Kehidupan yang makin maju dan kompleks mendorong manusia untuk memproduksi bahan-bahan berkualitas pada skala industri, sehingga diperlukan teknik perancangan sistem/peralatan pemrosesan bahan yang semakin kompetitif. Perancangan tersebut, selain membutuhkan pertimbangan yang bersifat kualitatif, umumnya juga memerlukan pertimbangan yang bersifat kuantitatif dalam bentuk angka-angka hasil estimasi, meskipun tidak harus sangat akurat. Sistem/peralatan pemrosesan bahan dapat digolongkan menjadi dua jenis, yaitu yang beroperasi pada kondisi yang relatif dekat dengan keadaan setimbang dan yang beroperasi pada kondisi yang relatif jauh dari keadaan setimbang. Untuk komputasi sistem/peralatan yang beroperasi dekat dengan keadaan setimbang, diperlukan konsep kesetimbangan (equilibrium). Dilain pihak, untuk yang beroperasi jauh dari keadaan setimbang, diperlukan konsep laju proses (rate process). Namun laju proses umumnya sangat tergantung jauhnya perbedaan keadaan saat itu dengan keadaan setimbang, sehingga perhitungan laju proses juga memerlukan perhitungan keadaan kesetimbangannya. Akibatnya, komputasi berbasis konsep termodinamika kesetimbangan sangat diperlukan pada perhitungan kedua jenis sistem/peralatan tersebut. Disamping itu, karena pemrosesan bahan umumnya melibatkan dua proses pokok, yaitu proses fisis (terutama perubahan fasa) serta proses kimiawi, maka komputasi berbasis konsep kesetimbangan fasa (proses fisis) dan kesetimbangan kimia sangat bermanfaat untuk perancangan sistem pemrosesan bahan.

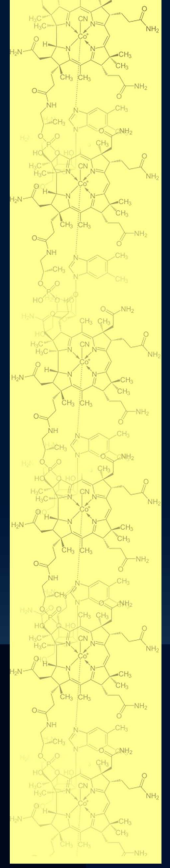
Buku ini mencoba menyajikan teknik komputasi termodinamis untuk kesetimbangan fasa maupun kesetimbangan kimia melalui sejumlah studi kasus. Diharapkan pembaca bisa mengekstrak esensi metodologi dan strategi implementasi komputasi tersebut dengan mengikuti analisis dan pelaksanaan komputasi yang disajikan. Program komputer untuk pelaksanaan komputasi tersebut dengan menggunakan Microsoft Excel, suatu software yang sudah dikenal luas, juga disajikan dalam bentuk soft-copy. Analisis kasus-kasus yang disajikan di buku ini tentunya memerlukan bekal teori terkait, dalam hal ini konsep termodinamika klasik. Bagi pembaca yang memerlukan penyegaran ataupun pengenalan atas termodinamika klasik terkait, pada bagian awal buku ini disajikan suatu review singkat.

PENERBIT
NAS MEDIA PUSTAKA
Anggota IKAPI
Jl. Batua Raya No. 550 Makassar, Sulawesi Selatan 90233
Phone : +62811-43222-71 / +62853-6363-5252
E-mail : redaksi@nasmediabooks.com
Website : www.nasmediapustaka.co.id / www.nasmediabooks.com
Penerbit Nas Media Pustaka @nasmediapustakapenerbit

SAINS & TEKNOLOGI
ISBN 978-602-5662-36-2
9 786025 662362
REFERENSI

Prof. Ir. Wahyudi Budi Sediawan, S.U., Ph.D.
Dr. Ir. Takdir Syarif, S.T., M.T.

KOMPUTASI TERMODINAMIS UNTUK KESETIMBANGAN FASA DAN KESETIMBANGAN KIMIA



Prof. Ir. Wahyudi Budi Sediawan, S.U., Ph.D.
Dr. Ir. Takdir Syarif, S.T., M.T.

KOMPUTASI TERMODINAMIS

UNTUK KESETIMBANGAN FASA DAN KESETIMBANGAN KIMIA

Prof. Ir. Wahyudi Budi Sediawan, S.U., Ph.D.
Dr. Ir. Takdir Syarif, S.T., M.T.

KOMPUTASI TERMODINAMIS

UNTUK KESETIMBANGAN FASA DAN KESETIMBANGAN KIMIA

Sanksi Pelanggaran Pasal 72
Undang-Undang Nomor 19 Tahun 2002 Tentang HAK CIPTA

1. Barangsiapa dengan sengaja melanggar dan tanpa hak melakukan perbuatan sebagaimana dimaksud dalam Pasal 2 ayat (1) atau Pasal 49 ayat (1) dan ayat (2) di pidana dengan pidana penjara masing-masing paling singkat 1 (satu) bulan dan/atau denda paling sedikit Rp.1.000.000,00 (satu juta rupiah) atau pidana penjara paling lama 7 (tujuh) tahun dan/atau denda paling banyak Rp.5.000.000.000,00 (lima miliar rupiah).
2. Barangsiapa dengan sengaja menyiarkan, memamerkan, mengedarkan, atau menjual kepada umum suatu ciptaan atau barang hasil pelanggaran Hak Cipta atau hak terkait sebagaimana dimaksud pada ayat (1) dipidana dengan pidana penjara paling lama 5 (lima) tahun dan/atau denda paling banyak Rp.500.000.000,00 (lima ratus juta rupiah)

Prof. Ir. Wahyudi Budi Sediawan, S.U., Ph.D.
Dr. Ir. Takdir Syarif, S.T., M.T.

KOMPUTASI TERMODINAMIS

UNTUK KESETIMBANGAN FASA DAN KESETIMBANGAN KIMIA

KOMPUTASI TERMODINAMIS UNTUK KESETIMBANGAN FASA DAN KESETIMBANGAN KIMIA

Prof. Ir. Wahyudi Budi Sediawan, S.U, Ph.D
Dr. Ir. Takdir Syarif, S.T., M.T

- Makassar : © 2018

Layout : **Nas Media Creative**
Design Cover : **Nas Media Creative**

Copyright © Wahyudi, Takdir 2018
Hak cipta ada pada Penerbit Nas Media Pustaka
All right reserved

Cetakan Pertama, Juli 2018

Diterbitkan oleh Penerbit Nas Media Pustaka
CV. Nas Media Pustaka
Anggota IKAPI
Jl. Batua Raya No. 550 Makassar 90233
Telp. 0811-43222-71 / 0853-6363-5252
redaksi@nasmediabooks.com
www.nasmediapustaka.co.id
www.nasmediabooks.com
Instagram : @nasmediapustakapenerbit
Fanspage : Penerbit Nas Media Pustaka

Perpustakaan Nasional: Katalog Dalam Terbitan (KDT)

Wahyudi, Takdir.
Komputasi Termodinamis Untuk Kesetimbangan Fasa dan Kesetimbangan Kimia/Wahyudi Budi Sediawan, Takdir Syarif; --cet.I –Makassar : Nas Media Pustaka, 2018.

Viii + 154 hlm; 16x24 cm
ISBN 978-602-5662-36-2

I. Referensi II. Judul

Dicetak oleh Percetakan CV. Nas Media Pustaka, Makassar
Isi di luar tanggung jawab percetakan

KATA PENGANTAR

Termodinamika merupakan cabang ilmu yang membahas perubahan energi yang menyertai suatu proses. Konsep termodinamika modern yang berkembang saat ini merupakan termodinamika klasik dengan teknik komputasi yang sudah sangat maju. Dengan semakin berkembangannya teknologi komputer, perhitungan-perhitungan yang rumit dapat dengan mudah diselesaikan.

Buku ini disusun untuk memberikan pemahaman mengenai konsep-konsep dasar ketimbangan fasa dan kesetimbangan kimia. Selain itu, disajikan pula teknik komputasi yang dilengkapi dengan algoritma agar pembaca dapat dengan mudah memahami langkah-langkah dalam menyelesaikan kasus-kasus yang ada.

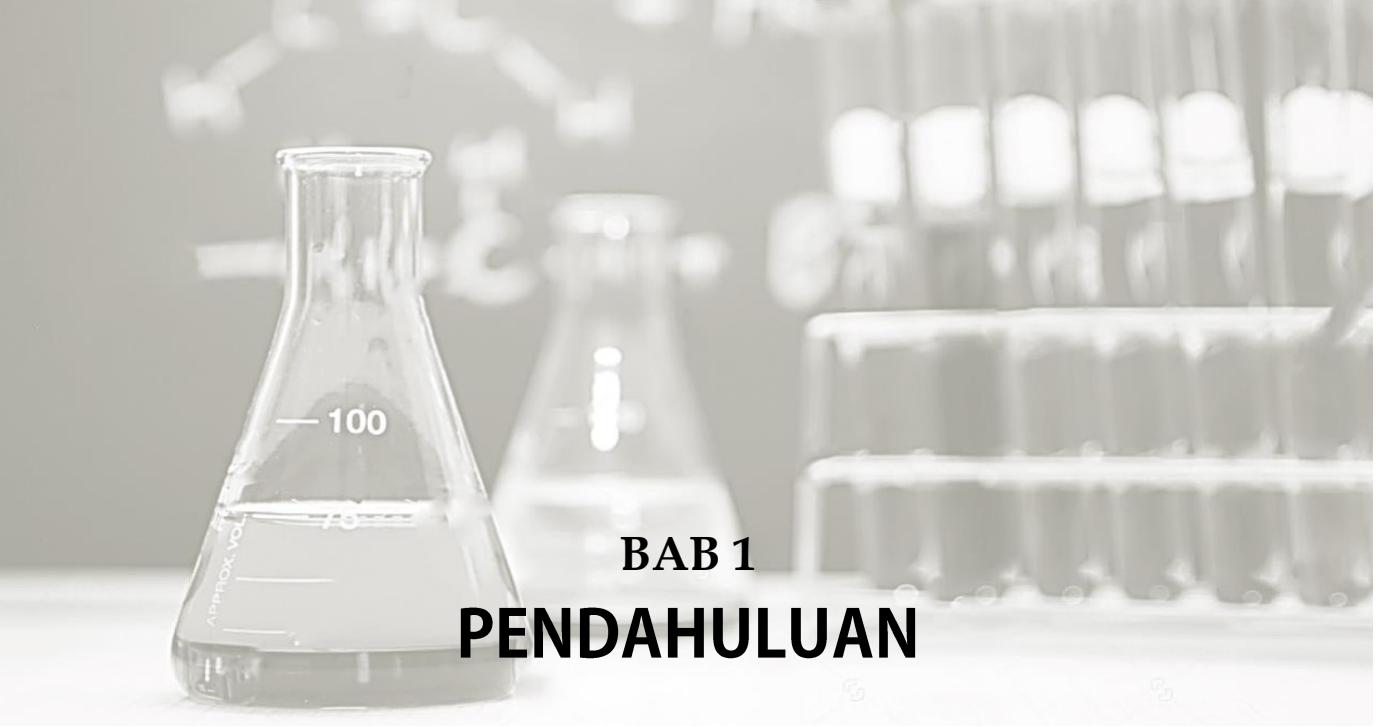
Penulis menyadari bahwa buku ini masih jauh dari kesempurnaan, baik dari segi isi maupun penulisan. Untuk itu, saran dan kritik yang bersifat membangun sangat diharapkan demi perbaikan tulisan-tulisan kami yang akan datang.

Yogyakarta, Juni 2018

Wahyudi Budi Sediawan
Takdir Syarif

DAFTAR ISI

Kata Pengantar ..... **v**
Daftar Isi ..... **iii**
Bab 1. Pendahuluan 1
1.1 Pengantar 1
1.2 Konsep Dasar Ringkas 4
Bab 2. Contoh Aplikasi Kesetimbangan Fasa 15
2.1 Cairan Ideal dan Gas Ideal 15
2.2 Cairan Non-Ideal dan Uap Ideal 36
2.3 Cairan Ideal dan Uap Non-Ideal 60
2.4 Cairan Non-Ideal dan Gas Non-Ideal 88
Bab 3. Contoh Aplikasi Kesetimbangan Kimia 121
3.1 Sintesis Amoniak dengan gas dianggap ideal 121
3.2 Sintesis Amoniak dengan gas dianggap non-ideal 123
3.3 *Primary Reformer* 125
3.4 *Secondary Reformer* 128
3.5 *Adiabatic Equilibrium Temperature* 131
Bab 4. Evaluasi Tetapan Termodinamis Berbasis Data Percobaan 135
4.1 Evaluasi Parameter Model *Two-Suffix Margules* Berbasis Data Percobaan dengan Metode Barker Untuk Sistem Biner 135
4.2 Evaluasi Parameter Model *Two-Suffix Margules* Berbasis Data Percobaan dengan Metode Barker Untuk Sistem Terner 139
4.3 Evaluasi Nilai Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer* 143
Daftar Pustaka **149**
Biografi Penulis **151**



BAB 1
PENDAHULUAN

1.1. Pengantar

Konsep-konsep termodinamika sangat bermanfaat untuk komputasi di bidang teknik maupun bidang-bidang ilmu lainnya, baik untuk perancangan alat/sistem ataupun untuk pemahaman lebih mendalam atas fenomena-fenomena yang terjadi di alam semesta. Termodinamika dapat dipandang sebagai ilmu yang membahas perubahan energi yang menyertai terjadinya proses-proses. Dengan memahami perubahan energi yang menyertai terjadinya suatu proses, manusia dapat mendorong terjadinya proses tersebut dengan mengatur perubahan energinya. Misal pada proses penguapan dibutuhkan energi panas, maka orang bisa mendorong terjadinya proses penguapan dengan memasukkan energi panas ke sistem itu. Untuk kasus itu diperlukan 2 hal pokok, yaitu energi dan alat untuk pelaksanaannya. Memang secara umum dapat dikatakan bahwa untuk mendorong terjadinya suatu proses diperlukan energi dan alat untuk pelaksanaannya. Seperti disebut di depan, termodinamika membahas perubahan energi yang menyertai suatu proses, namun tidak membahas secara terperinci peralatan untuk pelaksanaannya.

Perkembangan termodinamika dapat dibagi menjadi dua tahapan pokok, yaitu termodinamika klasik dan termodinamika statistis. Pada termodinamika klasik, bahan dianggap sebagai suatu medium kontinyu. Termodinamika klasik telah berkembang cukup lama dan konsep-konsepnya sudah relatif mantap. Sebagai gambaran, perumusan hukum termodinamika I terjadi pada lebih dari 150 tahun yang lalu. Dewasa ini berkembang termodinamika modern, yang pada hakikatnya adalah termodinamika klasik yang dilengkapi dengan komputasi maju. Hal ini terdorong oleh tersedianya sarana komputasi yang makin maju. Model-model termodinamika yang dulu dirasa tidak layak (*unfeasible*) karena kerumitannya, sekarang dipandang layak. Sementara itu termodinamika statistis memandang bahwa bahan adalah *ensemble* dari partikel-partikel mikroskopis (atom, molekul, dll). Termodinamika statistis saat ini sedang dalam perkembangan yang pesat. Di masa mendatang aplikasinya di bidang teknik atau ilmu pengetahuan lainnya akan semakin penting. Isi buku ini dapat digolongkan termodinamika modern, karena membahas berbagai kasus pelaksanaan komputasi berbasis termodinamika klasik untuk perhitungan kesetimbangan fasa dan kesetimbangan kimia.

Ada dua konsep pokok yang dibahas pada termodinamika klasik yaitu kuantitas energi (hukum termodinamika I) dan kualitas energi (hukum termodinamika II). Menurut konsep ini energi itu kekal dan dapat bermanifestasi dengan berbagai "perwujudan", misalnya energi panas, energi mekanis, energi listrik dan sebagainya. Dapat dikatakan bahwa hukum termodinamika I adalah salah satu formulasi hukum kekekalan energi, walaupun bentuk awalnya hanya meliputi energi panas dan energi mekanis. Di lain pihak, hukum termodinamika II berbasis pemikiran bahwa ada kualitas energi. Konsep ini memberi sumbangan besar pada perkembangan sains dan teknologi, antara lain karena dapat memprediksi kecenderungan arah suatu proses. Salah satu konsep turunannya adalah adanya gaya dorong (*driving force*) terjadinya suatu proses. Misal untuk suatu

sistem ada 2 kemungkinan keadaan, (misal keadaan A dan keadaan B) maka jika gaya dorong proses perubahan A menjadi B lebih besar dari gaya dorong proses perubahan dari B ke A, maka keadaan A akan cenderung berubah menjadi keadaan B. Demikian pula sebaliknya. Salah satu keadaan khususnya adalah jika gaya-gaya dorong tersebut sama maka keadaan A akan setimbang dengan keadaan B. Konsep ini dipakai pada seluruh bahasan di buku ini, meskipun dengan bentuk yang lebih operasional.

Sebenarnya ada 2 model utama untuk pendekatan kesetimbangan, yaitu yang berbasis konsep laju proses dan yang berbasis daya dorong. Pada konsep berbasis laju proses, keadaan setimbang akan terjadi jika laju proses-proses yang berlawanan sama. Sebaliknya seperti disebutkan di depan, pada konsep berbasis gaya dorong, keadaan setimbang akan terjadi jika gaya-gaya dorong proses yang berlawanan sama. Perkembangan studi kesetimbangan selanjutnya menunjukkan bahwa pendekatan berbasis konsep gaya dorong bersifat lebih komprehensif dan menghasilkan lebih banyak konsep bermanfaat.

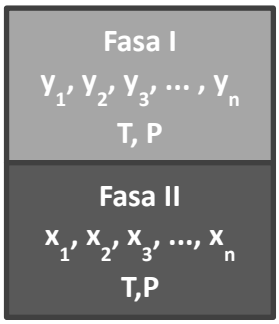
Seperti disebutkan di muka, buku ini membahas aplikasi konsep termodinamika untuk komputasi fenomena yang melibatkan fenomena kesetimbangan fasa dan kesetimbangan kimia. Konsep dasar termodinamika yang sudah banyak dibahas di banyak buku tidak dibahas pada buku ini. Namun untuk *review* singkat atas konsep-konsep termodinamika yang akan dipakai, pada sub bab 1.2 disajikan suatu uraian ringkas atas konsep-konsep dasar tersebut. Tujuan pokok penyajian kasus-kasus pada buku ini adalah sebagai jembatan untuk memberikan gambaran pola pikir dan prinsip metoda yang banyak dipakai pada komputasi termodinamis untuk fenomena kesetimbangan. Selanjutnya pembaca diharapkan bisa mengaplikasikannya untuk kasus-kasus yang lain, yang lebih kompleks, bahkan di luar bidang termodinamika. Perangkat lunak yang dipakai untuk komputasi adalah yang relatif sederhana dan

dikenal luas, serta umumnya bisa dijalankan pada semua komputer, yaitu Microsoft Excel. Contoh program Microsoft Excel untuk penyelesaian setiap kasus yang dibahas juga dilampirkan dalam bentuk *soft-copy*. Pembaca dipersilahkan mencoba dan memodifikasinya sesuai keperluan. Untuk mencobanya, yang perlu dilakukan adalah memasukkan nilai variabel-variabel untuk *trial solution*, kemudian menjalankan *solver* yang ada di Microsoft Excel.

Secara garis besar isi buku ini dapat digambarkan sebagai berikut. Pada Bab 1, disajikan pengantar dan suatu *review* singkat konsep-konsep termodinamika yang dipakai pada bab-bab selanjutnya. Sementara itu, bab 2 menyajikan analisis dan komputasi kasus-kasus kesetimbangan fasa, yang mencakup kesetimbangan fasa cairan ideal dan uap ideal, cairan non-ideal dan uap ideal, cairan ideal dan uap non-ideal, cairan non-ideal dan uap non-ideal, cairan non-ideal dan uap non-ideal yang bercampur *non-condensable-gas*. Setelah itu pada Bab 3 disajikan analisis dan komputasi kasus-kasus kesetimbangan kimia. Pada bagian terakhir, yaitu Bab 4, disajikan analisis dan komputasi untuk evaluasi nilai parameter-parameter termodinamika berbasis data percobaan dengan konsep minimasi *sum of squares of errors*.

1.2. Konsep Dasar Ringkas

1.2.1. Kesetimbangan Fasa



Dua fasa disebut setimbang jika dapat berkontak tanpa terjadi perpindahan massa antar fasa (makroskopis). Teori dasar kesetimbangan dapat dibaca secara detail di buku-buku termodinamika klasik misalnya *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamic* (Smith, et al, 2005), *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria* (Prausnitz, et al, 1990). Bab ini akan

menyajikan ringkasan konsep-konsep yang akan dipakai sepanjang buku ini.

Prasyarat terjadinya setimbang fasa:

1. Kesetimbangan termal (suhu seragam):

$$T^{I}=T^{II}=T$$

2. Kesetimbangan mekanikal (tekanan seragam):

$$P^{I}=P^{II}=P$$

Syarat setimbang fasa:

"*driving force* transfer massa tiap komponen dari fasa I ke fasa II sama dengan dari fasa II ke fasa I"

Secara termodinamis:

$f_i^I = f_i^{II}$ ..... (1.2.1)

(i=1, 2, 3, ..., k)

dengan, f_i=fugasitas parsial komponen i.

Misal ditinjau kesetimbangan fasa uap-cair. Fugasitas parsial komponen i di fasa I (misal fasa gas) umumnya didekati dengan persamaan (Smith, et al, 2005):

$f_i^I = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P$ ..... (1.2.2)

dengan:

$\emptyset_i$ = koefisien fugasitas parsial komponen i

y_i = fraksi mol komponen i

P = tekanan sistem

Untuk gas ideal, nilai $\emptyset_i$ = 1 (Hukum Dalton)

Nilai $\emptyset_i$ dapat dicari berbasis equation of state (hubungan P-V-T).

Fugasitas fasa II (misal fasa cair):

$$f_i^{II} = \gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 \cdot (\emptyset_i^0)_{T,P_i^0} \cdot \exp(\frac{1}{RT}\int_{P_i^0}^{P} v_i dP) \quad \text{.....} \quad (1.2.3)$$

dengan :

γ_i = koefisien aktivitas komponen i

x_i = fraksi mol komponen i

P_i^0 = tekanan uap murni i

v_i = volum per mol cairan murni i

$\exp(\frac{1}{RT}\int_{P^s}^{P} v_i dP)$ = koreksi Poynting.

Karena nilai v_i relatif kecil, maka nilai koreksi Poynting umumnya mendekati 1 jadi tidak diperhitungkan. Jika tekanan uap murni komponen i tidak terlalu tinggi maka $(\emptyset_i^0)_{T,P_i^0}$ mendekati 1, jadi tidak diperhitungkan pula. Diperoleh bentuk lebih sederhana:

$$f_i^{II} = \gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 \quad \text{.....} \quad (1.2.4)$$

Jika campuran ideal, maka γ_i=1 (Hukum Raoult).

Kombinasi persamaan (1.2.1), (1.2.2), dan (1.2.4) menghasilkan persamaan dasar kesetimbangan fasa uap-cair yang umum dipakai:

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

(i=1, 2, 3, ..., k)

Persamaan (1.2.5) bisa ditulis dalam bentuk lain sebagai berikut:

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

dengan

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

Untuk cairan ideal dan gas non-ideal:

$$x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P$$

Untuk cairan non-ideal dan gas ideal:

$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P$

Untuk cairan ideal dan gas ideal

$x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P$ ..... (1.2.8)

Persamaan (1.2.8) terkenal sebagai persamaan Raoult-Dalton.

Termodinamika menyediakan berbagai model pendekatan untuk mengestimasi nilai γ_i dan $\emptyset_i$, dari yang relatif kasar sampai teliti. Pengguna bisa memilih pendekatan mana yang dipakai, sesuai tujuan komputasi serta situasi dan kondisi. Perlu diingat pula bahwa model mana yang cocok sangat ditentukan oleh sifat-sifat/jenis bahan serta kondisi operasinya.

Nilai γ_i dapat didekati misalnya dengan model Scatchard-Hildebrand *(Regular Solution Theory)* yang relatif sederhana (Prausnitz, et al, 1999):

$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2$ ..... (1.2.9)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (1.2.10)

v_i = volum per mol komponen i

δ_i = *solubility parameter* komponen i.

Model ini banyak dipakai untuk cairan. Uraian teori ini banyak disajikan di buku-buku Termodinamika, misalnya *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria* oleh Prausnitz, et al, 1999. Model ini akan dipakai sebagai contoh pada analisis sepanjang buku ini. Tersedia banyak model untuk estimasi γ_i, misal: Van Laar, Margules, Wilson, NRTL, UNIQUAC, UNIFAC, dan lain-lain. Pemakai perlu menentukan dengan bijaksana model mana yang diprediksi bisa mendekati sistem yang dibahas.

Persamaan umum untuk $\emptyset_i$ (fasa uap) berbentuk (Prausnitz, et al, 1999):

$$\ln \emptyset_i = \frac{1}{RT}\int_{P=0}^{P=P}\left(\overline{v_i} - \frac{RT}{P}\right) dP \quad \text{.....} \quad (1.2.11)$$

atau:

$$\ln \emptyset_i = \frac{1}{RT}\left[\int_{V=V}^{V=\sim}\left(\frac{\partial P}{\partial n_i}\right)_{T,\,P,\,n_j} - \frac{RT}{P}\right] dV - RT \ln z \quad \text{.....} \quad (1.2.12)$$

Pendekatan dengan persamaan (1.2.11) dan (1.2.12) membutuhkan persamaan keadaan *(equation of state)* dan *mixing rule*. Persamaan keadaan sederhana untuk $\emptyset_i$ misalnya adalah dengan *Second Virial Expansion* seperti misalnya pada Nagahama and Hirata, 1970. Pendekatan jenis ini bisa dipakai sampai tekanan menengah. Jika dipakai model *Second Virial Expansion* seperti pada Nagahama and Hirata, 1970, diperoleh:

$$\ln \emptyset_i = \frac{2P}{RT}\sum_{j=1}^{n} y_j B_{ij} - B \quad \text{.....} \quad (1.2.13)$$

$$B_{ij} = (B_i B_j)^{0,5} \quad \text{.....} \quad (1.2.14)$$

$$B = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} y_i y_j\, B_{ij} \quad \text{.....} \quad (1.2.15)$$

Bentuk tersebut relatif sederhana (Nagahama and Hirata, 1970) dan akan dipakai sepanjang buku ini. Tersedia banyak model untuk $\emptyset_i$, berbasis *Equation of State* (hubungan P-V-T) berbeda-beda, misal: Redlich-Kwong, Adachi-Lu, Peng-Robinson, dan lain-lain (Prausnitz, et al, 1999).

Pada buku ini, contoh bahasan yang disajikan menggunakan model γ_i dan $\emptyset_i$ sederhana yang diuraikan di muka, karena buku ini berfokus pada alur pikir konsep penyelesaian problemnya. Pembaca diharapkan bisa mengaplikasikan alur pikir yang disajikan serta algoritma hitungan yang sama dengan memakai model-model lain sesuai tujuan, situasi dan kondisi.

Contoh aplikasi sederhana:

Ingin dicari titik didih air murni (H_2O) pada tekanan P = 1 atm = 760 mmHg. Tekanan uap H_2O ($P^0_{H_2o}$) mengikuti persamaan Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$$\mathrm{P(mmHg)} = \exp\left(20{,}386 - \frac{5132}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (1.2.16)$$

dengan T dalam K.

Analisis:

Ditinjau kesetimbangan fasa cairan dan uap dalam gelembung.

Dari persamaan (1.2.5)

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

Karena cairan dan uap adalah H_2O murni maka y_i dan x_i bernilai 1.

Diperoleh:

$$\gamma_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.17)$$

Karena cairan murni maka keadaan ideal (γ_i=1). Karena tekanan rendah maka $\emptyset_i$=1. Akibatnya $P_i^0 = P$, sehingga:

$$\exp\left(20{,}386 - \frac{5132}{T}\right) = 760$$

$$20{,}386 - \frac{5132}{T} = \ln(760)$$

$$T = 373{,}16\ K = 100°\mathrm{C}$$

1.2.2. Kesetimbangan Kimia

Misalnya ditinjau reaksi homogen setimbang:

$$\nu_A A + \nu_B B \leftrightarrow \nu_C C + \nu_D D \quad \text{.....} \quad (1.2.1)$$

dengan ν_i adalah koefisien reaksi. Pada keadaan setimbang, kosentrasi A, B, C, dan D sudah tidak berubah. Rumus yang sering

dipakai untuk larutan encer, pada keadaan setimbang adalah (Smith, et al, 2005):

$$\frac{C_C^{\nu_C} C_D^{\nu_D}}{C_A^{\nu_A} C_B^{\nu_B}} = K = \text{tetapan kesetimbangan} \quad \text{.....} \quad (1.2.2)$$

dalam hal ini, nilai K tergantung suhu (T).

Rumus termodinamika yang lebih fundamental berbentuk (Smith et al., 2005):

$$K = \frac{a_C^{\nu_C} a_D^{\nu_D}}{a_A^{\nu_A} a_B^{\nu_B}} \quad \text{.....} \quad (1.2.3)$$

dalam hal ini, a_i adalah koefisien aktivitas.

Pada termodinamika, a_i didefinisikan sebagai:

$$a_i = \frac{f_i}{f_i^o} \quad \text{.....} \quad (1.2.4)$$

dengan f_i adalah fugasitas parsial komponen i seperti pada kesetimbangan fasa, f_i^o adalah fugasitas standar. Jika keadaan standar dipilih 1 atm (cukup rendah), maka:

$$f_i^o = 1 \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

sehingga:

$$a_i = f_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

Persamaan kesetimbangan (1.2.3) selanjutnya dapat didekati dengan:

$$K = \frac{f_C^{\nu_C} f_D^{\nu_D}}{f_A^{\nu_A} f_B^{\nu_B}} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

Seperti pada kesetimbangan fasa (Smith, et al, 2005):

$$f_i = \phi_i y_i P \quad \text{.....} \quad (1.2.8)$$

dengan ϕ_i adalah fugasitas komponen i, y_i adalah fraksi mol i, P adalah tekanan sistem. Kombinasi persamaan (1.2.7) dan (1.2.8) menghasilkan:

$$K = \frac{(\phi_C y_C P)^{\nu_C}(\phi_D y_D P)^{\nu_D}}{(\phi_A y_A P)^{\nu_A}(\phi_B y_B P)^{\nu_B}} \quad \text{.....} \quad (1.2.9)$$

$$K = \underbrace{\frac{\phi_C^{\nu_C}\phi_D^{\nu_D}}{\phi_A^{\nu_A}\phi_B^{\nu_B}}}_{K_\phi} \underbrace{\frac{y_C^{\nu_C}y_D^{\nu_D}}{y_A^{\nu_A}y_B^{\nu_B}}}_{K_y} P^{\nu_C+\nu_D-\nu_A-\nu_B} \quad \text{.....} \quad (1.2.10)$$

Jika $\nu_C + \nu_D - \nu_A - \nu_B = \Delta\nu$, maka:

$$K = K_\phi K_y P^{\Delta\nu} \quad \text{.....} \quad (1.2.11)$$

Jika tekanan relatif rendah, gas mendekati ideal, maka ϕ_i=1, sehingga K_ϕ=1.

