

PEMANFAATAN METODA NEWTON-RAPHSON DALAM PERANCANGAN REAKTOR ALIR TANGKI BERPENGADUK

Sumarni, Ani Purwanti

Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri
Institut Sains & Teknologi AKPRIND Yogyakarta
Jl. Kalisahak No. 28 Balapan Yogyakarta 55222

ani4wanti@gmail.com

ABSTRACT

The design of continuous stirred tank reactor (CSTR) is to determine volume of the reactor needed to achieve a certain conversion. In a steady state isothermal process, which there are no volume and concentration change toward the time, mass balance and rate of reaction equation can be formulated.

In reversible reaction of isomerization of normal-butane to iso-butane, it can be determined the correlation between reaction conversion and temperature and the heat balance which is show the correlation between conversion and temperature from the data of heat reaction and equilibrium constant. Based on the thermodynamic equilibrium and conversion, the equilibrium conversion and temperature of process can be calculated by using the Newton-Raphson method.

In the design of CSTR, optimization of the number of tank series is important to know the total cost of reactor. The volume of each reactor in the four tanks in series is calculated.

In the reaction equilibrium of the formation iso-butane from isomerization of normal-butane with the feed temperature is 330 K and the equilibrium temperature is 360.99K, the conversion about 72.62% was obtained. For conversion up to 67.8% in the isothermal condition ($T=330$ K), with the assumption that the reaction is the first order of normal-butane (A) and first order of iso-butane (B), the calculated volume of each reactor in one reactor, two, three, and four reactors in series is 7.817,5 gallon, 1.897,5 gallon, 1.016,0 gallon, and 569,5 gallon, respectively.

Keywords : reactor volume, conversion, Newton-Raphson method

INTISARI

Perancangan reaktor alir tangki berpengaduk pada umumnya dimaksudkan untuk menentukan volume reaktor yang diperlukan agar reaksi yang terjadi dapat berlangsung sesuai dengan konversi yang diinginkan. Untuk proses yang berlangsung secara isotermal dan telah tercapai kondisi *steady*, yaitu tidak ada perubahan volume maupun konsentrasi terhadap waktu, dapat disusun neraca massa dan persamaan kecepatan reaksi maupun neraca panas pada reaktor tersebut.

Untuk reaksi bolak-balik (*reversible*) misal reaksi isomerisasi normal-butana menjadi iso-butana, dengan mengetahui panas reaksi sebagai fungsi suhu dan konstanta kesetimbangan, dapat disusun persamaan yang menyatakan hubungan antara konversi (termodinamika) dengan suhu dan disusun neraca panas untuk mendapatkan persamaan yang menyatakan hubungan konversi dengan suhu. Dengan menyamakan konversi berdasar kesetimbangan (termodinamika) dengan konversi (neraca panas), maka besarnya konversi kesetimbangan maupun suhu operasi dapat ditentukan dengan metoda Newton-Raphson.

Pada perancangan reaktor alir tangki berpengaduk dilakukan perhitungan optimasi jumlah reaktor yang diperlukan agar memberikan total harga reaktor relatif paling kecil. Untuk ini dihitung volume reaktor apabila reaksi dijalankan di dalam satu reaktor atau beberapa (dua, tiga, empat) reaktor yang disusun seri. Volume reaktor dapat dihitung apabila konversi keluar reaktor telah dihitung, dalam hal ini dapat digunakan metoda Newton-Raphson dengan bantuan program excel.

Berdasar suhu umpan ($T = 330$ K), pada keadaan kesetimbangan reaksi isomerisasi normal-butana membentuk iso-butana diperoleh konversi terhadap normal-butana (x_e) sebesar 72,62% dengan suhu kesetimbangan 360,99 K. Untuk mencapai konversi sebesar 67,8% pada kondisi isotermal ($T = 330$ K), dengan menganggap reaksi orde satu terhadap normal-butana (A) dan order satu terhadap iso-butana (B), dapat ditentukan volume masing-masing reaktor yaitu satu reaktor, $V = 7.817,5$ gallon, dua reaktor, $V = 1.897,5$ gallon, tiga reaktor, $V = 1.016,0$ gallon, empat reaktor, $V = 569,5$ gallon. Dengan memperhitungkan harga berdasarkan volume reaktor dan jumlah reaktor yang digunakan, dipilih jumlah reaktor yang digunakan sebanyak tiga buah reaktor, mengingat pada kondisi ini memberikan harga termurah.

Kata kunci : volume reaktor, konversi, metoda Newton-Raphs

PENDAHULUAN

Reaktor sebagai tempat berlangsungnya suatu reaksi kimia, sering dinyatakan sebagai pusat suatu proses kimia. Berbagai jenis reaktor dapat dibedakan atas dasar bentuk reaktor yang digunakan, proses yang berlangsung, atau kondisi operasinya. Reaktor alir tangki berpengaduk (RATB) atau dikenal sebagai *continuous stirred tank reactor (CSTR)* merupakan salah satu jenis reaktor, umumnya berbentuk bejana dan bekerja secara kontinu (alir), dan banyak digunakan untuk reaksi-reaksi homogen fase cair tanpa katalis maupun dengan katalis, serta reaksi yang terjadi di dalamnya berlangsung secara isothermal.

Misal ditinjau reaksi bolak-balik (*reversible*) homogen fase cair ($A \leftrightarrow B$), kecepatan reaksi dianggap orde satu terhadap A dan orde satu terhadap B, sehingga persamaan kecepatan reaksi dapat dinyatakan (Levenspile, 1999):

$$r_A = k(C_A - C_B/K_c) \quad \dots(1)$$

dengan:

r_A = kecepatan reaksi A, $\text{kmol/m}^3/\text{j}$.

k = konstante kecepatan reaksi, jam^{-1} .

C_A = konsentrasi A keluar reaktor, kmol/m^3 .

C_B = konsentrasi B keluar reaktor, kmol/m^3 .

K_c = konstante kesetimbangan.

