

LAMPIRAN

Perhitungan Reaktor

Jenis : Fixed bed

Kondisi Operasi:

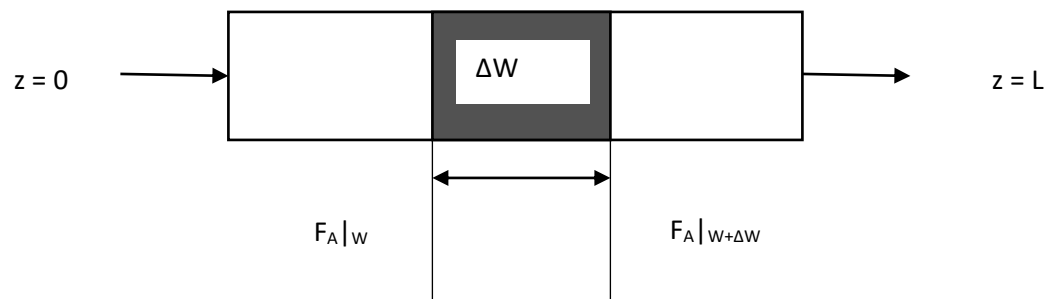
Suhu : 105-143°C

Tekanan : 1,935 atm

Reaksi : Eksotermis, adiabatik

6.1 Persamaan-Persamaan Matematis Reaktor

a. Persamaan neraca massa pada elemen volume



Gambar 6.1 Skema neraca massa *fixed bed reactor*

Rate in – rate out + rate generation = accumulation

$$F_A|_W - F_A|_{W+\Delta W} + R_A' \Delta W = 0$$

$$\lim_{\Delta W \rightarrow 0} \frac{F_A|_W - F_A|_{W+\Delta W}}{\Delta W} = -r_A'$$

$$\frac{dF_A}{dW} = r_A' \quad (6.1)$$

Dimana: $F_A = F_{A0}(1-x)$

$$dF_A = -F_{A0}dx$$

dan

$$\Delta W = Ac \cdot \Delta z \cdot \rho_s$$

Dan

$$-r_A' \cdot \rho_s = -r_A$$

Sehingga persamaan (6.1) menjadi:

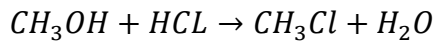
$$\frac{-F_{A0}dx}{Ac \cdot \rho_s \cdot dz} = r_A'$$

$$\frac{dx}{dz} = \frac{-r_A' \cdot Ac \cdot \rho_s}{F_{A0}}$$

$$\frac{dx}{dz} = \frac{-r_A \cdot Ac}{F_{A0}} \quad (6.2)$$

Reaksi Kimia

Reaksi kimia yang terjadi adalah hidroklorinasi metanol menjadi metil klorida dan air. Persamaan reaksinya adalah sebagai berikut:



Reaksi ini merupakan reaksi searah dan tidak ada reaksi samping. Konversi pembentukan metil klorida mencapai 90 % pada kesetimbangan.

Persamaan reaksi sebagaimana yang dinyatakan oleh Thyagarajan adalah:

$$-r_A = k \cdot P_B P_A = P_A^2 \quad (\text{Karena perbandingan mol reaktan adalah 1:1})$$

$$k = k_0 e^{\frac{-E}{R.T}}$$

$$P_A = y_A \cdot P = \frac{F_A}{F_T} \cdot P = \frac{F_{A0} \cdot (1-x)}{F_T} \cdot P$$

$$-r_A = k_0 e^{\frac{-E}{R.T}} \cdot \left(\frac{F_{A0} \cdot (1-x)}{F_T} \cdot P \right)^2 \quad (6.3)$$

Masukkan persamaan (6.3) ke persamaan (6.2), Sehingga menjadi:

$$\frac{dx}{dz} = \frac{k_0 e^{\frac{-E}{R.T}} \cdot \left(\frac{F_{A0} \cdot (1-x)}{F_T} \cdot P \right)^2 \cdot A_c}{F_{A0}} \quad (6.4)$$

Keterangan:

A_c = luas penampang reaktor (m^2)

F = laju alir molar (kmol/jam)

P = tekanan total (atm)

P_i = tekanan parsial i (atm)

Y_i = fraksi mol i

Stoikiometri

Untuk menentukan tekanan parsial gas di reaktor, maka perlu dihitung terlebih dahulu stoikiometri reaksinya.