Diperoleh:

$$K = K_y P^{\Delta\nu} \quad \text{.....} \quad (1.2.12)$$

Untuk tekanan rendah (gas ideal), persamaan (1.2.7) dapat ditulis sebagai:

$$K = \frac{(y_C P)^{\nu_C}(y_D P)^{\nu_D}}{(y_A P)^{\nu_A}(y_B P)^{\nu_B}} \quad \text{.....} \quad (1.2.13)$$

Menurut Dalton, $y_i P = P_i$, sehingga :

$$K = \frac{P_C^{\nu_C}P_D^{\nu_D}}{P_A^{\nu_A}P_B^{\nu_B}} = K_P \quad \text{.....} \quad (1.2.14)$$

Jadi pada tekanan rendah, K = K_P, sehingga persamaan (1.2.12) dapat ditulis sebagai:

$$K_P = K_y P^{\Delta\nu} \quad \text{.....} \quad (1.2.15)$$

Dapat dituliskan pula:

$$K = K_\phi K_P \quad \text{.....} \quad (1.2.16)$$

Pengaruh suhu dapat didekati dengan persamaan Van't Hoff (Smith, et al, 2005):

$$d \ln K = \frac{\Delta H^o}{R} \frac{dT}{T^2} \quad \text{.....} \quad (1.2.17)$$

dengan ΔH^oadalah perubahan entalpi reaksi pada keadaan standar. Jika ΔH^o tetap, maka integrasi persamaan (2.1.17) menghasilkan

$$\ln\left(\frac{K}{K_o}\right) = -\frac{\Delta H^o}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_o}\right) \quad \text{.....} \quad (1.2.18)$$

dengan K_o adalah tetapan kesetimbangan pada suhu T_o. Bentuk lain persamaan (1.2.18) adalah:

$$\ln K = A\frac{1}{T} + B \quad \text{.....} \quad (1.2.19)$$

$$K = \exp\left(A\frac{1}{T} + B\right) \quad \text{.....} \quad (1.2.20)$$

Berdasarkan konsep ringkas dimuka, dapat dijawab pertanyaan apa yang terjadi pada reaksi kesetimbangan kimia seperti pada persamaan (1.2.1) jika:

1. Tekanan dinaikkan
2. Ditambah A atau B
3. Ditambah C atau D
4. C atau D diambil
5. Ditambah gas inert
6. Suhu dinaikkan

Pertanyaan-pertanyaan tersebut akan terjawab dengan lebih kuantitatif pada analisis kasus-kasus di bab-bab berikutnya.

1.2.3. Perhitungan Entalpi Untuk Neraca Panas

Termodinamika menyediakan konsep-konsep untuk perhitungan neraca panas terkait kesetimbangan fasa maupun kesetimbangan kimia (Smith, et al, 2005).

Pada perhitungan entalpi untuk neraca panas pada peristiwa terkait kesetimbangan fasa uap-cair, terlibat panas penguapan, panas sensibel, panas pencampuran cairan dan perubahan entalpi uap akibat perubahan tekanan atau $(\partial H/\partial P)_T$. Namun pada neraca panas

proses kesetimbangan fasa uap-cair, pengaruh dua faktor terakhir (panas pencampuran cairan dan perubahan entalpi uap akibat perubahan tekanan) relatif kecil dibandingkan pengaruh dua faktor pertama. Oleh karena itu, entalpi cairan dan entalpi uap umumnya didekati dengan persamaan sebagai berikut.

Entalpi cairan:

$$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R) \quad \text{(1.2.21)}$$

dengan H_L adalah entalpi cairan, x_i adalah fraksi mol komponen i, cp_{Li} adalah kapasitas panas komponen i cair, T adalah suhu cairan dan T_R adalah suhu referensi.

Entalpi uap:

$$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R)) \quad \text{(1.2.22)}$$

dengan H_V adalah entalpi uap, y_i adalah fraksi mol komponen i dalam uap, λ_i adalah perubahan entalpi penguapan komponen i pada suhu referensi, cp_{vi} adalah kapasitas panas komponen i pada fasa uap, T adalah suhu uap dan T_R adalah suhu referensi. Persamaan (1.2.21) dan (1.2.22) berlaku jika cp_{Li} dan cp_{vi} tetap. Namun jika cp_{Li} dan cp_{vi} berubah terhadap suhu, dipakai konsep integral.

Penyederhanaan yang mirip juga lazim dipakai pada perhitungan entalpi untuk neraca panas pada peristiwa terkait kesetimbangan kimia, dimana terlibat panas reaksi, panas sensibel, panas laten perubahan fasa, panas pencampuran cairan dan perubahan entalpi uap akibat perubahan tekanan atau $(\partial H/\partial P)_T$. Namun pada neraca panas peristiwa terkait kesetimbangan kimia, pengaruh dua faktor terakhir juga relatif kecil dibandingkan dengan pengaruh tiga faktor pertama. Oleh karena itu, pengaruh dua faktor terakhir diabaikan. Prinsip paling dasar yang dipakai pada perhitungan neraca panas reaksi kimia adalah bahwa perubahan

entalpi reaksi akibat reaksi kimia adalah sebesar entalpi zat-zat sesudah reaksi dikurangi entalpi zat-zat sebelum reaksi.

BAB 2
CONTOH APLIKASI KESETIMBANGAN FASA

Berdasarkan konsep dasar yang telas dituliskan pada bab 1, pada bab ini disajikan sejumlah contoh yang berkaitan dengan kesetimbangan fasa. Contoh yang akan disajikan dibagi menjadi 4 kategori yaitu:

2.1. Cairan Ideal dan Gas Ideal
2.2. Cairan Non-Ideal dan Gas Ideal
2.3. Cairan Ideal dan Gas Non-Ideal
2.4. Cairan Non-Ideal dan Gas Non-Ideal.

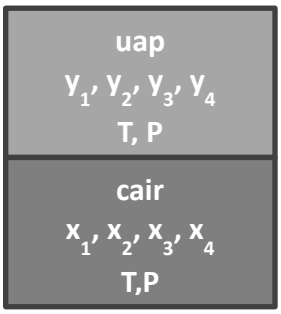
2.1. Cairan Ideal dan Gas Ideal

Pada sub bab ini dibahas sejumlah aplikasi konsep termodinamika untuk sistem Cairan Ideal dan Gas Ideal. Kasus yang dibahas meliputi:

2.1.1. *Bubble Point Temperature*
2.1.2. *Bubble Point Pressure*
2.1.3. *Dew Point Temperature*
2.1.4. *Dew Point Pressure*
2.1.5. *Partial Vaporization*
2.1.6. *Partial Condensation*

2.1.7. *Adiabatic Flash*
2.1.8. *Non-Adiabatic Flash*

2.1.1. Bubble Point Temperature



Suatu campuran cairan yang terdiri atas C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 dinaikkan suhunya (T) pada tekanan tetap P=3 atm. Cairan dan uap dianggap ideal. Ingin dicari suhu saat cairan mulai mendidih.

<u>Analisis:</u>

Start dari persamaan (1.2.5):

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

Karena cairan dan uap dianggap ideal, maka

$\gamma_i = 1$ dan $\emptyset_i = 1$. Diperoleh:

$$x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (2.1.1)$$

$$y_i = \frac{x_i \cdot P_i^0}{P} \quad \text{.....} \quad (2.1.2)$$

Persamaan (2.1.2) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

$$\left.\begin{aligned} y_1 &= \frac{x_1 \cdot P_1^0}{P} \\ y_2 &= \frac{x_2 \cdot P_2^0}{P} \\ y_3 &= \frac{x_3 \cdot P_3^0}{P} \\ y_4 &= \frac{x_4 \cdot P_4^0}{P} \end{aligned}\right\} \quad \text{..... .....} \quad (2.1.3)$$

Persamaan untuk P_i^0 didekati dengan persamaan Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$$\left.\begin{aligned}
\log P_1^0 &= 6{,}8040 - \frac{803{,}81}{T+246{,}99} \\
\log P_2^0 &= 6{,}8090 - \frac{935{,}86}{T+238{,}73} \\
\log P_3^0 &= 6{,}8763 - \frac{1075{,}78}{T+233{,}205} \\
\log P_4^0 &= 6{,}8702 - \frac{1168{,}72}{T+224{,}21}
\end{aligned}\right\} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

dengan P_i^0 dalam mmHg dan T dalam ^{0}C.

Untuk fasa uap berlaku:

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.5)$$

Diketahui : P, x_1, x_2, x_3, x_4

Dicari : T, y_1, y_2, y_3, y_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0

Diperoleh 9 persamaan dengan 9 *unknowns*, sehingga persamaan dapat diselesaikan.

Algoritma penyelesaian:

1. Trial T
2. Menghitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Menghitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.3)
4. Cek apakah $\sum y_i = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 \approx 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 1

Hitungan ini dengan mudah bisa dijalankan dengan Microsoft Excel baik manual maupun dengan bantuan solver. Hasil perhitungan

dengan program *Ideal Systems* di *Sheet* 1 ditunjukkan pada Gambar 2.1.1.

Bubble Point Temperature : Ideal Gases and Liquids

P, atm = 3

Trial: T, C = 26.6514

log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
Ki = Pi0 / P
yi = Ki * xi

Komp	xi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki = Pi0/P	yi
C3H8	0.2000	6.8040	803.81	246.99	7353.97	9.6763	3.2254	0.64509
C4H10	0.3000	6.8090	935.86	238.73	1916.41	2.5216	0.8405	0.25216
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.21	545.03	0.7171	0.2390	0.09562
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	162.71	0.2141	0.0714	0.00714
Jumlah =	1.0000							1.00000

Gambar 2.1.1. Hasil perhitungan *Bubble Point Temperature*

2.1.2. Bubble Point Pressure

Campuran cairan C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap. Jika diinginkan cairan mulai mendidih pada T=30^{0}C, ingin dicari tekanan sistem (P). Tekanan system diperkirakan rendah.

Analisis:

Start juga dari persamaan (1.2.5):

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \qquad \text{.....} \qquad (1.2.5)$$

Karena cairan dianggap ideal maka γ_i=1. Karena tekanan sistem dianggap rendah maka $\emptyset_i$=1.

$$x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P \qquad \text{.....} \qquad (2.1.1)$$

Dapat dituliskan:

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.1.6)

dengan,

$K_i = \frac{P_i^0}{P}$ ..... (2.1.7)

Nilai P_i^0 dihitung dengan persamaan Antoine(*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

dengan P_i^0 dalam mmHg dan T dalam ^{0}C.

Persamaan (2.1.7), (2.1.6), (2.1.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Harus dipenuhi pula:

$\sum y_i = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$ ..... (2.1.5)

Diketahui : T, x_1, x_2, x_3, x_4

Dicari : P, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0

Diperoleh 13 persamaan dengan 13 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Trial P
3. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
4. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.6)
5. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 2

Hasil hitungan dengan Microsoft Excel baik manual maupun dengan solver ada di program *Ideal Systems* pada *Sheet* 2 sebagaimana yang ditunjukkan pada Gambar 2.1.2.

Bubble Point Pressure : Ideal Gases and Liquids

	T, C =	30	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	P, atm =	3.285677	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
			Ki = Pi0 / P
			yi = Ki * xi

Komp	xi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki = Pi0/P	yi
C3H8	0.2	6.80398	803.81	246.99	7980.573	10.5008	3.1959182	0.63918
C4H10	0.3	6.80896	935.86	238.73	2120.465	2.7901	0.8491661	0.25475
C5H12	0.4	6.87632	1075.78	233.21	615.301	0.8096	0.2464048	0.09856
C6H14	0.1	6.87024	1168.72	224.21	187.405	0.2466	0.0750486	0.00750
Jumlah =	1							1.00000

Gambar 2.1.2. Hasil perhitungan *Bubble Point Pressure*

2.1.3. Dew Point Temperature

Campuran uap C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P=3 atm. Cairan dan uap dianggap ideal. Ingin dicari suhu saat mulai terjadi pengembunan.

Analisis:

Start dari persamaan (1.2.5).

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

Karena cairan dan uap dianggap ideal maka γ_i=1, $\emptyset_i$=1.

$$x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (2.1.1)$$

$$x_i = y_i \cdot \frac{P}{P_i^0} \quad \text{.....} \quad (2.1.8)$$

Bisa dituliskan:

$x_i = \frac{y_i}{K_i}$ ..... (2.1.9)

$K_i = \frac{P_i^0}{P}$ ..... (2.1.7)

Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

Persamaan (2.1.4), (2.1.7), dan (2.1.9) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Ada persamaan lain yang harus dipenuhi:

$\sum x_i = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

Diketahui : P, y_1, y_2, y_3, y_4

Dicari : T, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0

Diperoleh 13 persamaan dengan 13 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
4. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.9)
5. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan Microsoft Excel baik manual maupun dengan solver ada di program *Ideal Systems* pada *Sheet* 3 (Gambar 2.1.3).

Dew Point Temperarure : Ideal Gases and Liquids

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	T, C =	64.437154	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
			Ki = Pi0 / P
			yi = Ki * xi

Komp	yi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki = Pi0/P	xi
C3H8	0.2000	6.8040	803.8100	246.9900	16708.0961	21.9843	7.3281	0.02729
C4H10	0.3000	6.8090	935.8600	238.7300	5272.4939	6.9375	2.3125	0.12973
C5H12	0.4000	6.8763	1075.7800	233.2050	1828.0152	2.4053	0.8018	0.49890
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7200	224.2100	662.6477	0.8719	0.2906	0.34407
Jumlah =	1.0000							1.00000

Gambar 2.1.3. Hasil perhitungan *Dew Point Temperature*

2.1.4. Dew Point Pressure

Campuran uap C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap (P). Jika diinginkan mulai terjadi pengembunan pada suhu T= 70^0C, ingin dicari tekanan sistem (P). Cairan dan uap dapat dianggap ideal.

Analisis:

Persamaan matematik untuk kasus ini sama dengan pada sub-sub bab 2.1.3, yaitu persamaan (2.1.9), (2.1.7), (2.1.4), dan (2.1.10).

Diketahui : P, y_1, y_2, y_3, y_4

Dicari : T, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0

Diperoleh 13 persamaan dengan 13 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Trial P
3. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
4. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.9)
5. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 2

Hasil hitungan dengan Microsoft Excel baik manual maupun dengan solver ada di program *Ideal Systems* pada *Sheet* 4 (Gambar 2.14).

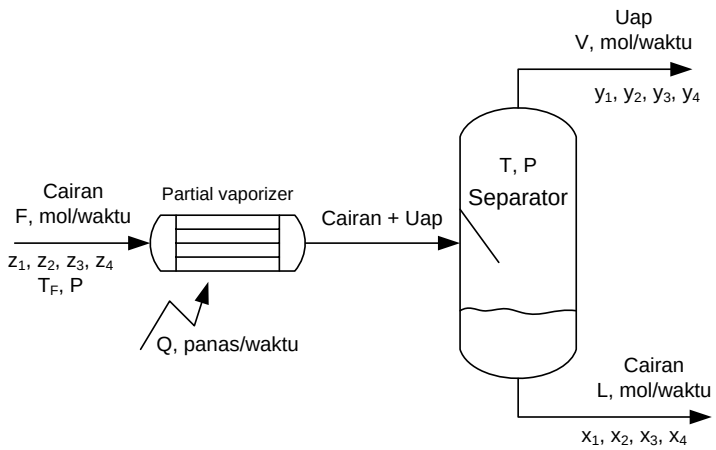
Dew Point Pressure : Ideal Gases and Liquids

	T, C =	70	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	P, atm =	3.506941	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
			Ki = Pi0 / P
			yi = Ki * xi

Komp	yi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki = Pi0/P	xi
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	18544.78	24.4010	6.95792	0.028744
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	5992.92	7.8854	2.24852	0.133421
C5H12	0.4000	6.87632	1075.78	233.21	2129.57	2.8021	0.79900	0.500623
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	790.39	1.0400	0.29655	0.337212
Jumlah =	1.0000							1.000000

Gambar 2.1.4. Hasil perhitungan *Dew Point Pressure*

2.1.5. *Partial Vaporization*



Gambar 2.1.5. Diagram alir *Partial Vaporization*

Cairan, beruhu T=20^{0}C, bertekanan P=3 atm, sebanyak F=200 mol/menit mengandung z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap sampai suhunya mencapai T=40^{0}C sehingga sebagian cairan menguap (Gambar 2.1.5). Ingin dicari jumlah cairan dan uap yang keluar dan komposisi masing-masing. Cairan dan uap dapat dianggap ideal.

Analisis:

Start dari persamaan (1.2.5).

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

Karena cairan dan uap dianggap ideal maka γ_i=1, $\emptyset_i$=1.

$$x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad (2.1.1)$$

$$y_i = x_i \cdot \frac{P_i^0}{P} \quad \text{.....} \quad (2.1.11)$$

Bisa dituliskan:

$$y_i \cdot= K_i \cdot\ x_i \quad \text{.....} \quad (2.1.6)$$

$K_i = \frac{P_i^0}{P}$ ..... (2.1.7)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

Neraca massa total:

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

Neraca massa komponen:

$F \cdot z_i = L \cdot x_i + V \cdot y_i$ ..... (2.1.13)

Kombinasi persamaan (2.1.12) dan (2.1.13) menghasilkan

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}\cdot\frac{y_i}{x_i}}$ ..... (2.1.14)

Kombinasi persamaan (2.1.6) dan (2.1.14) memberikan

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}\cdot K_i}$ ..... (2.1.15)

Tersedia pula persamaan Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

Persamaan (2.1.11), (2.1.7), (2.1.14), dan (2.1.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Diketahui : F, z_1, z_2, z_3, z_4, T, P

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0

Diperoleh 18 persamaan (2.1.11), (2.1.6), (2.1.7), (2.1.13), (2.1.15), (2.1.4) dengan 18 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)

2. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
3. Trial V/F
4. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
5. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : pergi ke langkah 6

   tidak : kembali ke langkah 3
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.6)

Selanjutnya jika diperlukan dapat dicari jumlah panas yang harus diberikan ke *partial vaporizer* (Q) dari hukum termodinamika 1 untuk proses alir:

$$H_1 + mgz_1 + \frac{1}{2}mv_1^2 + Q - W_s = H_2 + mgz_2 + \frac{1}{2}mv_2^2 \quad \text{.....} \quad (2.1.16)$$

Velocity head relatif kecil: $\frac{1}{2}mv_1^2$=0; $\frac{1}{2}mv_2^2$=0

Beda elevasi kecil: mgz_1= mgz_2

Tidak ada kerja mekanis: W_s=0

Diperoleh:

$$H_1 + \mathrm{Q} = H_2 \quad \text{.....} \quad (2.1.17)$$

$$\mathrm{Q} = H_2 - H_1 = \Delta H \quad \text{.....} \quad (2.1.18)$$

$$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

Jika suhu referensi T_R=25^{0}C, fasa cair, maka:

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R)) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

dengan λ_i adalah panas penguapan komponen i pada suhu T_R. Hitungan secara lengkap dengan Microsoft Excel baik secara manual

maupun dengan solver ada di program *Ideal Systems* pada *Sheet* 5 (Gambar 2.1.6).

Partial Vaporization: Ideal Gases and Liquids

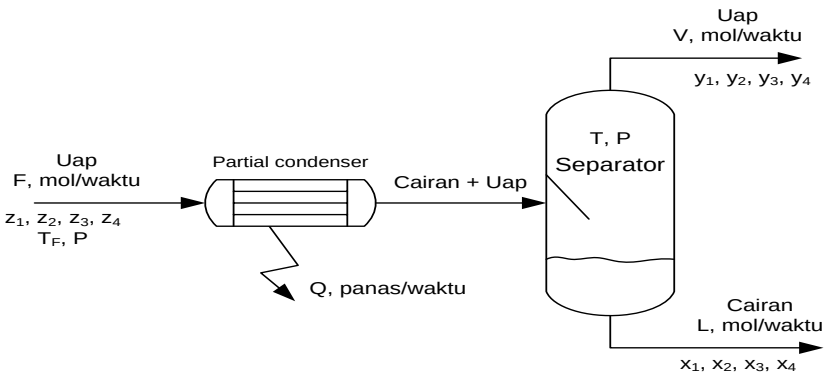
	F, mol/menit =	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
	TF, C =	20	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	P, atm =	3	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	T, C =	40	Ki = Pi0 / P
			yi = Ki * xi
Trial:	V/F =	0.280894	

Komp	zi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
C3H8	0.2000	6.8040	803.8100	246.9900	10072.8114	13.2537	4.4179	0.10204	0.45079
C4H10	0.3000	6.8090	935.8600	238.7300	2827.3124	3.7201	1.2400	0.28105	0.34851
C5H12	0.4000	6.8763	1075.7800	233.2050	868.3419	1.1426	0.3809	0.48421	0.18441
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7200	224.2100	279.7622	0.3681	0.1227	0.13270	0.01628
Jumlah =	1.0000							1.00000	1.00000

CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	L * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
98.36	73.6	24545	25	-19672.0	21651.7	649557.8	
132.42	98.49	22440	25	-39726.0	80287.9	468281.6	
167.19	120.07	26200	25	-66876.0	174646.4	290093.6	
197.66	142.6	28850	25	-19766.0	56585.9	28347.1	
				-146040.0	333171.9	1436280.1	1915492.0

Gambar 2.1.6. Hasil perhitungan *Partial Vaporization*

2.1.6. *Partial Condensation*



Gambar 2.1.7. Diagram alir *Partial Condensation*

Uap sebanyak F=200 mol/menit, bersuhu T_F=70^{0}C, bertekanan P=3 atm yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1, didinginkan pada tekanan tetap sampai suhu mecapai T = 40 ^{o}C sehingga sebagian uap mengembun (Gambar 2.1.7). Uap dan cairan dianggap ideal. Ingin dicari jumlah uap dan cairan keluar serta komposisinya. Selanjutnya ingin dicari pula jumlah panas yang harus diambil pada *partial condenser* (Q).

Analisis:

Persamaan-persamaan matematis untuk kasus ini mirip dengan pada Sub-Sub Bab 2.1.5 hanya persamaan untuk x_i dan H_F sedikit dimodifikasi, sehingga diperoleh:

$$y_i = K_i \cdot x_i \quad \text{.....} \quad (2.1.6)$$

$$K_i = \frac{P_i^0}{P} \quad \text{.....} \quad (2.1.7)$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

$$x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F} + \left(1 - \frac{L}{F}\right) \cdot K_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.15a)$$

$$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T_F - T_R)) \quad \text{.....} \quad (2.1.20a)$$

$$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R)) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Diketahui : T_F, P, T, z_1, z_2, z_3, z_4, F

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, Q, H_L, H_V

Diperoleh 21 persamaan dengan 21 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
3. Trial L/F
4. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a)
5. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : pergi ke langkah 6

   tidak : kembali ke langkah 3
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.6)
7. Hitung H_L, H_V, H_F dengan persamaan (2.1.21), (2.1.22), (2.1.20a)
8. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil hitungan dengan program *Ideal Systems* pada *Sheet* 6, ditunjukkan pada Gambar 2.1.8.

Partial Condensation: Ideal Gases and Liquids

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
	F, mol/menit =	200	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	TF, C =	70	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	T, C =	40	Ki = Pi0 / P
			yi = Ki * xi
Trial:	L/F =	0.7191056	

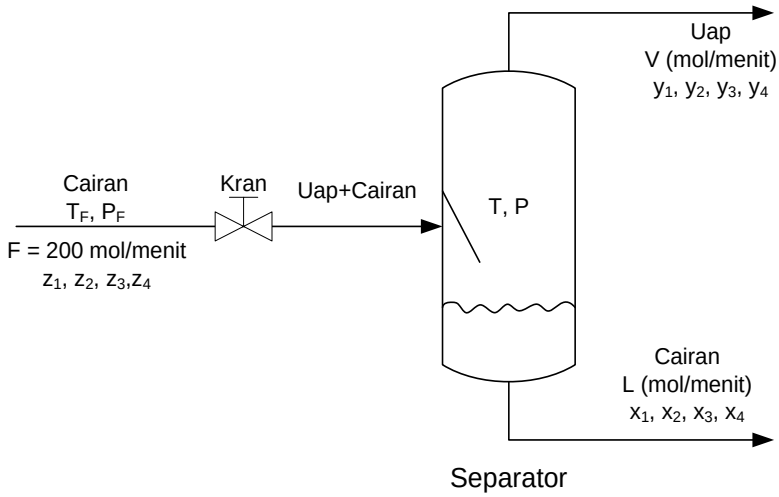
zi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
0.2000	6.8040	803.8100	246.9900	10072.8114	13.2537	4.4179	0.10204	0.45079
0.3000	6.8090	935.8600	238.7300	2827.3124	3.7201	1.2400	0.28105	0.34851
0.4000	6.8763	1075.7800	233.2050	868.3419	1.1426	0.3809	0.48421	0.18441
0.1000	6.8702	1168.7200	224.2100	279.7622	0.3681	0.1227	0.13270	0.01628
1.0000							1.00000	1.00000

CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * Hv, J/menit	Q, J/menit
73.6	24545	25	1114280.0	21651.7	649558.2	
98.49	22440	25	1612323.0	80287.9	468282.1	
120.07	26200	25	2528252.0	174646.4	290094.0	
142.6	28850	25	705340.0	56585.9	28347.2	
			5960195.0	333171.8	1436281.5	-4190741.8

Gambar 2.1.8. Hasil perhitungan *Partial Condensation*

2.1.7. *Adiabatic Flash*

Cairan bersuhu T_F=70 ^oC, bertekanan P_F=10 atm, yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1, berjumlah F=200 mol/menit, diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P=3atm, sehingga sebagian cairan menguap. Selanjutnya campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan (Gambar 2.1.9). Uap dan cairan dianggap ideal. Ingin dicari suhu setelah ekspansi (T), jumlah cairan (L), jumlah uap (V), serta komposisinya.



Gambar 2.1.9. Diagram alir proses *Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.1.5, hanya dalam hal ini karema tidak ada panas masuk maupun keluar, maka nilai Q=0.

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.1.6)

$K_i = \frac{P_i^0}{P}$ ..... (2.1.7)

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}\cdot K_i}$ ..... (2.1.15)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

$Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F = 0$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R)$ ..... (2.1.20)

$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R))$ ..... (2.1.22)

Diketahui : T_F, P_F, z_1, z_2, z_3, z_4, Q

Dihitung : T, V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, H_L, H_F, H_V

Diperoleh 22 persamaan dengan 22 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
4. Trial V/F
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
6. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : pergi ke langkah 7

   tidak : kembali ke langkah 4

7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.6)
8. Hitung H_L, H_V,H_F dengan persamaan (2.1.21), (2.1.22), (2.1.20)
9. Cek apakah $Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F = 0$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan program *Ideal Systems* dapat dilihat pada *Sheet* 7 sebagaimana yang ditunjukkan pada Gambar 2.10.

Flash Vaporization: Ideal Gases and Liquids
Constant Enthalpy

F, mol/me	200.00	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
TF, C	70	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
PF, atm =	10	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
P, atm =	3	Ki = Pi0 / P
		yi = Ki * xi

Trial:	T, C =	36.572
	V/F =	0.2051

Komp	zi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	9317.35	12.2597	4.08656	0.12247	0.50048
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	2567.83	3.3787	1.12624	0.29243	0.32935
C5H12	0.4000	6.87632	1075.78	233.21	773.85	1.0182	0.33941	0.46269	0.15704
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	244.71	0.3220	0.10733	0.12241	0.01314
Jumlah =	1.0000							1.00000	1.00000

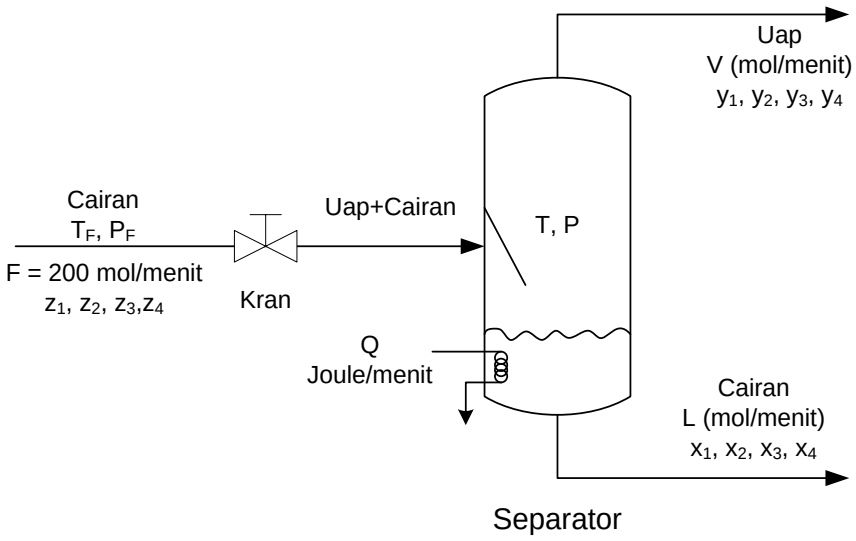
CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
98.36	73.6	24545	25	177048.0	22161.3	521395.6	
132.42	98.49	22440	25	357534.0	71240.1	318564.5	
167.19	120.07	26200	25	601884.0	142315.5	177731.1	
197.66	142.6	28850	25	177894.0	44514.1	16437.9	
				1314360.0	280230.9	1034129.1	-2E-08

Gambar 2.1.10. Hasil perhitungan *Adiabatic Flash*

2.1.8. Non-Adiabatic Flash

Cairan bersuhu T_F=60 ^oC, bertekanan P_F=30 atm, yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi z_1=0,2;

z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 berjumlah F=200 mol/menit, diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P=3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Selanjutnya campuran dipisahkan dalam *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan. Pada *separator* ditambahkan panas sebanyak Q=1.000.000 Joule/menit (Gambar 2.1.11). Cairan dan uap dianggap ideal. Ingin dicari suhu cairan dan uap dianggap ideal. Ingin dicari suhu cairan dan uap yang diperoleh (T), jumlah cairan (L), jumlah uap (V), serta komposisinya.



Gambar 2.1.11. Diargam alir proses *Non-Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.1.5, hanya dalam hal ini nilai Q=1.000.000 Joule/menit.