Reaksi yang berlangsung pada fase cair umumnya dilaksanakan di dalam suatu reaktor alir tangki berpengaduk dan prosesnya berlangsung secara isothermal. Pada kondisi isothermal atau suhu tetap, suhu umpan sama dengan suhu larutan di dalam reaktor maupun suhu larutan keluar reaktor. Untuk mempertahankan kondisi tersebut umumnya reaktor dilengkapi dengan pendingin (reaksi eksotermis) atau pemanas (reaksi endotermis). Dalam perancangan reaktor selain persamaan kecepatan reaksi yang terjadi, perlu disusun persamaan neraca massa maupun neraca panas di reaktor tersebut.

Untuk dapat menyusun neraca massa ditetapkan besaran kecepatan aliran volumetrik umpan masuk ke dalam reaktor (F_{V0}), konsentrasi A dalam umpan (C_{A0}) dan konsentrasi B dalam umpan (C_{B0}), serta densitas umpan (ρ_0). Kecepatan aliran volumetrik hasil keluar reaktor (F_{V1}), konsentrasi A keluar reaktor (C_{A1}) dan konsentrasi B (C_{B1}), serta densitas hasil (ρ_1). Adapun bagan reaktor alir tangki berpengaduk dengan besaran-besaran

tersebut di atas pada kondisi isothermal (suhu tetap T) tertera pada Gambar 1.

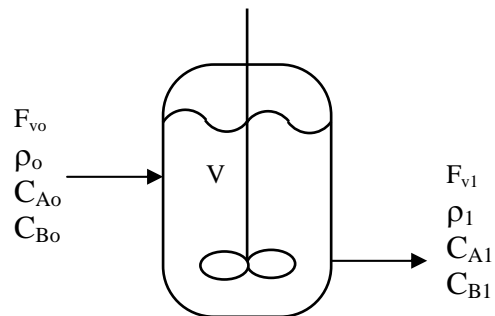
Apabila proses yang terjadi berlangsung pada keadaan *steady*, yaitu tidak terjadi perubahan volume maupun komposisi terhadap waktu, maka kecepatan aliran volumetrik dinyatakan tetap F_V .

$$F_{V0} = F_{V1} = F_V \quad \dots\dots (2)$$

Demikian pula apabila densitas larutan umpan dianggap sama dengan densitas produk dan komposisi larutan di dalam reaktor sama dengan komposisi keluar reaktor, maka:

$$\rho_0 = \rho_1 = \rho \quad \dots\dots (3)$$

$$C_A = C_{A1} \text{ dan } C_B = C_{B1} \quad \dots\dots (4)$$



Gambar 1. RATB Isothermal

Dapat disusun neraca massa untuk komponen A di dalam reaktor (Froment and Bischoff, 1979):

$$F_{V0} \cdot C_{A0} - F_{V1} \cdot C_{A1} - r_A \cdot V = 0 \quad \dots\dots (5)$$

dengan:

F_V = kecepatan aliran volumetrik

C_{A0} = konsentrasi A dalam umpan masuk

reaktor

C_{A1} = konsentrasi A keluar reaktor

r_A = kecepatan reaksi A

Dengan mensubstitusikan persamaan (1) ke dalam persamaan (5), diperoleh persamaan:

$$F_{V0} \cdot C_{A0} - F_{V1} \cdot C_{A1} - k(C_A - C_B/K_c) V = 0 \quad \dots\dots(6)$$

$$\Theta = (V/F_V) = (C_A - C_{A0}) / \{k(C_A - C_B/K_c)\} \quad \dots\dots (7)$$

Jika konversi A (x_A), $C_A = C_{A0}(1-x_A)$ dan $C_B = C_{A0}x_A$,

maka persamaan (7) dapat dinyatakan:

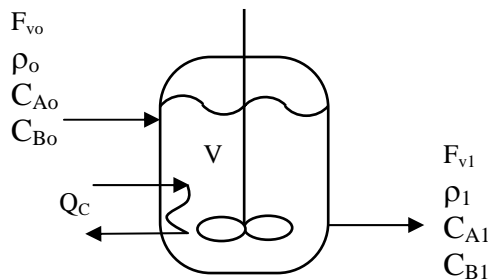
$$\Theta = (V/F_V) = (C_{A0}x_A) / \{k(C_{A0}(1-x_A) - C_{A0}x_A/K_c)\}$$

$$\Theta = (V/F_V) = (x_A) / \{k((1-x_A) - x_A/K_c)\} \quad \dots\dots (8)$$

Untuk proses yang berlangsung isothermal dan digunakan satu reaktor alir tangki berpengaduk, waktu tinggal (Θ) atau volume reaktor (V) dapat dihitung langsung dari persamaan (8) apabila diketahui kecepatan aliran volumetrik (F_V), konstante

kecepatan reaksi (k), konstanta kesetimbangan (K_c), dan konversi (x_A). Namun dalam perancangan reaktor alir tangki berpengaduk lazim digunakan lebih dari satu reaktor yang disusun seri dengan volume masing-masing reaktor atau waktu tinggal (θ) sama. Berdasar persamaan neraca massa dan persamaan reaksi pada masing-masing reaktor untuk memperoleh konversi akhir tertentu, volume reaktor atau waktu tinggal dapat ditentukan apabila konversi keluar dari masing-masing reaktor diketahui; perhitungannya dapat dilakukan dengan metoda Newton-Raphson (penentuan akar persamaan non-linier) dengan menggunakan bantuan program excel.

