

**TK4093 PENELITIAN TEKNIK KIMIA II**  
**Semester II – 2019/2020**

**Judul**  
**SIMULASI KINERJA KATALIS HIDRODEOKSIGENASI MINYAK**  
**SAWIT MENJADI BIOHIDROKARBON FRAKSI DIESEL**

**Kelompok C2.1819.K.15**

Tanmanraj Singh Dhillon (13016058)  
Joseph Jayadi (13016088)

**Pembimbing**

Dr. IGBN Makertiharta  
Prof. Dr. Ir. Subagjo



PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA  
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI  
INSTITUT TEKNOLOGI BANDUNG  
September 2020



**LEMBAR PENGESAHAN**  
**TK4093 PENELITIAN TEKNIK KIMIA II**  
**Semester II – 2019/2020**

**SIMULASI KINERJA KATALIS HIDRODEOKSIGENASI MINYAK  
SAWIT MENJADI BIOHIDROKARBON FRAKSI DIESEL**

Kelompok C2.1819.K.15

Tanmanraj Singh Dhillon  
Joseph Jayadi

13016058  
13016088

Catatan Pembimbing

Bandung, September 2020

Disetujui Pembimbing 1



Dr. IGBN Makertiharta

Disetujui Pembimbing 2



Prof. Dr. Ir. Subagjo

## **SURAT PERNYATAAN**

### **TP4093 PENELITIAN TEKNIK KIMIA II**

#### **Semester II Tahun 2019/2020**

Kami yang bertanda tangan di bawah ini:

Kelompok : C2.1819.K.15

Nama (NIM) : Tanmanraj Singh Dhillon (13016058)

Nama (NIM) : Joseph Jayadi (13016088)

dengan ini menyatakan bahwa laporan dengan judul:

#### **SIMULASI KINERJA KATALIS HIDRODEOKSIGENASI MINYAK SAWIT MENJADI BIOHIDROKARBON FRAKSI DIESEL**

adalah hasil penelitian kami sendiri di mana seluruh pendapat dan materi dari sumber lain telah dikutip melalui penulisan referensi yang sesuai. Publikasi yang dibuat berdasarkan materi yang tercakup dalam dokumen penelitian ini hanya dapat dilakukan dengan sepengetahuan dan seizin dosen pembimbing penelitian.

Surat pernyataan ini dibuat dengan sebenar-benarnya dan jika pernyataan dalam lembar pernyataan ini di kemudian hari diketahui keliru, kami bersedia menerima sanksi sesuai peraturan yang berlaku.

Bandung, 9 September 2020

Tanda tangan



**Tanmanraj Singh Dhillon**

Tanda tangan



**Joseph Jayadi**

## TK4093 PENELITIAN TEKNIK KIMIA II

### Simulasi Kinerja Katalis Hidrodeoksigenasi Minyak Sawit Menjadi Biohidrokarbon Fraksi Diesel

Kelompok C2.1819.K.15

Tanmanraj Singh Dhillon (13016058) dan Joseph Jayadi (13016088)

Pembimbing

Dr. IGBN Makertihartha dan Prof. Dr. Ir. Subagjo

---

#### ABSTRAK

Konversi minyak nabati menjadi bahan bakar sudah sangat umum dilakukan, termasuk dalam produksi biohidrokarbon. Metode relatif baru konversi minyak nabati menjadi biohidrokarbon yang sedang dikembangkan pada skala komersil adalah dengan reaksi hidrodeoksigenasi. Untuk mengetahui kinerja katalis dan reaktor nyata di Indonesia, diperlukan simulasi proses HDO dengan umpan campuran asam stearat dan oktadekana dengan katalis 5%-wt Ni/H-Y-80 yang akan memberikan hasil hidrokarbon alifatik rentang diesel terbaik pada kondisi optimum yang diperkirakan dengan memvariasikan konsentrasi umpan.

Data mengenai proses HDO Asam Stearat diambil dari artikel ilmiah karangan Hachemi dan Murzin (2018) di antaranya adalah karakteristik katalis beserta mekanisme dan parameter kinetika setiap reaksi pada kondisi temperatur 375°C dan tekanan 30 bar, kemudian data yang diperlukan untuk menentukan difusivitas komponen (Massa molekul, viskositas, volume molar) didapatkan dari *database* perangkat lunak Aspen Plus V10, selanjutnya data dimensi dan laju alir umpan reaktor didapatkan dari lembar spesifikasi alat reaktor *hydrotreating* dari RU IV Cilacap (ID=2,16 m, L=7,27 m, LHSV=7/jam).

Kinerja katalis Ni/H-Y-80 mampu mengonversi umpan sebanyak 99%, dengan selektivitas reaksi menuju reaksi hidrodeoksigenasi sebesar 95% untuk seluruh jenis variasi. Konfigurasi reaktor dengan media pendingin merupakan konfigurasi yang lebih baik menimbang temperatur reaksi berjalan sedikit di bawah ambang batas temperatur desain dari reaktor *hydrotreating*. Konsentrasi asam stearat sebanyak 25%-massa merupakan konsentrasi tertinggi yang diperbolehkan oleh temperatur desain reaktor.

Kata kunci: Biohidrokarbon, hidrodeoksigenasi, konsentrasi optimum, minyak nabati, Ni/H-Y-80

## **TK4093 CHEMICAL ENGINEERING RESEARCH II**

### **Performance Simulation of Hydrodeoxygenation Catalyst in Conversion of Palm Oil into Diesel-Range Bio-hydrocarbon**

Group C2.1819.K.15

Tanmanraj Singh Dhillon (13016058) and Joseph Jayadi (13016088)

Advisor

Dr. IGBN Makertihartha and Prof. Dr. Ir. Subagjo

---

#### **ABSTRACT**

The conversion of vegetable oil into fuel is very common, including in the production of biohydrocarbon. A relatively new method of converting vegetable oil into biohydrocarbon which is being developed on a commercial scale is the hydrodeoxygenation reaction process. To determine the performance of the real catalysts and reactors in Indonesia, a simulation of the HDO process is done with a mixture of stearic acid and octadecane feed with 5%-wt Ni/H-Y-80 catalyst which will provide the best aliphatic hydrocarbon yields in the range of diesel at optimum conditions predicted by varying the feed concentration.

Data regarding the HDO process of stearic acid is taken from a scientific article by Hachemi and Murzin (2018), including the characteristics of the catalyst, the mechanism and the kinetics of each reaction at 375°C and 30 bar conditions, then the data needed to determine the diffusivity of the components (molecular mass, viscosity, molar volume) were obtained from the Aspen Plus V10 software database, then dimensional data and reactor feed flow rates were obtained from the hydrotreating reactor equipment specification sheet from Pertamina RU IV Cilacap (ID = 2.16 m, L = 7.27 m, LHSV = 7/hour).

The simulated activity of Ni/H-Y-80 shows that the catalyst is able to convert 99% of stearic acid feed, with the selectivity towards hydrodeoxygenation reaction reaches 95% for all the simulated variation. The configuration of reactor with cooler-filled jacket is preferred to maintain the temperature inside the reactor below the maximum temperature design, in addition it is recommended to use the stearic acid feed with the composition below 25%-wt.

**Keywords:** Biohydrocarbon, hydrodeoxygenation, Ni/H-Y-80, optimum concentration, vegetable oil

## KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa atas berkat dan rahmat-Nya sehingga Laporan Akhir Penelitian Teknik Kimia II yang berjudul “Simulasi Kinerja Katalis Hidrodeoksigenasi Minyak Sawit Menjadi Biohidrokarbon Fraksi Diesel” dapat selesai tepat waktu. Laporan penelitian ini adalah salah satu syarat lulus dari program studi Teknik Kimia Institut Teknologi Bandung. Tujuan dari penulisan laporan ini adalah agar penulis paham bagaimana cara menulis laporan hasil penelitian, di mana dibutuhkan kajian pustaka teoritis dan praktikal terhadap objek penelitian beserta analisis dari rumusan masalah yang hasilnya akan menjawab sasaran penelitian.

Dalam menyusun laporan akhir penelitian ini, penulis mendapat banyak bantuan dari pihak-pihak lain. Oleh karena itu, penulis ingin menyampaikan rasa terima kasih kepada:

1. Dr. IGBN Makertiharta dan Prof. D. Ir. Subagjo sebagai dosen pembimbing yang telah memberikan bimbingan dalam penulisan proposal.
2. Orang tua dari kedua penulis yang telah memberikan dukungan moral dan material selama proses penulisan proposal.
3. Keluarga besar Laboratorium Teknik Reaksi Kimia dan Katalisis Institut Teknologi Bandung (TRKK ITB), baik dosen, karyawan, dan teman-teman mahasiswa yang bersedia membantu, membimbing, dan mendukung kami dalam penulisan laporan akhir.
4. Seluruh teman dan kerabat yang tidak dapat disebutkan satu per satu yang sudah memberikan dukungan kepada penulis selama penulisan laporan akhir.

Penulis menyadari bahwa laporan akhir yang telah disusun masih memiliki kesalahan, kekurangan, dan jauh dari kata sempurna. Maka dari itu, penulis membuka diri dan berterima kasih atas segala kritik dan saran yang dapat meningkatkan kualitas penulisan laporan akhir ini. Akhir kata, semoga penelitian yang dilakukan dapat memberikan dampak dan manfaat positif bagi para pembacanya.

## DAFTAR ISI

Lembar Pengesahan	i
Surat Pernyataan	ii
Abstrak	iii
Abstract	iv
Kata Pengantar	v
Daftar Isi	vi
Daftar Tabel	viii
Daftar Gambar	i
I Pendahuluan	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	4
1.4 Ruang Lingkup	4
II Tinjauan Pustaka	5
2.1 Proses Sintesis Biohidrokarbon	9
2.1.1 Alcohol-to-Oil	10
2.1.2 Oil-to-Hydrocarbon	12
2.1.3 Sugar-to-Hydrocarbon	21
2.1.4 Gas-to-Hydrocarbon	24
2.2 Bahan Baku Biohidrokarbon	27
2.3 Katalis	31
2.3.1 Katalis Hidrodeoksigenasi	31
III Metodologi Penelitian	43
4.1 Tahapan Penelitian	43
4.2 Dasar Pemodelan	44
4.3 Prosedur Kerja	46
3.3.1 Studi Literatur Awal	46
3.3.2 Pengambilan dan Pengolahan Data Awal	47



3.3.3	Simulasi Reaktor	47
3.3.4	Perhitungan Konversi dan Selektivitas	50
4.4	Variasi Percobaan	51
IV	Hasil dan Pembahasan	52
4.1	Simulasi Reaksi HDO pada Reaktor <i>Fixed Bed</i> Skala Industri	52
4.2	Hasil Simulasi untuk Variasi Komposisi Asam Stearat di dalam Oktadekana	57
4.3	Hasil Simulasi Neraca Energi untuk Variasi Jenis Reaktor	71
4.4	Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Asam Stearat Maksimum di dalam Umpan	76
V	Kesimpulan dan Saran	77
5.1	Simulasi Reaksi HDO pada Reaktor <i>Fixed Bed</i> Skala Industri	77
5.2	Hasil Simulasi untuk Variasi Komposisi Asam Stearat di dalam Oktadekana	77
	Daftar Pustaka	78
	Lampiran A Penjelasan Algoritma Pengerjaan Simulasi dalam FlexPDE	83

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1.	Data karakteristik bakteri asetogenik	27
Tabel 2.2.	Data asam lemak minyak nabati	29
Tabel 2.3.	Data komposisi asam lemak pada palm kernel oil	30
Tabel 2.4.	State-of-the-art katalis hidroleoksidasi dan isomerisasi minyak nabati	35
Tabel A.1.	Penjelasan algoritma pengerjaan simulasi dengan baris kode FlexPDE	82

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1.	Jalur proses produksi biohidrokarbon berdasarkan bahan baku	9
Gambar 2.2.	Proses ATJ: (a) ethanol to jet; (b) n-butanol to jet; (c) iso-butanol to jet	11
Gambar 2.3.	Mekanisme reaksi pelepasan oksigen dari trigliserida	15
Gambar 2.4.	Skema proses 2 tahap untuk mendapatkan jet fuel dengan kombinasi hydrodeoxygenation dan selective hydrocracking	17
Gambar 2.5.	Proses CH	18
Gambar 2.6.	Proses HDCJ	20
Gambar 2.7.	Proses Virent BioForming untuk memroses larutan glukosa dari biomassa menjadi hidrokarbon	21
Gambar 2.8.	Proses DSH	23
Gambar 2.9.	Proses sintesis Fischer-Tropsch	24
Gambar 2.10	Proses fermentasi syn-gas menjadi bioavtur	26
Gambar 2.11.	Data luas lahan dan produksi minyak kelapa sawit (CPO) di Indonesia tahun 2013-2017	30
Gambar 2.12.	Mekansime reaksi isomerisasi n-alkana	34
Gambar 3.1.	Diagram alir prosedur kerja simulasi proses hidrodeoksigenasi	44
Gambar 3.2.	Reaksi utama pada proses HDO Asam Stearat	45
Gambar 3.3.	Langkah kerja simulasi reaktor proses HDO Asam Stearat dengan FlexPDE	48
Gambar 4.1.	Diagram alir reaksi HDO pada asam stearat (Hachemi dan Murzin, 2018)	52
Gambar 4.2.	Kurva konsentrasi asam stearat varian 1 di sepanjang reaktor (skala $10^{-4}$ )	58
Gambar 4.3.	Kurva konsentrasi heptadekana varian 1 di sepanjang reaktor (skala $10^{-5}$ )	58
Gambar 4.4.	Kurva konsentrasi oktadekana varian 1 di sepanjang reaktor (skala $10^{-2}$ )	59

Gambar 4.5.	Kurva temperatur keluaran variasi pertama	60
Gambar 4.6.	Kurva temperatur variasi pertama di sepanjang reaktor	60
Gambar 4.7.	Kurva konsentrasi asam stearat varian 2 di sepanjang reaktor (skala $10^{-4}$ )	61
Gambar 4.8.	Kurva konsentrasi heptadekana varian 2 di sepanjang reaktor (skala $10^{-5}$ )	62
Gambar 4.9.	Kurva konsentrasi oktadekana varian 2 di sepanjang reaktor (skala $10^{-2}$ )	62
Gambar 4.10.	Kurva temperatur keluaran varian 2	63
Gambar 4.11.	Kurva temperatur varian 2 di sepanjang reaktor	64
Gambar 4.12.	Kurva konsentrasi asam stearat varian 3 di sepanjang reaktor (skala $10^{-3}$ )	65
Gambar 4.13.	Kurva konsentrasi heptadekana varian 3 di sepanjang reaktor (skala $10^{-5}$ )	65
Gambar 4.14.	Kurva konsentrasi oktadekana varian 3 di sepanjang reaktor (skala $10^{-5}$ )	66
Gambar 4.15.	Kurva temperatur keluaran varian 3	67
Gambar 4.16.	Kurva temperatur varian 3 di sepanjang reaktor	67
Gambar 4.17.	Kurva konsentrasi asam stearat varian 4 di sepanjang reaktor (skala $10^{-3}$ )	68
Gambar 4.18.	Kurva konsentrasi heptadekana varian 4 di sepanjang reaktor (skala $10^{-5}$ )	69
Gambar 4.19.	Kurva konsentrasi oktadekana varian 4 di sepanjang reaktor (skala $10^{-2}$ )	69
Gambar 4.20.	Kurva temperatur keluaran varian 4	70
Gambar 4.21.	Kurva temperatur varian 4 di sepanjang pusat reaktor	71
Gambar 4.22.	Kurva kontur temperatur di sepanjang reaktor non-adiabatis	72
Gambar 4.23.	Kurva temperatur di sepanjang reaktor non-adiabatis	72
Gambar 4.24.	Profil temperatur keluaran reaktor non-adiabatis	73
Gambar 4.25.	Kurva kontur temperatur di sepanjang reaktor adiabatis	74
Gambar 4.26.	Kurva temperatur di sepanjang pusat reaktor adiabatis	74

Gambar 4.27.	Kurva temperatur keluaran reaktor adiabatis	75
Gambar 4.28.	Kurva kontur temperatur untuk konsentrasi 25%-massa asam stearat di dalam umpan	76



# **BAB I**

## **PENDAHULUAN**

### **1.1. Latar Belakang**

Transportasi adalah salah satu kebutuhan manusia yang paling umum. Salah satu moda transportasi yang lazim digunakan oleh masyarakat untuk bepergian adalah mobil dengan mesin diesel. Menurut Kementerian Energi dan Sumber Daya Mineral Indonesia, angka konsumsi bahan bakar diesel (termasuk yang dicampurkan dengan bio-diesel) pada sektor transportasi meningkat 22,37% dari 2016 ke tahun 2018 di angka 19 juta kilo liter. Terhitung dari tahun 2016 ke tahun 2017 dan ke tahun 2018 terjadi peningkatan berturut-turut sebesar 11% dan 10,2%. Konsumsi diesel kian bertambah dalam beberapa tahun terakhir dan produksi diesel oleh Indonesia tidak bisa mencukupi kebutuhan negara akan diesel. Menurut Badan Pengkajian dan Penerapan Teknologi (BPPT) Indonesia pada tahun 2018, 25,3% dari total bahan bakar minyak (BBM) yang diimpor oleh Indonesia adalah diesel dan diprediksi akan terus meningkat hingga tahun 2050.

Dalam beberapa dekade terakhir, banyak usaha besar yang sudah dilakukan untuk mengembangkan teknologi bahan bakar terbarukan untuk melindungi cadangan energi dunia dan mendapatkan keuntungan lingkungan hidup. Untuk mengatasi masalah konsumsi diesel yang kian meningkat seiring masalah lingkungan hidup, Indonesia menerapkan mandatori biodiesel berbasis minyak sawit yang diatur dalam Permen ESDM No. 12 tahun 2015. Selain mengatasi peningkatan konsumsi dan impor diesel, biohidrokarbon berbasis minyak sawit juga mengurangi emisi CO<sub>2</sub> dan polutan yang mengandung N dan S secara signifikan. Produksi biohidrokarbon lebih ramah lingkungan dibandingkan dengan produksi avtur berbasis minyak bumi. Menurut U.S. Department of Agriculture (1998), emisi siklus hidup biohidrokarbon B20 lebih rendah 19% dibandingkan minyak diesel berbasis minyak bumi.

Konversi asam lemak menjadi hidrokarbon rentang diesel yang kompatibel dengan diesel

berbasis minyak bumi sudah diteliti dengan proses hidredeoksigenasi. Jenis katalis yang sudah diteliti meliputi katalis NiMo dan CoMo tersulfidasi (Boonyasuwat dan Tscheikuna, 2017), katalis logam mulia seperti Pd dan Pt (Kon dkk., 2017; Snåre dkk., 2006), dan juga katalis berbasis Ni bebas sulfur (Kordulis dkk., 2016; Santillan-Jimenez dkk., 2014; Soni dkk., 2017; Wu dkk., 2016). Untuk mengetahui kinerja katalis yang sudah diteliti jika digunakan pada reaktor skala komersial di Indonesia, diperlukan analisis simulasi reaktor dengan umpan model yang menyerupai kondisi nyata dan dimensi reaktor yang nyata. Adanya hasil simulasi dapat mendorong perkembangan penelitian proses konversi minyak sawit menjadi biohidrokarbon fraksi diesel. Selain itu, pada tahap selanjutnya hasil simulasi dapat digunakan sebagai patokan kondisi proses optimum.

## 1.2. Rumusan Masalah

Proses HDO dimulai dengan penjenuhan ikatan rangkap C=C pada rantai alkil yang diikuti oleh pemotongan ikatan C-O yang akan membentuk asam lemak. Asam lemak kemudian menjalani hidrogenasi lebih lanjut dan membentuk sebuah aldehid yang secara cepat berubah menjadi alkohol yang sesuai. Hidrokarbon alifatik terbentuk melalui tiga jalur reaksi yaitu dekarboksilasi asam lemak, dekarbonilasi aldehid, dan deoksigenasi alkohol. Dalam pengembangannya, katalis logam non-mulia dengan penyangga selain karbon, khususnya Ni dengan penyangga material oksidat menunjukkan performa yang baik untuk deoksigenasi asam lemak. Terjadinya proses HDO atau dekarboksilasi/dekarbonilasi bergantung kepada katalis yang digunakan. HDO asam lemak sudah diteliti pada rentang jenis katalis yang luas. Dan dari semuanya, katalis Ni berpenyangga menunjukkan produksi utama alkana melalui jalur HDO dan DCOx. Selektivitas dari kedua jalur reaksi tersebut bergantung pada keasaman penyangganya.

Penelitian sebelumnya (Hachemi dkk., 2017) menunjukkan proses HDO asam lemak yang berfokus pada penggunaan *fatty acids methyl esters* (FAME) yang di ekstraksi dari alga *chlorella* (Viêgas dkk., 2015), *tall oil fatty acids* (TOFA), dan lemak trigliserida



hewani (Kuuluvainen dkk., 2015). Pengetahuan mengenai kinetika reaksi tidak hanya sangat penting dalam merancang reaktor, tetapi juga penting untuk memahami mekanisme reaksi. Oleh karena itu, dipilih basis data kinetika reaksi yang didapatkan dari studi yang dilakukan Hachemi dan Murzin (2018) dan disesuaikan desain reaktor mengikuti dimensi reaktor nyata *hydrotreating* yang digunakan pada Pertamina RU IV Cilacap sehingga simulasi dapat mendekati hasil nyata dengan kondisi sesuai dengan lapangan di Indonesia.

Untuk mengetahui kinerja katalis dan reaktor nyata di Indonesia, diperlukan simulasi proses HDO dengan umpan asam stearat dan katalis 5%-wt Ni/H-Y-80 yang menurut literatur akan memberikan hasil hidrokarbon alifatik rentang diesel terbaik.

### **1.3. Tujuan dan Sasaran**

Tujuan dari penelitian ini adalah analisis kinerja katalis Ni/H-Y-80 sesuai dengan kondisi reaktor nyata komersial dalam pelaksanaan proses hidrideoksigenasi.

Sasaran dari penelitian ini adalah untuk menentukan variasi konsentrasi umpan terbaik sehingga menghasilkan produk HDO terbanyak dengan kenaikan temperatur reaktor yang masih di ambang batas normal pada reaktor nyata skala komersial.

### **1.4. Ruang Lingkup**

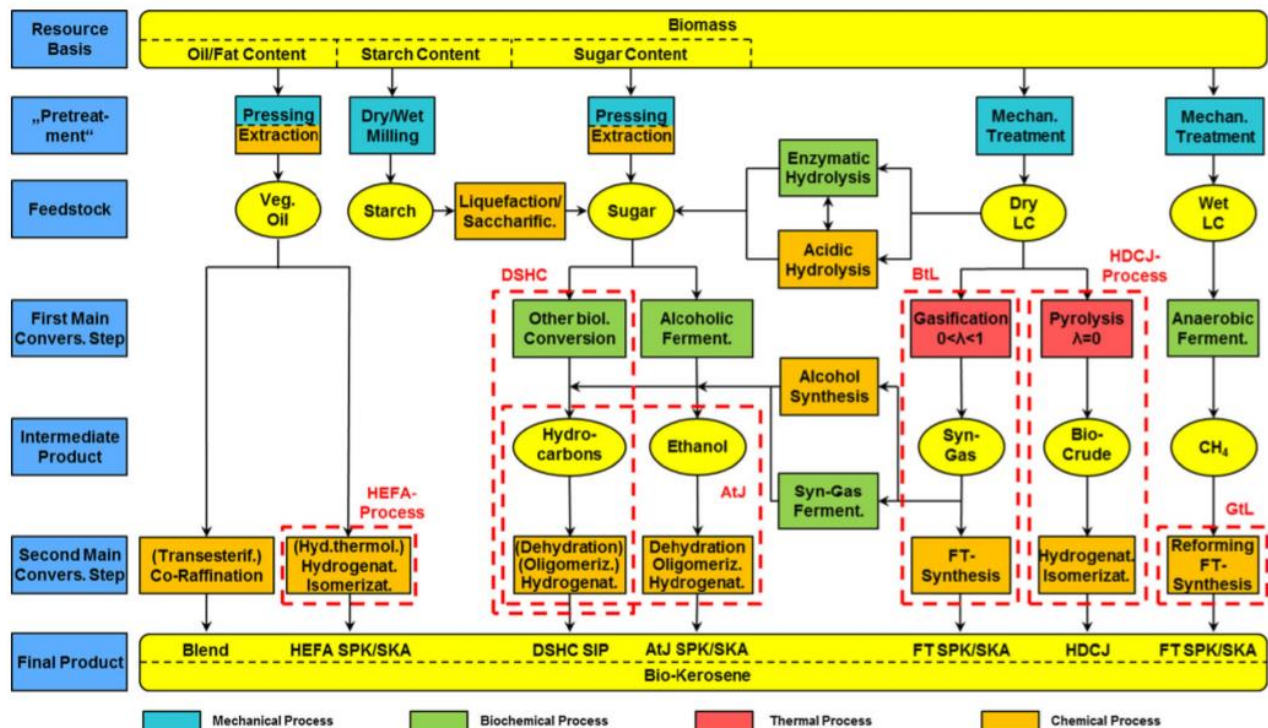
Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan asam stearat sebagai umpan untuk memproduksi bioavtur dengan reaksi hidrideoksigenasi. Katalis yang digunakan adalah Ni/H-Y-80 (5%-wt Ni). Uji kinerja katalis dalam proses hidrideoksigenasi dilakukan di dalam reaktor dengan temperatur 375<sup>0</sup>C, LHSV sebesar 7 jam<sup>-1</sup>, tekanan 3 MPa, dan nisbah H<sub>2</sub>/umpan sebesar 100.