Reaksi: $CH_3OH + HCl \rightarrow CH_3Cl + H_2O$

Penyederhanaan: $A + B \rightarrow C + D$

Mula-mula: $F_{A0} \quad F_{B0} \quad F_{C0} \quad F_{D0}$

Reaksi: $F_{A0} \cdot X_A \quad F_{A0} \cdot X_A \quad F_{A0} \cdot X_A \quad F_{A0} \cdot X_A$

Sisa: $F_{A0} \cdot (1 - X_A) \quad F_{B0} - F_{A0} \cdot X_A \quad F_{C0} + F_{A0} \cdot X_A \quad F_{D0} + F_{A0} \cdot X_A$

Mol total: $F_T = F_A + F_B + F_C + F_D$

$$F_T = [F_{A0} \cdot (1 - X_A)] + [F_{B0} - F_{A0} \cdot X_A] - [F_{C0} - F_{A0} \cdot X_A] - [F_{D0} - F_{A0} \cdot X_A]$$

$$F_T = F_{A0} + F_{B0} + F_{C0} + F_{D0}$$

Fraksi mol di sepanjang reaktor dinyatakan sebagai berikut:

$$y_i = \frac{F_i}{F_T} \quad (6.5)$$

Dengan y_i = fraksi mol komponen i

F_i = laju alir mol komponen i (kmol/jam)

F_T = laju alir mol total (kmol/jam)

Jadi, tekanan parsial komponen i di sepanjang reaktor adalah:

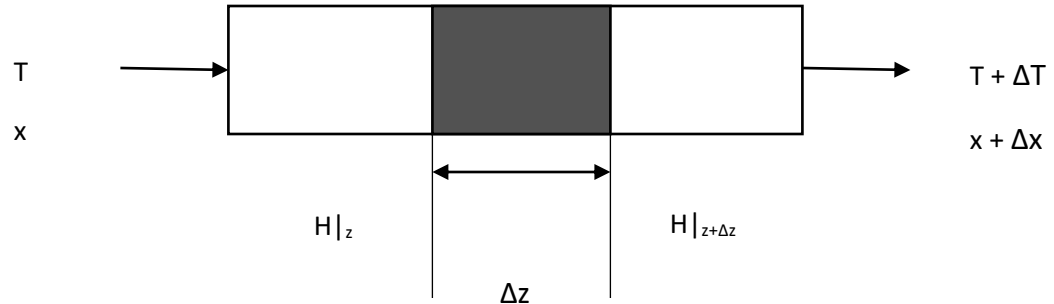
$$P_i = y_i P \quad (6.6)$$

Dengan P_i = tekanan parsial komponen i (atm)

y_i = fraksi mol komponen i

P = tekanan total sistem (atm)

b. Persamaan neraca panas pada elemen volume

Gambar 6.2 Skema neraca panas *fixed bed reactor*

Heat input – heat output – heat reaction = heat accumulation

$$H|_z - H|_{z+\Delta z} + H_R = 0$$

$$\sum F_i C_{pi} T|_z - \sum F_i C_{pi} T|_{z+\Delta z} + (-r'_A) \cdot A_c \cdot \rho_s \cdot \Delta z \cdot (-\Delta H_R) = 0$$

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\sum F_i C_{pi} T|_z - \sum F_i C_{pi} T|_{z+\Delta z}}{\Delta z} = (-r_A) \cdot A_c \cdot (-\Delta H_R)$$

$$\sum F_i C_{pi} \frac{dT}{dz} = (-r_A) \cdot A_c \cdot (-\Delta H_R)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{(-r_A) \cdot A_c \cdot (-\Delta H_R)}{\sum F_i C_{pi}} \quad (6.7)$$

Substitusi nilai $(-r_A) \cdot A_c$ dengan persamaan (6.2), sehingga persamaan (6.5) berubah menjadi:

$$\frac{dT}{dz} = F_{A0} \frac{dx (-\Delta H_R)}{dz \sum F_i C_{pi}} \quad (6.8)$$

Keterangan:

T = Suhu gas (K)

F_i = Kecepatan aliran massa komponen (kmol/jam)

C_{pi} = Kapasitas panas komponen (kJ/kmol.K)

ΔH_R = Panas reaksi (kJ/kmol)