Pada penggunaan satu reaktor untuk proses non-isotermal, nilai konstante kecepatan reaksi (k) dan konstante kesetimbangan (K_c) tidak tetap (sebagai fungsi suhu), sehingga persamaan (8) di atas merupakan persamaan aljabar non-linier. Penentuan nilai x_A secara analitis sangat kompleks dan panjang, namun dapat diselesaikan secara numeris dengan menggunakan metoda Newton-Raphson. Misal untuk reaksi eksotermis, sebagian panas yang dihasilkan diambil dengan menggunakan medium pendingin dan sisanya dimanfaatkan untuk menaikkan suhu di dalam reaktor (bagan tertera pada Gambar 2). Untuk menentukan waktu tinggal (θ) atau volume reaktor (V), selain persamaan reaksi dan persamaan neraca massa, diperlukan penyusunan persamaan neraca panas di dalam reaktor. Dengan menganggap kondisi proses telah berlangsung *steady* (yaitu pada setiap waktu tidak ada perubahan volume, konsentrasi hasil, dan suhu keluar reaktor), dapat disusun neraca massa dan neraca panas di dalam reaktor.



Gambar 2. RATB non-isotermal

Dalam kasus ini (proses non-isotermal) neraca massa untuk komponen A, yaitu persamaan (5) sampai (8) sama dengan semula (proses isotermal). Apabila suhu umpan (T_o) dan suhu larutan keluar reaktor

(T), maka dapat disusun neraca panas di dalam reaktor non-isotermal (Fogler, 2006) sebagai berikut:

$$\rho \cdot F_V \cdot C_p (T_o - T_{ref}) - \rho \cdot F_V \cdot C_p (T - T_{ref}) + Q_R + Q_C = 0 \quad \text{.....(9)}$$

Dengan Q_R merupakan panas yang ditimbulkan karena reaksi (satuan panas/waktu), sedang Q_C merupakan panas yang diambil dengan menggunakan medium pendingin, dan T_{ref} merupakan suhu *reference*.

Panas yang terbentuk karena reaksi, Q_R :

$$Q_R = (-\Delta H_R) \cdot r_A \cdot V = (-\Delta H_R) \cdot F_{A0} \cdot x_A \quad \text{.....(10)}$$

$$Q_R = \{-\Delta H_R^o + \Delta C_p (T - T_o)\} \cdot F_{A0} \cdot x_A \quad \text{.....(11)}$$

Besaran (ΔH_R^o) disebut sebagai panas reaksi standar pada suhu *reference* (satuan panas/mol); untuk reaksi bersifat eksotermis (menghasilkan panas) ΔH_R bernilai negatif dan bernilai positif apabila reaksi bersifat endotermis (memerlukan panas).

Dengan menganggap densitas larutan (ρ) dan kapasitas panas larutan rata-rata (C_p) tetap, maka persamaan yang tersusun untuk RATB non-isotermal:

$$F_V \cdot (C_{A0} - C_A) - k \{C_A - C_B / K_c\} V = 0 \quad \text{.....(12)}$$

$$\rho \cdot F_V \cdot C_p (T_o - T) + (-\Delta H_R) \cdot F_{A0} \cdot x_A + Q_C = 0 \quad \text{.....(13)}$$

Konstante kesetimbangan dari termodinamika (K_c) dan konstante kecepatan reaksi merupakan fungsi suhu (Levenspile, 1999). Konstante kecepatan reaksi sesuai dengan persamaan Arrhenius:

$$k = A \cdot \exp(-E/RT) \quad \text{.....(14)}$$

Nilai konstante kesetimbangan dari termodinamika (K_c) sebagai fungsi suhu:

$$d(\ln K)/dT = \Delta H_R / RT^2 \quad \text{.....(15)}$$

Dalam kasus RATB non-isotermal di sini diperoleh dua persamaan aljabar dengan dua variabel yaitu C_A dan T , masing-masing berupa persamaan non-linier dan memuat kedua variabel, yang sulit untuk dapat diselesaikan dengan cara substitusi untuk direduksi menjadi satu bentuk persamaan. Penyelesaian persamaan dapat dilakukan dengan metoda Newton-Raphson, yaitu penentuan akar persamaan non-linier untuk multi variabel (Constantinides and Mostoufi, 1999).

Apabila reaksi berlangsung pada kondisi adiabatik ($Q_C = 0$), maka persamaan (9) menjadi:

$$\rho \cdot F_V \cdot C_p (T - T_o) = (-\Delta H_R) \cdot F_{A0} \cdot x_A \quad \text{.....(16)}$$

$$T = T_o + \{(-\Delta H_R) \cdot F_{A0} \cdot x_A / m \cdot C_p\} \quad \text{.....(17)}$$

atau

$$T = T_o + \{(-\Delta H_R) \cdot F_{A0} \cdot x_A / \Sigma(F_i C_{p_i})\} \quad \text{.....(18)}$$

dengan

$$\Sigma(F_i C_{p_i}) = F_A C_{p_A} + F_B C_{p_B} \quad \text{.....(19)}$$

Nilai kapasitas panas (C_p) pada persamaan (16) mempunyai satuan (J/kg/K) yang berbeda dengan C_p pada persamaan (17) dengan satuan (J/kmol/K).

TINJAUAN PUSTAKA

Bentuk umum persamaan non-linier dapat dinyatakan:

$$f(x) = 0 \quad \dots\dots(20)$$

dengan variabel x berada pada interval nilai tertentu (a sampai b).

Ada beberapa cara untuk menentukan akar persamaan non-linier tersebut, antara lain dapat dilakukan dengan metoda Bisection, metoda Newton-Raphson, atau metoda Secant.