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1. Proses Sintesis Biohidrokarbon

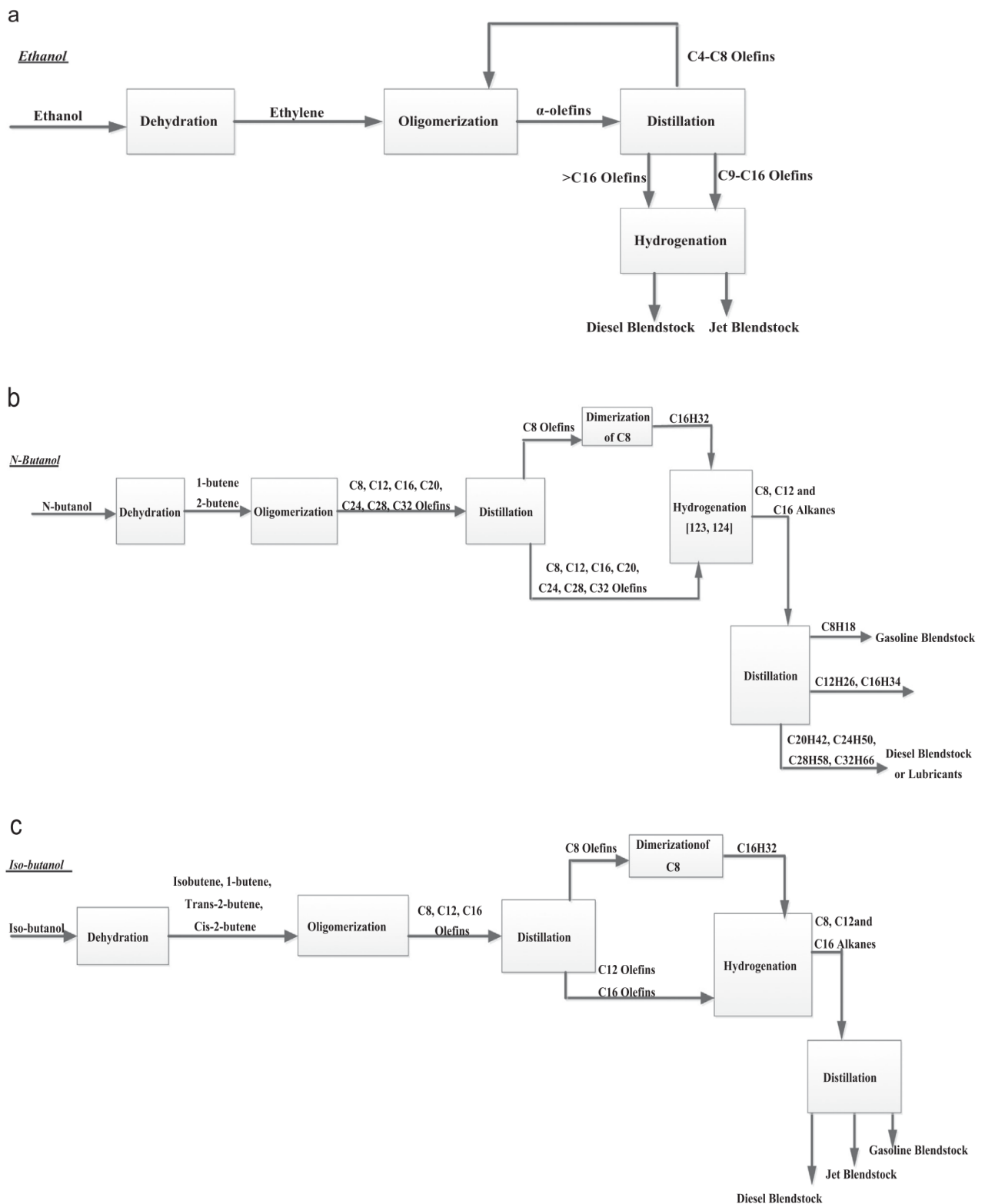
Ada berbagai pilihan teknologi untuk memproduksi biohidrokarbon: *alcohol-to-oil process*, *oil-to-hydrocarbon process*, *gas-to-hydrocarbon process*, dan *sugar-to-hydrocarbon process* (W. C. Wang dan Tao, 2016). Bahan baku produksi biohidrokarbon yang berbeda menentukan jalur teknologi mana yang dipilih untuk membuat biohidrokarbon. Gambar 2.2 (Neuling dan Kaltschmitt, 2014) menunjukkan jalur-jalur proses pembuatan bioavtur yang dapat dipilih berdasarkan bahan bakunya.



**Gambar 2.1.** Jalur proses produksi biohidrokarbon berdasarkan bahan baku (Neuling dan Kaltschmitt, 2015)

### **2.1.1 Alcohol-to-Oil**

Proses pembuatan biohidrokarbon dari alkohol, bisa disebut sebagai oligomerisasi alkohol, memanfaatkan methanol, etanol, butanol, dan alkohol rantai panjang lainnya (berasal dari lemak). Secara komersil, etanol dan butanol banyak dijadikan bahan baku untuk diubah menjadi bioavtur (W. C. Wang dan Tao, 2016). Proses ATJ menghasilkan kerosin parafinik, dan diutilisasi sebagai 50% campuran dengan avtur. Diharapkan di masa mendatang dapat mensubstitusi avtur berbasis kerosin dari minyak bumi (Palou-Rivera dkk., 2016). Berikut adalah gambaran proses ATJ komersial tersaji dalam Gambar 2.3.



**Gambar 2.2.** Proses ATJ: (a) *ethanol to oil*; (b) *n-butanol to oil*; (c) *iso-butanol to oil*  
(W. C. Wang dan Tao, 2016)

Secara general, proses ATJ meliputi dehidrasi alkohol, oligomerisasi, dan hidrogenasi. Alkohol awalnya didehidrasi menjadi senyawa intermediat, umumnya menjadi alkena, dengan menggunakan katalis. Senyawa intermediat lalu dioligomerisasi menjadi olefin dengan panjang rantai berkisar antara C8-C32.

### **2.1.2. Oil-to-Hydrocarbon**

Proses OTJ memiliki 3 jalur proses berbeda: *hydro-processed renewable jet* (HRJ), atau biasa dikenal sebagai *hydro-processed esters and fatty acids* (HEFA); *catalytic thermolysis* (CH), atau dapat dikenal sebagai *hydrothermal liquefaction*; dan *hydro-treated depolymerized cellulosic jet* (HDCJ), yang dikenal sebagai *fast pyrolysis with upgrading to jet fuel*. HRJ atau HEFA adalah jalur proses produksi bioavtur satu-satunya yang sudah menjadi komersil (W. C. Wang dan Tao, 2016).

#### **2.1.2.1. Hydro-processed Renewable Hydrocarbon**

- ***Hydrotreatment***

*Hydrotreating* adalah proses yang umum digunakan untuk memproduksi bahan bakar kualitas tinggi dan sebagai bagian dari strategi untuk meningkatkan *heavy crude oil* maupun minyak nabati dengan mengurangi kandungan sulfur, nitrogen, oksigen dan atau kandungan logam. *Hydrotreating* untuk menghilangkan kandungan sulfur disebut *hydrodesulfurization* (HDS), *hydrotreating* untuk menghilangkan kandungan nitrogen disebut *hydrodenitrogenation* (HDN), *hydrotreating* untuk menghilangkan kandungan oksigen disebut *hydrodeoxygenation* (HDO), sedangkan untuk menghilangkan kandungan logam disebut *hydrodemetallization* (HDM). Seluruh proses tersebut terjadi secara simultan saat dilakukan *hydroprocessing* berbagai umpan untuk memproduksi bahan bakar. Penghilangan sulfur dan nitrogen didorong oleh masalah lingkungan karena pembakaran bahan bakar menghasilkan emisi SO<sub>x</sub> dan NO<sub>x</sub>. Selain itu senyawa-N didalam umpan juga meracuni katalis; sehingga penghilangan mereka perlu dilakukan.

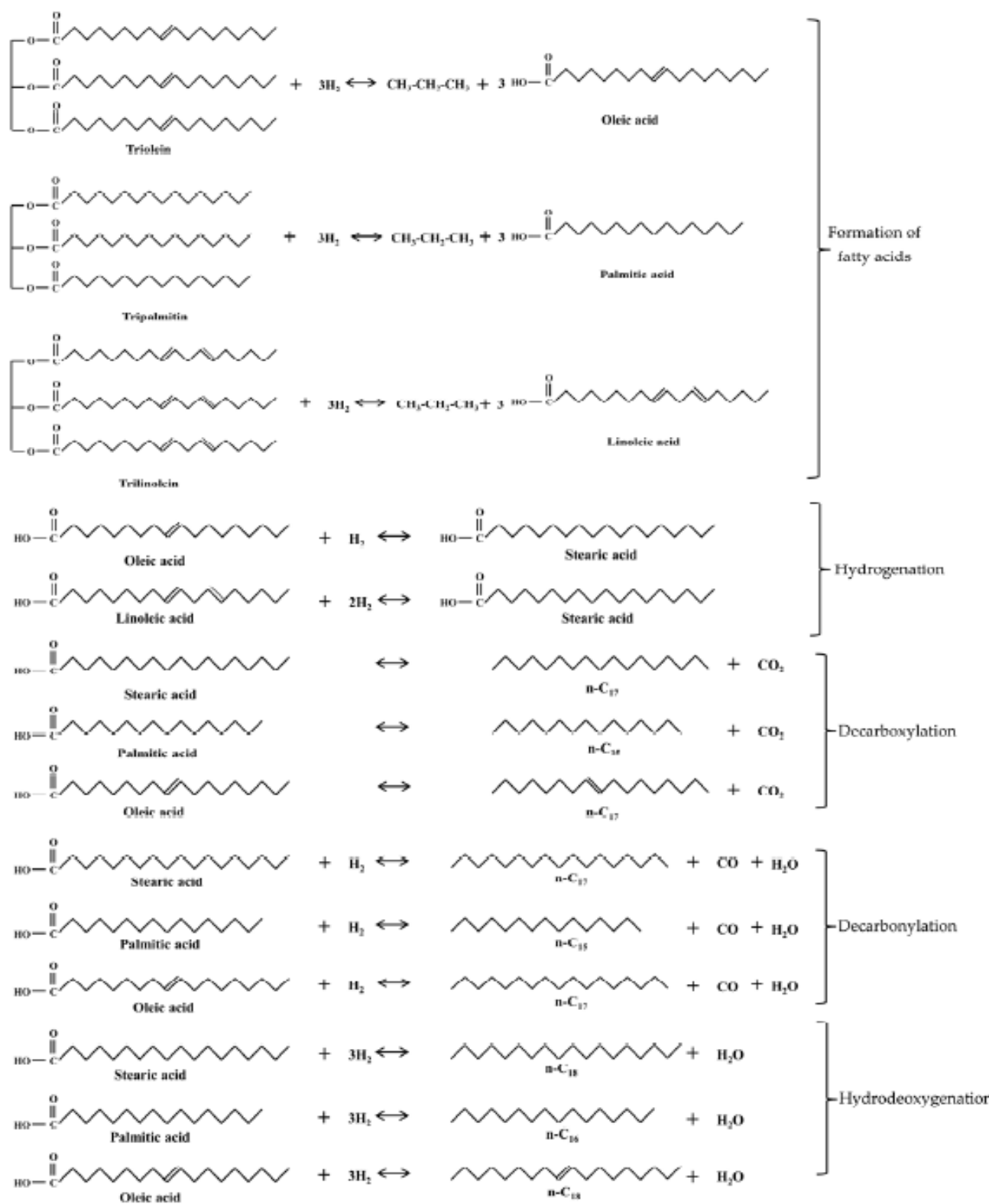
Saat HDO, oksigen didalam umpan dikonversi menjadi  $H_2O$  yang aman bagi lingkungan. Selanjutnya, dalam minyak mentah konvensional, kandungan oksigen adalah dibawah 2 wt.%. Sehingga HDO membutuhkan sedikit perhatian. Namun, pada kasus minyak mentah sintetis, seperti yang berasal dari turunan batubara dan biomassa, kandungan oksigen mungkin lebih dari 10 wt.%. Pada umpan turunan biomassa, kandungan oksigen bahkan dapat mencapai 50 wt.%. Sebagian dari senyawa-O dalam umpan langsung terpolimerisasi dan itu menyebabkan instabilitas bahan bakar yang menyebabkan kinerja yang tidak baik pada saat pembakaran. Saat *hydroprocessing*, senyawa tersebut dapat mengakibatkan deaktivasi katalis yang terjadi secara cepat (Furimsky, 2000).

Minyak nabati tidak dapat memberikan sifat pembakaran yang mirip dengan bahan bakar konvensional dikarenakan kandungan oksigen yang sangat tinggi (mencapai 50%), yang menyebabkan *heating value* yang rendah, kecenderungan polimerisasi, stabilitas termal yang rendah, dan viskositas yang tinggi (Czernik dan Bridgwater, 2004). Untuk menghasilkan hidrokarbon bahan bakar yang diinginkan dari trigliserida minyak nabati, *hydroprocessing* akan melalui beberapa tahap reaksi seperti pembentukan rantai jenuh, pembentukan *free fatty acid* dan pelepasan oksigen dengan salah satu dari cara berikut: *hydrodeoxygenation*, *decarboxylation*, dan *decarbonylation*. *Decarboxylation* adalah proses pelepasan oksigen dalam bentuk karbon dioksida (Mohammad dkk., 2013), sedangkan *decarbonylation* adalah proses pelepasan oksigen dalam bentuk karbon monoksida (Kubicka dan Horacek, 2010). Dari ketiga jalur tersebut, jalur yang lebih diminati adalah *hydrodeoxygenation* karena tidak menghasilkan emisi CO maupun  $CO_2$ .

Akan dibahas lebih lanjut mengenai proses *hydrodeoxygenation* (HDO). Konsumsi  $H_2$  dan kerumitan operasi yang diperlukan untuk mencapai konversi HDO yang tinggi bergantung kepada kandungan dan jenis senyawa-O didalam umpan. Sebuah katalis aktif harus ada untuk mencapai konversi HDO yang memuaskan. Operasi multi-tahap adalah salah satu syarat penting untuk mengkonversi *bio-oils* dan minyak nabati menjadi bahan bakar komersial. Tahap pertama, biasa disebut tahap stabilisasi, dilakukan dibawah 573K untuk melepaskan senyawa-O yang seketika mengalami polimerisasi. Dalam kasus ini, reaktan utama berupa seperti metoksifenol, bifenol, dan eter dikonversi menjadi fenol

yang harus dipisahkan pada tahap kedua pada 623K. Senyawa-O seperti keton, asam karboksilat, ester, dll. dapat juga terlibat. Umpan dengan kandungan furan dan fenol tinggi akan memiliki reaktivitas HDO yang rendah sehingga dibutuhkan tekanan  $H_2$  dan temperatur yang lebih tinggi untuk mengkonversi menjadi senyawa bebas-O. Selama ini, katalis konvensional *hydroprocessing* yang paling sering digunakan adalah  $CoMo/Al_2O_3$  dan  $NiMo/Al_2O_3$  (Furimsky, 1983).

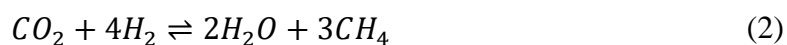
Dalam pemrosesan trigliserida, tipe katalis adalah salah satu faktor terpenting untuk menentukan perolehan dan komposisi produk cairan, diantaranya *green naphtha* (C5-C10), *green jet fuel* (C11-C13), dan *green diesel* (C14-C20), bahkan *green liquid petroleum gas* (LPG). Trigliserida dikonversi menjadi beberapa jenis hidrokarbon, terutama n-parafin pada temperatur antara 300 dan 450 °C dan tekanan hidrogen diatas 3 MPa, meninggalkan CO,  $CO_2$  dan air sebagai produk samping (Sotelo-Boyás dkk., 2012). Pelepasan oksigen dari trigliserida terjadi melalui 3 jalur yang sudah disebutkan. Mekanisme reaksi yang terjadi kompleks dan terdiri dari beberapa tahap seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.4.



**Gambar 2.3.** Mekanisme reaksi pelepasan oksigen dari trigliserida (Sotelo-Boyás dkk., 2012)



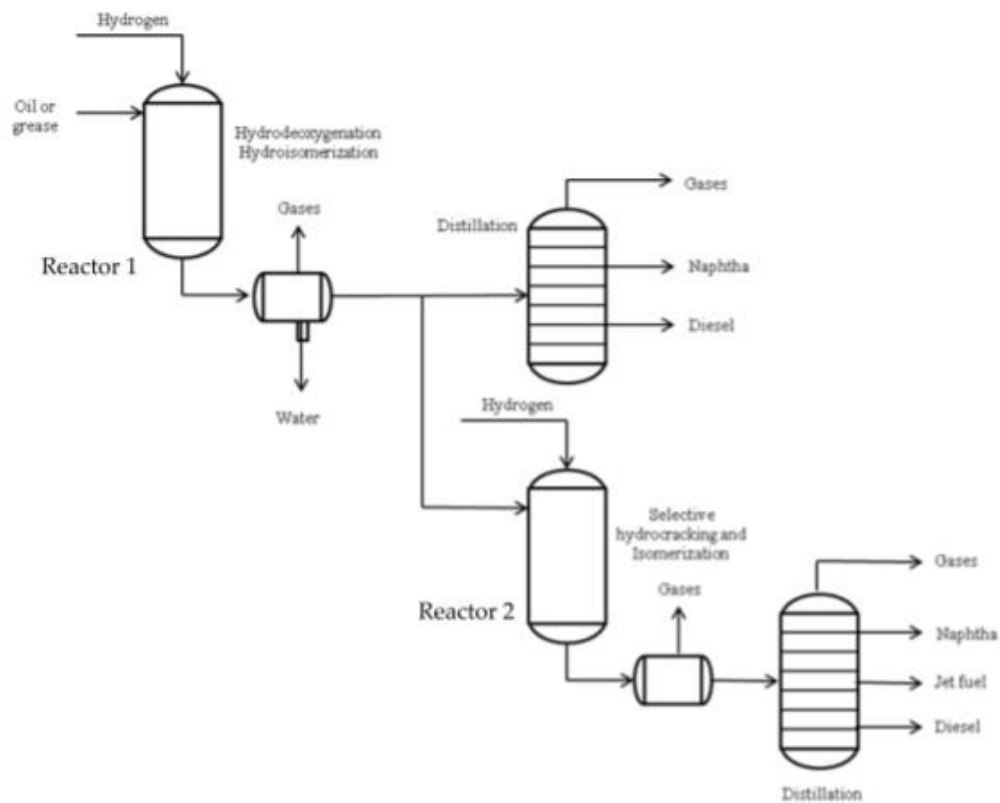
Sebagai contoh, pembentukan 2 mol n-heptadekana, 1 mol n-oktadekana, dan 1 mol propana membutuhkan 10 mol hidrogen per mol triolein dalam umpan. Berdasarkan mekanisme reaksi tersebut, kebutuhan hidrogen jika menggunakan jalur hidrideoksigenasi terbukti lebih banyak dibandingkan dekarboksilasi dan dekarbonilasi yang masing-masing hanya membutuhkan 3 mol dan 6 mol hidrogen sedangkan hidrideoksigenasi membutuhkan 12 mol oksigen. Karbon dioksida dan karbon monoksida yang dihasilkan pada reaksi dekarboksilasi (DCOx) dan dekarbonilasi (DCO) perlu diolah dapat dimanfaatkan kembali dan tidak dilepas ke atmosfer sebagai gas rumah kaca, pengolahan kedua senyawa tersebut mengikuti reaksi (1) dan (2) berikut:



Secara keseluruhan, hidrogen yang dibutuhkan pada reaksi DCOx dan DCO lebih banyak daripada reaksi dehidrogenasi. Hal ini disebabkan oleh kebutuhan oksigen yang dipakai pada reaksi metanasi untuk mengkonversi CO<sub>2</sub> dan CO menjadi metana dan air (Jęczmionek dan Porzycka-Semczuk, 2014).

- ***Hydrocracking dan Hydroisomerization***

Reaksi *cracking* dan isomerisasi dapat terjadi bersamaan maupun sekuensial (Kalnes dkk., 2010). Studi menunjukkan bahwa isomerisasi alkana rantai lurus terjadi lebih dulu dan *cracking* terjadi selanjutnya. Proses isomerisasi mengambil hidrokarbon rantai lurus dan mengubahnya menjadi struktur bercabang (H. Gary dkk., 2007). Reaksi tersebut diiringi dengan reaksi *hydrocracking*, yang menghasilkan *yield loss* minimum dari spesi terisomerisasi, dan juga mengurangi panjang rantai serta menghasilkan lebih banyak molekul (Abhari dkk., 2008). Detail proses *hydrocracking* dan *hydroisomerization* ditunjukkan pada Gambar 2.5 berikut.

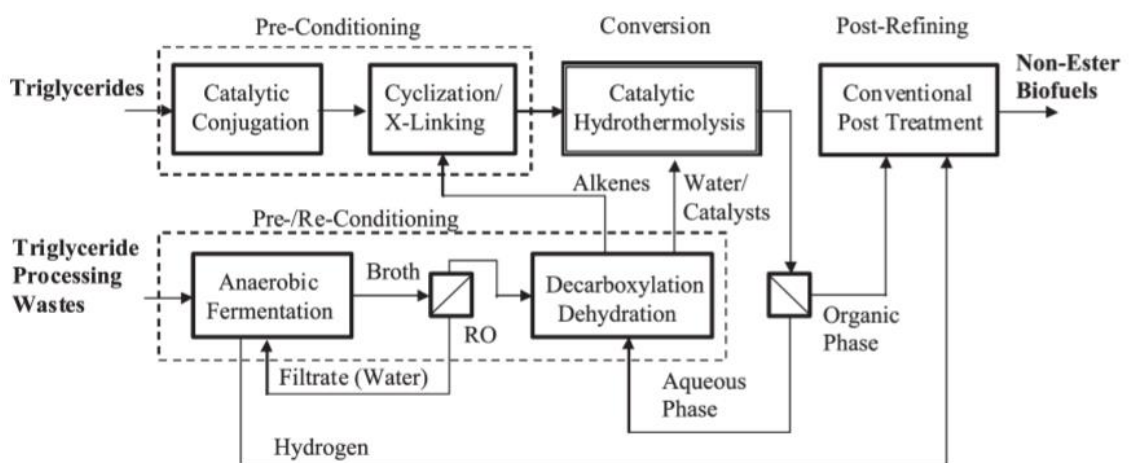


**Gambar 2.4.** Skema proses 2 tahap untuk mendapatkan jet fuel dengan kombinasi hydrodeoxygenation dan selective hydrocracking (Sinnatt dkk., 1937)

Reaktor pertama diisi dengan katalis *hydrotreating* untuk melepaskan oksigen. Hydroisomerisasi juga terjadi pada reaktor pertama dalam skala rendah. Kemudian produk bebas oksigen akan di proses pada reaktor kedua yang diisi dengan katalis selektif *hydrocracking* dimana *cracking* molekul besar akan terjadi dan *hydroisomerization* juga terjadi.

#### 2.2.2.2. Catalytic Thermolysis (CH)

Proses CH menggunakan trigliserida dari tumbuh-tumbuhan dan/atau alga. Proses CH melibatkan rangkaian proses reaksi perengkahan, hidrolisis, dekarboksilasi, isomerisasi, dan siklisasi (W. C. Wang dan Tao, 2016). Rangkaian reaksi pembuatan bioavtur tersebut dapat dibagi menjadi 3, yaitu *pre-treatment*, konversi CH, dan proses *refining* (L. Li dkk., 2010). Berikut adalah *process flow diagram* (PFD) dari CH tersaji dalam Gambar 2.6.



**Gambar 2.5.** Proses CH (Li dkk., 2010)

Umpan trigliserida awalnya diberi *pre-treatment* berupa proses konjugasi, siklisasi, dan *cross-linking*. Rangkaian proses tersebut dilakukan untuk meningkatkan kualitas struktur molekul asam lemak yang nantinya menjadi bioavtur. Asam lemak tidak *saturated cis* dari trigliserida diisomerisasi menjadi asam lemak *trans*, lalu salah satu ikatan C ganda pada rantai karbon asam lemak disiklisasi dengan reaksi Diels-Alder. Reaksi-reaksi tersebut dijalankan dengan katalis pada temperatur 240°C. Pada temperatur tersebut, proses *cross-linking* dan alkilasi dapat terjadi (L. Li dkk., 2010).

Proses reaksi *catalytic hydrothermolysis* dilakukan pada temperatur 240°C sampai 475°C dan tekanan 210 bar dengan air. Proses ini dapat menggunakan katalis, atau tidak menggunakan katalis sama sekali (L. Li dkk., 2010; W. C. Wang dan Tao, 2016). Pada proses ini, trigliserida yang tidak termodifikasi maupun yang sudah dimodifikasi (pada *pre-treatment*) dikonversi menjadi hidrokarbon berantai lurus, bercabang, dan/atau

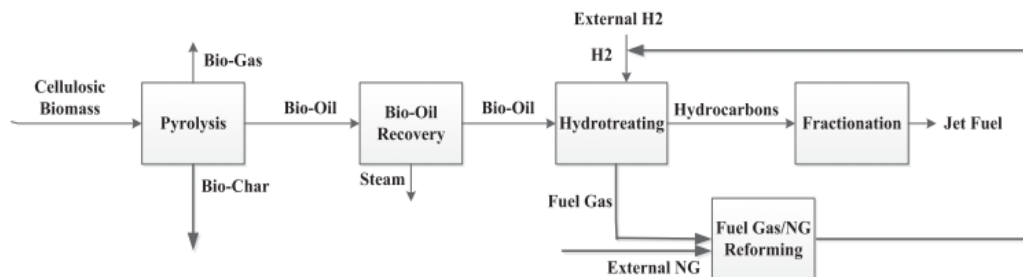
aromatik dengan rangkaian reaksi perengkahan, hidrolisis, dan dekarboksilasi (L. Li dkk., 2010). Komposisi produk hidrokarbon beserta selektivitasnya bergantung pada jenis katalis yang digunakan (Mawhood dkk., 2016).

Produk rangkaian reaksi *catalytic hydrothermolysis* memiliki tiga fasa: fasa gas, fasa organik, dan fasa *aqueous solution*. Fasa gas terdiri dari gas karbon monoksida, karbon dioksida, dan hidrokarbon rantai pendek (C3-C4). Fasa organik yang terbentuk merepresentasikan 85% massa trigliserida awal yang dipakai untuk reaksi, berupa hidrokarbon yang biasa dinamakan CH *biocrude*. Fasa *aqueous solution* yang terbentuk dari reaksi adalah asam karboksilat rantai pendek (C2-C5), gliserol, dan berbagai macam molekul polar. Fasa organik yang terbentuk harus difraksionasi untuk memisahkan produk nafta, diesel, dan avtur (L. Li dkk., 2010; Mawhood dkk., 2016; W. C. Wang dan Tao, 2016).

Umpan berupa limbah proses trigliserida atau limbah tumbuhan dapat diolah untuk menghasilkan hidrokarbon. Fermentasi anaerobik dilakukan pada umpan dengan bantuan mikroorganisme anaerobik menghasilkan hidrogen dan alkohol (Bagyaraj, 2014). Alkohol selanjutnya didehidrasi dengan bantuan katalis untuk membentuk senyawa alkena yang akan disiklisasi yang selanjutnya akan dikonversi menjadi hidrokarbon (Larsen dkk., 1997).

#### **2.2.2.3. Hydro-treated Depolymerized Cellulosic Hydrocarbon (HDCJ)**

Proses ini menggunakan bahan baku berbasis biomassa lignoselulosa. Umpan biomassa yang kaya akan karbon dipirolisis sehingga menghasilkan *bio-gas*, *bio-oil*, dan *bio-char*. Proses HDCJ pada umumnya mengikuti BFD yang disajikan pada Gambar 2.7 (Lang dan Farouk, 2014; W. C. Wang dan Tao, 2016).



**Gambar 2.6.** Proses HDCJ (Wang dan Tao, 2016)

Sebelum pirolisis dilakukan, umpan biomassa dikeringkan terlebih dahulu. Metode yang umum untuk dilakukan adalah pengeringan pada tekanan vakum selama kurang lebih 16-24 jam (Pindoria dkk., 1997). Selanjutnya, umpan dipirolisis dengan udara terbatas pada temperatur 450-550<sup>0</sup>C dan tekanan ruang. Metode pirolisis ini biasa disebut *fast pyrolysis* (Zhang dkk., 2007).

