

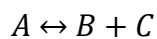
ASSIGNMENT WEEK 5

Pemodelan Reaktor Non Adiabatis Non Isotermal (NANI) Reaksi *Reversible* Isotermis

1.	<p>Reaksi fasa gas bolak balik dan eksotermis:</p> $A \leftrightarrow B + C$ <p>Dijalankan dalam reaktor tabung berdiameter dalam D dan panjang L yang bekerja pada tekanan yang dianggap tetap P. Reaksi mengikuti persamaan:</p> <p>Dengan,</p> $-r_A = k \cdot (C_A - \frac{C_B \cdot C_C}{K})$ $k = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{R \cdot T}\right)$ $K = \exp\left(\alpha + \frac{\beta}{T}\right)$ $\Delta H_R = \Delta H_R^0 + (C_{pB} + C_{pC} - C_{pA}) \cdot (T - T_{ref})$ <p>Umpan berjumlah F_0 mol/waktu dengan komposisi A = 90%, Inert (I) = 10% masuk reaktor pada suhu T_0. Perubahan entalpi reaksi pada suhu standard T_{ref} nilainya ΔH_R^0. Pendingin mengalir di luar tabung (anulus) dan suhunya dapat dianggap tetap T_p. Koefisien perpindahan panas antara gas dan pemanas dihitung berdasar luas permukaan dalam tabung U. Ingin disusun persamaan-persamaan matematis untuk mencari konversi A (x) dan suhu gas (T) pada berbagai posisi (z) pada keadaan <i>steady-state</i>.</p>
----	---

Penyelesaian:

Persamaan reaksi bolak balik dan eksotermis



Dengan persamaan laju reaksi:

$$-r_A = k(C_A - \frac{C_B C_C}{K})$$

di mana,

$$k = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

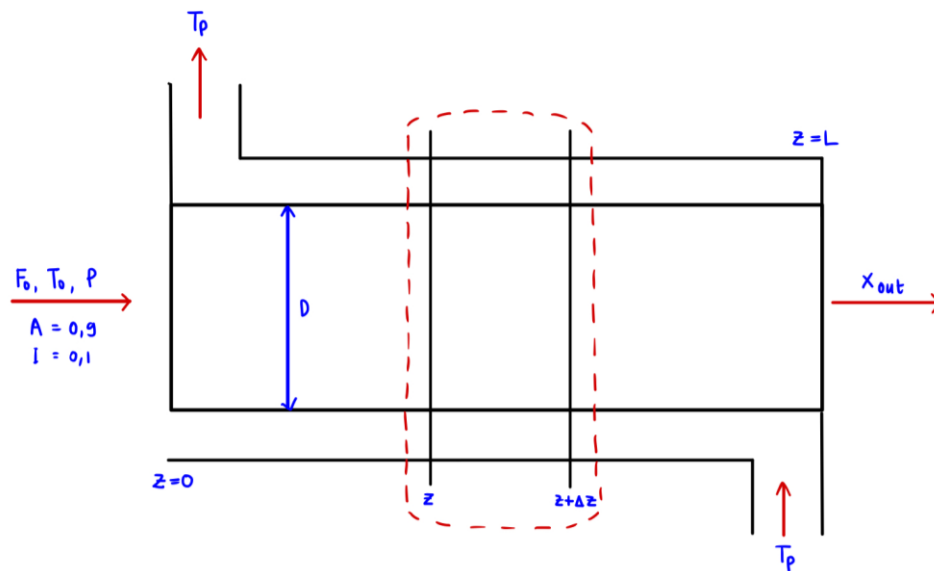
$$K = \exp\left(\alpha + \frac{\beta}{T}\right)$$

$$\Delta H_R = \Delta H_R^0 + (C_{pB} + C_{pC} - C_{pA}) \cdot (T - T_{ref})$$

- **Asumsi**

- Reaksi *steady state* sehingga nilai dari *rate of mass accumulation* dan *rate of heat accumulation* adalah 0.
- Gas yang berada dalam reaktor merupakan gas ideal (persamaan gas ideal berlaku)

- **Ilustrasi Proses**



Elemen volume

$$\Delta V = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot \Delta z$$

Neraca massa pada elemen volume

Rate of Mass Input – Rate of Mass Output = Rate of Mass Accumulation

$$F_A|_z - \left(F_A|_{z+\Delta z} + \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot \Delta z \cdot (-r_A) \right) = 0$$

