

## **Aplikasi Pemrograman Komputer Dalam Bidang Teknik Kimia**

**Arif Hidayat**

*Program Studi Teknik Kimia*

*Fakultas Teknologi Industri, Universitas Islam Indonesia*

*Jln. Kaliurang Km. 14,5, Besi, Yogyakarta, telp. (+62-274) 895287, 895007*

*E-mail : ariffhid@yahoo.com, arhidayat@fti.uii.ac.id*

### **Abstraksi**

*Pendekatan atau pemodelan matematis dan penyelesaian numeris dalam bidang teknik kimia terus berkembang penggunaannya. Hal ini didukung dengan perkembangan komputer yang semakin canggih, sehingga dapat membantu untuk menyelesaikan masalah-masalah dalam bidang teknik kimia, baik dalam perancangan maupun penelitian. Namun hal yang paling penting dalam pemodelan matematis ini adalah pemahaman mengenai konsep-konsep fundamental. Sehingga model yang disusun dan yang akan diperoleh mendekati dengan peristiwa fisis yang terjadi. Makalah ini menguraikan tentang aplikasi pemodelan matematis dan penyelesaian numeris perancangan reaktor yang sering dijumpai oleh mahasiswa dalam mengerjakan tugas akhir pra rancangan pabrik kimia.*

*Kata kunci: pemodelan, penyelesaian numeris, komputer*

### **1. Pendahuluan**

Perkembangan ilmu teknik kimia saat ini sangat pesat, terutama pada perbaikan kinerja proses yang optimal, disain alat proses yang lebih efisien dan pengendalian yang terjadi di dalam proses secara intensif dan mendalam. Selain itu, pemahaman tentang interaksi antar unit dalam suatu sistem proses atau kelakuan suatu unit terhadap sistem keseluruhan sangat dibutuhkan dalam mengoperasikan dan mengendalikan pabrik secara aman dan efisien. Deskripsi efektif kelakuan proses adalah melalui model matematik, baik berupa perhitungan sederhana, hingga perhitungan iteratif yang membutuhkan metoda numerik mutakhir.

Alat-alat dan proses-proses dalam industri kimia selalu berubah dan disempurnakan. Meskipun demikian prinsip-prinsip atau konsep-konsep fundamental yang mendasari alat-alat/proses-proses tersebut tidak banyak berubah. Model-model matematis yang maupun metode perhitungan yang terus berkembang akan selalu dapat diikuti dengan penguasaan konsep-konsep fundamental yang mantap. Dalam bidang Teknik Kimia, konsep-konsep fundamental tersebut adalah *Chemical Engineering Tools*, yang meliputi :

1. Neraca Massa
2. Neraca Energi
3. Keseimbangan:
  - a. fisis: keseimbangan fasa
  - b. kimiawi
4. Proses-proses kecepatan:
  - a. fisis (transport phenomena)
    - i. transfer momentum

- ii. transfer panas
- iii. transfer massa
- b. kimiawi (kinetika kimia)
- 5. Ekonomi
- 6. Humanitas

## 2. Pemodelan dan Penyelesaian Matematis dalam Teknik Kimia

Untuk penyusunan dan penyelesaian model-model matematis untuk aplikasi *Chemical Engineering Tools* pada alat-alat/proses-proses dalam industri kimia memerlukan peran matematika. Masalah-masalah yang dihadapi pada penyelesaian model-model matematis tersebut untuk langkah perhitungannya dapat dibantu dengan komputer. Dengan komputer hitungan-hitungan yang dulu dianggap tidak feasible sekarang menjadi *feasible*. Penyelesaian model-model matematis dengan menggunakan bantuan komputer ini dikenal dengan simulasi atau pemodelan komputer. Simulasi atau pemodelan komputer dapat mengurangi model fisik yang dibuat. Oleh karena itu kemampuan simulasi komputer dan pemanfaatannya perlu dilatih dalam pendidikan Teknik Kimia.