Biogas adalah produk pirolisis fasa gas yang terdiri dari: CO<sub>2</sub>, CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, dan C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. *Bio-oil*, atau yang biasa disebut *pyrolysis oil*, adalah produk cair dari proses HDCJ. *Bio-oil* didapatkan dalam bentuk tar, dan merupakan campuran dari senyawa-senyawa organik dengan molekul berukuran besar. Produk fasa padat pirolisis merupakan char dan abu yang diklasifikasi sebagai *bio-char* (Lang dan Farouk, 2014; Zhang dkk., 2007).

*Bio-oil* selanjutnya akan memasuki proses *hydrotreating* untuk menghilangkan kandungan oksigen. Proses *hydrotreating* dilakukan di dua reaktor. *Bio-oil* akan di-*cracking* pada temperatur 450<sup>0</sup>C dan tekanan 10-15 MPa. Selanjutnya, reaktor kedua melanjutkan proses *hydrocracking* dan *hydrotreatment* lainnya dengan bantuan katalis pada kondisi temperatur yang lebih rendah dan tekanan yang sama daripada reaktor pertama (Pindoria dkk., 1997). Produk hidrokarbon hasil *hydrotreatment* selanjutnya difraksionasi untuk mendapatkan produk yang diinginkan (LPG, LNG, nafta, diesel, dan avtur) (W. C. Wang dan Tao, 2016; Zhang dkk., 2007).

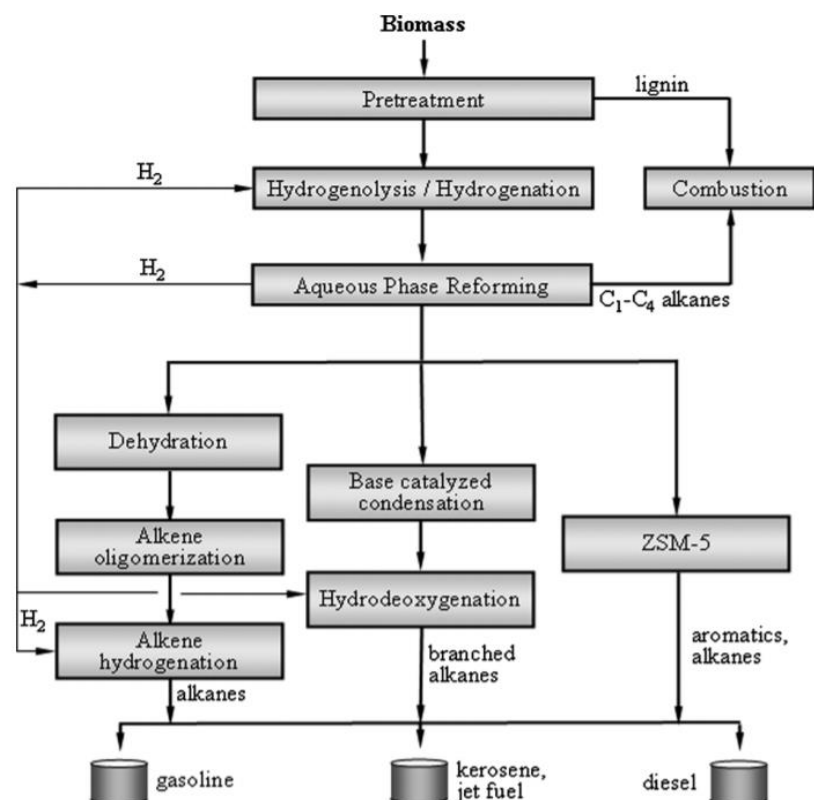
Hasil *hydrotreatment bio-oil* yang berupa fasa gas dapat memproduksi hidrogen dan/atau *syn-gas* melalui proses steam reforming. Proses dilakukan dengan uap air dan bantuan katalis. Hidrogen yang dihasilkan pada proses ini dapat digunakan untuk proses *hydrotreating* (W. C. Wang dan Tao, 2016; Zhang dkk., 2007)

### 2.2.3. Sugar-to-Hydrocarbon

Ada dua jalur proses pengolahan senyawa-senyawa glukosa (atau pati) menjadi bioavtur: (1) proses *catalytic upgrading* senyawa glukosa menjadi hidrokarbon dan (2) proses fermentasi glukosa menjadi hidrokarbon atau *direct sugar to hydrocarbons* (W. C. Wang dan Tao, 2016).

#### 2.2.3.1. Catalytic Upgrading of Sugars to Hydrocarbons

Larutan glukosa yang menjadi umpan dalam proses ini didapat dari biomassa, khususnya fraksi karbohidrat dari biomassa lignoselulosa (Serrano-Ruiz dan Dumesic, 2011). Berikut adalah salah satu metode pemrosesan biomassa untuk menghasilkan hidrokarbon tersaji dalam Gambar 2.8.

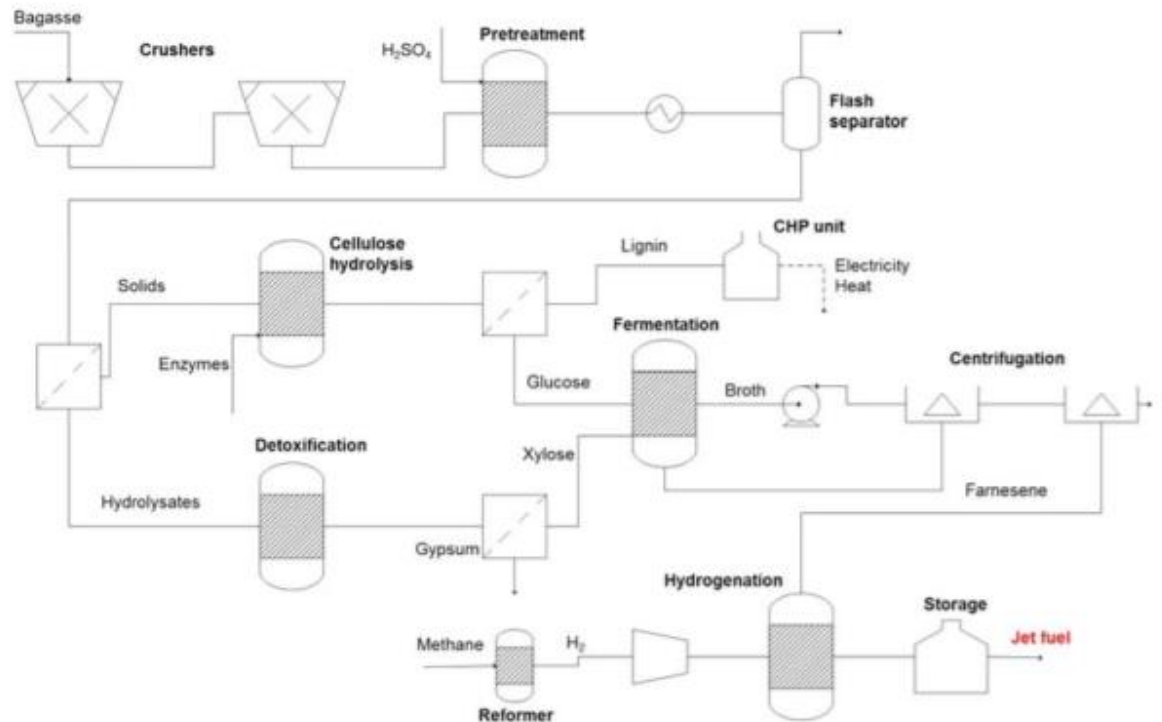


**Gambar 2.7.** Proses Virent BioForming untuk memroses larutan glukosa dari biomassa menjadi hidrokarbon (Perego dan Ricci, 2012)

Senyawa-senyawa glukosa diperoleh dengan menghidrolisis lignoselulosa (Serrano-Ruiz dan Dumesic, 2011). Setelah itu, senyawa glukosa melalui proses hidrogenolisis atau hidrogenasi diubah menjadi senyawa oksigenat rantai pendek atau alkohol (polialkohol). Senyawa oksigenat dan alkohol akan diproses dengan uap air pada *Aqueous Phase Reforming* (APR). Proses tersebut berjalan pada temperatur 450-575 K dan tekanan 10-90 bar. Pada APR, terjadi reaksi *steam reforming* pembentukan hidrogen, dehidrogenasi alkohol / dehidrogenasi senyawa karbonil, deoksigenasi, hidrogenolisis, dan siklisasi. Maka, akan terbentuk produk berupa hidrogen (berupa senyawa murni atau dalam bentuk *syn-gas*), karbon dioksida, senyawa alkohol, keton, aldehid, alkana, asam organik, dan furan. Hidrogen yang dihasilkan akan menopang proses *hydrotreatment*, sedangkan hidrokarbon fraksi ringan (C1-C4) digunakan untuk megenerasi panas bagi keseluruhan proses pada *combustor* (W. C. Wang dan Tao, 2016). Ada tiga pilihan jalur pemrosesan produk keluaran APR menjadi hidrokarbon, yaitu proses ATJ untuk senyawa-senyawa alkohol, sintesis Fischer-Tropsch untuk *syn-gas*, dan/atau *catalytic hydrotreatment* dengan katalis berbasis ZSM 5 untuk senyawa-senyawa oksigenat menjadi hidrokarbon alkana, iso-alkana, dan aromatik. Produk hidrokarbon akan difraksionasi untuk mendapatkan bahan bakar dengan fraksi karbon yang sesuai (bensin, diesel, kerosin/avtur) (Serrano-Ruiz dan Dumesic, 2011; W. C. Wang dan Tao, 2016; Zhao dkk., 2015)

#### **2.2.3.2. Direct Sugar to Hydrocarbons (DSH)**

Bahan baku proses ini merupakan senyawa glukosa dari hemiselulosa (W. C. Wang dan Tao, 2016). Secara singkat, proses DSH meliputi: (1) *pre-treatment* biomassa, (2) hidrolisis selulosa, (3) fermentasi senyawa glukosa (hekosa dan pentosa) menjadi farnesene (C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>), (4) pemisahan senyawa intermediet dari zat-zat pengotor, (5) konversi farnesene menjadi produk yang diinginkan (Michailos, 2018; W. C. Wang dan Tao, 2016). Gambar 2.9 merupakan penggambaran proses dengan PFD untuk proses DSH.



**Gambar 2.8.** Proses DSH (Michailos, 2018)

Proses hidrolisis hemiselulosa (*pre-treatment*) dilakukan dengan asam pada *stirred batch reactor* pada temperatur 130<sup>0</sup>C dan tekanan 2 bar untuk mendapatkan xilosa. Setelah itu, larutan dipisahkan dari material-material padat (hemiselulosa) dengan filtrasi dan diuapkan pada *flash separator* (beroperasi pada temperatur 105<sup>0</sup>C) untuk mendapatkan larutan jenuh. Hemiselulosa yang masih tersisa kemudian dihidrolisis dengan bantuan enzim pada temperature 50<sup>0</sup>C selama 45 jam. Lignin (fasa padat) produk proses hidrolisis dipisahkan dan dapat dimanfaatkan untuk sistem utilitas (listrik). Produk cair (heksosa) selanjutnya dicampurkan dengan larutan jenuh xilosa akan difermentasi menggunakan ragi yang dimodifikasi dan ditambah ammonium hidroksida dan diammonium fosfat sebagai nutrisi bagi ragi untuk mendapatkan farnesene. Farnesene selanjutnya akan dipisahkan dari larutan fermentasi dengan proses sentrifugasi. Farnesene yang telah dipisahkan akan di-*treating* dengan hidrogen (*hydrotreating*) untuk mendapatkan bahan bakar alternatif sesuai spesifikasi (Michailos, 2018).

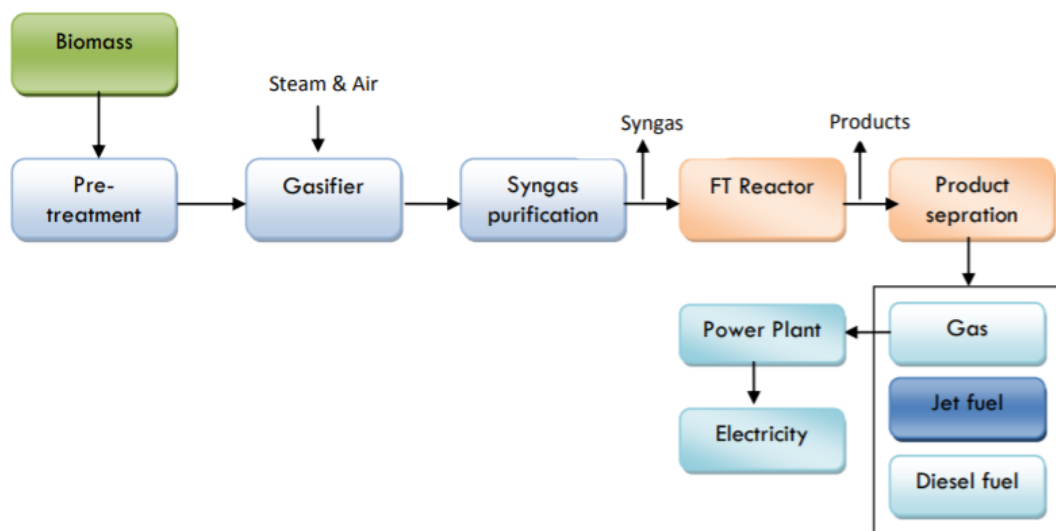


#### 2.2.4. Gas-to-Hydrocarbon

Proses GTJ menggunakan umpan fasa gas: biogas, gas alam, dan *syn-gas* untuk menghasilkan bioavtur. Terdapat dua proses yang saat ini sudah atau masih dalam perkembangan, yaitu sintesis Fischer-Tropsch atau dapat disebut Fischer-Tropsch *biomass to liquid process* (FT-BTL) dan proses fermentasi gas (*Gas fermentation process*) (W. C. Wang dan Tao, 2016).

##### 2.2.4.1. Sintesis Fischer-Tropsch

Proses sintesis Fischer-Tropsch menggunakan *syn-gas* sebagai bahan bakunya. Produk yang dihasilkan oleh proses ini umumnya tidak memiliki kandungan sulfur dan kandungan aromatik yang rendah dibandingkan dengan nafta dan diesel (W. C. Wang dan Tao, 2016). Hal ini dapat mengurangi emisi karbon dari penggunaan bahan bakar produk Fischer-Tropsch. Secara umum, proses sintesis Fischer-Tropsch mengikuti BFD yang disajikan pada Gambar 2.10.



**Gambar 2.9.** Proses sintesis Fischer-Tropsch (Lang dan Farouk, 2014)

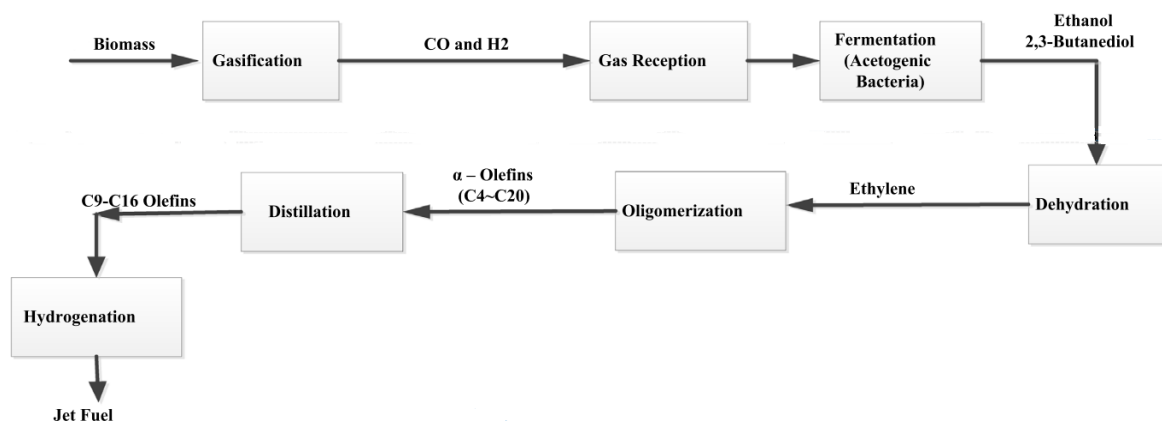
Umpan biomassa pada proses *pre-treatment* untuk memperkecil ukuran dengan proses pengeringan dan *grinding* (W. C. Wang dan Tao, 2016). Selanjutnya, biomassa akan melalui tiga tahap proses, yaitu preparasi *syn-gas*, sintesis Fischer-Tropsch, dan *treating* (Steynberg, 2007). Biomassa digasifikasi pada temperatur 1300<sup>0</sup>C dengan uap air dan oksigen murni untuk menghasilkan *syn-gas*. Produk yang meninggalkan reaktor gasifikasi masih mengandung banyak pengotor: karbon dioksida, sulfur, tar, dan abu (Lang dan Farouk, 2014; W. C. Wang dan Tao, 2016). *Syn-gas* kotor akan di-*quench* terlebih dahulu dengan sebuah *cooling system* untuk memisahkan *syn-gas* dengan tar dan abu. Lalu, karbon dioksida dan sulfur akan dipisahkan dengan kolom *scrubber* sehingga *syn-gas* menjadi ‘bersih’ dan dapat digunakan sebagai *feed* bagi reaktor Fischer-Tropsch (W. C. Wang dan Tao, 2016).

Konversi *syn-gas* dapat dilakukan di dua reaktor yang berbeda: reaktor bertemperatur tinggi dan reaktor bertemperatur rendah (Steynberg, 2007). Reaktor temperatur tinggi beroperasi pada temperatur 300-350<sup>0</sup>C dengan katalis berbasis besi, sedangkan reaktor bertemperatur rendah beroperasi pada temperatur 200-240<sup>0</sup>C dengan katalis berbasis besi atau kobalt (W. C. Wang dan Tao, 2016). Katalis yang digunakan pada sintesis Fischer-Tropsch adalah katalis basa (Lang dan Farouk, 2014). Reaksi yang terjadi pada reaktor Fischer-Tropsch adalah reaksi eksotermik (W. C. Wang dan Tao, 2016). Panas berlebihan dapat menggeser kesetimbangan reaksi untuk menghasilkan metana yang lebih banyak dan juga dapat mendeaktivasi katalis (Steynberg, 2007; W. C. Wang dan Tao, 2016). Maka dari itu, panas berlebih dibuang melalui *syn-gas* untuk menghasilkan uap air.

Produk dari sintesis Fischer-Tropsch berupa *tail gas*, hidrokarbon cair, dan *wax*. Produk hidrokarbon cair berantai karbon rendah (C3-C8) akan dihidrogenasi menjadi LPG dan nafta. Produk hidrokarbon cair berantai karbon di atas C8 dan *wax* akan di-*hydrotreating* (*hydrocracking* dan *hydroisomerization*) dan difraksionasi untuk menghasilkan avtur, diesel, dan oli. Hidrogen akan dipisahkan dari *tail gas* dan diumpankan pada proses hidrogenasi dan *hydrotreating* (Steynberg, 2007; W. C. Wang dan Tao, 2016).

#### 2.2.4.2. Fermentasi Gas

Proses ini menggunakan biomassa untuk memproduksi *syn-gas* yang akan difermentasi menjadi *bio-fuel* (Henstra dkk., 2007; W. C. Wang dan Tao, 2016). Gambar 2.11 tersaji BFD proses fermentasi *syn-gas* menjadi biohidrokarbon.



**Gambar 2.10** Proses fermentasi *syn-gas* menjadi bioavtur (Wang dan Tao, 2016)

Biomassa digasifikasi pada temperatur 1300<sup>0</sup>C dengan uap air dan oksigen murni untuk menghasilkan *syn-gas*. Selanjutnya, *syn-gas* yang telah didinginkan akan difermentasi dengan bakteri asetogenik untuk menghasilkan senyawa asetat, format, butirat, etanol dan/atau butanol (Henstra dkk., 2007; W. C. Wang dan Tao, 2016). Berikut adalah data karakteristik bakteri-bakteri umum yang digunakan untuk fermentasi *syn-gas*. Senyawa-senyawa alkohol yang dihasilkan selanjutnya akan didehidrasi, oligomerisasi, dan dihidrogenasi sesuai dengan proses ATJ pada Bab 2.2.1 yang disajikan dalam Tabel 2.2 (W. C. Wang dan Tao, 2016).

**Tabel 2.1.** Data karakteristik bakteri asetogenik (Henstra dkk., 2007)

Anaerobic carboxydutrophic microorganisms.				
Species	T <sub>opt</sub> (°C)	pH <sub>opt</sub>	t <sub>d</sub> (h)	Products
<b>Mesophilic bacteria</b>				
<i>Clostridium autoethanogenum</i>	37	5.8–6.0	nr	Acetate, ethanol
<i>Clostridium ljungdahlii</i>	37	6	3.8	Acetate, ethanol
<i>Clostridium carboxidivorans</i>	38	6.2	6.25	Acetate, ethanol, butyrate, butanol
<i>Oxobacter pfennigii</i>	36–38	7.3	13.9	Acetate, n-butyrate
<i>Peptostreptococcus productus</i>	37	7	1.5	Acetate
<i>Acetobacterium woodii</i>	30	6.8	13	Acetate
<i>Eubacterium limosum</i>	38–39	7.0–7.2	7	Acetate
<i>Butyrivibrio methylotrophicum</i>	37	6	12–20	Acetate, ethanol, butyrate, butanol
<i>Rubrivivax gelatinosus</i>	34	6.7–6.9	6.7	H <sub>2</sub>
<i>Rhodospseudomonas palustris P4</i>	30	nr	23	H <sub>2</sub>
<i>Rhodospirillum rubrum</i>	30	6.8	8.4	H <sub>2</sub>
<i>Citrobacter</i> sp Y19	30–40	5.5–7.5	8.3	H <sub>2</sub>
<b>Mesophilic archaea</b>				
<i>Methanosarcina barkeri</i>	37	7.4	65	CH <sub>4</sub>
<i>Methanosarcina acetivorans</i> strain C2A	37	7	24	Acetate, formate, CH <sub>4</sub>
<b>Thermophilic bacteria</b>				
<i>Moorella thermoacetica</i>	55	6.5–6.8	10	Acetate
<i>Moorella thermoautotrophica</i>	58	6.1	7	Acetate
<i>Moorella</i> strain AMP	60–65	6.9	nr	H <sub>2</sub>
<i>Carboxydotherrnus hydrogenoformans</i>	70–72	6.8–7.0	2	H <sub>2</sub>
<i>Carboxydibrachium pacificus</i>	70	6.8–7.1	7.1	H <sub>2</sub>
<i>Carboxydocella sporoproducens</i>	60	6.8	1	H <sub>2</sub>
<i>Carboxydocella thermoautotrophica</i>	58	7	1.1	H <sub>2</sub>
<i>Thermincola carboxydiphila</i>	55	8	1.3	H <sub>2</sub>
<i>Thermincola ferriacetica</i>	57–60	7.0–7.2	nr	
<i>Thermolithobacter carboxydivorans</i> <sup>b</sup>	70	7	8.3	H <sub>2</sub>
<i>Thermosinus carboxydivorans</i>	60	6.8–7.0	1.2	H <sub>2</sub>
<i>Desulfotomaculum kuznetsovii</i>	60	7	nr	Acetate, H <sub>2</sub> S
<i>Desulfotomaculum thermobenzoicum</i> subsp. <i>thermosyntrophicum</i>	55	7	nr	Acetate, H <sub>2</sub> S
<i>Desulfotomaculum carboxydivorans</i>	55	7	1.7	H <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> S
<b>Thermophilic archaea</b>				
<i>Methanothermobacter thermoautotrophicus</i>	65	7.4	140	CH <sub>4</sub>
<i>Thermococcus</i> strain AM4	82	6.8	nr	H <sub>2</sub>
<i>Archaeoglobus fulgidus</i>	83	6.4	nr	Acetate, formate, H <sub>2</sub> S

### 2.3. Bahan Baku Biohidrokarbon

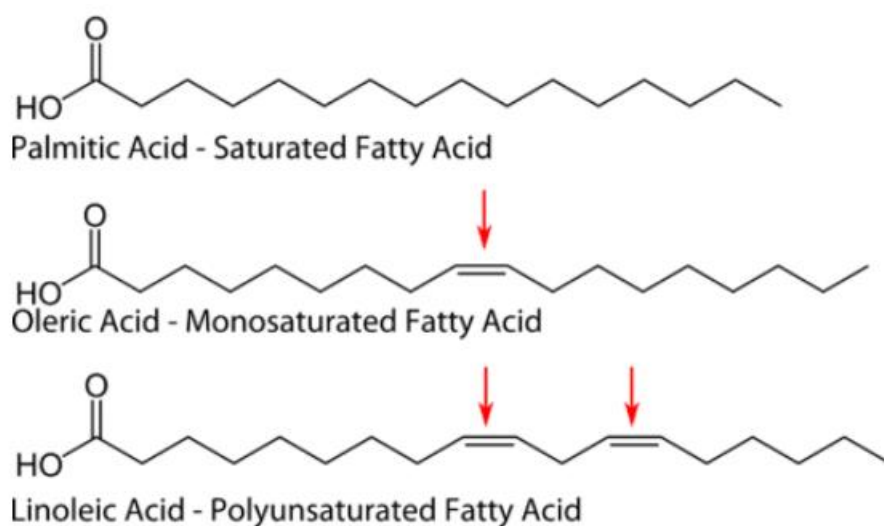
Metode-metode produksi bioavtur yang dijabarkan pada Bab 2.2 membutuhkan jenis umpan atau bahan baku yang berbeda. Berikut adalah macam-macam bahan baku yang dewasa ini dipakai untuk memproduksi bioavtur menurut Lang dan Farouk (2014).

1. Minyak nabati, lilin, dan minyak hewani
2. Bio-alkohol (alkohol dari biomassa) → etanol, metanol, dan butanol
3. Material lignoselulosa
4. Limbah perkotaan → menjadi *refuse derived fuel*

## 5. Flue gas industri

Pada percobaan yang akan kami lakukan, kami menggunakan metode *Hydro-processed Renewable Jet* (HRJ) untuk memproduksi bioavtur. Bahan baku dari metode ini menggunakan asam lemak/trigliserida dari minyak nabati atau minyak hewani (H. Chen dkk., 2015; Dwiratna dan Soebagjo, 2015; Furimsky, 2000).

Asam lemak merupakan senyawa asam karboksilat dengan rantai karbon alifatik panjang dan merupakan turunan dari trigliserida/lemak (Hart dkk., 2010). Asam lemak dapat diklasifikasi sesuai dengan ada atau tidak adanya ikatan rangkap antar karbon pada rantai panjang alifatiknya. Asam lemak yang tidak memiliki ikatan rangkap pada rantai alifatiknya disebut *saturated fatty acid* (SFA). Untuk asam lemak yang memiliki ikatan rangkap pada rantai alifatiknya disebut *monounsaturated fatty acid* (MUFA – bila hanya ada satu ikatan rangkap) dan *polyunsaturated fatty acid* (PUFA – bila ada dua atau lebih ikatan rangkap). Konfigurasi ikatan rangkap pada rantai alifatik dapat berupa konfigurasi *cis* atau *trans* (Orsavova dkk., 2015). Berikut adalah contoh struktur molekul asam lemak.



**Gambar 2.11.** Struktur asam lemak jenuh dan tidak jenuh

Berikut adalah data molekul-molekul asam lemak yang umum didapat pada minyak nabati disajikan di dalam Tabel 2.3.

**Tabel 2.2.** Data asam lemak minyak nabati (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>; Gunstone, n.d.)

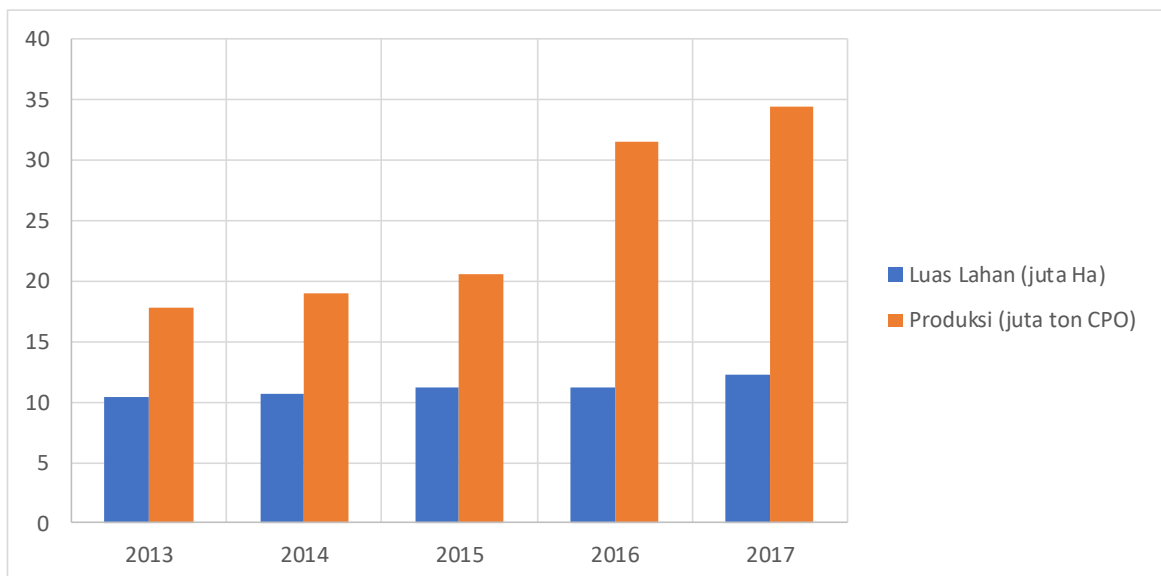
Nama Molekul	Struktur Molekul	Angka Lipid
Asam kaprilat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{COOH}$	C8:0
Asam kaprat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{COOH}$	C10:0
Asam laurat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$	C12:0
Asam mistirat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{12}\text{COOH}$	C14:0
Asam palmitat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOH}$	C16:0
Asam palmitoleat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	C16:1
Asam stearat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{COOH}$	C18:0
Asam oleat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	C18:1
Asam linoleat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	C18:2
Asam linelenat	$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$	C18:3
Asam arakidat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{18}\text{COOH}$	C20:0
Asam gondoat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$	C20:1
Asam eikosadienoat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}=\text{CHCH}_2\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$	C20:2
Asam behenat	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{20}\text{COOH}$	C22:0
Lignoceric acid	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{22}\text{COOH}$	C24:0

Untuk mengefisiensikan proses produksi, diperlukan bahan baku yang cocok. Telah dijelaskan pada Bab 2.2.2 bahwa *catalytic cracking* hidrokarbon dengan hidrogen mengincar hidrokarbon dengan panjang rantai di atas 15 (C15+) (M. Wang dkk., 2018). Maka dari itu, dipilihlah *palm kernel oil* (PKO) sebagai bahan baku produksi bioavtur. Berikut adalah komposisi asam lemak yang terdapat pada PKO disajikan di dalam Tabel 2.4.

**Tabel 2.3.** Data komposisi asam lemak pada *palm kernel oil* (Kostik dkk., 2013)

Asam Lemak	% w/w $\pm$ SD
C8:0	4 $\pm$ 1
C10:0	5 $\pm$ 2
C12:0	41 $\pm$ 5
C14:0	16 $\pm$ 2
C16:0	8 $\pm$ 1,0
C18:0	2 $\pm$ 0,8
C18:1	22,5 $\pm$ 2,2
C18:2	1,25 $\pm$ 0,55

*Crude palm oil* dipilih sebagai bahan baku produksi biohidrokarbon dikarenakan ketersediaan yang berlimpah di Indonesia. Hal itu didukung dengan fakta bahwa 85% ketersediaan minyak kelapa sawit dunia berasal dari Indonesia dan Malaysia (data tahun 2017) (Iskandar dkk., 2018). Berikut adalah data perkembangan produksi minyak kelapa sawit di Indonesia yang disajikan dengan Gambar 2.12



**Gambar 2.11.**Data luas lahan dan produksi minyak kelapa sawit (CPO) di Indonesia tahun 2013-2017 (Badan Pusat Statistik Indonesia, 2017)

Gambar 2.12 menunjukkan bahwa dari tahun 2013 sampai tahun 2017, Indonesia mengalami perkembangan produksi minyak sawit (disajikan dengan data CPO yang diproduksi), dan diprediksi akan terus meningkat pada tahun-tahun berikutnya (Badan Pusat Statistik Indonesia, 2017).

## **2.4. Katalis**

Dalam konversi minyak nabati menjadi *biofuel* diperlukan katalis untuk memastikan reaksi berjalan sesuai target yang diinginkan. Secara umum, dibutuhkan katalis untuk melakukan *hydrodeoxygenation* dan *hydrocracking/hydroisomerization*.

### **2.4.1. Katalis Hidrodeoksigenasi**

Katalis yang umumnya digunakan pada proses HDO adalah reaksi logam heterogen dan berupa katalis padat bersifat asam. Jenis katalis yang digunakan pada umumnya adalah katalis logam mulia berpenyangga dan logam tersulfidasi atau tereduksi. CoMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tersulfidasi dan NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dipakai secara luas untuk proses HDO, dilaporkan bahwa sulfidasi menghasilkan sisi aktif pada katalis (Ferrari dkk., 2001; Senol dkk., 2005). HDO dengan katalis tersulfidasi umumnya kurang diminati karena pembentukan produk yang terkontaminasi sulfur dan reduksi katalis pada reaktan dengan sulfur rendah. Selain itu, katalis logam mulia tidak diminati karena *cost* yang tinggi (Novopashina dkk., 2010; Şenol dkk., 2007). Karena itu pengembangan katalis logam transisi *sulfided* atau *non-sulfided* lebih cocok diperhatikan. Terdapat beberapa indikator yang menentukan kualitas katalis, yang pertama adalah aktivitas katalis. Aktivitas katalis bergantung pada tipe umpan yang digunakan, kondisi reaksi, dan sifat katalis itu sendiri. Sisi asam dan basa pada penyangga katalis memainkan peran penting dalam menentukan selektivitas produk (Zuo dkk., 2012). Selektivitas produk dan tingkat HDO bergantung pada temperatur reaksi, rasio tekanan H<sub>2</sub> terhadap volume minyak dan *liquid hourly space velocity*



(LHSV). Kehadiran air mengurangi stabilitas, aktivitas dan selektivitas katalis, yang sebagai gantinya, mengurangi derajat deoksigenasi (Furimsky dan Massoth, 1999).

Terdapat dua katalis HDO yang sudah digunakan secara komersil dan juga performanya sudah teruji dengan baik dan hasilnya cukup memuaskan, yaitu  $\text{CoMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  dan  $\text{NiMo}/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$  yang sudah tersulfidasi (Deliy dkk., 2011). Reaksi HDO bersifat eksotermik sehingga panas yang dilepaskan cukup banyak, hal ini juga dapat memicu deaktivasi katalis terutama di temperatur reaksi diatas  $80^\circ\text{C}$  dan terlebih lagi diatas  $200^\circ\text{C}$  (X. Li dkk., 2018). Perkembangan katalis hidrodoksigenasi minyak nabati saat ini (state of the art) ditampilkan pada Tabel 2.4 berikut.



**Tabel 2.4.** *State-of-the-art* katalis hidrodeoksigenasi dan isomerisasi minyak nabati

Umpan	Katalis	Kondisi Operasi	Yield	Sumber
Asam stearat	WO <sub>3</sub> /Pt/TiO <sub>2</sub>	Reaktor <i>batch</i> dengan temperatur sebesar 300 <sup>0</sup> C dan tekanan 15 bar selama 3 jam	Selektivitas HDO = 86% (via reaksi DCO <sub>x</sub> ), dengan selektivitas ke hidrokarbon C17 sebesar 64,1%	Choi dkk., 2018
Minyak kedelai	NiMo/ZSM5 Karbida dan NiMo/ZSM5 Nitrida	Reaktor tubular dengan tekanan 650 psi dan variasi temperatur operasi: 360, 400, dan 450 <sup>0</sup> C selama 1-7 hari. Jumlah katalis yang digunakan sebesar 2 g. <i>Space time velocity</i> = 1,5 h <sup>-1</sup> .	Reaksi DCO dan DCO <sub>2</sub> memiliki selektivitas yang lebih baik bila menggunakan katalis nitrida, tetapi reaksi metanasi juga terjadi lebih signifikan. Konversi minyak kedelai pada kedua katalis mencapai 100%. Semakin besar fraksi Ni pada katalis, maka semakin banyak produk gas yang dihasilkan akibat reaksi hidrogenasi terjadi semakin signifikan. Akibatnya, fraksi nafta akan semakin sedikit	Wang dkk., 2012
Minyak karmelina	ZSM-5-Zn-10, ZSM-5-Zn-20, dan ZSM-5-Zn-30	Reaktor <i>fixed bed</i> pada tekanan 13 bar dan temperatur 500 <sup>0</sup> C selama 12 jam. <i>Space time velocity</i> = 0,6 h <sup>-1</sup> . Jumlah katalis yang digunakan 25 g.	Perolehan <i>bio-fuel</i> hidrokarbon dari minyak karmelina terbesar didapat bila menggunakan katalis ZSM-5-Zn-20. Secara keseluruhan, perolehan <i>liquid oil</i> dari <i>catalytic cracking</i> dengan katalis ZSM-5-Zn-20 adalah 73,30%.	Zhao dkk., 2015
Minyak sawit dan minyak inti kelapa sawit	<i>calcined</i> Ni-MoS <sub>2</sub> /γ-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Dilakukan pada reaktor <i>trickle-bed</i> pada rentang temperatur 270-330 <sup>0</sup> C dan tekanan 30-50 bar. Rentang <i>space time velocity</i> digunakan = 1-5 h <sup>-1</sup> . Reaksi dijalankan selama 9 jam.	Konversi minyak inti kelapa sawit mencapai 100%, dengan perolehan fraksi C10-C12 yang didapat sebesar 58% berat dan fraksi n-parafin didapat sebesar 80-85%. Selektivitas reaksi HDO mencapai 60% dan selektivitas reaksi DCO+DCO <sub>2</sub> mencapai 20%. Syarat untuk mencapai hasil tersebut: temperatur reaksi 330 <sup>0</sup> C, tekanan 50 bar, LHSV sebesar 1 h <sup>-1</sup> , dan perbandingan H <sub>2</sub> /minyak sebesar 1000 Ncm <sup>3</sup> /cm <sup>3</sup> . Belum ada reaksi isomerisasi.	Itthibenchapong dkk., 2017

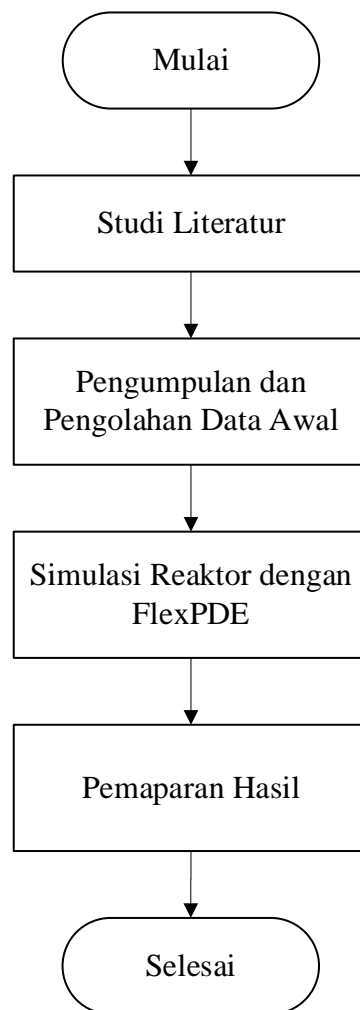
Minyak almond	Pt/ZSM-22 (Katalis Grubbs)	Reaktor <i>fixed bed</i> tekanan tinggi	Konversi <i>oleic acid methyl ester</i> (OAME) mencapai 94,854% dengan selektivitas 100% terhadap $\alpha$ -olefin dan yield sebesar 94,85%. Hal ini diperoleh dengan menggunakan Katalis Grubbs generasi pertama.	Wang dkk., 2018
Minyak jatropha (25% wt) di dalam sikloheksana	NiMo/SAPO-11 dan NiMo/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Reaktor <i>fixed bed</i> dengan temperatur 380 <sup>0</sup> C dan tekanan di bawah 3 bar. Jumlah katalis yang digunakan 10 g.	Penggunaan katalis NiMo/SAPO-11 mengkonversi trigliserida sebesar 94,4% dan menunjukkan selektivitas tinggi terhadap pembentukan hidrokarbon pada reaksi DCO <sub>2</sub> . Selain itu, katalis NiMo/SAPO-11 memiliki selektivitas tinggi terhadap pembentukan hidrokarbon iso-parafin Sedangkan penggunaan NiMo/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> dapat mengkonversi penuh trigliserida dan menunjukkan selektivitas yang tinggi terhadap proses HDO dengan selektivitas terhadap reaksi isomerisasi yang rendah.	Chen dkk., 2015
Minyak bunga matahari (kandungan asam oleat >90%)	NiMoW/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Reaktor <i>tubular down-flow</i> , dengan temperatur reaksi 340-360 <sup>0</sup> C dan tekanan 20-40 bar. Besar LHSV yang dipakai sebesar 1,0-1,5 h <sup>-1</sup> . Rasio volume H <sub>2</sub> /minyak = 600Nm <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> .	Yield produk parafin >70% dengan produk isoparafin sebanyak 23-29%. Mayoritas produk berupa C17 dan C18 dalam bentuk parafin.	Kovács dkk., 2010

## **BAB III**

### **METODOLOGI PENELITIAN**

#### **3.1. Tahapan Penelitian**

Penelitian ini secara garis besar dibagi menjadi empat, yaitu studi pustaka, pengumpulan dan pengelompokan data, pengolahan data dan pemodelan, serta simulasi. Pemodelan katalis produksi bioavtur diawali dengan studi literatur mengenai karakteristik proses produksi bioavtur. Selanjutnya dilakukan pengumpulan data-data penelitian dan percobaan produksi bioavtur yang terbagi menjadi dua yaitu proses hidrideoksigenasi dan proses hidroisomerisasi. Karena tidak adanya data kinetika reaksi proses hidroisomerisasi minyak nabati, maka penelitian ini berfokus pada simulasi proses hidrideoksigenasi untuk menentukan volume optimum reaktor, perolehan reaksi, dan juga mempertimbangkan difusi massa ke arah aksial dan radial dengan bantuan *software* MATLAB. Sebelum simulasi dilakukan, dibutuhkan beberapa data pendukung yang perlu ditentukan sebelum simulasi. Data-data tersebut mencakup kondisi reaksi, persamaan reaksi, parameter kinetika reaksi, syarat awal reaksi, persamaan diferensial reaksi, dan syarat batas reaksi. Setelah seluruh data yang dibutuhkan telah dilengkapi maka simulasi dilakukan dan hasil simulasi dipaparkan dalam bentuk grafik dan tabel untuk masing-masing parameter hasil reaksi. Diagram alir penelitian ditunjukkan pada Gambar 3.1 berikut.



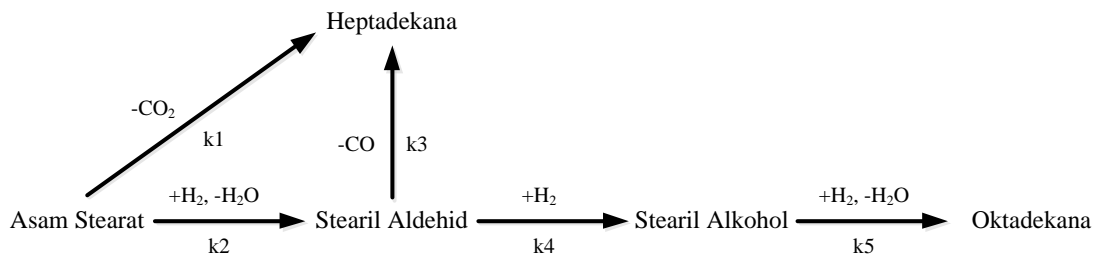
**Gambar 3.1.** Diagram alir prosedur kerja simulasi proses hidrodoksigenasi

### 3.2. Dasar Pemodelan

Proses hidrodoksigenasi asam stearat merupakan proses kimia kompleks yang melibatkan 5 reaksi berurutan. Senyawa yang terlibat meliputi asam stearat, hidrogen, karbon monoksida, karbon dioksida, oktadekana, heptadekana, *stearyl aldehyde*, *stearyl alcohol*, dan air. Studi simulasi ini akan dilakukan berdasarkan data kinetika reaksi HDO

asam stearate menjadi hidrokarbon fraksi panjang dengan katalis Ni-H-Y-80 (5%-wt Ni) dengan kondisi reaksi pada temperatur 375°C dan tekanan 30 bar, LHSV senilai 7/h dan juga rasio  $H_2/Feed = 100\text{-v/v}$ . Penyelesaian persamaan diferensial laju reaksi dilakukan dengan perangkat lunak FlexPDE yang akan menghasilkan grafik konsentrasi produk terhadap panjang reaktor. Reaktor pada simulasi ditetapkan pada diameter 25 cm dan volumenya dihitung dengan perangkat lunak FlexPDE agar menghasilkan konversi maksimum.

Untuk menyederhanakan pemodelan, proses HDO dilakukan dengan meninjau 5 reaksi utama yang terjadi (Hachemi dan Murzin, 2018). 5 reaksi yang ditinjau ditunjukkan pada Gambar 3.2 berikut.



**Gambar 3.2.** Reaksi utama pada proses HDO Asam Stearat

Keterangan:

SA: Asam Stearat

Pemodelan dilakukan dengan mendekati proses reaksi HDO Asam Stearat dengan model kinetika yang ditunjukkan pada Persamaan 3.1, 3.2, 3.3, 3.4, dan 3.5 berikut.

$$\frac{dC_{SA}}{dt} = \frac{-(k1 + k2) \cdot C_{SA}}{1 + K_A C_{SA}} = -(r1 + r2) \quad (3.1)$$

$$\frac{dC_{SAD}}{dt} = \frac{(k2 \cdot C_{SA}) - [(k3 + k4) \cdot C_{SAD}]}{1 + K_A C_{SA}} = r2 - r3 - r4 \quad (3.2)$$

$$\frac{dC_{HD}}{dt} = \frac{k1 \cdot C_{SA} + k3 \cdot C_{SAD}}{1 + K_A C_{SA}} = r1 + r3 \quad (3.3)$$

$$\frac{dC_{SAC}}{dt} = \frac{k4 \cdot C_{SAD} - k5 \cdot C_{SAC}}{1 + K_A C_{SA}} = r4 - r5 \quad (3.4)$$

$$\frac{dC_{OD}}{dt} = \frac{k5 \cdot C_{SAC}}{1 + K_A C_{SA}} = r5 \quad (3.5)$$

Keterangan:

SA : Asam Stearat

SAD : *Stearyl-Aldehyde*

SAC : *Stearyl-Alcohol*

OD : Oktadekana

HD : Heptadekana

### 3.3. Prosedur Kerja

Simulasi ini terdiri dari tahapan studi literatur, pengambilan dan pengelompokan data serta pengolahan data awal, simulasi reaktor dengan perangkat lunak FlexPDE, dan diakhiri dengan pemaparan hasil.

#### 3.3.1. Studi Literatur Awal

Studi literatur digunakan untuk melengkapi data yang digunakan sebagai dasar simulasi reaktor. Simulasi proses HDO Asam Stearat dilakukan dengan hasil studi literatur yang memberikan data kinetika reaksi utama yang terjadi pada proses tersebut. Untuk melakukan simulasi selain membutuhkan data parameter kinetika, diperlukan juga data kondisi reaksi, rasio hidrogen terhadap umpan, porositas katalis, konduktivitas dan kapasitas panas setiap komponen, laju alir dan dimensi reaktor nyata skala pabrik, difusivitas setiap komponen, dan panas reaksi untuk masing-masing dari ke-5 reaksi yang terjadi.

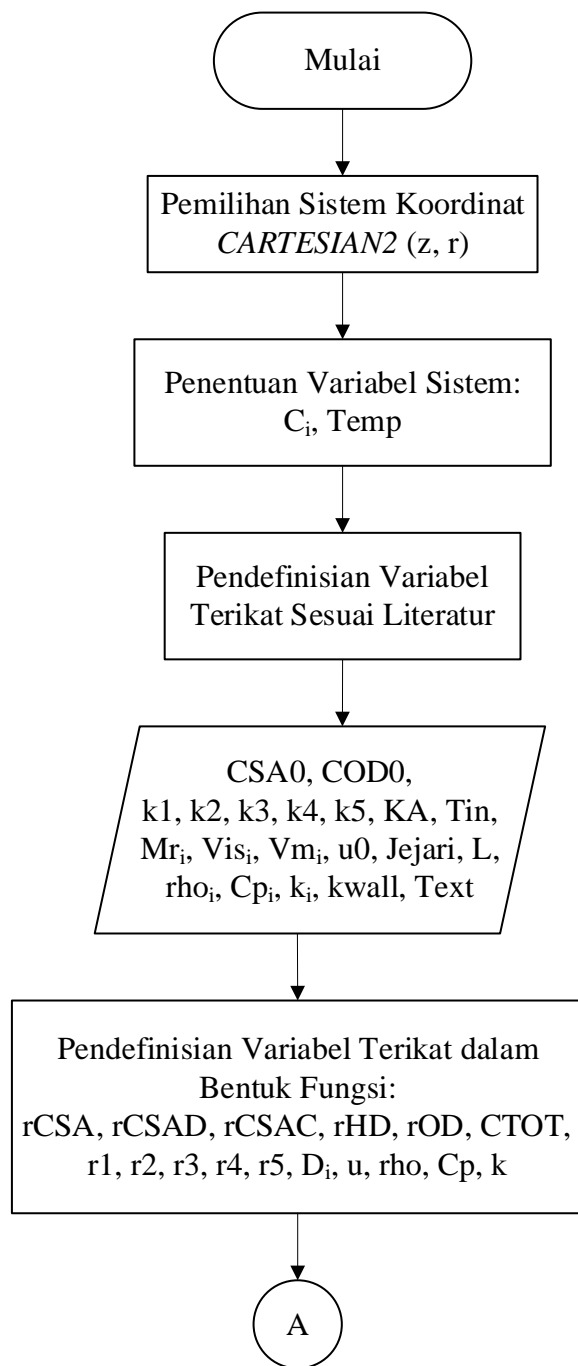


### 3.3.2. Pengambilan dan Pengolahan Data Awal

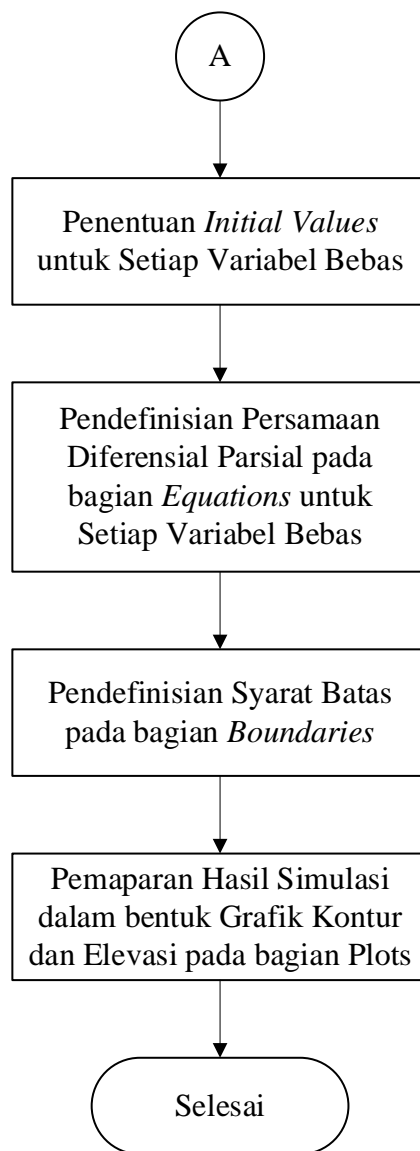
Data mengenai proses HDO Asam Stearat diambil dari penelitian-penelitian yang telah dilakukan sebelumnya. Data-data yang didapat dari artikel ilmiah karangan Hachemi dan Murzin (2018) di antaranya adalah karakteristik katalis beserta mekanisme dan parameter kinetika setiap reaksi pada kondisi temperatur 375°C dan tekanan 30 bar, kemudian data yang diperlukan untuk menentukan difusivitas komponen (Massa molekul, viskositas, volume molar) didapatkan dari *database* perangkat lunak Aspen Plus V10, selanjutnya data dimensi dan laju alir umpan reaktor didapatkan dari lembar spesifikasi alat reaktor *hydrotreating* dari RU IV Cilacap yang memberikan dimensi  $D = 2,16$  m dan  $L = 7,27$  m. Setelah semua data yang diperlukan sudah terkumpul, parameter kinetika disesuaikan dengan suatu koefisien agar kinerja katalis yang ditinjau menyerupai katalis yang sedang dikembangkan oleh Laboratorium Teknik Reaksi Kimia dan Katalisis, Institut Teknologi Bandung. Kumpulan data kemudian digunakan untuk melakukan simulasi reaktor HDO pada perangkat lunak FlexPDE.

### 3.3.3. Simulasi Reaktor

Simulasi reaktor proses HDO Asam Stearat dilakukan mengikuti langkah kerja yang ditunjukkan pada Gambar 3.3 di bawah ini. Penjelasan lebih lanjut mengenai algoritma pengerjaan simulasi ditunjukkan pada Tabel A.1 pada lampiran A yang juga menjelaskan baris kode yang dituliskan pada FlexPDE.



**Gambar 3.3.** Langkah kerja simulasi reaktor proses HDO Asam Stearat dengan FlexPDE



**Gambar 3.3.** Langkah kerja simulasi reaktor proses HDO Asam Stearat dengan FlexPDE (Lanjutan)

Keterangan:

- |   |   |
|---|---|
| -i : Subskrip untuk komponen SA, SAD, SAC, HD, dan OD | -u <sub>0</sub> : Kecepatan linier umpan      |
| -C <sub>i</sub> : Konsentrasi komponen i              | -Jejari : Jari-jari reaktor                   |
| -Mr <sub>i</sub> : Massa molekul komponen i           | -L : Panjang reaktor                          |
| -Vis <sub>i</sub> : Viskositas komponen i             | -rho <sub>i</sub> : Densitas komponen i       |
| -Vm <sub>i</sub> : Volume molar komponen i            | -Cp <sub>i</sub> : Kapasitas panas komponen i |
|   | -k <sub>i</sub> : Konduktivitas komponen i    |

- k<sub>wall</sub> : Konduktivitas dinding reaktor
- k<sub>1-k5</sub> : Konstanta reaksi 1-5
- r<sub>i</sub>: Ekspresi fungsi perubahan konsentrasi komponen i
- rho : Fungsi densitas total reaksi
- k : Fungsi konduktivitas total media reaksi
- Text : Temperatur fluida pendingin
- r<sub>1-5</sub> : Ekspresi model kinetika reaksi 1-5
- D<sub>i</sub> : Difusivitas komponen i
- u : Laju linier media reaksi
- C<sub>p</sub>: Fungsi kapasitas panas total reaksi

Seluruh satuan yang digunakan mengikuti sistem metrik (m, kg, s, Pa.s, dsb.) dengan satuan temperatur Kelvin, dan satuan molar dalam kmol.

### 3.3.4 Perhitungan Konversi dan Selektivitas

Perhitungan konversi reaksi hidroleoksisenasi dapat ditentukan dari perbandingan konsentrasi SA pada umpan dengan SA keluaran reaktor yang disajikan pada Persamaan 3.6 berikut.

$$X_{HDO} = \frac{C_{SA,umpan} - C_{SA,produk}}{C_{SA,umpan}} \times 100\% \quad (3.6)$$

Reaksi HDO menghasilkan senyawa alkana dengan rantai karbon genap (S. Liu dkk., 2015; Senol dkk., 2005). Reaksi ini selalu beriringan dengan reaksi dekarbonilasi dan dekarboksilasi (H. Chen dkk., 2015). Maka dari itu, Persamaan 3.2 menunjukkan bahwa selektivitas katalis terhadap reaksi HDO dilakukan dengan membandingkan konsentrasi senyawa alkana genap pada produk dengan total alkana yang terproduksi.

$$S_{HDO} = \frac{C_{alkana \text{ genap}}}{C_{SA,umpan} - C_{SA,produk}} \times 100\% \quad (3.7)$$

### **3.4. Variasi Percobaan**

Variasi yang akan dilakukan pada penelitian ini adalah konsentrasi Asam Stearat pada umpan campuran Asam Stearat dengan Oktadekana dan juga satu buah variasi dengan sistem adiabatik. Variasi yang akan diteliti adalah sebagai berikut:

1. Konsentrasi SA 5%-wt
2. Konsentrasi SA 10%-wt
3. Konsentrasi SA 15%-wt
4. Konsentrasi SA 20%-wt
5. Sistem Adiabatik dengan Konsentrasi SA 20%-wt

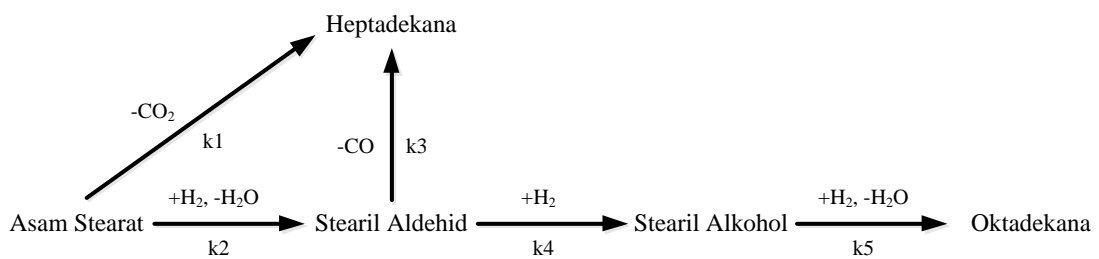
## BAB IV

### HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil dari rangkaian simulasi reaksi HDO yang dilakukan akan dibahas pada bab ini. Simulasi dilakukan dengan bantuan perangkat lunak FlexPDE 6.5 untuk menyelesaikan rangkaian model kinetika Langmuir-Hinshelwood reaksi HDO asam stearat dengan katalis Ni (5% wt) / H-Y-80, beserta faktor difusi massa dan energi selama keberjalanan reaksi.

#### 4.1. Simulasi Reaksi HDO pada Reaktor *Fixed Bed* Skala Industri

Rangkaian reaksi HDO asam stearat untuk menghasilkan hidrokarbon mengikuti model berikut ini.



**Gambar 4.1.** Diagram alir reaksi HDO pada asam stearat (Hachemi dan Murzin, 2018)

Reaksi HDO, sebagai reaksi utama, adalah jalur reaksi yang menghasilkan produk oktadekana. Sedangkan reaksi sekunder dari reaksi HDO, yaitu reaksi karboksilasi, adalah jalur reaksi yang menghasilkan heptadekana. Berdasarkan diagram alir rangkaian reaksi HDO pada Gambar 4.1, dapat diturunkan model kinetika Langmuir-Hinshelwood untuk setiap reaksi sebagai berikut (Hachemi dan Murzin, 2018).

$$\frac{dC_{SA}}{dt} = \frac{-(k_1 + k_2) \cdot C_{SA}}{1 + K_A C_{SA}} = -(r_1 + r_2)$$

$$\frac{dC_{SAD}}{dt} = \frac{(k_2 \cdot C_{SA}) - [(k_3 + k_4) \cdot C_{SAD}]}{1 + K_A C_{SA}} = r_2 - r_3 - r_4$$

$$\frac{dC_{HD}}{dt} = \frac{k1.C_{SA} + k3.C_{SAD}}{1 + K_A C_{SA}} = r1 + r3$$

$$\frac{dC_{SAC}}{dt} = \frac{k4.C_{SAD} - k5.C_{SAC}}{1 + K_A C_{SA}} = r4 - r5$$

$$\frac{dC_{OD}}{dt} = \frac{k5.C_{SAC}}{1 + K_A C_{SA}} = r5$$

Dengan:

- $C_{SA}$  = konsentrasi asam stearat (mol/L)
- $C_{SAD}$  = konsentrasi stearyl aldehida (mol/L)
- $C_{SAC}$  = konsentrasi stearyl alkohol (mol/L)
- $C_{HD}$  = konsentrasi heptadekana (mol/L)
- $C_{OD}$  = konsentrasi oktadekana (mol/L)
- $k1, k2, k3, k4, k5$  = konstanta kinetika laju reaksi menurut Gambar 4.1 ( $s^{-1}$ )
- $K_A$  = konstanta adsorpsi asam stearat pada katalis (L/mol)

Besaran konstanta laju reaksi yang digunakan di dalam reaksi adalah sebagai berikut.

$k1 = 1,667.10^{-4}$	$k4 = 0,0195$
$k2 = 0,022$	$k5 = 0,0145$
$k3 = 8,333.10^{-4}$	$K_A = 0,013$

Hasil dari rangkaian simulasi reaksi HDO yang dilakukan akan dibahas pada bab ini. Simulasi dilakukan dengan basis ukuran reaktor yang disebutkan pada Bab 3. Rangkaian persamaan kinetika yang telah disebutkan disusun beserta dengan neraca massa difusi komponen reaksi dengan katalis. Difusi massa beserta reaksi dimodelkan secara 2 dimensi di dalam reaktor dengan persamaan berikut (Levenspiel, 1999).

$$u \frac{\partial C}{\partial z} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) + rA(\varepsilon)$$

Dengan:

- $D$  = konstanta difusi komponen di dalam fasa bulk ( $m^2/s$ )
- $rA$  = kecepatan reaksi komponen (mol/L.s)
- $\varepsilon$  = fraksi kosong di sepanjang reaktor = 0,5

Syarat batas neraca difusi massa:

- Saat  $z = 0$ ,  $C = C_{\text{masuk}}$ ,
- Saat  $z = L$  (ujung reaktor),  $dC/dz = 0$ ,
- Saat  $r = R$  dan  $r = -R$  (pada dinding reaktor),  $dC/dr = 0$ .

Dengan menimbang adanya penambahan volume media reaksi selama keberlangsungan reaksi, nilai konsentrasi komponen di dalam reaktor dapat dinyatakan sebagai berikut (Levenspiel, 1999).

$$C_i = C_{i,o} \left( \frac{1 - X_i}{1 + \varepsilon_i X_i} \right)$$

Untuk:

$$\varepsilon_i = \frac{\Delta \vartheta}{-\vartheta_i} \times \frac{C_{i,o}}{C_i}$$

Dengan:

- $C_o$  = konsentrasi mula-mula komponen
- $\varepsilon_i$  = faktor ekspansi komponen reaksi
- $\Delta \vartheta$  = selisih koefisien reaksi produk dan reaktan
- $\vartheta_i$  = koefisien reaksi komponen (bila komponen merupakan reaktan di dalam persamaan reaksi, bernilai negatif)

Dengan memerhatikan ketiga persamaan tersebut dan anggapan bahwa perpindahan massa konveksi ke arah aksial jauh lebih besar dibandingkan dengan konduksi ke arah aksial, maka neraca massa reaksi dapat diubah ke dalam bentuk berikut.

$$u \cdot C_{i,o} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1 - X_i}{1 + \varepsilon_i X_i} \right] = D \cdot C_{i,o} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ \frac{1 - X_i}{1 + \varepsilon_i X_i} \right] + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left[ \frac{1 - X_i}{1 + \varepsilon_i X_i} \right] \right) + rA(\varepsilon)$$

Studi kasus simulasi yang dibahas di dalam dokumen ini memiliki profil tekanan yang sama di sepanjang reaktor, serta nilai  $\varepsilon_i$  mendekati 0 dikarenakan konsentrasi asam stearat yang relatif sangat kecil dibandingkan konsentrasi total media reaksi yang mengalir di



dalam reaktor. Atas pertimbangan tersebut, neraca massa reaksi dapat diturunkan menjadi:

$$u \frac{\partial C}{\partial z} = D \left( \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) + rA(\varepsilon)$$

Kecepatan linear komponen, akibat adanya perubahan volume media reaksi, juga berubah seiring dengan keberjalanan reaksi. Maka dari itu, persamaan kecepatan linear komponen reaksi di dalam reaktor adalah sebagai berikut.

$$u = u_o \cdot \left[ 1 - \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \cdot \beta$$

Di mana,

$$\beta = \frac{T}{T_o} \times \frac{P_o}{P}$$

Dengan:

- $u_o$  = kecepatan linear komponen mula-mula
- $r$  = titik tinjauan secara radial
- $\beta$  = faktor keadaan reaksi
- $P, P_o$  = tekanan akhir reaksi, tekanan awal reaksi
- $T, T_o$  = temperatur akhir reaksi, temperatur awal reaksi

Dikarenakan profil tekanan di sepanjang reaktor sama, maka:

$$\beta = \frac{T}{T_o}$$

Perhitungan difusi massa cairan dalam fasa bulk, yang merupakan salah satu kostanta dalam perhitungan konsentrasi komponen, mengikuti korelasi Reidy dan Doraiswamy (1967), dengan persamaan berikut.

$$D = 1 \times 10^{-11} \cdot \left( \frac{T_{reaksi} \sqrt{Mr}}{\mu V_A^{\frac{1}{3}} V_B^{\frac{1}{3}}} \right)$$

Dengan:

- $T_{reaksi}$  = temperatur fluida saat reaksi
- $Mr$  = massa molar fasa terlarut

- $\mu$  = viskositas fluida terlarut
- $V_A, V_B$  = volume molar fasa terlarut dan fasa pelarut pada titik didih normal
- $D$  = difusivitas fluida dalam fasa bulk

Pada akhir simulasi reaksi, konversi dan selektivitas produk hasil reaksi HDO asam stearat dapat dihitung dengan persamaan-persamaan berikut.

$$X_{SA} = \frac{C_{SA,in} - C_{SA,out}}{C_{SA,in}} \times 100\%$$

$$S_{HDO} = \frac{(C_{SA,in} - C_{SA,out}) - C_{HD,out}}{C_{SA,in} - C_{SA,out}} \times 100\%$$

Dengan:

- $X_{SA}$  = konversi asam stearat
- $S_{HDO}$  = selektivitas reaksi HDO dalam reaktor
- $C_{SA,in}$  = konsentrasi masukan asam stearat
- $C_{SA,out}$  = konsentrasi keluaran asam stearat
- $C_{HD,out}$  = konsentrasi keluaran produk heptadekana

Neraca energi reaksi HDO di dalam reaktor dipakai untuk menentukan persebaran temperatur di dalam reaktor. Berikut adalah neraca energi di dalam reaktor simulasi menurut Levenspiel (1999).

$$\rho \cdot Cp \cdot u \frac{\partial T}{\partial z} = k \left( \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \Sigma [\Delta H \cdot |rA|(\epsilon)]$$

Dengan:

- $\rho$  = kerapatan molar campuran rerata
- $C_p$  = kapasitas panas campuran
- $k$  = konduktivitas campuran
- $\Delta H$  = entalpi reaksi

Syarat batas neraca energi:

- Saat  $z = 0$ ,  $T = T_{\text{masukan}}$ ,

- Saat  $z = L$ ,  $dT/dz = 0$
- Saat  $z = R$  dan  $z = -R$ ,  $dT/dr = \frac{k}{k_{dinding}} \times (T - T_{lingkungan})$

Simulasi dilakukan dengan basis sebagai berikut.

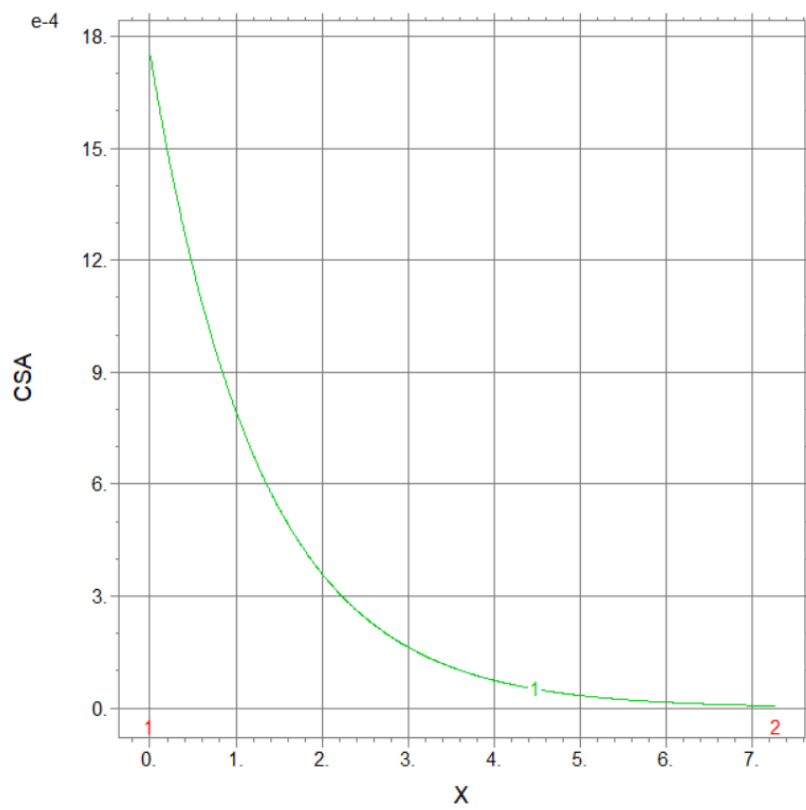
1. Diameter dan tinggi reaktor sebesar 2,16 m dan 7,27 m (Reaktor *hydrotreating* Kilang Minyak PERTAMINA RU IV Cilacap),
2. Kondisi operasi reaksi adalah 375<sup>0</sup>C dengan tekanan 30 bar (Hachemi dan Murzin, 2018),
3. Variasi komposisi masukan reaktor berupa 5, 10, 15, 20% massa asam stearat di dalam oktadekana, dengan laju alir linear fluida sebesar 0,014 m/s,
4. Adanya peninjauan jenis reaktor: reaktor adiabatik dan reaktor non-adiabatik (berpendingin),
5. Adanya media pendingin yang mengalir di luar dinding reaktor dengan temperatur 27<sup>0</sup>C atau 300 K.

#### **4.2. Hasil Simulasi untuk Variasi Komposisi Asam Stearat di dalam Oktadekana**

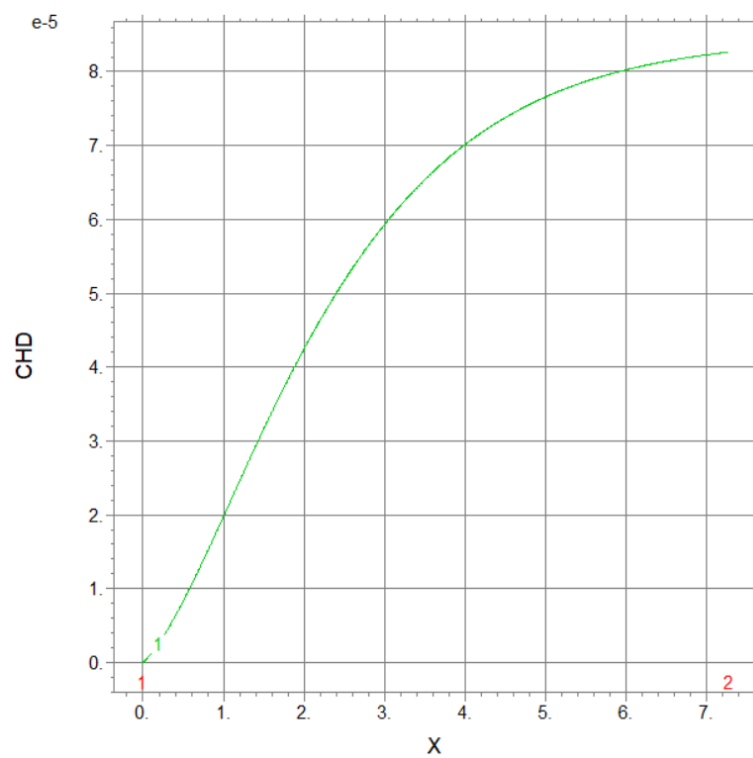
Hasil simulasi dengan FlexPDE untuk berbagai komposisi asam stearat di dalam umpan dinyatakan dalam grafik konsentrasi asam stearat, kurva oktadekana dan heptadekana, serta model persebaran temperatur di dalam reaktor.

##### **4.2.1 5% wt Asam Stearat di dalam Umpan**

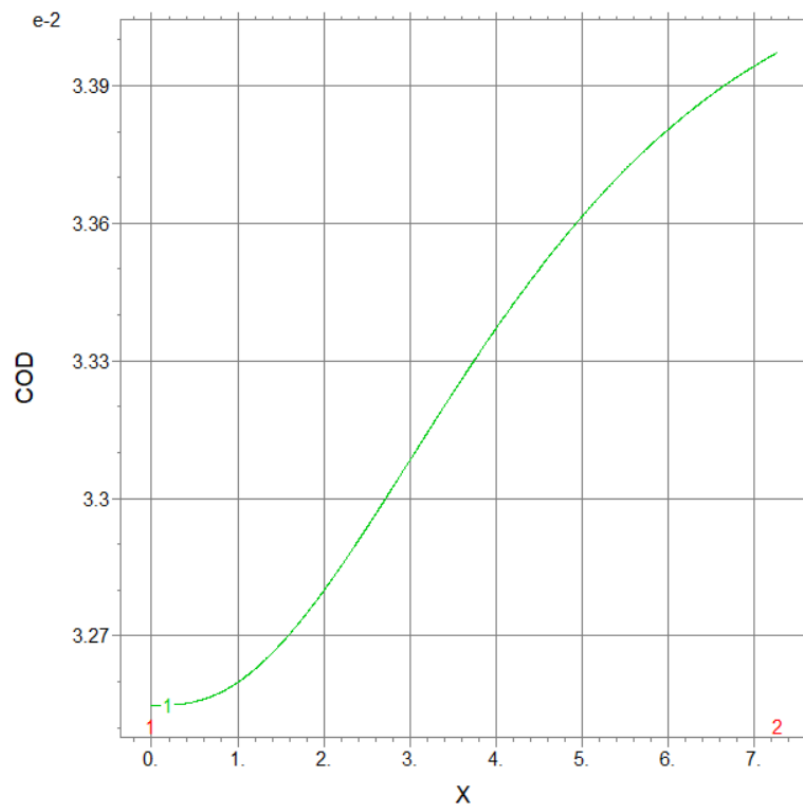
Berikut adalah hasil simulasi variasi pertama, 5% asam stearat di dalam umpan.



**Gambar 4.2.** Kurva konsentrasi asam stearat varian 1 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-4}$ )

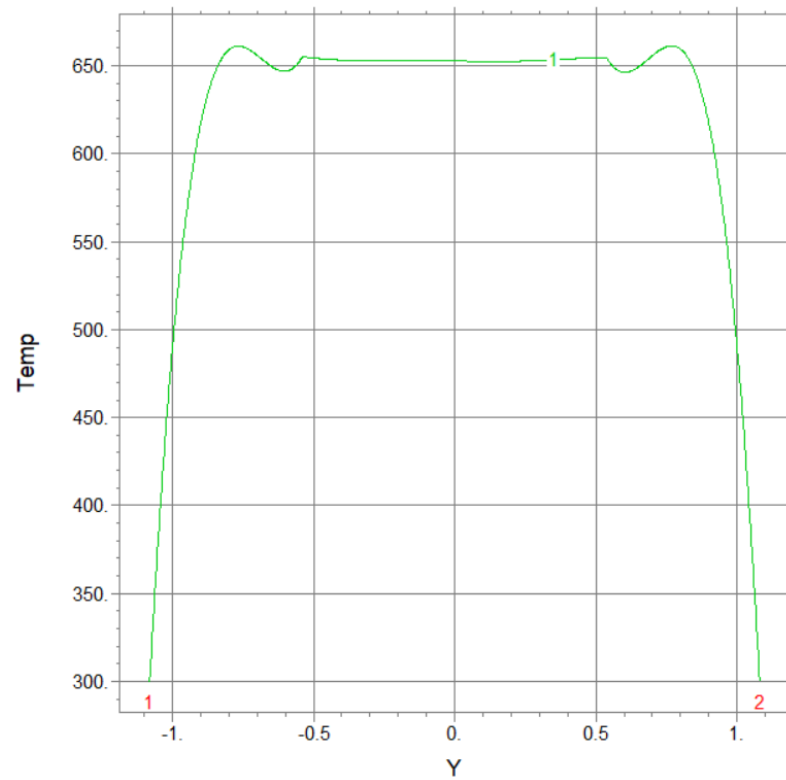


**Gambar 4.3.** Kurva konsentrasi heptadekana varian 1 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-5}$ )

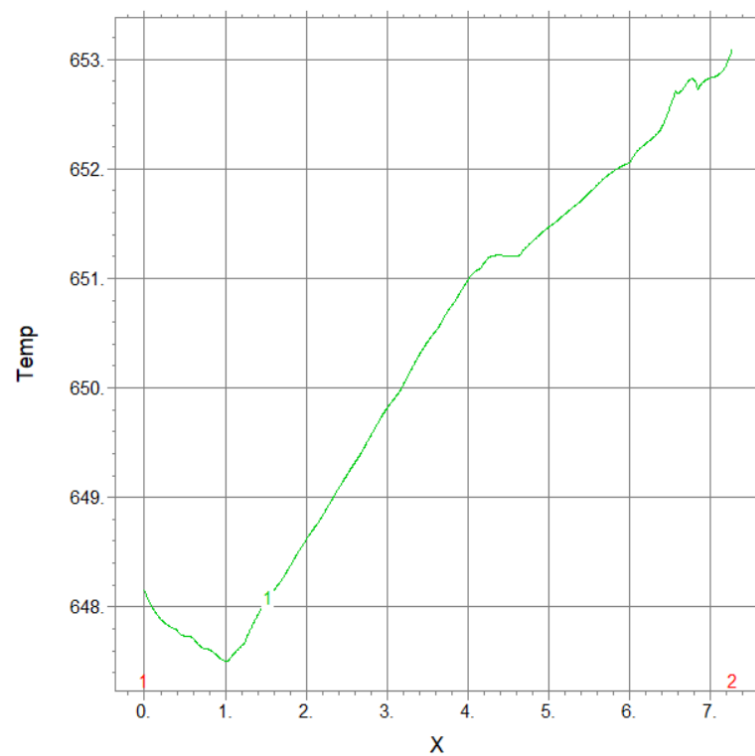


**Gambar 4.4.** Kurva konsentrasi oktadekana varian 1 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-2}$ )

Dapat dilihat dari Gambar 4.2, asam stearat di dalam umpan berhasil terkonversi sebesar 99,89%, atau hampir sempurna, di akhir reaksi atau pada akhir keberjalanan senyawa di dalam reaktor. Selain itu, selektivitas reaksi dapat dihitung dengan mengikuti persamaan selektivitas HDO. Maka, didapatkan selektivitas konversi asam stearat menuju reaksi HDO sebesar 95,28%. Persebaran temperatur di dalam reaktor disajikan dalam Gambar 4.5 dan Gambar 4.6 berikut.



