Seminar Nasional Teknik Kimia Indonesia – SNTKI 2009 Bandung, 19-20 Oktober 2009

MODELING PROSES PENCAIRAN BATUBARA MENGGUNAKAN SOFTWARE FLUENT 6.3 CFD CODE

Novia

Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Sriwijaya Jl. Raya Palembang-Prabumulih Km.32 Inderalaya, Ogan Ilir, SUMSEL. 30662

Lia Cundari

Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Sriwijaya Jl. Raya Palembang-Prabumulih Km.32 Inderalaya, Ogan Ilir, SUMSEL. 30662

> SD Sumbogo Murti BPP Teknologi – Indonesia

Muhammad Faizal Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Sriwijaya Jl. Raya Palembang-Prabumulih Km.32 Inderalaya, Ogan Ilir, SUMSEL. 30662

Abstrak

Kebutuhan bahan bakar minyak (BBM) mengalami peningkatan dari tahun ke tahun sedangkan cadangan minyak mentah diperkirakan akan habis dalam kurun waktu 20 tahun. Salah satu solusi untuk mengatasi masalah kelangkaan BBM adalah mencari alternatif lain pengganti minyak melalui proses pencairan batubara.

Pengujian pencairan batubara menggunakan reaktor autoclave 1 liter. Batubara dimasukkan ke dalam reaktor bersama pelarut dan katalis pada jumlah yang telah ditentukan. Kemudian reaktor ditutup dan diisi dengan gas hidrogen dan ditahan selama 2 jam untuk mengetahui ada tidaknya kebocoran (leak test). Setelah leak test selesai, dipanaskan sampai kondisi reaksi dan ditahan selama 60 menit, lalu reaksi dihentikan.

Proses pencairan batubara melibatkan reaksi perengkahan dan hidrogenasi yang sangat kompleks serta membutuhkan kondisi operasi tinggi (tekanan 8 - 12 Mpa dan suhu $430 - 450^{\circ}$ C). Oleh karena itu, diperlukan pemodelan matematis untuk menyederhanakan proses sehingga diperoleh kondisi operasi yang optimum. Pada penelitian ini, pemodelan matematis proses pencairan batubara menggunakan sofware Fluent 6.3, yang merupakan paket CFD (Computational Fluid Dynamic). Dari hasil simulasi dapat diketahui yield produk yang dihasilkan dari proses pencairan batubara pada berbagai kondisi operasi. Selanjutnya, hasil simulasi divalidasi dengan data eksperimen yang diperoleh dari pusat penelitian pencairan batubara BPPT-Serpong (data RUSNAS PEBT-2008).

Kata kunci: CFD Modeling, Fluent, Pencairan Batubara

The necessity of petroleum oil has increased while the crude oil reserve will tighten. One of the solutions to overcome this problem is to look for other alternative of oil substitution through coal liquefaction process.

The experiment of coal liquefaction used autoclave reactor 1 liter. Coal entered into reactor together with the solvent and the catalyst. The reactor was closed and filled with hydrogen gas. Then it was arrested during 2 hours to know the leakage (leak test). Furthermore, the reactor heated until the condition of reaction achieved. This condition was held during 60 minutes.

Coal Liquefaction Process involve the complex of cracking and hydrogenating reactions and require the high operating condition (the pressure of 8 - 12 MPa and the temperature of $430 - 450^{\circ}$ C). Therefore, mathematical modeling to simplify the process is needed in order to obtain the optimum operating condition. In this research, the mathematical modeling of coal liquefaction

ETU01-1

process used the Fluent 6.3 software which is a package of CFD (Computational Fluid Dynamic). From the simulation result, it can be known the yield of product of coal liquefaction process at various operating conditions. The simulation results were validated by the experiment data obtained from the research center of coal liquefaction of BPPT-SERPONG (the data of RUSNAS PEBT-2008).

Keywords: CFD Modeling, Fluent, Coal Liquefaction

1. Pendahuluan

Kebutuhan bahan bakar minyak di seluruh dunia mengalami peningkatan setiap tahunnya, sementara cadangan minyak mentah diperkirakan semakin menipis. Salah satu solusi untuk mengatasi permasalahan ini adalah mencari energi alternatif pengganti minyak bumi. Sumber energi alternatif pengganti minyak bumi adalah batubara. Indonesia memiliki cadangan batubara sekitar 36.3 juta ton dan 85% dari cadangan tersebut masih dalam bentuk batubara peringkat rendah (lignite). Pemanfaatan cadangan batubara dapat dilakukan dengan penggunaan teknologi pencairan batubara.