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{F_A|_{z+\Delta z} - F_A|_z}{\Delta z} + \frac{\pi D^2 \cdot (-r_A)}{4} = 0$$

$$\frac{dF_A}{dz} = -\frac{\pi D^2 \cdot (-r_A)}{4}$$

$$\frac{dF_A}{dz} = -\frac{\pi D^2}{4} k \left(C_A - \frac{C_B C_C}{K} \right)$$

Stoikiometri Reaksi Kesetimbangan

Posisi	A	B	C	I	Total
x = 0	0,9 F ₀	-	-	0,1 F ₀	F ₀
reaksi	-0,9 F ₀ .x	0,9 F ₀ .x	0,9 F ₀ .x	-	
x = x	0,9 F ₀ (1-x)	0,9 F ₀ .x	0,9 F ₀ .x	0,1 F ₀	F ₀ (1+0,9x)

Berdasarkan stoikiometri reaksi diperoleh jumlah mol/waktu tiap komponen pada posisi x = x sebagai berikut:

$$F_A = 0,9 \cdot F_0 \cdot (1 - x)$$

$$F_B = 0,9 \cdot F_0 \cdot x$$

$$F_C = 0,9 \cdot F_0 \cdot x$$

$$F_I = 0,1 \cdot F_0$$

Diperoleh persamaan F_A sebagai fungsi posisi:

$$F_A = 0,9 \cdot F_0 (1 - x)$$

$$\frac{dF_A}{dx} = -0,9 \cdot F_0$$

$$dF_A = -0,9 \cdot F_0 \cdot dx$$

Nilai dF_A disubstitusikan ke persamaan $\frac{dF_A}{dz}$ sehingga diperoleh:

$$-0,9 \cdot F_0 \frac{dx}{dz} = -\frac{\pi D^2}{4} k \left(C_A - \frac{C_B C_C}{K} \right)$$

$$\frac{dx}{dz} = \frac{\pi D^2}{3,6 F_0} k \left(C_A - \frac{C_B C_C}{K} \right) \quad (1)$$

Dengan menggunakan persamaan gas ideal.

$$P_A \cdot F_V = F_A \cdot R \cdot T$$

$$C_A = \frac{F_A}{F_V} = \frac{P_A}{RT} = y_A \cdot \frac{P}{RT} = \frac{F_A}{F_T} \frac{P}{RT} = \frac{0,9 \cdot F_0 (1 - x)}{F_0 (1 + 0,9x)} \frac{P}{RT}$$

$$C_A = \frac{0,9 \cdot F_0 (1 - x)}{F_0 (1 + 0,9x)} \frac{P}{RT} \quad (2)$$

Secara analog, persamaan di atas juga dapat digunakan untuk komponen B dan C

$$C_B = \frac{0,9.F_0.x}{F_0(1+0,9x)} \frac{P}{RT} \quad (2)$$

$$C_C = \frac{0,9.F_0.x}{F_0(1+0,9x)} \frac{P}{RT} \quad (4)$$

Substitusi persamaan (2), (3), dan (4) ke dalam persamaan (1), diperoleh:

$$\frac{dx}{dz} = \frac{\pi}{3.6F_0} D^2 k \left(\frac{0.9F_0(1-x)}{F_0(1+0.9x)} \frac{P}{RT} - \frac{\left[\frac{0.9F_0(x)}{F_0(1+0.9x)} \frac{P}{RT} \right]^2}{\exp\left(\alpha + \frac{\beta}{T}\right)} \right)$$

Neraca panas pada elemen volume

Rate of Heat Input – Rate of Heat Output = Rate of Heat Accumulation

$$\Sigma F_i H_i|_z - \left(\Sigma F_i H_i|_{z+\Delta z} + U \cdot \pi \cdot D \cdot \Delta z (T - T_p) \right) = 0$$

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Sigma F_i H_i|_{z+\Delta z} - \Sigma F_i H_i|_z}{\Delta z} + U \cdot \pi \cdot D (T - T_p) = 0$$

$$\Sigma F_i \frac{dH_i}{dz} + \Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} + U \cdot \pi \cdot D (T - T_p) = 0$$

Dengan, $\frac{dH_i}{dz} = \frac{dH_i}{dT} \cdot \frac{dT}{dz} = C_p \frac{dT}{dz}$, maka:

$$\Sigma F_i C_p \frac{dT}{dz} + \Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} + U \cdot \pi \cdot D (T - T_p) = 0$$

Tinjau masing-masing PD:

$$\Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} = H_A \frac{dF_A}{dz} + H_B \frac{dF_B}{dz} + H_C \frac{dF_C}{dz} + H_I \frac{dF_I}{dz}$$

