

Submitted : 11 Oktober 2018

Revised : 27 November 2018

Accepted : 15 Desember 2018

MODEL NUMERIK ABSORPSI GAS REAKSI ORDE DUA TAK REVERSIBEL

Putri Ramadhany^{1*}

¹ Program Studi Teknik Kimia, Fakultas Teknik Industri, Universitas Katolik Parahyangan

*Email: pramadhany@unpar.ac.id

Abstrak

Kontak antara fasa gas dan cair banyak sekali ditemui dalam industri kimia. Seringkali kontak yang terjadi disertai dengan reaksi kimia. Dalam absorpsi gas yang disertai dengan reaksi kimia dalam fasa cair, laju absorpsi gas dapat meningkat atau menurun secara signifikan. Akan tetapi terdapat beberapa kesulitan untuk mendeskripsikan kualitas perpindahan massa. Hal ini dikarenakan oleh keterbatasan numerik dalam menyelesaikan neraca massa kompleks. Tujuan penelitian ini adalah melakukan validasi model solusi numerik dengan membandingkan dua parameter yang dapat digunakan dalam menentukan kualitas perpindahan massa, yaitu: *enhancement factor* (E_{A0}) dan bilangan Hatta (ϕ). Perpindahan massa antara fasa gas dan cair diasumsikan mengikuti model penetrasi Higbie. Model ini mengasumsikan perpindahan massa komponen A dari fasa gas menuju fasa cair yang mengandung komponen B dengan waktu tinggal (t) yang seragam. *Lazarus Pascal Programming Language*® digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial parsial parabola tidak linear. Metode yang akan digunakan untuk memberikan solusi numerik adalah metode beda hingga (*finite difference method*). Pemodelan absorpsi gas ini berhasil dilakukan dengan 50 time steps dan diskrepansi sebesar 0,55%. Saat kondisi tunak, nilai *enhancement factor* (E_{A0}) yang didapatkan pada berbagai bilangan Hatta sesuai dengan nilai yang dihitung berdasarkan persamaan teoritis dengan deviasi sebesar 3,5%. Model yang didapatkan kemudian digunakan untuk menentukan keefektifannya pada suatu studi kasus. Pada saat waktu tinggal 3,25 ms, nilai *enhancement factor* (E_{A0}) yang didapatkan melalui solusi numerik lebih kecil dari solusi teoritis. Berdasarkan pemodelan, hal ini menunjukkan bahwa waktu tinggal belum menuju kondisi tunak.

Kata Kunci: absorpsi gas, bilangan Hatta, *enhancement factor*, reaksi kimia, orde dua, *Pascal*.

Abstract

Contact between gas and liquid phase are often found in the chemical industries and it is often followed by chemical reaction. In the gas absorption followed by chemical reaction, the rate of absorption can increase or decrease significantly. However, the quality of mass transfer can be hardly described quantitatively. This is due to numerical limitation in solving complex mass balances. The aim of this research is to validate numerical solution by comparing two parameters that can describe quality of mass transfer, *enhancement factor* (E_{A0}) and Hatta number (ϕ). The mass transfer is assumed following Higbie penetration model. In this research, the developed model assumes mass transfer of component A from gas phase to liquid phase that contain component B with uniform residence time (t). *Lazarus Pascal Programming Language*® is used to solve non-linear parabolic partial differential equation. Finite difference method is applied to give numerical solution. The modeling of the gas absorption with second order reaction is completed in 50 time steps and deviation of 0,55%. In steady state condition, the obtained *enhancement factor* (E_{A0}) in various Hatta number is in accordance with theoretical solution with 3.5% deviation. The valid model is then applied on a study case. When residence time 3.25 ms, the *enhancement factor* (E_{A0}) is smaller than theoretical solution. This shows that the residence time is still in transient state.

Keywords: gas absorption, Hatta number, *enhancement factor*, chemical reaction, second order, *Pascal*.

1. PENDAHULUAN

Kontak antara fasa gas dan cair seringkali ditemui dalam industri kimia (contoh: hidrogenasi dan oksidasi). Pada saat fasa gas dikontakkan dengan fasa cair, maka akan terjadi proses perpindahan massa. Tidak langka pula, perpindahan massa ini disertai dengan reaksi kimia. Reaksi kimia dapat meningkatkan atau menurunkan kualitas perpindahan massa antara fasa gas dan cair. Pemahaman mengenai karakteristik perpindahan massa antara fasa gas dan cair sangat diperlukan dalam menentukan proses variabel lain (seperti *yield* dan selektivitas) dan mendesain unit proses.

Perpindahan massa antara fasa gas dan cair sudah diteliti sejak lama. Whitman pertama kali mengeluarkan model perpindahan massa pada tahun 1923 melalui teori model film stagnan (*stagnant film model*). Akan tetapi, model yang dikeluarkan Whitman tidak memberikan kepuasan dalam mendefinisikan karakteristik perpindahan massa antara fasa gas dan cair. Oleh karena itu, muncul beberapa model perpindahan massa lain untuk memperbaiki model perpindahan massa Whitman. Berikut tiga model yang paling sering digunakan dalam mendiskripsikan perpindahan massa antara fasa gas dan cair:

1. Whitman (model film stagnan)
2. Higbie (model penetrasi)
3. Danckwerts (*surface renewal model*)

Model yang sering digunakan dalam solusi numerik adalah model film stagnan, dimana perpindahan massa dimodelkan melalui difusi molekuler pada film stagnan dengan ketebalan δ . Model penetrasi Higbie memperkenalkan waktu tinggal (t) yang identik untuk semua elemen fluida sebagai parameter karakteristik. *Surface renewal model* memperkenalkan probabilitas waktu tinggal Danckwerts sebagai parameter karakteristik (van Swaaij dan Versteeg, 1992).