Pendekatan matematis umumnya melalui 2 tahapan pokok yaitu:

1. Menyusun persamaan matematis yang dapat mendekati peristiwa-peristiwa yang ditinjau (pemodelan atau modelling)
2. Menyelesaikan persamaan-persamaan matematis yang tersusun tersebut (penyelesaian)

Tahap pemodelan memerlukan penguasaan konsep-konsep fundamental peristiwa yang ditinjau, pemahaman atas pengertian konsep-konsep matematika bukan keterampilan manipulasi matematika analitis, kemampuan imajinasi untuk menggambarkan peristiwa yang ditinjau dan kemampuan menyederhanakan/mengabaikan (asumsi-asumsi). Dengan adanya asumsi-asumsi tersebut maka model matematis tidak bersifat satu jawaban. Adanya asumsi-asumsi yang berbeda menyebabkan pendekatan matematis bersifat *open ended*. Jawaban yang dicari adalah yang cukup dekat dengan peristiwa sebenarnya, tapi tidak terlalu sulit penyelesaiannya.

Tahap kedua dapat dijalankan secara analitis ataupun numeris. Cara analitis memberikan jawaban eksak, akan tetapi memerlukan kemampuan yang tinggi dalam manipulasi matematik dan terbatas hanya untuk untuk model matematis sederhana, sehingga hanya dapat menyelesaikan sebagian kecil masalah teknik kimia. Cara numeris hanya memberikan jawaban pendekatan, tetapi tidak memerlukan kemampuan manipulasi matematik yang terlalu tinggi, dan dapat memecahkan lebih banyak masalah teknik kimia. Dengan adanya komputer yang semakin canggih dan murah, cara numeris dewasa ini banyak dipakai. Kelemahan dan kelebihan penyelesaian secara analitis adalah:

1. Penyelesaian yang diperoleh adalah exact (100% benar)
2. Memerlukan banyak bekal pengetahuan matematika bahkan *advanced mathematics*
3. Model yang disusun hanya terbatas untuk kasus-kasus sederhana, dengan bentuk matematika yang sudah banyak dijumpai
4. Penggunaan dalam kasus riil kurang luas
5. Interpretasi hasil lebih mudah

Kelemahan dan kelebihan penyelesaian secara numeris adalah:

1. Penyelesaian pendekatan, tidak 100% benar, namun cukup bermanfaat
2. Memerlukan bekal pengetahuan matematika sederhana
3. Dapat digunakan untuk kasus-kasus lebih kompleks
4. Penggunaan dalam kasus-kasus riil lebih luas
5. Interpretasi hasil lebih sulit
6. Memerlukan jumlah hitungan yang sangat banyak

Penyusunan model matematis untuk peristiwa yang disimulasikan dan kemudian menyelesaikan model matematis tersebut secara numeris dengan bantuan komputer dinamakan simulasi komputer. Simulasi komputer banyak dipakai dalam penyelesaian masalah teknik kimia, misalnya untuk penelitian, perancangan dan optimasi. Simulasi komputer dapat mengurangi model fisik yang dibuat. Simulasi komputer dapat dilakukan dengan menggunakan bantuan *soft ware* atau program komputer yang telah tersedia.

### 3. Contoh Aplikasi

Aplikasi pemrograman komputer dalam menyelesaikan kasus dalam bidang teknik kimia dapat dilihat dalam penjabaran di bawah ini.

Kasus:

Akan dirancang suatu Reaktor Fixed Bed yang akan digunakan untuk mereaksikan etilen oksida dan amonia membentuk Etanolamin. Reaksi antara etilen oksida dan amonia merupakan reaksi seri paralel dan dapat dituliskan sebagai-berikut :



Ingin diketahui berapa panjang reaktor yang diperlukan, suhu keluar reaktor, suhu pendingin keluar dan penurunan tekanan sepanjang reaktor jika diinginkan konversi reaksi 1 ( $x_1$ ) sebesar 85%.

