

# PREDIKSI KESETIMBANGAN UAP-CAIR SISTEM BINER ASETON + AMIL ALKOHOL MENGGUNAKAN HUKUM RAOULT

Nadia Rahmatillah dan Asalil Mustain

Jurusan Teknik Kimia

[nadiarahma2893@gmail.com](mailto:nadiarahma2893@gmail.com), [[asalil89@polinema.ac.id](mailto:asalil89@polinema.ac.id)]

## ABSTRAK

Prediksi Kesetimbangan Uap Cair Sistem Biner Aseton + Amil Alkohol pada Tekanan 101,3 kPa bertujuan untuk mengetahui kesetimbangan uap-cair sistem tersebut berdasarkan Hukum Raoult dan mengkorelasikan data kesetimbangan uap-cair dengan model *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*. Prediksi diawali dengan menentukan fraksi mol campuran biner aseton + amil alkohol dengan menggunakan persamaan Hukum Raoult pada tekanan 101,3 kPa. Kemudian, data kesetimbangan yang didapat dikorelasikan dengan perhitungan model *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*. Dari hasil penelitian didapatkan % deviasi rata-rata  $\Delta T$  hasil pengukuran dan korelasi dengan perhitungan model *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)* untuk sistem biner aseton + amil alkohol sebesar 0,0003 % menunjukkan hasil yang baik. Parameter interaksi biner yang diperoleh sangat berguna untuk merancang dan mengoptimasi kolom distilasi dalam proses pemurnian bioetanol.

**Kata Kunci:** Hukum Raoult, Kesetimbangan Uap-Cair, *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)*

## ABSTRACT

*The Prediction of Vapor-Liquid Equilibrium of binary systems of Acetone + Amyl Alcohol at 101,3 kPa aims to finds out the system's vapor-liquid equilibrium and correlates the vapor-liquid equilibrium data with the Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC) model. Prediction begins by determining the acetone + amyl alcohol mixture of mole fraction with Raoult's Law at 101,3 kPa. Then, the equilibrium data obtained was correlated with the calculation of the Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC) model. Based on the results of the study, it was found that the average deviation %  $\Delta T$  of the measurement results and the correlation with the calculation of the Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC) model for the binary system of acetone + amyl alcohol of 0.0003 % showed good results. Binary interaction parameters that have been obtained is very useful to optimize the distillation column at bioethanol purification process.*

**Keywords:** Raoult's Law, Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC), Vapor-Liquid Equilibrium

## 1. PENDAHULUAN

Energi merupakan kebutuhan dasar manusia, yang terus meningkat sejalan dengan tingkat kehidupannya. Bahan bakar minyak (BBM) memegang posisi yang sangat dominan dalam pemenuhan kebutuhan energi nasional. Kondisi demikian terjadi sebagai akibat dari

kebijakan subsidi masa lalu terhadap bahan bakar minyak dalam upaya memacu percepatan pertumbuhan ekonomi. Suatu kenyataan yang tidak dapat dipungkiri bahwa produksi minyak bumi Indonesia mengalami penurunan akibat adanya penurunan secara alamiah dan semakin menipisnya cadangan [1]. Semakin menipisnya cadangan bahan bakar fosil memerlukan adanya sumber energi alternatif. Sumber daya alam di Indonesia memiliki potensi yang besar untuk diolah menjadi sumber energi alternatif pengganti bahan bakar fosil seperti *biofuel*. Pada umumnya, bioetanol diproduksi secara fermentasi dari berbagai jenis bahan alam seperti tebu [2], jagung [3], jerami gandum [4], bakau [5] dan alga [6]. Hasil dari fermentasi bioethanol disebut *fusel oil*. *Fusel Oil* tidak dapat dibuang langsung ke lingkungan, karena akan menimbulkan dampak lingkungan yang tidak diinginkan. Beberapa penulis telah menunjukkan aplikasi langsung dari *fusel oil* yaitu dapat dibakar untuk memasok energi di tempat penyulingan atau dapat ditambahkan ke bahan bakar diesel untuk meningkatkan angka *cetane* [7]. Dalam perancangan proses distilasi diperlukan data kesetimbangan uap-cair/ *Vapor-Liquid Equilibrium (VLE)* dari pasangan-pasangan komponen yang akan dimurnikan. Berdasarkan *National Institute of Standards and Technology (NIST)*, data kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton dan alkohol yang masih belum diteliti adalah sistem biner aseton + amil alkohol. Oleh karena itu perlu dilakukan prediksi terhadap data kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton + amil alkohol yang akan dikorelasikan dengan model koefisien aktifitas seperti *Universal Quasi-Chemical (UNIQUAC)* oleh Abrams dkk. (1975) [8] sangat berguna untuk optimasi desain perancangan kolom distilasi pada proses pemurnian produksi bioetanol.

