

SIMULASI NUMERIK MODEL MATEMATIKA DINAMIKA REAKSI OKSIDASI DENGAN KONSENTRASI GAS UMPAN PERIODIK

Aang Nuryaman

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lampung
email: aangnuryaman@gmail.com

ABSTRAK

Dinamika reaksi oksidasi metana digambarkan dalam bentuk sistem persamaan difusi-konveksi yang di dalamnya mengandung suku tak linier yang terkait dengan laju reaksi dan dilengkapi dengan syarat awal dan syarat batas tertentu. Pada artikel ini akan dikaji dinamika peubah tak bebas temperatur dan konsentrasi pada proses oksidasi gas metana dengan konsentrasi gas umpan berupa fungsi periodik melalui pendekatan numerik. Profil konsentrasi gas umpan di sepanjang reactor akan disimulasikan untuk beberapa perioda berbeda dan dibandingkan dengan kasus gas umpan konstan. Hasil simulasi menunjukkan adanya pengaruh faktor besarnya laju alir gas umpan terhadap profil periodisitas gas metana di sepanjang reaktor.

Kata kunci: reaksi oksidasi, persamaan difusi-konveksi, fungsi periodik

PENDAHULUAN

Penelitian yang telah dilakukan para ahli selama beberapa dekade terakhir ini menunjukkan bahwa ternyata makin panasnya bumi salah satunya adalah akibat gas-gas rumah kaca yang dihasilkan oleh aktifitas manusia. Setiap gas rumah kaca memiliki efek pemanasan global yang berbeda-beda. Pemberi kontribusi terbesar terjadinya pemanasan global adalah gas CO₂ dan CH₄ (metana). Gas CH₄ menghasilkan efek pemanasan lebih parah dari CO₂. Sebagai contoh sebuah molekul metana menghasilkan efek pemanasan 23 kali lebih tinggi daripada molekul CO₂ (Salomons, 2003). Emisi gas CH₄ utamanya diperoleh dari sektor agrikultur (44%), pembakaran biomassa (22%), penambangan batubara (12%), dan industri gas dan minyak (15%) (Moore, 1988).

Salah satu strategi untuk mengurangi pengaruh pemanasan global adalah dengan mengkonversi gas CH₄ menjadi gas CO₂ menurut persamaan reaksi oksidasi (pembakaran):



Setiap 1 mol gas CH₄ yang dioksidasi akan melepaskan energi panas sebesar 802,7 kJ. Konversi gas CH₄ menjadi gas CO₂ akan menurunkan pengaruh pemanasan sebesar 87%. Keberadaan gas metana yang cukup kecil di udara (0,1-1% volume) menyebabkan konversi

gas metana menjadi gas CO₂ membutuhkan katalis agar reaksi tersebut dapat berlangsung. Reaktor unggun tetap berkatalis sesuai untuk berlangsungnya reaksi gas metana menjadi gas CO₂. Di sisi lain suhu metana yang rendah (sekitar 303 K) sangat jauh dari suhu reaksi sehingga membutuhkan pemanasan awal gas umpan.

Karakteristik gas rumah kaca yang berbeda-beda menjadikan perancangan model reaktor sangatlah penting dan memerlukan kajian mendalam. Perilaku dinamika gas umpan di dalam reaktor katalitik selama reaksi berlangsung terus dikaji untuk memperoleh data yang dibutuhkan untuk merancang reaktor yang baik dan sesuai. Dinamika gas umpan di dalam reaktor dapat dipandang sebagai masalah dinamika fluida dalam media berpori dengan gas umpan sebagai fluida dan katalis sebagai media berporinya. Masalah tersebut biasanya digambarkan dalam bentuk model matematika berupa persamaan difusi-konveksi yang di dalamnya terkandung suku tak linier yang terkait dengan laju reaksi. Ada dua pendekatan yang dapat dilakukan untuk membantu merancang reaktor sesuai dengan yang dibutuhkan yaitu melalui percobaan skala laboratorium dan pendekatan simulasi numerik (komputasi). Kedua pendekatan tersebut memiliki kelebihan dan kekurangan masing-masing namun keduanya saling membutuhkan satu sama lain.

Beberapa peneliti telah menggunakan pendekatan numerik untuk mengkaji perilaku dinamika gas umpan dalam sebuah reaksi diantaranya Salinger dkk (1996), Khinast dkk (1999), dan Gosiewsky dkk (2004). Para peneliti tersebut mengkaji dinamika perilaku gas umpan dengan konsentrasi konstan. Pada artikel ini, simulasi numerik digunakan untuk mempelajari bagaimana perilaku dinamika gas umpan di sepanjang reaktor khususnya yang terkait dengan konsentrasi dan temperatur gas umpan selama reaksi oksidasi berlangsung untuk kasus konsentrasi gas umpan periodik dan temperaturnya konstan. Lebih jauh akan dikaji sensitivitas parameter perioda konsentrasi gas umpan dengan cara memvariasikan nilai parameter tersebut.

METODE PENELITIAN

Metode yang digunakan dalam penelitian ini secara umum terbagi menjadi dua yaitu kajian pustaka dari berbagai jurnal ilmiah ataupun buku untuk kajian analisisnya dan simulasi komputasi sebagai kajian hampiran numeriknya. Adapun model matematika yang digunakan dalam simulasi numerik didasarkan pada asumsi bahwa temperatur (konsentrasi) fasa padat dan fasa gas pada suatu titik dalam arah koordinat panjang reaktor dianggap sama sehingga

diperoleh model homogen semu 1-D. Hampiran solusi numerik dari model matematika diperoleh dengan menggunakan metode beda hingga.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Model homogen semu 1-D yang digunakan diadopsi dari model yang dikemukakan oleh Khinast dkk (1999) yaitu

$$K \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_{ax} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} - u(\rho c_p)_s \frac{\partial T}{\partial z} + (-\Delta H)g(T)C - U_w a_w (T - T_c) \quad (1)$$

$$\epsilon \frac{\partial C}{\partial t} = \epsilon D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u \frac{\partial C}{\partial z} - g(T)C \quad (2)$$

Dengan $K = (1 - \epsilon)(\rho c_p)_s + \epsilon(\rho c_p)_g$ dan $g(T) = \frac{\eta k_{\infty} k_c a_p \exp(-E_a/RT)}{k_c a_p + \eta k_{\infty} \exp(-E_a/RT)}$. Peubah $T = T(z, t)$ dan $C = C(z, t)$ secara berturut-turut menyatakan temperatur dan konsentrasi gas umpan pada posisi z dan waktu t . Adapun syarat batasnya adalah

$$-\frac{\lambda_{ax}}{u(\rho c_p)_g} \frac{\partial T}{\partial z} = T_{in} - T, \quad -\frac{\epsilon D}{u} \frac{\partial C}{\partial z} = C_{in} - C, \quad \text{di } z = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad \text{di } z = L \quad (4)$$

yang dikenal dengan syarat batas Danckwert (Danckwerts, 1953) di mana T_{in} dan C_{in} menyatakan konsentrasi dan temperatur gas umpan serta L menyatakan panjang reaktor. Syarat batas ini diturunkan dari asumsi model bahwa dispersi massa dan energi hanya muncul di dalam reaktor. Secara fisis dispersi massa (energi) menyatakan penyebaran atau perubahan konsentrasi (temperatur) gas umpan dari satu titik ke titik lain karena adanya perbedaan konsentrasi (temperatur). Sedangkan syarat batas di ujung kanan reaktor diturunkan dari asumsi bahwa tidak ada pengaruh peralatan pada perilaku aliran. Secara fisis, konsentrasi (temperatur) gas metana di bagian dalam dan di bagian luar ujung kanan reaktor adalah sama. Dengan kata lain tidak ada perubahan konsentrasi (temperatur) gas metana di titik berikutnya pada ujung kanan reaktor.

Kondisi gas umpan yang masuk di ujung reaktor diasumsikan memiliki temperatur tetap dan konsentrasi berupa fungsi periodik berbentuk $C_{in}(t) = A + B \sin \omega t$ dengan $A > B$ dan ω terkait dengan frekuensi konsentrasi tinggi dan rendah di sepanjang reaktor pada periode waktu tertentu. Adapun pada saat kondisi awal, $t = 0$, diasumsikan reaktor telah dipanaskan terlebih dahulu sehingga mencapai suhu tertentu yang diinginkan, yaitu $T(z, 0) = T_0$.

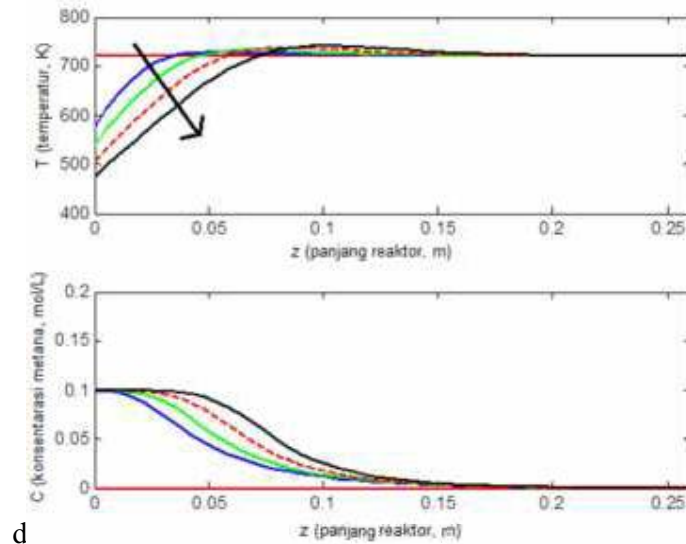
Pada simulasi numerik di sini, Persamaan (1)-(2) didiskritisasi dengan menggunakan metode *forward time centered space* (FTCS) sehingga diperoleh sistem persamaan terdiskritisasi dari Persamaan (1) - (2) sebagai berikut:

$$T_j^{n+1} = T_j^n + a_1 \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (T_{j+1}^n - 2T_j^n + T_{j-1}^n) - b_1 \frac{\Delta t}{2\Delta z} (T_{j+1}^n - T_{j-1}^n) - c_1 \Delta t (T_j^n - T_c) + d_1 \Delta t g(T_j^n) C_j^n$$

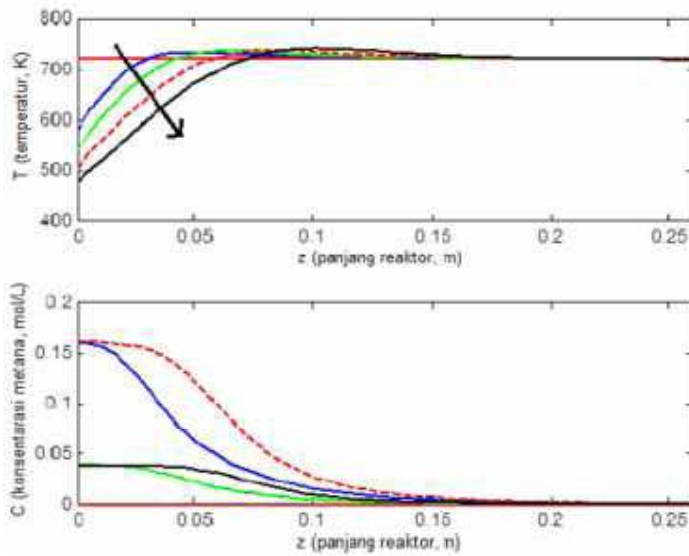
$$C_j^{n+1} = C_j^n + a_2 \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n) - b_2 \frac{\Delta t}{2\Delta z} (C_{j+1}^n - C_{j-1}^n) - d_2 \Delta t g(T_j^n) C_j^n$$

dengan $T_j^n = T(z_j, t_n)$, $C_j^n = C(z_j, t_n)$, $\Delta z = L/N_z$ dan $\Delta t = t/N_t$. N_z dan N_t berturut-turut menyatakan banyaknya partisi koordinat spasial dan partisi waktu.

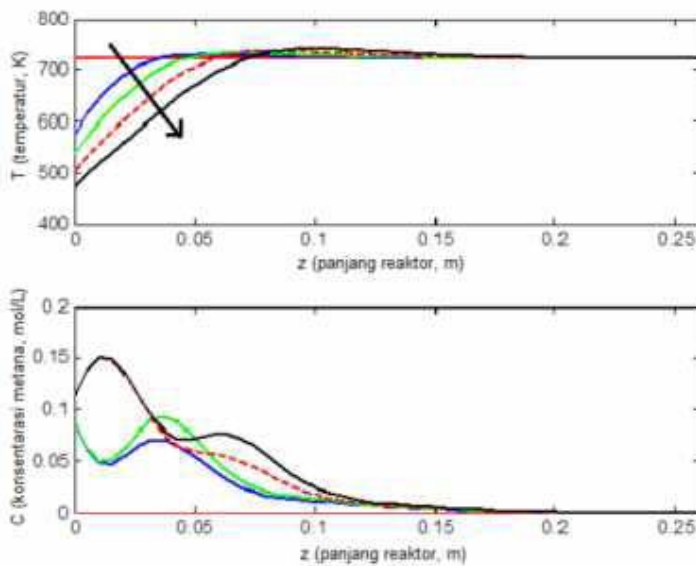
Dengan menggunakan syarat batas (3) - (4) dan syarat awal $T(z, 0) = T_0$, diperoleh profil dinamika temperatur dan konsentrasi gas metana untuk gas umpan konstan dan kondisi gas umpan periodik untuk beberapa nilai ω berbeda dapat dilihat pada



Gambar 3.1 Dinamika temperatur dan konsentrasi secara berturut-turut (sesuai arah panah) untuk $t = 0$, $t = \frac{1}{4}t_c$, $t = \frac{3}{8}t_c$ dan $t = \frac{1}{2}t_c$ dengan $A = 0.1$, $B = 0.07$, $\omega = 0$ (konsentrasi konstan), $T_c = 323 K$, $T(z, 0) = 773$, dan $C(z, 0) = 0$.