Untuk penyederhanaan lambang, persamaan reaksi di atas dapat dituliskan:



Persamaan kecepatan reaksinya dapat dituliskan sebagai berikut:

$$(-r_A) = k_1 C_E C_A \quad \dots (7)$$

$$(-r_E) = k_1 C_E C_A + k_2 C_E C_M + k_3 C_E C_D \quad \dots (8)$$

$$r_M = k_1 C_E C_A - k_2 C_E C_M \quad \dots (9)$$

$$r_D = k_2 C_E C_M - k_3 C_E C_D \quad \dots (10)$$

$$r_T = k_3 C_E C_D \quad \dots (11)$$

Dari penyusunan neraca massa E pada elemen volum diperoleh persamaan differensial sebagai berikut:

$$\frac{dx_1}{dz} = \frac{\pi D_i^2 \rho_b k_1 C_E C_A}{4 F_{E0}} \quad \dots (12)$$

$$\frac{dx_2}{dz} = \frac{\pi D_i^2 \rho_b k_2 C_E C_M}{4 F_{E0}} \quad \dots (13)$$

$$\frac{dx_3}{dz} = \frac{\pi D_i^2 \rho_b k_3 C_E C_D}{4 F_{E0}} \quad \dots (14)$$

Dari penyusunan neraca panas total pada elemen volum diperoleh persamaan differensial untuk mencari suhu gas sebagai berikut:

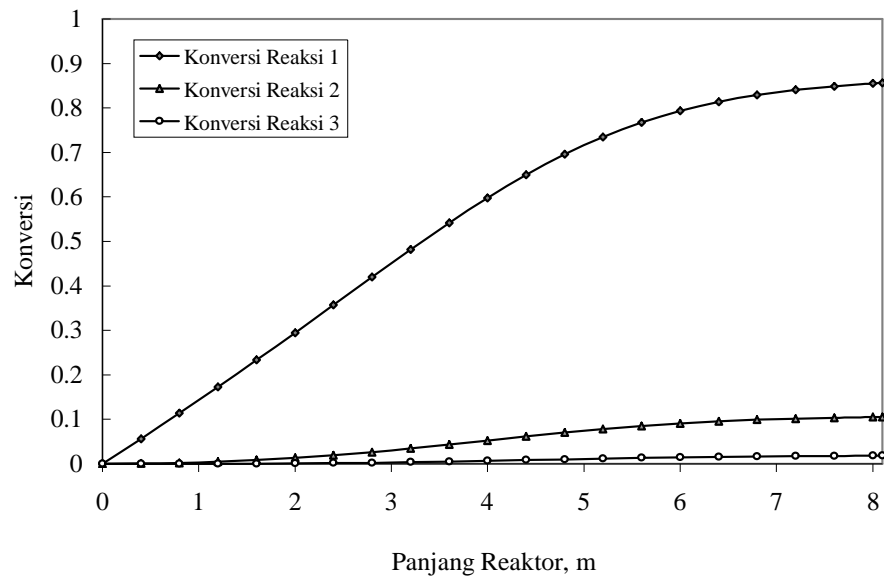
$$\frac{dT}{dz} = \frac{\left[ (-\Delta H_{R1,T}) \frac{dx_1}{dz} + (-\Delta H_{R2,T}) \frac{dx_2}{dz} + (-\Delta H_{R3,T}) \frac{dx_3}{dz} \right] F_{E0} - U_D \pi D_i (T - T_p)}{\Sigma F_i C_{pi}} \quad \dots (15)$$

Untuk mencari suhu pendingin keluar reaktor, maka dapat disusun penyusunan neraca panas total pendingin pada elemen volum. Diperoleh persamaan differensial sebagai berikut:

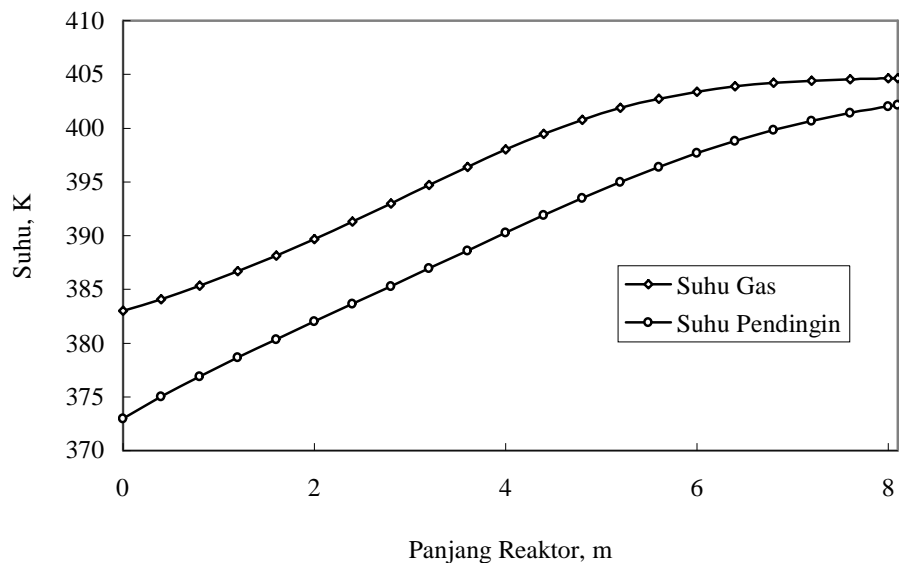
$$\frac{dT_p}{dz} = \frac{U_D \pi D_i (T - T_p)}{MC_{pp}} \quad \dots (16)$$