Inert tidak bereaksi sepanjang reaktor dan jumlah molnya akan selalu sama, sehingga:

$$\frac{dF_I}{dz} = 0$$

Persamaan menjadi:

$$\Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} = -0,9F_0 H_A \frac{dx}{dz} + 0,9F_0 H_B \frac{dF_B}{dz} + 0,9F_0 H_C \frac{dF_C}{dz}$$

$$\Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} = 0,9F_0 \frac{dx}{dz} (H_B + H_C - H_A)$$

$$\Sigma H_i \frac{dF_i}{dz} = 0,9F_0 \frac{dx}{dz} (\Delta H_R)$$

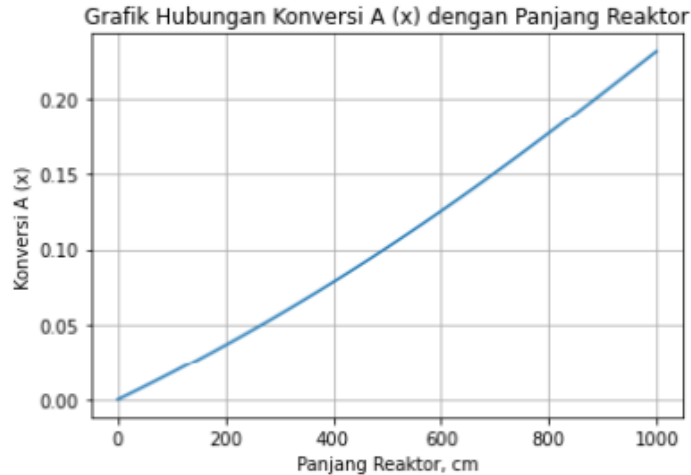
Sehingga diperoleh persamaan akhir sebagai berikut:

$$\Sigma F_i C_p \frac{dT}{dz} + 0,9 F_0 \Delta H_R \frac{dx}{dz} + U \cdot \pi \cdot D (T - T_p) = 0$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-U \cdot \pi \cdot D (T - T_p) - 0,9 \cdot F_0 \cdot \Delta H_R \frac{dx}{dz}}{F_A \cdot C_{pA} + F_B \cdot C_{pB} + F_C \cdot C_{pC} + F_I \cdot C_{pI}}$$

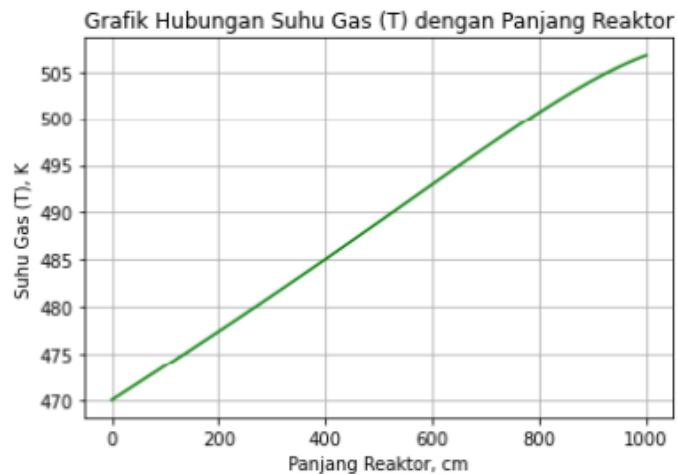
Dengan, $\Delta H_R = \Delta H_R^0 + (C_{pa} + C_{pc} - C_{pa})(T - T_{ref})$

Hasil



Gambar 1. Grafik Hubungan Konversi A (x) dengan Panjang Reaktor

Berdasarkan grafik hubungan konversi A (x) dengan panjang reaktor, dapat dilihat bahwa tren yang terbentuk adalah tren positif. Hal tersebut berarti bahwa semakin jauh posisi dari titik masuk reaktor ($z = 0$), maka konversi komponen A akan semakin tinggi.



Gambar 2. Grafik Hubungan Suhu Gas (T) dengan Panjang Reaktor

Berdasarkan grafik hubungan suhu gas (T) dengan panjang reaktor, dapat dilihat bahwa tren yang terbentuk adalah tren positif. Hal tersebut berarti bahwa semakin jauh posisi dari titik masuk reaktor ($z = 0$), maka suhu akan semakin tinggi. Hal tersebut dikarenakan reaksi bersifat eksotermis (menghasilkan panas), sehingga semakin tinggi reaksi yang terjadi maka suhu juga akan semakin meningkat.