Panas Reaksi

Perhitungan panas reaksi menggunakan persamaan berikut ini:

$$\Delta H_R = \Delta H_{R0} + \int_{T_R}^T \Delta C_P \cdot dT \quad (6.9)$$

Perhitungan panas pembentukan merujuk kepada (Yaws, 1999) dengan persamaan

(untuk senyawa organik) sebagai berikut:

$$\Delta H_f = A + B \cdot T + C \cdot T^2 \quad (6.10)$$

Tabel 6.1 Entalpi pembentukan gas

Komponen	A	B	C	ΔH_f (kJ/mol)	ΔH_f (kJ/kmol)
CH3OH	-188,188	-0,049823	0,000020791	-201,18893	-201188,93
HCL	ΔH_f (kj/mol) = -92,30kjoule/mol			-92,3	-92300
CH3CL	-76,576	-0,037541	0,000016128	-86,33098	-86330,9871
H2O	ΔH_f (kj/mol) = -241,80 kjoule/mol			-241,8	-241800

Panas reaksi hidroklorinasi metanol pada suhu referensi 298 K (fase gas) adalah:

$$\Delta H_{R0} = \sum(n \cdot \Delta H_f)_{produk} - \sum(n \cdot \Delta H_f)_{reaktan} \quad (6.11)$$

$$\Delta H_{R0(298K)} = [(-86330,9871) + (-241800)] - [(-201188,93) + (-92300)]$$

$$\Delta H_{R0(298K)} = -34642,05705 \text{ kJ/kmol}$$

Kapasitas Panas Campuran Gas

Kapasitas panas campuran gas dipengaruhi oleh komponen gas dan suhu:

$$\int_{298}^T \Delta C_p \cdot dT = \int_{298}^T \Delta a \cdot dT + \int_{298}^T \Delta b \cdot T \cdot dT + \int_{298}^T \Delta c \cdot T^2 \cdot dT + \int_{298}^T \Delta d \cdot T^3 dT$$

$$+ \int_{298}^T \Delta e \cdot T^4 dT$$

(6.12)

Adapun harga Cp tiap komponen diperoleh dari (Yaws,1999) dengan persamaan:

$$C_p = A + B.T + C.T^2 + D.T^3 + E.T^4 \text{ kJ/kmol.K} \quad (6.13)$$

Tabel 6.2 Kapasitas panas gas

Komponen	A	B	C	D	E
CH3OH	40,046	-3,83E-02	2,45E-04	-2,17E-07	5,99E-11
HCL	29,244	-1,26E-03	1,12E-06	4,97E-09	2,50E-12
CH3CL	27,385	2,60E-02	1,03E-04	-1,09E-07	3,16E-11
H2O	33,933	-8,42E-03	2,99E-05	-1,78E-08	3,69E-12

Dari harga masing-masing Cp dan reaksi pembentukan metil klorida dapat diperoleh

konstanta sebagai berikut:

$$\Delta a = [(27,385) + (33,933)] - [(40,046) - (29,244)] = -7,972$$

Dan seterusnya: $\Delta b = 0,0571$

$$\Delta c = -0,000113$$

$$\Delta d = 8,513E-08$$

$$\Delta e = -2,707E-11$$

Sehingga diperoleh persamaan ΔH_R sebagai fungsi T sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \Delta H_R = & -34642,05705 + (-7,972)(T - 298) + \frac{0,0571}{2}(T^2 - 298^2) \\ & + \frac{-0,000113}{3}(T^3 - 298^3) + \frac{8,513E - 08}{4}(T^4 - 298^4) \\ & + \frac{-2,707E - 11}{5}(T^5 - 298^5) \end{aligned}$$

c. Pressure Drop

Pressure drop aliran fluida pada tumpukan katalis menggunakan persamaan Ergun:

$$\frac{dP}{dz} = - \frac{G_t}{\rho_G \cdot g_c \cdot dp} \left(\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \right) \left(\frac{150 \cdot (1-\varepsilon) \mu_M}{dp} + 1,75G \right) g_{cc} \quad (6.14)$$

Keterangan:

P = tekanan (kPa)

ε = porositas

$g_c = 127101600 \text{ kgm.m / jam}^2 \text{ kgf}$ (penyehat satuan)

dp = diameter partikel katalis (m)

μ_M = viskositas campuran gas (kg/m.jam)

z = panjang reaktor pipa (m)

Gt = Kecepatan massa superfisial gas (kg/m².jam)

$$g_{cc} = 9,807 \times 10^{-3} \frac{\text{kPa}}{\text{kgf/m}^3} \text{ (faktor koreksi)}$$