Penentuan akar persamaan non-linier (*single variable root*) dengan metoda Newton-Raphson dilakukan dengan menggunakan satu titik awal x_0 . Apabila nilai x merupakan salah satu akar persamaan non-linier, maka nilai $x = x_0 + \Delta x$ dan nilai Δx dapat ditentukan berdasarkan persamaan ekspansi deret Taylor (Jenson and Jeffreys, 1983) sebagai berikut:

$$f(x) = f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + (\Delta x/1!) f'(x_0) + \dots\dots + (\Delta x/n!) f^n(x_0) \quad \dots\dots(21)$$

Nilai Δx yang paling sederhana dihitung dengan mengambil dua suku pada deret Taylor,

$$f(x) = f(x_0 + \Delta x) = f(x_0) + (\Delta x/1!) f'(x_0) = 0 \quad \dots\dots(22)$$

$$\Delta x = - (f(x_0)/ f'(x_0)). \quad \dots\dots(23)$$

Nilai x yang baru (x_n) dapat ditentukan sebagai berikut:

$$x_n = x_0 + \Delta x$$

$$x_n = x_0 - (f(x_0)/ f'(x_0)). \quad \dots\dots(24)$$

Berdasar persamaan (24) tersebut, penentuan nilai x (atau x_n) sebagai akar persamaan non-linier ($f(x) = 0$) dengan metoda Newton-Raphson dapat dilakukan dengan urutan sebagai berikut (Constantinides and Mostoufi, 1999):

- mula-mula ditentukan titik awal x_0 .
- selanjutnya dilakukan iterasi berdasar persamaan; $x_{n+1} = x_n - (f(x_n)/ f'(x_n))$, dengan $n = 0, 1, 2, 3, \dots, n$.
- perhitungan diakhiri setelah diperoleh nilai x_{n+1} mendekati x_n , atau $[x_{n+1} - x_n]/ x_n \leq \epsilon$, dengan ϵ sebagai parameter toleransi kesalahan yang diijinkan (cukup kecil), misal diambil nilai $\epsilon = 0,001$.

Pada suatu kondisi perhitungan dalam penentuan akar persamaan non-linier dengan metoda Newton-Raphson dijumpai adanya kondisi *convergence* atau *divergen*. Pada kondisi *convergence* penentuan x dengan

bantuan program akan mudah diperoleh, namun pada kondisi *divergen* tidak memungkinkan untuk memperoleh hasil (nilai x menjauh dari yang diharapkan). Untuk mengatasi kondisi tersebut, dilakukan langkah-langkah perhitungan yang lebih akurat berdasarkan persamaan ekspansi deret Taylor dengan memperhitungkan sampai suku ketiga, sehingga diperoleh persamaan orde dua.

Dari deret Taylor, diperoleh :

$$\frac{f''(X_0)}{2!} (\Delta x)^2 + f'(x_0).(\Delta x) + f(x_0) = 0 \dots\dots(25)$$

dengan $\Delta x = x - x_0$

Persamaan tersebut merupakan persamaan kuadrat dalam Δx , sehingga nilai Δx dapat ditentukan berdasar persamaan:

$$(\Delta x)_{1,2} = \frac{-f'(x_0) \pm \sqrt{(f'(x_0))^2 - 2f''(x_0).f(x_0)}}{f''(x_0)} \quad \dots\dots(26)$$

Dengan persamaan tersebut dapat dihitung nilai Δx dengan dua kemungkinan, yaitu:

a).

$$X_{n+1}^{(-)} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)} - \frac{\sqrt{((f'(x_n))^2 - 2f''(x_n).f(x_n))}}{f''(x_n)} \quad \dots\dots(27)$$

b).

$$X_{n+1}^{(+)} = x_n - \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)} + \frac{\sqrt{((f'(x_n))^2 - 2f''(x_n).f(x_n))}}{f''(x_n)} \quad \dots\dots(28)$$

Reaksi isomerisasi normal butana ($n\text{-C}_4\text{H}_{10}$) membentuk isobutana ($i\text{-C}_4\text{H}_{10}$) berlangsung pada fase cair dan bersifat eksotermis, dilakukan di dalam reaktor alir tangki berpengaduk, menggunakan katalis cairan dan konstanta kecepatan reaksi (k) pada suhu 360K sebesar $31,1 \text{ jam}^{-1}$. Misal, ingin ditentukan volume reaktor yang diperlukan untuk berlangsungnya reaksi tersebut di atas untuk menghasilkan isobutana sebanyak 100.000 gal/day atau 163 kmol/jam. Umpam masuk pada suhu 330 K dengan komposisi 90% mol normal-butana dan 10% iso-pentana. Proses yang terjadi dapat berlangsung secara isothermal atau adiabatik, dengan menggunakan sebuah reaktor alir tangki berpengaduk atau beberapa reaktor alir tangki berpengaduk yang disusun seri dengan volume masing-masing reaktor

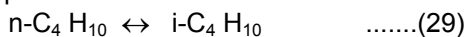
sama besar (Fogler, 1999). Data yang diketahui: $\Delta H_R^\circ = -6.900 \text{ J/mol}$ n-butana, energi aktivasi, $E = 65,7 \text{ kJ/mol}$, konstanta kesetimbangan pada 60°C (333K), $K_c = 3,03$, konsentrasi n-butana mula-mula, $C_{A0} = 9,3 \text{ kmol/m}^3$, kapasitas panas untuk n-butana, iso-butana, dan iso-pentana berturut-turut $C_{p_{nB}} = 141 \text{ J/mol/K}$, $C_{p_{iB}} = 141 \text{ J/mol/K}$, dan $C_{p_{iP}} = 161 \text{ J/mol/K}$.

PEMBAHASAN

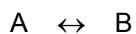
Untuk dapat menghitung volume yang diperlukan untuk berlangsungnya suatu reaksi di dalam sebuah reaktor alir tangki berpengaduk atau beberapa buah reaktor yang disusun seri, perlu disusun persamaan kecepatan reaksi dan neraca massa di sekitar reaktor. Volume reaktor (V) dapat ditentukan dengan jalan menghitung waktu tinggal (Θ) yang diperlukan untuk berlangsungnya reaksi. Dengan menggabungkan persamaan kecepatan reaksi dengan neraca massa, dapat ditentukan konversi reaksi, sehingga waktu tinggal (Θ) untuk masing-masing reaktor dapat diketahui.

Apabila proses berlangsung secara adiabatik, akan terjadi perubahan suhu yang mengakibatkan konstante kecepatan reaksi tidak tetap melainkan fungsi suhu sesuai dengan persamaan Arrhenius, makin besar suhu maka konstante kecepatan reaksi makin besar pula. Untuk reaksi bolak-balik (*irreversible*), konversi maksimum terjadi pada saat kesetimbangan tercapai, sedang pada umumnya konversi yang mungkin terjadi dapat dianggap sebesar 95% dari konversi kesetimbangan (Fogler, 2006). Konstanta kesetimbangan (K_c) tergantung suhu (fungsi suhu). Untuk mengetahui perubahan suhu pada proses adiabatik, selain diperlukan penyusunan neraca massa dan persamaan kecepatan reaksi juga diperlukan penyusunan persamaan neraca panas.

