*) hal ini dikarenakan keadaan tersebut berada pada posisi masukan awal reaktor (temperatur awal fluida), sedangkan Gambar 5.23 (b) memperlihatkan keadaan temperatur pada bagian akhir reaktor dimana daerah dekat dinding telah meningkat panasnya yang diakibatkan oleh pemanasan secara tetap oleh *furnace*.



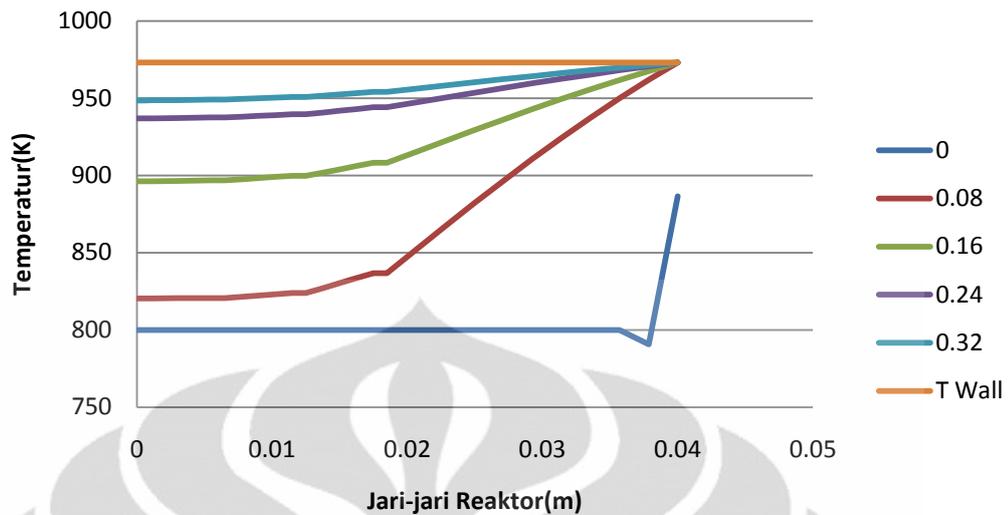
**Gambar 5. 24** Hasil Simulasi untuk Temperatur secara Aksial

Dari Gambar 5.24 dapat dilihat bahwa temperatur semakin cepat mendekati temperatur dinding pada bagian yang mendekat ke arah dinding. Sedangkan ketika semakin menjauh dari bagian dinding menuju pusat reaktor/reaksi, temperatur semakin sulit untuk mendekati temperatur dinding karena energi dari panas tersebut juga dikonsumsi oleh reaksi dekomposisi metana yang merupakan reaksi endotermis. Untuk mengevaluasi temperatur lebih mendalam, dibuat grafik temperatur sepanjang reaktor pada posisi tertentu seperti terlihat pada Gambar 5.25.



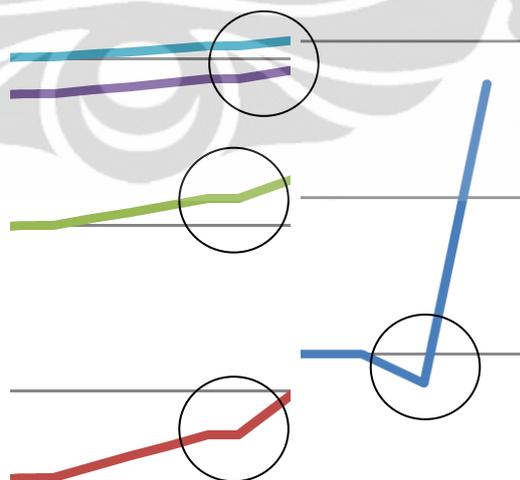
**Gambar 5. 25** Perubahan Temperatur Terhadap Panjang Reaktor ( $z=0-0,32$ ;  $T=800K$ ;  $P=1\text{ atm}$ )

Pada Gambar 5.25 menunjukkan grafik bergradien positif yang berarti temperatur reaktor yang semakin meningkat yang disebabkan oleh pemanasan *furnace*. Gradien positif ini juga menunjukkan pemanasan yang dilakukan oleh *furnace* melebihi panas yang dikonsumsi reaksi endotermis, sehingga membuat temperatur pada fluida semakin meningkat. Hal ini disebabkan semakin menjauh dari pusat reaksi maka menyebabkan panas yang dikonsumsi menjadi jauh lebih kecil dibandingkan panas yang masuk dari *furnace*. Adanya lengkungan pada grafik untuk bagian diantara pelat-pelat menandakan konsumsi energi/panas karena berlangsungnya reaksi secara signifikan di awal reaktor. Kemudian, grafik temperatur terhadap jari-jari reaktor juga dievaluasi pada Gambar 5.26.



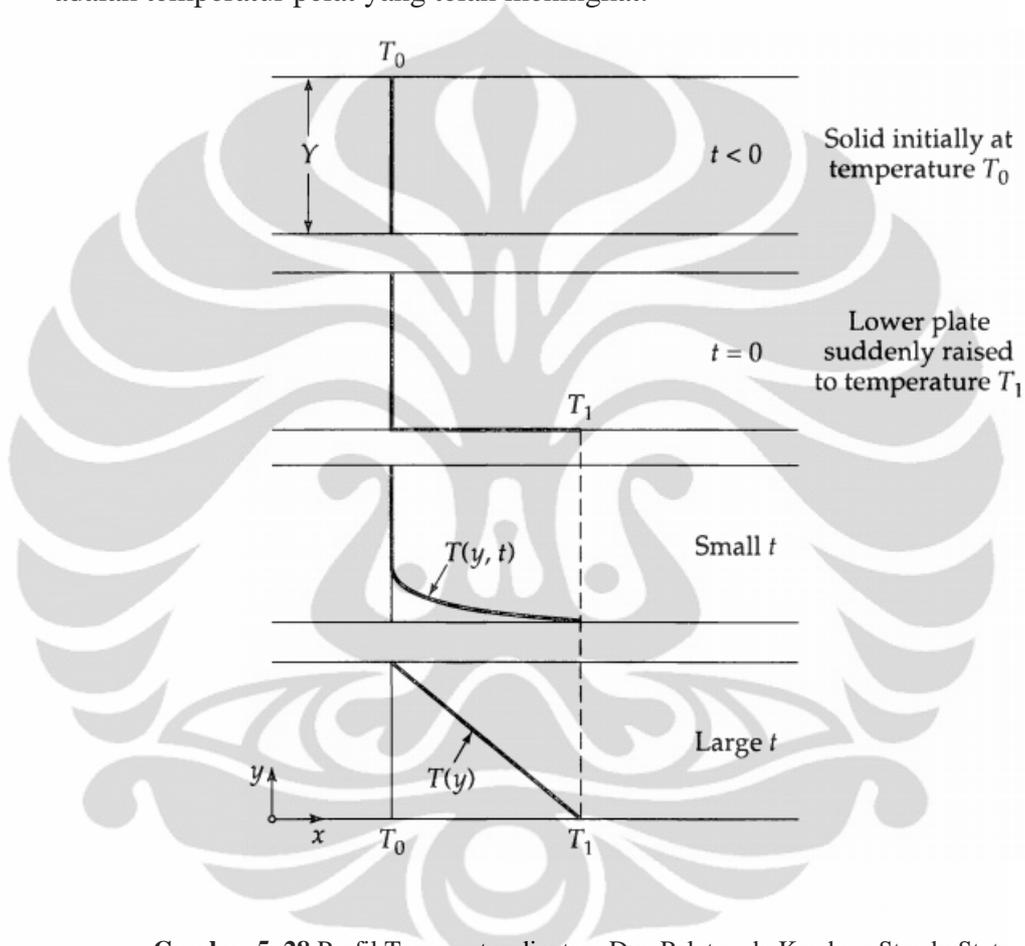
**Gambar 5. 26** Perubahan Temperatur Terhadap Jari-jari Reaktor ( $y=0-0,04$ ;  $T=800K$ ;  $P=1atm$ )