Dilihat dari segi model, model stagnan film Whitman paling banyak digunakan karena kesederhanaannya. Namun, pendekatan ini tidak dapat digunakan dalam sistem dinamik. Untuk sistem dinamik, model penetrasi Higbie dan *surface renewal model* banyak dipilih karena lebih realistis. Walau kenyataannya kedua model tersebut masih belum bisa menggambarkan kondisi dinamik. Sayangnya, hingga saat ini masih belum ada model yang benar - benar dapat menggambarkan kondisi dinamik sistem gas dan cair.

Sudah terdapat beberapa penelitian mengenai komputasi untuk menyelesaikan perpindahan massa antara fasa gas dan cair. Penelitian yang dilakukan oleh van Elk dkk (2000) membuat *rigorous dynamic model* yang berbasis pada teori model penetrasi Higbie. Model yang dibuat oleh van Elk dkk (2000) merupakan pengembangan dari konsep Hinterland yang menggunakan model film stagnan Whitman. Van Elk dkk (2000) berhasil mengaplikasikan solusi model numerik pada sistem fasa gas dan cair yang disertai reaksi kimia reversibel dan tak reversibel. Penelitian yang dilakukan oleh Benbelkacem dan Debellefontaine (2003) membuat model perpindahan massa antara

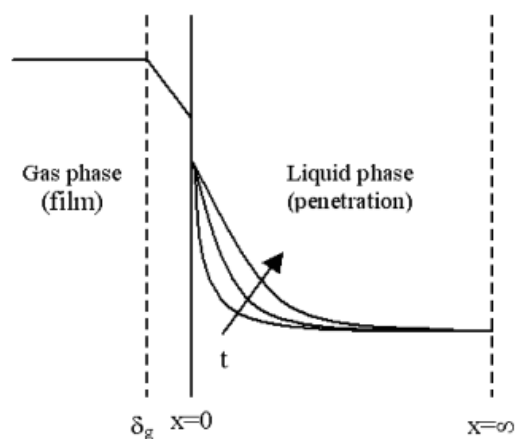
fasa gas dan cair yang disertai reaksi tak reversibel dengan menggunakan teori model film stagnan Whitman. Selain itu, parameter baru *depletion factor* (D) diperkenalkan dalam model. *Depletion factor* (D) merupakan parameter yang digunakan untuk membedakan fraksi reaksi yang terjadi dalam film dengan reaksi yang terjadi dalam cairan bulk.

Penelitian selanjutnya yang dilakukan van Elk dkk (2007) menginvestigasi perpindahan massa yang disertai reaksi tak reversibel pada sistem tanpa cairan bulk dan sistem yang disertai cairan bulk. Penelitian van Elk (2007) menggunakan model penetrasi Higbie dengan asumsi kondisi isothermal. Model yang dibuat oleh van Elk dkk (2007) ternyata dapat diaplikasikan pada sistem tanpa cairan bulk jika ketebalan film δ setidaknya sama dengan kedalaman penetrasi (d_{pen}).

Penelitian yang dilakukan oleh Eldien dkk (2016) melakukan simulasi modeling perpindahan massa disertai reaksi tak reversibel orde dua. Penelitian dilakukan untuk menghitung *enhancement factor* (E_{A0}) berdasarkan model film stagnan Whitman. Berdasarkan penelitian Eldien dkk (2016), *enhancement factor* (E_{A0}) bergantung pada parameter *enhancement factor* maksimum ($E_{A\infty}$) dan konsentrasi dari pelarut.

Walaupun muncul beberapa model, masih belum ditemukan kriteria model yang memuaskan dalam menggambarkan fenomena perpindahan massa antara fasa gas dan cair. Hal ini dikarenakan keterbatasan numerik dalam menyelesaikan neraca massa yang kompleks. Akan tetapi, dengan kemajuan teknologi komputasi saat ini, menyelesaikan model numerik yang kompleks tidak lagi menjadi suatu hal yang sulit. Hal ini yang menjadi motivasi dalam melakukan penelitian ini, yaitu membuat solusi numerik untuk absorpsi gas yang disertai reaksi kimia orde dua. Validasi model kemudian dilakukan dengan membandingkan hasil solusi numerik dengan hasil solusi teoritis.

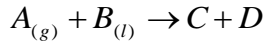
Model penetrasi Higbie adalah model perpindahan massa dengan parameter karakteristik waktu tinggal (t). Model ini telah banyak diaplikasikan pada perpindahan massa gelembung, tetesan, dan film cairan yang bergerak.



Gambar 1. Model Penetrasi Higbie (van Elk, 2007)

2. METODE PENELITIAN

Dalam penelitian ini, reaktan gas A terabsorpsi ke dalam fasa cair yang mengandung komponen B. Reaksi yang berlangsung antara komponen A dan B adalah reaksi tak reversibel disertai reaksi kimia orde dua. Dimana perpindahan massa dalam fasa gas tidak menjadi limitasi.



Model penetrasi Higbie digunakan untuk membuat model perpindahan massa antara fasa gas dan cair. Model film stagnan Whitman tidak dipilih karena tidak realistis, walaupun memiliki konsep yang sederhana. Model penetrasi Higbie dan *surface renewal model* dapat digunakan pada kondisi dinamik disertai reaksi kimia. Namun, model penetrasi Higbie dipilih karena kesederhanaannya. Penelitian yang telah dilakukan oleh van Elk dkk (2007) menjadi basis dalam penelitian ini. Dengan menggunakan asumsi - asumsi yang digunakan oleh van Elk dkk (2007). Perhitungan numerik perpindahan massa dilakukan dengan metode beda hingga (*finite difference method*) dengan skema diskritisasi implisit menggunakan *Pascal Programming Language*.

