

Simulasi Enhancement Factor untuk Absorpsi Gas disertai Reaksi Kimia Reversibel Orde Dua Kondisi Non Isotermal dengan Model Difusitas Eddy

Yunita D. Indrasari, Koatlely A. Serpara, dan Ali Altway*

Laboratorium Perpindahan Massa dan Panas Jurusan Teknik Kimia, FTI-ITS
Kampus ITS Sukolilo, Surabaya 60111. Telp/Fax (031) 5961317/(031)5995273

Abstract

Proses absorpsi gas ke dalam liquida seringkali dijumpai dalam dunia industri. Proses ini dilakukan untuk memisahkan suatu komponen yang tidak diinginkan dan untuk mendapatkan suatu senyawa yang merupakan hasil reaksi. Proses absorpsi di industri umumnya adalah absorpsi secara kimia yang dilakukan dalam packed column atau bubble column dengan aliran counter current. Reaksi kimia dapat terjadi secara irreversibel atau reversibel. Pada kondisi nyata, proses absorpsi gas terjadi pada kondisi non isotermal yang sangat dipengaruhi oleh panas pelarutan gas. Pengaruh panas dan reaksi kimia terhadap laju absorpsi dinyatakan dengan enhancement factor. Beberapa penelitian terdahulu tentang enhancement factor untuk absorpsi gas pada kondisi non isotermal terbatas pada pemakaian model film dan model Higbie. Model film cukup sederhana namun kurang realistis dengan asumsi film stagnan. Model Higbie cukup realistis namun melibatkan persamaan difusi unsteady state yang rumit. Pada simulasi ini penelitian dikembangkan dengan model difusivitas eddy untuk reaksi orde dua. Model ini cukup realistis namun sederhana.

Tujuan dari penelitian ini adalah permodelan matematis untuk menentukan faktor peningkatan absorpsi gas dalam larutan yang disertai reaksi reversibel orde dua dalam kondisi non isotermal dengan model difusivitas eddy. Penelitian dilakukan secara teoritis dengan simulasi menggunakan program matlab dimana perumusan harga enhancement factor diturunkan dari persamaan dasar absorpsi dengan menggunakan model difusivitas eddy. Harga-harga variabel yang ditinjau pada penelitian ini adalah perbandingan rate difusi A terhadap rate difusi B (S) 0.01 - 0.0125, bilangan hatta (γ) antara 1 - 100, energi aktivasi difusi (E_d) 4 - 20, energi aktivasi reaksi (E_r) 5, energi aktivasi pelarutan (E_s) 0 - 1.5, panas pelarutan (ΔH_s) dan panas reaksi (ΔH_r) 0.001 - 0.003, konstanta kesetimbangan (K) 10 - 15, ratio konsentrasi (L) 100, dan ratio difusi (T) 1. Reynolds number 5000 (Tak berdimensi). Dari penelitian yang telah dilakukan didapatkan bahwa harga enhancement factor dipengaruhi oleh harga S dan bilangan hatta. Semakin besar bilangan hatta cenderung akan mempercepat laju absorpsi. Dan diperoleh bahwa dengan model difusivitas eddy, harga enhancement factor yang didapatkan lebih besar daripada dengan menggunakan model film. Panas kelarutan, panas reaksi, dan energi aktivasi memiliki andil tersendiri dalam mempengaruhi harga enhancement factor.

Kata Kunci : enhancement factor ; diffusivity eddy ; non isotermal; simulasi

TEORI

Laju absorpsi dapat dipengaruhi oleh reaksi kimia dan panas. Pengaruh reaksi kimia dan panas terhadap laju penyerapan gas dinyatakan dengan faktor peningkatan/enhancement factor (E), sehingga persamaan laju absorpsi menjadi

$$R = E \cdot k_L (A^* - A^0) \quad (1)$$

pada kondisi isotermal, enhancement factor didefinisikan sebagai rasio laju absorpsi disertai reaksi kimia terhadap laju absorpsi fisik tanpa adanya perubahan temperatur dimana harga E_{iso} ditentukan oleh kecepatan reaksi dan kecepatan difusi.