Persamaan (12), (13), (14), (15), dan (16) dapat diselesaikan secara numeris. Bentuk persamaan-persamaan di atas adalah persamaan differensial ordiner simultan yang dapat diselesaikan dengan metode *Runge-Kutta*. Penyelesaian numeris dilakukan dengan menggunakan bantuan komputer.

Dari hasil pemrograman komputer diperoleh hubungan:



**Gambar 1.** Hubungan antara Konversi dengan Panjang Reaktor



**Gambar 2.** Hubungan antara Suhu dengan Panjang Reaktor

Hasil yang diperoleh dengan perhitungan program komputer adalah:

- Suhu gas keluar reaktor = 404,637 K
- Suhu pendingin keluar reaktor = 402,151 K
- Konversi reaksi 1 keluar reaktor = 0.8564
- Konversi reaksi 2 keluar reaktor = 0,1055
- Konversi reaksi 3 keluar reaktor = 0,0182
- Panjang Reaktor = 8,91 m

#### 4. Kesimpulan

- a. Pemodelan matematis dan penyelesaian numeris dalam bidang teknik kimia terus berkembang dengan didukung perkembangan komputer yang semakin canggih.
- b. Penguasaan terhadap konsep fundamental diperlukan dan sangat penting dalam menyusun model matematis.

#### Daftar Pustaka

- [1]. Jenson, V. G. and Jeffreys, G. V., 1977, *Mathematical Methods in Chemical Engineering*. 2<sup>nd</sup> edition, Academic Press, London.
- [2]. Mickley, H. S., Sherwood, T. S., and Reed C. E., 1975. *Applied Mathematics in Chemical Engineering*, McGraw Hill Publishing Co., New Delhi.
- [3]. Sediawan, W. B. dan Prasetya, A., *Pemodelan Matematis dan Penyelesaian Numeris dalam Teknik Kimia*. Penerbit Andi, Yogyakarta.

#### Daftar Lambang

$\rho_b$	=	densitas bulk katalis
$\Delta_{HR1, T}$	=	panas reaksi 1
$\Delta_{HR2, T}$	=	panas reaksi 2
$\Delta_{HR3, T}$	=	panas reaksi 3
$C_A$	=	konsentrasi Ammoniak
$C_D$	=	konsentrasi Diethanolamin
$C_E$	=	konsentrasi Etilen Oksid
$C_M$	=	konsentrasi Monoethanoamin
$C_T$	=	konsentrasi Triethanoamin
$C_{pi}$	=	kapasitas panas komponen i
$C_{pp}$	=	kapasitas panas pendingin
$D_i$	=	diamter reaktor
$F_{E0}$	=	Kecepatan aliran massa umpan E
$F_i$	=	Kecepatan aliran massa komponen i
$k_1$	=	tetapan kecepatan reaksi 1
$k_2$	=	tetapan kecepatan reaksi 1
$k_3$	=	tetapan kecepatan reaksi 1
$M$	=	kecepatan aliran pendingin
$T$	=	suhu gas
$T_p$	=	suhu pendingin
$U_D$	=	tetapan perpindahan panas keseluruhan
$x_1$	=	konversi reaksi 1
$x_2$	=	konversi reaksi 2
$x_3$	=	konversi reaksi 3
$z$	=	panjang reaktor