Reaksi isomerisasi n-butana membentuk iso-butana (Fogler, 2006) berlangsung bolak-balik pada fase cair:



Atau dapat disederhanakan



Persamaan kecepatan reaksi:

$$(-r_A) = k (C_A - C_B/K_c) \quad \dots\dots(30)$$

dengan:

C_A = konsentrasi normal butana, kmol/m^3 .

C_B = konsentrasi isobutana, kmol/m^3

k = konstante kecepatan reaksi, $\text{m}^3/\text{J.kmol}$

Berdasar persamaan Arrhenius, apabila diketahui konstante kecepatan reaksi pada suhu T_1 (disebut k_1), maka dapat dituliskan hubungan konstanta kecepatan reaksi sebagai fungsi suhu:

$$k = k_1 \exp \left(\frac{E}{R} \right) \left\{ \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right\} \quad \dots\dots(31)$$

Dari data diketahui pada suhu 360°C harga konstante kecepatan reaksi sebesar $31,1 \text{ jam}^{-1}$ dan E sebesar $65,7 \cdot 10^3 \text{ cal/gmol}$ (Fogler, 2006), sehingga:

$$k = 31,1 \exp \left(\frac{65,7 \cdot 10^3}{8,31} \right) \left\{ \frac{1}{360} - \frac{1}{T} \right\}$$

$$k = 31,1 \exp \left\{ \frac{7906}{T - 360} \right\} \quad \dots\dots(32)$$

Pada saat kesetimbangan tercapai, $(-r_A) = 0$, sehingga persamaan (30) dapat dinyatakan (Fogler, 2006) :

$$C_{Ae} = C_{Be}/K_c \quad \dots\dots(33)$$

Dianggap konversi A pada kesetimbangan = x_e , sehingga:

$$C_A = C_{A0} (1 - x_e) \quad \dots\dots(34)$$

$$C_B = C_{A0} x_e \quad \dots\dots(35)$$

Dengan mensubstitusikan persamaan (34) dan (35) ke dalam persamaan (33), maka pada keadaan kesetimbangan:

$$C_{A0} (1 - x_e) = C_{A0} x_e / K_c \quad \dots\dots(36)$$

atau:

$$x_e = K_c / (1 + K_c) \quad \dots\dots(37)$$

Konstante kesetimbangan (K_c) sebagai fungsi suhu:

$$K_c = K_{c(T_2)} \exp \left(\frac{\Delta H_R^\circ}{R} \right) \left\{ \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right\} \quad \dots\dots(38)$$

Dari data diketahui konstanta kesetimbangan pada suhu 60°C atau 333 K , $K_c = 3,03$ dan $\Delta H_R^\circ = -6.900 \text{ J/mol}$ n-butana (Fogler, 2006), sehingga persamaan (38) menjadi:

$$K_c = 3,03 \exp \left(\frac{-6.900}{8,31} \right) \left\{ \frac{1}{333} - \frac{1}{T} \right\}$$

$$K_c = 3,03 \exp \left\{ \frac{-830,3}{T - 333} \right\} \quad \dots\dots(39)$$

Dengan mensubstitusikan K_c pada persamaan (39) tersebut ke dalam persamaan (25) akan diperoleh persamaan yang menyatakan hubungan antara konversi kesetimbangan (x_e) dengan suhu (termodinamika).

Untuk proses yang berlangsung secara adiabatik ($Q_c=0$), dari neraca panas diperoleh hubungan antara suhu dengan konversi sebagai berikut (Fogler, 2006):

$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_R^\circ) F_{A0} x}{\sum (F_i C_{pi})} \quad \dots\dots(40)$$

dengan:

$$\sum (F_i C_{pi}) = F_A C_{pA} + F_B C_{pB} + F_{iP} C_{p_{iP}}$$

Nilai $C_{pA} = C_{pB} = 141 \text{ J/mol/K}$ dan $C_{p_{iP}} = C_{p_{iP}} = 161 \text{ J/mol/K}$, sehingga diperoleh:

$$\begin{aligned} \sum (F_i C_{pi}) &= F_{A0} (1-x) C_{pA} + F_{A0} \cdot x \cdot C_{pA} + \\ &\quad (0,1/0,9) F_{A0} C_{p_{iP}} \\ &= F_{A0} \cdot \{ C_{pA} + (0,1/0,9) C_{p_{iP}} \} \\ &= F_{A0} \{ 141 + (0,1/0,9) 161 \} \\ &= 159 \cdot F_{A0} \text{ J/mol/K.} \end{aligned}$$

Hubungan antara suhu dan konversi, dari persamaan (40) diperoleh:

$$T = T_0 + (-\Delta H_R^0)F_{A_0}x / (159 F_{A_0})$$

$$T = 330 + (6.900)F_{A_0}x / (159 F_{A_0})$$

$$T = 330 + 43,4 x$$

atau:

$$x = (T - 330)/43,4 \quad \dots(41)$$

Persamaan (41) di sini menunjukkan hubungan antara konversi dengan suhu (berdasar neraca panas). Suhu pada konversi maksimum ($x = x_e$) yang dapat dicapai pada keadaan kesetimbangan dapat ditentukan berdasarkan persamaan (35), (36), dan (41), yang dapat dihitung dengan metoda Newton-Raphson.