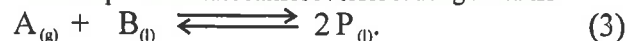
Untuk kondisi non isothermal, Enhancement factor didefinisikan sebagai ratio laju absorpsi disertai reaksi kimia dengan pengaruh panas dengan laju absorpsi secara fisik tanpa pengaruh panas :

$$E_{non} = \frac{D_A(T_i) \frac{dC_A}{dx}}{k_L C_{Aib}} \quad (2)$$

dimana C_{Aib} adalah konsentrasi di interface gas terlarut yang dievaluasi pada temperature bulk. Untuk reaksi eksotermis, kenaikan suhu dapat disebabkan

oleh panas pelarutan dan panas reaksi itu sendiri. Pemanasan liquid menyebabkan laju reaksi dan difusi meningkat, sehingga gradien konsentrasi mendekati interface gas liquid. Tetapi pemanasan justru memperkecil kelarutan gas dalam liquid yang menurunkan driving force pada proses absorpsi.

Pada kondisi non isothermal, Enhancement factor ditentukan dengan memperhitungkan pengaruh panas reaksi dan panas pelarutan terhadap suhu film, karena hal ini akan berpengaruh terhadap laju absorpsi. Untuk mendapatkan harga E_{non} , apabila proses absorpsi gas ke dalam liquid disertai reaksi reversibel dengan reaksi



METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian ini dilaksanakan secara teoritis dengan membuat program simulasi untuk menentukan enhancement factor untuk absorpsi gas disertai reaksi reversibel orde dua dalam kondisi nonisothermal.

Diffusivity eddy pada fase liquid

$$\epsilon = a \cdot y^2 \quad \text{dengan } a = 7.9 \cdot 10^{-5} Re^{1.678} \quad (4)$$

Neraca Massa untuk komponen A, B dan P

Input - Output - yang bereaksi = Akumulasi

$$F_{x,x} - F_{x,x+\Delta x} - k_1 C_A C_B \Delta x S + k_{-1} C_P^2 \Delta x S = 0 \quad (5)$$

$$\frac{d}{dy} \left\{ [D_A + \epsilon(y)] \frac{dC_A}{dy} \right\} - (k_1 C_A C_B - k_{-1} C_P^2) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{d}{dy} \left\{ [D_B + \epsilon(y)] \frac{dC_B}{dy} \right\} - (k_1 C_A C_B - k_{-1} C_P^2) = 0 \quad (7)$$

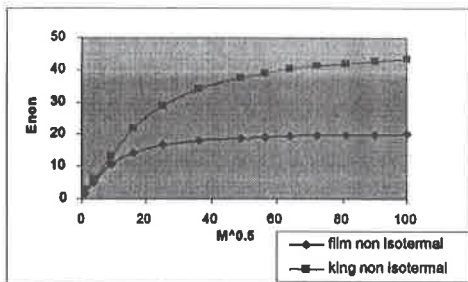
$$\frac{d}{dy} \left\{ [D_P + \epsilon(y)] \frac{dC_P}{dy} \right\} + 2(k_1 C_A C_B - k_{-1} C_P^2) = 0 \quad (8)$$

HASIL DAN PEMBAHASAN

Tujuan dari penelitian ini adalah pemodelan matematis untuk menentukan faktor peningkatan absorpsi gas (enhancement factor) dalam larutan yang disertai reaksi reversibel orde dua dalam kondisi non isothermal dengan model difusivitas eddy. Penelitian dilakukan secara teoritis dengan simulasi menggunakan program matlab dimana perumusan harga enhancement factor diturunkan dari persamaan dasar absorpsi dengan menggunakan model difusivitas eddy.*

Pengaruh Diffusivitas Eddy

Harga enhancement factor non isothermal untuk model film dengan model difusivitas eddy (model King) dapat dilihat dari grafik di bawah ini.

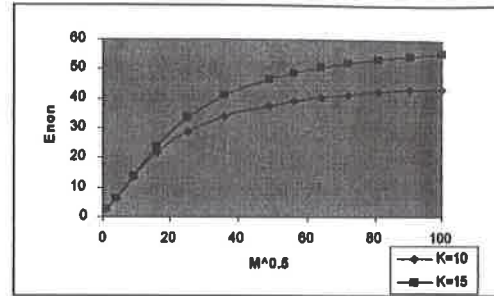


Gambar 1 Grafik Enon vs \sqrt{M} untuk Model Film dengan Model Difusivitas Eddy (model King)

Dari grafik diatas, untuk Enhancement factor yang sama-sama dalam kondisi non isothermal terdapat perbedaan untuk model film dengan model difusivitas eddy. Dapat dilihat bahwa dengan model difusivitas eddy harga Enon (Enhacement Factor non isothermal) lebih besar daripada dengan model film. Hal ini dikarenakan dengan model difusivitas eddy, terdapat penambahan nilai difusivitas pada liquida yang bergolak. Kenaikan difusivitas menyebabkan harga enhancement factor juga meningkat karena naiknya laju absorpsi.

Pengaruh Konstanta Kesetimbangan (K)

Besar kecilnya konstanta Kesetimbangan memiliki pengaruh terhadap besarnya harga enhancement factor non isothermal. Dari grafik dibawah dapat dilihat perbedaan untuk harga K = 10 dengan K = 15.



Gambar 2 Grafik Pengaruh K terhadap Enhancement Factor Non Isothermal

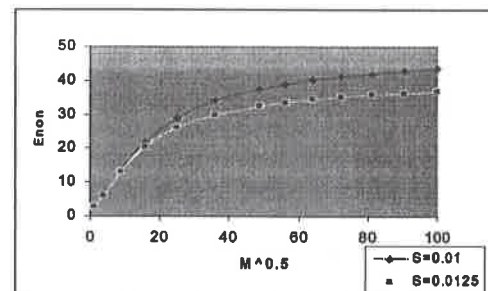
Dari gambar terlihat bahwa semakin besar harga konstanta kesetimbangan (K), harga enhancement factornya juga semakin besar. Semakin besar nilai K, temperatur naik lebih tinggi sehingga mempercepat reaksi bergeser ke kanan.



Peningkatan temperatur pada sistem, yaitu pada absorpsi gas, meningkatkan pergerakan pada keseluruhan komponen. Kenaikan mobility ini menyebabkan reaksi produk, P, tertransfer lebih cepat dari zone reaksi ke zone bulk, sedang reaktan B akan bergerak cepat dari bulk ke zone reaksi. Sedang konsentrasi A akan jatuh (semakin banyak A yang bereaksi). Slope konsentrasi A pada kurva dekat interface akan meningkat, hal ini menyebabkan harga enhancement factor lebih tinggi

Pengaruh Rate Difusi (S)

Pengaruh rate difusi S terhadap enhancement factor non isothermal dapat dilihat dari grafik dibawah ini.



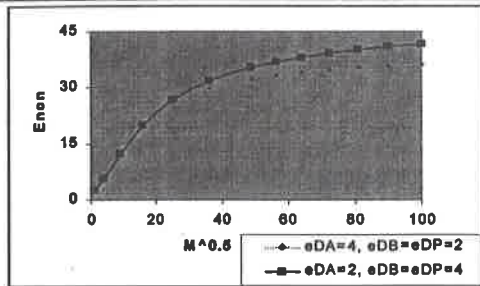
Gambar 3 Grafik Pengaruh S terhadap nilai Enhancement Factor

Pada reaksi gas liquid, gas terlebih dahulu diabsorpsi dengan terdifusi ke dalam liquid melalui interface. Difusi solute dalam liquida berupa gerakan thermal secara acak. Adanya ketergantungan temperatur terhadap difusivitas, pada saat temperatur naik, konsentrasi gas yang diserap banyak mendorong difusi gas ke interface lebih lambat.

Dari grafik dapat dilihat untuk nilai S yang lebih besar, (rate difusi A lebih besar) konsentrasi gas yang diserap banyak sehingga difusi A melalui interface ke film liquid menuju bulk lebih lambat, hal inilah yg menyebabkan laju absorpsi juga lambat sehingga harga Enhancement factor menurun

Pengaruh Energi Aktivasi Diffusi

Pengaruh energi aktivasi diffusi A, B, dan P terhadap harga enhancement factor non isothermal dapat ditunjukkan pada gambar IV.4 IV.6.



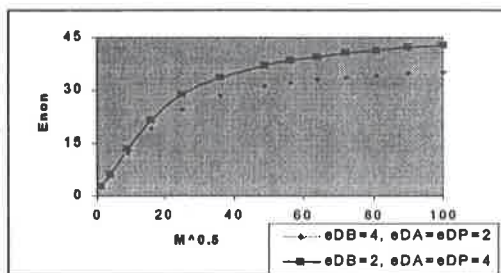
Gambar 4 Grafik Pengaruh Energi Aktivasi Difusivitas Komponen A Terhadap Enhancement Factor

Dari grafik di atas dapat dilihat bahwa untuk ϵ_{DB} dan ϵ_{DP} 4 harga enhancement factor lebih besar daripada untuk ϵ_{DA} 4.

Hal ini disebabkan karena pada simulasi ini menggunakan L yang sangat besar ($L=100$), harga enhancement factor lebih dipengaruhi oleh ϵ_{DB} daripada pergerakan A.

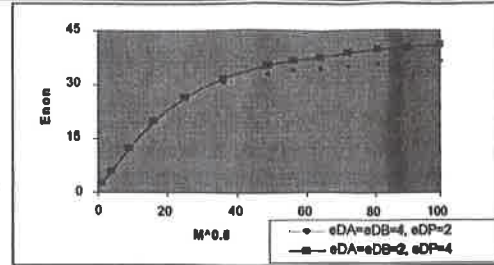
Tetapi pada bilangan hatta yg lebih rendah, terlihat harga enhancement yang diperoleh lebih besar karena pengaruh nilai ϵ_{DA} . Pada regim ini rate reaksi jauh lebih kecil daripada rate transfer A di film, sehingga konsentrasi A dekat interface besar, hal ini menyebabkan enhancement di regim ini lebih dipengaruhi ϵ_{DA} .

Pada grafik ini ϵ_{DB} dan ϵ_{DP} lebih mempengaruhi harga enhancement factor, hal ini karena kenaikan pergerakan produk menyebabkan perpindahan produk ke bulk liquid terjadi lebih cepat, sementara reaktan B bergerak lebih cepat ke film. Untuk mendapatkan batasan equilibrium, konsentrasi A di film jatuh sehingga harga enhancement factor meningkat.



Gambar 5 Grafik Pengaruh Energi Aktivasi Difusivitas Komponen B Terhadap Enhancement Factor

Difusivitas dari komponen A, B, dan P yang bergantung pada temperatur meningkatkan pergerakan mereka seiring dengan kenaikan temperatur. Dari grafik diatas, untuk ϵ_{DA} dan ϵ_{DP} yang lebih besar menyebabkan harga enhancement yang terjadi juga lebih besar. Hal ini dikarenakan P yang bergerak cepat dari film ke bulk mengurangi rata-rata nilai konsentrasi di film, pengurangan ini di kombinasikan dengan tingginya mobility A sehingga harga enhancement yang didapatkan lebih besar.