Pemodelan Reaktor NANI dengan Reaksi Reversible

```
In [32]: #Nama : Liska Dewi Muktiarani
#NIM : 21/477837/TK/52633

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp as sol

#Data Perhitungan
U = 0.0085 #cal/(cm2.s.K)
F0 = 10 #mol/s
x0 = 0
P = 7 #atm
D = 35 #cm
L = 1000 #cm
Cpa = 20 #cal/mol/K
Cpb = 10 #cal/mol/K
Cpc = 15 #cal/mol/K
Cpi = 10 #cal/mol/K
dHr = -35000 #cal/mol
R = 82 #cm3atm/mol/K
A = 10000 #s-1
E_R = 6500 #K
alfa = -12.3
beta = 4400 #K
Tref = 273 #K
T0 = 470 #K
Tp = 421 #K

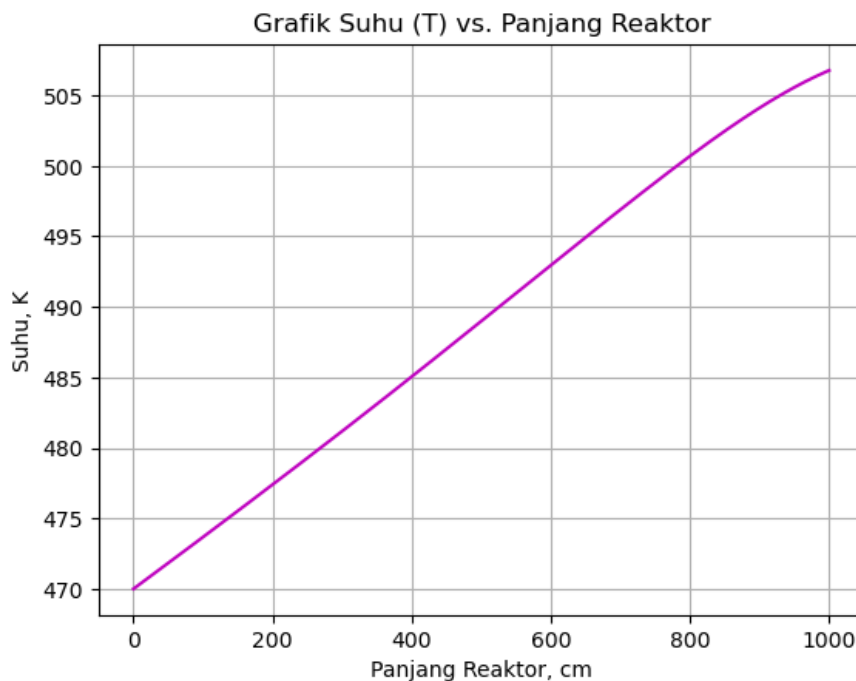
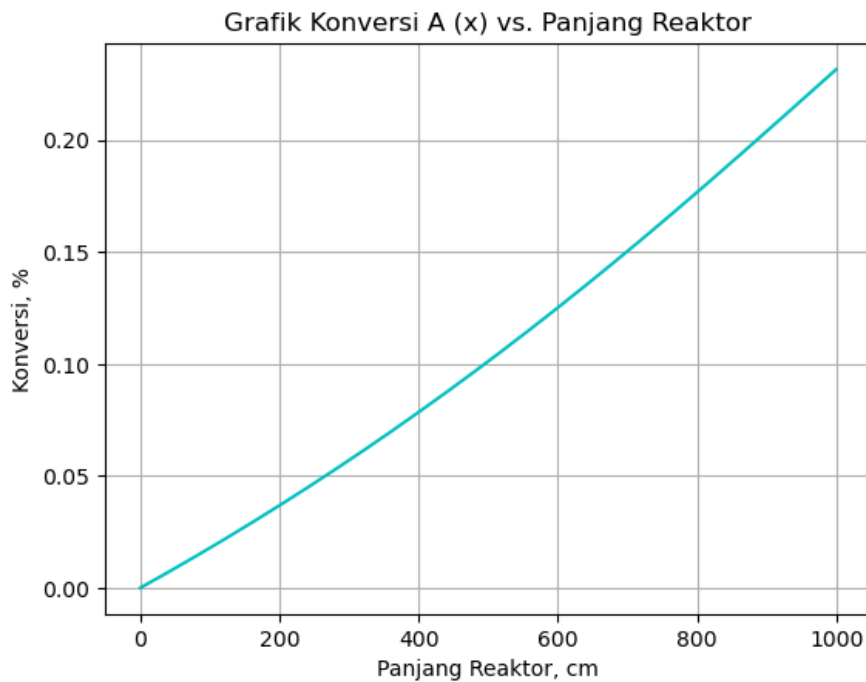
IC = [x0, T0]
zbound = [0, L]
n = 201
zspan = np.linspace(0, L, n)

def ODE(z, IC): variabel dalam PD (pembagian dalam PD), ditaruh di depan, sebelahnya IC.
    x = IC[0]
    T = IC[1]
    Fa = 0.9 * F0 * (1 - x)
    Fb = 0.9 * F0 * x
    Fc = 0.9 * F0 * x
    Fi = 0.1 * F0
    Ft = Fa + Fb + Fc + Fi
    Ca = Fa / Ft * P / (R * T)
    Cb = Fb / Ft * P / (R * T)
    Cc = Fc / Ft * P / (R * T)
    K = np.exp(alfa + beta / T)
    k = A * np.exp(-E_R / T)
    minra = k * (Ca - (Cb * Cc) / K)
    dHr = dHr + (Cpb + Cpc - Cpa) * (T - Tref)
    dxdz = np.pi * D ** 2 * minra / (3.6 * F0)
    dTdz = ((-U * np.pi * D * (T - Tp)) + (-dHr) * 0.9 * F0 * dxdz) / (Fa * Cpa + Fb * Cpb + Fc * Cpc + Fi * Cpi)
    dCdz = [dxdz, dTdz]
    return dCdz

solver = sol(ODE, zbound, IC, t_eval=zspan) template

#Plotting
plt.figure(0)
plt.plot(zspan, solver.y[0], '-c')
plt.grid()
plt.title('Grafik Konversi A (x) vs. Panjang Reaktor')
plt.xlabel('Panjang Reaktor, cm')
plt.ylabel('Konversi, %')
plt.show()

plt.figure(1)
plt.plot(zspan, solver.y[1], '-m')
plt.grid()
plt.title('Grafik Suhu (T) vs. Panjang Reaktor')
plt.xlabel('Panjang Reaktor, cm')
plt.ylabel('Suhu, K')
plt.show()
```