Pada Gambar 5.26 terlihat bahwa ketika suatu posisi semakin menuju arah dinding reaktor, semakin cepat pula temperatur masukan (temperatur fluida) mendekati temperatur dinding. Hal ini disebabkan semakin dekat suatu posisi dengan dinding, semakin kecil pula panas yang diambil untuk kebutuhan reaksinya karena reaksi yang terjadi tidak sebanyak pada bagian tengah reaktor dan juga karena adanya pasokan panas dari *furnace* sehingga membuat fluida yang lebih dekat dengan daerah dinding terpengaruh oleh panas yang diberikan oleh *furnace* tersebut.



**Gambar 5. 27** Patahan-Patahan pada Grafik Perubahan Temperatur

Patahan-patahan ( $z=0,08-0,32$ ) pada setiap grafik seperti terlihat pada Gambar 5.27 menunjukkan daerah pelat. Hal ini sesuai dengan penjelasan dalam Hukum *Fourier* pada Gambar 5.28, menunjukkan bahwa daerah diantara dua pelat yang memiliki temperatur berbeda akan membentuk gradient pada profil temperaturnya. Dengan  $T_0$  adalah temperatur pelat pada keadaan awal dan  $T_1$  adalah temperatur pelat yang telah meningkat.



**Gambar 5. 28** Profil Temperatur diantara Dua Pelat pada Keadaan Steady State.

Sedangkan pada  $z=0$ , patahan tersebut disebabkan adanya daerah pencampuran antara dua nilai temperatur yang berbeda jauh. Sehingga menyebabkan terjadinya fenomena patahan/*temperature gradient* akibat adanya distribusi temperatur (Gambar 5.27).

## BAB VI KESIMPULAN

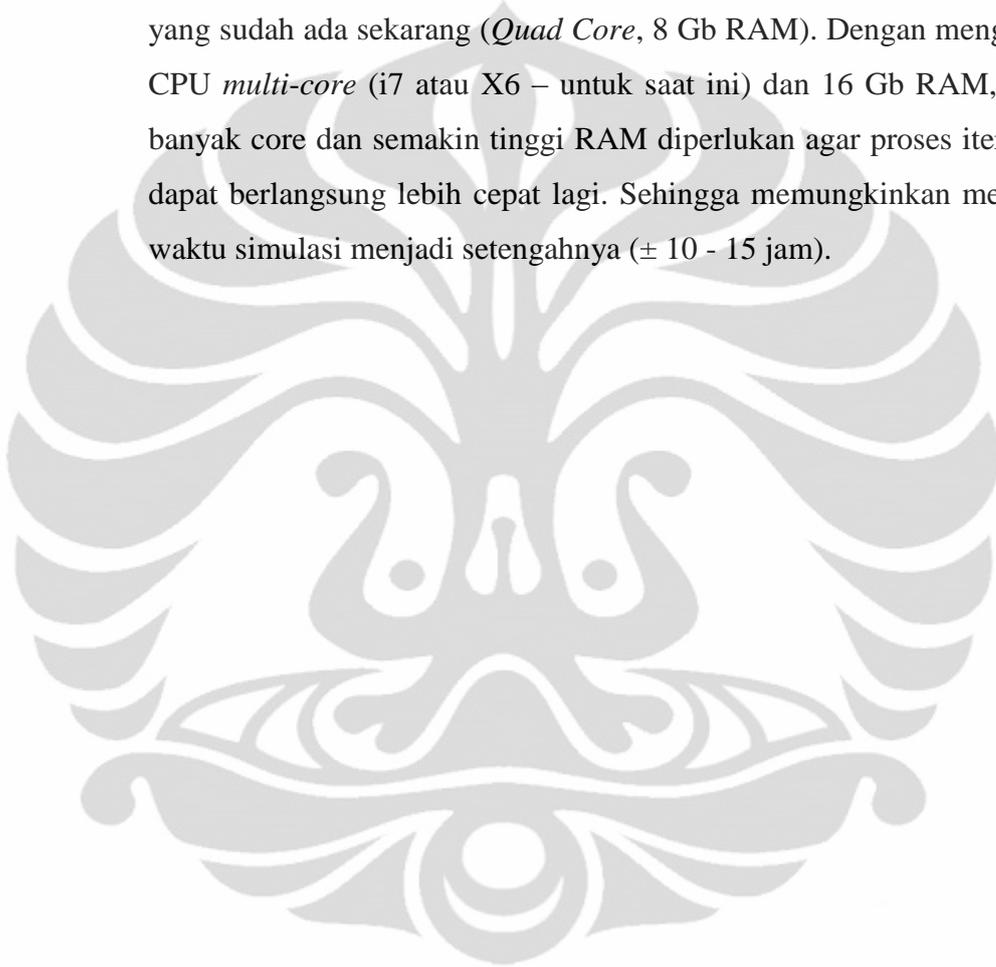
### 6.1 Kesimpulan

Setelah melakukan penelitian ini, peneliti menyimpulkan beberapa hal, yaitu

1. Kecepatan fluida (secara aksial) paling besar ada pada bagian yang jauh dari pelat ( $y = -0.02925$ ) dan terjadi di awal reaktor ( $z = 0-0.08$ ) yang kemudian semakin menurun dikarenakan adanya faktor friksi dengan dinding reaktor serta permukaan pelat, dan pengaruh tekanan parsial hidrogen yang bersifat mengurangi laju reaksi (Persamaan 4.12).
2. Kecepatan fluida (secara radial) dipengaruhi oleh pola aliran yang terbentuk akibat adanya perbedaan tekanan/*pressure drop* pada setiap bagian dalam reaktor tersebut, dimana aliran mengalir menuju tekanan yang lebih rendah.
3. Konversi dengan variabel-variabel awal model ( $T = 700$  K,  $P = 1$  atm) adalah 37.85% ( $y = -0.003$ ), 37.83% ( $y = -0.009$ ), 37.80% ( $y = -0.015$ ) dan 37.68% ( $y = -0.02925$ ).
4. Semakin mendekati bagian tengah reaktor ( $y = -0.003$ ), semakin besar konversi metana menjadi hidrogen akibat luas permukaan pelat bagian tengah lebih besar dibandingkan pelat-pelat lainnya. Sedangkan ketika suatu titik semakin mendekati bagian dinding ( $y = -0.02925$ ), konsentrasi metana memiliki konversi yang lebih kecil akibat jauh dari daerah pelat katalis sehingga masih banyak metana yang tidak terkena katalis yang menyebabkan tidak terkonversi.
5. Temperatur semakin cepat mendekati temperatur dinding pada bagian yang mendekat ke arah dinding ( $y = -0.02925$ ) akibat panas yang dikonsumsi menjadi jauh lebih kecil dibandingkan panas yang masuk dari *furnace*. Sedangkan ketika semakin menjauh dari bagian dinding menuju pusat reaktor/reaksi ( $y = -0.003$ ), temperatur semakin sulit untuk mendekati temperatur dinding karena energi dari panas tersebut juga dikonsumsi oleh reaksi dekomposisi metana yang merupakan reaksi endotermis.