**Gambar 4.5.** Kurva temperatur keluaran variasi pertama

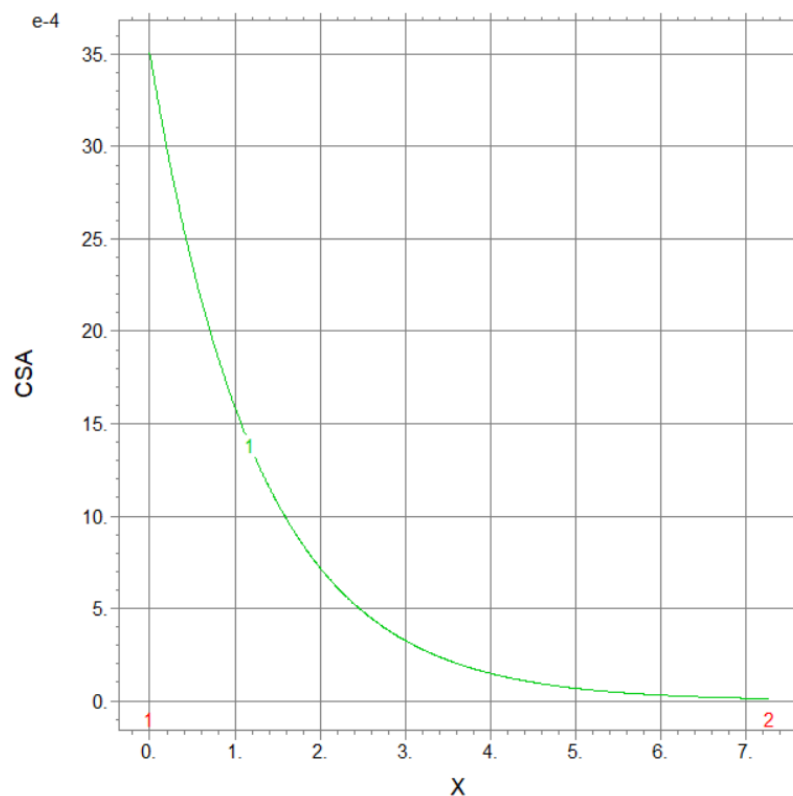


**Gambar 4.6.** Kurva temperatur variasi pertama di sepanjang reaktor

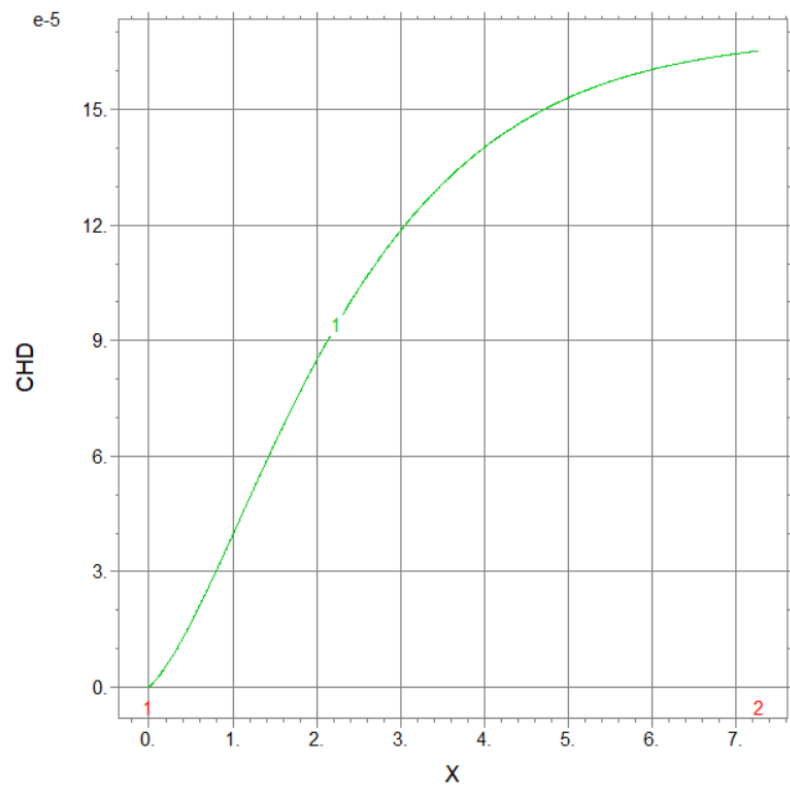
Dapat dilihat dari Gambar 4.5 dan Gambar 4.6, terjadi kenaikan temperatur di sepanjang terjadinya reaksi. Hal itu sesuai dengan fakta bahwa reaksi HDO merupakan reaksi yang eksotermis. Namun, kenaikan temperatur yang terjadi tidak signifikan dikarenakan konsentrasi asam stearat pada umpan yang cenderung rendah sehingga banyak panas reaksi yang dihasilkan diserap oleh media reaksi (oktadekana dari umpan dan gas-gas hasil reaksi) dan media pendingin yang mengalir di luar dinding reaktor. Temperatur keluaran reaktor yang dihasilkan sebesar 653 K.

#### 4.2.2 10% wt Asam Stearat di dalam Umpan

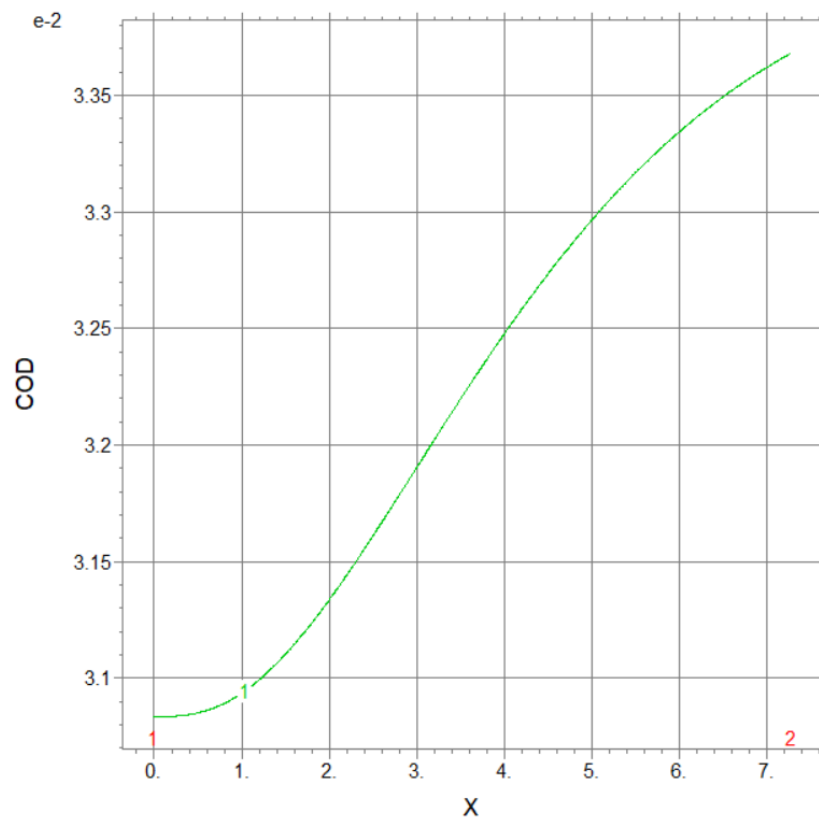
Berikut adalah hasil simulasi variasi kedua, 10% asam stearat di dalam umpan.



**Gambar 4.7.** Kurva konsentrasi asam stearat varian 2 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-4}$ )



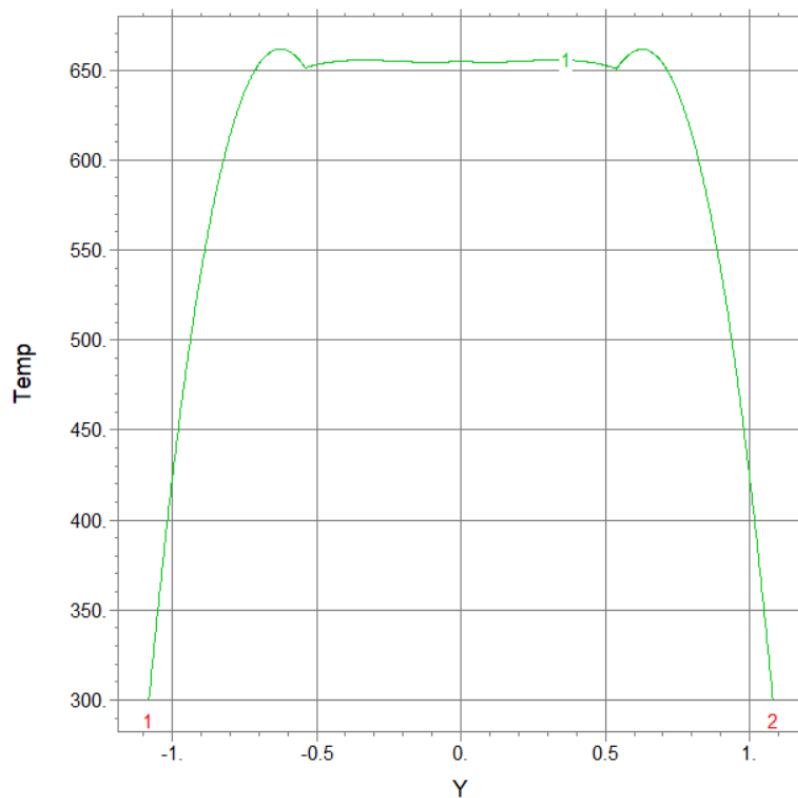
**Gambar 4.8.** Kurva konsentrasi heptadekana varian 2 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-5}$ )



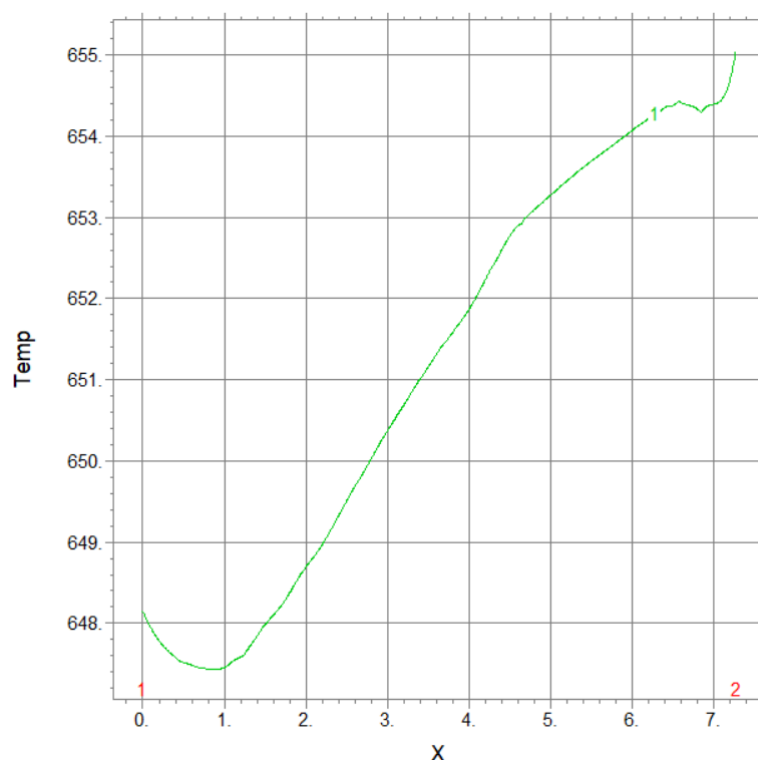
**Gambar 4.9.** Kurva konsentrasi oktadekana varian 2 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-2}$ )



Dapat dilihat dari Gambar 4.7, asam stearat di dalam umpan berhasil terkonversi sebesar 99,69%, atau hampir sempurna, di akhir reaksi atau pada akhir keberjalanan senyawa di dalam reaktor, dengan selektivitas reaksi HDO di dalam usaha mengonversi asam stearat sebesar 95,27%. Persebaran temperatur di dalam reaktor disajikan dalam Gambar 4.10 dan Gambar 4.11 berikut.



**Gambar 4.10.** Kurva temperatur keluaran varian 2

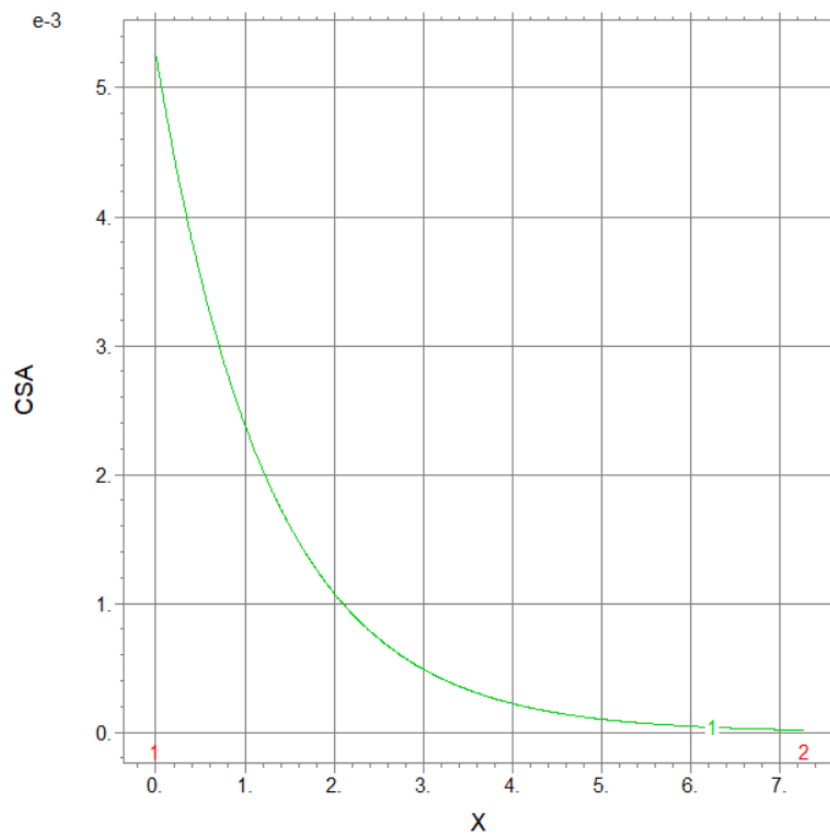


**Gambar 4.11.** Kurva temperatur varian 2 di sepanjang reaktor

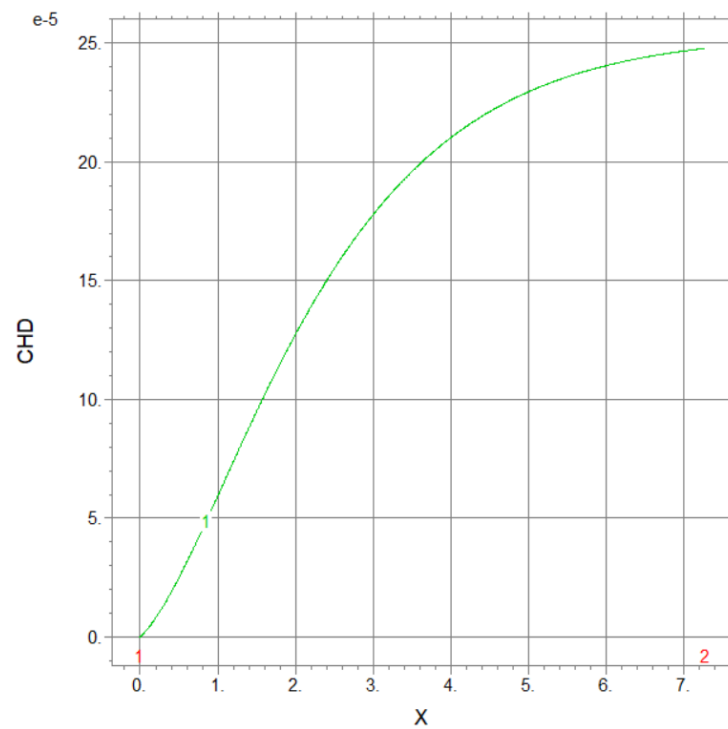
Dapat dilihat dari Gambar 4.10 dan Gambar 4.11, terjadi kenaikan temperatur di sepanjang terjadinya reaksi karena entalpi reaksi keseluruhan merupakan reaksi yang eksotermis. Konsentrasi asam stearat yang relatif rendah terhadap media reaksi tetap menjadi alasan dibalik kenaikan temperatur yang tidak signifikan. Selain itu, temperatur keluaran reaktor relatif lebih besar (655 K) dibanding varian sebelumnya, dikarenakan panas reaksi yang lebih besar dihasilkan dari proses konversi asam stearat yang lebih banyak.

#### 4.2.3 15% wt Asam Stearat di dalam Umpan

Berikut adalah hasil simulasi variasi ketiga, 15% asam stearat di dalam umpan.

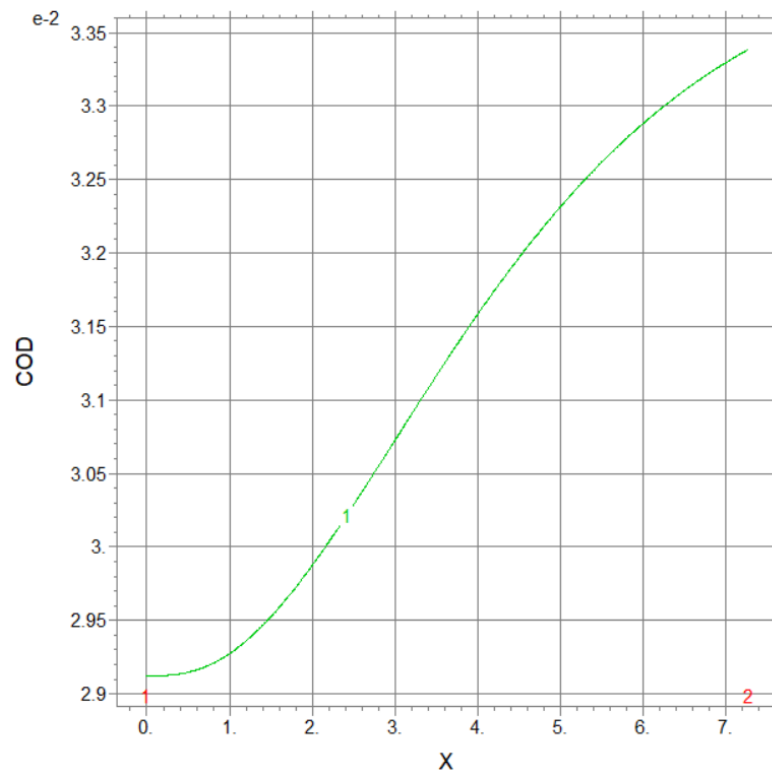


**Gambar 4.12.** Kurva konsentrasi asam stearat varian 3 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-3}$ )



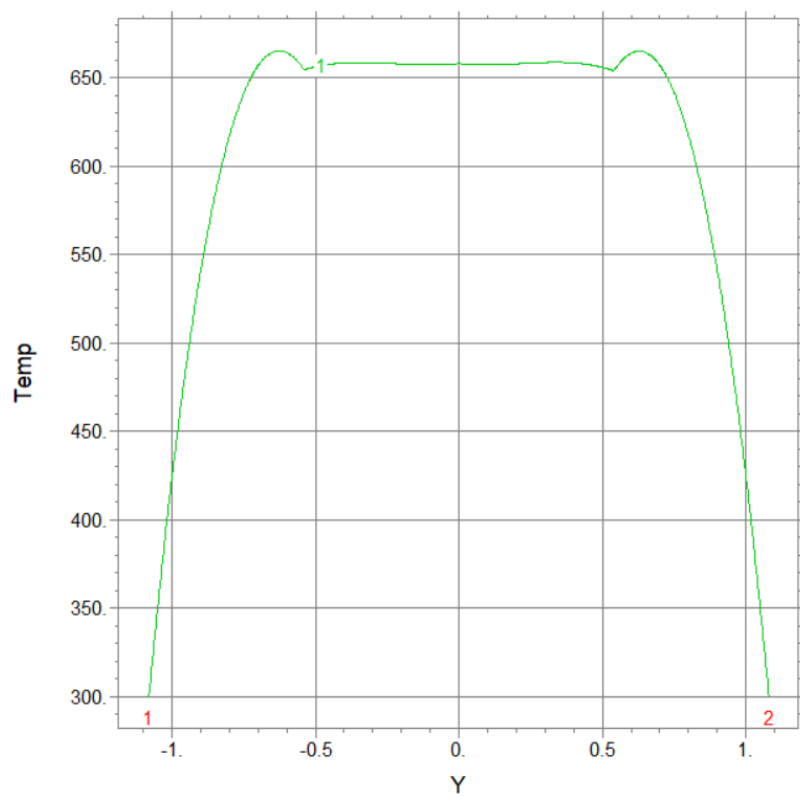
**Gambar 4.13.** Kurva konsentrasi heptadekana varian 3 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-5}$ )

5)

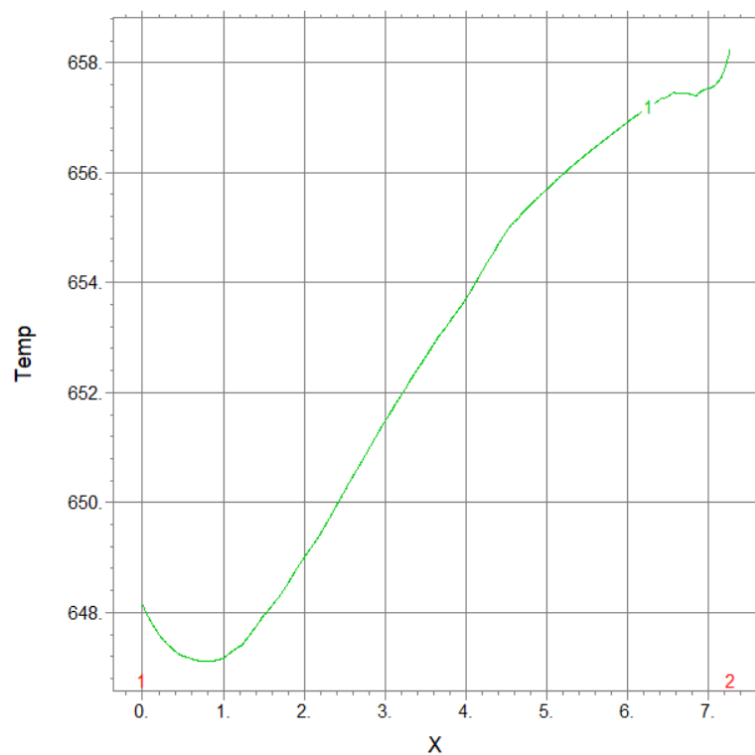


**Gambar 4.14.** Kurva konsentrasi oktadekana varian 3 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-5}$ )

Dapat dilihat dari Gambar 4.12, asam stearat di dalam umpan berhasil terkonversi sebesar 99,59% di akhir reaksi atau pada akhir keberjalanan senyawa di dalam reaktor, dengan selektivitas reaksi HDO di dalam usaha mengonversi asam stearat sebesar 95,28%. Persebaran temperatur di dalam reaktor disajikan dalam Gambar 4.15 dan Gambar 4.16 berikut.



**Gambar 4.15.** Kurva temperatur keluaran varian 3

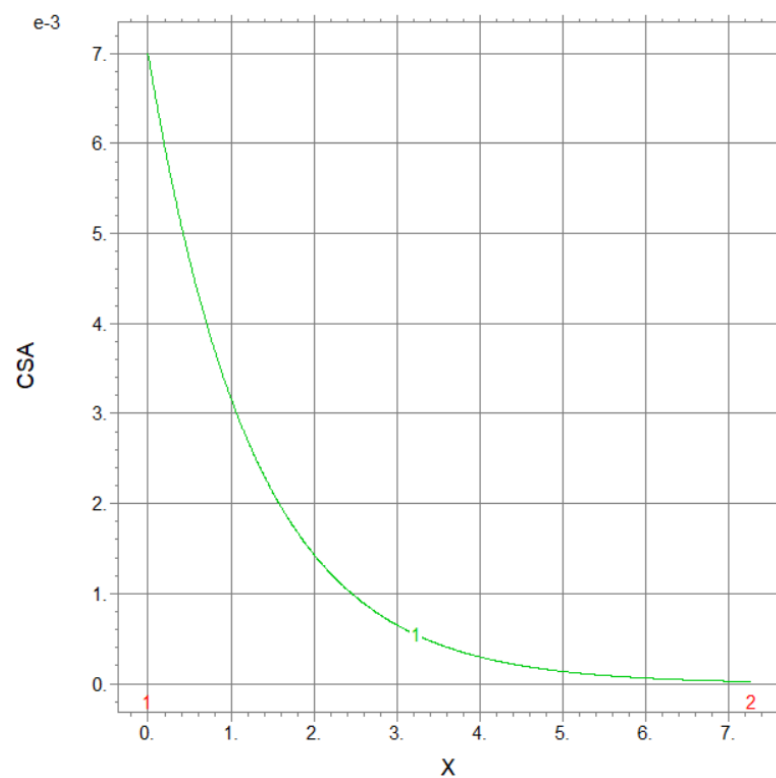


**Gambar 4.16.** Kurva temperatur varian 3 di sepanjang reaktor

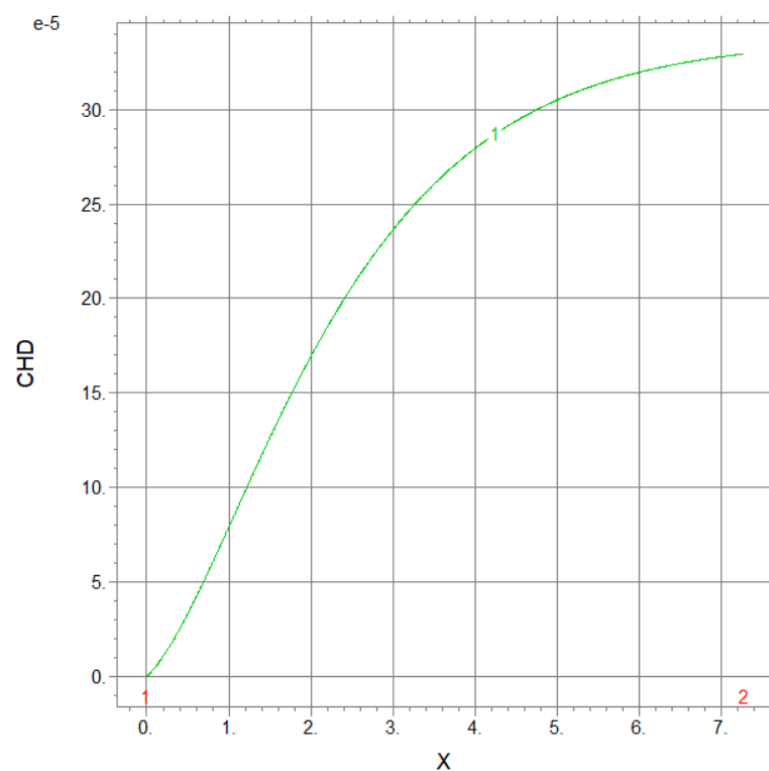
Dapat dilihat dari Gambar 4.15 dan Gambar 4.16, temperatur di dalam reaktor secara keseluruhan meningkat menandakan rangkaian reaksi konversi asam stearat merupakan reaksi yang eksotermis. Nilai temperatur keluaran reaktor relatif lebih besar dibanding kedua varian sebelumnya, yaitu pada angka 659 K.

#### 4.2.4 20% wt Asam Stearat di dalam Umpan

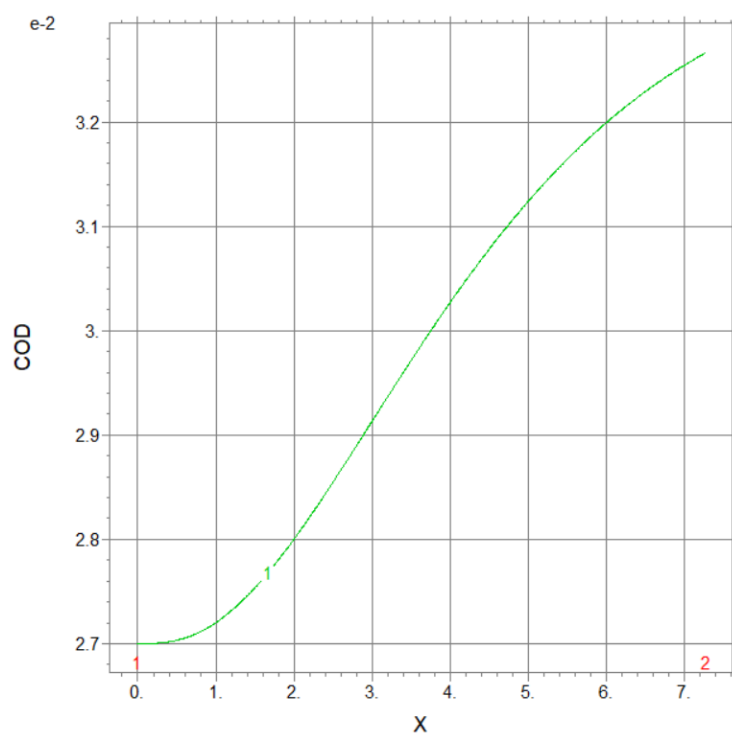
Berikut adalah hasil simulasi variasi keempat, 20% asam stearat di dalam umpan.