Persamaan:

$$f(T) = X_{(neraca\ panas)} - X_{(termodinamika)} = 0$$

dengan:

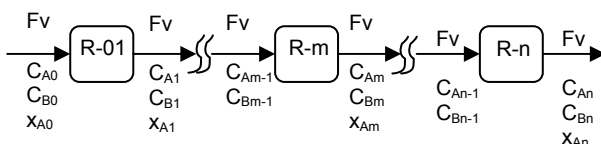
$$X_{(neraca\ panas)} = (T-330)/43,4$$

$$X_{(termodinamika)} = Kc/(1+Kc)$$

$$Kc = 3,03 \exp \{-830,3 (T - 333)/333T\}$$

Persamaan (32) tersebut merupakan persamaan non-linier dengan variabel T. Nilai T sebagai akar persamaan non-linier dapat dicari dengan berbagai cara, antara lain dengan metoda Secant, Bisection, atau metoda Newton-Raphson (Sediawan, 1997). Dari hasil perhitungan dengan menggunakan metoda Newton-Raphson, diperoleh hasil konversi kesetimbangan, $x_e = 71,41\%$ dan kondisi kesetimbangan terjadi pada suhu 360,99K. Dalam perancangan reaktor, kemungkinan besarnya konversi yang dapat terjadi ditentukan 95% dari konversi kesetimbangan, yaitu $x = 67,84\%$.

Berdasar data suhu umpan masuk reaktor 330°C, konversi yang terjadi pada reaksi isomerisasi normal butana (x_A) sebesar 67,84% dan proses berlangsung pada suhu tetap ($T=330$ K), maka volume reaktor alir tangki berpengaduk yang diperlukan dapat ditentukan dengan menyusun neraca massa dan menetapkan jumlah reaktor yang digunakan. Dengan mengetahui volume reaktor yang terkait dengan jumlah reaktor yang telah ditetapkan, maka dapat dilakukan optimasi jumlah reaktor yang diperlukan agar harga reaktor relatif murah. Skema n buah RATB yang disusun seri dapat dilihat pada Gambar (3).



Gambar 3. Skema n buah RATB yang disusun seri

Neraca massa di reaktor yang ke-m untuk komponen A:

Kecepatan A masuk – kecepatan A keluar – kecepatan reaksi A = kecepatan akumulasi
 Pada keadaan *steady*, kecepatan akumulasi sama dengan nol, sehingga diperoleh persamaan (Smith, 1981):

$$F_V C_{A_{m-1}} - F_V C_{A_m} - (-r_{A_m}) \cdot V = 0 \quad \dots(43)$$

$$F_V (C_{A_{m-1}} - C_{A_m}) = (-r_{A_m}) \cdot V \quad \dots(44)$$

Didefinisikan waktu tinggal, $\Theta = V/F_V$, sehingga persamaan (34) dapat dinyatakan $\Theta = V/F_V = (C_{A_{m-1}} - C_{A_m})/(-r_{A_m}) \quad \dots(45)$

Dari persamaan (29), persamaan kecepatan reaksi pada reaktor yang ke-m ($-r_{A_m}$) dapat dituliskan:

$$(-r_{A_m}) = k (C_{A_m} - C_{B_m}/Kc) \quad \dots\dots(46) \quad \dots\dots(42)$$

dengan:

C_{A_m} = konsentrasi normal butan di dalam reaktor ke-m, kmol/m³.

C_{B_m} = konsentrasi isobutan ke-m, kmol/m³

k = konstante kecepatan reaksi, jam⁻¹.

Kc = konstante kesetimbangan

Apabila $C_{A_{m-1}} = C_{A_0}(1-x_{A_{m-1}})$, $C_{A_m} = C_{A_0}(1-x_{A_m})$, dan $C_{B_m} = C_{A_0}x_{A_m}$, dari persamaan (35) dan (36) diperoleh persamaan :

$$\Theta = \frac{C_{A_0}(1-x_{A_{m-1}}) - C_{A_0}(1-x_{A_m})}{k\{C_{A_0}(1-x_{A_m}) - (C_{A_0}x_{A_m}/Kc)\}}$$

atau

$$\Theta = \frac{x_{A_m} - x_{A_{m-1}}}{k\{(1-x_{A_m}) - (x_{A_m}/Kc)\}} \quad \dots\dots(47)$$

dengan:

Θ = waktu tinggal (=V/F_V), jam.

x_{A_m} = konversi yang terjadi pada reaktor ke-m

$x_{A_{m-1}}$ = konversi yang terjadi pada reaktor ke (m-1).

Penentuan volume reaktor yang diperlukan apabila digunakan satu reaktor, maupun lebih dari satu reaktor alir tangki berpengaduk (dua, tiga, dan empat) yang disusun seri dijelaskan sebagai berikut.

1. Apabila digunakan satu reaktor

$x_{A_0} = 0$ dan $x_{A_1} = 0.6784$

Diketahui $F_V = 100.000$ gal/hari = 4.166,667 gal/jam.

Pada suhu $T = 330K$, $k = 4.22 \cdot 38$ jam⁻¹ dan $K = 3.0995$

Waktu tinggal ($\Theta = V/F_V$) dapat dihitung berdasar persamaan (47) dengan $m=1$:

$$\Theta = \frac{x_{A1} - x_{A0}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}}$$

$$\Theta = \frac{0,6784 - 0}{4,2238\{(1 - 0,6784) - (0,6784 / 3,0995)\}}$$

$\Theta = 1,5635$ jam.

Volume cairan , $V = \Theta \cdot F_V = 1,5635 \times 4.166,667 = 6.514,584$ gal.

Diambil over design sebesar 20%, sehingga volume reaktor yang diperlukan: Volume reaktor = $1,20 \times 6.514,584$ gal = 7.817,50 gal.