Teknologi pencairan batubara (Brown Coal Liquefaction/BCL) yang telah dikembangkan saat ini sesuai dengan karakteristik batubara peringkat rendah Indonesia. Brown Coal Liquefaction adalah proses untuk mengkonversi batubara (brown coal) menjadi minyak sintetik pengganti minyak bumi. Penelitian teknologi pencairan batubara (BCL Technology) menggunakan reaktor batch telah banyak dilakukan secara eksperimen (Hartiniati, 2000, Komatsu, 2000, Narita et Al., 2000, Okuyama et Al., 2000; Silalahi, L. H. dan Yusnitati, 2000). Namun, penelitian mengenai pemodelan matematis proses pencairan batubara sedikit sekali dilakukan. Padahal hanya pemodelan matematis yang menggambarkan proses pencairan batubara secara fisika dan kimia, diperlukan untuk memahami proses pencairan batubara terutama untuk mengoptimasi kondisi operasi dan mendesain reaktor. Proses pencairan batubara melibatkan percampuran multifasa, reaksi perengkahan dan hidrogenasi yang sangat kompleks. Oleh karena itu untuk mendapatkan kondisi operasi yang optimum, diperlukan pemodelan matematis. Pada penelitian ini, pemodelan matematis proses pencairan batubara menggunakan sofware Fluent 6.3, yang merupakan paket CFD (Computational Fluid Dynamic).

Computational Fluid Dynamic (CFD) merupakan alat desain yang digunakan oleh para ahli untuk menyelesaikan permasalahanpermasalahan dinamika fluida dalam proses kimia. CFD dapat memberikan informasi mengenai konsentrasi, kecepatan, tekanan dan temperatur di dalam peralatan proses. Selain itu CFD juga bisa digunakan untuk menyelesaikan permasalahan-permasalahan satu-fasa, demikian juga halnya dengan aliran multifasa atau reaksi yang sangat kompleks.

Reaksi pencairan batubara merupakan reaksi yang sangat kompleks karena banyak sekali senyawa yang terbentuk di dalamnya. Pada tahun 1950, Weller dkk. mengembangkan suatu model proses pengkonversian batubara menjadi minyak melalui tahap pembentukan asphaltenes. Sampai saat ini model yang mereka ajukan masih bisa diterima. Sementara Li dkk. (2008) mengajukan suatu model kinetika proses pencairan batubara pada tahap pemanasan (*heating-up*) dan tahap isotermis. Hasil mereka menunjukkan bahwa kecepatan yang mengontrol pada proses pencairan batubara adalah reaksi preasphaltene-asphaltene menjadi minyak dan gas.

Pemodelan pencampuran multifasa dan kinetika reaksi proses pencairan batubara bertujuan untuk memberikan pemahaman yang lebih baik mengenai fenomean-fenomena yang terjadi dalam reaktor BCL (autoclave). Penelitian kali ini menggunakan CFD untuk memodelkan pencampuran multifasa dan reaksi yang terjadi BCL. Hasil dalam reaktor pemodelan menunjukkan bahwa FLUENT 6.3 (paket CFD) dapat menggambarkan pola alir dan dinamika fluida di dalam reaktor. Distribusi kecepatan, temperatur dan yield distilat di dalam reaktor juga dapat ditentukan.

2. Teori Dasar

Computational fluid dynamics (CFD) menyediakan penyelesaian numeris persamaanpersamaan konservasi massa, momentum, energi serta persamaan-persamaan pendukung seperti persamaan untuk turbulensi, reaksi kimia dsb. Persamaan-persamaan ini tidak bisa diselesaikan secara analitis. Persamaan-persamaan tersebut dapat diselesaikan secara numeris menggunakan metode finite volume.

Persamaan konservasi massa fase i (i = fluid, solid):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \varepsilon_i) + \nabla (\rho_i \varepsilon_i \mathbf{U}_i) = r_i$$
⁽¹⁾

ETU01-2

dimana: $\varepsilon_f + \varepsilon_s = 1$

Persamaan konservasi momentum fase i (i = fluid, k = solid, $k \neq i$):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_i \varepsilon_i \mathbf{U}_i \right) + \nabla \left(\rho_i \varepsilon_i \mathbf{U}_i \mathbf{U}_i \right) = -\varepsilon_i \nabla P + \nabla \cdot \mathbf{\tau}_i + \rho_i \varepsilon_i \mathbf{g} - \beta (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_k)$$
(2)

Persamaan konservasi energi fase i:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon_i \rho_i H_i \right) + \nabla \left(\varepsilon_i \rho_i \mathbf{U}_i H_i \right) = -\varepsilon_i \frac{\partial P_i}{\partial t} + \tau_i : \nabla \mathbf{U}_i - \nabla \mathbf{q}_i + S_i$$
(3)

dimana:
$$H_i = \sum_i \varepsilon_i \int_{Tref}^T Cp_i dT$$
 (4)

k-∈ Turbulence Models

Untuk menggambarkan gerakan turbulensi setiap fase digunakan $k - \epsilon$ model. Pada $k - \epsilon$ model, viskositas turbulensi didefinisikan sebagai:

$$\mu_{t,i}^{(t)} = \rho_i \varepsilon_i C_\mu \frac{k_i^2}{\epsilon_i}$$
(5)

Dimana energi kinetik turbulen, k, dan laju dissipatsi, ϵ , bisa dihitung dari persamaan berikut:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_i \varepsilon_i k_i \right) + \nabla . \left(\rho_i \varepsilon_i k_i U_i \right) = \\ \nabla \left(\varepsilon_i \frac{\mu_t}{\sigma_k} \nabla k_i \right) + \left(\varepsilon_i G_k - \varepsilon_i \rho_i \in_i \right)$$
(6)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\varepsilon_{i} \rho_{i} \in_{i} \right) + \nabla \left(\rho_{i} \varepsilon_{i} \in_{i} U_{i} \right) = \\ \nabla \left(\varepsilon_{i} \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}} \nabla \in_{i} \right) + \frac{\epsilon_{i}}{k} \left(C_{1} \in \varepsilon_{i} G_{k} - C_{2} \in \varepsilon_{i} \rho_{i} \in_{i} \right)$$

$$(7)$$

Model kinetika reaksi yang digunakan pada penelitian ini berdasarkan model yang diajukan oleh Li dkk (2008), dimana laju yang mengontrol proses pencairan batubara adalah reaksi Preasphalten dan asphalten (PAA) menjadi minyak dan gas. Skema reaksi pencairan batubara pada model ini adalah sebagai berikut:



Dimana: PAA mewakili preasphaltene dan asphaltene. Diasumsi bahwa reaksi order satu dan irreversible. Persamaan kinetika reaksi ini dimasukkan ke model hidrodinamika dengan menyelesaikan persamaan spesies masingmasing komponen dalam bentuk laju reaksi sebagai berikut:

$$\frac{dA}{dt} = -K_1 A\phi \tag{8}$$

3. Metodologi dan Prosedur Numeris

Gambar 1 menggambarkan geometri reaktor pencairan batubara, dibuat menggunakan GAMBIT yang merupakan pre-processor dalam FLUENT 6.3. Simulasi dilakukan pada reaktor pencairan batubara dengan volum 1 liter.



GaGambar 1. Geometri Reaktor Pencairan Batubara

Pada awalnya, slurry batubara, katalis dan pelarut heavy-oil diletakkan pada bagian bawah reaktor. Kemudian hidrogen diinjeksikan sampai memenuhi reaktor. Fraksi volum batubara dalam slurry yang masuk ke reaktor adalah 30 %, dengan diameter partikel batubara 75 μm . Temperatur reaktor 450°C dan tekanan 12 MPa. Skema reaktor dan posisi awal slurry ditunjukkan pada gambar 1. Simulasi dilakukan selama 60 menit waktu reaksi. Data experimen distribusi yield pada berbagai temperatur dihadirkan pada tabel 1.

Asumsi yang digunakan dalam perhitungan:

- Batubara masuk ke reaktor dalam bentuk slurry
- Reaksi orde satu, irreversibel
- Perhitungan dimulai pada kondisi reaktor isothermal telah tercapai

Prosiding

Seminar Nasional Teknik Kimia Indonesia – SNTKI 2009 Bandung, 19-20 Oktober 2009

Tabel 1:

Data Experimen Distribusi Yield pada berbagai temperatur, Tekanan awal gas H2. 10MPa. Waktu: 60 min, S/Fe: 2.0

Temperature	430°C	450°C	470°C
DISTILATE	22.08	40.53	40.23
H2O	22.54	13.42	12.36
CLB	51.86	38.57	37.8
CO+CO2	3.23	6.7	4.24
C1-C4	4.41	7.94	9.03
H2 cons.	-4.11	-7.16	-3.67

4. Hasil Komputasi dan Pembahasan

Pola Alir Kecepatan Slurry Batubara

Pola alir kecepatan slurry batubara dihadirkan pada gambar 2. Hasil komputasi menunjukkan bahwa kecepatan tertinggi slurry batubara ditemukan di sekitar zona pengaduk yaitu sebesar 0.2 m/s. Ini membuktikan bahwa pencampuran sempurna terjadi pada bagian bawah reaktor. Pencampuran sempurna bertujuan untuk meningkatkan reaksi pencairan batubara. Dari gambar 2 juga bisa dilihat bahwa kecepatan perputaran tidak mencapai bagian atas reaktor.



Gambar 2. Pola Alir Kecepatan Slurry Batubara dalam Reaktor

Pola Alir Temperatur Slurry Batubara dalam Reaktor

Gambar 3 menghadirkan profil temperatur slurry batubara dalam reaktor selama waktu reaksi 10 menit. Dari gambar ini kita bisa melihat bahwa suhu disekitar pengaduk hampir homogen yaitu sekitar 450°C (723 K). Hal ini menunjukkan bahwa pencampuran sempurna terjadi pada bagian bawah reaktor. Namun sebaliknya, suhu pada bagian atas reaktor lebih tinggi dibanding suhu pada bagian atas reaktor, yaitu sekitar 527°C (800K). Hal ini ini dikarenakan bertambahnya jumlah produk gas karena reaksi perengkahan dan hidrogenasi selama proses pencairan batubara, sehingga suhu pada bagian atas reaktor menjadi lebih tinggi.



Gambar 3. Pola Alir Temperatur Slurry Batubara dalam Reaktor setelah waktu reaksi 10 menit.

Yield Produk Distilat dan CLB Pada Berbagai Temperatur

Pengaruh perubahan temperatur pada yield distilat dapat dilihat pada gambar 4. Data hasil percobaan menunjukkan bahwa jumlah produk distilat meningkat dengan bertambahnya temperatur, kenaikan produk terbesar adalah pada suhu 450°C. Sementara hasil simulasi tidak menunjukkan kenaikkan produk yang cukup signifikan dengan naiknya suhu. Pada suhu 450 dan 470°C, jumlah yield distilat yang dihasilkan dari data percobaan dan simulasi hampir mendekati sama yaitu sekitar 37.7 % sampai 40.5 %. Dari hasil eskperimen dan modeling dapat disimpulakn bahwa yield distilat optimum diperoleh pada saat suhu operasi 450°C.



Gambar 4. Yield Produk Distilat Pada Berbagai Temperatur.

Gambar 5 menunjukkan pengaruh perubahan temperatur pada yield Coal Liquid Bottom (CLB). Hasil percobaan menunjukkan bahwa dengan semakin naiknya temperatur maka yield CLB semakin menurun. Namun demikian, hasil simulasi menunjukkan bahwa kenaikan suhu tidak menyebabkan bertambahnya produk CLB. Pada suhu 430°C, persen yield CLB hasil simulasi dan data percobaan mendekati sama yaitu sekitar 49 %.



Gambar 5. Yield Produk CLB Pada Berbagai Temperatur.

5. Kesimpulan

Dari hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa sofware FLUENT 6.3 (paket CFD) dapat menggambarkan pola alir dan dinamika pencampuran sistem multifase dan reaksi hidrogenasi dan perengkahan dalam reaktor pencairan batubara. Kecepatan tertinggi slurry batubara berada pada zona disekitar pengaduk. Pencampuran sempurna terjadi pada bagian bawah reaktor, dimana reaksi perengkahan dan hidrogenasi terjadi. Hal ini dibuktikan dengan kehomogenan suhu pada zona ini yaitu sekitar 450°C (723 K). Yield distilat dan CLB yang diperoleh dari pemodelan CFD hampir mendekati yield distilat hasil percobaan. Kondisi optimum diperoleh pada saat suhu operasi 450°C.

Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terimakasih atas bantuan dana penelitian RUSNAS PEBT kepada Pemerintah Provinsi Sumatera Selatan dan Menteri Negara Riset dan Teknologi. Serta pihak-pihak terkait yang telah membantu pelaksanaan penelitian ini.

DAFTAR SIMBOL

- C_D Drag coefficient, [-]
- C_{μ} Konstanta turbulensi, [-]
- d_s Diameter partikel, [m]
- *e*_s Particle collisions coefficient, [-]
- g Percepatan gravitasi, $[m s^{-2}]$
- g_o Radial distribution function, [-]
- H_i Enthalpi spesifik fase ke- i, [J kg⁻¹]
- $k_{\Theta s}$ Koefisien diffusi, [kg m⁻¹ s⁻¹]
- k_i Energi turbulen kinetik, [J kg⁻¹]
- *P* Tekanan statik, $[N m^{-1}]$
- P_s Tekanan solid, [N m⁻¹]
- q_i Flux panas, $[W m^{-2}]$
- Re_s Bilangan Reynolds, [-]
- T_s Stress tensor solid, [Pa]
- U_i Kecepatan fase ke-i, $[m s^{-1}]$

- α Turbulent kinetic energy dissipation rate, $[m^2 s^{-3}]$
- β Koefisien pertukaran solid-fluida, [kg m⁻³ s⁻¹]
- ρ_i Densiti fase ke-i, [kg m⁻³]
- ε_i Fraksi volum fase ke-i, [-]
- ϵ_i Turbulent dissipation rate, $[m^2 s^{-3}]$
- τ_i Shear stress tensor of ith phase, [N m⁻²]
- $\gamma_{\rm s}$ Collisional dissipation of energy, [kg m⁻¹ s⁻³]
- Θ_s Granular temperature, $[m^2 s^{-1}]$
- $]\mu_b$ Solid bulk viscosity, [kg m⁻¹ s⁻¹]
- μ_i Viscosity of ith phase, [kg m⁻¹ s⁻¹]
- $\mu_{s,dill}$ Solid phase dilute viscosity, [kg m⁻¹ s⁻¹]
- μ_t Turbulent viscosity, [kg m⁻¹ s⁻¹]

DAFTAR PUSTAKA

ANSYS, Fluent 6.3 Documentation (2008).

- Li, X., Hu, H., Zhu, S., Hu, S., Wu, B., Meng, M., (2008) Kinetics of Coal Liquefaction during Heating-up and Isothermal Stages. Fuel., 87, 508-513.
- Liu, S. X. and Peng, M., (2005) Verification of mass transfer simulation with CFD using highly accurate solutions, *Computers and Electronics in Agriculture*, 49, 309-314.
- Hartiniati, (2000) Brown Coal Liquefaction to Produce Synthetic Oil Investment Opportunity in the Beginning of 21st Century, *Coal-Tech 2000*, Jakarta.
- Komatsu N., (2000) Outline of Research Collaboration on Coal Liquefaction Technology between Indonesia and Japan, *Coal-Tech 2000*, Jakarta.
- Narita H., Maekawa Y., (2000) Coal Liquefaction Properties of Low Rank Coal, *Coal-Tech 2000*, Jakarta.
- Novia, N., Ray, M. S., Pareek V. K.;, (2006) Application of CFD for Transient Multiphase Flow and Reaction Modeling in a Riser, *Proceeding of Fifth International Conference on CFD in the Process Industries, CSIRO, Melbourne, Australia* Paper No. 172Par.
- Novia, N., Agustina, T. E., Santoso, B., Murti, S. (2008)Preliminary Study on CFD Simulation of Multiphase Flow Mixing in Brown Coal Liquefaction Reactor. Proceeding of Sriwijaya International Seminar on Energy Science and Technology 2008 (SISEST-2008), Palembang, Indonesia on 5-6 November 2008, Paper No. CL.02.
- Okuyama N., Yasumuro, M., Yanai, S., Tamura M., Shimasaki, K., Kaneko, T., Makino E., Silalahi, L., H., (2000) Investigation of

ETU01-5

Seminar Nasional Teknik Kimia Indonesia – SNTKI 2009 Bandung, 19-20 Oktober 2009

Indonesian Limonite Ore for a Direct Coal Liquefaction Catalyst, *Coal-Tech* 2000, Jakarta.

- Silalahi, L. H. and Yusnitati, (2000) Investigation of Limonite Catalyst for Coal Liquefaction of Bangko Coal, *Coal-Tech* 2000, Jakarta.
- Simsek E. H., Karaduman, A., Olcay A., (2001) Investigation of Dissolution Mechanism of Six Turkish Coals in Tetralin with Microwave Energy. *Fuel*, 80, 2181.
- Weller S., Clark E., L., Pelipetz, M., G., (1950) Mechanism of Coal Hydrogenation. Ind. Eng. Chem., 42, 334.
- Williams, K., A., Saini, S., and Wick, T., M., (2002) Computational Fluid Dynamics Modeling of Steady-State Momentum and Mass Transport in a Bioreactor for Cartilage Tissue Engineering. *Biotechnol. Prog.* 18, 951-963.