**Gambar 4.17.** Kurva konsentrasi asam stearat varian 4 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-3}$ )

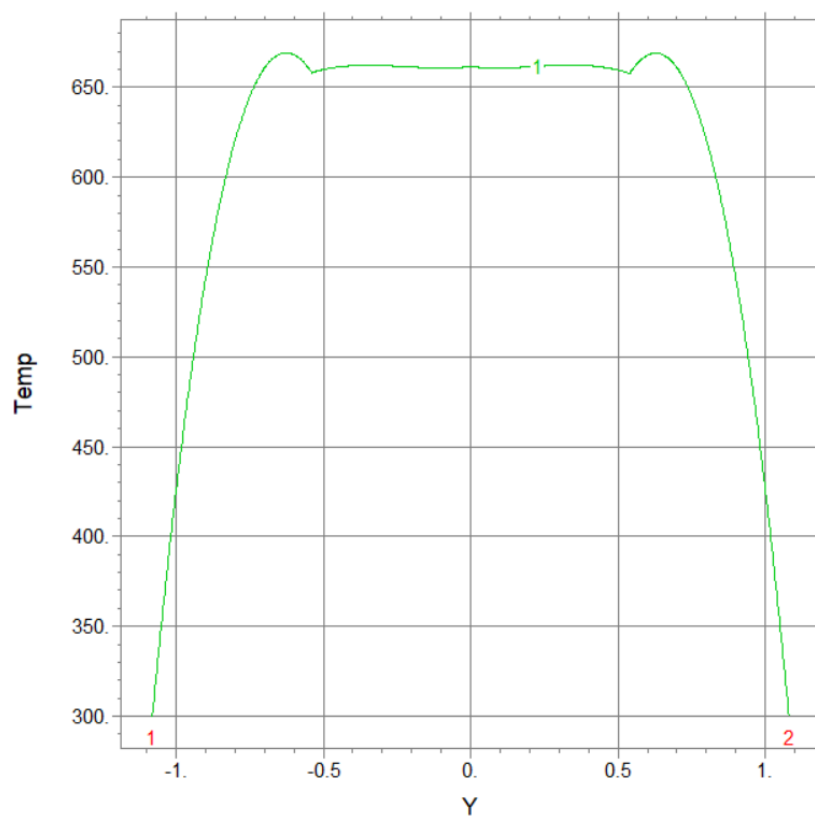


**Gambar 4.18.** Kurva konsentrasi heptadekana varian 4 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-5}$ )



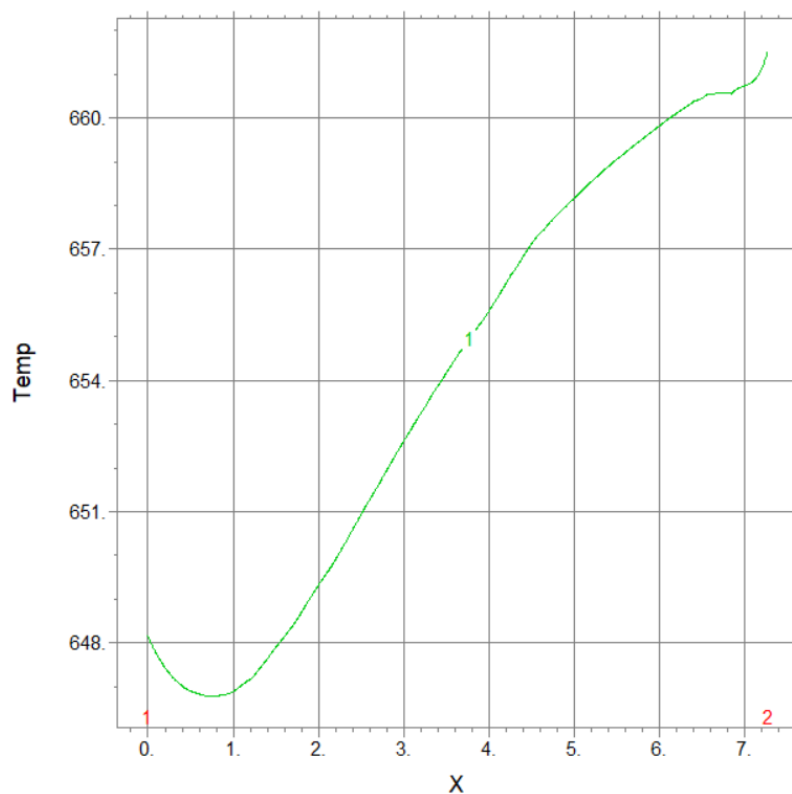
**Gambar 4.19.** Kurva konsentrasi oktadekana varian 4 di sepanjang reaktor (skala  $10^{-2}$ )

Dapat dilihat dari Gambar 4.17, asam stearat di dalam umpan berhasil terkonversi sebesar 99,69% di akhir reaksi atau pada akhir keberjalanan senyawa di dalam reaktor, dengan selektivitas reaksi HDO di dalam usaha mengonversi asam stearat sebesar 95,30%. Dari keempat variasi konsentrasi umpan, dapat terlihat bahwa katalis yang digunakan di dalam reaksi memiliki 95% selektivitas reaksi HDO terhadap reaksi hidrodekarboksilasi dalam memproduksi hidrokarbon. Persebaran temperatur di dalam reaktor disajikan dalam Gambar 4.20 dan Gambar 4.21 berikut.



**Gambar 4.20.** Kurva temperatur keluaran varian 4



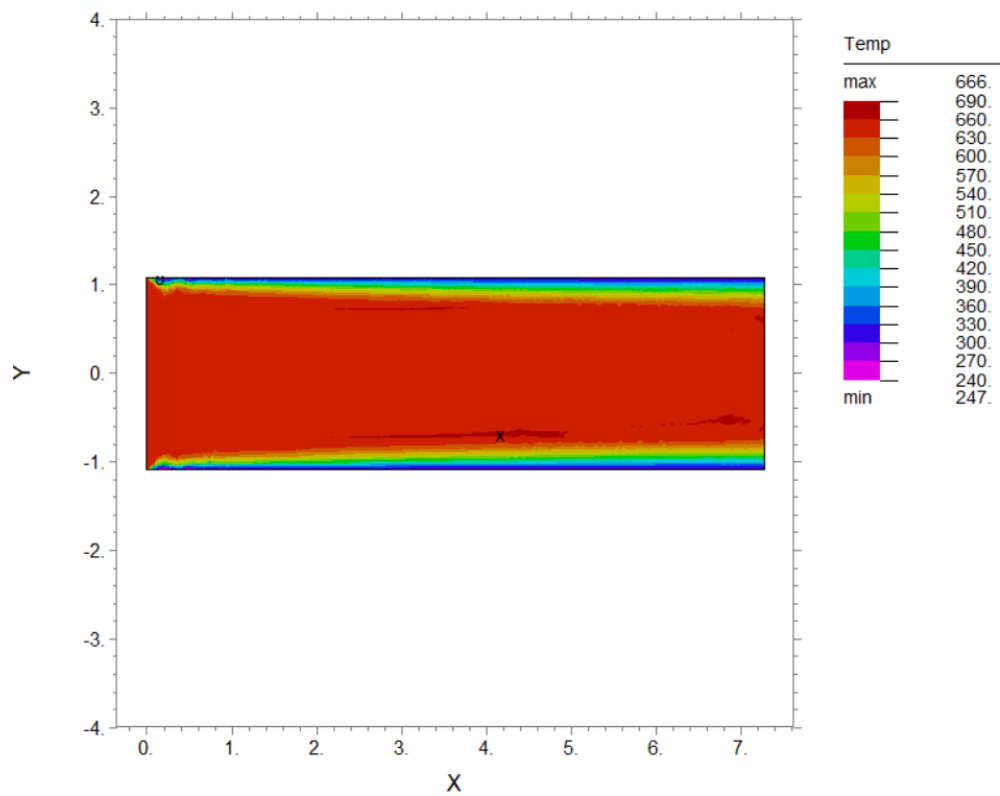


**Gambar 4.21.** Kurva temperatur varian 4 di sepanjang pusat reaktor

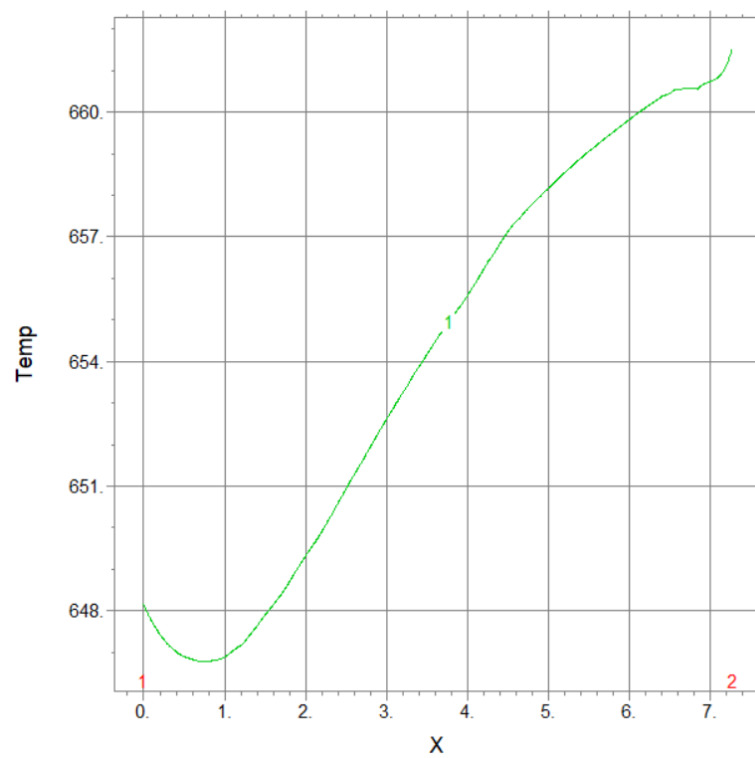
Dapat dilihat dari Gambar 4.20 dan Gambar 4.21, fenomena-fenomena yang telah dijelaskan pada ketiga varian sebelumnya terjadi pada varian yang keempat ini. Nilai akhir temperatur reaksi, dengan peningkatan konsentrasi asam stearat di dalam umpan, juga relatif lebih tinggi dibanding ketiga varian sebelumnya. Selain itu untuk keempat varian, persebaran temperatur di dekat dinding reaktor menjadi lebih dingin. Hal itu disebabkan oleh media pendingin di luar dinding reaktor yang tetap terus mendinginkan reaktor, serta menjaga agar kenaikan temperatur di dalam reaktor tidak melewati batas desain material reaktor yang sudah didesain.

#### 4.3. Hasil Simulasi Neraca Energi untuk Variasi Jenis Reaktor

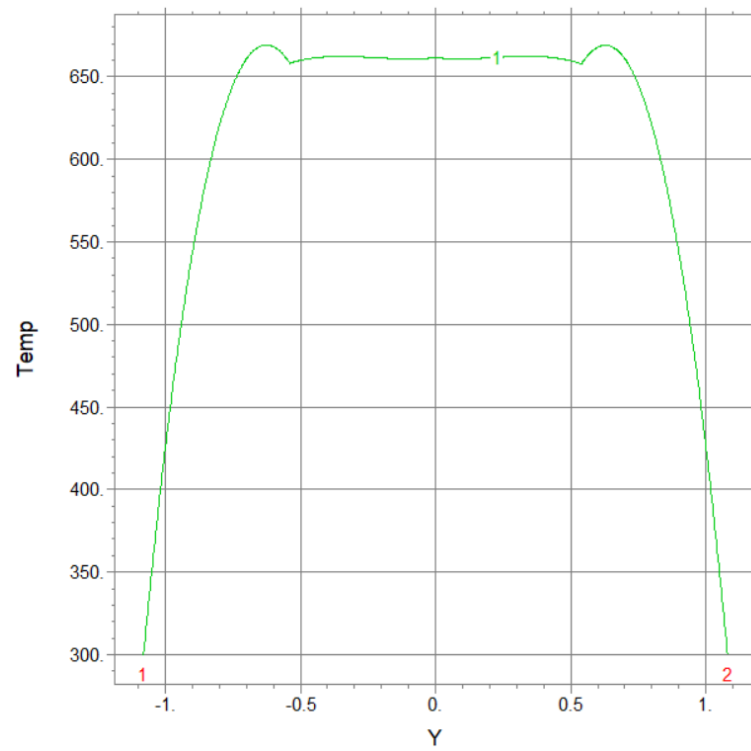
Analisis pengaruh jenis reaktor terhadap persebaran temperatur dilakukan dengan menganalisis hasil simulasi umpan 20% wt asam stearat dengan konfigurasi reaktor dengan pendingin dan dengan konfigurasi adiabatik. Berikut adalah hasil simulasi untuk kedua jenis reaktor.



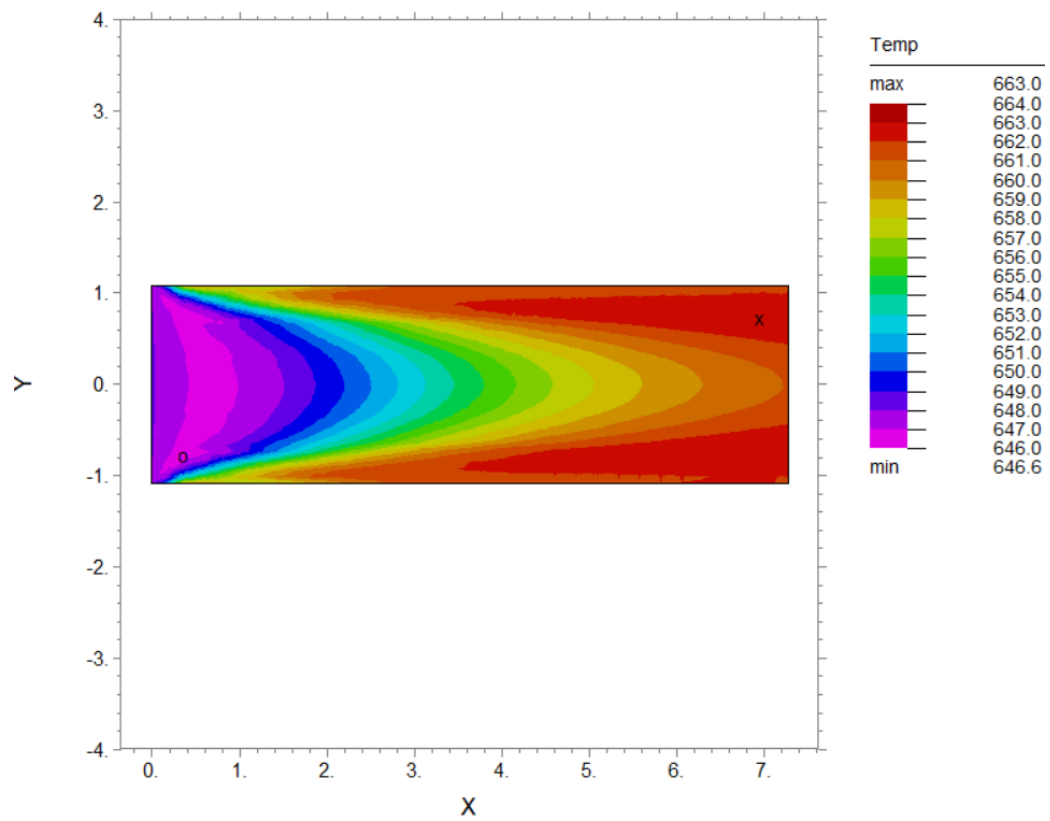
**Gambar 4.22.** Kurva kontur temperatur di sepanjang reaktor non-adiabatis



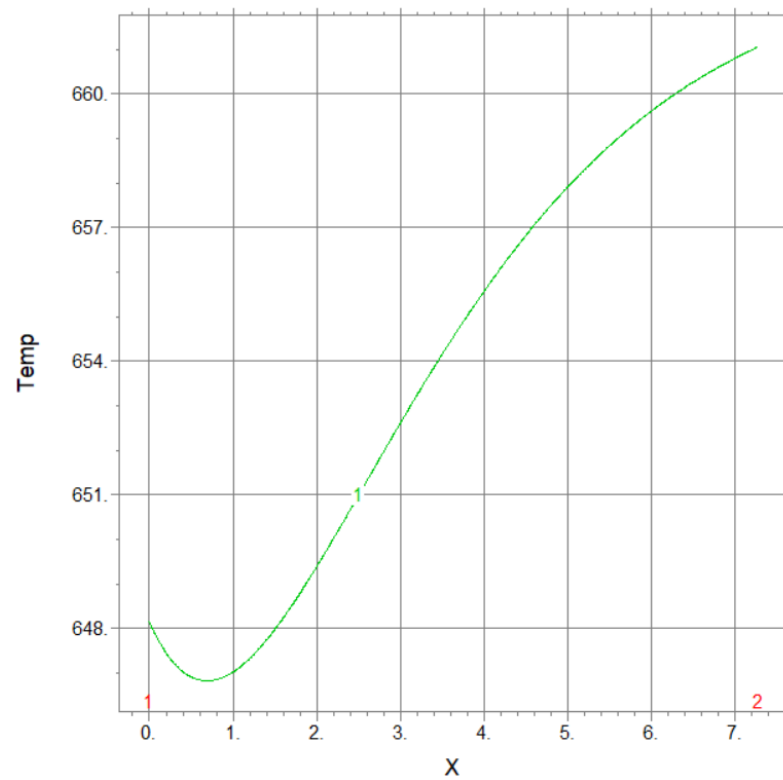
**Gambar 4.23.** Kurva temperatur di sepanjang reaktor non-adiabatis



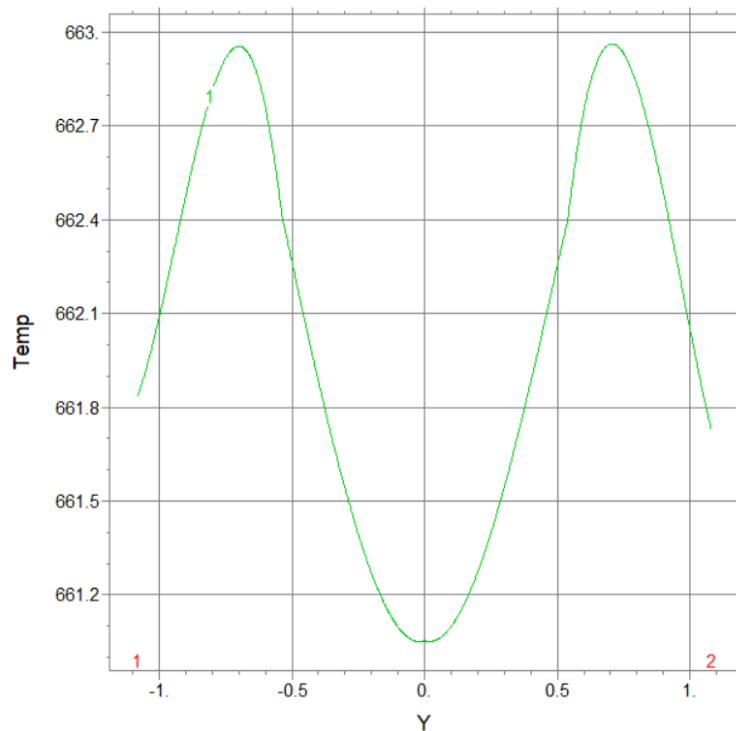
**Gambar 4.24.** Profil temperatur keluaran reaktor non-adiabatis



**Gambar 4.25.** Kurva kontur temperatur di sepanjang reaktor adiabatik



**Gambar 4.26.** Kurva temperatur di sepanjang pusat reaktor adiabatik



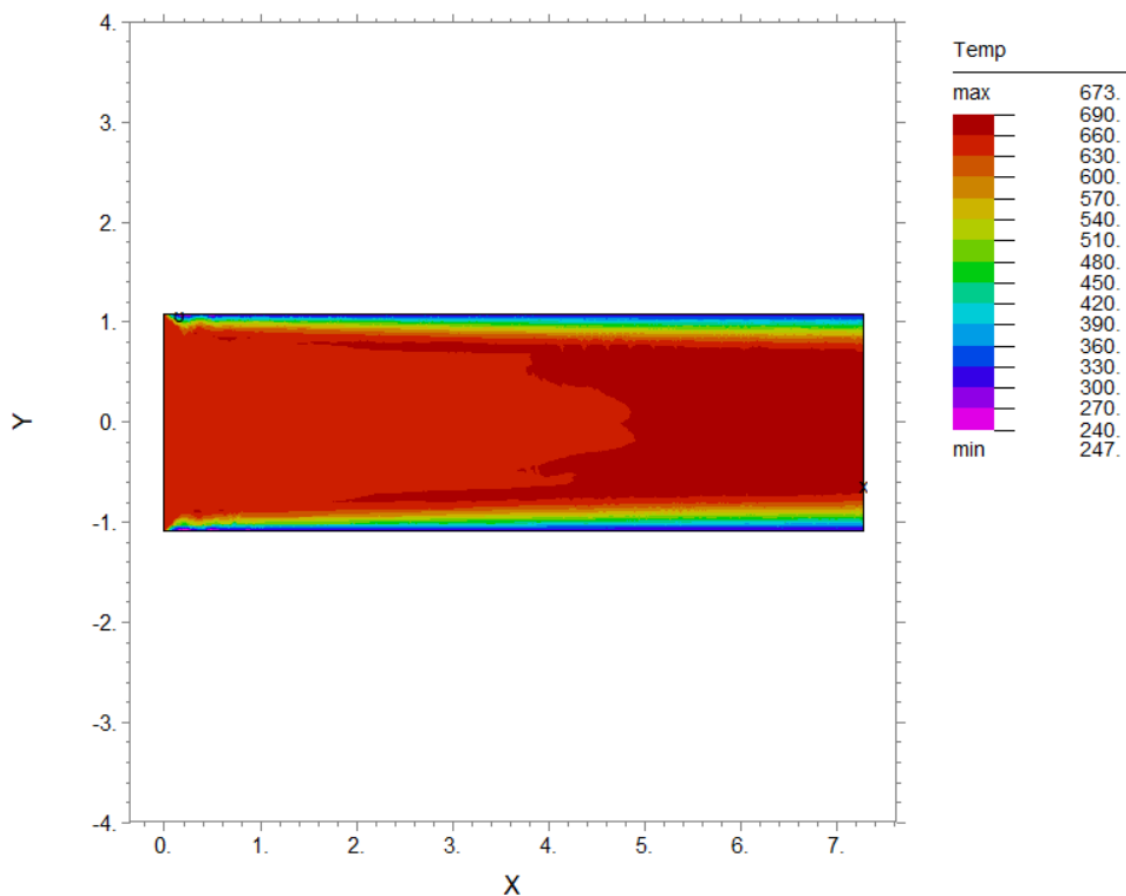
**Gambar 4.27.** Kurva temperatur keluaran reaktor adiabatik

Dapat terlihat dari kurva kontur temperatur reaktor non-adiabatik dan reaktor adiabatik, ada perbedaan profil temperatur di sepanjang reaktor. Untuk reaktor non-adiabatik, temperatur media reaksi tertinggi berada di bagian tengah reaktor, di mana mayoritas reaksi terjadi. Pada bagian dinding, terjadi perpindahan panas dari dalam reaktor ke luar reaktor akibat adanya media pendingin pada dinding reaktor bagian luar.

Untuk reaktor adiabatik, tidak terjadi perpindahan panas dari dalam reaktor ke lingkungan maupun sebaliknya. Sehingga, seluruh panas reaksi yang dihasilkan tertahan di dalam reaktor. Hal itu ditunjukkan pada Gambar 4.24 dan Gambar 4.27, di mana keluaran reaktor adiabatik memiliki temperatur yang lebih tinggi. Pada reaktor adiabatik ditemukan juga adanya profil temperatur yang lebih tinggi di area dinding reaktor dibandingkan dengan pusat reaktor. Hal itu disebabkan karena profil kecepatan media reaksi yang semakin lambat ketika media reaksi berada lebih dekat ke arah dinding, yang menyebabkan waktu tinggal untuk fluida pada area tersebut lebih lama dibandingkan dengan fluida yang bergerak di area pusat reaktor. Sehingga, panas reaksi yang dihasilkan oleh fluida di dekat dinding reaktor semakin besar.

#### 4.4. Hasil Simulasi untuk Konsentrasi Asam Stearat Maksimum di dalam Umpan

Berdasarkan simulasi, umpan dengan 25%-massa asam stearat merupakan konsentrasi asam stearat maksimum yang diperbolehkan di dalam umpan menimbang adanya batas desain temperatur untuk reaktor *hydrotreating* sebesar 400°C atau 673,15 K (PERTAMINA RU IV Cilacap, 1997). Berikut adalah persebaran temperatur di dalam reaktor hasil simulasi.



**Gambar 4.28.** Kurva kontur temperatur untuk konsentrasi 25%-massa asam stearat di dalam umpan

## **BAB V**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **5.1. Kesimpulan**

Kesimpulan dari studi kasus simulasi konversi asam stearat menjadi biohidrokarbon fraksi diesel adalah sebagai berikut.

1. Komposisi umpan berupa 20% wt asam stearat di dalam oktadekana merupakan komposisi umpan terbaik untuk melakukan reaksi HDO,
2. Reaktor dengan media pendingin adalah konfigurasi reaktor yang lebih baik, dikarenakan mampu menjaga temperatur di dalam reaktor di bawah batas desain reaktor *hydrotreating* pada simulasi,
3. Komposisi asam stearat dalam umpan tidak boleh melebihi 25% wt, untuk menjaga persebaran temperatur di dalam reaktor tidak melebihi batas desain reaktor *hydrotreating*.

#### **5.2. Saran**

Saran yang dapat diajukan untuk penelitian selanjutnya adalah hasil simulasi sebaiknya dibandingkan dengan data laboratorium untuk memvalidasi model yang dipakai di dalam simulasi.