Hasil dan Pembahasan

Berdasarkan skema grafik pertama diperoleh hubungan antara konversi komponen A terhadap panjang reaktor. Plot menunjukkan tren positif yang berarti terjadi kenaikan konversi komponen A seiring bertambahnya posisi pada reaktor. Semakin jauh posisi dari titik masuk ($z = 0$), maka konversi A semakin tinggi.

Berdasarkan skema grafik kedua diperoleh hubungan antara suhu gas terhadap panjang reaktor. Plot menunjukkan tren positif yang artinya terjadi kenaikan suhu gas seiring dengan bertambahnya posisi dari titik awal gas masuk ($z = 0$) pada reaktor. Hal ini disebabkan reaksi reversibel yang terjadi bersifat eksotermis (menghasilkan panas) sehingga seiring bertambahnya posisi pada reaktor, yang artinya semakin tinggi jumlah A yang terkonversi sebagai produk, suhu juga akan semakin meningkat. Hal ini juga sesuai dengan data pada soal yang mana perubahan entalpi reaksi (dH_r) pada kasus bernilai negatif sehingga reaksi bersifat eksotermis.

Hasil konversi A dan persebaran suhu terhadap posisi reaktor dapat dilihat pada tabel berikut:

```
In [33]: #Tabel
n = 31
zspan = np.linspace(0,L,n)
solver2 = sol(ODE,t_span=[0,L],y0=[x0,T0],t_eval=zspan).y
xspan = solver2[0]
Tspan = solver2[1]
```



```

Fa = (1-xspan)*F0*0.9
Fb = xspan*F0*0.9
Fc = xspan*F0*0.9
Fi = F0*0.1*np.ones(n)
Ft = Fa+Fb+Fc+Fi

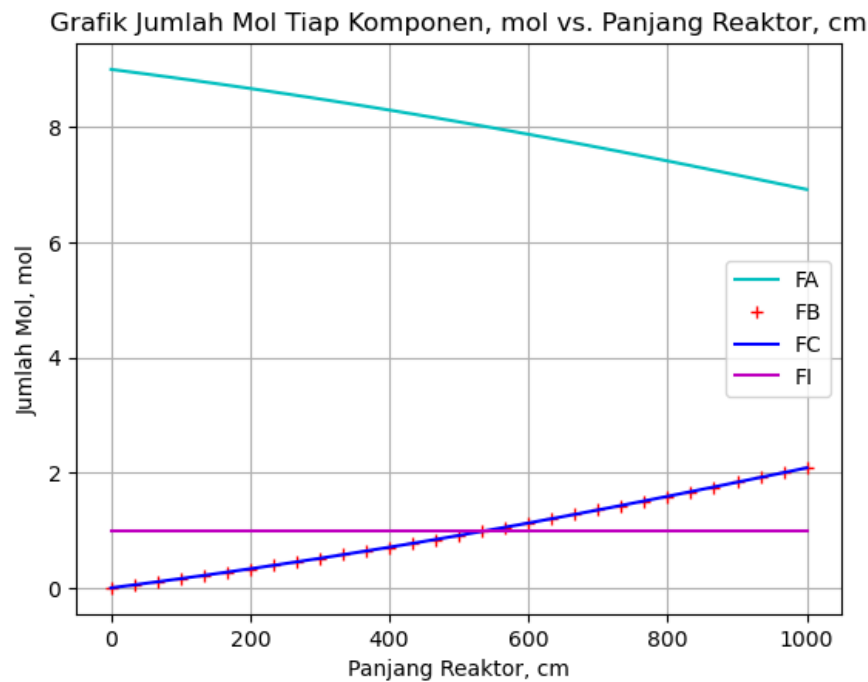
header = ['Panjang Reaktor (z), cm', 'Konversi A (x), %', 'Suhu (T), K']
tabel = np.zeros([len(zspan),3])
tabel[:,0] = zspan
tabel[:,1] = xspan*100
tabel[:,2] = Tspan
garis = ('_')*63
print(garis)
print('{:^23s} | {:^17s} | {:^15s} |'.format(*header))
print(garis)
for baris in tabel:
    print('{:^23.2f} | {:^17.2f} | {:^15.2f} |'.format(*baris))
print(garis)

plt.figure(2)