## 6.2 Saran

- Untuk meningkatkan konversi dapat dilakukan dengan cara simulasi menggunakan temperatur masukan yang lebih tinggi ( $T = 973 \text{ K}$ ).
- Kemudian untuk memperpendek waktu ( $\pm 30 \text{ jam}$ ) yang diperlukan dalam melakukan simulasi maka perlu digunakan sistem yang lebih tinggi dari yang sudah ada sekarang (*Quad Core*, 8 Gb RAM). Dengan menggunakan CPU *multi-core* (i7 atau X6 – untuk saat ini) dan 16 Gb RAM, semakin banyak core dan semakin tinggi RAM diperlukan agar proses iterasi lebih dapat berlangsung lebih cepat lagi. Sehingga memungkinkan mengurangi waktu simulasi menjadi setengahnya ( $\pm 10 - 15 \text{ jam}$ ).



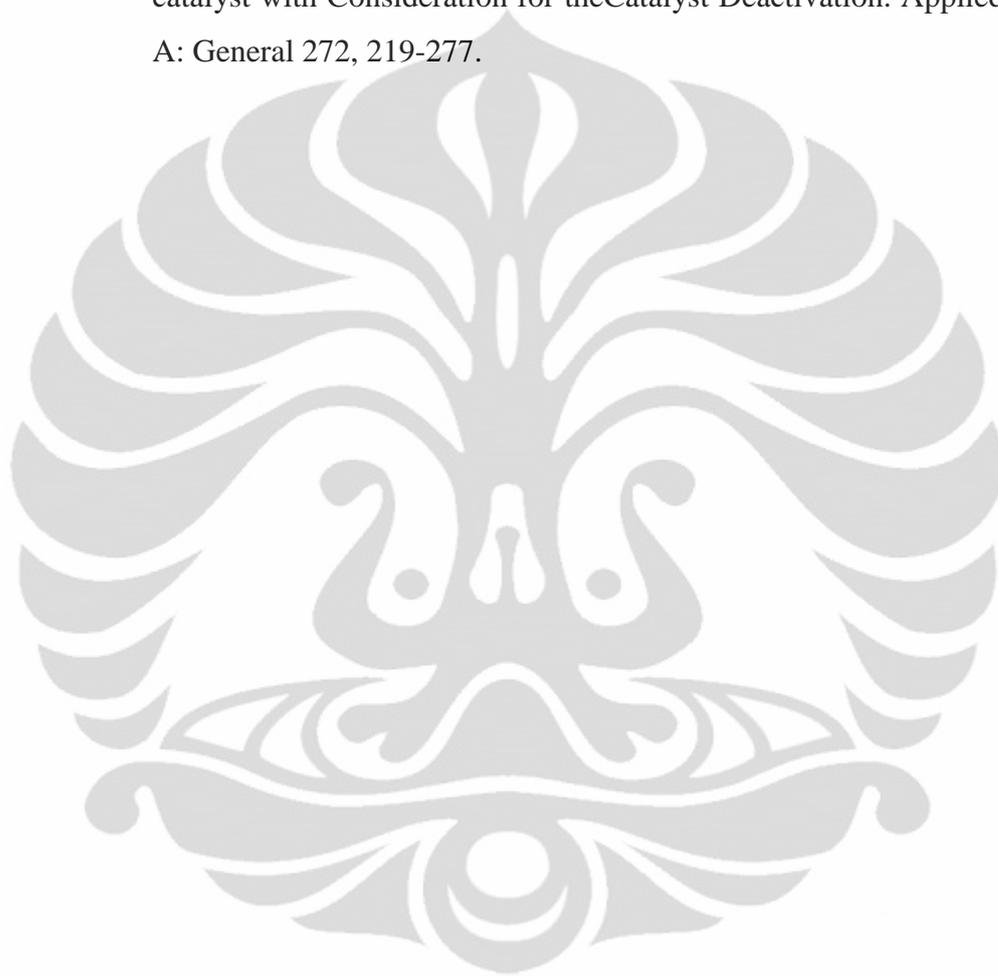
## DAFTAR PUSTAKA

- Anonim. Mass Balance [Online]. Available at: URL:  
[http://en.wikipedia.org/Mass\\_balance](http://en.wikipedia.org/Mass_balance). Accessed Juni, 15 2011.
- Anonim. The Effect of Pressure on Reaction Rates. Accessed Juni, 6 2011.  
<http://www.chemguide.co.uk/physical/basicrates/pressure.html>.
- Beers, Annemarie E. W., et al. *BEA Coating of Structured Supports – Performance in Acylation*. Applied Catalysis A: General, vol. 243. 2003.
- Bird, R. Byron., et al. *Transport Phenomena*. Singapore: John Wiley & sons
- Burnett, David S. 1987. Finite Element Analysis, New Jersey: Addison-Wesley Publishing Company
- Coker, Kayode. 2001. Modeling of Chemical Kinetics and Reactor Design. Texas: Gulf Publishing Company
- Coulson. 2005. Chemical Engineering Design volume 6. Elsevier Butterworth-Heinemann
- Firstian, Peter. 2010. Pemodelan dan simulasi reaktor berkatalis pelat sejajar untuk dekomposisi katalitik metana menjadi karbon nanotube. Depok: Universitas Indonesia.
- Fogler, H.Scott. Elements of Chemical Reaction Engineering fourth edition. United States: Pearson Education International.
- Grujicic M, Cao G, Gersten B. *An atomic-scale analysis of catalytically assisted chemical vapor deposition of carbon nanotubes*. Materials Science and Engineering 2002;B94:247-259.
- Heiszwolf, Johan. Introduction to Monoliths. Accessed Mei, 15 2011.  
<http://www.dct.tudelft.nl/monoliet/Intro/introduction.html>.
- L. X. Zheng et al. (2004). *Ultralong Single-Wall Carbon Nanotubes*. **3**. pp. 673–676. doi:10.1038/nmat1216.
- Morançais A, Causat B, Kihn Y, Kalck P, Plee D, Gaillard P, Bernard D et al. (2007). A Parametric Study of The Large Scale Production of Multi-Walled Carbon Nanotubes by a Fluidized Bed Catalytic Chemical Vapour Deposition. *Carbon*, 45, 624-635.