## 2. METODOLOGI PENELITIAN

Prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton + amil alkohol diawali dengan menentukan fraksi mol untuk campuran sistem aseton + amil alkohol pada tekanan 101,3 kPa dari 0 sampai 1. Data kesetimbangan uap-cair dihitung menggunakan persamaan Hukum Raoult. Setelah itu, data yang telah ditentukan tersebut dikorelasikan dengan model perhitungan *UNIQUAC*.

## 3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hubungan kesetimbangan uap-cair didefinisikan sebagai berikut :

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^0 \quad (1)$$

$P_i^0$  adalah tekanan uap jenuh komponen murni dihitung melalui rumus *extended Antoine* sebagai berikut :

$$\ln P_i^0 = A_1 + \frac{B_2}{T + C_3} + D_4 T + E_5 \ln T + F_6 T^{G_7} \quad (2)$$

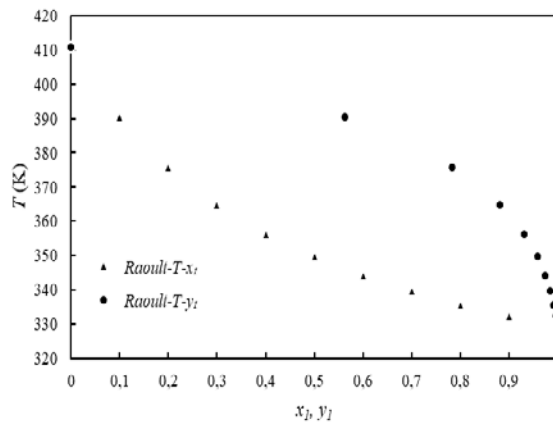
Dimana  $P_i^0$  dalam kPa, T dalam K dan nilai  $A_1$  sampai  $G_7$  untuk komponen I diperoleh dari database aplikasi Aspen Plus.

Data kesetimbangan uap-cair yang telah diprediksi dengan menentukan fraksi mol untuk campuran sistem biner aseton + amil alkohol dari 0 sampai 1 yang dihitung dengan persamaan Hukum Raoult. Dari hasil perhitungan diperoleh fraksi cair dan uap dari masing-masing komponen seperti yang ditunjukkan pada Tabel 1.

**Tabel 1.** Hasil prediksi kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton (1) + amil alkohol (2)

T (K)	x <sub>1</sub>	y <sub>1</sub>
410,9	0	0,000
390,4	0,1	0,562
375,6	0,2	0,783
364,7	0,3	0,882
356,3	0,4	0,932
349,7	0,5	0,959
344,2	0,6	0,975
339,6	0,7	0,985
335,7	0,8	0,992
332,3	0,9	0,997
329,3	1	1,000

Data kesetimbangan pada Tabel 1 juga digambarkan dalam bentuk diagram seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1.