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.1.6)

$K_i = \frac{P_i^0}{P}$ ..... (2.1.7)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i}$ ..... (2.1.15)

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R)$ ..... (2.1.20)

$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R))$ ..... (2.1.22)

Diketahui : T_F, P_F, z_1, z_2, z_3, z_4, Q

Dihitung : T, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, H_L, H_F, H_V

Diperoleh 22 persamaan dengan 22 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.1.7)
4. Trial V/F
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
6. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : pergi ke langkah 7

   tidak : kembali ke langkah 4
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.1.6)

8. Hitung H_L, H_V,H_F dengan persamaan (2.1.21), (2.1.22), (2.1.20)
9. Hitung $Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_L$ dengan persamaan (2.1.14)
10. Cek apakah Q = 1.000.000

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Berikut hasil hitungan dengan program *Ideal Systems, Sheet* 8 (Gambar 2.12):

Flash Vaporization: Ideal Gases and Liquids

Given Heat Input

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
	F, mol/menit =	200	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	TF, C	60	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	PF, atm =	30	Ki = Pi0 / P
	Q, J/menit =	1000000	yi = Ki * xi
Trial:	T, C =	41.834	
	V/F =	0.32361	

Komp	zi	A	B	C	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	10493.8	13.8076	4.602541	0.09234	0.42502
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	2973.8	3.9130	1.304317	0.27310	0.35622
C5H12	0.4000	6.87632	1075.78	233.21	922.4	1.2137	0.404583	0.49547	0.20046
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	300.1	0.3949	0.131626	0.13908	0.01831
Jumlah =	1.0000							1.00000	1.00000

CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Qhit, J/menit	del Q %
98.36	73.60	24545	25	137704.0	20684.2	709259.0		
132.42	98.49	22440	25	278082.0	82355.3	555571.1		
167.19	120.07	26200	25	468132.0	188639.8	366138.4		
197.66	142.60	28850	25	138362.0	62604.5	37027.4		
				1022280.0	354283.8	1667995.9	999999.6	3.6E-07

Gambar 2.1.12. Hasil perhitungan *Non-Adiabatic Flash*

2.2. Cairan Non-Ideal dan Uap Ideal

Pada sub bab ini dibahas aplikasi konsep termodinamika untuk sistem cairan Non-Ideal dan Uap Ideal. Adapun contoh kasus yang dibahas meliputi:

2.2.1. *Bubble Point Temperature*
2.2.2. *Bubble Point Pressure*
2.2.3. *Dew Point Temperature*
2.2.4. *Dew Point Pressure*
2.2.5. *Partial Vaporization*
2.2.6. *Adiabatic Flash*
2.2.7. *Partial Condensation*
2.2.8. *Non-Adiabatic Flash*

2.2.1. Bubble Point Temperature

Cairan non-ideal yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1, dipanaskan pada tekanan tetap P=3 atm. Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999) dimana:

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

dengan

x_i = fraksi mol i

v_i = volum molar cairan i

δ_i = solubility parameter i

R = tetapan gas

T = suhu mutlak (K)

Uap dianggap ideal. Ingin dicari suhu saat mulai terjadi pendidihan.

Analisis:

Start dari persamaan (1.2.5)

$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P$ ..... (1.2.5)

Karena uap dianggap ideal, maka

$\emptyset_i$ = 1. Diperoleh:

$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = y_i \cdot P$ ..... (2.2.3)

Persamaan (2.2.3) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

$y_i = \frac{\gamma_i\, x_i \cdot P_i^0}{P}$ ..... (2.2.4)

Dapat dituliskan:

$y_i = K_i\, x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^0}{P}$ ..... (2.2.6)

Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T + C_i}$ ..... (2.2.7)

Harus dipenuhi pula:

$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$ ..... (2.2.8)

Diketahui : P, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : T, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, $\bar{\delta}$

Persamaan : (2.2.1), (2.2.2), (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.8)

Diperoleh 18 persamaan dengan 18 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.2.7)

3. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
4. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
5. Hitung y_i dengan persamaan (2.2.5)
6. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan Excel memakai *Non-Ideal Liquids*, pada *Sheet* 1, baik secara manual maupun dengan solver adalah seperti pada gambar 2.2.1.

Bubble Point Temperature: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids

Scatchard-Hildebrand

P, atm = 3

Trial: T, C = 26.148182

log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
Ki = GAMA i * Pi0 / P
yi = Ki * xi

R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine:			S-H parameters:		Pi0,	Pi0,
Komp	xi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm
C3H8	0.2000	6.8040	803.8100	246.9900	89.1600	41.9000	7262.909	9.556
C4H10	0.3000	6.8090	935.8600	238.7300	96.8200	43.4400	1887.073	2.483
C5H12	0.4000	6.8763	1075.7800	233.2050	115.0000	44.9800	535.039	0.704
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7200	224.2100	131.5000	46.5200	159.239	0.210
Jumlah :	1.0000							

xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	yi
17.8320	747.1608		1.0199	3.24895	0.64979
29.0460	1261.7582		1.0025	0.82971	0.24891
46.0000	2069.0800		1.0026	0.23528	0.09411
13.1500	611.7380		1.0284	0.07183	0.00718
106.0280	4689.7370	44.2311186		Sum yi	1.00000

Gambar 2.2.1. Hasil perhitungan *Bubble Point Temperature*

2.2.2. *Bubble Point Pressure*

Cairan non-ideal yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap P. Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999), uap dianggap ideal. Jika diharapkan cairan mulai mendidih pada suhu 30^0C, ingin dicari tekanan sistem (P).

Analisis:

Persamaan matematis sama dengan pada sub-sub bab 2.2.2, hanya nilai T diketahui dan nilai P dihitung.

$$y_i = K_i\, x_i \qquad \text{.....} \qquad (2.2.5)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^0}{P} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.6)$$

$$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.7)$$

$$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2 \qquad \text{.....} \qquad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.2)$$

Harus dipenuhi pula:

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1 \qquad \text{.....} \qquad (2.2.8)$$

Persamaan (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.1) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : T, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : P, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}$

Persamaan : (2.2.1), (2.2.2), (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.8)

Diperoleh 18 persamaan dengan 18 *unknowns*, jadi dapat diselesaikan.

Algortima hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.2.7)

2. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
3. Trial P.
4. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
5. Hitung y_i dengan persamaan (2.2.5)
6. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 3

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Liquids*, Sheet 2, ditunjukkan pada Gambar 2.2.2.

Bubble Point Temperature: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Scatchard-Hildebrand

	T, C =	30	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Trial:	P, atm =	3.33056	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
			Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
			Ki = GAMA i * Pi0 / P
			yi = Ki * xi
	R, mL atm/mol/K =	82.057	

		Antoine:			S-H parameters:		Pi0,	Pi0,
Komp	xi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm
C3H8	0.2000	6.804	803.81	246.99	89.160	41.900	7980.573	10.501
C4H10	0.3000	6.809	935.86	238.73	96.820	43.440	2120.465	2.790
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.21	115.000	44.980	615.301	0.810
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	131.500	46.520	187.405	0.247
Jumlah :	1.0000							

xi vi	xl vi di	d av	gama i	Ki	yi
17.832	747.161		1.0197	3.21486	0.64297
29.046	1261.758		1.0024	0.83977	0.25193
46.000	2069.080		1.0026	0.24372	0.09749
13.150	611.738		1.0281	0.07612	0.00761
106.028	4689.737	44.2311186		Sum yi =	1.00000

Gambar 2.2.2. Hasil perhitungan *Bubble Point Pressure*

2.2.3. *Dew Point Temperature*

Uap ideal yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P=3 atm. Ingin dicari suhu (T) saat mulai terjadi pengembunan. Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999).

Analisis:

Persamaan matematis sama dengan pada sub-sub bab 2.2.1, hanya nilai T diketahui dan nilai P dihitung.

$$y_i = K_i\, x_i \qquad \text{.....} \qquad (2.2.5)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^0}{P} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.6)$$

$$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.7)$$

$$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2 \qquad \text{.....} \qquad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.2)$$

Harus dipenuhi pula:

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \qquad \text{.....} \qquad (2.2.9)$$

Persamaan (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.1) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : P, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : T, x_1, x_2, x_3, x_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}$

Diperoleh 18 persamaan dengan 18 *unknowns*. Pada kasus ini algoritma lebih rumit karena nilai x_1, x_2, x_3, x_4 tidak diketahui, sedang $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ membutuhkan x_1, x_2, x_3, x_4

Algortima hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.2.7)
3. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).
4. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5)
6. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5
7. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6) dengan γ_i dari langkah 6
8. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan K_i dari langkah 7.
9. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 8 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5.

   ya : lanjut ke langkah 10

   tidak : kembali ke langkah 3

10. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Liquids*, *Sheet* 3, disajikan pada Gambar 2.2.3

Dew Point Temperature: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids

Scatchard-Hildebrand

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Trial:	T, C =	64.256	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	gama 1 =	1.0390	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	gama 2 =	1.0128	Ki = GAMA i * Pi0 / P
	gama 3 =	1.0006	yi = Ki * xi
	gama 4 =	1.0066	
R, mL atm/mol/K =		82.057	

		Antoine			S-H parameters:		Pi0,	Pi0,
Komp	yi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm
C3H8	0.2000	6.8040	803.8100	246.99	89.16	41.90	16650.31	21.9083
C4H10	0.3000	6.8090	935.8600	238.73	96.82	43.44	5250.10	6.9080
C5H12	0.4000	6.8763	1075.7800	233.205	115.00	44.98	1818.76	2.3931
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7200	224.21	131.50	46.52	658.77	0.8668
Jumlah =	1.0000							

Komp	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	xi	del xi
C3H8	7.5877	0.02636	2.3501	98.4705		1.0390	7.5877	0.02636	0.00000
C4H10	2.3322	0.12864	12.4546	541.0268		1.0128	2.3322	0.12864	0.00000
C5H12	0.7981	0.50116	57.6334	2592.3505		1.0006	0.7981	0.50116	0.00000
C6H14	0.2908	0.34384	45.2156	2103.4284		1.0066	0.2908	0.34384	0.00000
Jumlah =			117.6537	5335.2762	45.3473			1.00000	

Gambar 2.2.3. Hasil perhitungan *Dew Point Temperature*

2.2.4. *Dew Point Pressure*

Uap ideal yang mengandung mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P. Ingin dicari tekanan sistem (P) agar pada suhu T=60 ^{0}C mulai terjadi pengembunan. Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999).

Analisis:

Persamaan matematis sama dengan pada sub-sub Bab 2.2.1.

$$y_i = K_i\, x_i \qquad \text{.....} \qquad (2.2.5)$$

$K_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^0}{P}$ ..... (2.2.6)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.2.7)

$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2$ ..... (2.2.1)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (2.2.2)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.2.9)

Persamaan (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.1) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : T, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : P, x_1, x_2, x_3, x_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, $\bar{\delta}$

Diperoleh 18 persamaan dengan 18 *unknowns*.

Algoritma hitungan mirip dengan pada sub-sub Bab 2.2.3.

Algortima hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.2.7)
2. Trial P
3. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).
4. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5)
6. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5
7. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6) dengan γ_i dari langkah 6
8. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan K_i dari langkah 7.

9. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 8 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5.

   ya : lanjut ke langkah 10

   tidak : kembali ke langkah 3

10. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 2

Hasil hitungan dengan program *Non-Ideal Liquids, Sheet* 4, disajikan pada Gambar 2.2.4.

Dew Point Pressure: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids

Scatchard-Hildebrand

	T, C =	60	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Trial:	P, atm =	2.65055	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	gama 1 =	1.03988	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	gama 2 =	1.01318	Ki = GAMA i * Pi0 / P
	gama 3 =	1.00062	yi = Ki * xi
	gama 4 =	1.00647	
	R, mL atm/mol/K =	82.057	

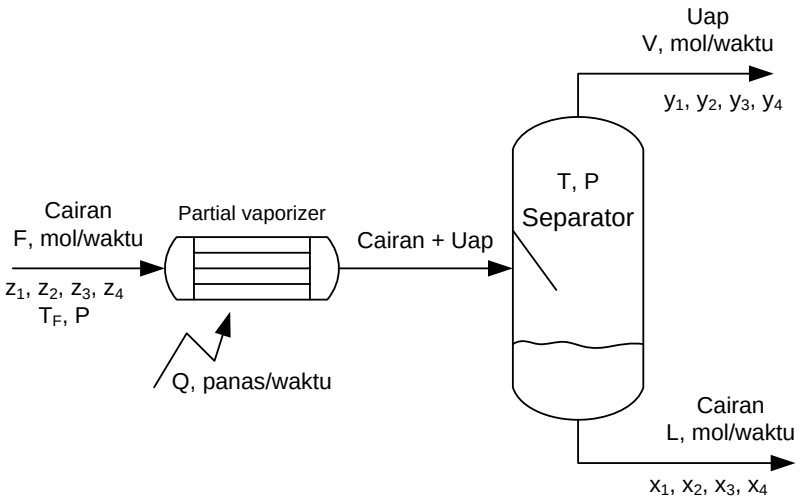
		Antoine			S-H parameters:		Pi0,	Pi0,
Komp	yi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	89.16	41.90	15332.8	20.17472
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	96.82	43.44	4744.22	6.24239
C5H12	0.4000	6.87632	1075.78	233.205	115	44.98	1611.7	2.120652
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	131.5	46.52	572.888	0.753799
Jumlah =	1.0000							

Komp	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	xi	del xi
C3H8	7.91505	0.02527	2.252924	94.3975		1.03988	7.91505	0.025268	1.45E-11
C4H10	2.38616	0.12572	12.17267	528.781		1.01318	2.38616	0.125725	3.29E-12
C5H12	0.80057	0.49964	57.4588	2584.5		1.00062	0.80057	0.499642	-8.34E-14
C6H14	0.28623	0.34937	45.94161	2137.2		1.00647	0.28623	0.349366	2.27E-13
Jumlah =			117.826	5344.88	45.36247202			1.00000	

Gambar 2.2.4. Hasil perhitungan *Dew Point Pressure*

2.2.5. *Partial Vaporization*

Cairan bersuhu T_F=20^{0}C, berjumlah F=200 mol/menit, yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap P=3 atm, sampai suhunya mencapai T=40^{0}C, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan (Gambar 2.2.5). Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan uap ideal. Ingin dicari jumlah cairan (L) dan jumlah uap (V) serta komposisinya. Ingin dicari pula jumlah panas yang harus dihasilkan (Q).



Gambar 2.2.5. Diagram alir proses *Partial Vaporization*

Analisis:

Persamaan termodinamika yang terbentuk sama dengan sub-sub bab 2.2.1.

$$y_i = K_i\, x_i \qquad \text{.....} \qquad (2.2.5)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i \cdot P_i^0}{P} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.6)$$

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.2.7)

$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2$ ..... (2.2.1)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (2.2.2)

Neraca massa total menghasilkan:

$F = L + V$ ..... (2.2.10)

Neraca massa komponen menghasilkan:

$F \cdot z_i = L \cdot x_i + V \cdot y_i$ ..... (2.2.11)

Kombinasi persamaan (2.2.10), (2.2.11) dan (2.2.5) menghasilkan:

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i}$ ..... (2.2.12)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.2.9)

Persamaan (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7), (2.2.1), (2.2.11), (2.2.12) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : F, T, T_F, P, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}$, y_1, y_2, y_3, y_4

Diperoleh 23 persamaan dengan 23 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.2.7)
2. Trial nilai V/F
3. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).
4. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)

5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.12)
6. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5
7. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6) dengan y_i dari langkah 6
8. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.12) menggunakan K_i dari langkah 7.
9. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 8 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5.

   ya : lanjut ke langkah 10

   tidak : kembali ke langkah 3
10. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

    ya : lanjut ke langkah 11

    tidak : kembali ke langkah 2
11. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5); selesai

Untuk mencari nilai panas yang harus dimasukkan (Q), dipakai Hukum Termodinamika I seperti pada sub-sub bab 1.2.5. Diperoleh:

$$\mathrm{Q} = H_2 - H_1 = \Delta H \quad \text{.....} \quad (2.1.18)$$

$$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R)) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Liquids*, *Sheet* 5, disajikan pada Gambar 2.2.6.

Partial Vaporization: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids

Scatchard-Hildebrand

		Trial:	V/F =	0.28891527	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
F, mol/menit	200		GAMA 1 =	1.02558	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
TF, C =	20		GAMA 2 =	1.00507	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
P, atm =	3		GAMA 3 =	1.00065	Ki = GAMA i * Pi0 / P
T, C =	40		GAMA 4 =	1.01908	yi = Ki * xi
					R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine:			S-H parameters:		Pi0,	Pi0,		
Komp	zi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm	Ki	xi
C3H8	0.2000	6.8040	803.81	246.99	89.16	41.90	10072.81	13.2537	4.53091	0.09900
C4H10	0.3000	6.8090	935.86	238.73	96.82	43.44	2827.31	3.7201	1.24633	0.28007
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.21	115.00	44.98	868.34	1.1426	0.38110	0.48710
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	131.50	46.52	279.76	0.3681	0.12504	0.13383
Jumlah =	1.0000									

xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	xi	del xi	yi
8.827	369.86		1.0256	4.53091	0.09900	0.00000	0.44858
27.116	1177.93		1.0051	1.24633	0.28007	0.00000	0.34906
56.016	2519.61		1.0007	0.38110	0.48710	0.00000	0.18563
17.599	818.69		1.0191	0.12504	0.13383	0.00000	0.01673
109.558	4886.09	44.598			1.00000		1.00000

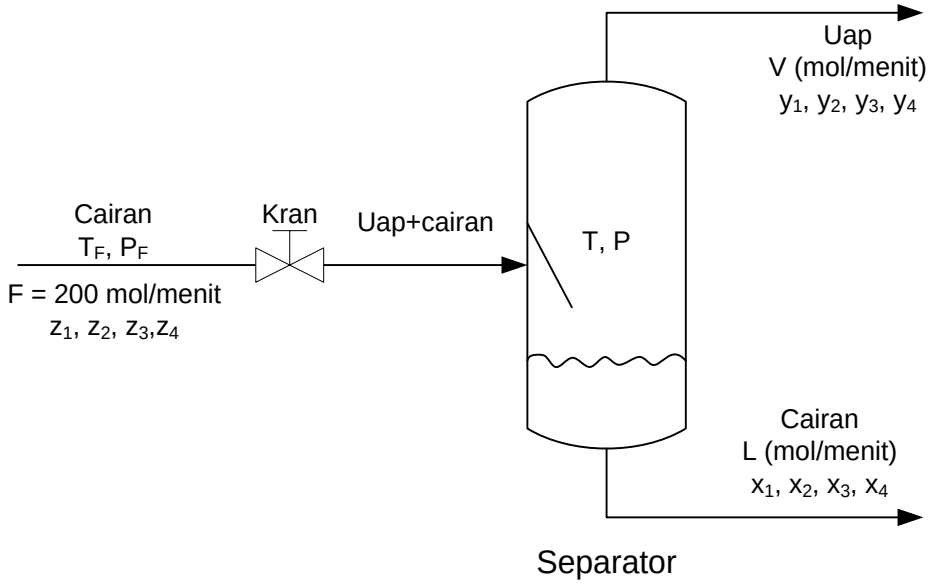
CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
98.36	73.60	24545	25	-19672	20773.56	664823	
132.42	98.49	22440	25.0	-39726	79115.12	482403	
167.19	120.07	26200	25.0	-66876	173727.7	300352	
				-146040.0	330047.3	1477545	1953632

Gambar 2.2.6. Hasil perhitungan *Partial Vaporization*

2.2.6. *Adiabatic Flash*

Cairan bersuhu TF=70 ^{0}C bertekanan P_F=30 atm, berjumlah F=200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P=3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan (Gambar 2.2.7). Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan uap ideal. Ingin dicari

suhu setelah ekspansi (T), jumlah cairan (L) dan juga uap (V) serta komposisinya.



Gambar 2.2.7. Diagram Alir *Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.1.5.

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{\gamma_i P_i^0}{P}$ ..... (2.2.6)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2$ ..... (2.2.1)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (2.2.2)

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

Harus dipenuhi pula:

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

$$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F = 0 \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R)) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Persamaan (2.1.6), (2.1.7), (2.1.4), (2.2.1), (2.1.15) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : F, P, T_F, P_F, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}, y_1$, y_2, y_3, y_4, H_F, H_L, H_V

Diperoleh 27 persamaan dengan 27 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Trial nilai V/F
4. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).
5. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5)
7. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 6
8. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6) dengan γ_i dari langkah 7

9. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan K_i dari langkah 8.
10. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 9 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 6.

    ya : pergi ke langkah 11

    tidak : pergi ke langkah 4
11. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

    ya : pergi ke langkah 12

    tidak : kembali ke langkah 3
12. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
13. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21), (2.1.22)
14. Cek apakah $Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F$=0

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Liquids*, *Sheet* 6, ditunjukkan pada Gambar 2.28.

Flash Vaporization: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Scatchard-Hildebrand
Constant Enthalpy

F, mol/m	200	Trial:	T, C =	36.259	log (PiO, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
TF, C =	70		V/F =	0.2069	PiO, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
PF, atm =	30		GAMA 1 =	1.02404	PiO, atm = PiO, mmHg / 760		
P, atm =	3		GAMA 2 =	1.00430	Ki = GAMA i * PiO / P		
			GAMA 3 =	1.00104	yi = Ki * xi		
			GAMA 4 =	1.02134			

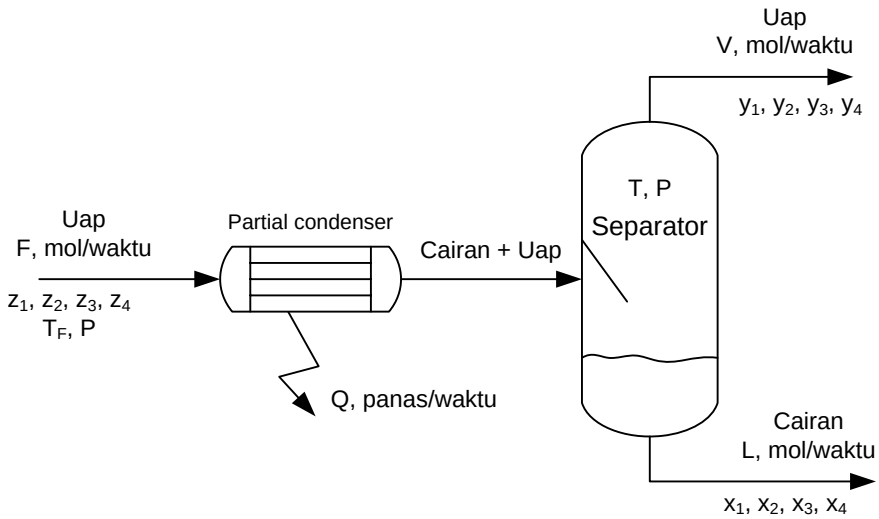
		Antoine:			S-H parameters:		PiO,	PiO,						
Komp	zi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0	mmHg	atm	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	89.16	41.9	9250.4	12.17156	4.15471	0.12101	10.789	452.061		1.0240
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	96.82	43.44	2545.1	3.34876	1.12105	0.29267	28.336	1230.925		1.0043
C5H12	0.4000	6.87632	1075.8	233.21	115	44.98	765.64	1.00742	0.33616	0.46370	53.325	2398.560		1.0010
C6H14	0.1000	6.87024	1168.7	224.21	131.5	46.52	241.69	0.31801	0.10827	0.12263	16.126	750.159		1.0213
Jumlah =	1.0000										108.576	4831.705	44.50075	

Ki	xi	del xi	yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
4.15471	0.12101	0.000000	0.50275	98.36	73.6	24545	25	177048.0	21255.8	527934.4	
1.12105	0.29267	0.000000	0.32810	132.42	98.49	22440	25	357534.0	69211.3	319754.8	
0.33616	0.46370	0.000000	0.15587	167.19	120.07	26200	25	601884.0	138449.3	177733.9	
0.10827	0.12263	0.000000	0.01328	197.66	142.6	28850	25	177894.0	43286.6	16733.7	
	1.00000		1.00000					1314360.0	272203.1	1042156.9	0.0

Gambar 2.2.8. Hasil perhitungan *Adiabatic Flash*

2.2.7. *Partial Condensation*

Uap sebanyak F=200 mol.menit bersuhu T_F=70 ^{0}C bertekanan P=3 atm yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap sampai suhunya mencapai T=40 ^{0}C, sehingga sebagian uap mengembun (Gambar 2.2.9). Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan uap ideal. Campuran dipisahkan sehingga diperoleh cairan dan uap. Ingin dicari jumlah cairan (L), jumlah uap (V), dan komposisinya, serta panas yang diambil pada pendingin (Q).



Gambar 2.2.9. Diagram alir proses *Partial Condensation*

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.1.5.

$$y_i = K_i \cdot x_i \qquad \text{.....} \qquad (2.2.5)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^0}{P} \qquad \text{.....} \qquad (2.2.6)$$

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2$ ..... (2.2.1)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (2.2.2)

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F}+\left(1-\frac{L}{F}\right)\cdot K_i}$ ..... (2.1.15a)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

$Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F = 0$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T_F - T_R))$ ..... (2.1.20a)

$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R))$ ..... (2.1.22)

Persamaan (2.1.6), (2.1.7), (2.1.4), (2.2.1), (2.2.2) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Diketahui : F, P, T_F, T, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}$, y_1, y_2, y_3, y_4, H_F, H_L, H_V, Q

Diperoleh 27 persamaan dengan 27 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Trial nilai L/F
3. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).

4. Hitung K_i dengan persamaan (2.1.7)
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a)
6. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2).
7. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6) dengan γ_1, γ_2, γ_3, γ_4 dari langkah 6.
8. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a) menggunakan K_i dari langkah 7.
9. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 8 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 5.

   ya : lanjut ke langkah 10

   tidak : kembali ke langkah 3
10. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

    ya : pergi ke langkah 11

    tidak : kembali ke langkah 2
11. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
12. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20a), (2.1.21), (2.1.22)
13. Menghitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil hitungan dengan program *Non-Ideal Liquids*, *Sheet* 7, ditunjukkan pada Gambar 2.2.10.

Partial Condensation: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids

Scatchard-Hildebrand

		Trial:	L/F =	0.7111	log (PiO, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
F, mol/menit =	200		GAMA 1 =	1.0256	PiO, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
TF, C =	70		GAMA 2 =	1.0051	PiO, atm = PiO, mmHg / 760		
P, atm =	3		GAMA 3 =	1.0007	Ki = GAMA i * PiO / P		
T, C =	40		GAMA 4 =	1.0189	yi = Ki * xi		

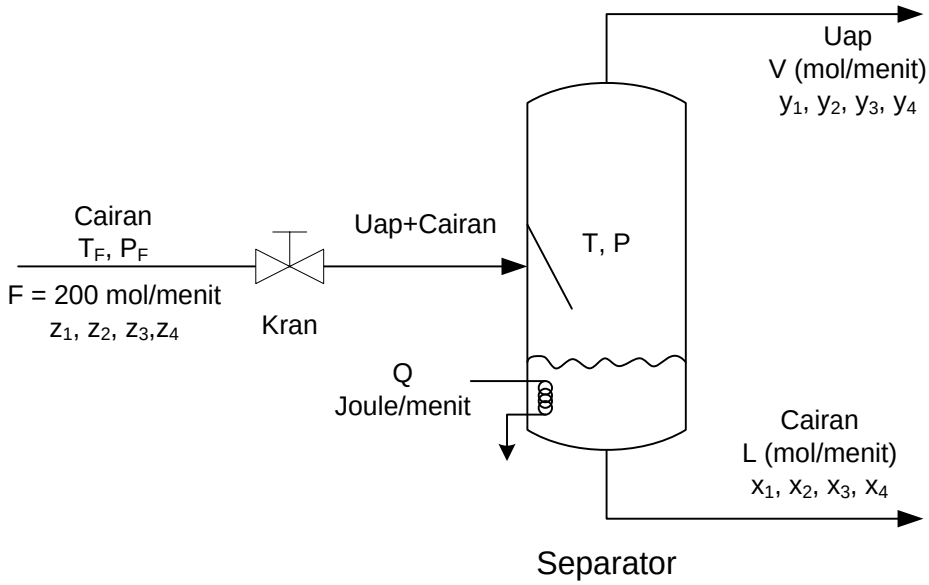
		Antoine:			S-H parameters:		PiO,	PiO,						
Komp	zi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i
C3H8	0.2000	6.804	803.81	246.99	89.16	41.90	10072.81	13.254	4.53091	0.0990	8.8271	369.86		1.0256
C4H10	0.3000	6.809	935.86	238.73	96.82	43.44	2827.31	3.720	1.246331	0.2801	27.1162	1177.93		1.0051
C5H12	0.4000	6.876	1075.78	233.21	115.00	44.98	868.34	1.143	0.3811	0.4871	56.0163	2519.61		1.0007
C6H14	0.1000	6.870	1168.72	224.21	131.50	46.52	279.76	0.368	0.125025	0.1338	17.5989	818.70		1.0191
Jumlah =	1.0000										109.5585	4886.1	44.598	

				CpL,	CpV,	dHvap,		F * HF,	L * HL,	V * HV,	Q,
Ki	xi	del xi	yi	J/mol/C	J/mol/C	J/mol	Tref, C	J/menit	J/menit	J/menit	J/menit
4.5309	0.09900	0.00000	0.44857	98.36	73.6	24545	25	1114280	211.198	664825	
1.2463	0.28007	0.00000	0.34906	132.42	98.49	22440	25	1612323	597.454	482406	
0.3811	0.48710	0.00000	0.18563	167.19	120.07	26200	25	2528252	1039.1	300354	
0.1250	0.13383	0.00000	0.01673	197.66	142.6	28850	25	705340	285.495	29966	
	1.00000		1.00000					5960195	2133.25	1E+06	-4480511
	Sum yi										

Gambar 2.2.10. Hasil perhitungan *Partial Condensation*

2.2.8. *Non-Adiabatic Flash*

Cairan, bersuhu TF = 70 ^{0}C, bertekanan P=30 atm, berjumlah F=200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1, diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P= 3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh cairan dan uap. Pada *separator drum* dimasukkan panas sebesar Q=200000 Joule/menit (Gambar 2.2.11). Cairan mengikuti model Scatchard-Hildebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan uap ideal. Ingin dicari suhu pada separator drum (T), jumlah uap (V), dan jumlah cairan (L) serta komposisinya.



Gambar 2.2.11. Diagram alir proses *Non-Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.1.5.

$$y_i = K_i \cdot x_i \quad \text{.....} \quad (2.2.5)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^0}{P} \quad \text{.....} \quad (2.2.6)$$

$$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\ln \gamma_i = \frac{v_i}{RT}(\delta_i - \bar{\delta})^2 \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$F = L + V \quad \text{.....} \quad (2.1.12)$$

$$x_i = \frac{z_i}{\left(1 - \frac{V}{F}\right) + \frac{V}{F} \cdot K_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

$Q = L \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F$=200000 ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R)$ ..... (2.1.20)

$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R))$ ..... (2.1.22)

Persamaan (2.1.6), (2.1.7), (2.1.4), (2.2.1), (2.2.2) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4

Diketahui : P, T_F, F, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \bar{\delta}, y_1$, y_2, y_3, y_4, H_F, H_L, H_V

Diperoleh 27 persamaan dengan 27 *unknowns*.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.6)
3. Trial nilai V/F
4. Trial $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$; sebagai harga awal bisa dicoba γ_i=1 (cairan dianggap ideal).
5. Hitung K_i dengan persamaan (2.2.6)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
7. Hitung $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2).
8. Hitung K_i dengan persamaan (2.1.7) dengan $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$ dari langkah 7.

9. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15) menggunakan K_i dari langkah 8.
10. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 9 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 6.

    ya : lanjut ke langkah 11

    tidak : kembali ke langkah 4
11. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

    ya : pergi ke langkah 12

    tidak : kembali ke langkah 3
12. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
13. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21), (2.1.22)
14. Menghitung Q dengan persamaan (2.1.19)
15. Cek apakah Q=200000

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Liquids*, *Sheet* 8, ditunjukkan pada Gambar 2.2.12.