## DAFTAR PUSTAKA

- Abhari, R.; Tomlinson, L.; Havlik, P.; dan Jannasch, N., "Process for co-producing jet fuel and lpg from renewable sources", United States Patent Application Publication (2008).
- Bagyaraj, D. J., "Microorganisms in Sustainable Agriculture", *Proceedings of the Indian National Science Academy* **80** (2014), 357.
- Bartholomew, Calvin H, R. J. F., "*Fundamentals of industrial catalytic process*", *Fundamentals of industrial catalytic process* (2005).
- Boonyasuwat, S.; dan Tscheikuna, J., "Co-processing of palm fatty acid distillate and light gas oil in pilot-scale hydrodesulfurization unit over commercial CoMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", *Fuel* **199** (2017), 115–124.
- Chen, H.; Wang, Q.; Zhang, X.; dan Wang, L., "Effect of support on the NiMo phase and its catalytic hydrodeoxygenation of triglycerides", *Fuel* **159** (2015), 430–435.
- Chen, L.; Janssens, T. V. W.; Skoglundh, M.; dan Grönbeck, H., "Interpretation of - NH<sub>3</sub> - TPD Profiles from Cu - CHA Using First - Principles Calculations", *Topics in Catalysis* **62** (2019), 93–99.
- Chen, N.; Gong, S.; dan Qian, E. W., "Effect of reduction temperature of NiMoO<sub>3-x</sub>/SAPO-11 on its catalytic activity in hydrodeoxygenation of methyl laurate", *Applied Catalysis B: Environmental* **174–175** (2015), 253–263.
- Coordinating Research Council Inc, "Handbook of Aviation Fuel Properties. Atlanta", (1983), 122.
- Czernik, S.; dan Bridgwater, A. V., "Overview of applications of biomass fast pyrolysis oil", *Energy and Fuels* (2004).
- De Lucia, C., "*Multiple objectives policy for biofuels production: environmental, socio-economic and regulatory issues*", *Handbook of Biofuels Production* (2011), Woodhead Publishing Limited.
- Deliy, I. V; Vlasova, E. N.; Nuzhdin, A. L.; dan Bukhtiyarova, G. A., "The Comparison of Sulfide CoMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Catalysts in Methyl Palmitate and Methyl Heptanoate Hydrodeoxygenation", *Proceedings of the 2Nd European Conference of Control, and Proceedings of the 2Nd European Conference on Mechanical Engineering* (2011), 24–29, World Scientific and Engineering Academy and Society (WSEAS), Stevens Point, Wisconsin, USA,.
- Dwiratna, B.; dan Soebagjo, D., "PENGEMBANGAN KATALIS BERBASIS NiMo ALUMINA UNTUK REAKSI HIDRODEOKSIGENASI MINYAK NABATI MENJADI BIOAVTUR Development of NiMo Alumina Based Catalyst To Make Bioavtur From Plant Oil Through Hydrodeoxygenation Reaction", (2015), 75–80.
- Exxon Mobil Aviation, "World Jet Fuel Specifications with Avgas Supplement, 2005 Edition", (2005), 1–47.
- Ferdous, D.; Dalai, A. K.; dan Adjaye, J., "A series of NiMo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalysts containing boron and phosphorus", *Applied Catalysis A: General* **260** (2004), 153–162.
- Ferrari, M.; Bosmans, S.; Maggi, R.; Delmon, B.; dan Grange, P., "CoMo/carbon hydrodeoxygenation catalysts: Influence of the hydrogen sulfide partial pressure and of the sulfidation temperature", *Catalysis Today* (2001).



- Furimsky, E., "Chemistry of Catalytic Hydrodeoxygenation", *Catalysis Reviews: Science and Engineering* **25** (1983), 421–458.
- Furimsky, E., "Catalytic hydrodeoxygenation", *Applied Catalysis A: General* **199** (2000), 147–190.
- Furimsky, E.; dan Massoth, F. E., "Deactivation of hydroprocessing catalysts", *Catalysis Today* (1999).
- Gong, S.; Chen, N.; Nakayama, S.; dan Qian, E. W., "Isomerization of n-alkanes derived from jatropha oil over bifunctional catalysts", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* **370** (2013), 14–21.
- Gunstone, F. D., "*VEGETABLE OILS IN*", (n.d.).
- H. Gary, J.; E. Handwerk, G.; dan J. Kaiser, M., "*Petroleum Refining Technology and Economics*", (2007), CRC Press, Boca Raton,.
- Hachemi, I.; Kumar, N.; Mäki-Arvela, P.; Roine, J.; Peurla, M.; Hemming, J.; Salonen, J.; dan Murzin, D. Y., "Sulfur-free Ni catalyst for production of green diesel by hydrodeoxygenation", *Journal of Catalysis* **347** (2017), 205–221.
- Hachemi, I.; dan Murzin, D. Y., "Kinetic modeling of fatty acid methyl esters and triglycerides hydrodeoxygenation over nickel and palladium catalysts", *Chemical Engineering Journal* **334** (2018), 2201–2207.
- Hendrawati, T. Y.; Siswahyu, A.; dan Ramadhan, A. I., "Analysis Of Technoeconomy Of Bioavtur Production With Hydroprocessed Esters And Fatty Acids ( Hefa ) Process In Indonesia", **7** (2018), 39–43.
- Henstra, A. M.; Sipma, J.; Rinzema, A.; dan Stams, A. J. M., "Microbiology of synthesis gas fermentation for biofuel production", *Current Opinion in Biotechnology* **18** (2007), 200–206.
- Iskandar, M. J.; Baharum, A.; Anuar, F. H.; dan Othaman, R., "Palm oil industry in South East Asia and the effluent treatment technology—A review", *Environmental Technology and Innovation* **9** (2018), 169–185.
- Jęczmioneł, Ł.; dan Porzycka-Semczuk, K., "Hydrodeoxygenation, decarboxylation and decarbonylation reactions while co-processing vegetable oils over a NiMo hydrotreatment catalyst. Part I: Thermal effects – Theoretical considerations", *Fuel* **131** (2014), 1–5.
- Kalnes, T. N.; McCall, M. M.; dan Shonnard, D. R., "Chapter 18 Renewable Diesel and Jet-Fuel Production from Fats and Oils", *Thermochemical Conversion of Biomass to Liquid Fuels and Chemicals* (2010), 468–495, The Royal Society of Chemistry.
- Kasza, T. K.; Baladincz, P. B.; dan Hncsó, J. H., "Production of Bio-Isoparaffins By Hydroisomerisation of Bioparaffins", *Hungarian Journal of Industrial Chemistry Veszprem* **37** (2009), 95–99.
- Kim, M. Y.; Lee, K.; dan Choi, M., "Cooperative effects of secondary mesoporosity and acid site location in Pt/SAPO-11 on n-dodecane hydroisomerization selectivity", *Journal of Catalysis* **319** (2014), 232–238.
- Kon, K.; Toyao, T.; Onodera, W.; Siddiki, S. M. A. H.; dan Shimizu, K., "Hydrodeoxygenation of Fatty Acids, Triglycerides, and Ketones to Liquid Alkanes by a Pt-MoO<sub>x</sub>/TiO<sub>2</sub> Catalyst", *ChemCatChem* **9** (2017), 2822–2827.
- Kordulis, C.; Bourikas, K.; Gousi, M.; Kordouli, E.; dan Lycourghiotis, A., "Development of nickel based catalysts for the transformation of natural triglycerides and related compounds into green diesel: A critical review", *Applied Catalysis B: Environmental* **181** (2016), Februari 1, Elsevier.

- Kostik, V.; Memeti, S.; dan Bauer, B., "Fatty acid composition of edible oils and fats", *Journal of Hygienic Engineering and Design* (2013), 113–116.
- Kuuluvainen, V.; Mäki-Arvela, P.; Rautio, A.-R.; Kordas, K.; Roine, J.; Aho, A.; Toukoniitty, B.; Österholm, H.; Toivakka, M.; dan Murzin, D. Y., "Properties of adsorbents used for bleaching of vegetable oils and animal fats", *Journal of Chemical Technology & Biotechnology* **90** (2015), 1579–1591.
- Ladavos, A. K.; Katsoulidis, A. P.; Iosifidis, A.; Triantafyllidis, K. S.; Pinnavaia, T. J.; dan Pomonis, P. J., "The BET equation, the inflection points of N<sub>2</sub> adsorption isotherms and the estimation of specific surface area of porous solids", *Microporous and Mesoporous Materials* **151** (2012), 126–133.
- Lang, A.; dan Farouk, H., "The current developments regarding technologies, feedstocks , and innovative new R&D developments.", (2014), 58.
- Larsen, G.; Lotero, E.; Petkovic, L. M.; dan Shobe, D. S., "Alcohol dehydration reactions over tungstated zirconia catalysts", *Journal of Catalysis* **169** (1997), 67–75.
- Li, L.; Coppola, E.; Rine, J.; Miller, J. L.; dan Walker, D., "Catalytic hydrothermal conversion of triglycerides to non-ester biofuels", *Energy and Fuels* **24** (2010), 1305–1315.
- Li, X.; Luo, X.; Jin, Y.; Li, J.; Zhang, H.; Zhang, A.; dan Xie, J., "Heterogeneous sulfur-free hydrodeoxygenation catalysts for selectively upgrading the renewable bio-oils to second generation biofuels", *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **82** (2018), 3762–3797.
- Liu, Q.; Zuo, H.; Wang, T.; Ma, L.; dan Zhang, Q., "Applied Catalysis A : General One-step hydrodeoxygenation of palm oil to isomerized hydrocarbon fuels over Ni supported on nano-sized SAPO-11 catalysts", "Applied Catalysis A, General" **468** (2013), 68–74.
- Liu, S.; Zhu, Q.; Guan, Q.; He, L.; dan Li, W., "Bio-aviation fuel production from hydroprocessing castor oil promoted by the nickel-based bifunctional catalysts", *Bioresource Technology* **183** (2015), 93–100.
- Mawhood, R.; Gazis, E.; Jong, S. De; Hoefnagels, R.; dan Slade, R., "Production pathways for renewable jet fuel: a review of commercialization", *Biofuels, Bioprod. Bioref.* (2016).
- Michailos, S., "Process design, economic evaluation and life cycle assessment of jet fuel production from sugar cane residue", *Environmental Progress and Sustainable Energy* **37** (2018), 1227–1235.
- Mohammad, M.; Kandaramath Hari, T.; Yaakob, Z.; Chandra Sharma, Y.; dan Sopian, K., "Overview on the production of paraffin based-biofuels via catalytic hydrodeoxygenation", *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **22** (2013), 121–132.
- Neuling, U.; dan Kaltschmitt, M., "Conversion routes for production of biokerosene—status and assessment", *Biomass Conversion and Biorefinery* **5** (2015), 367–385.
- Novopashina, V. M.; Lebedev, M. Y.; Ermakov, D. Y.; Yakovlev, V. A.; Sister, V. G.; Yakimchuk, A. I.; Dundich, V. O.; dan Khromova, S. A., "Nickel catalysts for the hydrodeoxygenation of biodiesel", *Kinetics and Catalysis* (2010).
- Orsavova, J.; Misurcova, L.; Ambrozova, J. V.; dan Vicha, R., "Fatty Acids Composition of Vegetable Oils and Its Contribution to Dietary Energy Intake and Dependence of Cardiovascular Mortality on Dietary Intake of Fatty Acids", (2015), 12871–12890.
- Palou-Rivera, I.; Burton, F.; Snowden-Swan, L. J.; Butcher, M. G.; Brooks, K. P.; Lee,

- G.-S. J.; Shonnard, D.; Harmon, L.; Owen, J.; Handler, R.; Jones, S. B.; Anderson, D. M.; Plaza, J.; Holladay, J. E.; dan Frye, J. G., "Low-Carbon Aviation Fuel Through the Alcohol to Jet Pathway", *Biofuels for Aviation* (2016), Elsevier Inc.
- Perego, C.; dan Ricci, M., "Diesel fuel from biomass", *Catalysis Science and Technology* **2** (2012), 1776–1786.
- Pindoria, R. V; Lim, J.; Hawkes, J. E.; Lazaro, M.; Herod, A. A.; dan Kandiyoti, R., "Pindoria\_1997\_Fuel.pdf", **76** (1997), 1013–1023.
- PPIPE BPPT, "Outlook Energi Indonesia 2018 : energi berkelanjutan untuk transportasi darat", *Development* **134** (2018), **134**.
- Qian, E. W.; Chen, N.; dan Gong, S., "Role of support in deoxygenation and isomerization of methyl stearate over nickel–molybdenum catalysts", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* **387** (2014), 76–85.
- Reilly, K.; Lewis, C.; Bozzano, A.; McCall, M.; LeDuc, G.; Henry, T.; Juenger, J.; Holmgren, J.; Kinder, J.; Lambert, D.; Crenfeldt, G.; Abe, Y.; Rahmes, T.; Zombanakis, G.; dan Andac, M., "Sustainable Bio-Derived Synthetic Paraffinic Kerosene (Bio-SPK) Jet Fuel Flights and Engine Tests Program Results", (2012), 1–19.
- Reksowadojo, I. K.; dan Duong, L. H., "REVIEW OF TYPICAL BIOFUEL FOR AVIATION", **4** (2014), 20–30.
- Rodríguez-González, L.; Hermes, F.; Bertmer, M.; Rodríguez-Castellón, E.; Jiménez-López, A.; dan Simon, U., "The acid properties of H-ZSM-5 as studied by NH<sub>3</sub>-TPD and 27Al-MAS-NMR spectroscopy", *Applied Catalysis A: General* **328** (2007), 174–182.
- Ryland, A. L., "X-ray diffraction", *Journal of Chemical Education* **35** (1958), **35**.
- Santillan-Jimenez, E.; Morgan, T.; Shoup, J.; Harman-Ware, A. E.; dan Crocker, M., "Catalytic deoxygenation of triglycerides and fatty acids to hydrocarbons over Ni-Al layered double hydroxide", *Catalysis Today* **237** (2014), 136–144.
- Şenol, O. İ.; Ryymin, E.-M.; Viljava, T.-R.; dan Krause, A. O. I., "Effect of hydrogen sulphide on the hydrodeoxygenation of aromatic and aliphatic oxygenates on sulphided catalysts", *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* **277** (2007), 107–112.
- Senol, O.; Viljava, T.; dan Krause, A., "Hydrodeoxygenation of methyl esters on sulphided NiMo/?-AlO and CoMo/?-AlO catalysts", *Catalysis Today* (2005).
- Serrano-Ruiz, J. C.; dan Dumesic, J. A., "Catalytic routes for the conversion of biomass into liquid hydrocarbon transportation fuels", *Energy and Environmental Science* **4** (2011), 83–99.
- Sinnatt, F. S.; King, J. G.; dan Macfarlane, A., "Hydrogenation", *Industrial and Engineering Chemistry* **29** (1937), 133–140.
- Snåre, M.; Kubičková, I.; Mäki-Arvela, P.; Eränen, K.; dan Murzin, D. Y., "Heterogeneous catalytic deoxygenation of stearic acid for production of biodiesel", *Industrial and Engineering Chemistry Research* **45** (2006), 5708–5715.
- Soni, V. K.; Sharma, P. R.; Choudhary, G.; Pandey, S.; dan Sharma, R. K., "Ni/Co-Natural Clay as Green Catalysts for Microalgae Oil to Diesel-Grade Hydrocarbons Conversion", *ACS Sustainable Chemistry and Engineering* **5** (2017), 5351–5359.
- Sotelo-Boyás, R.; Trejo-Zárraga, F.; dan de Jesús Hernández-Loyo, F., "Hydroconversion of Triglycerides into Green Liquid Fuels", *Hydrogenation* (2012), IntechOpen.
- Steynberg, A. P., "Introduction to Fischer-Tropsch Technology", *Studies in Surface*

- Science and Catalysis* **152** (2007), **152**, Elsevier B.V.
- Tuan, V. A.; Nghiem, V. T.; Lai, S. Y.; Hung, L. N.; dan Naccache, C., "SAPO-11 , SAPO-31 , and SAPO-41 Molecular Sieves : Synthesis , Characterization , and Catalytic Properties in n-Octane", **66** (1997), 55–66.
- U.S. Department of Agriculture, "An Overview of Biodiesel and Petroleum Diesel Life Cycles A Joint Study Sponsored by :", (1998).
- Verma, D.; Kumar, R.; Rana, B. S.; dan Sinha, A. K., "Aviation fuel production from lipids by a single-step route using hierarchical mesoporous zeolites", *Energy and Environmental Science* **4** (2011), 1667–1671.
- Vertz, L., "Long-Term Jet Fuel Outlook", (2018).
- Viêgas, C. V.; Hachemi, I.; Freitas, S. P.; Mäki-Arvela, P.; Aho, A.; Hemming, J.; Smeds, A.; Heinmaa, I.; Fontes, F. B.; Da Silva Pereira, D. C.; Kumar, N.; Aranda, D. A. G.; dan Murzin, D. Y., "A route to produce renewable diesel from algae: Synthesis and characterization of biodiesel via in situ transesterification of *Chlorella* alga and its catalytic deoxygenation to renewable diesel", *Fuel* **155** (2015), 144–154.
- Wang, M.; Chen, M.; Fang, Y.; dan Tan, T., "Highly efficient conversion of plant oil to bio-aviation fuel and valuable chemicals by combination of enzymatic transesterification, olefin cross-metathesis, and hydrotreating", *Biotechnology for Biofuels* **11** (2018), 1–9.
- Wang, W. C.; dan Tao, L., "Bio-jet fuel conversion technologies", *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **53** (2016), 801–822.
- Wilson, A. C.; Us, M. A.; Zhang, H.; dan Glazer, S. B., "( 12 ) United States Patent", **2** (2016).
- Wu, J.; Shi, J.; Fu, J.; Leidl, J. A.; Hou, Z.; dan Lu, X., "Catalytic decarboxylation of fatty acids to aviation fuels over nickel supported on activated carbon", *Scientific Reports* **6** (2016), 1–8.
- Yadav, R.; dan Sakthivel, A., "Silicoaluminophosphate molecular sieves as potential catalysts for hydroisomerization of alkanes and alkenes", *Applied Catalysis A: General* **481** (2014), 143–160.
- Zhang, Q.; Chang, J.; Wang, T.; dan Xu, Y., "Review of biomass pyrolysis oil properties and upgrading research", *Energy Conversion and Management* **48** (2007), 87–92.
- Zhao, X.; Wei, L.; Cheng, S.; Huang, Y.; Yu, Y.; dan Julson, J., "Catalytic cracking of camelina oil for hydrocarbon biofuel over ZSM-5-Zn catalyst", *Fuel Processing Technology* **139** (2015), 117–126.
- Zuo, H.; Liu, Q.; Wang, T.; Ma, L.; Zhang, Q.; dan Zhang, Q., "Hydrodeoxygenation of methyl palmitate over supported ni catalysts for diesel-like fuel production", *Energy and Fuels* (2012).

## LAMPIRAN A

### Penjelasan Algoritma Pengerjaan Simulasi dalam FlexPDE

**Tabel A.1.** Penjelasan algoritma pengerjaan simulasi dengan baris kode FlexPDE

Langkah kerja	Baris kode dalam FlexPDE
Pemilihan sistem koordinat pada bagian “ <i>COORDINATES</i> ”	<b>COORDINATES</b> cartesian2
Pendefinisian variabel bebas pada bagian “ <i>VARIABLES</i> ”	<b>VARIABLES</b> CSA CSAD CSAC CHD COD Temp
	<b>DEFINITIONS</b> CSA0 = 0.0011 COD0 = 0.0204  k1 = 0.010/60 k2 = 1.32/60 k3 = 0.05/60 k4 = 1.17/60 k5 = 0.871/60 KA = 0.013 rCSA = -(k1+k2)*CSA/(1+(KA*CSA)) rCSAD = ((k2*CSA)-((k3+k4)*CSAD))/(1+(KA*CSA)) rCSAC = ((k4*CSAD)-(k5*CSAC))/(1+(KA*CSA))

	$r_{HD} = ((k_1 * CSA) + (k_3 * CSAD)) / (1 + (KA * CSA))$ $r_{OD} = k_5 * CSAC / (1 + (KA * CSA))$ $CTOT = CSA + CSAD + CSAC + CHD + COD + 0.56$ $r_1 = k_1 * CSA / (1 + (KA * CSA))$ $r_2 = k_2 * CSA / (1 + (KA * CSA))$ $r_3 = k_3 * CSAD / (1 + (KA * CSA))$ $r_4 = k_4 * CSAD / (1 + (KA * CSA))$ $r_5 = k_5 * CSAC / (1 + (KA * CSA))$ $T_{in} = 375 + 273.15$ $MrSA = 248.48$ $VisSA = 0.0003151$ $VmSA = 0.4771$ $DSA = 1 / (10^{11}) * (T_{in} * (MrSA)^{0.5}) / (VisSA * (VmSA^{(2/3)}))$ $MrSAC = 270.5$ $VisSAC = 0.0001224$ $VmSAC = 0.3978$ $DSAC = 1 / (10^{11}) * (T_{in} * (MrSAC)^{0.5}) / (VisSAC * (VmSAC^{(2/3)}))$ $MrHD = 240.5$ $VisHD = 0.0001285$ $VmHD = 0.4261$ $DHD = 1 / (10^{11}) * (T_{in} * (MrHD)^{0.5}) / (VisHD * (VmHD^{(2/3)}))$ $MrOD = 254.5$ $VisOD = 0.0001478$ $VmOD = 0.4576$
--	--

	$DOD = 1/(10^{11}) * (T_{in} * (M_{rOD})^{0.5}) / (V_{isOD} * (V_{mOD})^{(2/3)})$ $u_0 = 0.01399 \text{ !m/s}$ $J_{ejari} = 1.08 \text{ !m}$ $L = 7.27 \text{ !m}$ $Beta = Temp/T_{in}$ $u = u_0 * (1 - (y/J_{ejari})^2) * Beta$ $PanasReaksi1 = -32292$ $PanasReaksi2 = 36323$ $PanasReaksi3 = 0964$ $PanasReaksi4 = -58756$ $PanasReaksi5 = -81377$ $\rho_{SA} = 2.22906 \text{ !kmol/m}^3$ $\rho_{SAD} = 2.35784 \text{ !kmol/m}^3$ $\rho_{SAC} = 2.13147 \text{ !kmol/m}^3$ $\rho_{HD} = 2.07587 \text{ !kmol/m}^3$ $\rho_{OD} = 2.01521 \text{ !kmol/m}^3$ $C_{pSA} = 901.68 \text{ !kJ/kmol.K}$ $C_{pSAD} = 884.082 \text{ !kJ/kmol.K}$ $C_{pSAC} = 884.127 \text{ !kJ/kmol.K}$ $C_{pHD} = 826.371 \text{ !kJ/kmol.K}$ $C_{pOD} = 868.434 \text{ !kJ/kmol.K}$ $C_{pH} = 29.37 \text{ !kJ/kmol.K}$ $k_{SA} = 9.57973/(10^5)$ $k_{SAD} = 9.29416/(10^5)$ $k_{SAC} = 7.76591/(10^5)$ $k_{HD} = 7.44581/(10^5)$
--	--

	$k_{OD} = 0.0000744929 \text{ !kJ/m.K.s}$ $k_W = 7.02252/(10^5) \text{ !kJ/m.K.s}$ $k_H = 0.3105/1000$  $\rho = CTOT \text{ !mol/L}$ $C_p = (C_{SA}/CTOT * C_{pSA}) + (C_{SAD}/CTOT * C_{pSAD}) + (C_{SAC}/CTOT * C_{pSAC}) + (C_{HD}/CTOT * C_{pHD}) + (C_{OD}/CTOT * C_{pOD}) + (0.56/CTOT * C_{pH}) \text{ !kJ/kmol.K}$ $k = (C_{SA}/CTOT * k_{SA}) + (C_{SAD}/CTOT * k_{SAD}) + (C_{SAC}/CTOT * k_{SAC}) + (C_{HD}/CTOT * k_{HD}) + (C_{OD}/CTOT * k_{OD}) + (0.56/CTOT * k_H) \text{ !J/mol.K.s}$  $k_{wall} = 0.045 \text{ !kJ/m.K.s}$ Text = 300
Pendefinisian nilai awal setiap variabel pada bagian “ <i>INITIAL VALUES</i> ”	<b>INITIAL VALUES</b>  $CSA = CSA0/2$ $CSAD = 0.5$ $CHD = 0.01$ Temp = 777 $CSAC = 0.5$ $COD = COD0 * 1.5$
Pendefinisian persamaan diferensial yang akan diselesaikan pada bagian “ <i>EQUATIONS</i> ”	<b>EQUATIONS</b>  CSA: $u * dx(CSA) = (Deff1 * ((dy(CSA)/y) + (dyy(CSA)))) + (rCSA * 0.5)$ CSAD: $u * dx(CSAD) = (Deff2 * ((dy(CSAD)/y) + (dyy(CSAD)))) + (rCSAD * 0.5)$ CSAC: $u * dx(CSAC) = (Deff3 * ((dy(CSAC)/y) + (dyy(CSAC)))) + (rCSAC * 0.5)$



	<p>CHD: <math>u \cdot dx(CHD) = (Deff4 \cdot ((dy(CHD)/y) + (dyy(CHD)))) + (rHD \cdot 0.5)</math></p> <p>COD: <math>u \cdot dx(COD) = (Deff5 \cdot ((dy(COD)/y) + (dyy(COD)))) + (rOD \cdot 0.5)</math></p> <p>Temp: <math>\rho \cdot Cp \cdot u \cdot dx(Temp) = k \cdot ((dy(Temp)/y) + (dyy(Temp))) - ((PanasReaksi1 \cdot r1 \cdot 0.5) + (PanasReaksi2 \cdot r2 \cdot 0.5) + (PanasReaksi3 \cdot r3 \cdot 0.5) + (PanasReaksi4 \cdot r4 \cdot 0.5) + (PanasReaksi5 \cdot r5 \cdot 0.5))</math></p>
Pendefinisian syarat batas persamaan diferensial yang akan diselesaikan pada bagian “ <i>BOUNDARIES</i> ”	<p><b>BOUNDARIES</b></p> <p><b>REGION 1</b></p> <p><b>START(0,-Jejari)</b></p> <p><b>natural(CSA) = 0</b></p> <p><b>natural(Temp)=0</b></p> <p><b>natural(CSAC)=0</b></p> <p><b>natural(CSAD)=0</b></p> <p><b>natural(CHD)=0</b></p> <p><b>natural(COD)=0</b></p> <p><b>LINE TO (L,-Jejari)</b></p> <p><b>natural(CSA) = 0</b></p> <p><b>natural(Temp)=0</b></p> <p><b>natural(CSAC)=0</b></p> <p><b>natural(CSAD)=0</b></p> <p><b>natural(CHD)=0</b></p> <p><b>natural(COD)=0</b></p> <p><b>LINE TO (L,Jejari)</b></p> <p><b>natural(CSA) = 0</b></p> <p><b>natural (Temp)=0</b></p> <p><b>natural (CSAC)=0</b></p> <p><b>natural (CSAD)=0</b></p> <p><b>natural (CHD)=0</b></p>

	<pre> natural (COD)=0 LINE TO (0,Jejari) value(CSA) = CSA0 value (Temp)=Tin value (CSAC)=0 value (CSAD)=0 value (CHD)=0 value (COD)=COD0 LINE TO CLOSE </pre>
Pendefinisian grafik hasil simulasi pada bagian “ <i>PLOTS</i> ”	<pre> PLOTS CONTOUR(CSA) painted CONTOUR(Temp) painted ELEVATION(CSA) from (0,0) to (L,0) ELEVATION (CSAD) from (0,0) to (L,0) ELEVATION (CSAC) from (0,0) to (L,0) ELEVATION (CHD) from (0,0) to (L,0) ELEVATION (COD) from (0,0) to (L,0) ELEVATION (Temp) from (L, -Jejari) to (L, Jejari) ELEVATION (Temp) from (0,0) to (L, 0) END </pre>