2. Apabila digunakan dua reaktor

$x_{A0} = 0$ dan $x_{A2} = 0.7262$

Berdasar data dan persamaan (47), dapat ditentukan nilai Θ pada reaktor ke-1 dan reaktor ke-2 sebagai berikut:

Reaktor ke-1 ($m = 1$):

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1} - x_{A0}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}}$$

$$= \frac{x_{A1}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}}$$

Reaktor ke-2 ($m = 2$):

$$\Theta_2 = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{k\{(1 - x_{A2}) - (x_{A2} / Kc)\}}$$

$$= \frac{0,6784 - x_{A1}}{k\{(1 - 0,6784) - (0,6784 / Kc)\}}$$

Agar volume reaktor sama ($V_1=V_2=V$), maka $\Theta_1=\Theta_2= \Theta$.

$$\frac{x_{A1}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}} = \frac{0,6784 - x_{A1}}{k\{(1 - 0,6784) - (0,6784 / Kc)\}}$$

atau:

$$f(x_{A1}) = \Theta_1 - \Theta_2 = 0 \quad \dots\dots(48)$$

dengan:

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1}}{4,2238\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / 3,0995)\}}$$

$$\Theta_2 = \frac{0,6784 - x_{A1}}{4,2238\{(1 - 0,6784) - (0,6784 / 3,0995)\}}$$

$$\Theta_2 = \frac{0,6784 - x_{A1}}{0,433894}$$

Berdasar persamaan (48) tersebut x_{A1} dapat dihitung dengan menggunakan metoda Newton-Raphson, sehingga diperoleh $x_{A1} = 0,5137$ dengan waktu tinggal, $\Theta = 0,3795$ jam.

Volume cairan , $V=\Theta \cdot F_V = 0,3795 \times 4.166,667 = 1.581,25$ gal.

Diambil over design sebesar 20%, sehingga volume reaktor yang diperlukan: Volume reaktor = $1,20 \times 1.581,25$ gal = 1.897,50 gal.

3. Apabila digunakan tiga reaktor

$x_{A0} = 0$ dan $x_{A3} = 0.7262$

Berdasar data dan persamaan (47), dapat ditentukan nilai Θ pada reaktor ke-1, reaktor ke-2, dan reaktor ke-3 sebagai berikut:

Reaktor ke-1 ($m = 1$):

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1} - x_{A0}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}}$$

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}}$$

Reaktor ke-2 ($m = 2$):

$$\Theta_2 = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{k\{(1 - x_{A2}) - (x_{A2} / Kc)\}}$$

Reaktor ke-3 ($m = 3$):

$$\Theta_3 = \frac{x_{A3} - x_{A2}}{k\{(1 - x_{A3}) - (x_{A3} / Kc)\}}$$

$$\Theta_3 = \frac{0,6784 - x_{A2}}{4,2238\{(1 - 0,6784) - (0,6784 / 3,0995)\}}$$

$$\Theta_3 = \frac{0,6784 - x_{A2}}{0,433894}$$

Agar volume eaktor sama ($V_1=V_2=V_3=V$), maka $\Theta_1=\Theta_2=\Theta_3=\Theta$.

Untuk dapat menghitung volume reaktor (V) atau waktu tinggal (Θ) tersebut, maka disusun persamaan:

$$\Theta_1=\Theta_3 \quad \frac{x_{A1}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}} = \frac{0,6784 - x_{A2}}{0,433894}$$

$$x_{A2} = 0,6784 - 0,433894 \cdot x_{A1} / \{4,2238(1-x_{A1}) - x_{A1} / 3,0995\} \quad \dots\dots(49)$$

$$\Theta_1=\Theta_2 \quad \frac{x_{A1}}{k\{(1 - x_{A1}) - (x_{A1} / Kc)\}} = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{k\{(1 - x_{A2}) - (x_{A2} / Kc)\}}$$

atau

$$f(x_{A1}) = \Theta_1 - \Theta_2 = 0 \quad \dots\dots(50)$$

dengan:

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1}}{4,2238\{(1-x_{A1})-(x_{A1}/3,0995)\}}$$

$$\Theta_2 = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{4,2238\{(1-x_{A2})-(x_{A2}/3,0995)\}}$$

$$x_{A2} = 0,6784 - 0,433894 \frac{x_{A1}}{4,2238(1-x_{A1}) - x_{A1}/3,0995}$$

Berdasar persamaan (50) nilai x_{A1} dapat dihitung dengan menggunakan metoda Newton-Raphson, sehingga diperoleh $x_{A1} = 0,4020$ dan $x_{A2} = 0,5902$, dengan waktu tinggal, $\Theta = 0,2032$ jam.

Volume cairan, $V = \Theta \cdot F_V = 0,2032 \times 4.166,667 = 846,667$ gal.

Diambil over design sebesar 20%, sehingga volume reaktor yang diperlukan: Volume reaktor = $1,20 \times 846,667$ gal = $1.016,0$ gal.

4. Apabila digunakan empat reaktor

$$x_{A0} = 0 \text{ dan } x_{A4} = 0,7262$$

Diketahui $F_V = 4.166,667$ gal/jam, harga $k = 4,2238 \text{ jam}^{-1}$, dan $K_C = 3,0995$.

Berdasar persamaan (47), dapat ditentukan harga Θ pada reaktor ke-1, reaktor ke-2, reaktor ke-3, dan reaktor ke-4. Analog dengan perhitungan pada penggunaan tiga reaktor, untuk dapat menghitung volume reaktor (V) atau waktu tinggal (Θ), maka perlu disusun persamaan sebagai berikut:

$$\Theta_1 = \Theta_4$$

$$\frac{x_{A1}}{k\{(1-x_{A1})-(x_{A1}/K_C)\}} = \frac{0,6784 - x_{A3}}{0,433894 - x_{A3}/3,0995} \quad \dots\dots(50)$$

$$\Theta_3 = \Theta_4$$

$$\frac{x_{A3} - x_{A2}}{k\{(1-x_{A1})-(x_{A1}/K_C)\}} = \frac{0,6784 - x_{A3}}{0,433894 - x_{A3}/3,0995} \quad \dots\dots(51)$$

$$\Theta_1 = \Theta_2$$

$$\frac{x_{A1}}{k\{(1-x_{A1})-(x_{A1}/K_C)\}} = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{k\{(1-x_{A2})-(x_{A2}/K_C)\}}$$

atau

$$f(x_{A1}) = \Theta_1 - \Theta_2 = 0 \quad \dots\dots(52)$$

dengan:

$$\Theta_1 = \frac{x_{A1}}{4,2238\{(1-x_{A1})-(x_{A1}/3,0995)\}}$$

$$\Theta_2 = \frac{x_{A2} - x_{A1}}{4,2238\{(1-x_{A2})-(x_{A2}/3,0995)\}}$$

$$x_{A3} = 0,6784 - 0,433894 \frac{x_{A1}}{4,2238(1-x_{A1}) - x_{A1}/3,0995}$$

$$x_{A2} = \frac{x_{A3} - \{4,2238(1-x_{A1}) - x_{A1}/3,0995\} \cdot \{0,6784 - x_{A3}/0,433894\}}{x_{A3}/0,433894}$$