Viskositas gas

Nilai viskositas dapat dihitung dengan persamaan:

$$\mu_i = A + BT + CT^2 \quad (6.15)$$

Tabel 6.3 Viskositas gas

Komponen	A	B	C	Yi
CH3OH	-14,236	3,89E-01	-6,27E-05	0,494668738
HCL	-9,118	5,55E-01	-1,11E-04	0,494668738
CH3CL	-1,374	3,86E-01	-4,87E-05	0,004463754
H2O	-36,826	4,29E-01	-1,62E-05	0,00619877

Viskositas campuran gas yang masuk dihitung dengan persamaan berikut:

$$\mu_{mix} = \sum(A + BT + CT^2). y_i \quad (6.16)$$

6.2 Diameter reaktor

Diameter reaktor ditentukan dari densitas dan laju alir massa gas umpan ke reaktor.

Campuran gas masuk reaktor diasumsikan ideal sehingga dapat digunakan rumus gas

ideal:

$$PV = nRT$$

$$PV = \frac{m}{BM_G} RT$$

$$\frac{m}{V} = \frac{P \cdot BM_G}{R \cdot T} = \rho_G \quad (6.17)$$

Dimana ρ_G adalah densitas campuran gas dan $BM_G = \sum y_i BM_i$

Keterangan:

ρ_G = densitas campuran gas (kg/m³)

P = tekanan total gas (atm) = 1,935 atm

BM_G = berat molekul campuran gas (kg/kmol)

R = 0,0826 (atm.m³/mol.K)

T = suhu gas masuk reaktor (K) = 378 K

Kecepatan massa superfisial campuran gas (G) ditentukan dari nilai kecepatan gas pada luas penampang reaktor tanpa adanya bed. (ulrich, 1984)

$$G_t = U_G \rho_G \quad (6.18)$$

Keterangan:

G_t = kecepatan massa superfisial campuran gas (kg/jam.m²)

U_G = kecepatan linear gas (m/jam)

Luas penampang reaktor dapat dihitung dengan:

$$AC = \frac{F_{MT0}}{G_t} \quad (6.19)$$

Dimana F_{MT0} adalah laju alir massa gas total yang masuk ke reaktor (kg/jam).

Sehingga diameter reaktor dapat diketahui dengan:

$$ID = \sqrt{\frac{4}{\pi \cdot AC}} \quad (6.20)$$

6.3 Panjang Reaktor

Dengan menggunakan persamaan neraca massa, neraca panas, dan pressure drop, kita dapat menentukan panjang reaktor untuk konversi yang diinginkan dengan menggunakan metode Rungge-Kutta.

Tabel 6.4 Kondisi masuk reaktor

konversi awal	Xo	0	
posisi awal katalis	Zo	0	
suhu masuk pipa	To	378,15	K
tekanan masuk pipa	Po	1,935	atm
aliran molar CH ₃ OH masuk pipa	FAo	1852,0949	kmol/jam
aliran molar masuk pipa total	FTo	3744,1115	kmol/jam

Lanjutan Tabel 6.4

Energi aktivasi	E	18860	kkal/kmol
Faktor Frekuensi	k ₀	2165,0000	kmol/jam (atm ²) kg cat
aliran massa masuk pipa	FMT ₀	128130,2584	kg/jam
Penyehat satuan	gc	127101600	kgm.m / jam ² kgf
Faktor koreksi	gcc	0,009807	kPa/kgf/m ²
Diameter katalis	dp	0,003696	m
Porositas katalis dalam tube	ε	0,384	
panas pembentukan standar	ΔH ₂₉₈	-34642,0571	kJ/kmol
Densitas katalis	rho	3,98	gr/cm ³
Kecepatan gas	U _g	3,0000	m/s
Berat molekul campuran	BM	34,22	kg/kmol
Konstanta gravitasi	g	127137600	m ² .jam
Konstanta gas ideal	R	0,08206	m ³ .atm/kmol.K