Neraca massa yang mengikuti model penetrasi Higbie dapat dimodelkan dalam bentuk persamaan differensial parsial parabola tak linear sebagai berikut:

Komponen A
$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - k C_A C_B \quad (1)$$

Komponen B
$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} - k C_A C_B \quad (2)$$

Pada model penetrasi Higbie, profil konsentrasi terikat dengan waktu. Pemodelan yang dibuat dimaksudkan untuk menyelesaikan N persamaan diferensial parsial tidak linear yang mengikuti bentuk umum sebagai berikut (Kuipers dan Deen, 2014):

$$\gamma_i(x, \bar{C}) \frac{\partial C_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha_i(x, \bar{C}) \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\beta_i(x, \bar{C}) C_i) + r_i(x, \bar{C}) \quad (3)$$

$i = 1, 2, \dots, N$

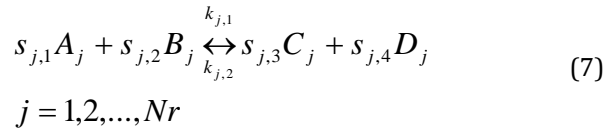
Dengan satu kondisi awal dan dua kondisi batas,

Kondisi Awal $t = 0 \quad C_i = f_i(x) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4)$

Kondisi Batas $x = 0 \quad a_{i,1} \frac{\partial C_i}{\partial x} + b_{i,1} C_i = d_{i,1} \quad (5)$

$x = \delta \quad a_{i,2} \frac{\partial C_i}{\partial x} + b_{i,2} C_i = d_{i,2} \quad (6)$

Reaksi kimia (*source term*) akan dimodelkan untuk menyelesaikan Nr reaksi kimia yang memiliki stokiometri sebagai berikut:



Kinetika reaksi mengikuti persamaan *power-law*:

$$R_j = k_{j,1} A_j^{kt_{j,1}} B_j^{kt_{j,2}} C_j^{kt_{j,3}} D_j^{kt_{j,4}} - k_{j,2} A_j^{kt_{j,5}} B_j^{kt_{j,6}} C_j^{kt_{j,7}} D_j^{kt_{j,8}} \quad (8)$$

$j = 1, 2, \dots, Nr$

Dimana R_j adalah laju reaksi untuk reaksi ke-j. Hubungan R_j dengan laju reaksi r_j pada persamaan (8) dapat dideskripsikan sebagai berikut:

$r_{Ai} = s_{j,1} R_j \quad (9)$

$r_{Bi} = s_{j,2} R_j \quad (10)$

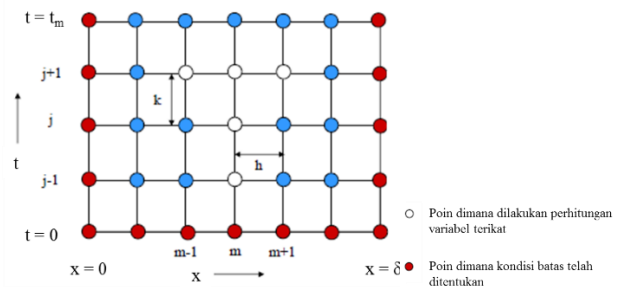
$r_{Ci} = s_{j,3} R_j \quad (11)$

$r_{Di} = s_{j,4} R_j \quad (12)$

Metode diskritisasi implisit yang digunakan adalah metode implisit Baker dan Oliphant (Gambar 2). Turunan waktu adalah tiga poin diskritisasi mundur yang dinyatakan dengan persamaan (13). Parameter difusivitas dapat dinyatakan dalam persamaan (14).

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} \Big|_m^{j+1} = \frac{3C_{i,m}^{j+1} - 4C_{i,m}^j + C_{i,m}^{j-1}}{2k} \quad (13)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\alpha_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \right) \Big|_m^{j+1} = \alpha_i \left(\frac{C_{m+1}^{j+1} - 2C_m^{j+1} + C_{m-1}^{j+1}}{\Delta x^2} \right) \quad (14)$$



Gambar 2. Skema Diskritisasi Implisit Molekul Baker dan Oliphant (Kuipers dan Deen, 2014)

Bilangan Hatta adalah parameter tidak berunit yang sangat penting dalam reaksi fasa gas dan cair. Arti fisik dari bilangan Hatta (ϕ) dapat diekspresikan sebagai rasio laju difusi dan laju reaksi. Bilangan Hatta (ϕ) yang besar ($\phi > 2$) menunjukkan bahwa laju reaksi

lebih cepat dari laju difusi. Saat reaktan (komponen A) berdifusi dari fasa gas ke fasa cair, reaksi segera terjadi di *interface*. Bilangan Hatta (ϕ) yang kecil ($\phi < 0,2$) menunjukkan laju reaksi yang lambat dan reaksi banyak terjadi di fasa cairan bulk (van Elk dkk, 2000).

$$\phi^2 = \frac{t_d}{t_r} \quad (15)$$

Seperti yang telah dijelaskan pada bab sebelumnya, *enhancement factor* (E_{Ao}) mendeskripsikan pengaruh reaksi kimia terhadap laju perpindahan massa.

$$E_{Ao} = \frac{J_{A, \text{ada reaksi}}}{J_{A, \text{tidak ada reaksi}}} \quad (16)$$

Berdasarkan teori oleh van Krevelen dan Hoftijzer (1948), *enhancement factor* (E_{Ao}) untuk perpindahan massa pada kondisi tunak (*steady state*) adalah fungsi dari bilangan Hatta (ϕ). *Enhancement factor* maksimum ($E_{Ao\infty}$) adalah *enhancement factor* paling tinggi yang bisa didapat jika tidak ada resistan dalam perpindahan massa.

$$E_{Ao} = \frac{\phi \sqrt{(E_{Ao} - E_{Ao\infty}) / (E_{Ao\infty} - 1)}}{\text{Tanh}[\phi \sqrt{(E_{Ao} - E_{Ao\infty}) / (E_{Ao\infty} - 1)}}] * \left(1 - \frac{C_{A,bulk}}{C_{A,int} * \text{Cosh}[\phi \sqrt{(E_{Ao} - E_{Ao\infty}) / (E_{Ao\infty} - 1)}}]} \right)} \quad (17)$$

Dimana:

$$\text{Enhancement Factor Maksimum} \quad E_{Ao\infty} = \left(1 + \frac{D_B * C_{B,bulk}}{D_A * C_{A,int}} \right) \quad (18)$$

$$\text{Enhancement Factor} \quad E_{Ao} = \left(\frac{\delta * J_A}{D_A * C_{A,int}} \right) \quad (19)$$

$$\text{Bilangan Hatta} \quad \phi = \delta \sqrt{\left(\frac{k * C_{B,bulk}}{D_A} \right)} \quad (20)$$

$$\text{Fluks molar} \quad J_A = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (21)$$

Dalam penelitian ini, profil konsentrasi bergantung pada waktu sehingga membentuk sistem persamaan differensial parsial parabola tak linear. Perpindahan massa disertai reaksi kimia dapat dimodelkan sesuai dengan persamaan (1) dan (2). Penentuan *Enhancement Factor* dan bilangan Hatta ditentukan dengan persamaan (17) - (21). Kondisi awal dan kondisi batas didefinisikan sebagai berikut:

$$\begin{array}{ll} \text{Kondisi} & t = 0 \quad C_A = 0 \\ \text{Awal} & x = \delta \quad C_B = C_{B,bulk} \end{array} \quad (22)$$

$$\begin{array}{ll} & t > 0 \\ & x = 0 \quad \frac{\partial C_B}{\partial x} = 0 \end{array} \quad (23)$$

$$\begin{array}{ll} \text{Kondisi} & t > 0 \\ \text{Batas} & x = \delta \quad \frac{\partial C_A}{\partial x} = 0 \end{array} \quad (24)$$

$$C_A = C_{A,int}$$

$$C_B = C_{B,bulk}$$

Data kondisi referensi ditunjukkan pada Tabel 1. Waktu kontak (t_c) ditentukan oleh diameter rata - rata gelembung udara ($d_b = 0,1 - 10$ mm) dan kecepatan rata - rata cairan ($v_l = 0,01 - 0,3$ m/s) (Westerterp dkk, 1990). Kedalaman penetrasi (δ) didefinisikan sebagai fungsi waktu tinggal (t).

Konstanta laju reaksi (k) dan konsentrasi komponen A di *interface* adalah parameter yang akan divariasikan dalam penelitian ini. Variasi konstanta laju reaksi (k) akan berpengaruh pada bilangan Hatta (ϕ), sedangkan variasi konsentrasi komponen A di *interface* ($C_{A,int}$) akan berpengaruh pada *enhancement factor* (E_{Ao}).

$$t_c = \frac{d_b}{v_l} \quad (25)$$

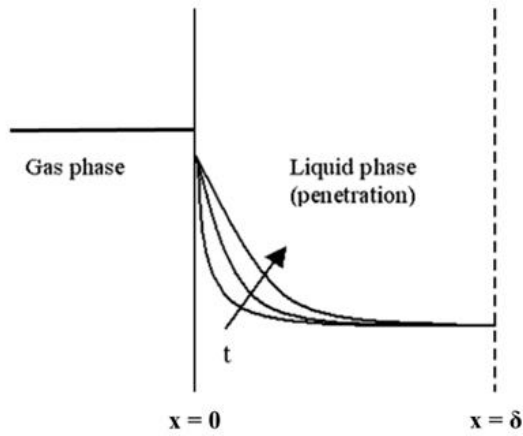
$$\delta = \sqrt{\pi D_A t_c} \quad (26)$$

Tabel 1. Data Kondisi Referensi / Studi Kasus (Westerterp dkk,1990; van Elk dkk, 2007)

Diameter gelembung udara (m)	d_b	$5,05 \times 10^{-3}$
Kecepatan rata-rata cairan (m/s)	v_l	0,155
Difusivitas komponen A dan B (m^2/s)	$D_{A,B}$	10^{-9}
Konsentrasi B di cairan bulk (mol/m^3)	$C_{B,bulk}$	1
Konsentrasi A di <i>interface</i> (mol/m^3)	$C_{A,int}$	0,01
Konstanta laju reaksi ($m^3/(mol.s)$)	k	1000

Berikut asumsi - asumsi yang digunakan dalam membangun model (van Elk dkk, 2007):

- Perpindahan massa dalam fasa gas bukanlah faktor limitasi. Perpindahan massa yang dilihat hanya pada fasa cair.
- Kedalaman penetrasi diasumsikan sama dengan ketebalan film ($d_{pen} = \delta$).
- Perpindahan massa di fasa cair mengikuti model penetrasi Higbie.
- Reaksi terjadi hanya pada fasa cair.
- Komponen B, C, dan D tidak mudah menguap dan tidak berdifusi ke fasa gas.
- Tidak terjadi dispersi axial pada fasa cair.
- Temperatur tidak mempengaruhi difusivitas, absorpsi, dan reaksi.



Gambar 3. Model Penetrasi Higbie Berdasarkan Asumsi van Elk dkk (2007)

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1 Penentuan Jumlah *Time Steps*

Pemodelan absorpsi gas dilakukan dengan menggunakan metoda diskritisasi implisit. Dalam metoda ini diperlukan penentuan *time steps* untuk memastikan solusi numerik yang dihasilkan memiliki akurasi yang baik.

Pada Tabel 2 terlihat pengaruh jumlah *time steps* pada akurasi perhitungan *Enhancement factor* (E_{A0}). Semakin banyak jumlah *time steps* yang dipilih, maka perhitungan akan memiliki akurasi yang semakin tinggi. Akan tetapi, semakin banyak *time steps* juga akan meningkatkan beban kerja komputasi. Oleh karena itu, dipilih 50 *time steps* pada penelitian ini karena selain memiliki keakuratan yang baik, beban kerja komputasi juga tidak terlalu besar.