Berdasar persamaan (52) tersebut x_{A1} dapat dihitung dengan menggunakan metoda Newton-Raphson, sehingga diperoleh $x_{A1} = 0,2940$ dan harga $x_{A2} = 0,4736$, harga $x_{A3} = 0,6290$, dengan waktu tinggal, $\Theta = 0,1139$ jam.

Volume cairan, $V = \Theta \cdot F_V = 0,1139 \times 4.166,667 = 474,58$ gal.

Diambil over design sebesar 20%, sehingga volume reaktor yang diperlukan: Volume reaktor = $1,20 \times 474,58$ gal = $569,5$ gal.

Dari hasil perhitungan tersebut di atas dapat dibandingkan besarnya volume yang diperlukan pada penggunaan satu reaktor maupun lebih dari satu reaktor alir tangki berpengaduk (dua, tiga, dan empat) yang disusun seri. Dengan demikian dapat dipilih jumlah reaktor yang diperlukan dengan harga yang paling murah. Estimasi harga alat tergantung jenis alat yang digunakan dan kondisi operasinya, untuk reaktor yang dilengkapi dengan pengaduk dengan tekanan tertentu (10 atmosfer) dapat ditentukan berdasarkan volume reaktor. Disamping itu, harga suatu alat dapat ditentukan berdasar harga alat pada volume tertentu, dan harga alat yang sama dengan volume lain dapat ditentukan berdasarkan persamaan (Peter et.al., 2003):

Harga alat (a) = Harga alat (b) * (X)⁰.(53)
 Dengan X adalah perbandingan kapasitas alat (a) terhadap alat (b). Berdasarkan data tersebut, dapat dilihat harga alat dengan kapasitas 565,5 gallon sebesar \$ 313,900 (www.matche.com) dan untuk kapasitas lainnya dapat dihitung berdasarkan persamaan (53) tercantum pada Tabel 1 berikut.

Tabel 1. Perbandingan Volume dan Total Harga Reaktor.

Jumlah reaktor (buah)	Volume reaktor (gallon)	Harga reaktor (\$)	Total harga reaktor (\$)
1	7.817,5	1,511,250	1,511,250
2	1.897,5	646,250	1,292,500
3	1.016,0	395,500	1,186,500
4	569,5	313,900	1,255,600

KESIMPULAN

Dari pembahasan di atas dapat diambil kesimpulan sebagai berikut:

1. Reaksi isomerisasi normal butana membentuk isobutana merupakan reaksi bolak-balik pada fase cair, dilakukan di dalam reaktor alir tangki berpengaduk pada suhu tetap (isotermal).
 2. Berdasar suhu umpan ($T = 330$ K), pada keadaan kesetimbangan diperoleh konversi terhadap normal butana (x_e) sebesar 72,62% dengan suhu kesetimbangan 360,99 K.
 3. Volume reaktor dapat ditentukan berdasarkan neraca massa dan persamaan kecepatan reaksi, dengan mengambil waktu tinggal (Θ) untuk masing-masing reaktor alir tangki berpengaduk yang disusun seri dengan memperhitungkan konversi terhadap normal butana (x_A) yang terjadi di dalam reaktor yang dilakukan dengan metoda Newton-Raphson.
 4. Untuk mencapai konversi sebesar 95% terhadap konversi kesetimbangan, $x_A = 67,8\%$ pada kondisi isotermal ($T = 330$ K), dengan menganggap reaksi orde satu terhadap normal butana (A) dan order satu terhadap isobutana (B), dapat ditentukan volume masing-masing reaktor sesuai dengan jumlah reaktor, yaitu:
 - a. satu reaktor, $V = 7.817,5$ gallon.
 - b. dua reaktor, $V = 1.897,5$ gallon.
 - c. tiga reaktor, $V = 1.016,0$ gallon.
 - d. empat reaktor, $V = 569,5$ gallon.
5. Dengan memperhitungkan harga berdasarkan volume reaktor dan jumlah reaktor yang digunakan, dipilih jumlah reaktor yang digunakan sebanyak tiga buah reaktor, mengingat pada kondisi ini memberikan harga termurah.

DAFTAR PUSTAKA

- Constantinides, A. and Mostoufi, N., 1999, *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*, Prentice Hall PTR, New Jersey.
- Fogler, H.S., 2006, *Element of Chemical Engineering*, 4th ed., Pearson Education, Inc., Upper Saddle River, New Jersey.
- Froment, G.F. and Bischoff, K.B., 1990, *Chemical Reactor Analysis and Design*, John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Jenson, V.G. and Jeffreys, G.V., 1983, *Mathematical Methods in Chemical Engineering*, 3rd ed., Academic Press, London.
- Levenspiel, O., 1999, *Chemical Reactor Engineering*, 3rd ed., John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Peters, M.S., Timmerhaus, K.D., and West, R.E., 2003, *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, 5th ed., McGraw-Hill Book Company, New York.
- Sediawan, W.B. dan Prasetya, A., 1997, *Pemodelan Matematis dan Penyelesaian Numeris dalam Teknik Kimia*, Penerbit ANDI, Yogyakarta.
- Smith, J.M., 1981, *Chemical Engineering Kinetics*, 3rd ed., McGraw-Hill Book Company, New York.
- www.matche.com/equipment.