Tabel 6.5 Hasil perhitungan panjang reaktor dengan metode Rungge-Kutta

z (m)	X	T (K)	P (atm)
0	0	378,15	1,935
0,1	0,047224	380,191	1,934556
0,2	0,096334	382,308	1,934112
0,3	0,147069	384,4889	1,933667
0,4	0,19905	386,7172	1,933222
0,5	0,251777	388,9709	1,932778
0,6	0,304636	391,2239	1,932333
0,7	0,356935	393,4466	1,931887
0,8	0,40795	395,6087	1,931442
0,9	0,456986	397,6814	1,930996
1	0,503441	399,6401	1,930551
1,1	0,546851	401,466	1,930105
1,2	0,586919	403,1477	1,929659
1,3	0,623511	404,6804	1,929213
1,4	0,656641	406,0655	1,928766
1,5	0,686435	407,3092	1,92832
1,6	0,7131	408,4206	1,927873
1,7	0,736889	409,4109	1,927427
1,8	0,758074	410,2918	1,92698
1,9	0,776931	411,0751	1,926533
2	0,793722	411,7719	1,926087
2,1	0,80869	412,3925	1,92564
2,2	0,822056	412,9464	1,925193
2,3	0,834018	413,4417	1,924746
2,4	0,844748	413,8858	1,924299
2,5	0,854398	414,2849	1,923852
2,6	0,863102	414,6448	1,923405
2,7	0,870974	414,9701	1,922958
2,8	0,878113	415,2651	1,92251
2,9	0,884607	415,5332	1,922063
3	0,890529	415,7777	1,921616
3,1	0,895944	416,0012	1,921169
3,2	0,900909	416,206	1,920722
3,3	0,905472	416,3943	1,920274

Hasil akhir perhitungan adalah sebagai berikut:

Konversi (X)	= 0,905472		
Suhu gas masuk (Tin)	= 378 K	= 105°C	= 221 F
Suhu gas keluar (Tout)	= 416 K	= 143 °C	= 290 F
Z (panjang tube reaktor)	= 3,30 m	= 129,921 in	
Tekanan masuk (Pin)	= 1,935 atm		
Tekanan keluar (Pout)	= 1,923 atm		
Diameter shell (IDs)	= 2,803 m	= 110,363 in	

6.4 Desain Mekanis

1. Shell

a) Tekanan design (maks. *over design* 20%)

Tekanan operasi = 1,935 atm

= 28,44 psi

= 1,9606 bar

Tekanan desain = 3,1334 psi

= 19,4334 psig

b) Bahan konstruksi *shell*

Dipilih material *stainless steel SA 167 Grade C* (Brownell, tabel 13.1, hal.253)

Pertimbangan: suhu operasi antara -20 s/d 650 F (-28,89 s/d 343,33 °C)

c) Tebal dinding *shell*

Tebal dinding *shell* dihitung dengan persamaan:

$$ts = \frac{Pxr}{fxE - 0.6P} + c \quad (6.21)$$

(equation 13.1, p.254, Brownell, 1959)

Dimana:

Ts = tebal dinding *shell* (in)

P = tekanan desain (psi)

R = radius dalam shell (in)

E = efisiensi sambungan

F = *allowable working stress* (psi)

C = faktor korosi (in)

IDs = 110,363 in

Tebal shell = 0,2555 in

Dipilih tebal dinding standar, yaitu 0,25 in.

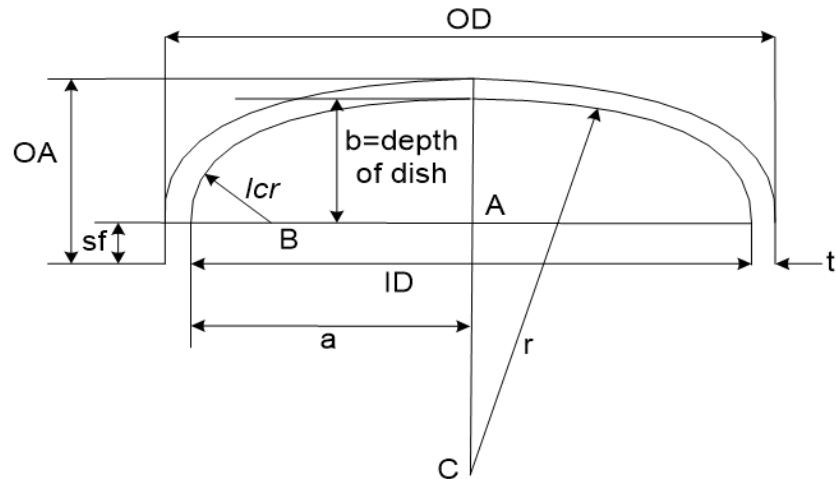
ODs = IDs + 2 (tebal shell) = 110,863 in

Dari tabel 5.7, hal.90, Brownell, 1959 dipilih OD standar = 114 in

2. *Head* Reaktor

a. Bentuk *Head*: elipstical

Digunakan untuk tekanan operasi hingga 15 bar dan harganya cukup ekonomis. (Coulson hal.818). Digunakan untuk vessel dengan tekanan antara 15 – 200 psig. (Brownell and Young, 1959).