Gambar 3.2 Dinamika teemperatur dan konsentrasi secara berturut-turut (sesuai arah panah) untuk $t = 0$, $t = \frac{1}{4} t_c$, $t = \frac{3}{8} t_c$ dan $t = \frac{1}{2} t_c$ dengan $A = 0.1$, $B = 0.07$, $\omega = \pi/15$ (konsentrasi konstan), $T_c = 323 K$, $T(z, 0) = 773$, dan $C(z, 0) = 0$.



Gambar 3.3 Dinamika teemperatur dan konsentrasi secara berturut-turut (sesuai arah panah) untuk $t = 0$, $t = \frac{1}{4} t_c$, $t = \frac{3}{8} t_c$ dan $t = \frac{1}{2} t_c$ dengan $A = 0.1$, $B = 0.07$, $\omega = 15\pi$ (konsentrasi konstan), $T_c = 323 K$, $T(z, 0) = 773$, dan $C(z, 0) = 0$.

Secara umum, antara konsentrasi gas umpan konstan dengan gas umpan periodik tidak memberikan dampak yang cukup berbeda pada profil temperaturnya. Hal ini dikarenakan pemilihan nilai B pada fungsi gas umpan periodik C_{in} yang kecil sehingga efeknya terhadap kenaikan temperatur juga kecil. Profil temperatur di titik ujung reaktor di mana gas umpan masuk, seiring dengan bertambahnya waktu terlihat semakin menurun. Hal ini terjadi karena adanya faktor dispersi. Di posisi reaktor semakin ke ujung kanan, temperatur semakin meningkat kemudian menurun kembali. Profil ini terjadi karena pengaruh adanya kontribusi dari panas hasil reaksi dan pendinginan. Ketika konsentrasi gas umpan semakin habis, maka kontribusi panas hasil reaksi menjadi semakin kecil hingga tidak ada. Namun di sisi lain pendinginan masih tetap berlangsung, sehingga temperatur akan semakin turun.

Sedangkan profil konsentrasi untuk kasus gas umpan konstan, menunjukkan seiring dengan bertambahnya waktu konsentrasi di dalam reaktor semakin meningkat khususnya di posisi dekat ujung reaktor di mana gas umpan masuk. Hal ini terjadi karena tidak semua gas umpan langsung bereaksi. Namun semakin ke kanan, konsentrasi semakin mendekati nol atau habis karena bereaksi. Adapun untuk kasus gas umpan periodik, secara umum profil konsentrasi serupa dengan kasus gas umpan konstan. Perbedaannya terletak pada adanya osilasi antara konsentrasi tinggi dan rendah.

Adapun variasi nilai ω berpengaruh pada ada tidaknya bentuk gelombang pada profil konsentrasi di sepanjang reaktor. Ketika ω kecil, maka bentuk gelombang fungsi periodiknya semakin tidak nampak. Gas umpan yang semakin habis karena bereaksi menjadikan kecekungan puncak maupun lembah konsentrasi gas umpan semakin landai ketika koordinat z mendekati ujung reaktor. Dari Gambar 3.1 – Gambar 3.3 terlihat bahwa gas umpan habis karena bereaksi setelah melewati setengah panjang reaktor

KESIMPULAN

Dari uraian bab-bab sebelumnya dapat disimpulkan bahwa pada model homogen semu 1-D, efek gas umpan konstan dan periodik pada profil dinamika temperatur tidaklah signifikan atau perbedaan yang mencolok. Hal ini disebabkan konsentrasi gas umpannya kecil. Sedangkan pada profil dinamika konsentrasi gas umpan, pengaruh besar perioda gas umpan yang masuk berpengaruh pada ada tidaknya bentuk gelombang pada profil konsentrasi.

DAFTAR PUSTAKA

- Dankwerts, P.V. 1953. Continous flow system: Distribution of Residence times. *Chem. Eng. Sci.*, 2: 1-13.
- Gosiewski, K. 2004. Effective approach to cyclic steady state in the catalytic reverse-flow combustion of methane. *Chemical Engineering Science*, 59,4095 – 4101.
- Khinast, J., Jeong, Y.O., Luss, D., 1999. Dependence of cooled reverse-flow reactor dynamics on reactor model. *A.I.Ch.E. Journal* 45, 299–309.
- Moore, T.R. 1988. Atmosphere Methane. *The Canadian Geographer*. 32(2):178-184.
- Salinger, A., Eigenberger, G. 1996a. The Direct Calculations of Periodic States of the Reverse flow Reactor-I, Methodology and Propane Combustion Result. *Chemical Engineering Science*. 51: 4903-4913
- Salomons, S., Hayes, R., Poirier, M., dan Sapoundjiev, H. 2003. Flow reversal reactor for catalytic combustions of lean methane mixtures. *Catalysis Today*. 83: 59-69.