Flash Vaporization: Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Scatchard-Hildebrand
Given Heat Input

F, mol/meni	**200**	**Trial:**	T, C =	37.79779	log (PiO, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
TF, C =	70		V/F =	0.239971	PiO, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
PF, atm =	30		GAMA 1 =	1.0247	PiO, atm = PiO, mmHg / 760		
P, atm =	3		GAMA 2 =	1.0046	Ki = GAMA i * PiO / P		
Q, J/menit =	200000		GAMA 3 =	1.0009	yi = Ki * xi		
			GAMA 4 =	1.0204			

		Antoine:			S-H parameters:		PiO,	PiO,							
Komp	zi	A	B	C	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	mmHg	atm	Ki	xi	xi vi	xI vi di	dav	gama i
C3H8	0.2000	6.80398	803.8	247.0	89.2	41.9	9582.80	12.609	4.3067	0.11151	9.942573	416.5938		1.02467
C4H10	0.3000	6.80896	935.9	238.7	96.8	43.4	2658.49	3.498	1.1714	0.28815	27.89866	1211.918		1.00461
C5H12	0.4000	6.87632	1075.8	233.2	115.0	45.0	806.66	1.061	0.3541	0.47337	54.43755	2448.601		1.00087
C6H14	0.1000	6.87024	1168.7	224.2	131.5	46.5	256.81	0.338	0.1149	0.12697	16.69608	776.7018		1.02040
Jumlah =	1.0000										108.9749	4853.814	44.540678	

				CpL,	CpV,	dHvap,		F * HF,	L * HL,	V * HV,	Q,	del Q,
Ki	xi	del xi	yi	J/mol/C	J/mol/C	J/mol	Tref, C	J/menit	J/menit	J/menit	J/menit	J/menit
4.30665	0.11151	0.00000	0.48025	98.36	73.60	24545.0	25.0	177048.0	21337.5	587454.1		
1.17138	0.28815	0.00000	0.33753	132.42	98.49	22440.0	25.0	357534.0	74227.9	383936.4		
0.35411	0.47337	0.00000	0.16762	167.19	120.07	26200.0	25.0	601884.0	153959.5	223140.5		
0.11493	0.12697	0.00000	0.01459	197.66	142.60	28850.0	25.0	177894.0	48820.6	21483.5		
	1.00000		1.00000					1314360.0	298345.5	1216014.5	200000.0	0.0

Gambar 2.2.12. ***Hasil perhitungan Non-Adiabatic Flash***

2.3. Cairan Ideal dan Gas Non-Ideal

Pada sub bab ini akan dibahas sejumlah aplikasi konsep kesetimbangan fasa untuk komputasi kesetimbangan fasa cairan ideal dan gas non-ideal. Dalam arti uap tidak bersifat seperti gas ideal. Sebagai contoh dipakai uap yang non-idealitasnya didekati dengan model *second-virial coefficient* yang relatif sederhana (Nagahama and Hirata, 1970).

Kasus yang dijelaskan adalah sebagai berikut:

2.3.1. *Dew Point Temperature*
2.3.2. *Dew Point Pressure*
2.3.3. *Bubble Point Temperature*
2.3.4. *Bubble Point Pressure*
2.3.5. *Partial Vaporization*
2.3.6. *Partial Condensation*
2.3.7. *Adiabatic Flash*

2.3.8. *Non-Adiabatic Flash*

2.3.1. Dew Point Temperature

Uap yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P=3 atm. Ingin dicari suhu saat mulai terjadi pengembunan. Cairan dianggap ideal, sedangkan uap dianggap dapat didekati dengan metode *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970).

$$\emptyset_i = [\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

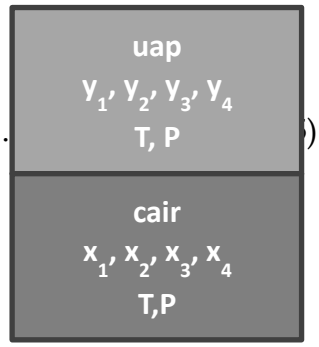
$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

Nilai second virial coefficient tiap komponen (B_i) didekati dengan persamaan:

$$B_{i,} \frac{cm^3}{mol} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T}) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

dengan T dalam K.

Analisis:



Start dari persamaan (1.2.5)

$$\gamma_i \cdot x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P \quad \text{.....} \quad)$$

Karena cairan ideal, maka γ_i = 1. Diperoleh:

$$x_i \cdot P_i^0 = \emptyset_i \cdot y_i \cdot P$$

$$y_i = \frac{x_i \cdot P_i^0}{\emptyset . P}$$

Bisa dituliskan:

$$y_i = K_i \cdot x_i \quad \text{.....} \quad (2.2.5)$$

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp[\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_{i,} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T})$ ..... (2.3.4)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

Diketahui : P, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : T, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 21 persamaan dengan 21 *unknowns*.

Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Persamaan (2.3.2), (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Hitung $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5)

7. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 1, ditunjukkan pada Gambar 2.3.1.

Dew Point Temperature: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids
Second Virial Coefficient

	P, atm =	3	log (PiO, mmHg) = A - B / (T + C)
			PiO, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	T, C =	65.42204629	PiO, atm = PiO, mmHg / 760
			Ki = PiO / P/PSI i
			yi = Ki * xi
			R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine			Second Virial			B,			
Komp	yi	A	B	C	a	b	c	cm3/mol	B1j	B2j	B3j
C3H8	0.2000	6.8040	803.8100	246.9900	322.8000	220.3000	350.0000	-296.60	296.60	397.26	506.29
C4H10	0.3000	6.8090	935.8600	238.7300	165.4000	135.4000	555.0000	-532.08	397.26	532.08	678.12
C5H12	0.4000	6.8763	1075.7800	233.2050	377.9000	237.6000	560.0000	-864.24	506.29	678.12	864.24
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7200	224.2100	839.6000	404.1000	572.6000	-1353.09	633.50	848.50	1081.39
Jumlah =	1.0000										

B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i		PiO,	PiO,		
633.50	59.32	79.45	101.26	126.70	88.87	0.95329	Komp	mmHg	atm	Ki	xi
848.50	119.18	159.62	203.44	254.55	178.55	0.98487	C3H8	17024.088	22.400	7.8325	0.0255
1081.39	202.52	271.25	345.70	432.55	303.41	1.02025	C4H10	5395.257	7.099	2.4027	0.1249
1353.09	63.35	84.85	108.14	135.31	94.91	1.06314	C5H12	1878.885	2.472	0.8077	0.4952
	444.36	595.17	758.53	949.11	665.75		C6H14	683.992	0.900	0.2822	0.3544
					Sum Sum yiyjBij		Jumlah =				1.0000

Gambar 2.3.1. Hasil perhitungan *Dew Point Temperature*

2.3.2. *Dew Point Pressure*

Uap yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P. Jika diinginkan mulai terjadi pengembunan pada suhu T = 70^0C, ingin dicari tekanan sistem P. Cairan dianggap ideal sedangkan uap didekati dengan model *second virial coefficient* (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.3.1.

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp[\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_{i,} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T})$ ..... (2.3.4)

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.14)

Diketahui : T, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : P, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 21 persamaan dengan 21 *unknowns*.

Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Persamaan (2.3.2), (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial P

4. Hitung $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.2.5)
7. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$

   ya : selesai

   tidak : kembali ke langkah 3

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 2, ditunjukkan pada Gambar 2.3.2.

Dew Point Pressure : Non-Ideal Gases and Ideal Liquids
Second Virial Coefficient

	T, C =	70	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	P, atm =	3.4461	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
			Ki = Pi0 / P/PSI i
			yi = Ki * xi
			R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine		Second Virial				B,				
Komp	yi	A	B	C	a	b	c	cm3/mol	B1j	B2j	B3j	B4j
C3H8	0.2000	6.80398	803.81	246.99	322.8	220.3	350.0	-288.11	288.11	385.94	491.11	612.98
C4H10	0.3000	6.80896	935.86	238.73	165.4	135.4	555.0	-516.99	385.94	516.99	657.87	821.12
C5H12	0.4000	6.87632	1075.78	233.205	377.9	237.6	560.0	-837.13	491.11	657.87	837.13	1044.88
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	839.6	404.1	572.6	-1304.17	612.98	821.12	1044.88	1304.17
Jumlah =	1.0000											

yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i
57.62	77.19	98.22	122.60	86.23	0.94893
115.78	155.10	197.36	246.34	173.26	0.98357
196.44	263.15	334.85	417.95	293.97	1.02222
61.30	82.11	104.49	130.42	91.73	1.06890
431.15	577.54	734.92	917.30	645.19	
				Sum Sum yiyjBij	

Komp	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi
C3H8	18544.8	24.401	7.461788	0.02680
C4H10	5992.92	7.88541	2.357072	0.12728
C5H12	2129.57	2.80206	0.805915	0.49633
C6H14	790.386	1.03998	0.28605	0.34959
Jumlah =				1.00000

Gambar 2.3.2. Hasil perhitungan *Dew Point Pressure*

2.3.3. *Bubble Point Temperature*

Cairan yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1, dipanaskan pada

tekanan tetap P=3 atm. Ingin dicari suhu saat cairan mulai mendidih. Cairan dianggap ideal sedang uap mengikuti model *second virial coefficient* (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub Bab 2.3.1.

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp[\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_{i,} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T})$ ..... (2.3.4)

Harus dipenuhi pula:

$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$ ..... (2.1.5)

Diketahui : P, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : T, y_1, y_2, y_3, y_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 21 persamaan dengan 21 *unknowns*.

Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Persamaan (2.3.2), (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma hitungan lebih rumit dari kasus pada sub-sub Bab 2.3.1 dan 2.3.2 karena di sini diperlukan nilai $\emptyset_i$, sedang $\emptyset_i$ membutuhkan nilai y_i dimana nilai y_i tidak diketahui.

Algoritma hitungan:

1. Trial T
2. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Trial nilai $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$; sebagai nilai awal bisa diambil $\emptyset_i$=1 (uap dianggap ideal)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.2.5)
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.3.5)
7. Hitung $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3), menggunakan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 6
8. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dari langkah 7
9. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 8
10. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 9 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 6.

    ya : lanjut ke langkah 11

    tidak : kembali ke langkah 4

11. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 3, ditunjukkan pada Gambar 2.3.3.

Bubble Point Temperature : Non- Ideal Gases and Ideal Liquids

Second Virial Coefficient

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))	
Trial:	T, C =	26.66498	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760	
	PSI 1 =	0.982826	Ki = Pi0 / P/PSI i	
	PSI 2 =	1.02044	yi = Ki * xi	
	PSI 3 =	1.06479	R, mL atm/mol/K =	82.057
	PSI 4 =	1.121778		

	Antoine:			Second Virial			B,	Pi0,	Pi0,		
xi	A	B	C	a	b	c	cm3/mol	mmHg	atm	Ki	yi
0.2000	6.8040	803.81	246.99	322.80	220.30	350.00	-385.15	7356.45	9.6795	3.2829	0.6566
0.3000	6.8090	935.86	238.73	165.40	135.40	555.00	-696.70	1917.21	2.5226	0.8240	0.2472
0.4000	6.8763	1075.78	233.21	377.90	237.60	560.00	-1160.36	545.30	0.7175	0.2246	0.0898
0.1000	6.8702	1168.72	224.21	839.60	404.10	572.60	-1888.90	162.80	0.2142	0.0637	0.0064
1.0000											

B1j	B2j	B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	yi	del yi
385.15	518.01	668.52	852.94	252.88	340.12	438.93	560.03	293.12	0.98283	3.28289	0.65658	0.0000
518.01	696.70	899.13	1147.17	128.06	172.23	222.27	283.59	148.43	1.02044	0.82404	0.24721	0.0000
668.52	899.13	1160.36	1480.47	60.06	80.78	104.25	133.01	69.62	1.06479	0.22461	0.08985	0.0000
852.94	1147.17	1480.47	1888.90	5.43	7.30	9.42	12.02	6.29	1.12178	0.06365	0.00637	0.0000
				446.43	600.43	774.88	988.66	517.47		Sum yi	1.00000	
								Sum Sum yiyjBij				

Gambar 2.3.3. Hasil perhitungan *Bubble Point Temperature*

2.3.4. Buble Point Pressure

Cairan yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1, dipanaskan pada tekanan tetap P. Jika diinginkan cairan mulai mendidih pada suhu T=300 ^oC, ingn dicari nilai tekanan sistem P. Cairan dianggap ideal sedangkan uap mengikuti model *second virial coefficient* (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.3.1.

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp[\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_{i,} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T})$ ..... (2.3.4)

Harus dipenuhi pula:

$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$ ..... (2.1.5)

Diketahui : T, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : P, y_1, y_2, y_3, y_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 21 persamaan dengan 21 *unknowns*.

Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Persamaan (2.3.2), (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma hitungan lebih rumit dari kasus pada sub-sub Bab 2.3.1 dan 2.3.2 karena di sini diperlukan nilai $\emptyset_i$, sedang $\emptyset_i$ membutuhkan nilai y_i dimana nilai y_i tidak diketahui.

Algoritma hitungan:

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial P
4. Trial nilai $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$; sebagai nilai awal bisa diambil $\emptyset_i$=1 (uap dianggap ideal)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
7. Hitung $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3), menggunakan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 6
8. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dari langkah 7
9. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 8
10. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 9 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 6.

    ya : lanjut ke langkah 11

    tidak : kembali ke langkah 4

11. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

    ya : selesai

    tidak : kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 4, ditunjukkan pada Gambar 2.3.4.

Bubble Point Pressure: Non- Ideal Gases and Ideal Liquids

Second Virial Coefficient

	T, C =	30	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	P, atm =	3.283299	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	PSI 1 =	0.976216	Ki = Pi0 / P/PSI i
	PSI 2 =	1.028133	yi = Ki * xi
	PSI 3 =	1.090819	R, mL atm/mol/K = 82.057
	PSI 4 =	1.175247	

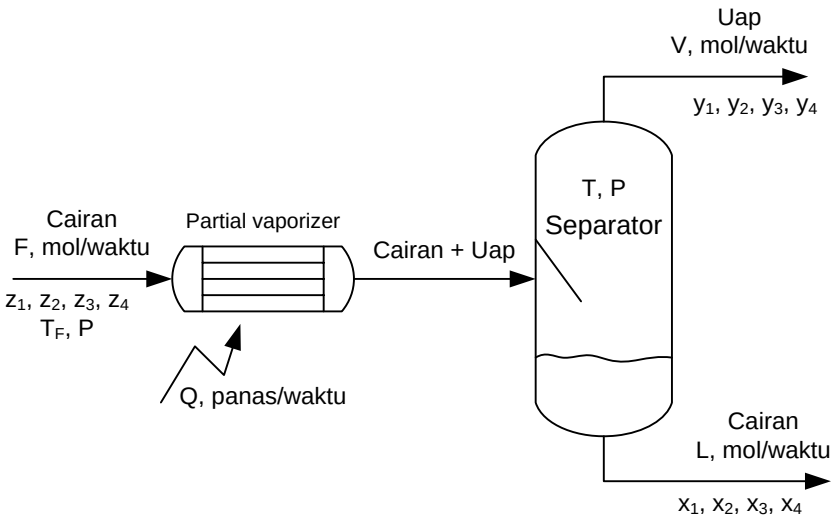
		Antoine:			Second Virial			B,	Pi0,	Pi0,				
Komp	xi	A	B	C	a	b	c	cm3/mol	mmHg	atm	Ki	yi	B1j	B2j
C3H8	0.2000	6.804	803.81	246.99	322.8	220.3	350	-470.608	7980.573	10.501	3.27615	0.65523	470.61	638.93
C4H10	0.3000	6.809	935.86	238.73	165.4	135.4	555	-867.457	2120.465	2.790	0.82653	0.24796	638.93	867.46
C5H12	0.4000	6.8763	1075.8	233.205	377.9	237.6	560	-1468.040	615.301	0.810	0.22605	0.09042	831.19	1128.48
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7	224.21	839.6	404.1	572.6	-2448.110	187.405	0.247	0.06390	0.00639	1073.36	1457.27
Jumlah =	1.0000													

Komp	B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	yi	del yi
C3H8	831.19	1073.36	308.36	418.65	544.62	703.30	359.59	0.976217	3.2762	0.65523	0.0000
C4H10	1128.48	1457.27	158.43	215.09	279.82	361.34	184.75	1.028134	0.8265	0.24796	0.0000
C5H12	1468.04	1895.76	75.16	102.04	132.74	171.42	87.64	1.090819	0.2261	0.09042	0.0000
C6H14	1895.76	2448.11	6.86	9.31	12.11	15.64	8.00	1.175248	0.0639	0.00639	0.0000
Jumlah =			548.80	745.09	969.29	1251.70	639.99		Sum yi	1.00000	
							Sum Sum yiyjBij				

Gambar 2.3.4. Hasil perhitungan *Bubble Point Pressure*

2.3.5. *Partial Vaporization*

Cairan bersuhu T_F=20^{0}C, bertekanan P=3 atm, berjumlah F=200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12} dan C_6H_{14} dengan komposisi z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1, dipanaskan pada tekanan tetap P, sampai suhunya mencapai T=40^{0}C, sehingga sebagian cairan menguap. Cairan dianggap ideal sedangkan uap mengikuti model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Selanjutnya campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan. Ingin dicari jumlah uap (V), jumlah cairan (L) serta komposisinya (Gambar 2.3.5). Ingin dicari pula jumlah panas yang harus dimasukkan ke *partial vaporizer*.



Gambar 2.3.5. Diagram alir proses *Partial Vaporization*

Analisis :

Persamaan matematis yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.3.1.

$y_i = K_i \cdot x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i^0 = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp[\frac{2P}{RT}[\sum_j y_j B_{ij} - B]]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_{i,} = a_i - b_i \exp(\frac{c_i}{T})$ ..... (2.3.4)

Neraca massa total :

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

Neraca massa komponen:

$F \cdot z_i = L \cdot x_i + V \cdot y_i$ ..... (2.1.13)

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}\cdot K_i}$ ..... (2.1.15)

Harus dipenuhi pula:

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4), (2.1.15) berlaku untuk i=1, 2, 3, 4.

Untuk perhitungan Q diperlukan persamaan-persamaan berbasis dipakai Hukum Termodinamika I seperti pada sub-sub bab 2.1.5, diperoleh:

$\mathrm{Q} = H_2 - H_1 = \Delta H$ ..... (2.1.18)

$\mathrm{Q} = \mathrm{L} \cdot H_L + V \cdot H_v - F \cdot H_F$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R)$ ..... (2.1.20)

$H_L = \sum x_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T - T_R))$ ..... (2.1.22)

Diketahui : F, P, T_F, T, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4 , K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0, y_1, y_2, y_3, y_4, H_F, H_L, H_V, Q, $\emptyset_1$, $\emptyset_2$, $\emptyset_3$, $\emptyset_4$, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 30 persamaan dengan 30 *unknowns*.

Persamaan (2.3.2), (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma hitungan :

1. Hitung P_1^0, P_2^0, P_3^0, P_4^0 dengan persamaan (2.1.4)

2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial V/F
4. Trial nilai $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$; sebagai nilai awal bisa diambil $\emptyset_i$=1 (uap dianggap ideal)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
8. Hitung $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3), menggunakan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 7
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan $\emptyset_1, \emptyset_2, \emptyset_3, \emptyset_4$ dari langkah 8
10. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9 dan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 10.
12. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 11 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 7.

    ya : lanjut ke langkah 13

    tidak : kembali ke langkah 4
13. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$

    ya : lanjut ke langkah 14

    tidak`` : kembali ke langkah 3

14. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21), (2.1.22)

15. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil hitungan dengan *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 5, ditunjukkan pada Gambar 2.3.6.

Partial Vaporization: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids
Second Virial Coefficient

F, mol/meni	200	Trial:	V/F =	0,29206	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
TF, C =	20		PSI 1 =	0,94824	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
P, atm =	3		PSI 2 =	0,98255	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
T, C =	40		PSI 3 =	1,02246	Ki = Pi0 / P/PSI i
			PSI 4 =	1,07277	yi = Ki * xi
					R, mL atm/mol/K = 82,057

Komp	zi	A	B	C	Second Virial a	b	c	B, cm3/mol	B1j	B2j
C3H8	0,2000	6,80398	803,81	246,99	322,8	220,3	350	-350,8	350,8	470,6
nC4H10	0,3000	6,80896	935,86	238,73	165,4	135,4	555	-631,4	470,6	631,4
C5H12	0,4000	6,87632	1075,78	233,205	377,9	237,6	560	-1042,7	604,8	811,4
C6H14	0,1000	6,87024	1168,72	224,21	839,6	404,1	572,6	-1675,8	766,7	1028,6
Jumlah =	1,0000									

B3j	B4j	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j
604,8	766,7				0,09668	0,45044	158,02	211,99	272,44	345,37
811,4	1028,6	10072,8	13,254	4,65903	0,27867	0,35170	165,52	222,05	285,37	361,76
1042,7	1321,9	2827,3	3,720	1,26207	0,48976	0,18243	110,34	148,02	190,23	241,15
1321,9	1675,8	868,3	1,143	0,37249	0,13489	0,01543	11,83	15,87	20,40	25,85
		279,8	0,368	0,11438			445,71	597,93	768,43	974,14

Sum yjBij	yi Sum yjBi	PSI i	Ki	xi	yi	del yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC
987,83	89,14	0,94824	4,65903	0,09668	0,45044	-1,3E-08	98,36	73,6	24545	25
1034,69	179,38	0,98255	1,26207	0,27867	0,35170	-3,2E-09	132,42	98,49	22440	25
689,74	307,37	1,02246	0,37249	0,48976	0,18243	1,6E-09	167,19	120,07	26200	25
73,95	97,41	1,07277	0,11438	0,13489	0,01543	4,1E-10	197,66	142,6	28850	25
	673,31			1,00000	1,00000					
	Sum Sum yiyjBij									

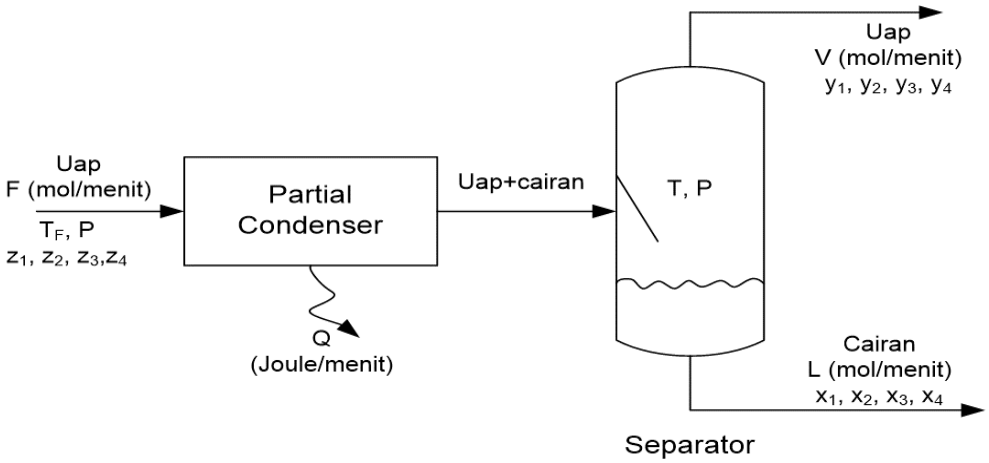
F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
-19672,0	20196,7	674852,2	
-39726,0	78372,5	491345,9	
-66876,0	173904,5	298377,7	
-19766,0	56626,0	27927,6	
-146040,0	329099,6	1492503,4	1967643,1

Gambar 2.3.6. Hasil perhitungan *Partial Vaporization*

2.3.6. *Partial Condensation*

Uap, bersuhu T_F = 70°C, bertekanan P = 3 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P sampai suhu mencapai T=40 °C, sehingga sebagian uap mengembun. Cairan dianggap ideal, sedangkan uap mengikuti model

second virial coefficient sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Selanjutnya campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan. Ingin dicari jumlah uap (V), jumlah cairan (L) serta komposisinya (Gambar 2.3.7). Ingin dicari pula jumlah panas yang harus diambil pada alat pendingin (Q).



Gambar 2.3.7. Diagram alir proses *Partial Condensation*

Analisis:

Persamaan matematis untuk kasus ini mirip dengan pada sub-sub bab 2.3.5.

$y_i = K_i x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right)$ ..... (2.3.4)

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F} + \left(1 - \frac{L}{F}\right) K_i}$ ..... (2.1.15a)

Harus dipenuhi pula :

$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$ ..... (2.1.10)

$Q = LH_L + VH_V - FH_F$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot (\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T_F - T_R))$ ..... (2.1.20a)

$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i \left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right)$ ..... (2.1.22)

Diketahui : F, P, T_F, z_1, z_2, z_3, z_4, T

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, K_1, K_2, K_3, K_4, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, B_1, B_2, B_3, B_4, Q, H_F, H_L, H_V

Diperoleh 30 persamaan dengan 30 *unknowns*. Persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial L/F
4. Trial ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\phi_i = 1$ (uap dianggap ideal)
5. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)

6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
8. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4 dari langkah 8
10. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 10 dan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9.
12. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 11 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 7. Jika ya, lanjut ke langkah 13. Jika tidak, kembali ke langkah 4
13. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 14. Jika tidak, kembali ke langkah 3.
14. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20a), (2.1.21) dan (2.1.22)
15. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil Hitungan dengan program *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 6, ditunjukkan pada Gambar 2.3.8.

Partial Condensation: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids Second Virial Coefficient

P, atm =	3	Trial:	L/F =	0.7079	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
F, mol/r	200		PSI 1 =	0.9482	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
TF, C =	70		PSI 2 =	0.9826	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
T, C =	40		PSI 3 =	1.0225	Ki = Pi0 / P/PSI i
			PSI 4 =	1.0728	yi = Ki * xi
					R, mL atm/mol/K = 82.057

Komp	zi	A	B	C	a	b	c	Second Virial B, cm3/mol	B1j	B2j	B3j	B4j
C3H8	0.2000	6.8040	803.81	246.99	322.80	220.30	350.00	-350.82	350.82	470.63	604.83	766.74
nC4H10	0.3000	6.8090	935.86	238.73	165.40	135.40	555.00	-631.35	470.63	631.35	811.38	1028.60
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.21	377.90	237.60	560.00	-1042.75	604.83	811.38	1042.75	1321.90
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	839.60	404.10	572.60	-1675.78	766.74	1028.60	1321.90	1675.78
Jumlah =	1.0000											

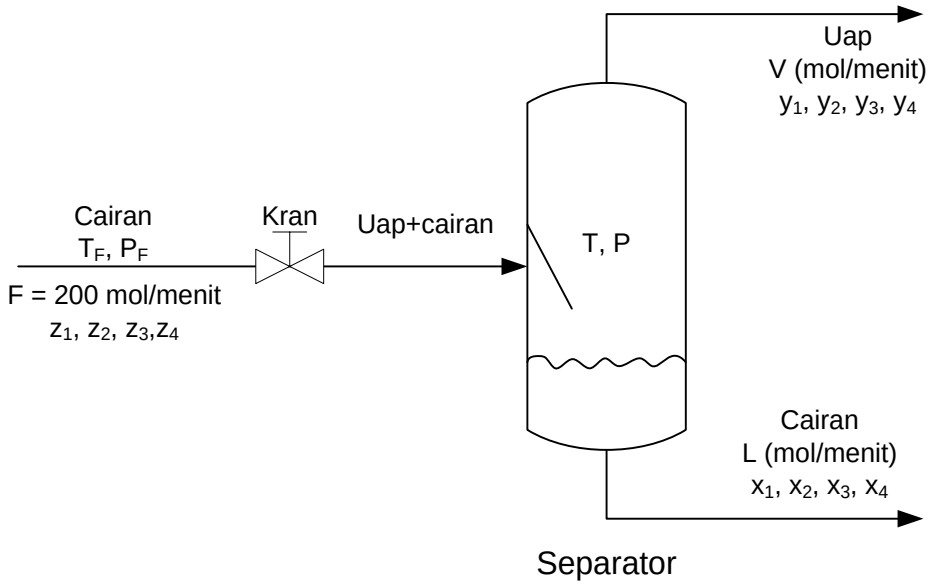
Komp	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i
C3H8											
nC4H10	10072.81	13.254	4.6590	0.0967	0.4504	158.02	211.99	272.44	345.37	89.14	0.94824
C5H12	2827.31	3.720	1.2621	0.2787	0.3517	165.52	222.05	285.37	361.76	179.38	0.98255
C6H14	868.34	1.143	0.3725	0.4898	0.1824	110.34	148.02	190.23	241.15	307.37	1.02246
Jumlah =	279.76	0.368	0.1144	0.1349	0.0154	11.83	15.87	20.40	25.85	97.41	1.07277
						445.71	597.93	768.43	974.14	673.31	
										Sum Sum yiyjBij	

Komp	Ki	xi	yi	del yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
C3H8	4.6590	0.09668	0.45044	0.00000	98.36	73.6	24545	25	1114280.0	20196.7	674851.4	
nC4H10	1.2621	0.27867	0.35170	0.00000	132.42	98.49	22440	25	1612323.0	78372.6	491344.6	
C5H12	0.3725	0.48976	0.18243	0.00000	167.19	120.07	26200	25	2528252.0	173904.6	298376.7	
C6H14	0.1144	0.13489	0.01543	0.00000	197.66	142.6	28850	25	705340.0	56626.0	27927.5	
Jumlah =		1.00000	1.00000						5960195.0	329099.9	1492500.2	-4138594.9

Gambar 2.3.8. Hasil perhitungan *Partial Condensation*

2.3.7. *Adiabatic Flash*

Cairan, bertekanan P = 3 atm, bersuhu T_F = 70 ^oC, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P = 3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh cairan dan uap (Gambar 2.3.9). Cairan dianggap ideal, sedangkan uap mengikuti model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970) Ingin dicari suhu setelah ekspansi (T), jumlah uap (V), jumlah cairan (L) dan komposisinya.



Gambar 2.3.9. Diagram alir *Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis untuk kasus ini mirip dengan pada sub-sub bab 2.3.6, hanya disini, nilai Q harus nol.

$y_i = K_i x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right)$ ..... (2.3.4)

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

Harus dipenuhi pula :

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.5)$$

$$Q = LH_L + VH_V - FH_F = 0 \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Diketahui : F, T_F, P, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, B_1, B_2, B_3, B_4, H_F, H_L, H_V

Diperoleh 30 persamaan dengan 30 *unknowns*. Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.1.15), (2.3.1), dan (2.3.4) berlaku untuk i=1,2,3,4. Persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Trial L/F
5. Trial ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\phi_i = 1$ (uap dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
7. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
8. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)

9. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
10. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4 dari langkah 9
11. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10
12. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 11 dan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10.
13. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 12 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 8. Jika ya, lanjut ke langkah 14. Jika tidak, kembali ke langkah 5
14. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 15. Jika tidak, kembali ke langkah 4.
15. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21) dan (2.1.22)
16. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)
17. Cek apakah Q = 0. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali kelangkah 1

Hasil hitungan dengan menggunakan program *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 7, ditunjukkan pada Gambar 2.3.10.