plt.plot(zspan,Fa,'c',label='FA')
plt.plot(zspan,Fb,'r+',label='FB')
plt.plot(zspan,Fc,'b',label='FC')
plt.plot(zspan,Fi,'m',label='FI')
plt.legend(loc='center right')
plt.grid()
plt.xlabel('Panjang Reaktor, cm')
plt.ylabel('Jumlah Mol, mol')
plt.title('Grafik Jumlah Mol Tiap Komponen, mol vs. Panjang Reaktor, cm')

```

Panjang Reaktor (z), cm	Konversi A (x), %	Suhu (T), K
0.00	0.00	470.00
33.33	0.58	471.22
66.67	1.17	472.44
100.00	1.78	473.67
133.33	2.40	474.91
166.67	3.03	476.15
200.00	3.68	477.40
233.33	4.34	478.65
266.67	5.01	479.91
300.00	5.70	481.19
333.33	6.40	482.47
366.67	7.12	483.75
400.00	7.84	485.05
433.33	8.59	486.36
466.67	9.34	487.67
500.00	10.12	488.99
533.33	10.90	490.32
566.67	11.70	491.64
600.00	12.51	492.97
633.33	13.34	494.29
666.67	14.18	495.60
700.00	15.03	496.90
733.33	15.90	498.19
766.67	16.77	499.46
800.00	17.66	500.70
833.33	18.56	501.89
866.67	19.47	503.04
900.00	20.38	504.12
933.33	21.30	505.11
966.67	22.23	506.00
1000.00	23.15	506.77

Out[33]: Text(0.5, 1.0, 'Grafik Jumlah Mol Tiap Komponen, mol vs. Panjang Reaktor, cm')



Berdasarkan perhitungan diperoleh distribusi suhu dan konversi A pada reaktor NANI dengan $L = 1000$ cm seperti yang tertera pada tabel diatas dengan **konversi A keluar reaktor sebesar 23.15% dan suhu keluar reaktor sebesar 506.77 K**. Dapat disimpulkan juga berdasarkan grafik jumlah mol terhadap panjang reaktor bahwa seiring dengan bertambahnya posisi pada reaktor maka konversi A (reaktan) menjadi B dan C (produk) semakin meningkat dan jumlah mol A pada reaktor semakin menurun bersamaan dengan meningkatnya jumlah mol B dan C. Inert tidak bereaksi dan tidak terjadi pertambahan jumlah mol selama reaksi sehingga jumlah mol inert selama reaksi tetap sama (kurva linier).