Gambar 6 Grafik Pengaruh Energi Aktivasi Difusivitas Komponen P Terhadap Enhancement Factor

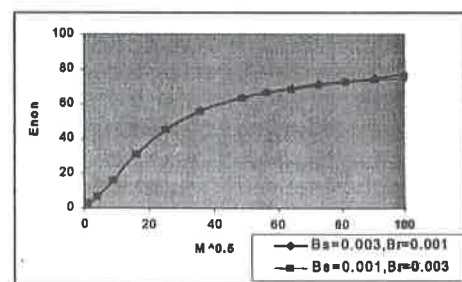
Harga enhancement factor yang diperoleh untuk ϵ_{DP} 4 ternyata lebih tinggi. Saat temperature tergantung pada harga difusivitas P, peningkatan pergerakan dari P menyebabkan pengurangan komponen ini pada film, agar didapatkan batasan equilibrium, konsentrasi A semakin banyak berkurang, hal ini menyebabkan enhancement factor meningkat.

Dari ketiga grafik diatas, grafik IV.4 IV.6, temperatur yang tergantung pada P mempunyai efek yang lebih besar terhadap enhancement factor daripada temperatur yang tergantung pada B dan A.

Tetapi saat nilai bilangan hatta rendah, harga enhancement factor untuk ϵ_{DA} dan ϵ_{DB} 4 terlihat sedikit lebih tinggi, hal ini dikarenakan pada bilangan hatta yang rendah, secara keseluruhan mass transfer ditentukan oleh forward reaction. Sejumlah komponen P yang terbentuk di film tidak mencukupi untuk backward reaction untuk mempengaruhi laju transfer massa, sehingga peningkatan mobility dari A dan B lebih berpengaruh terhadap enhancement daripada mobility P.

Pengaruh Panas Pelarutan dan Panas Reaksi

Panas kelarutan dan panas reaksi memiliki pengaruh terhadap harga enhancement factor non isothermal, pengaruh keduanya dapat dilihat dari grafik dibawah.

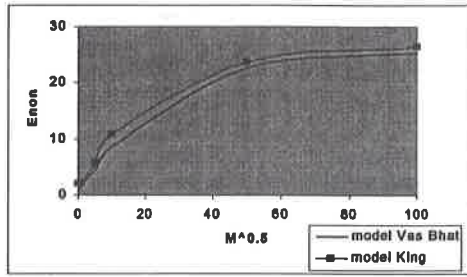


Gambar 7 Grafik Pengaruh Panas Kelarutan dengan Panas Reaksi Terhadap Enhancement Factor

Dari gambar diatas terlihat bahwa panas pelarutan dan panas reaksi memiliki pengaruh yang sama terhadap Enon. Keduanya sama sama meningkatkan laju absorpsi.

Komparasi Hasil Perhitungan

Perbandingan Hasil Perhitungan harga E_{non} berdasarkan model King (eddy difusivity, pada penelitian ini) dengan E_{non} berdasarkan teori penetrasi hasil penelitian R.D Vas Bhat et all (1997) dapat dilihat dari grafik IV.8 IV.10 dibawah untuk berbagai nilai ϵ_p



Gambar 8 Grafik Perbandingan Harga Enhancement Factor dengan Model Vas Bhat dan Model King untuk $\epsilon_D = 0$

Dari hasil perbandingan grafik diatas dapat disimpulkan bahwa dengan teori penetrasi yang dikerjakan Vas Bhat dengan model eddy diffusivity pada penelitian ini terdapat perbedaan, dengan deviasi rata-rata dari $\epsilon_D = 0$, $\epsilon_D = 4$, $\epsilon_D = 8$ diatas sebesar 12.0413%.

KESIMPULAN

Dari penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan :

1. Harga enhancement factor dengan model difusivitas eddy memiliki harga yang lebih besar dibandingkan dengan model film, yaitu sebesar 50.6%
2. Pada nilai K lebih kecil harga enhancement factor juga lebih kecil, yaitu pada $K = 10$, $E_{non} = 43.5088$ sedangkan pada $K = 15$, $E_{non} = 55.6014$.
3. Semakin besar kecepatan difusi A ke B ($S = 0.0125$), harga E_{non} semakin kecil.
4. Peningkatan energi aktivasi difusi reaktan gas (A), liquid (B) dan produk (P) saling mempengaruhi besar kecilnya faktor peningkatan laju absorpsi, yang terutama P lebih berpengaruh.
5. Panas reaksi dan panas pelarutan memiliki pengaruh yang hampir sama terhadap faktor peningkatan laju absorpsi.

Hasil komparasi harga E_{non} model King (difusivitas eddy, pada penelitian ini) dengan model penetrasi Vas Bhat memiliki deviasi sebesar 12.0413 %.

UCAPAN TERIMAKASIH

Kami ucapkan banyak-banyak terima kasih kepada Bpk. Ali Altway dan Bpk. Susianto selaku bapak pembimbing kami atas arahan dan bimbingannya. Kami ucapkan terimakasih juga kepada semua pihak yang telah membantu terselesaikannya penelitian ini.

DAFTAR NOTASI

C	Konsentrasi larutan	mol/cm ³
C _A	Konsentrasi komponen A (reaktan gas)	mol/cm ³
C _B	Konsentrasi komponen B (reaktan liquida)	mol/cm ³
C _P	Konsentrasi komponen P (produk)	mol/cm ³
D _A	Koefisien difusivitas spesies A	cm ² /s
D _B	Koefisien difusivitas spesies B	cm ² /s
D _P	Koefisien difusivitas spesies P	cm ² /s
E _{non}	Enhancement Factor kondisi Non Isotermal	cm ² /s
K	Konstanta Kesetimbangan (k ₁ /k ₋₁)	
k ₁	Konstanta reaksi orde 2	
k _L	Koefisien perpindahan massa fase liquid	cm ³ /mol.s
β _R	Bentuk tak berdimensi dari panas reaksi $<(-\Delta H_R)D_A C_{Aib} / KT_b >$	cm/s
β _S	Bentuk tak berdimensi dari panas pelarutan $<(-\Delta H_S)D_A C_{Aib} / KT_b >$	
δ _M	Ketebalan film untuk transfer massa	cm
δ _H	Ketebalan film untuk transfer panas	cm
D	energi aktivasi tak berdimensi untuk difusi $< E_D / RT_b >$	
K	energi aktivasi tak berdimensi untuk reaksi fase liquid $< E_R / RT_b >$	
S	Energi aktivasi pelarutan tak berdimensi $< E_S / RT_b >$	
θ	Bentuk tak berdimensi dari Temperatur	

DAFTAR PUSTAKA

Basil H. Al-Ubaidi, M. Sami Selim." Non-isothermal Gas Absorption Accompanied By a Second Order Irreversible Reaction". AIChE Journal, Vol.36 No.1, January 1990

Danckwertz FRS, P.V. "Gas Liquid Reaction". McGraw Hill Book Company, New York, 1970,18-20

Endah W.L. dan Feri J.I. 2007. "Enhancement Factor untuk Absorpsi Gas disertai Reaksi Reversibel Orde Dua dalam Kondisi Non Isotermal".

J.A. Hogendoorn, et. al. 1997. "Approximation for The Enhancement Factor Applicable to Reversible Reactions of Finite Rate in Chemically Loaded Solution". Engineering Science vol 52, no.24.

Guy D. Menez dan Orville C. Sandall. 1974. "Gas Absorption Accompanied by First-Order Chemical Reaction in Turbulent Liquids". Ind. Eng. Chem., Fundam., Vol.13 No.1

R. D. Vas Bhat, W.P.M van Swaaij, et al. 1997. "Non-Isotermal Gas Absorption Reversible Chemical Reaction". Chemical Engineering Science vol 52.