**Gambar 1.** Prediksi kurva kesetimbangan sistem biner aseton (1) + amil alkohol (2) pada tekanan 101,3 kPa

Hasil prediksi kesetimbangan uap-cair sistem aseton (1) + amil alkohol (2) dikorelasikan dengan model *UNIQUAC* dengan menggunakan perhitungan dengan rumus sebagai berikut:

$$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \left( \frac{\phi_i}{\theta_i} \right) l_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left( \sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right) + q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{kj}} \quad (3)$$

Dimana,

$$i = 1 \ j = 2 \text{ atau } i = 2 \ j = 1 \quad (4)$$

$$\phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_k^N r_k x_k} \quad (5)$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_k^N q_k x_k} \quad (6)$$

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (7)$$

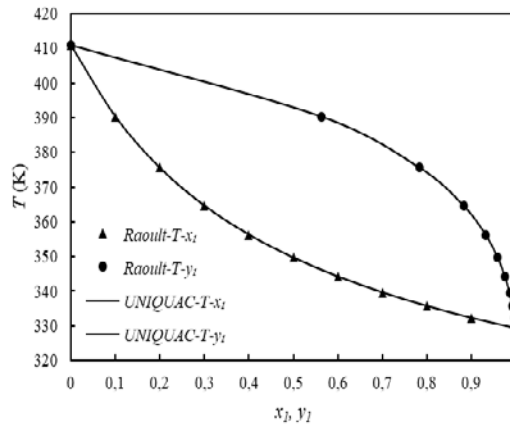
$$l_j = \frac{z}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1) \quad (8)$$

$$\tau_{ij} = \exp\left(A_{ij} + \frac{B_{ij}}{T}\right) \tag{9}$$

$$\tau_{ji} = \exp\left(A_{ji} + \frac{B_{ji}}{T}\right) \tag{10}$$

$$\text{dan } z = 10 \tag{11}$$

Data kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton (1) + amil alkohol (2) pada tekanan 101,3 kPa yang telah ditentukan ini, kemudian dikorelasikan dengan perhitungan model *UNIQUAC*, yang ditunjukkan seperti pada Gambar 2.



**Gambar 2.** Kurva hasil korelasi data kesetimbangan uap-cair sistem biner aseton (1) + amil alkohol (2) menggunakan Hukum Raoult dengan *UNIQUAC*

Berdasarkan Gambar 2, perbandingan data menunjukkan hasil yang baik dikarenakan data yang didapat dari data yang ditentukan hampir sama dengan perhitungan *UNIQUAC*. Pada Gambar 2 ditunjukkan dengan banyaknya titik data yang dilewati oleh garis model *UNIQUAC*. Selain itu, pernyataan ini juga didukung oleh nilai rata-rata deviasi dari temperatur antara data yang ditentukan dengan perhitungan *UNIQUAC* memiliki nilai rata-rata yang kecil yaitu sebesar 0,0003 %. Nilai deviasi ini bisa dihitung menggunakan rumus:

$$\text{Deviasi (\%)} = \left| \frac{T_{eks} - T_{cal}}{T_{eks}} \right| \cdot 100\%$$

Korelasi data kesetimbangan uap-cair hasil prediksi dengan model *UNIQUAC* didapatkan nilai parameter yang ditunjukkan pada Tabel 2. Parameter yang diperoleh dapat digunakan untuk optimasi desain pada kolom distilasi dalam proses pemurnian bioetanol.

**Tabel 2.** Parameter hasil korelasi *UNIQUAC* untuk sistem aseton (1) + amil alkohol (2) pada tekanan 101,3 kPa

Sistem	$A_{12}$	$A_{21}$	$B_{12}$ (K)	$B_{21}$ (K)
Aseton (1) + Amil Alkohol (2)	0,105	-0,147	0,763	-0,992