Flash Vaporization: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids
Second Virial Coefficient
Constant Enthalpy

F, mol/menit =	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	
TF, C =	60	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))	
PF, atm =	20	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760	
P, atm =	3	Ki = Pi0 / P/PSI i	
		yi = Ki * xi	
		R, mL atm/mol/K =	82,057

Trial:	T, C =	33,60552
	V/F =	0,16137
	PSI 1 =	0,94667
	PSI 2 =	0,98189
	PSI 3 =	1,02314
	PSI 4 =	1,07564

		Antoine:			Second Virial			B,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c	cm3/mol
C3H8	0,2000	6,80398	803,81	246,99	322,8	220,3	350,0	-366,70
nC4H10	0,3000	6,80896	935,86	238,73	165,4	135,4	555,0	-661,34
C5H12	0,4000	6,87632	1075,78	233,21	377,9	237,6	560,0	-1096,71
C6H14	0,1000	6,87024	1168,72	224,21	839,6	404,1	572,6	-1773,51
Jumlah =	1,0000							

B1j	B2j	B3j	B4j	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
366,70	492,46	634,16	806,44	8696,06	11,442	4,029	0,13434	0,54124
492,46	661,34	851,64	1083,00	2357,96	3,103	1,053	0,29744	0,31329
634,16	851,64	1096,71	1394,64	698,75	0,919	0,300	0,45097	0,13508
806,44	1083,00	1394,64	1773,51	217,31	0,286	0,089	0,11724	0,01039

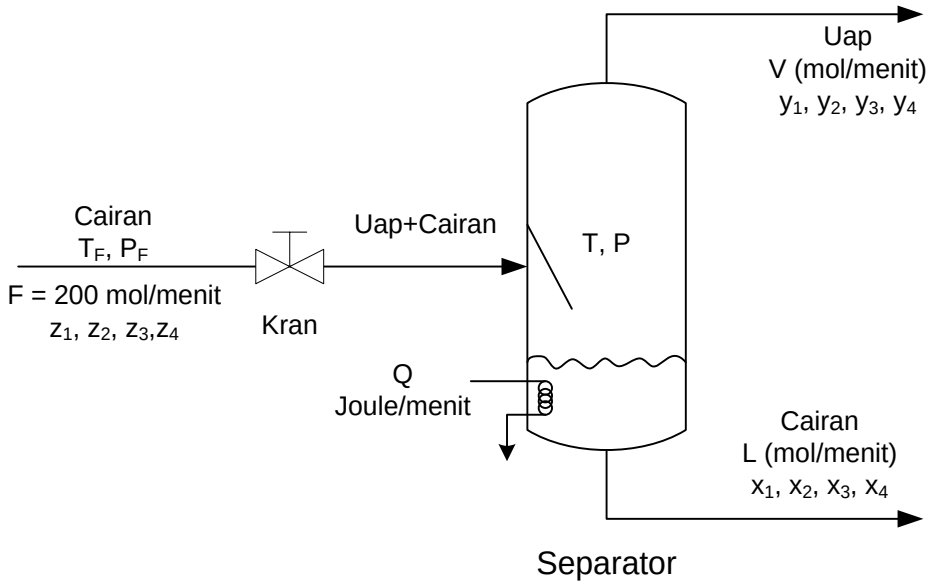
yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	xi	yi
198,47	266,54	343,23	436,48	89,36	0,94667	4,02891	0,13434	0,54124
154,28	207,19	266,81	339,29	180,01	0,98189	1,05327	0,29744	0,31329
85,66	115,04	148,15	188,39	309,07	1,02314	0,29954	0,45097	0,13508
8,38	11,25	14,49	18,42	98,26	1,07564	0,08861	0,11724	0,01039
446,79	600,02	772,68	982,58	676,69			1,00000	1,00000
				Sum Sum yiyjBij				

del yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
0,00000	98,36	73,6	24545	25	137704,0	19072,2	439810,0	
0,00000	132,42	98,49	22440	25	278082,0	56850,7	235458,9	
0,00000	167,19	120,07	26200	25	468132,0	108828,1	118726,7	
0,00000	197,66	142,6	28850	25	138362,0	33449,0	10084,3	
					1022280,0	218200,0	804080,0	0,0

Gambar 2.3.10. Hasil perhitungan *Adiabatic Flash*

2.3.8. *Non-Adiabatic Flash*

Cairan , bersuhu T_F = 60 ^oC, bertekanan P_F = 20 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P = 3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh cairan dan uap. Pada *separator drum* dimasukkan panas sebesar Q = 1.000.000 Joule/menit (Gambar 2.3.11). Cairan dianggap ideal, sedangkan uap mengikuti model *second virial coefficient* (Nagahama and Hirata, 1970). Ingin dicari suhu setelah ekspansi (T), jumlah uap (V), jumlah cairan (L) serta komposisinya.



Gambar 2.3.11. Diagram alir proses *Non-Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan matematis untuk kasus ini mirip dengan pada sub-sub-Bab 2.3.7, hanya nilai Q disini ditentukan 1.000.000 Joule/menit.

$y_i = K_i x_i$ ..... (2.2.5)

$K_i = \frac{P_i^0}{\emptyset i.P}$ ..... (2.3.5)

$\log P_i = A_i - \frac{B_i}{T+C_i}$ ..... (2.1.4)

$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right)$ ..... (2.3.4)

$F = L + V$ ..... (2.1.12)

$x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i}$ ..... (2.1.15)

Harus dipenuhi pula:

$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$ ..... (2.1.5)

$Q = LH_L + VH_V - FH_F$ ..... (2.1.19)

$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T - T_R)$ ..... (2.1.20)

$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R)$ ..... (2.1.21)

$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right)$ ..... (2.1.22)

Diketahui : F, P_F,T_F, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, B_1, B_2, B_3, B_4, H_F, H_L, H_V

Diperoleh 30 persamaan dengan 30 *unknowns*. Persamaan (2.2.5), (2.3.5), (2.1.4), (2.3.1), (2.3.4) dan (2.1.15) berlaku untuk i=1,2,3,4. Persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Trial L/F
5. Trial ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\phi_i = 1$ (uap dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5)
7. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
8. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5)
9. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
10. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (2.3.5) menggunakan ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4 dari langkah 9
11. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.3.15) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10
12. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (2.2.5) menggunakan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 11 dan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10.
13. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 12 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 8. Jika ya, lanjut ke langkah 14. Jika tidak, kembali ke langkah 5
14. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 15. Jika tidak, kembali ke langkah 4.
15. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21) dan (2.1.22)
16. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)
17. Cek apakah Q = 1.000.000? Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali kelangkah 1

Hasil hitungan dengan program *Non-Ideal Gases*, *Sheet* 8, ditunjukkan pada Gambar 2.3.12.

Flash Vaporization: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids
Second Virial Coefficient
Given Heat Input; Can Be Applied For Constant Enthalpy By setting Q = 0

F, mol/menit =	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
TF, C =	60	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
PF, atm =	20	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
P, atm =	3	Ki = Pi0 / P/PSI i
Q, J/menit =	1000000	yi = Ki * xi
		R, mL atm/mol/K = 82,057

Trial:		
	T, C =	42,18891
	V/F =	0,32177
	PSI 1 =	0,97139
	PSI 2 =	1,00605
	PSI 3 =	1,04625
	PSI 4 =	1,09675

		Antoine:			Second Virial				B,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c		cm3/mol
C3H8	0,2000	6,8040	803,81	247,0	322,8	220,3	350,0		-345,61
nC4H10	0,3000	6,8090	935,86	238,7	165,4	135,4	555,0		-621,61
C5H12	0,4000	6,8763	1075,78	233,2	377,9	237,6	560,0		-1025,22
C6H14	0,1000	6,8702	1168,72	224,2	839,6	404,1	572,6		-1644,05
Jumlah =	1,0000								

B1j	B2j	B3j	B4j	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	yi
345,61	463,51	595,26	753,80	10576,73	13,917	4,7755	0,09030	0,43123
463,51	621,61	798,31	1010,92	3002,87	3,951	1,3091	0,27286	0,35721
595,26	798,31	1025,22	1298,28	933,23	1,228	0,3912	0,49744	0,19461
753,80	1010,92	1298,28	1644,05	304,18	0,400	0,1216	0,13940	0,01696

yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	xi	yi
149,04	199,88	256,69	325,06	191,13	0,97139	4,77555	0,09030	0,43123
165,57	222,04	285,16	361,11	212,33	1,00605	1,30913	0,27286	0,35721
115,84	155,36	199,52	252,66	148,56	1,04625	0,39122	0,49744	0,19461
12,78	17,14	22,01	27,88	16,39	1,09675	0,12164	0,13940	0,01696
443,23	594,42	763,38	966,70	568,42			1,00000	1,00000
				Sum Sum yiyjBij				

del yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, oC	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit	del Q J/menit
0,00000	98,36	73,6	24545	25	137704	20708,727	716266,5		
0,00000	132,42	98,49	22440	25	278082	84245,145	554767,3		
0,00000	167,19	120,07	26200	25	468132	193913,43	353977,5		
0,00000	197,66	142,6	28850	25	138362	64243,58	34157,8		
					1022280	363110,88	1659169,1	1000000,0	0,0

Gambar 2.3.12. Hasil perhitungan *Non-Adiabatic Flash*

2.4. Cairan Non-Ideal Dan Gas Non-Ideal

Pada sub bab ini, akan dibahas sejumlah aplikasi konsep kesetimbangan fasa untuk komputasi kesetimbangan fasa cair-uap dimana cairan non-ideal dan uap juga non-ideal. Sebagai contoh analisis yang dipilih cairan yang non-idealnya didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999) sedangkan uapnya dimodelkan dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Kasus yang akan dibahas:

2.4.1. *Bubble Point Temperature*
2.4.2. *Bubble Point Pressure*
2.4.3. *Dew Point Temperature*
2.4.4. *Dew Point Pressure*
2.4.5. *Partial Vaporization*
2.4.6. *Partial Condensation*
2.4.7. *Adiabatic Flash*
2.4.8. *Non-Adiabatic Flash*
2.4.9. *Partial Condensation with Non-Condensable Gas*

2.4.1. Bubble Point Temperature

Cairan yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, dan C_6H_{14} dengan fraksi mol x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap P = 3 atm. Ingin dicari suhu saat cairan mulai mendidih. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999) sedangkan Non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* yang sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Model Scatchard-Hidebrand:

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

Dalam hal ini, x_i adalah fraksi mol komponen i dan v_i adalah volum molar komponen i sedangkan T adalah suhu dalam K. Model *second virial coefficient*:

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

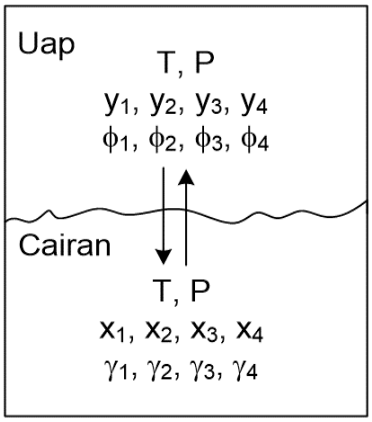
$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Dalam hal ini T adalah suhu dalam K, B_i adalah *second virial coefficient* komponen i dalam cm^3/mol.

Analisis:



Start dari persamaan (1.2.5)

$$\gamma_i x_i P_i^o = \phi_i y_i P \quad \text{.....} \quad (1.2.5)$$

$$y_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} x_i$$

Dapat dituliskan:

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$log\, P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = \exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = \exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i \exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Harus dipenuhi pula :

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.5)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.2.1), (2.3.1) dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : P, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : T, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 25 persamaan dengan 25 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian juga persamaan (2.3.2), (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
5. Trial ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\phi_i = 1$ (uap dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1) , (2.3.2), (2.3.3)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7) menggunakan ϕ_i dari langkah 8

10. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 10 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 7. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5
12. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 1, ditunjukkan pada Gambar 2.4.1.

Bubble Point Temperature: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

P, atm = 3

log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i
yi = Ki * xi
R, mL atm/mol/K = 82,057

Trial: T, C = 26,16181
PSI 1 = 0,98299
PSI 2 = 1,02076
PSI 3 = 1,06532
PSI 4 = 1,12262

		Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:	
Komp	xi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5
C3H8	0,2000	6,8040	803,81	246,99	322,80	220,30	350,00	89,16	41,90
C4H10	0,3000	6,8090	935,86	238,73	165,40	135,40	555,00	96,82	43,44
C5H12	0,4000	6,8763	1075,78	233,21	377,90	237,60	560,00	115,00	44,98
C6H14	0,1000	6,8702	1168,72	224,21	839,60	404,10	572,60	131,50	46,52
Jumlah =	1,0000								

xi vi	xI vi di	dav	gama i	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	B, cm3/mol	yi	B1j	B2j
17,83	747,16		1,01992	7265,4	9,5597	3,30630	-386,54	0,66126	386,54	519,95
29,05	1261,76		1,00247	1887,9	2,4840	0,81317	-699,39	0,24395	519,95	699,39
46,00	2069,08		1,00263	535,3	0,7044	0,22097	-1165,20	0,08839	671,12	902,73
13,15	611,74		1,02845	159,3	0,2096	0,06402	-1897,67	0,00640	856,47	1152,05
106,03	4689,74	44,231								

B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjB	PSI i	Ki	yi	del yi
671,12	856,47	255,61	343,82	443,78	566,35	295,75	0,98299	3,30630	0,66126	0,00000
902,73	1152,05	126,84	170,62	220,22	281,04	146,76	1,02076	0,81317	0,24395	0,00000
1165,20	1487,00	59,32	79,79	102,99	131,43	68,63	1,06532	0,22097	0,08839	0,00000
1487,00	1897,67	5,48	7,38	9,52	12,15	6,34	1,12262	0,06402	0,00640	0,00000
		447,25	601,60	776,51	990,97	517,49			1,00000	
						Sum Sum yiyjBij			Sum yi	

Gambar 2.4.1. Hasil perhitungan *Buble Point Temperature*

2.4.2. *Bubble Point Pressure*

Cairan yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, dan C_6H_{14} dengan fraksi mol x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap P. Ingin dicari tekanan sistem P agar cairan mulai mendidih pada suhu T = 30 ^oC. Cairan dianggap mengikuti model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999) sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan sub-sub bab 2.4.1.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.2.1), (2.3.1) dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : T, x_1, x_2, x_3, x_4

Dihitung : P, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 25 persamaan dengan 25 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian juga persamaan (2.3.2), (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4 dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
4. Trial P
5. Trial ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\phi_i = 1$ (uap dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.3), (2.3.3)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7) menggunakan ϕ_i dari langkah 8
10. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Cek apakah y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 10 sama dengan y_1, y_2, y_3, y_4 dari langkah 7. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5
12. Cek apakah $y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 1$. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 4

Hasil Hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 2, ditunjukkan pada Gambar 2.4.2.

Bubble Point Pressure: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

T, C = 30

log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Pi0, mmHg = 10^ (A - B / (T + C))
Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i
yi = Ki * xi

R, mL atm/mol/K = 82.057

Trial: P, atm = 3.32912
PSI 1 = 0.98151
PSI 2 = 1.02173
PSI 3 = 1.06917
PSI 4 = 1.13006

		Antoine:			Second Virial			S-H parameters:	
Komp	xi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5
C3H8	0.2000	6.8040	803.81	246.99	322.8	220.3	350.00	89.160	41.90
C4H10	0.3000	6.8090	935.86	238.73	165.4	135.4	555.00	96.820	43.44
C5H12	0.4000	6.8763	1075.8	233.21	377.9	237.6	560.00	115.000	44.98
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7	224.21	839.6	404.1	572.60	131.500	46.52
Jumlah =	1.0000								

xi vi	xi vi di	dav	gama i	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	yi	B, cm3/mol	B1j	B2j
17.832	747.16		1.0197	7980.6	10.5008	3.27682	0.65536	-376.119	376.12	505.48
29.046	1261.76		1.0024	2120.5	2.7901	0.82226	0.24668	-679.324	505.48	679.32
46.000	2069.08		1.0026	615.3	0.8096	0.22805	0.09122	-1129.074	651.66	875.79
13.150	611.74		1.0281	187.4	0.2466	0.06738	0.00674	-1832.170	830.13	1115.63
106.028	4689.737	44.231								

B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	yi	del yi
651.66	830.13	246.49	331.27	427.08	544.04	285.89	0.98151	3.27682	0.65536	0.00000
875.79	1115.63	124.69	167.57	216.04	275.20	144.62	1.02173	0.82226	0.24668	0.00000
1129.07	1438.28	59.44	79.89	102.99	131.20	68.94	1.06917	0.22805	0.09122	0.00000
1438.28	1832.17	5.59	7.52	9.69	12.35	6.49	1.13007	0.06738	0.00674	0.00000
		436.22	586.25	755.80	962.78	505.93			1.00000	

Gambar 2.4.2. Hasil perhitungan *Buble Point Pressure*

2.4.3. *Dew Point Temperature*

Uap yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, dan C_6H_{14} dengan fraksi mol y_1=0,2; y_2=0,3; y_3=0,4; y_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap P = 3 atm. Ingin dicari suhu saat uap mulai mengembun. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999) sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan sub-sub bab 2.4.1.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Harus dipenuhi pula :

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.2.1), (2.3.1) dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : P, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : T, x_1, x_2, x_3, x_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 25 persamaan dengan 25 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian juga persamaan (2.3.2), (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
5. Trial γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\gamma_i = 1$ (cairan dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
7. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7) menggunakan γ_i dari langkah 8
10. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (1.2.6) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 10 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 7. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5
12. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 1

Hasil Hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 3, disajikan pada Gambar 2.4.3.

Dew Point Temperature: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

	P, atm =	3	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
Trial:	T, C =	65.245	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
	gama 1 =	1.040	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	gama 2 =	1.013	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i
	gama 3 =	1.001	yi = Ki * xi
	gama 4 =	1.006	R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine		Second Virial			S-H parameters:			B,
Komp	yi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	cm3/mol
C3H8	0.2000	6.8040	803.81	246.99	322.80	220.30	350.00	89.16	41.90	-296.93
C4H10	0.3000	6.8090	935.86	238.73	165.40	135.40	555.00	96.82	43.44	-532.68
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.21	377.90	237.60	560.00	115.00	44.98	-865.32
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	839.60	404.10	572.60	131.50	46.52	-1355.03
Jumlah =	1.0000									

Komp	B1j	B2j	B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i
C3H8	296.93	397.70	506.89	634.31	59.39	79.54	101.38	126.86	88.98	0.95321
C4H10	397.70	532.68	678.92	849.58	119.31	159.80	203.68	254.88	178.76	0.98483
C5H12	506.89	678.92	865.32	1082.84	202.76	271.57	346.13	433.13	303.79	1.02029
C6H14	634.31	849.58	1082.84	1355.03	63.43	84.96	108.28	135.50	95.04	1.06327
Jumlah =					444.89	595.87	759.47	950.37	666.56	
									Sum Sum yiyjBij	

Komp	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	xi	del xi
C3H8	16966.94	22.3249	7.8069	0.02464	2.1973	92.0660		1.0395	8.1155	0.02464	0.00000
C4H10	5373.02	7.0698	2.3929	0.12375	11.9812	520.4647		1.0131	2.4243	0.12375	0.00000
C5H12	1869.65	2.4601	0.8037	0.49737	57.1971	2572.7269		1.0006	0.8042	0.49737	0.00000
C6H14	680.11	0.8949	0.2805	0.35424	46.5829	2167.0345		1.0062	0.2823	0.35424	0.00000
Jumlah =					117.9585	5352.2922	45.3744			1.00000	

Gambar 2.4.3. Hasil perhitungan *Dew Point Temperature*

2.4.4. Dew Point Pressure

Uap yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, dan C_6H_{14} dengan fraksi mol x_1=0,2; x_2=0,3; x_3=0,4; x_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P. Ingin dicari tekanan sistem P agar pada suhu T = 70 ^oC mulai terjadi pengembunan. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970).

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan sub-sub bab 2.4.1.

$y_i = K_i x_i$ ..... (1.2.6)

$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P}$ ..... (1.2.7)

$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i}$ ..... (2.1.4)

$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right]$ ..... (2.2.1)

$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i}$ ..... (2.2.2)

$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right]$ ..... (2.3.1)

$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij}$ ..... (2.3.2)

$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$ ..... (2.3.3)

$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right)$ ..... (2.3.4)

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.2.1), (2.3.1) dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : T, y_1, y_2, y_3, y_4

Dihitung : P, x_1, x_2, x_3, x_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 25 persamaan dengan 25 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian juga persamaan (2.3.2), (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)

2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
4. Trial P
5. Trial γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; sebagai nilai awal bisa dipakai $\gamma_i = 1$ (cairan dianggap ideal)
6. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
7. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7) menggunakan ϕ_i dari langkah 8
10. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (1.2.6) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9
11. Cek apakah x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 10 sama dengan x_1, x_2, x_3, x_4 dari langkah 7. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5
12. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 4

Hasil hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 4, disajikan pada Gambar 2.4.4.

Dew Point Pressure: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

	T, C =	70	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
			Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
Trial:	P, atm =	3.4206166	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
	gama 1 =	1.0386471	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i
	gama 2 =	1.012764	yi = Ki * xi
	gama 3 =	1.0005911	R, mL atm/mol/K = 82.057
	gama 4 =	1.0062947	

		Antoine			Second Virial			S-H parameters:		B,
Komp	yi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	cm3/mol
C3H8	0.2000	6.804	803.81	246.99	322.8	220.3	350	89.16	41.90	-288.11
C4H10	0.3000	6.809	935.86	238.73	165.4	135.4	555	96.82	43.44	-516.99
C5H12	0.4000	6.8763	1075.78	233.205	377.9	237.6	560	115	44.98	-837.13
C6H14	0.1000	6.8702	1168.72	224.21	839.6	404.1	572.6	131.5	46.52	-1304.17
Jumlah =	1.0000									

Komp	B1j	B2j	B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i
C3H8	288.11	385.94	491.11	612.98	57.62	77.19	98.22	122.60	86.23	0.94930
C4H10	385.94	516.99	657.87	821.12	115.78	155.10	197.36	246.34	173.26	0.98369
C5H12	491.11	657.87	837.13	1044.88	196.44	263.15	334.85	417.95	293.97	1.02205
C6H14	612.98	821.12	1044.88	1304.17	61.30	82.11	104.49	130.42	91.73	1.06838
Jumlah =					431.15	577.54	734.92	917.30	645.19	
									Sum Sum yiyjBij	

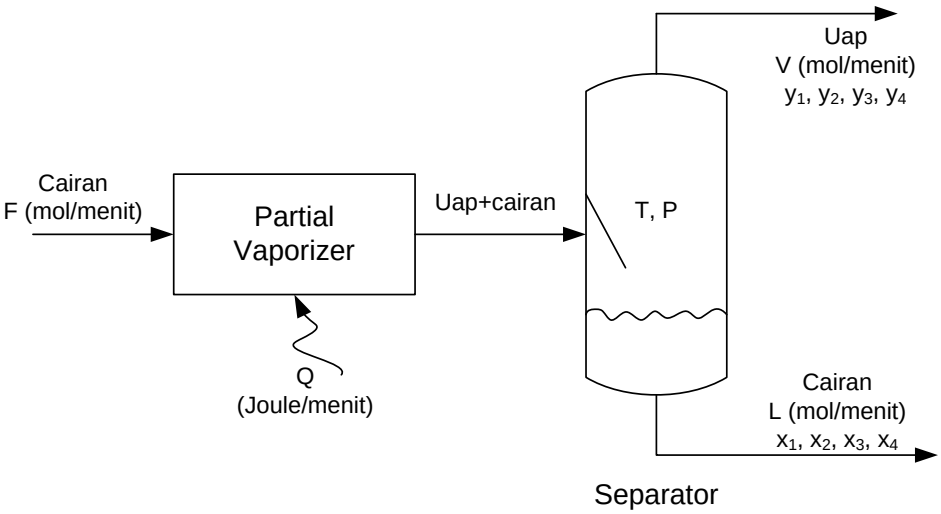
Komp	Pi0, mmHg	Pi0, atm	Ki	xi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	Ki	xi	del xi
C3H8	18544.8	24.401	7.51448	0.025625	2.28472	95.7298		1.038648183	7.8049	0.02562	0.00000
C4H10	5992.92	7.8854	2.343479	0.1264014	12.2382	531.627		1.012764048	2.3734	0.12640	0.00000
C5H12	2129.57	2.8021	0.801496	0.4987721	57.3588	2580		1.000591731	0.8020	0.49877	0.00000
C6H14	790.386	1.04	0.284575	0.3492029	45.9202	2136.21		1.006297523	0.2864	0.34920	0.00000
Jumlah =					117.802	5343.56	45.3606			1.00000	

Gambar 2.4.4. Hasil perhitungan *Dew Point Pressure*

2.4.5. *Partial Vaporization*

Cairan, bersuhu T_F = 20 ^oC, bertekanan P = 3 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 dipanaskan pada tekanan tetap sampai suhu mencapai T=40 ^oC, sehingga sebagian cairan menguap. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999) sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana

(Nagahama and Hirata, 1970). Campuran kemudian dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan (Gambar 2.4.5). Ingin dicari jumlah uap (V), jumlah cairan (L) dan komposisinya serta jumlah panas yang harus dimasukkan (Q).



Gambar 2.4.5. Diagram alir proses *Partial Vaporization*

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan sub-sub bab 1.5.1.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Neraca massa total

$$\mathrm{F = L + V} \quad \text{.....} \quad (2.1.12)$$

Neraca massa komponen

$$\mathrm{Fz_i = Lx_i + Vy_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.13)$$

Kombinasi persamaan (2.1.6), (2.1.12), dan (2.1.13) menghasilkan

$$\mathrm{x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i}} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

atau

$$\mathrm{x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F}+\left(1-\frac{L}{F}\right)K_i}} \quad \text{.....} \quad (2.1.15a)$$

Harus dipenuhi pula:

$$\mathrm{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1} \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

Untuk menghitung Q, dipakai persamaan berbasis Hukum Termodinamika 1 seperti pada sub-sub bab 2.2.5.

$$Q = LH_L + VH_V - FH_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.1.14), (2.2.1), (2.3.1), (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : T_F, P, F, T_R, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : V, L, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4,Q , H_F, H_L, H_V , B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 34 persamaan dengan 34 *unknowns*, yaitu persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.1.10), (2.1.14), (2.1.19) – (2.1.22), (2.2.1), (2.3.1), (2.3.4). Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian pula persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial V/F
4. Trial K_1, K_2, K_3, K_4 sebagai nilai awal dipakai $K_i = \frac{P_i^o}{P}$ (cairan dan uap dianggap ideal)
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.14)
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
7. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
8. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
10. Cek apakah K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9 sama dengan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 4. Jika ya, lanjut ke langkah 11. Jika tidak, kembali ke langkah 4
11. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 3.
12. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21) dan (2.1.22).
13. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil Hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 5, disajikan pada Gambar 2.4.6.

Partial Vaporization: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
20	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
3	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760		
40	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i		
	yi = Ki * xi		

Trial:	V/F	0.28011
	K1 =	4.65670
	K2 =	1.23644
	K3 =	0.36340
	K4 =	0.11367

	Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:		B,
zi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	cm3/mol
0.2000	6.8040	803.81	246.99	322.8	220.3	350	89.16	41.90	-350.82
0.3000	6.8090	935.86	238.73	165.40	135.40	555.00	96.8200	43.44	-631.35
0.4000	6.8763	1075.78	233.21	377.90	237.60	560.00	115.0000	44.98	-1042.75
0.1000	6.8702	1168.72	224.21	839.60	404.10	572.60	131.5000	46.52	-1675.78
1.0000									

Pi0, atm	xi	yi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	B1j	B2j
13.25370	0.09880	0.46008	8.809	369.099		1.0255	350.82	470.63
3.72015	0.28137	0.34789	27.242	1183.384		1.0050	470.63	631.35
1.14256	0.48681	0.17690	55.983	2518.109		1.0007	604.83	811.38
0.36811	0.13303	0.01512	17.493	813.774		1.0191	766.74	1028.60
			109.527	4884.366	44.59521			

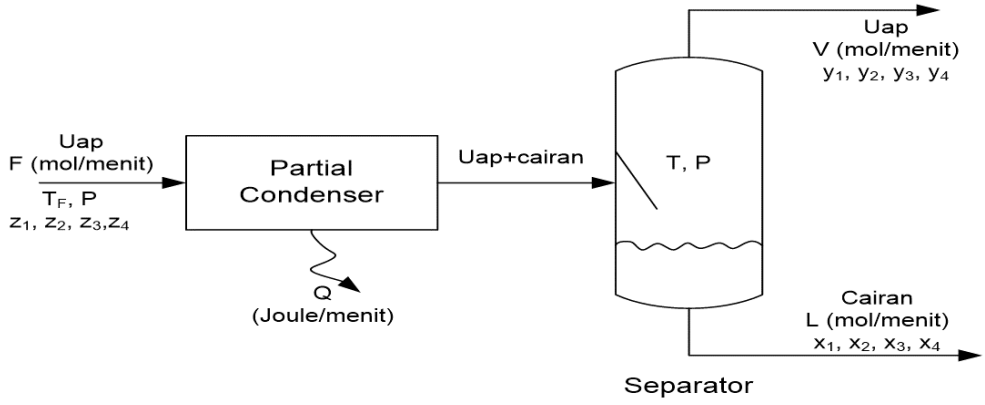
B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	·i Sum yjBi	PSI i	Ki	del Ki	xi
766.74	161.41	216.53	278.27	352.77	204.15	0.9729	4.65670	0.00000	0.09880
1028.60	163.73	219.64	282.27	357.84	207.09	1.0080	1.23644	0.00000	0.28137
1321.90	107.00	143.54	184.47	233.85	135.33	1.0487	0.36340	0.00000	0.48681
1675.78	11.59	15.55	19.99	25.34	14.66	1.1001	0.11367	0.00000	0.13303
	443.72	595.26	765.00	969.80	561.23				1.00000
									Sum xi

CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
98.36	73.6	24545	25	-19672.0	20987.6	661102	
132.42	98.49	22440	25	-39726.0	80465.7	466140	
167.19	120.07	26200	25	-66876.0	175773.8	277506	
197.66	142.6	28850	25	-19766.0	56786.3	26252	
				-146040.0	334013.5	1E+06	1911053.9

Gambar 2.4.6. Hasil perhitungan *Partial Vaporization*

2.4.6. *Partial Condensation*

Uap, bersuhu T_F = 70 ^oC, bertekanan P = 3 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 didinginkan pada tekanan tetap P sampai suhu mencapai T=40 ^oC, sehingga sebagian uap mengembun. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan non-idealitas uap didekati dengan *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Selanjutnya campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan. Ingin dicari jumlah uap (V), jumlah cairan (L) serta komposisinya. Ingin dicari pula jumlah panas yang harus diambil pada *partial condenser* (Q).



Gambar 2.4.7. Diagram alir proses *Partial Condensation*

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan pada sub-sub bab 2.4.5.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T+C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Neraca massa total

$$\mathrm{F = L + V} \quad \text{.....} \quad (2.1.12)$$

Berdasarkan neraca massa komponen dapat diperoleh (sub-sub bab 2.1.5)

$$\mathrm{x_i} = \frac{\mathrm{z_i}}{\frac{\mathrm{L}}{\mathrm{F}} + \left(1 - \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{F}}\right)\mathrm{K_i}} \quad \text{.....} \quad (2.1.15a)$$

Harus dipenuhi pula :

$$\mathrm{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1} \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

Untuk menghitung Q, dipakai persamaan berbasis Hukum Termodinamika 1 seperti pada sub-sub bab 2.1.5:

$$Q = LH_L + VH_V - FH_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot \left(\lambda_i + cp_{vi} \cdot (T_F - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.20a)$$

$$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.1.10) , (2.1.14), (2.2.1), (2.3.1), dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : T_F, P, F, T_R, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : V, L, Q , H_F, H_L, H_V , x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, B_1, B_2, B_3, B_4

Diperoleh 34 persamaan dengan 34 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian pula persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial L/F
4. Trial K_1, K_2, K_3, K_4 sebagai nilai awal dipakai $K_i = \frac{P_i^o}{P}$ (cairan dan uap dianggap ideal)
5. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15a)
6. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
7. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
8. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
9. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7)
10. Cek apakah K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 9 sama dengan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 4. Jika ya, lanjut ke langkah 11. Jika tidak, kembali ke langkah 4
11. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 3.
12. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20a), (2.1.21), dan (2.1.22).
13. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19)

Hasil hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 6, ditunjukkan pada Gambar 2.4.8.