Pada umumnya panjang reaktor (L) berpengaruh terhadap laju konversi, sehingga dapat dilakukan perbandingan konversi yang menggunakan reaktor dengan panjang $L = 1000$ cm dengan konversi yang dihasilkan reaktor dengan panjang $L = 4000$ cm, sebagai berikut:

```
In [34]: L2 = 4000
n = 201
zspan2 = np.linspace(0,L2,n)
zbound2=[0,L2]
solver3=sol(ODE,zbound2,IC,t_eval=zspan2)

#Plot
plt.figure(0)
plt.plot(zspan2,solver3.y[0],'-c')
plt.grid()
plt.title('Grafik Konversi A (x) vs. Panjang Reaktor')
plt.xlabel('Panjang Reaktor, cm')
plt.ylabel('Konversi, %')
plt.show()

plt.figure(1)
plt.plot(zspan2,solver3.y[1],'-m')
plt.grid()
plt.legend()
plt.title('Grafik Suhu (T) vs. Panjang Reaktor')
plt.xlabel('Panjang Reaktor, cm')
plt.ylabel('Suhu, K')
plt.show()

#Tabel
n = 51
zspan = np.linspace(0,L2,n)
solver4 = sol(ODE,t_span=[0,L2],y0=[x0,T0],t_eval=zspan).y
xspan = solver4[0]
Tspan = solver4[1]

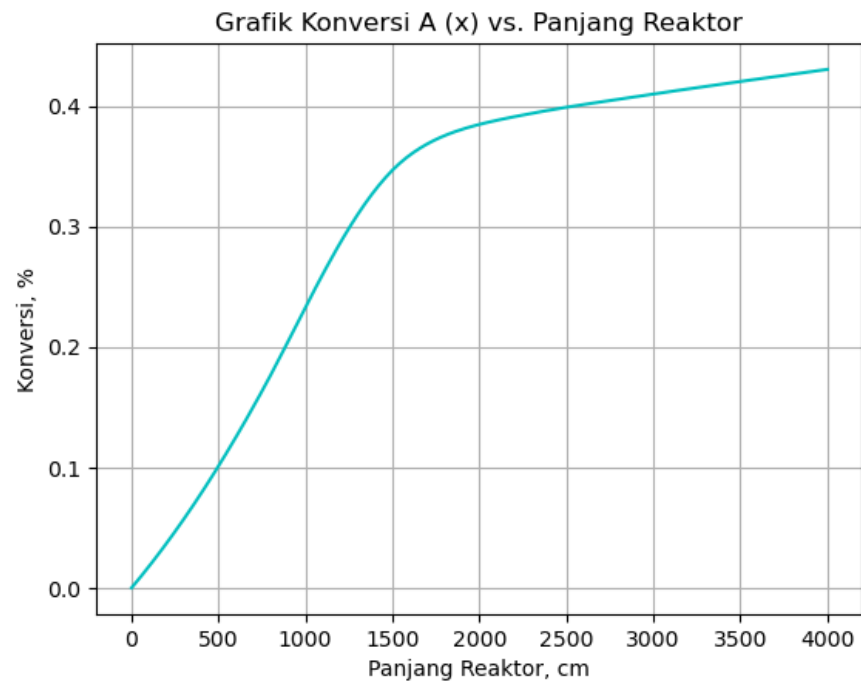
Fa = (1-xspan)*F0*0.9
Fb = xspan*F0*0.9
Fc = xspan*F0*0.9
Fi = F0*0.1*np.ones(n)
Ft = Fa+Fb+Fc+Fi

header = ['Panjang Reaktor (z), cm','Konversi A (x), %','Suhu (T), K']
tabel = np.zeros([len(zspan),3])
tabel[:,0] = zspan
```