Gambar 6.3 Diagram *head* reaktor

b. Bahan konstruksi *head*

Dipilih material *Stainless Steel SA 167 Grade C* dari tabel 13.1, hal.251, Brownell. Pertimbangannya adalah reaktor tidak berisi larutan maupun gas yang beracun dan suhu operasi antara -20 s/d 650°F.

c. Tebal *Head* (tH)

Untuk *elipstical dished head*, tebalnya dihitung dengan persamaan 13.10 (Brownell, 1959).

$$tH = \frac{P.IDs}{2.f.E - 0,2 P} + c \quad (6.22)$$

Dimana:

P = Tekanan perancangan, Psi

F = Tekanan maksimum yang diizinkan pada bahan, Psi

C = efisiensi pengelasan, in

E = Faktor korosi, in

Dipilih material Stainless Steel SA 167 Grade C, dari tabel 13.1, hal.251,

Brownell diperoleh :

Tekanan yang diizinkan (f) = 17000 psi

Efisiensi pengelasan (E) = 0,85

Faktor korosi (c) = 0,125 in

Tebal *Head* reaktor = 0,2554 in

Dipilih tebal *head* standar = 0,25 in

d. Tinggi *Head* (hH)

Dari tabel 5.7 Brownell hal.90:

ODs = 114 in

Ts = 0,25 in

Didapat:

icr = 6,785 in

r = 108 in

a = $IDs/2$ = 55,1815 in

AB = $a - icr$ = 48,3065 in

BC = $r - icr$ = 101,125

$$AC = (BC^2 - AB^2)^{1/2} = 88,8411 \text{ in}$$

$$b = r - AC = 19,1589 \text{ in}$$

Dari tabel 5.6 Brownell hal.88 dengan $tH = 0,25 \text{ in}$, diperoleh $sf = 1,5 - 2,5$
in

Digunakan $sf = 2 \text{ in}$

$$hH = tH + b + sf = 21,4143 \text{ in} = 1,7845 \text{ ft} = 0,5439 \text{ m}$$

3. Tinggi Reaktor

$$hR = \text{Panjang } tube + \text{top tinggi } head$$

$$= 151,335 \text{ in}$$

$$= 12,6113 \text{ ft}$$

$$= 3,8439 \text{ m}$$

4. Volume Reaktor

a. Volume Head

Volume head (VH) = $0,000049 \times ID_s^3$ (Persamaan 5.11, hal.88, Brownell, 1959)

$$VH = 65,8699 \text{ in}^3$$

$$= 1,0794 \text{ m}^3$$

b. Volume bed (VB)

$$\text{Volume katalis} = A \text{ tube} \times L$$

$$A \text{ tube} = 6,1686 \text{ cm}^2$$

$$L \text{ (Panjang tube)} = 330 \text{ cm}$$

$$\text{Volume katalis} = 2035,6284 \text{ cm}^3$$

$$V_{\text{shell}} = \pi/4 \cdot (\text{IDs})^2 \cdot Z = 20,35628 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{bed}} = (\text{volume katalis}) / (1 - \epsilon)$$

$$= 3305 \text{ cm}^3$$

$$= 0,0033 \text{ m}^3$$

c. Volume total reaktor

$$\text{Volume total reaktor} = V_{\text{bed}} + 2 (VH)$$

$$= 2,16 \text{ m}^3$$

5. Diameter

Direncanakan diameter pipa masuk dan keluar sama, karena debit aliran sama.

$$\text{Umpan masuk, } G = 128130,2584 \text{ kg/jam}$$

$$= 35,59174 \text{ kg/detik}$$

$$\rho_{\text{avg}} = 1,9233 \text{ kg/m}^3$$

$$\text{Diameter optimum} = 226 G^{0,5} \rho^{-0,35} \quad (\text{Coulson, hal.161})$$

$$= 1072,4273 \text{ mm}$$

$$= 10,7243 \text{ m}$$

$$= 42,22 \text{ in}$$

Diameter standar yang dipakai adalah 10 SN 60

$$\text{OD} = 10,75 \text{ in}$$

$$\text{ID} = 9,75 \text{ in}$$