- Muharam Y., Purwanto W.W., Afianty A. (2007), Uji kinerja reaktor katalitik terstruktur untuk reaksi dekomposisi katalitik metana, Laporan Riset Departemen Teknik Kimia UI
- Muradov, N. (2001). Catalysis of Methane Decomposition over Elemental Carbon. *Catalysis Communication*, 2, 89 – 94.
- Prasetyo, Herry. 2010. Pemodelan dan simulasi reaktor gauze untuk produksi karbon nanotube melalui proses dekomposisi katalitik metana. Depok: Universitas Indonesia.
- Purwanto W.W., M. Nasikin, E. Saputra, L. Song (2005). Decomposition of Methane to Produce NanoCarbon and Hydrogen with Ni-Cu-Al-Si as the Catalyst, *Prosiding Seminar Nasional Rekayasa Kimia dan Proses*, UNDIP Semarang.
- Resketenko, T.V., dkk. 2003. Carbon capacious Ni-Cu-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst for high temperature methane decomposition. *Applied Catalyst A: General*, 247, 51-63.
- S.G. Zavarukhin and G.G. Kuvshinov, *J. Appl. Catal. A*, vol. 272, p. 219, 2004.
- S.B. Sinnott, dkk, *Chem. Phys. Lett.* 315 (1999) 25
- Simons, Robert. Estimating Parallel Plate-fin Heat Sink Pressure Drop. Accessed Juni, 1 2011. <http://www.electronics-cooling.com/2003/05/estimating-parallel-plate-fin-heat-sink-pressure-drop/>.
- Song L. *Pengaruh keasaman katalis berbasis Ni-Cu terhadap kinerja reaksi dekomposisi katalitik metana menjadi hydrogen dan nanokarbon*. Skripsi. Departemen Teknik Gas dan Petrokimia FTUI; 2005.
- Weizhong, Qian, et al. (2004). Production of Hydrogen and Carbon Nanotubes from Methane Decomposition in a Two-Stage Fluidized Bed Reactor. *Applied Catalysis*, 260, 223-228.
- Wulan, Praswasti PDK. 2010. Pengembangan Sistem Produksi Hidrogen dan *Carbon Nanotube* melalui Reaksi Dekomposisi Katalitik Metana dengan Menggunakan Katalis Ni-Cu-Al. Depok: Universitas Indonesia. (Disertasi sedang diajukan)

Yulianti, Ira. Perancangan reaktor katalis terstruktur untuk produksi karbon nanotube dan hydrogen melalui proses dekomposisi katalitik metana. Skripsi Departemen Teknik Gas dan Petrokimia FTUI; 2008.

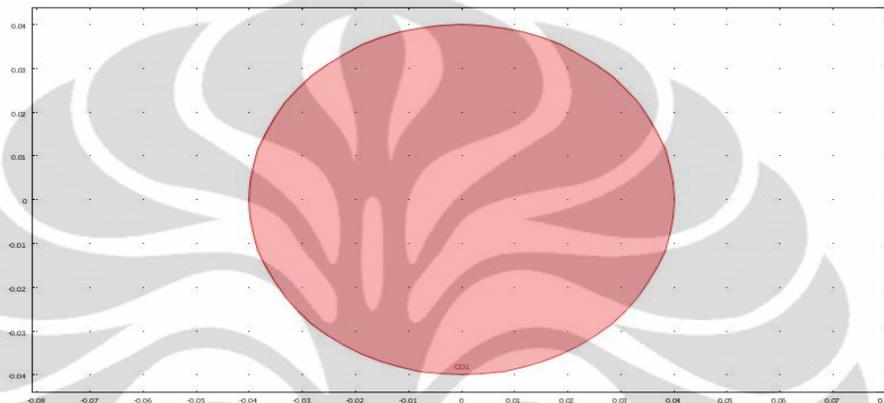
Zavarukhin, G. Sergei, et al. (2004). The Kinetic Model of formation of nanofibrous Carbon from CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> mixture over a high loaded nickel catalyst with Consideration for the Catalyst Deactivation. Applied Catalyst A: General 272, 219-277.



## LAMPIRAN

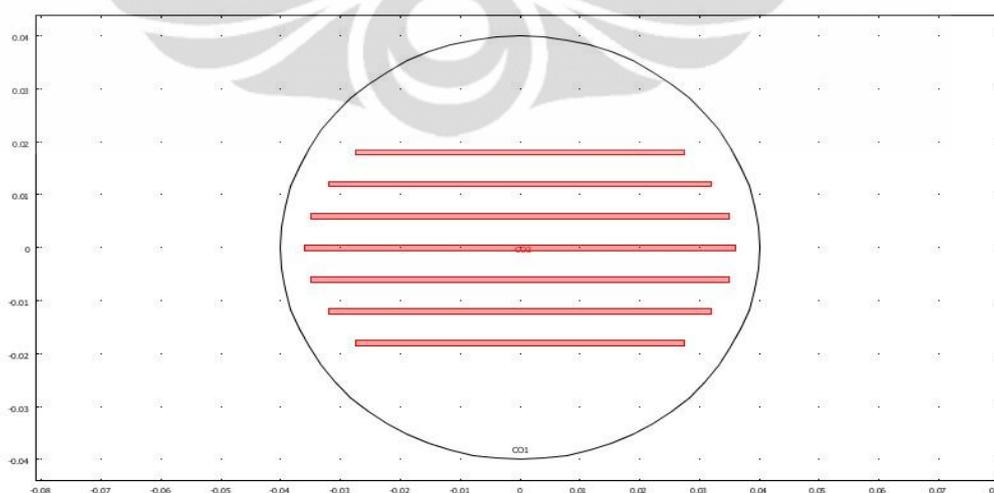
### A. Pembuatan Geometri

1. Membuat gambar lingkaran terlebih dulu pada area 2 dimensi sebagai geometri reaktor.



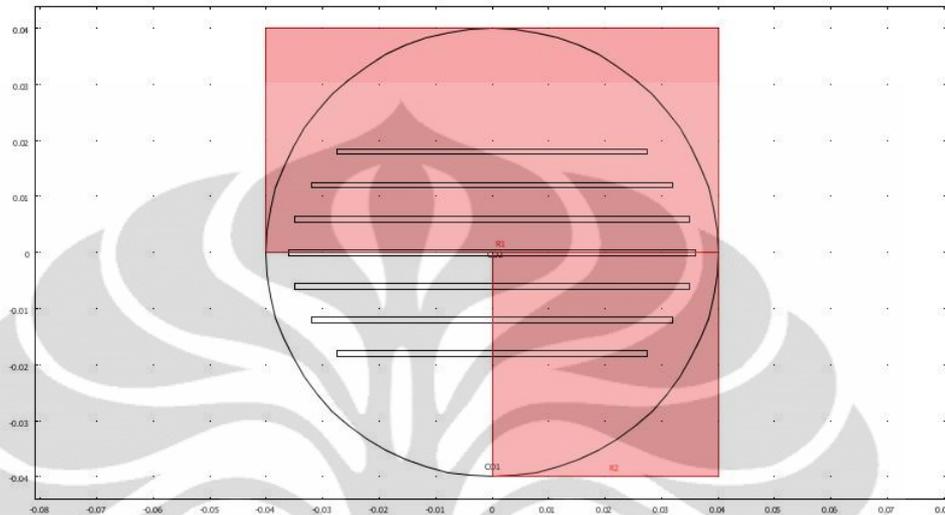
**Gambar A. 1** Awal Geometri Reaktor

2. Membuat gambar persegi panjang pada daerah-daerah dan ukuran yang telah ditentukan sebanyak 7 buah sebagai geometri pelat.