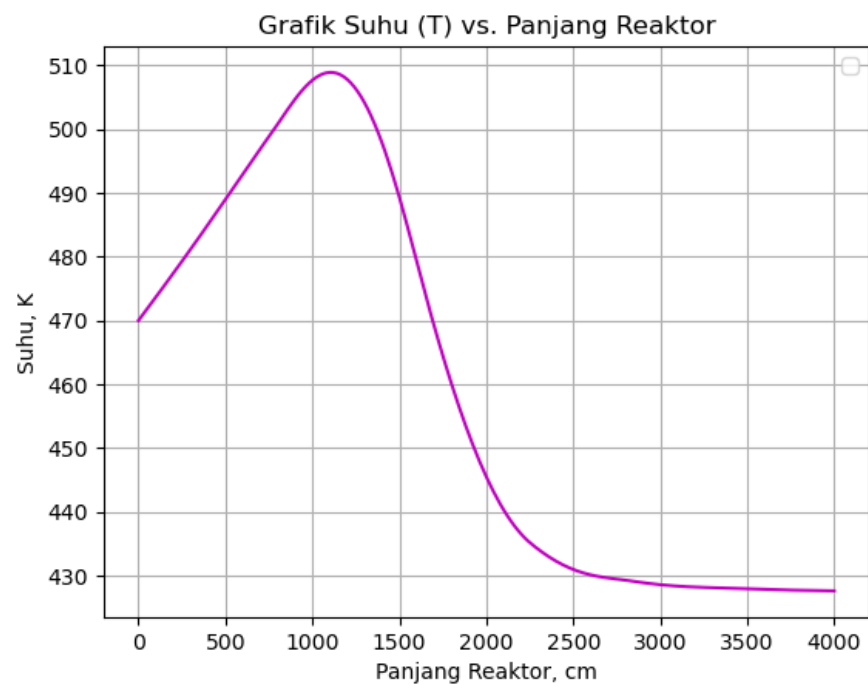
```

tabel[:,1] = xspan*100
tabel[:,2] = Tspan
garis = ('_')*63
print(garis)
print('{:^23s} | {:^17s} | {:^15s} |'.format(*header))
print(garis)
for baris in tabel:
    print('{:^23.2f} | {:^17.2f} | {:^15.2f} |'.format(*baris))
print(garis)

```



No artists with labels found to put in legend. Note that artists whose label start with an underscore are ignored when legend() is called with no argument.



Panjang Reaktor (z), cm	Konversi A (x), %	Suhu (T), K
0.00	0.00	470.00
80.00	1.42	472.94
160.00	2.91	475.90
240.00	4.47	478.90
320.00	6.12	481.95
400.00	7.84	485.05
480.00	9.65	488.20
560.00	11.54	491.38
640.00	13.51	494.55
720.00	15.55	497.68
800.00	17.67	500.79
880.00	19.90	503.95
960.00	22.17	506.65
1040.00	24.42	508.42
1120.00	26.59	508.89
1200.00	28.65	507.82
1280.00	30.55	505.09
1360.00	32.25	500.69
1440.00	33.73	494.73
1520.00	34.96	487.42
1600.00	35.93	479.18
1680.00	36.69	471.11
1760.00	37.29	463.59
1840.00	37.77	456.75
1920.00	38.16	450.70
2000.00	38.48	445.51
2080.00	38.75	441.23
2160.00	39.00	437.88
2240.00	39.23	435.43
2320.00	39.44	433.70
2400.00	39.65	432.29
2480.00	39.85	431.20
2560.00	40.04	430.42
2640.00	40.21	429.90
2720.00	40.39	429.57
2800.00	40.56	429.29
2880.00	40.74	428.98
2960.00	40.91	428.70
3040.00	41.08	428.49
3120.00	41.25	428.33
3200.00	41.42	428.21
3280.00	41.58	428.13
3360.00	41.75	428.07
3440.00	41.91	427.98
3520.00	42.08	427.91
3600.00	42.24	427.84
3680.00	42.40	427.78
3760.00	42.56	427.73
3840.00	42.72	427.69
3920.00	42.88	427.66
4000.00	43.04	427.62

Kesimpulan

Berdasarkan variasi percobaan diperoleh bahwa reaktor dengan panjang 4 m pada mulanya memiliki profil konversi A yang mirip dengan reaktor dengan panjang 1 m. Akan tetapi, dapat dilihat pada **posisi 1120 m** dari titik $z = 0$ suhu mencapai titik tertinggi sebesar **508.89 K (titik hotspot)** sebelum perlahan mulai menurun. Pada posisi tersebut dapat dilihat juga bahwa laju konversi A semakin menurun walaupun masih terjadi konversi A menjadi produk. Adanya penurunan suhu menyebabkan konversi A setelah posisi 1120 m menjadi tidak signifikan, sehingga panas yang dihasilkan dari reaksi eksotermis menurun dan suhu keluar reaktor menjadi lebih rendah yaitu sebesar **427.62 K (seperti pada tabel)**. Walaupun begitu, penambahan panjang reaktor dapat digunakan untuk optimasi konversi A menjadi produk. Pada panjang reaktor 4 m persen **konversi A keluar reaktor menjadi 43.04 %**.

In []: