

## Perancangan Proses Kimia

# PERANCANGAN SISTEM/JARINGAN REAKTOR

1

## Rancangan Kuliah Section 2

1. Dasar-dasar Penggunaan CHEMCAD/HYSYS
2. **Perancangan Sistem/jaringan Reaktor**
3. Tugas 1 dan Pembahasannya
4. Perancangan Sistem/jaringan Pemanas
5. Perancangan Sistem/jaringan Separator & Recycle
6. Tugas 2 dan Pembahasannya
7. Studi Kasus
8. Ujian Section 2

2

## Chemical Reactor Models

- Chemical Reactors are designated to involve:
  - multiple phases (vapor, liquid, reacting solid, solid catalyst)
  - different geometries (stirred tank, tubular flows, converging and diverging nozzles, spiral flows, and membrane transport)
  - various regimes of momentum, heat and mass transfer (viscous flow, turbulent flow, conduction, radiation, diffusion, and dispersion)

3

## Types of Reactor Models in Simulator

- **Stoichiometric Reactor** (permits the specification of reactant conversion and extents of reaction for one or more specified reactions)
- **Equilibrium Reactor** (model for multiple phases (vapor, liquid, solid) in chemical equilibrium)
- **Kinetic Reactor** (CSTR & Plug Flow)
- **Gibbs Reactor** (for mass and energy balance, no stoichiometric reaction required)

4

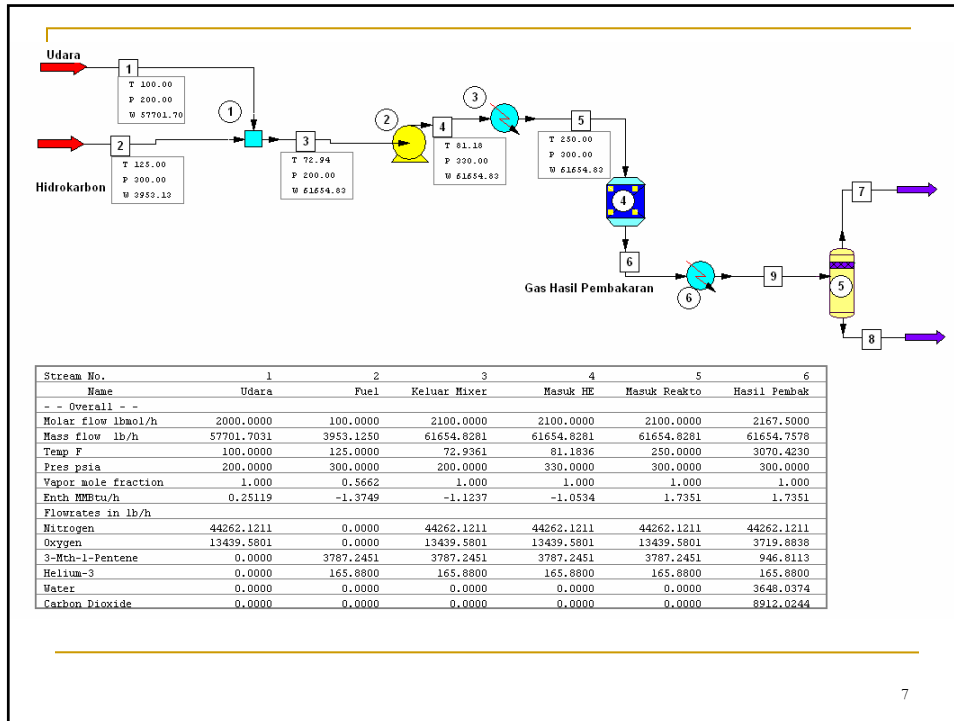
## Stoichiometric Reactor

- Digunakan untuk mensimulasikan:
  - Reaksi tunggal dengan satu set koefisien reaksi
  - Komponen kunci dan konversi diketahui
  - Reaksi dapat berlangsung secara adiabatik, isotermik, atau dengan pengeluaran/pemasukan panas
- Masukkan faktor-faktor stoikiometri reaksi, negatif bila reaktan, dan positif bila produk, dan nol bila tidak bereaksi

5

## Reaction Stoichiometry

6



7

## Setting Stoichiometric Reactor

- Stoichiometric Reactor (REAC) -

ID: 4

**General Specifications**

**Specify Thermal Mode:**

1. Adiabatic

2. Isothermal  F

3. Heat Duty  MMBtu/h

Key Component:

Frac. Conversion:

Heat of Reaction:  Btu/lbmol

Reactor Pressure:  psia

Calc H of Reac.:  Btu/lbmol

**Stoichiometric Coefficients:**  Mole base

Nitrogen	<input type="text"/>	Helium-3	<input type="text"/>	N/A
Oxygen	<input type="text" value="-9"/>	Water	<input type="text" value="6"/>	N/A
3-Mth-1-Pentene	<input type="text" value="-1"/>	Carbon Dioxide	<input type="text" value="6"/>	N/A

8

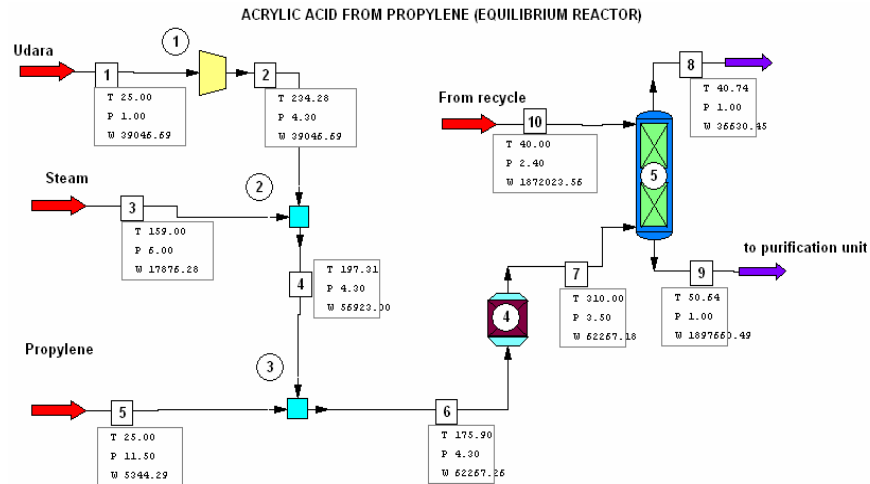
## Equilibrium Reactor

- Digunakan untuk mensimulasikan:
  - Lebih dari 20 reaksi simultan
  - Reaksi-reaksi tersebut diketahui konversinya atau rasio kesetimbangan
  - Masing-masing reaksi dapat mengandung lebih dari 10 komponen
  - Laju alir produk, komposisi, dan kondisi termal dapat dihitung melalui persamaan kesetimbangan reaksi
  - Reaksi fasa cair maupun fasa uap
  - Reaksi dapat isothermal atau adiabatik

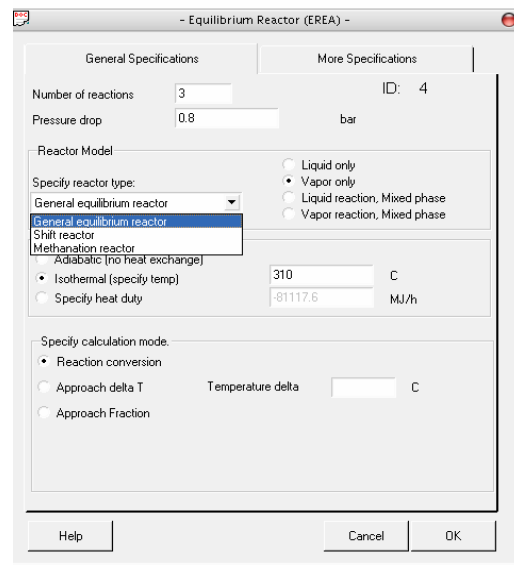
9

10

# Example: Equilibrium Reactor



11



12

- Equilibrium Data -

Reaction Number: 1  $K_{eq} = \exp(A+B/T)$

Base component: 1 Propylene Approach delta T:  C

A Factor:  Frac. approach:

B Factor:  Frac. conversion: 0.69

Heat of reaction:

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
1 Propylene	-1	
3 Oxygen	-1.5	
7 Acrylic Acid	1	
5 Water	1	
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		

13

- Equilibrium Data -

Reaction Number: 2  $K_{eq} = \exp(A+B/T)$

Base component: 1 Propylene Approach delta T:  C

A Factor:  Frac. approach:

B Factor:  Frac. conversion: 0.05

Heat of reaction:

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor
1 Propylene	-1	
3 Oxygen	-2.5	
6 Acetic Acid	1	
4 Carbon Dioxide	1	
5 Water	1	
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		
<None>		

14

## Kinetic Reactor

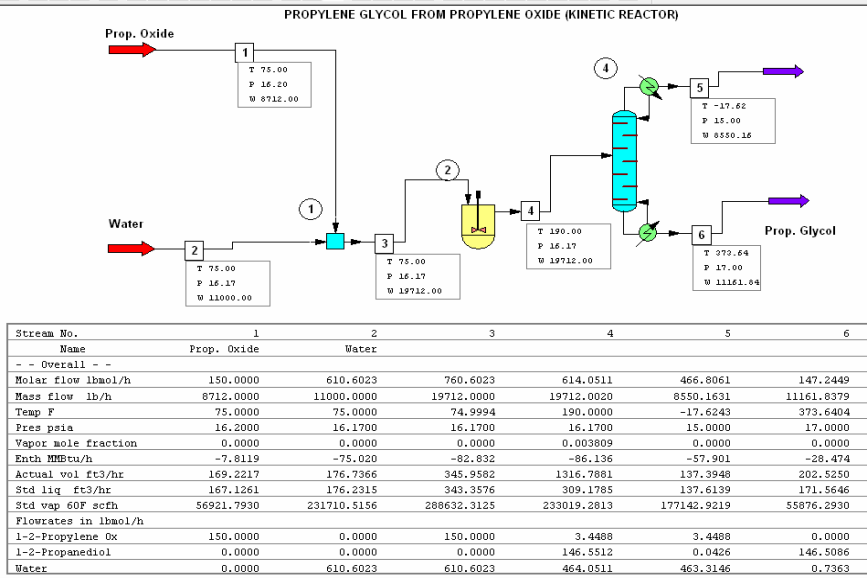
- Reaktor ini dapat digunakan untuk mensimulasikan:
  - Plug Flow Reactor (PFR) dan Continuous Stirred Tank Reactor (CSTR)
  - Lebih dari 20 reaksi simultan
  - Konversi total komponen kunci diketahui dan akan dihitung volume reaktornya atau kebalikannya
  - Reaksi fasa uap, cair, atau campuran
  - Reaksi-reaksi yang diketahui data-data kinetiknya (faktor frekuensi, energi aktivasi, faktor eksponensial, faktor adsorpsi, energi adsorpsi, etc.)
  - Laju kinetika dapat dibuat standar atau dispesifikasikan oleh pengguna
  - Reaksi dapat bersifat adiabatik atau isothermal

15

16



# Example: Kinetic Reactor



17

- Kinetic Reactor (KREA) -

**General Specifications**

Number of reactions:  ID:

Reactor pressure:  psia

Pressure drop:  psi

Kinetic rate expression:

Reactor Model:

Specify reactor type:

Liquid only

Vapor only

Liquid reaction, Mixed phase

Vapor reaction, Mixed phase

Specify reactor type:

Thermal Mode:

Isothermal (specify temp)  F

Adiabatic (no heat exchange)

Specify heat duty  MMBtu/h

Spec PFR temp. profile (later)

Specify PFR utility U  Btu/hr-ft2-F

Specify calculation mode:

Specify volume, Calculate conversion

Specify conversion, Calculate volume

Reactor Volume:  Cubic feet

Key Component:  Conversion

**More Specifications**

18

- Kinetic Data -

**Reaction Number:** 1

Frequency factor:       Beta factor:

Activation energy:       Heat of reaction:

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor	Adsorption factor	Adsorption energy	Adsorption exponent
1 1,2-Propylene O	-1				
3 Water	-1				
2 1,2-Propanediol	1				
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					

Help      Cancel      OK

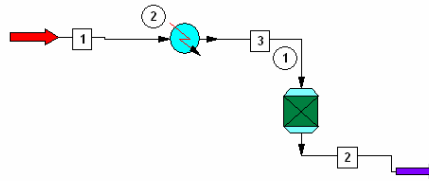
19

## Gibbs Reactor

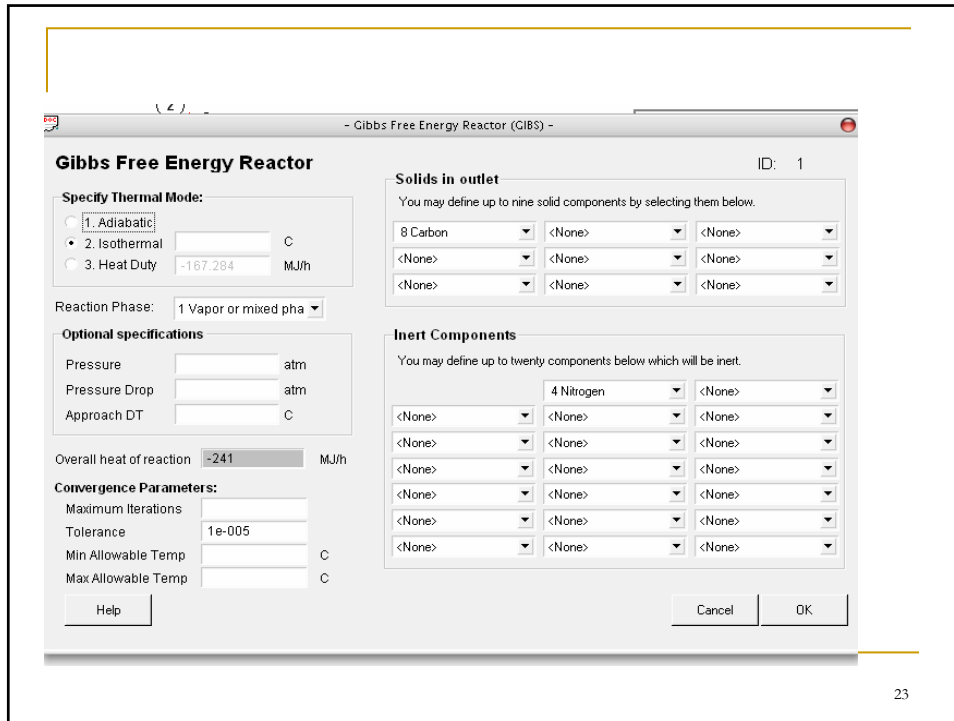
- Reaktor ini dapat digunakan untuk mensimulasikan:
  - tujuan neraca massa dan energi
  - tidak memerlukan stoikiometri
  - Laju alir produk, komposisi, kondisi termal dihitung dengan meminimasi energi bebas Gibbs, cenderung kepada neraca massa keseluruhan
  - Reaktor dapat dioperasikan dengan fasa tunggal (cair atau uap) atau campuran
  - dapat dioperasikan secara isothermal
  - komponen inert dapat dispesifikasi

## Example: Gibbs Reactor

Gibbs Reactor (Minimization of Gibbs Free Energy)



Stream No.	1	2
Name	FEED	PRODUCT
-- Overall --		
Molar flow kmol/h	10.0723	17.1841
Mass flow kg/h	220.0000	219.9956
Temp C	100.0000	800.0000
Pres atm	5.0000	4.9000
Vapor mole fraction	1.000	0.9522
Enth MJ/h	-441.04	-2023.3
Flowrates in kmol/h		
Methane	6.2332	1.1148
Hydrogen	0.0000	8.8809
Carbon Monoxide	0.0000	3.7016
Nitrogen	0.7139	0.7139
Oxygen	3.1251	0.0000
Water	0.0000	1.3561
Carbon Dioxide	0.0000	0.5962
Carbon	0.0000	0.8206



23

# TUGAS 1

## PRODUKSI PHTHALIC ANHYDRIDE

**Thermodynamic method**  
K-value : SRK  
Entaphi : LATENT heat

**Spesifikasi Umpan**

- o-xylene 1275 kg/jam, T = 20°C, P = 1,013 bar
- udara = O<sub>2</sub> : 8994 kg/jam, N<sub>2</sub> : 29622 kg/jam . T = 20°C, P = 1,013 bar
- air 30000 kg/jam, T = 30°C, P = 4,013 bar.

**REAKTOR**  
Pressure drop = 0,1 bar  
Isotermal 380°C (fasa uap)  
Reaksi-reaksi yang terjadi:

- $C_8H_{10} + 3 O_2 \rightarrow C_8H_6O_3 + 3 H_2O$  X = 70,58%
- $C_8H_{10} + 7,5 O_2 \rightarrow C_8H_4O_3 + 4 CO_2 + 4 H_2O$  X = 6,55%
- $C_8H_{10} + 10,45 O_2 \rightarrow 0,1 CO + 7,9 CO_2 + 5 H_2O$  X = 21,91%

**KOMPRESOR**  
polytropic  
P<sub>out</sub> = 1,6 bar  
efisiensi = 75%

**POMPA**  
P<sub>out</sub> = 6,5 bar  
efisiensi = 75%

**HEAT EXCHANGER**

	E-01	E-02	E-03
Temperatur keluar (°C)	180	130	65
Pressure drop (bar)	0,3	0,05	0,05