Partial Condensation: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

F, mol/menit :	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
TF, C =	70	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
P, atm =	3	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760		
T, C =	40	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i		
		yi = Ki * xi		

Trial:	L/F =	0.71989
	K1 =	4.65670
	K2 =	1.23644
	K3 =	0.36340
	K4 =	0.11367

		Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:		B,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/m	di, atm^0,!	cm3/mol
C3H8	0.2000	6.804	803.81	246.99	322.80	220.30	350.00	89.16	41.90	-350.82
C4H10	0.3000	6.809	935.86	238.73	165.40	135.40	555.00	96.82	43.44	-631.35
C5H12	0.4000	6.876	1075.78	233.21	377.90	237.60	560.00	115.00	44.98	-1042.75
C6H14	0.1000	6.870	1168.72	224.21	839.60	404.10	572.60	131.50	46.52	-1675.78
Jumlah =	1.0000									

Pi0, mmHg	Pi0, atm	xi	yi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	B1j	B2j
10072.81	13.254	0.09880	0.46008	8.8090	369.10		1.0255	350.82	470.63
2827.31	3.720	0.28137	0.34789	27.2418	1183.38		1.0050	470.63	631.35
868.34	1.143	0.48681	0.17690	55.9829	2518.11		1.0007	604.83	811.38
279.76	0.368	0.13303	0.01512	17.4930	813.77		1.0191	766.74	1028.60
				109.53	4884.37	44.595			

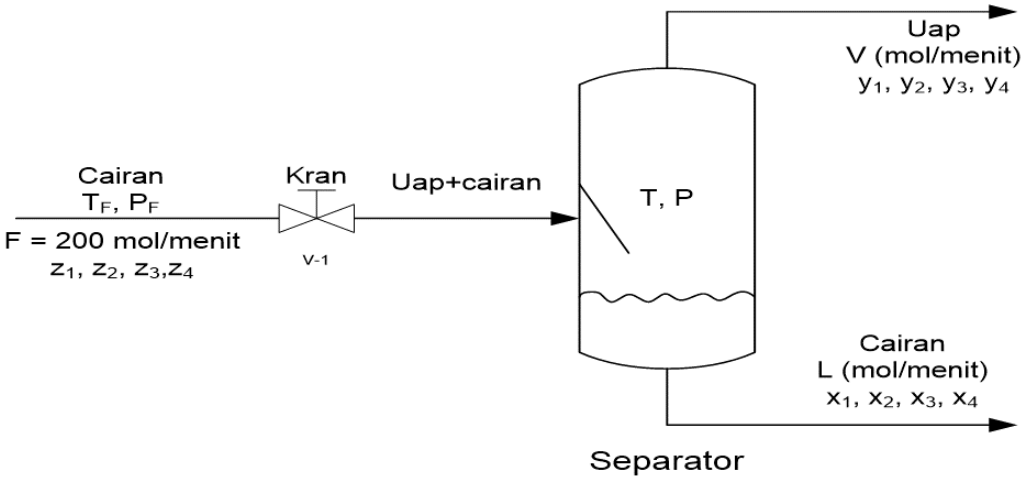
B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	Sum yjBi yi	Sum yjBi	PSI i	Ki	del Ki
604.83	766.74	161.41	216.53	278.27	352.77	1008.97	204.15	0.9729	4.65670	0.00000
811.38	1028.60	163.73	219.64	282.27	357.84	1023.48	207.09	1.0080	1.23644	0.00000
1042.75	1321.90	107.00	143.54	184.47	233.85	668.85	135.33	1.0487	0.36340	0.00000
1321.90	1675.78	11.59	15.55	19.99	25.34	72.48	14.66	1.1001	0.11367	0.00000
		443.72	595.26	765.00	969.80		561.23			
							Sum Sum yiyjBij			

xi	yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
0.09880	0.46008	98.36	73.6	24545	25	1E+06	20987.6	661102	
0.28137	0.34789	132.42	98.49	22440	25	2E+06	80465.7	466140	
0.48681	0.17690	167.19	120.07	26200	25	3E+06	175773.8	277506	
0.13303	0.01512	197.66	142.6	28850	25	705340	56786.3	26252.1	
1.00000	1.00000					6E+06	334013.5	1431000	-4195181
Sum xi	Sum yi								

Gambar 2.4.8. Hasil perhitungan *Partial Condensation*

2.4.7. *Adiabatic Flash Vaporization*

Cairan, bersuhu T_F = 70 ^oC, bertekanan P = 12 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P = 3 atm, sehingga sebagian cairan menguap (Gambar 2.4.9). Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh cairan dan uap. Ingin dicari suhu setelah ekspansi (T), jumlah uap (V), jumlah cairan (L) dan komposisinya.



Gambar 2.4.9. Diagram alir proses *Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan kasus pada sub-sub bab 2.4.6, hanya disini nilai Q (panas masuk/keluar) harus nol karena kran dan *separator* berkerja secara adiabatis.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Neraca massa total dan neraca massa komponen:

$$\mathrm{F = L + V} \quad \text{.....} \quad (2.1.12)$$

$$\mathrm{x_i} = \frac{\mathrm{z_i}}{\left(1 - \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{F}}\right) + \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{F}}\mathrm{K_i}} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

Harus dipenuhi pula:

$$\mathrm{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1} \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

Untuk menghitung Q, dipakai persamaan berbasis Hukum Termodinamika 1 seperti pada sub-sub bab 2.1.5

$$Q = LH_L + VH_V - FH_F = 0 \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.1.10) , (2.1.15), (2.2.1), (2.3.1), dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,

Diketahui : P_F, T_F,F, T_R, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, H_F, H_L, H_V, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, B_1, B_2, B_3, B_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4

Diperoleh 34 persamaan dengan 34 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1) demikian pula persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Trial V/F
5. Trial K_1, K_2, K_3, K_4 sebagai nilai awal dipakai $K_i = \frac{P_i^o}{P}$ (cairan dan uap dianggap ideal)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
9. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
10. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2,7) dengan γ_i dari langkah 8 dan ϕ_1 dari langkah 9.
11. Cek apakah K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10 sama dengan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 5. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5.
12. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan menggunakan persamaan (2.1.15) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10.

13. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 14. Jika tidak, kembali ke langkah 4.
14. Hitung H_F, H_L, H_V dengan persamaan (2.1.20), (2.1.21) dan (2.1.22).
15. Cek, apakah $Q = LH_L + VH_V - FH_F = 0$. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 1.

Hasil hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 7, ditunjukkan pada Gambar 2.4.10.

Flash Vaporization: Non-Ideal Gases and Ideal Liquids Second Virial Coefficient And Scatchard-Hildebrand Constant Enthalpy

F, mol/menit	200	Trial:	T, C =	36.49318398	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)
TF, C =	70		V/F	0.205647524	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))
PF, atm =	12		K1 =	4.281655391	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760
P, atm =	3		K2 =	1.115980682	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i
			K3 =	0.321818817	yi = Ki * xi
			K4 =	0.098826924	R, mL atm/mol/K = 82.057

		Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:		B,	Pi0,	Pi0,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0, cm3/mol		mmHg	atm
C3H8	0.2000	6.8040	803.8	247.0	322.8	220.3	350.0	89.16	41.90	-359.400	9300.433	12.237
C4H10	0.3000	6.8090	935.9	238.7	165.4	135.4	555.0	96.82	43.44	-647.509	2562.078	3.371
C5H12	0.4000	6.8763	1075.8	233.2	377.9	237.6	560.0	115.00	44.98	-1071.814	771.775	1.015
C6H14	0.1000	6.8702	1168.7	224.2	839.6	404.1	572.6	131.50	46.52	-1728.413	243.942	0.321
Jumlah =	1.0000											

Komp	xi	yi	xi vi	xi vi di	dav	gama i	B1j	B2j	B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j
C3H8	0.11941	0.51128	10.64683	446.102		1.0241	359.4	482.4	620.7	788.2	183.76	246.65	317.33	402.97
C4H10	0.29301	0.32700	28.36936	1232.365		1.0043	482.4	647.5	833.1	1057.9	157.74	211.73	272.41	345.93
C5H12	0.46483	0.14959	53.45520	2404.415		1.0010	620.7	833.1	1071.8	1361.1	92.84	124.62	160.33	203.60
C6H14	0.12275	0.01213	16.14139	750.897		1.0212	788.2	1057.9	1361.1	1728.4	9.56	12.83	16.51	20.97
Jumlah =			108.61278	4833.779	44.5047						443.90	595.83	766.58	973.47

Komp	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	del Ki	xi	yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
C3H8	226.961	0.9757	4.2817	-2.19E-08	0.11941	0.51128	98.36	73.6	24545.0	25	177048.0	21446.3	533941.4	
C4H10	194.834	1.0113	1.1160	-7.18E-09	0.29301	0.32699	132.42	98.49	22440.0	25	357534.0	70847.0	317022.7	
C5H12	114.674	1.0529	0.3218	-2.58E-09	0.46483	0.14959	167.19	120.07	26200.0	25	601884.0	141901.2	169688.0	
C6H14	11.809	1.1056	0.0988	-9.65E-10	0.12275	0.01213	197.66	142.6	28850.0	25	177894.0	44301.4	15212.0	
Jumlah =	548.278				1.00000	1.00000					1314360.0	278495.9	1035864.1	0.0
	Sum Sum yiyjBij				Sum xi	Sum yi								

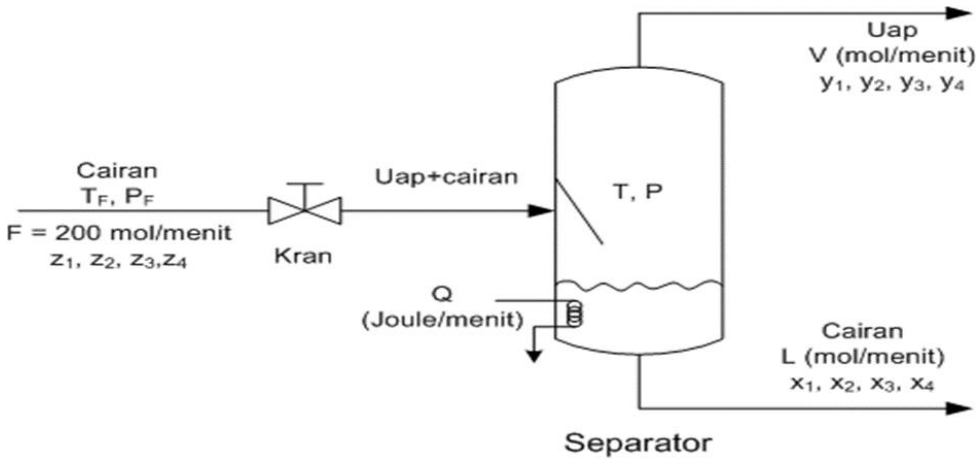
Gambar 2.4.10. Hasil perhitungan *Adiabatic Flash*

2.4.8. Non-Adiabatic Flash

Cairan , bersuhu T_F = 60 ^oC, bertekanan P_F = 20 atm, berjumlah F = 200 mol/menit yang mengandung C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,2; z_2=0,3; z_3=0,4; z_4=0,1 diekspansikan lewat kran sampai tekanannya menjadi P = 3 atm, sehingga sebagian cairan menguap. Campuran dipisahkan dengan *separator drum*

sehingga diperoleh cairan dan uap. Pada *separator drum* dimasukkan panas sebesar Q = 200.000 Joule/menit.

Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Ingin dicari suhu dalam separator drum (T), jumlah cairan (L), jumlah uap (V) serta komposisinya.



Gambar 2.4.11. Diagram alir proses *Non-Adiabatic Flash*

Analisis:

Persamaan yang terbentuk mirip dengan kasus pada sub-sub bab 2.4.7, namun pada kasus ini, proses berjalan non-adiabatis dimana dimasukkan panas sejumlah Q = 1.000.000 Joule/menit.

$$y_i = K_i x_i \quad \text{.....} \quad (1.2.6)$$

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^o}{\phi_i P} \quad \text{.....} \quad (1.2.7)$$

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

$$\gamma_i = exp\left[\frac{v_i}{RT}\left(\delta_i - \bar{\delta}\right)^2\right] \quad \text{.....} \quad (2.2.1)$$

$$\bar{\delta} = \frac{\sum x_i v_i \delta_i}{\sum x_i v_i} \quad \text{.....} \quad (2.2.2)$$

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Neraca massa total

$$\mathrm{F = L + V} \quad \text{.....} \quad (2.1.12)$$

$$\mathrm{x_i = \frac{z_i}{\left(1-\frac{V}{F}\right)+\frac{V}{F}K_i}} \quad \text{.....} \quad (2.1.15)$$

Harus dipenuhi pula:

$$\mathrm{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1} \quad \text{.....} \quad (2.1.10)$$

$$Q = LH_L + VH_V - FH_F \quad \text{.....} \quad (2.1.19)$$

$$H_F = \sum z_i \cdot cp_{Li} \cdot (T_F - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.20)$$

$$H_L = \sum x_i Cp_{Li}(T - T_R) \quad \text{.....} \quad (2.1.21)$$

$$H_V = \sum y_i\left(\lambda_i + Cp_{Vi}(T - T_R)\right) \quad \text{.....} \quad (2.1.22)$$

Persamaan (2.1.4), (1.2.6), (1.2.7), (2.1.10) , (2.1.15), (2.2.1), (2.3.1), dan (2.3.4) berlaku untuk i = 1,2,3,4.

Diketahui : P_F, T_F,F, T_R, Q, z_1, z_2, z_3, z_4

Dihitung : T, V, L, H_F, H_L, H_V, x_1, x_2, x_3, x_4, y_1, y_2, y_3, y_4, K_1, K_2, K_3, K_4, P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o, B_1, B_2, B_3, B_4, γ_1, γ_2, γ_3, γ_4, ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4

Diperoleh 34 persamaan dengan 34 *unknowns*. Persamaan (2.2.2) tidak dihitung karena merupakan bagian dari persamaan (2.2.1), demikian pula persamaan (2.3.2) dan (2.3.3) karena merupakan bagian dari persamaan (2.3.1).

Algoritma Perhitungan :

1. Trial T
2. Hitung P_1^o, P_2^o, P_3^o, P_4^o dengan persamaan (2.1.4)
3. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4 dengan persamaan (2.3.4)
4. Trial V/F
5. Trial K_1, K_2, K_3, K_4 sebagai nilai awal dipakai $K_i = \frac{P_i^o}{P}$ (cairan dan uap dianggap ideal)
6. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan persamaan (2.1.15)
7. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4 dengan persamaan (1.2.6)
8. Hitung γ_1, γ_2, γ_3, γ_4; dengan persamaan (2.2.1) dan (2.2.2)
9. Hitung ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3, ϕ_4; dengan persamaan (2.3.1), (2.3.2), (2.3.3)
10. Hitung K_1, K_2, K_3, K_4 dengan persamaan (1.2.7) dengan γ_i dari langkah 8 dan ϕ_1 dari langkah 9.
11. Cek apakah K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10 sama dengan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 5. Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, kembali ke langkah 5.
12. Hitung x_1, x_2, x_3, x_4 dengan menggunakan persamaan (2.1.15) menggunakan K_1, K_2, K_3, K_4 dari langkah 10.
13. Cek apakah $x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1$. Jika ya, lanjut ke langkah 14. Jika tidak, kembali ke langkah 4.
14. Hitung y_i dengan menggunakan persamaan (1.2.6) menggunakan x_i dari langkah 12.
15. Hitung Q dengan persamaan (2.1.19).
16. Cek, apakah Q = 1.000.000. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 1

Hasil hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 8, ditunjukkan pada Gambar 2.4.11.

Flash Vaporization: Non-Ideal Gases and Non-Ideal Liquids
Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand
Given Heat Input; Can Be Applied For Constant Enthalpy By setting Q = 0

F, mol/menit	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	R, mL atm/mol/K =	82.057
TF, C =	70	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		
PF, atm =	12	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760		
P, atm =	3	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i		
Q, J/menit =	1000000	yi = Ki * xi		

Trial:	T, C =	44.04038
	V/F	0.37283
	K1 =	5.11838
	K2 =	1.38738
	K3 =	0.41650
	K4 =	0.13298

		Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:		B,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	cm3/mol
C3H8	0.2000	6.80398	803.8	247.0	322.8	220.3	350.00	89.16	41.90	-341.30
C4H10	0.3000	6.80896	935.9	238.7	165.4	135.4	555.00	96.82	43.44	-613.57
C5H12	0.4000	6.87632	1075.8	233.2	377.9	237.6	560.00	115.00	44.98	-1010.75
C6H14	0.1000	6.87024	1168.7	224.2	839.6	404.1	572.60	131.50	46.52	-1617.87
Jumlah :	1.0000									

Pi0, mmHg	Pi0, atm	xi	yi	xi vi	xI vi di	dav	gama i	B1j	B2j
11016.3	14.495	0.07888	0.4037	7.0331	294.69		1.02725	341.3	457.6
3157.5	4.155	0.26214	0.3637	25.3804	1102.52		1.00594	457.6	613.6
991.0	1.304	0.51121	0.2129	58.7896	2644.35		1.00034	587.3	787.5
326.1	0.429	0.14777	0.0196	19.4312	903.94		1.01685	743.1	996.3
				110.63	4945.50	44.701392			

B3j	B4j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yi Sum yjBij	PSI i	Ki	del Ki	xi
587.3	743.1	137.80	184.76	237.13	300.02	179.21	0.96971	5.11838	0.00000	0.07888
787.5	996.3	166.43	223.15	286.41	362.35	216.45	1.00413	1.38738	0.00000	0.26214
1010.8	1278.8	125.06	167.67	215.21	272.27	162.64	1.04395	0.41650	0.00000	0.51121
1278.8	1617.9	14.60	19.58	25.13	31.79	18.99	1.09385	0.13298	0.00000	0.14777
		443.88	595.16	763.88	966.43	577.30				1.00000
						Sum Sum yiyjBij				Sum xi

yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit	del Q, J/menit
0.40374	98.36	73.60	24545.0	25.0	177048.0	18530.3	781131.3		
0.36369	132.42	98.49	22440.0	25.0	357534.0	82904.3	659401.2		
0.21292	167.19	120.07	26200.0	25.0	601884.0	204128.5	452259.4		
0.01965	197.66	142.60	28850.0	25.0	177894.0	69756.2	46248.8		
1.00000					1314360.0	375319.3	1939040.7	1000000.0	0.0
Sum yi									

Gambar 2.4.11. Hasil perhitungan *Non-Adiabatic Flash*

2.4.9. *Partial Condensation* Dengan *Non-Condensable Gas*

Pada sub-sub bab 2.4.9 ini dibahas contoh komputasi untuk sistem kesetimbangan uap-cair dimana fasa uap mengandung komponen yang praktis tidak bisa mengembun *(Non-Condensable Gas)*, misalnya H_2. Uap yang bercampur dengan non-condensable gas, bersuhu T_F = 70 ^oC, bertekanan P = 3 atm, berjumlah F = 100 mol/menit yang terdiri dari H_2, C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14} dengan fraksi mol z_1=0,3; z_2=0,1; z_3=0,2; z_4=0,3; z_5=0,1 didinginkan pada tekanan tetap sampai suhunya mencapai T = 40 ^oC, sehingga sebagian uap mengembun. Campuran dipisahkan dengan *separator drum* sehingga diperoleh uap dan cairan. Non-idealitas cairan didekati dengan model Scatchard-Hidebrand (Prausnitz, et al, 1999), sedangkan non-idealitas uap didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama and Hirata, 1970). Ingin dicari jumlah uap (V), jumlah cairan (L), dan komposisinya, serta jumlah panas yang harus diambil pada pendingin (Q).

Analisis:

Kasus ini mirip dengan partial condensation pada sub-sub bab 2.4.6 Cuma disini fasa uap mengandung *non-condesable* gas (H_2). *Non-condesable gas* adalah uap yang praktis tidak bisa mengembun. Ini berarti tekanan uapnya relatif sangat besar Jadi pendekatan sederhana yang bisa dilakukan adalah memberi nilai tekanan uap dengan angka yang relatif besar. Berdasarkan persamaan Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016), nilai tekanan uap dapat didekati dengan :

$$\log P_i^o = A_i - \frac{B_i}{T+C_i} \quad \text{.....} \quad (2.1.4)$$

Memberikan nilai P_i^o relatif besar bisa dijalankan dengan memberi nilai A_i sangat besar, dengan nilai B_i kecil dan C_i yang agak besar. Jadi untuk kasus ini, bisa dijalankan seperti pada sub-sub bab 2.4.6 dengan nilai A_i diset relatif besar (misalnya 10), B_i=0 dan C_i agak

besar (300). Persamaan matematis dan program komputer mirip dengan pada sub-sub bab 2.4.6.

Pada perhitungan ini, karena ada nilai *second virial coefficient* komponen-komponen murni yang berlainan tanda, maka perhitungan B_{ij} dengan persamaan (2.3.3) yang pada prinsipnya adalah rata-rata akar tidak bisa berjalan karena ada akar bilangan negatif. Untuk itu jika kasus tersebut terjadi, B_{ij} didekati dengan rata-rata jumlah, yaitu B_i dan B_j dijumlah lalu dibagi dua.

Hasil Hitungan dengan program *Real Systems*, *Sheet* 9, ditunjukkan pada Gambar 2.4.12.

Partial Condensation With Non-Condensable Gas: Non-Ideal Liquids and Non-Ideal Gases

Second Virial Coefficient and Scatchard-Hildebrand

F, mol/menit	200	log (Pi0, mmHg) = A - B / (T + C)	Trial:	L/F =	0.30764
TF, C =	70	Pi0, mmHg = 10 ^ (A - B / (T + C))		K1 =	3.18.E+07
P, atm =	3	Pi0, atm = Pi0, mmHg / 760		K2 =	4.41233
T, C =	40	Ki = GAMA i * Pi0 / P / PSI i		K3 =	1.19698
		yi = Ki * xi		K4 =	0.36199
		R, mL atm/mol/K = 82.057		K5=	0.11791

		Antoine:			Second Virial:			S-H parameters:		B,
Komp	zi	A	B	C	a	b	c	vi, cm3/mol	di, atm^0,5	cm3/mol
H2	0.3000	10.00000	0.00	300.00	315.0	289.7	9.47	40	10	16.41
C3H8	0.1000	6.80398	803.81	246.99	322.8	220.3	350.00	89.16	41.9	-350.82
C4H10	0.2000	6.80896	935.86	238.73	165.4	135.4	555.00	96.82	43.44	-631.35
C5H12	0.3000	6.87632	1075.78	233.205	377.9	237.6	560.00	115	44.98	-1042.75
C6H14	0.1000	6.87024	1168.72	224.21	839.6	404.1	572.60	131.5	46.52	-1675.78
Jumlah =	1.0000									

Pi0, mmHg	Pi0, atm	xi	yi	xi vi	xl vi di	dav	gama i	B1j	B2j	B3j
1.E+10	1.E+07	0.00000	0.43330	5.45E-07	5.4478E-06		6.83051	16.41	-167.21	-307.47
10072.81	13.254	0.02974	0.13122	2.6515	111.10		1.03693	-167.21	350.82	470.63
2827.31	3.720	0.17600	0.21067	17.0400	740.22		1.01086	-307.47	470.63	631.35
868.34	1.143	0.53738	0.19453	61.7982	2779.68		1.00010	-513.17	604.83	811.38
279.76	0.368	0.25689	0.03029	33.7808	1571.48		1.00990	-829.69	766.74	1028.60
				115.2706	5202.48	45.133				

B4j	B5j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yjB5j	yi Sum yjBij		Ki	del Ki
-513.17	-829.69	7.108	-72.451	-133.228	-222.36	-359.50	-88.64	PSI i	3.18.E+07	0.00000
604.83	766.74	-21.941	46.034	61.755	79.36	100.61	28.03	0.94165	4.41233	0.00000
811.38	1028.60	-64.774	99.145	133.005	170.93	216.69	52.78	1.03824	1.19698	0.00000
1042.75	1321.90	-99.826	117.655	157.836	202.84	257.15	52.68	1.04723	0.36199	0.00000
1321.90	1675.78	-25.131	23.224	31.156	40.04	50.76	8.05	1.05220	0.11791	0.00000
		-204.563	213.609	250.524	270.82	265.70	52.90	1.05094		
							Sum Sum yiyjBij			

xi	yi	CpL, J/mol/C	CpV, J/mol/C	dHvap, J/mol	Tref, C	F * HF, J/menit	L * HL, J/menit	V * HV, J/menit	Q, J/menit
0.00000	0.43330	20.00	28.8	904	25	77868.0	0.0	80196.0	
0.02974	0.13122	98.36	73.6	24545	25	557140.0	2699.7	466048.1	
0.17600	0.21067	132.42	98.5	22440	25	1074882.0	21508.9	697701.4	
0.53738	0.19453	167.19	120.1	26200	25	1896189.0	82917.9	754254.8	
0.25689	0.03029	197.66	142.6	28850	25	705340.0	46862.3	129977.2	
1.00000	1.00000					4311419.0	153988.8	2128177.5	-2029252.7
Sum xi	Sum yi								

Gambar 2.4.12. Hasil perhitungan *Partial Condensation* dengan *Non-Condensable Gas*

Pada hasil hitungan nampak bahwa untuk komponen H_2 *(non-condensable gas)*, nilai P_i^o sangat besar, sedangkan nilai x_i sangat kecil (H_2 praktis tidak bisa mengembun). Komponen H_2 praktis tetap difasa uap sehingga nilai y_i untuk H_2 naik setelah pengembunan.

BAB 3

CONTOH APLIKASI KESETIMBANGAN KIMIA

Pada bab ini akan diberikan beberapa contoh yang berkaitan dengan topik kesetimbangan kimia yang berada pada fasa yang sama (homogen). Pembahasan pada bab ini meliputi:

3.1. Sintesis Amoniak dengan gas dianggap ideal
3.2. Sintesis Amoniak dengan gas dianggap non-ideal
3.3. *Primary Reformer*
3.4. *Secondary Reformer*
3.5. *Adiabatic Equilibrium Temperature*

3.1. Sintesis Amoniak dengan gas dianggap ideal

Campuran gas yang terdiri atas Argon (Ar), CH_4, N_2, H_2, NH_3 dengan fraksi mol y_{01}=0,01; y_{02}=0,05; y_{03}=0,23; y_{04}=0,69; y_{05}=0,02 diumpankan ke reaktor bersuhu T=500 ^oC, bertekanan P=250 atm (*International Process Plants*, 2016). Terjadi reaksi bolak-balik:

$$N_2 + 3H_2 \Leftrightarrow 2NH_3 \qquad \text{.....} \qquad (3.1.1)$$

Jika reaksi mencapai kesetimbangan, ingin dicari nilai konversi N_2. Gas dianggap ideal dan nilai tetapan kesetimbangan mengikuti persamaan (diolah dari: *Haber Process*, 2018):

$$K = exp\left(\frac{12623}{T} - 27{,}465\right) \qquad \text{.....} \qquad (3.1.2)$$

dengan K dalam atm^{-2} dan T dalam K.

Analisis:

Basis hitungan: 100 mol/s gas campuran

Jumlah mol mula-mula:

Ar : $F_{01} = F_0\ y_{01}$ ..... (3.1.3)

CH_4: $F_{02} = F_0\ y_{02}$ ..... (3.1.4)

N_2 : $F_{03} = F_0\ y_{03}$ ..... (3.1.5)

H_2 : $F_{04} = F_0\ y_{04}$ ..... (3.1.6)

NH_3 : $F_{05} = F_0\ y_{05}$ ..... (3.1.7)

Dimisalkan konversi N_2 = x (mol N_2 bereaksi/mol N_2 mula-mula)

Sesudah reaksi:

Ar : $F_1 = F_{01}$ ..... (3.1.8)

CH_4 : $F_2 = F_{02}$ ..... (3.1.9)

N_2 : $F_3 = F_{03} - x\ F_{03} = F_{03}\ (1\text{-}x)$ ..... (3.1.10)

H_2 : $F_4 = F_{04} - 3\ x\ F_{03}$ ..... (3.1.11)

NH_3 : $F_5 = F_{05} + 2\ x\ F_{03}$ ..... (3.1.12)

Total = $F_t = F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5$ ..... (3.1.13)

Untuk gas ideal berlaku hukum Dalton:

$P_{N2} = \frac{F_3}{F_t} P$ ..... (3.1.14)

$P_{H2} = \frac{F_4}{F_t} P$ ..... (3.1.15)

$P_{NH3} = \frac{F_5}{F_t} P$ ..... (3.1.16)

Pada keadaan setimbang untuk gas ideal berlaku:

$K_P = K = \frac{P_{NH3}^2}{P_{N2} P_{H2}^3}$ ..... (3.1.17)

Dengan *trial solution* bisa dicari nilai x.

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung K_P = K dengan persamaan (3.1.2)
2. Trial nilai x
3. Hitung F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_t dengan persamaan (3.1.8) sampai (3.1.13)
4. Hitung P_{N2}, P_{H2}, P_{NH3} dengan persamaan (3.1.14) sampai (3.1.16)
5. Hitung K_P dengan persamaan (3.1.17)

6. Cek apakah K_P dari langkah 5 sama dengan K_P dari langkah 1. Jika ya, selesai. Jika tidak, ke langkah 2

Hasil perhitungan dengan program *Chemical Equilibrium*, *Sheet* 1, ditunjukkan pada Gambar 3.1. Pengaruh tekanan, gas inert, dll bisa diobservasi dengan simulasi menggunakan program computer ini.

Ammonia Synthesis Equilibrium
Ideal Gasses

	P, atm =	250	Kp = PNH3^2/PN2/PH2^3
	T, C =	500	Kp = EXP(12632,6/(T+273,15)-27,4805)
	F0 , mol/s =	100	
	Kp value =	1.45E-05 atm-2	
Trial:	N2 Conv. =	0.288533	

Komp	y0	Fi, Umpan mol/s	Reaksi, mol/s	Produk, mol/s	yi	Pi, atm	Kp calc	del K
Argon	0.0100	1.0000	0.0000	1.0000	0.0115	2.8826		
CH4	0.0500	5.0000	0.0000	5.0000	0.0577	14.4130		
N2	0.2300	23.0000	6.6363	16.3637	0.1887	47.1700		
H2	0.6900	69.0000	19.9088	49.0912	0.5660	141.5100		
NH3	0.0200	2.0000	13.2725	15.2725	0.1761	44.0244		
	1.0000	100.0000		86.7275			1.45E-05	0.00%

Gambar 3.1. Hasil perhitungan Sintesis Amoniak dengan gas dianggap ideal

3.2. Sintesis Amoniak dengan Gas dianggap Non-Ideal

Dibahas kasus yang sama dengan sub-sub bab 3.2, namun disini gas tidak dianggap ideal. Non-idealitas gas didekati dengan model *second virial coefficient* sederhana (Nagahama dan Hirata, 1970):

$$\emptyset_i = exp\left[\frac{2P}{RT}\left(\sum_j y_j B_{ij} - B\right)\right] \quad \text{.....} \quad (2.3.1)$$

$$B = \sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij} \quad \text{.....} \quad (2.3.2)$$

$$B_{ij} = \sqrt{B_i B_j} \quad \text{.....} \quad (2.3.3)$$

$$B_i = a_i - b_i exp\left(\frac{c_i}{T}\right) \quad \text{.....} \quad (2.3.4)$$

Perlu diingat bahwa:

$$y_i = \frac{F_i}{F_t} \quad \text{.....} \quad (3.2.1)$$

Analisis:

Persamaan dasar yang dipakai seperti yang telah disebutkan pada bab 1:

$$K = K_\phi K_P \quad \text{.....} \quad (3.2.2)$$

$$K_P = \frac{P_{NH3}^2}{P_{N2} P_{H2}^3} \quad \text{.....} \quad (3.2.3)$$

$$K_\phi = \frac{\phi_{NH3}^2}{\phi_{N2} \phi_{H2}^3} \quad \text{.....} \quad (3.2.4)$$

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung K dengan persamaan (3.1.2)
2. Hitung B_1, B_2, B_3, B_4, B_5 (Ar, CH_4, N_2, H_2, NH_3) dengan persamaan (2.3.4)
3. Trial konversi N_2 (x)
4. Hitung F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_t dengan persamaan (3.1.8) sampai (3.1.13)
5. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4, y_5 dengan persamaan (3.2.1)
6. Hitung ϕ_3, ϕ_4, ϕ_5 dengan persamaan (2.3.1) sampai (2.3.3)
7. Hitung K_ϕ dengan persamaan (3.2.4)
8. Hitung P_{N2}, P_{H2}, dan P_{NH3} dengan persamaan (3.1.14) sampai (3.1.16)
9. Hitung K_P dengan persamaan (3.2.3)
10. Hitung K dengan persamaan (3.2.2)
11. Cek apakah K dari langkah 10 sama dengan K dari langkah 1. Jika ya, selesai. Jika tidak, ke langkah 3

Pada perhitungan ini, karena ada nilai *second virial coefficient* komponen-komponen murni yang berlainan tanda, maka perhitungan B_{ij} dengan persamaan (2.3.3) yang pada prinsipnya adalah rata-rata akar tidak bisa berjalan karena ada akar bilangan negatif. Untuk itu jika kasus tersebut terjadi, B_{ij} didekati dengan rata-rata jumlah, yaitu B_i dan B_j dijumlah lalu dibagi dua.

Hasil perhitungan dengan program *Chemical Equilibrium, Sheet* 2, ditunjukkan pada Gambar 3.2. Pengaruh non-idealitas dapat dilihat dengan membandingkan hasil pada hasil sub-sub bab 3.1 dan 3.2.

Ammonia Synthesis Equilibrium, Non-Ideal Gasses

N2 + 3 H2 ===== 2 NH3

P, atm =	250		Kp = PNH3^2/PN2/PH2^3	R, L atm / mol / K =	82.057
T, C =	500		Kpsi=psiNH3^2/psiN2/psiH2^3		
F0 , mol/s =	100		K=Kpsi*Kp		
K value =	1.4500E-05	atm-2	K = EXP(12632,6/(T+273,15)-27,4805)		
Trial: N2 Conv. =	0.327142139				

Komp	y0	Fi, Umpan mol/s	Reaksi, mol/s	Produk, mol/s	yi	a	b	c	B, cm3/mol
Argon	0.0100	1.00	0	1.0000	0.0118	154.2	119.3	105.10	17.529
CH4	0.0500	5.00	0	5.0000	0.0589	206.4	159.5	133.00	16.961
N2	0.2300	23.00	7.5243	15.4757	0.1822	185.4	141.8	88.70	26.362
H2	0.6900	69.00	22.5728	46.4272	0.5465	315.0	289.7	9.47	21.730
NH3	0.0200	2.00	15.0485	17.0485	0.2007	44.3	23.6	766.60	-19.310
	1.0000	100.00		84.9515					

Komp	B1j	B2j	B3j	B4j	B5j	yjB1j	yjB2j	yjB3j	yjB4j	yjB5j	yi Sum yjBij	PSI i
Argon	17.529	17.242	21.50	19.52	-0.89	0.2063	0.2030	0.2530	0.2297	-0.0105	0.18392	1.01320
CH4	17.242	16.961	21.15	19.20	-1.17	1.0148	0.9983	1.2446	1.1299	-0.0691	0.90107	1.01068
N2	21.496	21.145	26.36	23.93	3.53	3.9160	3.8521	4.8024	4.3601	0.6423	3.65944	1.04947
H2	19.517	19.198	23.93	21.73	1.21	10.6661	10.4919	13.0803	11.8756	0.6611	9.74882	1.03103
NH3	-0.891	-1.17	3.53	1.21	-19.31	-0.1788	-0.2357	0.7076	0.2428	-3.8753	-0.53211	0.87728
						15.6245	15.3095	20.0879	17.8382	-2.6515	13.96115	
											Sum yiyjBij	

Komp	Pi	Kp calc	K psi	K calc	del K
Argon	2.94				
CH4	14.71				
N2	45.54				
H2	136.63				
NH3	50.17				
		2.16704E-05	0.669110442	1.4500E-05	0.00%

Gambar 3.2. Hasil perhitungan Sintesis Amoniak dengan gas dianggap non-ideal

3.3. *Primary Reformer*

Gas berjumlah F_0 = 200 mol/s yang mengandung N_2, CH_4, H_2O dengan fraksi mol y_{0N2}=0,00029; y_{0CH4}=0,24978; y_{0H2O}=0,74933 diumpankan ke *primary reformer*. Tekanan gas keluar *reformer* P=35 atm dan suhunya T = 800 ^oC = 1073,15 K (Keith, 2016, Strait, et al, 2016). Terjadi reaksi bolak-balik:

$$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow CO + 3H_2 \qquad \text{.....} \qquad (3.3.1)$$

$CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$ ..... (3.3.2)

Jika gas keluar dianggap dalam keadaan kesetimbangan kimia, ingin dicari komposisi gas keluar *reformer*. Nilai tetapan kesetimbangan reaksi (3.3.1) dan (3.3.2) mengikuti persamaan (Keith, 2016, Strait, et al, 2016):

$K_{P1} = exp\left(30{,}42 - \frac{27106}{T}\right)$ ..... (3.3.3)

$K_{P2} = exp\left(-3{,}798 + \frac{4160}{T}\right)$ ..... (3.3.4)

dengan T dalam K dan K_P dalam atm^{-2} . Gas dianggap ideal.

Analisis:

Jumlah gas masuk *reformer* (mol/s) :

$N_2 \rightarrow F_{01} = F_0\, y_{0N2}$ ..... (3.3.5)

$CH_4 \rightarrow F_{02} = F_0\, y_{0CH4}$ ..... (3.3.6)

$H_2O \rightarrow F_{03} = F_0\, y_{0H2O}$ ..... (3.3.7)

$CO \rightarrow F_{04} = 0$ ..... (3.3.8)

$CO_2 \rightarrow F_{05} = F_0\, y_{0CO2}$ ..... (3.3.9)

$H_2 \rightarrow F_{06} = 0$ ..... (3.3.10)

Total:

$F_{to} = F_{01} + F_{02} + F_{03} + F_{04} + F_{05} + F_{06} = F_o$ ..... (3.3.11)

Cara yang relatif mudah untuk analisis kasus ini adalah dengan basis atom tiap komponen (mol atom/s)

Atom C: $n_C = F_{02} + F_{05}$ ..... (3.3.12)

Atom H: $n_H = 4F_{02} + 2F_{03} + 2F_{06}$ ..... (3.3.13)

Atom O: $n_O = F_{03} + 2F_{05} + 2F_{06}$ ..... (3.3.14)

Atom N: $n_N = 2F_{01}$ ..... (3.3.15)

Jumlah atom tiap komponen pada produk dan umpan *primary reformer* sama (neraca massa atom).

Berdasarkan reaksi (3.3.1) dan (3.3.2) serta komposisi umpan, terlihat bahwa pada kondisi kesetimbangan kimia, produk *reformer* mengandung N_2, CH_4, H_2O, CO, CO_2, H_2. Dimisalkan:

Mol C yang berbentuk CO adalah α $\frac{mol\ C\ di\ CO}{mol\ C\ total}$

Mol C yang berbentuk CO_2 adalah β $\frac{mol\ C\ di\ CO2}{mol\ C\ total}$

Gas keluar *reformer*:

N_2 → $F_1 = F_{01}$ (tetap) ..... (3.3.16)

CH_4 → $F_2 = n_C - n_C\,\alpha - n_C\,\beta = n_C\,(1 - \alpha - \beta)$ ..... (3.3.17)

CO → $F_4 = n_C\,\alpha$ ..... (3.3.18)

CO_2 → $F_5 = n_C\,\beta$ ..... (3.3.18)

H_2O → $F_3 = n_0 - F_4 - 2F_5$ ..... (3.3.20)

H_2 → $F_6 = ½(n_H - 4F_2 - 2F_3)$ ..... (3.3.21)

Total: $F_t = F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6$ ..... (3.3.22)

Selanjutnya fraksi mol komponen y_i dan tekanan parsial komponen dengan mudah bisa dihitung:

$P_1 = \frac{F_1}{F_t} P$ ..... (3.3.23)

$P_2 = \frac{F_2}{F_t} P$ ..... (3.3.24)

$P_3 = \frac{F_3}{F_t} P$ ..... (3.3.25)

$P_4 = \frac{F_4}{F_t} P$ ..... (3.3.26)

$P_5 = \frac{F_5}{F_t} P$ ..... (3.3.27)

$P_6 = \frac{F_6}{F_t} P$ ..... (3.3.28)

Konsep kesetimbangan:

$K_{P1} = \frac{P_4\ P_6^3}{P_2 P_3}$ ..... (3.3.29)

$K_{P2} = \frac{P_5\ P_6}{P_3\ P_4}$ ..... (3.3.30)

Algoritma Perhitungan:

1. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (3.3.3) dan (3.3.4)
2. Hitung F_{01}, F_{02}, F_{03}, F_{04}, F_{05}, F_{06} dengan persamaan (3.3.5) sampai (3.3.11)
3. Hitung n_C, n_H, n_O, n_N dengan persamaan (3.3.12) sampai (3.3.15)
4. Trial nilai α dan β

5. Hitung F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6 dengan persamaan (3.3.16) sampai (3.3.22)
6. Hitung P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6 dengan persamaan (3.3.23) sampai (3.3.28)
7. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (2.2.29) dan (2.3.30)
8. Cek apakah K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 7 sama dengan K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 1. Jika ya, selesai. Jika tidak, ke langkah 4

Hasil perhitungan dengan program *Chemical Equilibrium*, *Sheet* 3 ditunjukkan pada Gambar 3.3.

Primary Reformer
Ideal Gases

CH4 + H2O ===== CO + 3 H2
CO + H2O ====== CO2 + H2

Kp1 = PCO * PH2^3 / PCH4 / PH2O
Kp2 = PCO2 * PH2 / PCO / PH2
Kp1 = EXP(30,42-27106 / T)
Kp2 = EXP(-3,798+4160 / T)

F0, mol/s =	200			Kp1 =	174.4518 atm2 (dari suhu T)
P, atm =	35			Kp2 =	1.0816 (dari suhu T)
T, C =	800	=====	1073.15 K		

Trial:	CO, mol C/mol C =	0.30388	(alpha)
	CO2, mol C /mol C =	0.31378	(beta)

Komp	yF	Fi, Umpan mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm	Kp1 Kp2	del Kp1 del Kp2
N2	0.00089	0.18	0.00	0.00	0.00	0.36	0.18	0.00068	0.02380		
CH4	0.24978	49.96	49.96	199.82	0.00	0.00	19.10	0.07298	2.55437		
H2O	0.74933	149.87	0.00	299.73	149.87	0.00	103.34	0.39485	13.81961		
CO	0.00000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	15.18	0.05800	2.03017		
CO2	0.00000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	15.68	0.05989	2.09630		
H2	0.00000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	108.24	0.41359	14.47574		
Jumlah =	1.00000	200.00	49.96	499.56	149.87	0.36	261.71	1.00000	35.00000	1.745.E+02	0.000%
										1.082.E+00	0.000%

Gambar 3.3. Hasil perhitungan *Primary Reformer*

3.4. *Secondary Reformer*

Pada *secondary reformer* (Keith, 2016, Strait, et al, 2016), kesetimbangan reaksi yang terjadi mirip dengan *primary reformer* (sub-sub bab 3.3) namun disini ada tambahan reaksi pembakaran CH_4 akibat adanya penambahan O_2 (dari udara). Reaksi pembakaran CH_4 dengan O_2 berlangsung relatif cepat dan tidak bolak-balik. Dalam hal ini O_2 yang ditambahkan jumlahnya relatif terbatas sehingga praktis habis bereaksi. Oleh karena itu secara keseluruhan, reaksi di *secondary reformer* adalah:

$$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow CO + 3H_2 \qquad \text{.....} \qquad (3.4.1)$$

$CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$ ..... (3.4.2)

$CH4 + O_2 \rightarrow \ CO + H2O$ ..... (3.4.3)

Reaksi (3.4.3) dianggap searah dan sempurna. Reaksi (3.4.2) dan (3.4.1) dianggap setimbang.

Gas berjumlah F_0 = 200 mol/s yang mengandung Argon, O_2, N_2, CH_4, H_2O, CO, CO_2, H_2 dengan fraksi mol y_{01} = 0,01973; y_{02} = 0,03157; y_{03} = 0,12051; y_{04} = 0,06207; y_{05} = 0,33013; y_{06} = 0,04732; y_{07} = 0,04965; y_{08} = 0,33903 diumpankan ke *secondary reformer*. Terjadi reaksi menurut persamaan (3.4.1), (3.4.2), (3.4.3). Nilai tetapan kesetimbangan mengikuti persamaan (3.3.3) dan (3.3.4). Tekanan dan suhu keluar *reformer* adalah P = 35 atm dan T = 996 ^oC = 1269,15 K. Jika gas keluar dianggap dalam keadaan kesetimbangan kimia, ingin dicari komposisi gas keluar reformer. Gas dianggap ideal.

Analisis:

Jumlah gas umpan (mol/s):

Ar = $F_0\ y_{01}$ ..... (3.4.4)

O2 = $F_0\ y_{02}$ ..... (3.4.5)

N_2 = $F_0\ y_{03}$ ..... (3.4.6)

CH_4 = $F_0\ y_{04}$ ..... (3.4.7)

H_2O = $F_0\ y_{05}$ ..... (3.4.8)

CO = $F_0\ y_{06}$ ..... (3.4.9)

CO2 = $F_0\ y_{07}$ ..... (3.4.10)

H_2 = $F_0\ y_{08}$ ..... (3.4.11)

Jumlah mol atom pada umpan dan hasil reaktor jika dinyatakan dalam mol atom/s sama.

Gas umpan *reformer* dalam mol atom/s:

Ar: $n_{Ar} = F_0\ y_{01}$ ..... (3.4.12)

C: $n_C = F_0\ y_{04} + F_0\ y_{06} + 2F_0\ y_{07}$ ..... (3.4.13)

H: $n_H = 4F_0\ y_{04} + 2F_0\ y_{05} + 2F_0\ y_{08}$ ..... (3.4.14)

O: $n_O = 2F_0\ y_{02} + F_0\ y_{05} + F_0\ y_{06} + 2F_0\ y_{07}$ ..... (3.4.15)

N: $n_n = 2\ F_0\ y_{03}$ ..... (3.4.16)

Dimisalkan pada gas keluar reaktor:

Mol C yang berbentuk CO adalah $\alpha \frac{mol\ C\ di\ CO}{mol\ C\ total}$

Mol C yang berbentuk CO_2 adalah $\beta \frac{mol\ C\ di\ CO2}{mol\ C\ total}$

Jumlah gas keluar *reformer* (mol/s):

Ar → $F_1 = F_{01}\ y_{01}$ (tetap) ..... (3.4.17)

O_2 → $F_2 =$ habis ..... (3.4.18)

N_2 → $F_3 = F_{03}\ y_{03}$ (tetap) ..... (3.4.19)

CH_4 → $F_4 = n_C - n_C\ \alpha - n_C\ \beta = n_C\ (1 - \alpha - \beta)$ ..... (3.4.20)

CO → $F_6 = n_C\ \alpha$ ..... (3.4.21)

CO_2 → $F_7 = n_C\ \beta$ ..... (3.4.22)

H_2O → $F_5 = n_0 - F_6 - 2F_7$ ..... (3.4.23)

H_2 → $F_8 = ½(n_H - 4F_4 - 2F_5)$ ..... (3.4.24)

Total: $F_t = F_1 + F_2 + F_3 + F_4 + F_5 + F_6 + F_7 + F_8$ ..... (3.4.25)

Fraksi mol tiap komponen (y_i) dan tekanan parsial tiap komponen (P_i) pada gas keluar *reformer* bisa dicari dengan persamaan:

$$y_i = \frac{F_i}{F_t} \quad \text{.....} \quad (3.4.26)$$

$$P_i = \frac{F_i}{F_t} P \quad \text{.....} \quad (3.4.27)$$

Konsep kesetimbangan:

$$K_{P1} = \frac{P_6\ P_8^3}{P_4\ P_5} \quad \text{.....} \quad (3.4.28)$$

$$K_{P2} = \frac{P_7\ P_8}{P_5\ P_6} \quad \text{.....} \quad (3.4.29)$$

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (3.3.3) dan (3.3.4)
2. Hitung n_{Ar}, n_C, n_H, n_O, n_N dengan persamaan (3.4.12) sampai (3.4.16)
3. Trial nilai α dan β
4. Hitung F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6 , F_7, F_8, F_t dengan persamaan (3.4.17) sampai (3.4.25)
5. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 , y_7, y_8 dengan persamaan (3.4.26)
6. Hitung P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6 , P_7, P_8 dengan persamaan (3.4.27)

7. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (3.4.28) dan (3.4.29)
8. Cek apakah K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 7 sama dengan K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 1. Jika ya, selesai. Jika tidak, ke langkah 3

Hasil perhitungan dengan program *Chemical Equilibrium*, *Sheet* 4, ditunjukkan pada Gambar 3.4.

Secondary Reformer, Ideal Gases

CH4 + H2O ===== CO + 3 H2	EQUILIBRIUM		Kp1 = PCO * PH2^3 / PCH4 / PH2O
CO + H2O ====== CO2 + H2	EQUILIBRIUM		Kp2 = PCO2 * PH2 / PCO / PH2
CH4 + 3/2 O2 --------- CO + 2 H2C	COMPLETE		Kp1 = EXP(30,42-27106 / T)
			Kp2 = EXP(-3,798+4160 / T)

F0, mol/s	200	Kp1 =	8624.812	atm2 (terhitung dari suhu T)
P, atm =	35	Kp2 =	0.594392	(terhitung dari suhu T)
T, C =	996 ========= 1269.15 K			

Secondary Reformer		Kp1 = PCO * PH2^3 / PCH4 / PH2O
Ideal Gases		Kp2 = PCO2 * PH2 / PCO / PH3
		Kp1 = EXP(30,42-27106 / T)
CH4 + H2O ===== CO + 3 H3	EQUILIBRIUM	Kp2 = EXP(-3,798+4160 / T)
CO + H2O ====== CO2 + H3	EQUILIBRIUM	
CH4 + 3/2 O2 --------- CO + 2 H2C	COMPLETE	

Trial:	CO, mol C/mol C =	0.6769312	(alpha)
	CO2, mol C /mol C =	0.3010043	(beta)

Komp	yF	Fin	Atom C	Atom H	Atom O	Atom N	Atom Ar	Fout	yi	Pi	Kp1 Kp2	del Kp1 del Kp2
Argon	0.01973	3.95	0.0000	0	0.0000	0	3.9460	3.9460	0.01818	0.6361		
O2	0.03157	6.31	0.0000	0	12.6280	0	0.0000	0.0000	0.00000	0.0000		
N2	0.12051	24.10	0.0000	0	0.0000	48.204	0.0000	24.1020	0.11101	3.8854		
CH4	0.06207	12.41	12.4140	49.656	0.0000	0	0.0000	0.7018	0.00323	0.1131		
H2O	0.33013	66.03	0.0000	132.052	66.0260	0	0.0000	67.2975	0.30997	10.8489		
CO	0.04732	9.46	9.4640	0	9.4640	0	0.0000	21.5318	0.09917	3.4711		
CO2	0.04965	9.93	9.9300	0	19.8600	0	0.0000	9.5743	0.04410	1.5435		
H2	0.33902	67.80	0.0000	135.608	0.0000	0	0.0000	89.9569	0.41434	14.5018		
Jumlah =	1.00000	200.00	31.8080	317.316	107.9780	48.204	3.9460	217.1103	1.00000	35.0000		
											8624.393	-0.005%
											0.594379	-0.002%

Gambar 3.4. Hasil perhitungan *Secondary Reformer*

3.5. *Adiabatic Equilibrium Temperature*

Dibahas kasus yang mirip dengan pada sub-sub bab 3.4, namun disini suhu keluar *reformer* tidak diketahui. Yang diketahui adalah suhu umpan reaktor dan reaktor dianggap bekerja adiabatis.

Gas berjumlah F_0 = 200 mol/s, bersuhu T_F=764,3°C, yang mengandung Argon, O_2, N_2, CH_4, H_2O, CO, CO_2, H_2 dengan fraksi mol y_{01} = 0,01973; y_{02} = 0,03157; y_{03} = 0,12051; y_{04} = 0,06207; y_{05} = 0,33013; y_{06} = 0,04732; y_{07} = 0,04965; y_{08} = 0,33903 diumpankan ke *secondary reformer* yang bekerja secara adiabatis pada tekanan P = 35

atm (Keith, 2016, Strait, et al, 2016). Jika gas keluar dianggap dalam keadaan kesetimbangan kimia, ingin dicari suhu gas keluar dan komposisinya. Gas dianggap ideal dan nilai ΔH_f pada suhu standar tersedia.

Analisis:

Reaksi yang terjadi sama dengan pada sub-sub bab 3.4.

$CH_4 + H_2O \Leftrightarrow CO + 3H_2$ ..... (3.4.1)

$CO + H_2O \Leftrightarrow CO_2 + H_2$ ..... (3.4.2)

$CH4 + O_2 \rightarrow CO + H2O$ ..... (3.4.3)

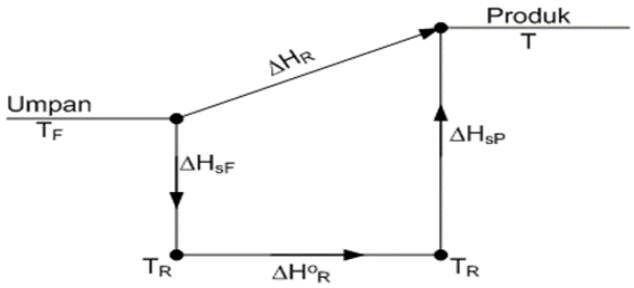
Reaksi (3.4.3) dianggap searah dan sempurna dan O_2 habis. Jumlah tiap komponen pada gas umpan dapat dihitung dengan persamaan (3.4.4) sampai (3.4.11). Selanjutnya jumlah mol atom pada reaktor (mol/s) dapat dihitung dengan persamaan (3.4.12) sampai (3.4.16). Dimisalkan:

Suhu gas keluar = T ^oC

Mol C yang berbentuk CO adalah $\alpha \frac{mol\ C\ di\ CO}{mol\ C\ total}$

Mol C yang berbentuk CO_2 adalah $\beta \frac{mol\ C\ di\ CO2}{mol\ C\ total}$

Jumlah tiap komponen gas pada produk *reformer* dapat dihitung dengan persamaan (3.4.17) sampai (3.4.24), sedangkan jumlah gas total dapat dihitung dengan persamaan (3.4.25). Fraksi mol tiap komponen (y_i) dan tekanan parsial (P_i) pada gas keluar *reformer* bisa dicari dengan persamaan (3.4.26) dan (3.4.27). Konsep kesetimbangan juga menghasilkan persamaan (3.4.28) dan (3.4.29). Korelasi K_{P1} dan K_{P2} dengan suhu (T) mengikuti persamaan (3.3.3) dan (3.3.4). Suhu keluar bisa dicari berdasarkan konsep neraca panas seperti pada Gambar 3.5.



Gambar 3.5. Diagram Neraca Panas

Pada proses adiabatis, nilai $\Delta H_R = 0$.

$\Delta H_R = \Delta H_{SF} + \Delta Ho_R + \Delta H_{SP} = 0$ ..... (3.5.1)

$\Delta H_{SF} = (\sum(Fi\ Cpi)umpan)(T_R - T_F)$ ..... (3.5.2)

$\Delta Ho_R = \sum(Fi\ (\Delta Hf)i)produk - \sum(Fi\ (\Delta Hf)i)umpan$..... (3.5.3)

$\Delta H_{SP} = (\sum(Fi\ Cpi)produk)(T - T_R)$ ..... (3.5.4)

Algoritma Perhitungan :

1. Hitung jumlah mol tiap komponen gas pada umpan dengan persamaan (3.4.4) sampai (3.4.11).
2. Hitung jumlah mol atom pada reaktor dengan persamaan (3.4.12) sampai (3.4.16)
3. Trial T
4. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (3.3.3) dan (3.3.4).
5. Trial α dan β
6. Hitung jumlah mol tiap komponen gas pada produk dengan persamaan (3.4.17) sampai (3.4.24)
7. Hitung F_1, F_2, F_3, F_4, F_5, F_6 , F_7, F_8, F_t dengan persamaan (3.4.17) sampai (3.4.25)
8. Hitung y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 , y_7, y_8 dengan persamaan (3.4.26)
9. Hitung P_1, P_2, P_3, P_4, P_5, P_6 , P_7, P_8 dengan persamaan (3.4.27)
10. Hitung K_{P1} dan K_{P2} dengan persamaan (3.4.28) dan (3.4.29)
11. Cek apakah K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 10 sama dengan K_{P1} dan K_{P2} dari langkah 4
    Jika ya, lanjut ke langkah 12. Jika tidak, ke langkah 5

12. Hitung ΔH_R dengan persamaan (3.5.1) sampai (3.5.4)
13. Cek apakah ΔH_R bernilai nol. Jika ya, selesai. Jika tidak, kembali ke langkah 3

Hasil perhitungan dengan program *Chemical Equilibrium*, *Sheet* 5, ditunjukkan pada Gambar 3.6.

Secondary Reformer, Ideal Gases, Adiabatic Equilibrium Temperature

F0, mol/s	200	Kp1 =	3445.230 atm2	CH4 + H2O ===== CO + 3 H2	EQUILIBRIUM	Kp1 = PCO * PH2^3 / PCH4 / PH2O
P, atm =	35.00	Kp2 =	0.684	CO + H2O ====== CO2 + H2	EQUILIBRIUM	Kp2 = PCO2 * PH2 / PCO / PH2
TF, C =	764.30			CH4 + 3/2 O2 --------- CO + 2 H2O	COMPLETE	Kp1 = EXP(30,42-27106 / T)
Trial: T, C =	943.716	======	1216.87 K			Kp2 = EXP(-3,798+4160 / T)
CO, mol C/mol total C =	0.60898					
CO2, mol C /mol total C =	0.35444					

Komp	dHf 25 C, gas J/mol	Cp, gas J/mol/C	Tref, C	yF	F in, mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom A mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm
Argon	0	30.7	25	0.00209	0.419	0.000	0.000	0.000	0.419	0.000	0.419	0.00197	0.06889
O2	0	43.4	25	0.04396	8.792	0.000	0.000	17.583	0.000	0.000	0.000	0.00000	0.00000
N2	0	43.0	25	0.16360	32.719	0.000	0.000	0.000	0.000	65.438	32.719	0.15384	5.38440
CH4	-74600	52.7	25	0.05924	11.847	11.847	47.390	0.000	0.000	0.000	1.110	0.00522	0.18272
H2O	-241800	49.6	25	0.31504	63.009	0.000	126.017	63.009	0.000	0.000	68.571	0.32241	11.28440
CO	-110500	43.0	25	0.04516	9.032	9.032	0.000	9.032	0.000	0.000	18.485	0.08692	3.04205
CO2	-395300	54.8	25	0.04738	9.476	9.476	0.000	18.952	0.000	0.000	10.759	0.05059	1.77055
H2	0	42.6	25	0.32354	64.707	0.000	129.415	0.000	0.000	0.000	80.619	0.37906	13.26699
Jumlah =				1.00000	200.000	30.355	302.822	108.575	0.419	65.438	212.683	1.00000	35.00000

Komp	Kp1 / Kp2	del Kp1 / del Kp2	dHsF	HF, 25 C	HP, 25 C	dHsP	dH
Argon			-9510.84	0.00	0.00	11818.97	
O2			-282322.91	0.00	0.00	0.00	
N2			-1039990.34	0.00	0.00	1292379.02	
CH4			-461983.22	-883815.70	-82830.30	53803.97	
H2O			-2312460.13	-15235481.15	-16580543.70	3127356.84	
CO			-287074.55	-997996.19	-2042643.01	730161.41	
CO2			-383993.18	-3745771.85	-4253041.46	541804.24	
H2			-2035547.72	0.00	0.00	3151552.03	
Jumlah =	3445.23	4.285E-10	-6812882.89	-20863064.89	-22959058.47	8908876.48	0.00
	0.684	-7.235E-13					

Gambar 3.6. Hasil perhitungan *Adiabatic Equilibrium Temperature*

BAB IV
EVALUASI TETAPAN TERMODINAMIKA BERBASIS DATA PERCOBAAN

Pada komputasi termodinamika diperlukan persamaan-persamaan termodinamika yang mengandung parameter-parameter. Misalnya pada model non-idealitas *two-suffix Margules* (Prausnitz, et al, 1999), untuk sistem biner 1,2 berbetuk:

$$g^E = \beta x_1 x_2 \qquad \text{.....} \qquad (4.1)$$

terdapat parameter β yang nilainya tidak diketahui. Untuk dapat mengaplikasikan persamaan tersebut, diperlukan nilai parameter β. Nilai parameter-parameter umumnya diperoleh dari data percobaan. Bab ini membahas contoh-contoh evaluasi nilai parameter berbasis data percobaan. Meskipun hanya disajikan 3 kasus sederhana, namun pembaca diharapkan dapat mengekstrak esensi prosesnya dan bisa mengaplikasikan untuk kasus-kasus lain yang lebih kompleks.

4.1 Evaluasi Parameter Model *Two-Suffix Margules* Berbasis Data Percobaan dengan Metode Barker Untuk Sistem Biner

Pada kesetimbangan uap-cair campuran biner A dan B, fasa uap dapat dianggap ideal pada tekanan rendah dan fasa cairnya

mengikuti model *two-suffix Margules* sebagai berikut (Prausnitz, et al, 1999):

$$g^E = \beta x_1 x_2 \quad \text{.....} \quad (4.1.1)$$

dengan nilai parameter β yang relatif tetap. Berdasarkan konsep dasar termodinamika dapat dijabarkan secara analitis bahwa:

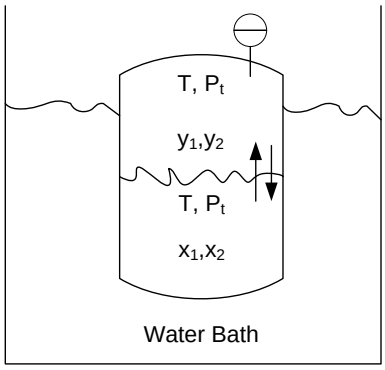
$$\gamma_A = exp\left(\frac{\beta}{RT}(1 - x_A)^2\right) \quad \text{.....} \quad (4.1.2)$$

$$\gamma_B = exp\left(\frac{\beta}{RT}{x_A}^2\right) \quad \text{.....} \quad (4.1.3)$$

dengan T adalah suhu mutlak serta x_A dan x_B adalah fraksi mol A dan B. Tersedia data percobaan metode Barker yaitu hubungan tekanan total sistem (Pt, mmHg) pada berbagai komposisi cairan (x_A) dan suhu (T, ^oC). Ingin dicari nilai β berdasarkan data percobaan tersebut (Tabel 4.1). Sistem percobaan yang dipakai seperti pada Gambar 4.1.

Tabel 4.1. Kesetimbangan uap-cair Metode Barker Sistem Biner A dan B

x_A	T, ^oC	Pt, mmHg
0,1	66	853
0,2	63	912
0,3	60	943
0.4	65	1221
0,5	65	1332
0,6	60	1249
0,7	55	1152
0,8	55	1235
0,9	50	1129



Gambar. 4.1. Alat Percobaan

Analisis:

Kesetimbangan uap-cair:

$f_i^L = f_i^V$ ..... (4.1.4)

$\gamma_i x_i P_i^\circ = \emptyset_i y_i P_t$ ..... (4.1.5)

Karena uap dianggap ideal (tekanan sistem rendah), maka nilai $\emptyset_i \approx 1$, sehingga diperoleh:

$\gamma_i x_i P_i^\circ = y_i P_t$ ..... (4.1.6)

Untuk tiap komponen diperoleh:

$\gamma_A x_A P_A^\circ = y_A P_t$ ..... (4.1.7)

$\gamma_B x_B P_B^\circ = y_B P_t$ ..... (4.1.8)

Hasil perjumlahan persamaan (4.1.7) dan (4.1.8) adalah

$\gamma_A x_A P_A^\circ + \gamma_B x_B P_B^\circ = (y_A + y_B) P_t$ ..... (4.1.9)

Karena sistem biner, maka $y_A + y_B = 1$ sehingga diperoleh:

$P_t = \gamma_A x_A P_A^\circ + \gamma_B x_B P_B^\circ$ ..... (4.1.10)

Tekanan uap jenuh masing-masing komponen pada persamaan (4.1.10) didekati dengan persamaan Antoine (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$log(P_A^\circ) = A_1 - \frac{B_1}{T+C_1}$ ..... (4.1.11)

$log(P_B^\circ) = A_2 - \frac{B_2}{T+C_2}$ ..... (4.1.12)

dengan T dalam ^oC, P_A dan P_B dalam mmHg.

Jadi, ringkasan persamaan yang akan dipakai adalah (4.1.2), (4.1.3), (4.1.10), (4.1.11), dan (4.1.12). Selanjutnya, stategi evaluasi nilai β adalah dengan mencoba berbagai nilai β agar penyimpangan antara hasil perhitungan dan data percobaan minimum. Penyimpangan

(deviasi) hasil perhitungan dan data percobaan direfleksikan dengan *Sum of Squares of Errors* (SSE) sebagai berikut:

$$SSE = \sum\left(P_{t,hitung} - P_{t,data}\right)^2 \quad \text{..... (4.1.13)}$$

Jadi, strategi praktis untuk mengevaluasi nilai β adalah mencoba berbagai nilai β agar diperoleh nilai SSE minimum. Secara matematis, proses ini adalah minimasi SSE dengan variabel β.

Algoritma:

Algoritma evaluasi β adalah sebagai berikut:

1. Menghitung nilai P_A^0 dan P_B^0 dengan menggunakan persamaan (4.1.11) dan (4.1.12) serta T dari data percobaan.
2. Trial nilai β.
3. Menghitung nilai γ_A dan γ_B dengan menggunakan persamaan (4.1.2) dan (4.1.3) serta x_A dan T dari data percobaan.
4. Menghitung nilai P_t dengan menggunakan persamaan (4.1.10).
5. Menghitung SSE dengan menggunakan persamaan (4.1.13).
6. Dicek nilai SSE, apakah sudah minimum?

   Jika ya berarti selesai

   Jika tidak berarti kembali ke langkah 2

Hasil hitungan dengan Microsoft Excel, program Evaluasi Tetapan, *Sheet* 1 ditunjukkan pada Gambar 4.1.

Parameter Evaluation Vapor-Liquid Equilibrium Ideal Gas and Non-Ideal Liquid
Two Suffix Margules Binary Mixture
Data:

Trial:	beta =	139.3075 cal/mol	Antoine:	A1 =	6.87632	R, cal/mol/K =	1.987
				B1 =	1075.78		
				C1 =	233.205		
				A2 =	6.87024		
				B2 =	1168.72		
				C2 =	224.21		

x1	T, C	Pt, mmHg	P10, mmHg	P20, mmHg	gama1	gama2	Pt calc	(del Pt)^2
0.1	66	853	1909.23195	696.766478	1.18228	1.00207	854.11	1.24
0.2	63	912	1755.67218	632.444404	1.14280	1.00838	911.47	0.28
0.3	60	943	1611.69544	572.8876	1.10862	1.01912	944.72	2.95
0.4	65	1221	1856.95629	674.780591	1.07750	1.03373	1218.87	4.54
0.5	65	1332	1856.95629	674.780591	1.05320	1.05320	1333.21	1.47
0.6	60	1249	1611.69544	572.8876	1.03424	1.07870	1247.32	2.81
0.7	55	1152	1391.96953	483.537361	1.01941	1.11037	1154.37	5.60
0.8	55	1235	1391.96953	483.537361	1.00858	1.14653	1234.01	0.98
0.9	50	1129	1195.99365	405.606718	1.00217	1.19212	1127.09	3.67
						SSE =		**23.54**

Gambar 4.1. Hasil perhitungan Evaluasi Parameter Model Two-Suffix Margules Metode Barker Untuk Sistem Biner

4.2 Evaluasi Parameter Model *Two-Suffix Margules* Berbasis Data Percobaan dengan Metode Barker Untuk Sistem Terner

Kasus ini mirip dengan kasus pada sub-bab 4.1 hanya sistem yang dibahas berbeda yaitu sistem dengan 3 komponen (terner) dalam hal ini komponen A, B, dan C. Tekanan sistem juga relatif rendah sehingga uap dapat dianggap ideal.

Fasa cair mengikuti model *two-suffix Margules* untuk terner, berbentuk (Prausnitz, et al, 1999):

$$g^E = A_{12}x_Ax_B + A_{13}x_Ax_C + A_{23}x_Bx_C \quad \text{.....} \quad (4.2.1)$$

Berdasarkan konsep termodinamika, dapat dijabarkan bahwa:

$$RT\ ln(\gamma_A) = A_{12}x_B^2 + A_{13}x_C^2 + (A_{12} + A_{13} - A_{23})x_Bx_C \quad \text{.....} \quad (4.2.2)$$

$$RT\ ln(\gamma_B) = A_{12}x_A^2 + A_{23}x_C^2 + (A_{12} + A_{23} - A_{13})x_A x_C \quad \text{.....} \quad (4.2.3)$$

$$RT\ ln(\gamma_C) = A_{13}x_A^2 + A_{23}x_B^2 + (A_{13} + A_{23} - A_{12})x_A x_B \quad \text{.....} \quad (4.2.4)$$

Tekanan uap murni cairan A, B, dan C dapat didekati dengan persamaan Antoine berbentuk (*Antoine Coefficient Table*, 2016):

$$log(P_A^\circ) = A_1 - \frac{B_1}{T+C_1} \quad \text{.....} \quad (4.2.5)$$

$$log(P_B^\circ) = A_2 - \frac{B_2}{T+C_2} \quad \text{.....} \quad (4.2.6)$$

$$log(P_C^\circ) = A_3 - \frac{B_3}{T+C_3} \quad \text{.....} \quad (4.2.7)$$

dengan T dalam ^oC dan P_A°, P_B°, P_C° dalam mmHg. Nilai A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3, C_1, C_2, C_3 dapat dilihat pada *Antoine Coefficient Table*, 2016.

Tersedia data percobaan kesetimbangan uap-cair dalam bentuk tekanan total (P_t, mmHg) pada berbagai suhu (T, ^oC) dan komposisi cairan (x_A, x_B) seperti pada Tabel 4.2.

Tabel 4.1. Kesetimbangan fasa uap-cair sistem terner A, B, C dengan Metode Barker

x_A	x_B	T, ^oC	Pt, mmHg
0.1	0.1	66	862
0.2	0.1	63	775
0.3	0.2	60	834
0.4	0.3	65	1119
0.5	0.2	65	956
0.6	0.3	65	1097
0.6	0.2	60	814
0.7	0.2	60	811
0.7	0.1	70	797

Ingin dievaluasi nilai parameter A_{12}, A_{13}, dan A_{23} berdasarkan data percobaan tersebut.

Analisis:

Kesetimbangan uap-cair:

$$f_i^L = f_i^V \quad \text{.....} \quad (4.2.8)$$

$$\gamma_i x_i P_i^\circ = \emptyset_i y_i P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.9)$$

Karena tekanan sistem relatif rendah, maka nilai $\emptyset_i \approx 1$, sehingga diperoleh:

$$\gamma_i x_i P_i^\circ = y_i P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.10)$$

Persamaan (4.2.10) berlaku untuk A, B, dan C sehingga diperoleh:

$$\gamma_A x_A P_A^\circ = y_A P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.11)$$

$$\gamma_B x_B P_B^\circ = y_B P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.12)$$

$$\gamma_C x_C P_C^\circ = y_C P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.13)$$

Jumlahan persamaan (4.2.11) – (4.2.13) menghasilkan:

$$\gamma_A x_A P_A^\circ + \gamma_B x_B P_B^\circ + \gamma_C x_C P_C^\circ = (y_A + y_B + y_C) P_t \quad \text{.....} \quad (4.2.14)$$

Karena sistem terner, maka $y_A + y_B + y_C = 1$ sehingga diperoleh:

$$P_t = \gamma_A x_A P_A^\circ + \gamma_B x_B P_B^\circ + \gamma_C x_C P_C^\circ \quad \text{.....} \quad (4.2.15)$$

Jadi persamaan yang akan dipakai selanjutnya adalah (4.2.2), (4.2.3), (4.2.4), (4.2.5), (4.2.6), (4.2.7), dan (4.2.15). Nilai A_{12}, A_{13}, dan A_{23} yang dicari adalah yang memberikan penyimpangan (deviasi) antara hasil perhitungan dan data percobaan yang minimum. Ukuran deviasi bisa dinyatakan dengan *Sum of Squares of Errors* (SSE) yang didefenisikan sebagai berikut:

$$SSE = \sum \left(P_{t,hitung} - P_{t,data}\right)^2 \quad \text{.....} \quad (4.2.16)$$

Jadi dicari A_{12}, A_{13}, dan A_{23} yang memberikan nilai SSE minimum.

Algoritma:

Algoritma evaluasi A_{12}, A_{13}, dan A_{23} adalah sebagai berikut:

1. Menghitung nilai P_A^0, P_B^0 dan P_C^0 dengan menggunakan persamaan (4.2.5), (4.2.6) dan (4.2.7) berdasarkan data T dari percobaan.
2. Trial nilai A_{12}, A_{13}, dan A_{23}.
3. Menghitung nilai γ_A, γ_B dan γ_C dengan menggunakan persamaan (4.2.11), (4.2.12) dan (4.2.13) berdasarkan T dan komposisi dari data percobaan.
4. Menghitung nilai P_t dengan menggunakan persamaan (4.2.15).
5. Menghitung SSE dengan menggunakan persamaan (4.2.16).
6. Dicek nilai SSE, apakah sudah minimum?

   Jika ya berarti selesai

   Jika tidak berarti kembali ke langkah 2

Hasil hitungan dengan Microsoft Excel, program Evaluasi Tetapan, *Sheet* 2 ditunjukkan pada Gambar 4.2.

Parameter Evaluation Vapor-Liquid Equilibrium, Ideal Gas and Non-Ideal Liquid
Two Suffix Margules (Ternary System)

				Data:				
				Antoine:	A1 =	6.876	R, cal/mol/	1.987
Trial:	A12 =	147.9	cal/mol		B1 =	1075.780		
	A13 =	151.6	cal/mol		C1 =	233.205		
	A23 =	108.3	cal/mol		A2 =	6.870		
					B2 =	1168.720		
					C2 =	224.210		
					A3 =	6.792		
					B3 =	1205.423		
					C3 =	220.352		

x1	x2	T, C	Pt, mmHg	x3	P10, mmHg	P20, mmHg	P30, mmHg	gama1	gama2	gama3	Pt calc	(del Pt)^2
0.1	0.1	66	862	0.8	1909.23	696.77	382.31	1.18399	1.01134	1.00553	860.25	3.05667
0.2	0.1	63	775	0.7	1755.67	632.44	345.02	1.14280	1.01188	1.01416	776.60	2.56643
0.3	0.2	60	834	0.5	1611.70	572.89	310.69	1.09975	1.05086	1.03802	836.11	4.45686
0.4	0.3	65	1119	0.3	1856.96	674.78	369.54	1.06793	1.10853	1.07318	1118.54	0.21077
0.5	0.2	65	956	0.3	1856.96	674.78	369.54	1.04727	1.04686	1.08279	954.07	3.74191
0.6	0.3	65	1097	0.1	1856.96	674.78	369.54	1.03107	1.10853	1.13401	1098.01	1.01126
0.6	0.2	60	814	0.2	1611.70	572.89	310.69	1.03009	1.05086	1.11551	813.66	0.11631
0.7	0.2	60	811	0.1	1611.70	572.89	310.69	1.01715	1.05086	1.15313	809.49	2.29307
0.7	0.1	70	797	0.2	2129.57	790.39	436.93	1.01681	1.01069	1.12982	798.83	3.36022
												20.8135

Gambar 4.2. Hasil perhitungan Evaluasi Parameter Model *Two-Suffix Margules* Metode Barker Untuk Sistem Terner

4.3 Evaluasi Nilai Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer*

Pada *primary reformer*, CH_4 dan H_2O diumpankan pada suhu dan tekanan tinggi. Katalisator padat mendorong reaksi sebagai berikut:

$$CH_4 + H_2O \rightleftarrows CO + 3H_2 \quad \text{.....} \quad (4.3.1)$$

$$CO + H_2O \rightleftarrows CO_2 + H_2 \quad \text{.....} \quad (4.3.2)$$

Katalisator bekerja sangat baik sehingga gas keluar *primary reformer* dalam keadaan kesetimbangan kimia. Suhu *primary reformer* dijaga relatif tetap 800 ^oC. Tersedia data operasi pada 4 kondisi yaitu:

a. Tekanan operasi 33 atm, laju umpan 200 mol/s dengan komposisi CH_4 = 25%; H_2O = 74,91%; N_2 = 0,09%. Dihasilkan produk dengan perbandingan mol CO : CO_2 : CH_4 = 1 : 1,09 : 1,21.

b. Tekanan operasi 35 atm, laju umpan 200 mol/s dengan komposisi CH_4 = 24,5%; H_2O = 75,40%; N_2 = 0,10%. Dihasilkan produk dengan perbandingan mol CO : CO_2 : CH_4 = 1 : 0,98 : 1,17.

c. Tekanan operasi 37 atm, laju umpan 200 mol/s dengan komposisi CH_4 = 27%; H_2O = 72,90%; N_2 = 0,10%. Dihasilkan produk dengan perbandingan mol CO : CO_2 : CH_4 = 1 : 0,91 : 1,33.

d. Tekanan operasi 39 atm, laju umpan 200 mol/s dengan komposisi CH_4 = 23,1%; H_2O = 76,7%; N_2 = 0,2%. Dihasilkan produk dengan perbandingan mol CO : CO_2 : CH_4 = 1 : 1,09 : 1,03.

Berdasarkan data operasi tersebut ingin dievaluasi nilai Kp_1 dan Kp_2 pada suhu 800 ^oC.

Analisis:

Berdasarkan reaksi (4.3.1) dan (4.3.2), diperoleh:

$$Kp_1 = \frac{P_{CO}\,P_{H_2}^3}{P_{CH_4}\,P_{H_2O}} \quad \text{.....} \quad (4.3.3)$$

$$Kp_2 = \frac{P_{CO_2}\,P_{H_2}}{P_{CO}\,P_{H_2O}} \quad \text{.....} \quad (4.3.4)$$

Misal perbandingan CO : CO_2 : CH_4 produk adalah 1 : α : β

Fraksi C menjadi CO = $\frac{mol\ CO}{mol\ C\ total} = \frac{1}{1+\alpha+\beta} = x_1$ ..... (4.3.5)

Fraksi C menjadi CO_2 = $\frac{\alpha}{1+\alpha+\beta} = x_2$ ..... (4.3.6)

Rasio mol $\frac{CH_4}{CO} = \beta$ ..... (4.3.7)

Mol C total dalam umpan = mol CH_4 umpan = F_c..... (4.3.8)

Produk:

CO = F_c . x_1 (mol/s) ..... (4.3.9)

CO_2 = F_c . x_2 (mol/s) ..... (4.3.10)

CH_4 = F_c . x_1 . β (mol/s) ..... (4.3.11)

H_2O = $(F_o)_{H2O}$ – F_c . x_1 – 2 F_c . x_2 (mol/s) ..... (4.3.12)

H_2 = (3 F_c . x_1 +4 F^c . x_2) (mol/s) ..... (4.3.13)

N_2 = tetap ..... (4.3.14)

Mol total gas produk selanjutnya bisa dicari jika nilai α dan β tersedia. Selanjutnya bisa dicari:

$$P_{CO} = y_{CO}P_t = \frac{mol\ CO}{mol\ total}.P_t \quad \text{.....} \quad (4.3.15)$$

$$P_{H_2} = y_{H_2}P_t = \frac{mol\ H_2}{mol\ total}.P_t \quad \text{.....} \quad (4.3.16)$$

$$P_{CO_2} = y_{CO_2}P_t = \frac{mol\ CO_2}{mol\ total}.P_t \quad \text{.....} \quad (4.3.17)$$

$$P_{CH_4} = y_{CH_4}P_t = \frac{mol\ CH_4}{mol\ total}.P_t \quad \text{.....} \quad (4.3.18)$$

$$P_{H_2O} = y_{H_2O}P_t = \frac{mol\ H_2O}{mol\ total}.P_t \quad \text{.....} \quad (4.3.19)$$

Nilai Kp_1 dan dan Kp_2 selanjutnya bisa dicari dengan menggunakan persamaan (4.3.3) dan (4.3.4). Untuk tiap kondisi operasi (ada 4 kondisi) diperoleh nilai Kp_1 dan dan Kp_2 hasil hitungan. Evaluasi nilai Kp yang sebenarnya diestimasi dengan cara sebagai berikut:

1. Dicoba nilai Kp_1 dan dan Kp_2 (trial)
2. Hitung *Sum of Squares of Errors* dengan persamaan:

$$SSE = \sum\left(\frac{(Kp_1)_{trial}-(Kp_1)_{hitung}}{(Kp_1)_{trial}}\right)^2 + \sum\left(\frac{(Kp_2)_{trial}-(Kp_2)_{hitung}}{(Kp_2)_{trial}}\right)^2 \text{.....(4.3.20)}$$

Nilai Kp_1 dan dan Kp_2 yang dianggap memenuhi adalah yang menghasilkan nilai SSE yang minimum.

Algoritma:

Algoritma evaluasi Kp_1 dan dan Kp_2 adalah sebagai berikut:

1. Menghitung x_1 dan x_2 dengan persamaan (4.3.5) dan (4.3.6)
2. Menghitung mol CO dengan persamaan (4.3.9)
3. Menghitung mol CO_2 dengan persamaan (4.3.10)
4. Menghitung mol CH_4 dengan persamaan (4.3.11)
5. Menghitung mol H_2O dengan persamaan (4.3.12)
6. Menghitung mol H_2 dengan persamaan (4.3.13)
7. Menghitung mol N_2 dengan persamaan (4.3.14)
8. Menghitung mol total gas
9. Menghitung P_{CO}, P_{H2}, P_{CO2}, P_{CH4}, P_{H2O} dengan persamaan (4.3.15), (4.3.16), (4.3.17), (4.3.18), (4.3.19).
10. Menghitung Kp_1 dan Kp_2 dengan persamaan (4.3.3) dan (4.3.4).
11. Langkah 1 sampai 10 diulang untuk setiap set data percobaan.
12. Trial nilai Kp_1 dan Kp_2.

13. Menghitung SSE dengan persamaan (4.3.20).
14. Cek apakah SSE minimum?

    Jika ya berarti selesai.

    Jika tidak berarti kembali ke langkah 12.

Hasil perhitungan dengan Microsoft Excel, Program Evaluasi Tetapan, *Sheet* 3 adalah seperti pada Gambar 4.3(a) – (c).

Primary Reformer

Ideal Gases

Evaluasi Kp1 dan Kp2

CH4 + H2O ===== CO + 3 H2 Kp1 = PCO * PH2^3 / PCH4 / PH2O

CO + H2O ====== CO2 + H2 Kp2 = PCO2 * PH2 / PCO / PH2

T, C =	800	=====>	1073 K	**Trial:**	Kp1 =	171.8	atm2
F0, mol/s	200				Kp2 =	1.090	

P, atm = 33

CO : CO2 : CH4 = 1 : alph : beta

alph, % = 1.090

beta, % = 1.210

CO, mol C/mol C = 0.303 (terhitung)

CO2, mol C /mol C = 0.33 (terhitung)

CH4/CO = 1.210 (terhitung)

Komp	yF	Fi, Umpan mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm	Kp1 Kp2	R1^2 R2^2
N2	0.0009	0.18	0.00	0.00	0	0.36	0.180	0.00068	0.023		
CH4	0.2500	50.00	50.00	200.00	0	0	18.333	0.06962	2.297		
H2O	0.7491	149.82	0.00	299.64	149.8	0	101.638	0.38597	12.737		
CO	0.0000	0.00	0.00	0.00	0	0	15.152	0.05754	1.899		
CO2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0	0	16.515	0.06272	2.070		
H2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0	0	111.515	0.42348	13.975		
Jumlah =	1.0000	200.00	50.00	499.64	149.8	0.36	263.333	1.00000	33.000	177.0825	0.000945
										1.195924	0.009368

Gambar 4.3(a). Hasil perhitungan Evaluasi Nilai Tetapan-Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer* untuk P = 33 atm

P, atm = 35

CO : CO2 : CH4 = 1 : alph : beta

alph = 0.980

beta = 1.170

CO, mol C/mol C = 0.317 (terhitung)

CO2, mol C /mol C = 0.311 (terhitung)

CH4/CO = 1.17 (terhitung)

Komp	yF	Fi, Umpan mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm	Kp1 Kp2	R1^2 R2^2
N2	0.0010	0.20	0.00	0.00	0.00	0.40	0.200	0.00076	0.0251		
CH4	0.2450	49.00	49.00	196.00	0.00	0.00	18.200	0.06911	2.2808		
H2O	0.7540	150.80	0.00	301.60	150.80	0.00	104.756	0.39781	13.1276		
CO	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	15.556	0.05907	1.9494		
CO2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	15.244	0.05789	1.9104		
H2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	107.644	0.40878	13.4896		
Jumlah =	1.0000	200.00	49.00	497.60	150.80	0.40	261.600	0.99342	32.7828	159.819	0.004865
										1.007	0.005845

Gambar 4.3(b). Hasil perhitungan Evaluasi Nilai Tetapan-Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer* untuk P = 35 atm

P, atm = 37

CO : CO2 : CH4 = 1 : alph : beta

alph = 0.910

beta = 1.330

CO, mol C/mol C = 0.309 (terhitung)

CO2, mol C /mol C = 0.281 (terhitung)

CH4/CO = 1.33 (terhitung)

Komp	yF	Fi, Umpan mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm	Kp1 Kp2	R1^2 R2^2
N2	0.0010	0.20	0.00	0.00	0.00	0.40	0.20	0.00076	0.0251		
CH4	0.2700	54.00	54.00	216.00	0.00	0.00	22.17	0.08418	2.7778		
H2O	0.7290	145.80	0.00	291.60	145.80	0.00	98.80	0.37519	12.3813		
CO	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	16.67	0.06329	2.0886		
CO2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	15.17	0.05759	1.9006		
H2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	110.67	0.42025	13.8684		
Jumlah =	1.0000	200.00	54.00	507.60	145.80	0.40	263.67	1.00127	33.0418	161.979	0.003269
										1.019	0.004250

Gambar 4.3(c). Hasil perhitungan Evaluasi Nilai Tetapan-Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer* untuk P = 37 atm

P, atm = 39

CO : CO2 : CH4 = 1 : alph : beta

alph = 1.090

beta = 1.030

CO, mol C/mol C = 0.321 (terhitung)

CO2, mol C /mol C = 0.349 (terhitung)

CH4/CO = 1.03 (terhitung)

Komp	yF	Fi, Umpan mol/s	atom C mol/s	atom H mol/s	atom O mol/s	atom N mol/s	F out, mol/s	yi	Pi, atm	Kp1 Kp2	R1^2 R2^2
N2	0.0020	0.40	0.00	0.00	0.00	0.80	0.40	0.00152	0.0501		
CH4	0.2310	46.20	46.20	184.80	0.00	0.00	15.25	0.05792	1.9113		
H2O	0.7670	153.40	0.00	306.80	153.40	0.00	106.31	0.40371	13.3226		
CO	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	14.81	0.05623	1.8556		
CO2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	16.14	0.06129	2.0227		
H2	0.0000	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	108.98	0.41387	13.6576		
Jumlah =	1.0000	200.00	46.20	491.60	153.40	0.80	261.90	0.99454	32.8199	185.650	0.006497
										1.117	0.000614

SSE = 0.035653

Gambar 4.3(d). Hasil perhitungan Evaluasi Nilai Tetapan-Tetapan Kesetimbangan Reaksi Pada *Primary Reformer* untuk P = 39 atm

DAFTAR PUSTAKA

Ambrose, D., Ewing, M. B., McGlashan, M. L., "Critical Constants and Second Virial Coefficients of Gases", www.kayelaby.npl.co.uk/chemistry/3_5/3_5.htm, diunduh 12 April 2016.

Antoine Coefficient Table, http://www.engr.umd.edu/~nsw/ench250 /antoine.dat, diunduh 17 November 2016.

Bottino, A., Comite, A., Capannelli, G., Di Felice, R., Pinacci, P, "Steam Reforming of Methane in Equilibrium Membrane Reactors for Integration in Power Cycles", Catalysis Today, 118 (2006) 214-222.

Haber Process, https://en.wikipedia.org/wiki/Haber_process, diunduh 21 April 2018.

International Process Plants, "1,620 Metric Tons/Day Ammonia Plant", www.ippe.com, diunduh 12 Oktober 2016.

Keith, J., "Equilibrium Simulation of a Methane Steam Reformer: Fuel Cells", CACHE Modules on Energy in the Curriculum, Michigan Technological University, diunduh 12 November 2016.

Nagahama, K., Hirata, M., 1970. "Second Virial Coefficients for Vapor-Liquid Equilibrium Calculation", J. Chem. Eng. Japan, 3, 146–152.

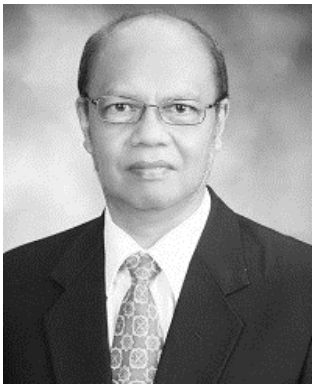
Prausnitz, J.M., Lichtenthaler, R.N., de Azevedo, E.G., 1999, Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria, 3rd ed., Prentice Hall, United States.

Smith, J.M., Van Ness, H.C., Abbott, M.M., 2005, "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 7th ed., McGraw-Hill.

Standard Thermodynamic Properties Of Chemical Substances, CRC Press LLC, http://www.update.uu.se/~jolkonen/pdf/CRC_TD.pdf.200, diunduh 12 November 2016.

Strait, M., Allum, G., Gidwani, N., "Synthesis Gas Reformers", http://www.owlnet.rice.edu/~ceng403/nh3ref97.html, di unduh 12 Oktober 2016.

BIODATA PENULIS



Wahyudi Budi Sediawan lahir di Yogyakarta pada 17 September 1953. Ia menyelesaikan pendidikan dasar dan menengah (SD, SMP dan SMA) di kota kelahirannya tersebut. Kemudian ia menempuh pendidikan S1 Teknik Kimia di Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta dan menyelesaikannya pada tahun 1979. Setelah itu, ia menempuh pendidikan S2 Teknik Kimia di universitas itu pula dan lulus pada tahun 1983. Mulai tahun 1985 ia menempuh pendidikan S3 di bidang *Chemical Engineering* di *Louisiana State University (LSU)*, *USA,* dan selesai pada tahun 1988. Disertasinya mendapat penghargaan *Distinguished Dissertation Award of 1988* dari *LSU*. Ia mulai bekerja sebagai Dosen di Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Gadjah Mada tahun 1980 dan ditetapkan sebagai Guru Besar Teknik Kimia pada tahun 2002. Sejumlah matakuliah yang pernah diampunya antara lain Fisika, Pemodelan Matematis, Komputasi, Termodinamika, Proses Transfer, Perancangan Pabrik Kimia dan Teknik Produk.

Takdir Syarif lahir di Ujung Pandang pada tanggal 07 Januari 1975. Menyelesaikan pendidikan dasar dan menengah (SD, SMP dan SMA) di kota kelahirannya tersebut. Pada tahun 1993 menempuh pendidikan S1 Teknik Kimia di Universitas Muslim Indonesia, Makassar dan menyelesaikannya pada tahun 1999. Pada tahun 2005, ia menempuh pendidikan S2 Teknik Kimia di Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta dan lulus pada tahun 2007 dengan predikat *Cum Laude*. Tahun 2014 ia menempuh pendidikan S3 di bidang Teknik Kimia di Universitas Gadjah Mada dan selesai pada tahun 2017. Mulai bekerja sebagai Dosen Tetap di Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknologi Industri, Universitas Muslim Indonesia pada tahun 2000. Selain sebagai dosen tetap, penulis juga aktif sebagai pemateri pada berbagai pelatihan *Sofware for Chemical Engineering*. Beberapa diantarnya adalah pelatihan *Advance System for Process Engineering* (ASPEN) di Universitas Fajar pada tahun 2007, pelatihan ASPEN dan *Excel for Engineering* yang diikuti oleh mahasiswa Teknik Kimia se-Kota Makassar pada tahun 2008. Pada tahun 2016 memberikan pelatihan Matrix Laboratory (MATLAB) bagi mahasiswa S3 jurusan Teknik Kimia UGM dan pada tahun 20018 memberikan pelatihan ASPEN dan MATLAB bagi mahasiswa Teknik Kimia UMI bekerja sama dengan INERT Research Club. Matakuliah yang pernah diampunya antara lain Kalkulus, Fisika, Pemodelan Matematis, Komputasi Proses, Teknik Software, Perpindahan Panas, Matematika Teknik Kimia.