Tabel 2. Pengaruh *time steps* pada akurasi simulasi ($k = 1000 \text{ m}^3/\text{mol.s}$ & $C_{A,int} = 0,01 \text{ mol}/\text{m}^3$)

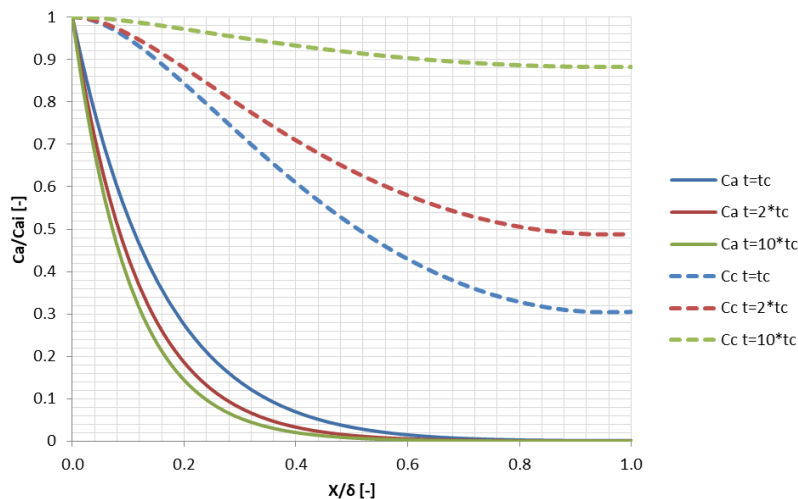
<i>Time Steps</i>	30	40	50	60
$E_{A0,teori}$	9,67	9,67	9,67	9,67
$E_{A0,simulasi}$	9,45	9,57	9,61	9,63
Error(%)	2,27	1,01	0,55	0,36

3.2 Validasi Model: Pengaruh Waktu Tinggal (t)

Ketika gas diabsorpsi oleh fasa cair, maka terdapat beberapa fenomena yang dapat terjadi, tergantung pada kecepatan laju reaksi. Berdasarkan teori van Krevelen dan Hoftijzer (1948), pada reaksi irreversibel, semakin lama waktu tinggal maka semakin banyak komponen A yang bereaksi dengan komponen B. Berhubung asumsi dalam pembuatan model ini mengikuti asumsi van Elk, dkk (2007), maka solusi numerik yang dihasilkan harus memiliki kesesuaian dengan teori van Krevelen dan Hoftijzer (1948).

Pada model ini, reaksi diasumsikan terjadi pada fasa cair sepanjang film penetrasi (δ). Komponen gas A akan berdifusi dan bereaksi dengan komponen B di sepanjang film δ . Komponen B hadir dalam jumlah yang lebih besar dari komponen A. Reaksi komponen A dengan komponen B bergantung pada waktu tinggal komponen A sepanjang δ . Waktu tinggal (t) dihitung berdasarkan persamaan 25, dimana waktu tinggal diasumsikan sama dengan waktu kontak (t_c) dan merupakan fungsi diameter gelembung rata-rata dan kecepatan fasa cair rata-rata. Melalui persamaan ini, waktu kontak yang didapat adalah 3,25 ms. Selanjutnya untuk mengetahui pengaruh waktu tinggal, maka waktu tinggal akan divariasikan dengan menjaga konstan ketebalan film (δ) dan difusivitas komponen A (D_A). Waktu tinggal yang divariasikan merupakan dua kali dan sepuluh kali kelipatan dari waktu kontak.

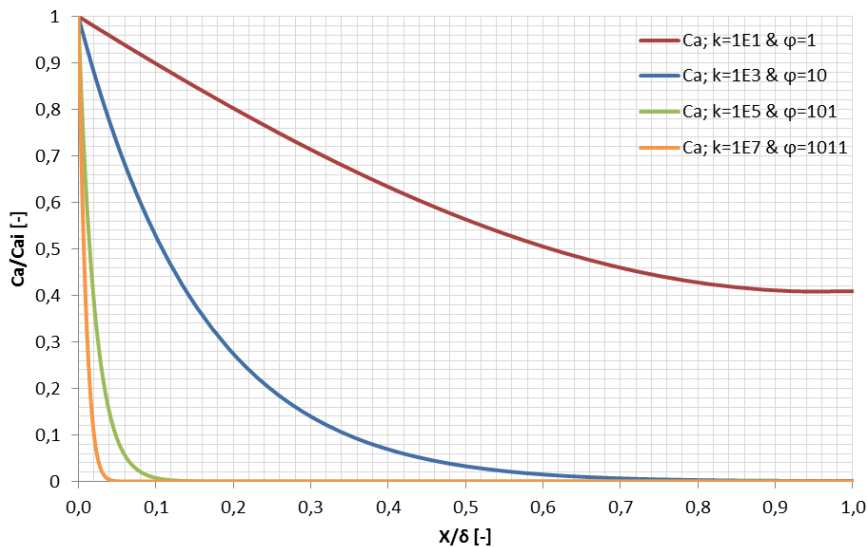
Pada Gambar 4 terlihat profil konsentrasi komponen A sepanjang δ pada berbagai waktu tinggal, t. Dapat terlihat bahwa profil konsentrasi dan kondisi batas hasil simulasi masih mengikuti tren yang sesuai dengan teori. Semakin lama waktu tinggal komponen A, maka akan semakin banyak komponen A yang bereaksi dengan komponen B. Sehingga konsentrasi komponen A sepanjang δ akan menurun seiring dengan meningkatnya waktu kontak. Akibat waktu kontak yang semakin lama, konsentrasi komponen C (produk) yang dihasilkan juga akan semakin meningkat. Hal ini terlihat pada Gambar 4.



Gambar 4. Profil konsentrasi komponen A pada $k = 1000$ terhadap berbagai waktu kontak.

3.3 Validasi Model: Pengaruh Bilangan Hatta (ϕ)

Salah satu bilangan yang sering digunakan untuk mengukur suatu fenomena absorpsi gas dan cairan adalah bilangan Hatta (ϕ). Seperti dijelaskan pada bab sebelumnya, bilangan Hatta (ϕ) menunjukkan rasio laju difusi terhadap laju reaksi. Jika melihat persamaan 20, bilangan Hatta (ϕ) dipengaruhi oleh konstanta laju reaksi (k), difusivitas komponen A (D_A), ketebalan film (δ), dan konsentrasi komponen B di fasa bulk ($C_{B,bulk}$). Dengan mengasumsikan bahwa perpindahan massa dalam fasa gas diabaikan dan reaksi hanya terjadi pada film fasa cair, maka pengaruh laju reaksi hasil simulasi numerik perlu dianalisis lebih lanjut untuk dibandingkan dengan teori. Berdasarkan teori dari van Krevelen dan Hoftijzer (1948), semakin dominan laju reaksi, maka kecepatan reaksi antara komponen A dan B lebih cepat dibandingkan laju difusi A sepanjang film fasa cair. Hal ini ditunjukkan dengan meningkatnya bilangan Hatta (ϕ).



Gambar 5. Pengaruh bilangan Hatta (ϕ) terhadap profil konsentrasi komponen A pada $t = t_c$.

3.4 Validasi Model: Pengaruh Enhancement Factor (E_{A0})

Selain bilangan Hatta (ϕ), *Enhancement factor* (E_{A0}) dapat digunakan untuk mengukur fenomena absorpsi gas dan cairan. *Enhancement factor* (E_{A0}) adalah rasio antara laju perpindahan massa komponen A sepanjang *interface* jika terdapat reaksi terhadap laju perpindahan massa komponen A tanpa adanya reaksi. Nilai *Enhancement factor* (E_{A0}) menunjukkan kontribusi reaksi kimia pada perpindahan massa komponen. Semakin tinggi *Enhancement factor* (E_{A0}) maka reaksi kimia memiliki kontribusi yang tinggi terhadap perpindahan massa. Akibatnya, konsentrasi komponen A di *interface* akan menurun drastis.

Untuk melihat kesesuaian hasil numerik terhadap penjelasan teoritis, maka konsentrasi komponen A di *interface* divariasikan dengan faktor 10. Perubahan

Pada Gambar 5 dapat terlihat profil konsentrasi komponen A hasil simulasi numerik pada berbagai layer bilangan Hatta (ϕ). Variabel konstanta laju reaksi (k) adalah variabel yang divariasikan dengan faktor 10^2 untuk mendapatkan bilangan Hatta (ϕ) yang berbeda.

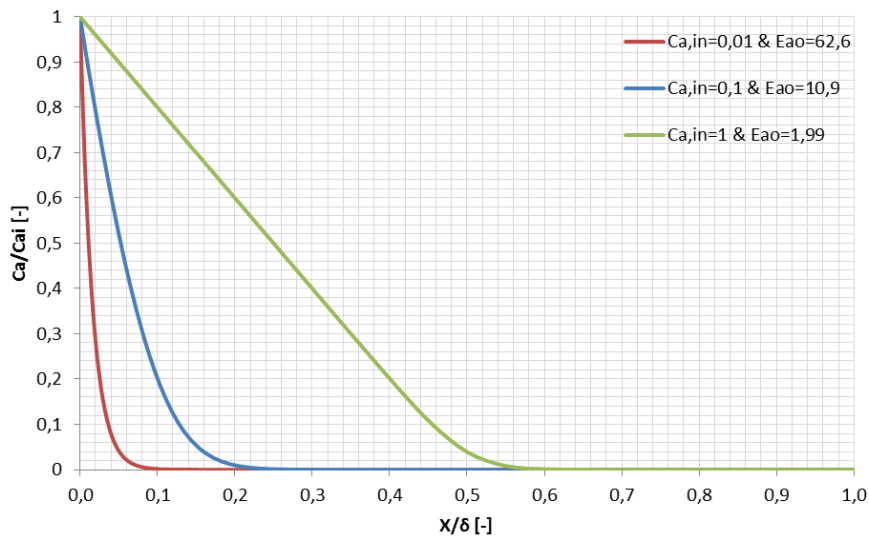
Seperti yang terlihat pada Gambar 5, ketika bilangan Hatta (ϕ) meningkat maka konsentrasi komponen A sepanjang δ akan menurun secara drastis. Hal ini menunjukkan, bahwa komponen gas A bereaksi langsung ketika dikontakkan dengan komponen B tanpa harus berdifusi sepanjang δ . Bilangan Hatta (ϕ) yang rendah menunjukkan bahwa komponen A dan B bereaksi lebih lama dibandingkan dengan laju difusi komponen A. Akibatnya konsentrasi komponen A yang cukup tinggi sepanjang δ . Profil pada Gambar 5 masih mengikuti penjelasan teoritis, oleh karena itu, hasil simulasi dapat terbilang cukup baik.

konsentrasi komponen A akan mempengaruhi nilai *Enhancement factor* (E_{A0}), lihat Tabel 3.

Pada Gambar 6 dapat terlihat profil konsentrasi komponen A pada berbagai nilai *Enhancement factor* (E_{A0}). Nilai *Enhancement factor* (E_{A0}) yang rendah didapatkan saat konsentrasi komponen A di *interface* meningkat. Perilaku ini menunjukkan bahwa pengurangan konsentrasi komponen A di *interface* akibat reaksi kimia lebih kecil dibandingkan dengan konsentrasi total komponen A di *interface*. Profil konsentrasi pada Gambar 6 sesuai dengan penjelasan teoritis van Krevelen dan Hoftijzer (1948).