Dimana  $A_{12}$ ,  $A_{21}$ ,  $B_{12}$ , dan  $B_{21}$  adalah spesifik parameter yang diperoleh dari perhitungan *UNIQUAC*. Nilai *root mean square deviations (RMSD)* antara hasil perhitungan dengan hasil prediksi ditunjukkan pada Tabel 3. Selain itu, pernyataan ini juga didukung oleh nilai *root mean square deviation (RMSD)* antara hasil prediksi dengan perhitungan *UNIQUAC*

yang ditunjukkan Tabel 3. Nilai *root mean square deviation (RMSD)* ini dapat diperoleh dari rumus:

$$RMSD \Delta M = \left( \frac{1}{n_p} \sum_{k=1}^{n_p} (M_k^{cal} - M_k^{exp})^2 \right)^{0,5} \quad (12)$$

**Tabel 3.** *Root Mean Square Deviations (RMSD)* antara hasil perhitungan dengan hasil prediksi

Kode	RMSD $\Delta T$
1	0,0020
2	0,0003
3	0,0001
4	0,0002
5	0,0001
6	0,0003
7	0,0003
8	0,0000
9	0,0002
10	0,0002
11	0,0004

Nilai *RMSD* antara hasil prediksi dengan hasil perhitungan menunjukkan bahwa korelasi antara hasil prediksi dengan perhitungan model *UNIQUAC* memberikan hasil yang baik dikarenakan nilai *RMSD* yang relatif kecil, nilai ini menunjukkan bahwa parameter interaksi biner yang dihasilkan akurat. Ketelitian nilai parameter interaksi biner sangat berpengaruh dalam pendesaianan dan pengoptimasian kolom distilasi untuk menghasilkan bioetanol dengan kemurnian tinggi.

#### 4. KESIMPULAN DAN SARAN

Data kesetimbangan uap-cair pada tekanan 101,3 kPa untuk sistem biner aseton + amil alkohol hasil prediksi yang dikorelasikan dengan model *UNIQUAC* memberikan hasil yang baik dengan ditunjukkan nilai yang kecil untuk *root mean square deviations (RMSD)* antara hasil perhitungan dengan hasil prediksi.

Diharapkan untuk penelitian selanjutnya dapat digunakan interval data prediksi yang lebih kecil.

#### REFERENSI

- [1] Kholiq, I., 2015, Pemanfaatan Energi Alternatif sebagai Energi Terbarukan untuk Mendukung Substitusi BBM, No. 19, No. 75-91.
- [2] Cardona, C.A., Quintero, J., C Paz, I., 2009, *Production of bioethanol from sugarcane bagasse: Status and perspectives*, *Bioresource Technology*, No. 101, 4754-66.
- [3] Nikolić, S., Mojovi, L., Rakin, M., Pejin, D., 2009, *Bioethanol production from corn meal by simultaneous enzymatic saccharification and fermentation with immobilized cells of Saccharomyces cerevisiae var. ellipsoideus*, No. 88, 1602-1607.
- [4] Saravanakumar, K., Senthilraja, P., Kandasamy, K., 2013, *Bioethanol production by mangrove-derived marine yeast, Sacchromyces cerevisiae*, No. 25, 121-127.

- [5] Talebnia, F., Karakashev, D. , Angelidaki, I., 2010, *Production of bioethanol from wheat straw: An overview on pretreatment, hydrolysis and fermentation*, *Bioresour Technol*, No. 101, 4744-53.
- [6] Ku, H.-C. , Tu, C.-H., 2005, *Isobaric vapor–liquid equilibria for mixtures of acetone, ethanol, and 2,2,4-trimethylpentane at 101.3 kPa*, No. 231, 99-108. Li, K., Liu, S. , Liu, X., 2014, *An overview of algae bioethanol production*, *International Journal of Energy Research*, No. 38, 965-977.
- [7] Patil, A.G., Koolwal, S.M. , Butala, H.D., 2002, *Fusel Oil: Composition, Removal and Potensial Utilization*, *International Sugar Journal*, No. 104, 51-58.
- [8] Abrams, D.S. , Prausnitz, J.M., 1975. *Statistical thermodynamics of liquid mixtures: A new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems*, *AIChE Journal*, No. 21, 116-128.