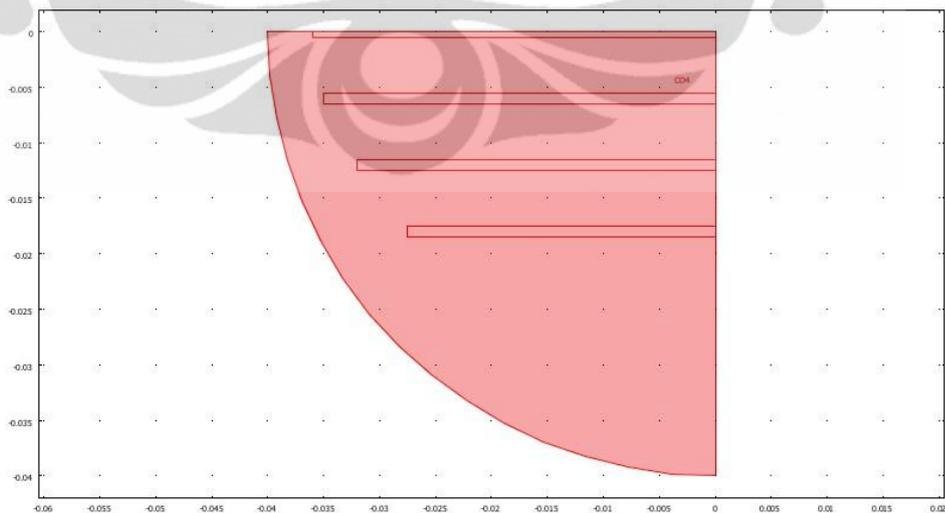
**Gambar A. 2** Awal Geometri Pelat

3. Membuat gambar persegi panjang agar dapat membagi reaktor menjadi 4 bagian yang simetris.



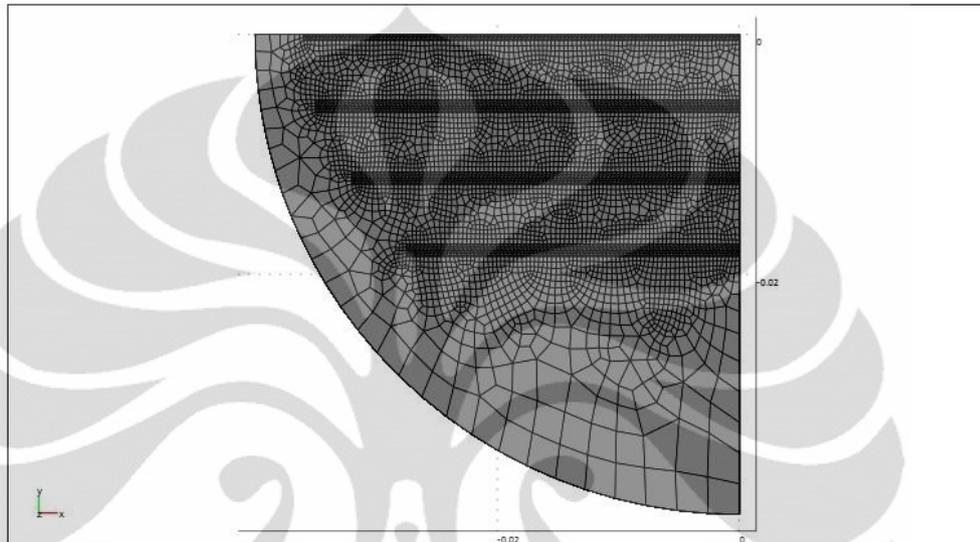
**Gambar A. 3** Awal Geometri Simetris

4. Dengan cara composite sehingga diperoleh reaktor pelat sejajar yang telah berbentuk  $\frac{1}{4}$  bagian.



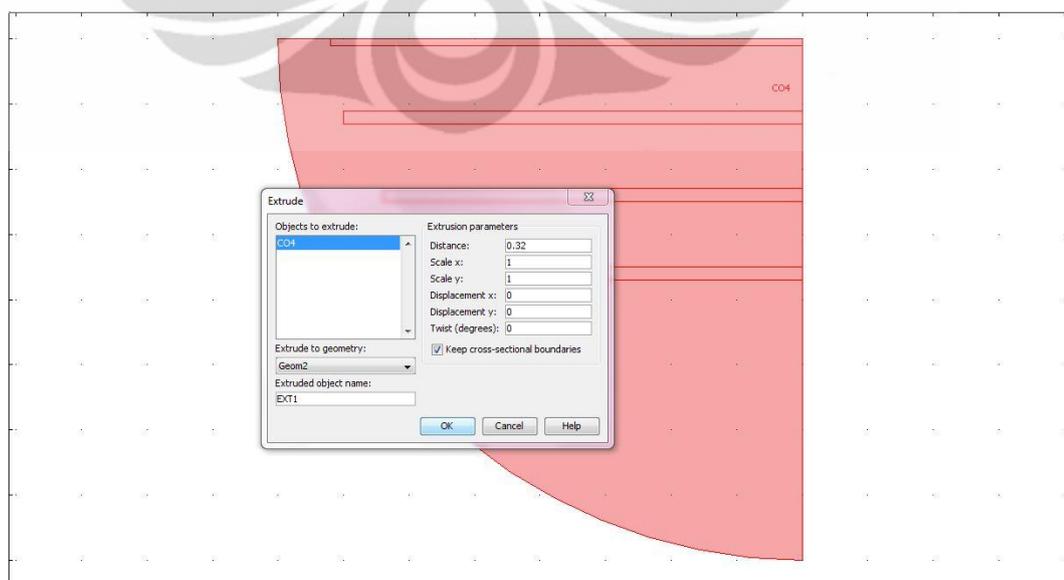
**Gambar A. 4** Awal Geometri  $\frac{1}{4}$  yang Simetris

5. Kemudian dilanjutkan dengan tahap pembuatan meshing melalui mode *Selected Mesh*, dengan membuat meshing pada pelat terlebih dahulu kemudian dilanjutkan dengan pembuatan meshing untuk reaktor.



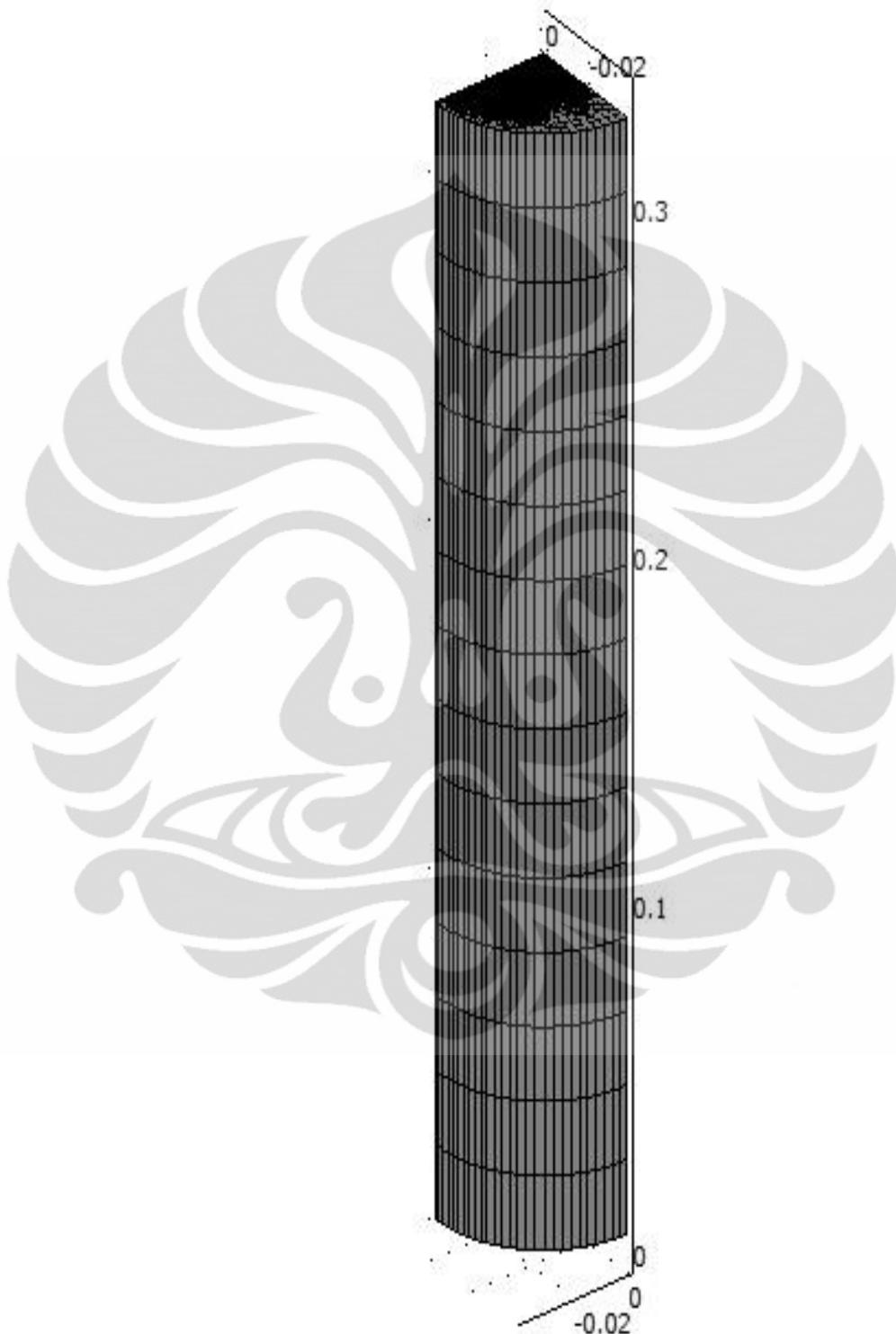
**Gambar A. 5** Meshing Geometri  $\frac{1}{4}$

6. Untuk merubah geometri dari 2 dimensi menjadi 3 dimensi dilakukan melalui teknik *extrude mesh* dengan jarak/*distance* 0.32 m.



**Gambar A. 6** Proses Perubahan Menjadi 3 Dimensi

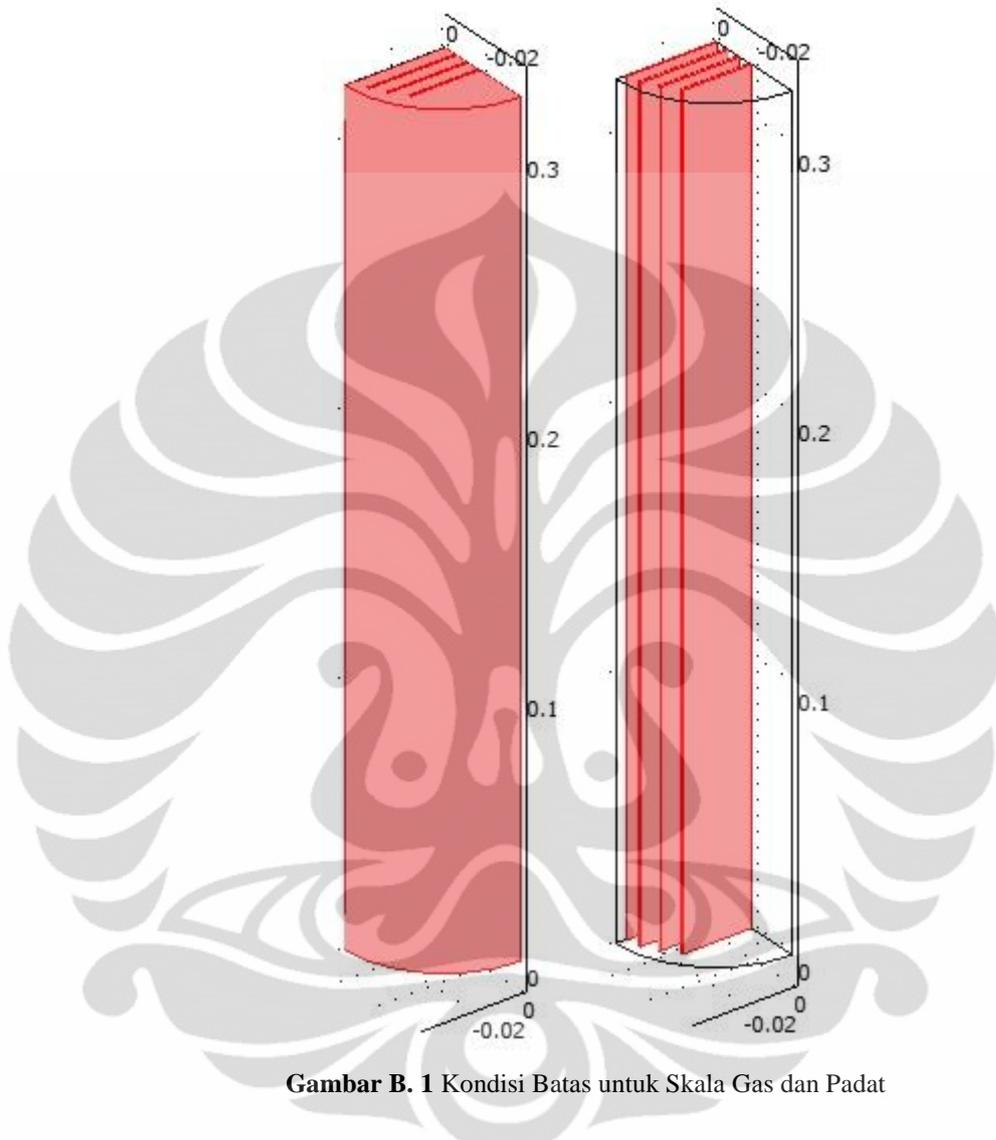
7. Geometri reaktor yang telah berbentuk 3 dimensi yang siap untuk dimasukkan kondisi batas.



**Gambar A. 7** Geometri Reaktor 3 Dimensi

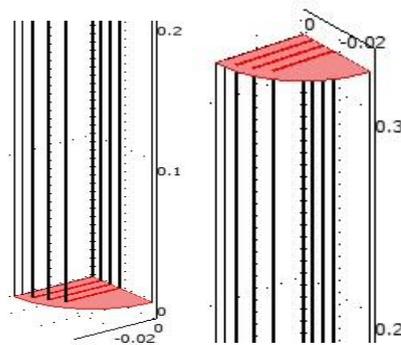
## B. Penentuan Kondisi Batas

1. Penentuan kondisi batas pada *subdomain* untuk skala gas dan padatan.



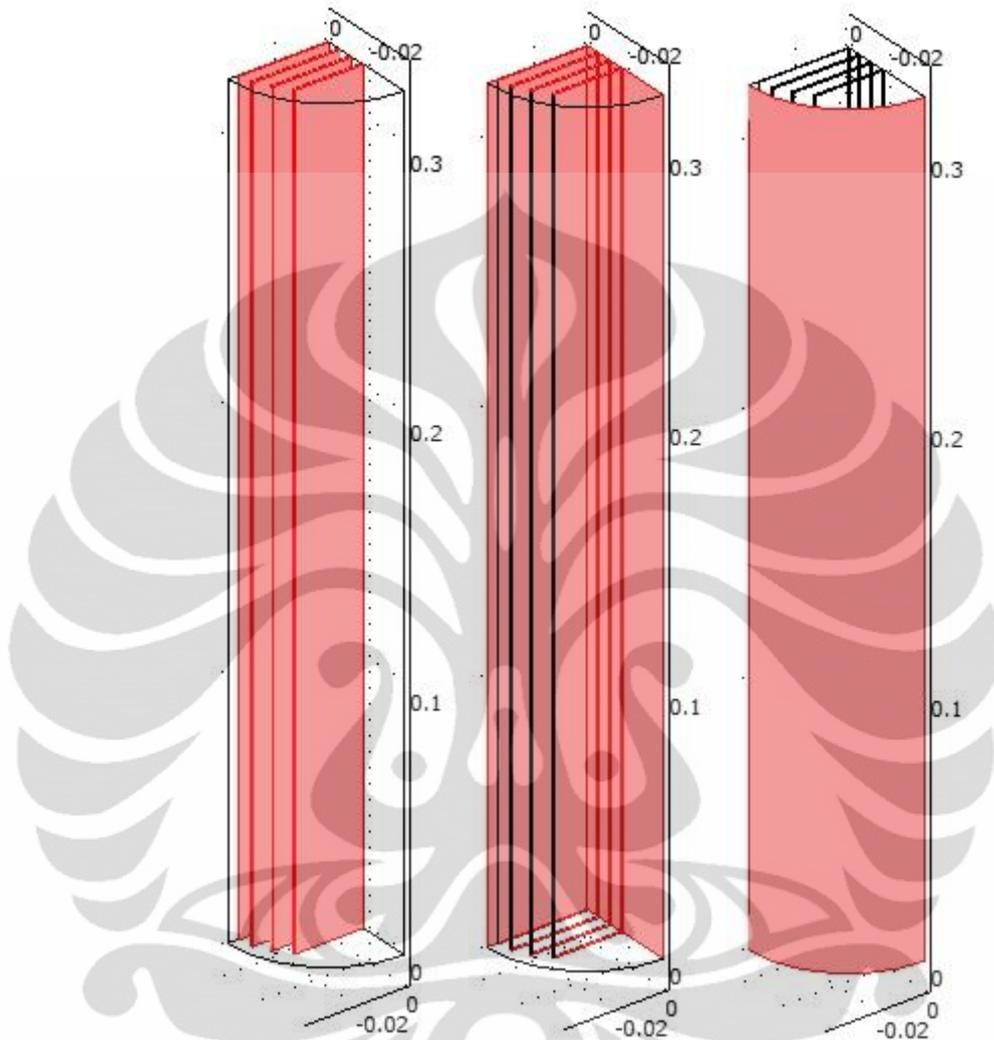
**Gambar B. 1** Kondisi Batas untuk Skala Gas dan Padat

2. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca energi untuk *input* ( $T_{\text{feed}}$ ) dan *ouput* (*convective flux*).



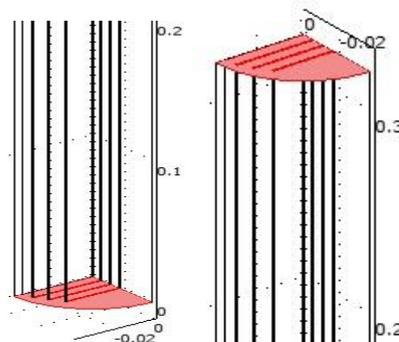
**Gambar B. 2** Kondisi Batas untuk Input dan Output

3. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca energi untuk pelat ( $-Q$ ), simetri (*thermal insulation*) dan wall ( $T_{\text{wall}}$ ).



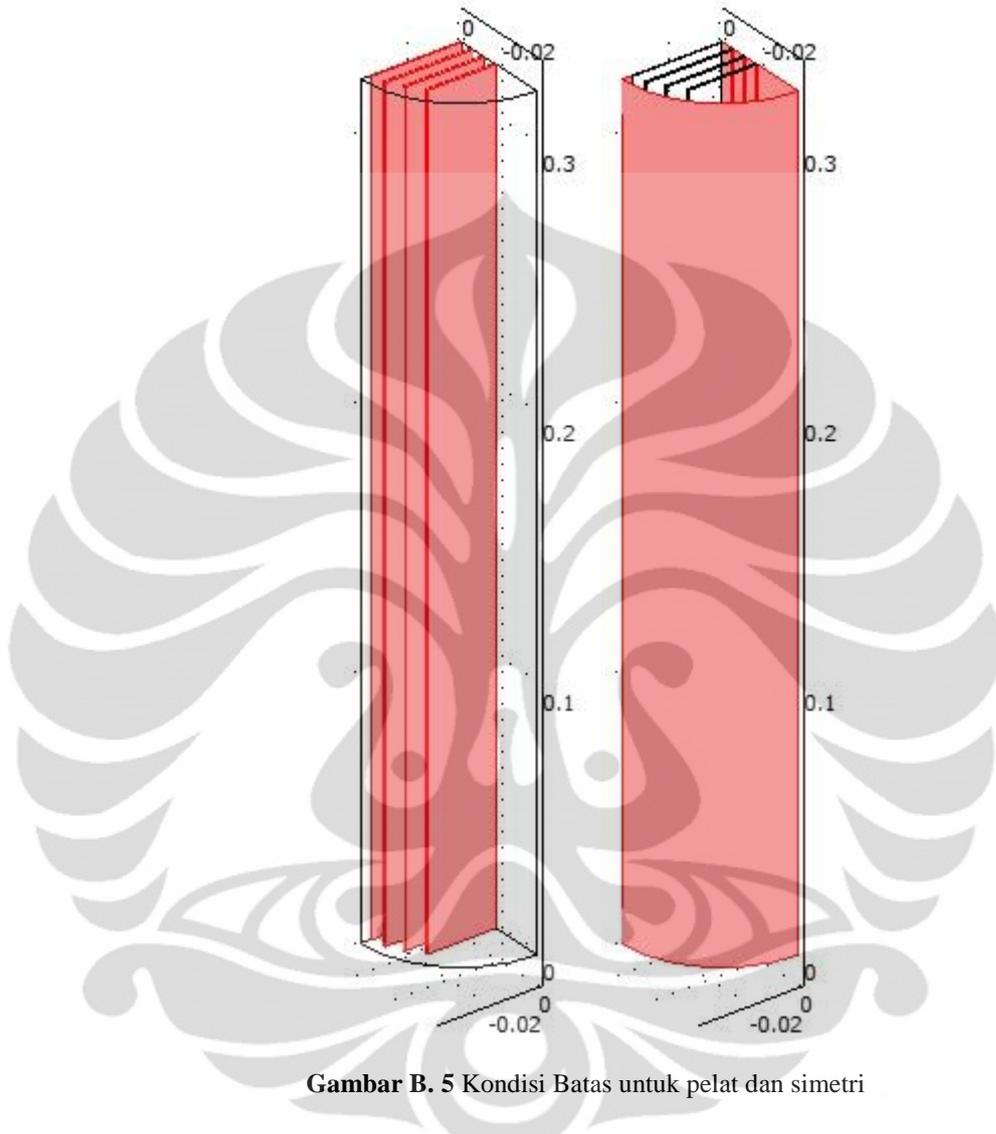
**Gambar B. 3** Kondisi Batas untuk pelat, simetri dan wall

4. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca massa untuk *input* (*concentration*) dan *ouput* (*convective flux*).



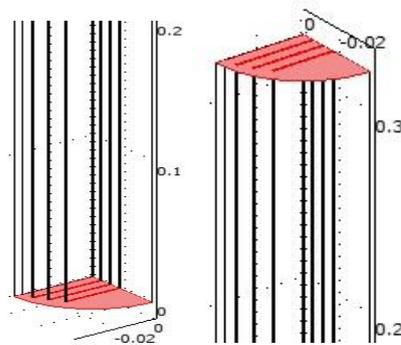
**Gambar B. 4** Kondisi Batas untuk Input dan Output

5. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca massa untuk pelat ( $-flux$  &  $2*flux$ ), simetri (*insulation & symmetry*).



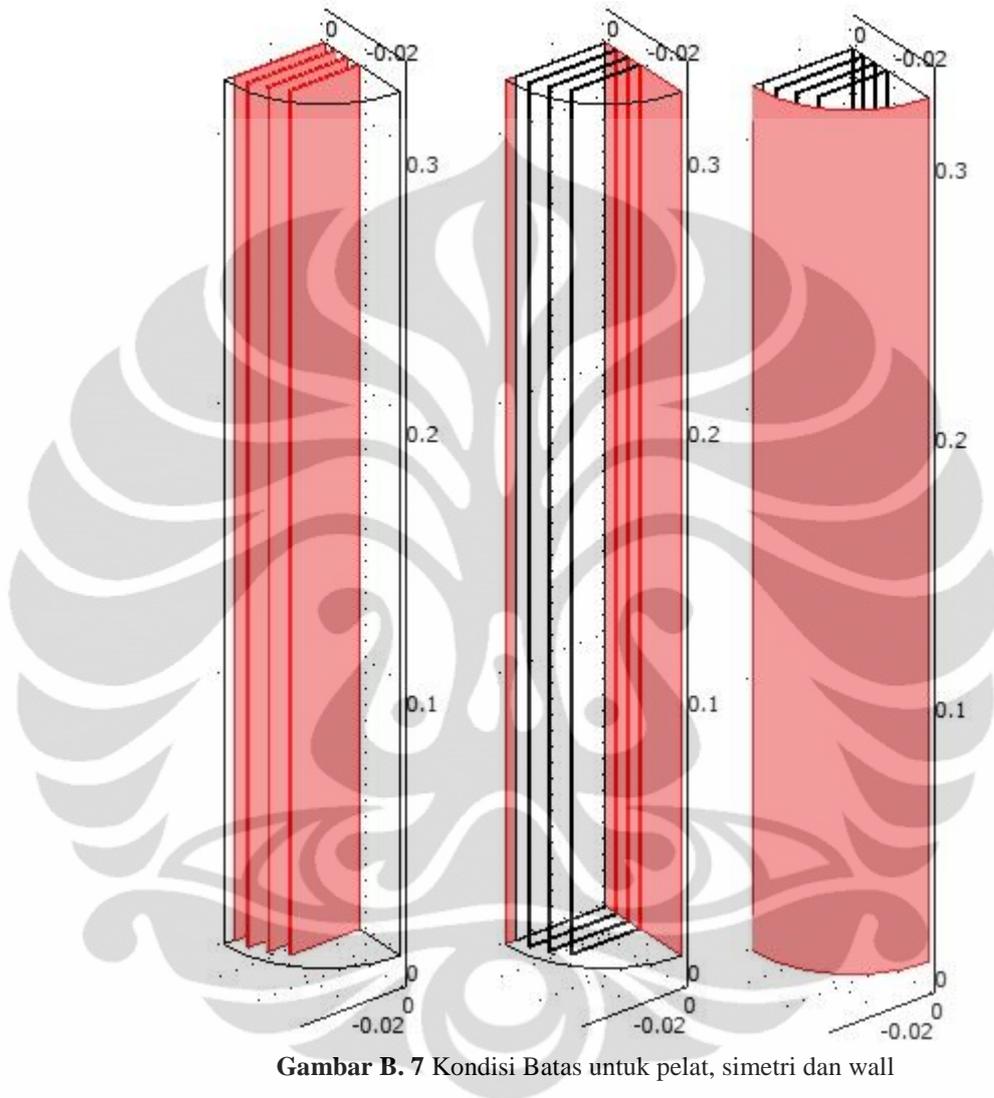
**Gambar B. 5** Kondisi Batas untuk pelat dan simetri

6. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca momentum untuk *input* ( $u_{feed}$ ) dan *ouput* ( $pressure$ ).



**Gambar B. 6** Kondisi Batas untuk Input dan Output

7. Penentuan kondisi batas pada *boundary* neraca momentum untuk pelat (*no slip*), simetri (*symmetry boundary*) dan *wall* (*no slip*).



Gambar B. 7 Kondisi Batas untuk pelat, simetri dan wall