Tabel 3. Variasi konsentrasi komponen A di interface terhadap E_{A0} ($t = 10t_c$ dan $k = 10^5 \text{ m}^3/\text{mol.s}$)

$C_{A,int} \text{ (mol/m}^3\text{)}$	E_{A0}
0,01	62,55
0,1	10,90
1	1,99

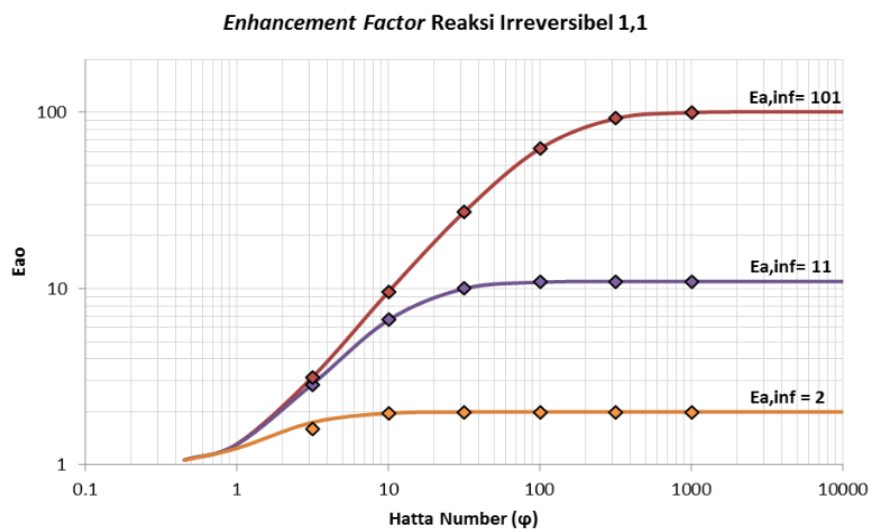


Gambar 6. Pengaruh bilangan Hatta (E_{A0}) terhadap profil konsentrasi komponen A pada $k = 10^5$.

3.5 Profil Numerik dan Teoritis: Bilangan Hatta (ϕ) dan Enhancement Factor (E_{A0})

Perhitungan teoritis yang ditampilkan sebelumnya adalah perhitungan pada saat kondisi tunak (*steady state*). Oleh karena itu, untuk membandingkan dua kondisi tunak dari perhitungan numerik dan teoritis, maka waktu tinggal sebanyak 10 kali waktu kontak dianggap cukup untuk mengestimasi kondisi tunak (*steady state*) pada simulasi numerik. Perbandingan hasil numerik dan teoritis pada kondisi tunak dapat dilihat pada Gambar 7.

Pada Gambar 7 dapat dilihat hasil perhitungan Enhancement factor (E_{A0}) pada berbagai bilangan Hatta (ϕ) berdasarkan perhitungan teoritis dan numerik. Dapat terlihat bahwa hasil yang didapatkan dengan solusi numerik sesuai dengan perhitungan teoritis dari van Krevelen dan Hoftijzer (1948). Deviasi rata-rata antara hasil teoritis dan numerik sebesar 3,5%. Hasil ini dinilai cukup baik karena penelitian yang dihasilkan oleh Westerterp (1990) memiliki deviasi rata-rata sebesar 3,1%. Oleh karena itu, dapat disimpulkan model yang dibuat dapat diaplikasikan untuk membuat simulasi absorpsi gas reaksi orde dua pada kondisi tunak.



Gambar 7. Perbandingan solusi numerik dan teoritis (garis: solusi teoritis dan dot: solusi numerik).

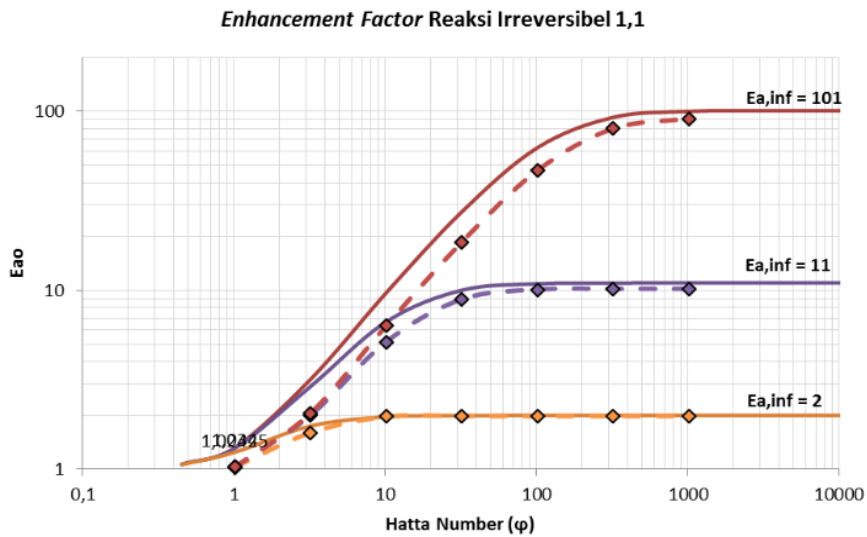
3.6 Profil Model Saat Kondisi Transient

Tujuan utama dalam melakukan simulasi numerik ini adalah menghasilkan profil konsentrasi sepanjang film pada absorpsi gas reaksi orde dua menggunakan model penetrasi Higbie. Dimana pada pemodelan ini, profil konsentrasi bergantung terhadap waktu.

Setelah mengetahui pemodelan bisa bekerja dengan baik untuk simulasi absorpsi reaksi orde dua

pada kondisi tunak, maka model ini dapat diaplikasikan untuk mengetahui apakah suatu kondisi proses sudah berjalan tunak atau belum dengan membandingkan kurva bilangan Hatta (ϕ) dan Enhancement Factor (E_{A0}).

Kembali pada kasus awal dimana waktu tinggal yang dihitung berdasarkan persamaan 25 adalah 3,25 ms. Perbandingan solusi numerik dan teoritis dapat dilihat Gambar 8.



Gambar 8. Perbandingan solusi numerik dan teoritis pada kondisi *transient* (garis: solusi teoritis dan dot: solusi numerik)

Pada Gambar 8 dapat dilihat bahwa solusi numerik pada kondisi *transient* memiliki perbedaan yang cukup mencolok dengan kondisi tunak, terutama pada saat nilai *Enhancement factor* maksimum ($E_{A\infty}$) yang tinggi. Hasil menunjukkan bahwa waktu tinggal sebesar 3,25 ms tidak cukup untuk mencapai kondisi tunak, hal ini ditunjukkan dengan nilai *Enhancement factor* (E_{A0}) yang lebih rendah dari perhitungan teoritis. Oleh karena itu, untuk meningkatkan efektivitas, maka waktu tinggal antara fasa gas dan cairan perlu ditingkatkan.

4. KESIMPULAN

Pemodelan dan validasi pemodelan absorpsi gas pada reaksi orde dua telah berhasil dilakukan untuk kondisi tunak. Solusi numerik yang dibuat melalui model ini memiliki hasil yang bersesuaian dengan hasil teoritis dari van Krevelen dan Hoftijzer (1948). Kondisi waktu tinggal yang dipilih (3,25 ms) ternyata belum mencapai kondisi tunak, dikarenakan solusi numerik yang dihasilkan memiliki nilai *Enhancement factor* (E_{A0}) yang lebih kecil dari solusi teoritis. Oleh karena itu, untuk meningkatkan efektivitas, maka waktu tinggal antara fasa gas dan cairan perlu ditingkatkan. Validasi pemodelan sebaiknya dilakukan dengan membandingkan hasil solusi numerik dengan data nyata hasil penelitian.

5. ACKNOWLEDGMENT/UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Niels Deen dan Hans Kuipers dari Technische Universiteit Eindhoven yang telah memberikan kesempatan kepada penulis untuk melakukan analisis lebih lanjut mengenai pemodelan absorpsi gas sebagai bagian dari tugas akhir *Computational Fluid Dynamics*. Penulis juga berterima kasih kepada Andrea Nino, Eva Lacasa, dan Dragana Stojanovic yang telah memberikan masukan dalam pemodelan ini.

6. NOTASI

ϕ	=	Bilangan Hatta (-)
Φ	=	<i>Spatial transformation</i> (-)
δ	=	Ketebalan film (μm)
E_{A0}	=	<i>Enhancement factor</i> (-)
$E_{A\infty}$	=	<i>Enhancement factor</i> maksimum (-)
C_A	=	Konsentrasi komponen A (mol/m^3)
$C_{A,int}$	=	Konsentrasi komponen A di <i>interface</i> (mol/m^3)
$C_{A,bulk}$	=	Konsentrasi komponen A bulk (mol/m^3)
C_B	=	Konsentrasi komponen B (mol/m^3)
$C_{B,int}$	=	Konsentrasi komponen B di <i>interface</i> (mol/m^3)
$C_{B,bulk}$	=	Konsentrasi komponen B bulk (mol/m^3)
d_b	=	Diameter gelembung udara (μm)
d_{pen}	=	Kedalaman penetrasi (μm)
D_A	=	Difusivitas komponen A (m^2/s)
D_B	=	Difusivitas komponen B (m^2/s)
i	=	Komponen ke-n
j	=	Reaksi ke-n
J_A	=	Flux molar ($\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$)
k	=	Konstanta laju reaksi (m/s)
t	=	Waktu tinggal (s)
t_c	=	Waktu kontak (s)
t_d	=	Waktu difusi (s)
t_r	=	Waktu reaksi (s)
v_l	=	Kecepatan rata-rata cairan (m/s)

7. DAFTAR PUSTAKA

- Banbelkacem, H., Debellefontaine, H., 2003, Modeling of a Gas Liquid Reactor in Batch Conditions, *Chemical Engineering and Processing*, 42: 723 - 732.
- Eldien, N.W., Mohammed, B.M., 2016, Enhancement Factor Simulation of H_2S Absorption by $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ Aqueous. *International Journal of Scientific and Research Publications*, 6: 687-693.

- Kuipers, J.A.M., Deen, N.G., 2014, Computational Fluid Dynamic Courses in Process Industries, Eindhoven University of Technology.
- van Elk, E.P., Borman, P.C., and Kuipers, J.A.M., 2000, Modelling of Gas - Liquid Reactors - Implementation of The Penetration Model of Gas - Liquid Process with The Presence of Liquid Bulk, *Chemical Engineering Journal*, 76: 223-237.
- van Elk, E.P., Knaap, M.C., and Versteeg, G.F., 2007, Application of The Penetration Theory for Gas - Liquid Mass Transfer without Liquid Bulk, *Chemical Engineering Research and Design*, 85(A4): 516-524.
- van Krevelen, D.W., Hoftijzer, P.J., 1948, Kinetics of Gas Liquid Reactions, *Recueil*, Volume 67, Issue 7: 563-586.
- van Swaaij, M.P.M., Versteeg, G.F., 1992, Mass Transfer Accompanied with Complex Reversible Chemical Reactions in Gas Liquid System: An Overview. *Chemical Engineering Science*, Vol 47, No.13/14: 3181-3195.
- Westerterp, K.R., van Swaaij, W.P.M, and Beenackers, A.A.C.M., 1990, Chemical Reactor Design and Operation. Wiley: New York, USA.