

STUDI KASUS SIMULASI REAKTOR EQUILIBRIUM PADA PRODUKSI METIL ASETAT MENGGUNAKAN SOFTWARE CHEMCAD

Nimas Ayu Prawito Hapsari dan Agung Ari Wibowo
Jurusan Teknik Kimia, Politeknik Negeri Malang, Jl. Soekarno Hatta No. 9, Malang, Indonesia
nimas.seyzhea98@gmail.com, [agung.ari@polinema.ac.id]

ABSTRAK

Produksi metil asetat dapat dilakukan melalui reaksi esterifikasi. Reaksi yang terjadi antara asam asetat dan metanol akan menghasilkan metil asetat dan air sebagai produk samping. Reaksi esterifikasi pada metil asetat berlangsung lama, sehingga katalis dibutuhkan untuk mempercepat laju reaksi. Pada penelitian ini digunakan simulasi reaktor equilibrium dengan pendekatan ΔT sehingga keadaan kesetimbangan diprediksi menggunakan metode minimisasi energi bebas gibbs. Simulasi ini bertujuan untuk mendapatkan jumlah metil asetat yang maksimal sehingga dilakukan trial rasio umpan asam asetat : metanol sebesar 1:1 hingga 1:9, dan melakukan simulasi ada suhu operasi yang berbeda. Berdasarkan simulasi yang telah dilakukan, hasil terbaik diperoleh pada rasio umpan 1:9, dengan suhu 35°C, pada tekanan 101.3 kPa dengan konversi sebesar 99.9%.

Kata kunci: Metil Asetat, Esterifikasi, Reaktor Equilibrium, CHEMCAD

ABSTRACT

The production of methyl acetate can be done through the esterification reaction. The reaction that occurs between acetic acid and methanol will produce methyl acetate and water as a byproduct. The esterification reaction of methyl acetate generally need a long time, so the catalyst is needed to accelerate the reaction rate. In this study, the simulation of equilibrium reactor is used with the ΔT approach so that the equilibrium state is predicted using the gibbs free energy minimization method. This simulation aims to get the maximum amount of methyl acetate, therefore, the trial ratio of the acetic acid methanol feed ratio of 1: 1 to 1: 9, and do the simulation there are different operating temperatures. Based on the simulation, the best result was obtained at a 1: 9 feed ratios, with a temperature of 35 ° C, at a pressure of 101.3 kPa with a conversion of 99.9%.

Keywords: Methyl Acetate, Esterification, Equilibrium Reactor, CHEMCAD

1. PENDAHULUAN

Reaktor pada proses pembentukan metil asetat merupakan salah satu komponen utama, karena hingga saat ini masih banyak penelitian optimalisasi baik dari segi kinetika maupun desain proses produksi metil asetat untuk mendapatkan produk secara optimal [1]. Menurut Ganesh,dkk (2011), reaksi metil asetat secara konvensional dapat dilakukan secara optimal didalam tangki berpengaduk dengan suhu 50°C pada tekanan 1 atm. Pada kondisi operasi tersebut konversi maksimum yang didapatkan mencapai 70%, dengan perbandingan reaktan 1:1 (asam asetat: metanol) [2]. Selain itu penggunaan reaktan berlebih juga dilakukan dan didapatkan *yield* terbesar 95.5% pada perbandingan 1:8 (asam asetat:metanol). Tetapi

pada penelitian tersebut terdapat kejanggalan yakni pada perbandingan 1:9, *yield* yang dihasilkan rendah [1].

Metil asetat ($\text{CH}_3\text{COOCH}_3$) termasuk bagian dari kelompok ester yang memiliki karakteristik mudah terbakar, sulit larut dalam air, dan *less toxic* [3]. Dalam industri kimia, metil asetat digunakan sebagai pelarut organik atau solvent, material pelapisan, produksi *essence*, dan sebagainya [4]. Produksi metil asetat dapat dilakukan melalui reaksi esterifikasi dan karbonilasi. Industri lebih banyak menggunakan esterifikasi dalam pemilihan prosenya, reaksi esterifikasi yang terjadi adalah sebagai berikut:



Reaksi diatas merupakan reaksi reversibel, sehingga konversi limiting reaktan pada reaksi tersebut dapat ditentukan melalui kesetimbangan. Laju reaksi pada esterifikasi sangat lambat, sehingga dengan adanya penambahan katalis sangat penting untuk mempercepat laju reaksi [2].

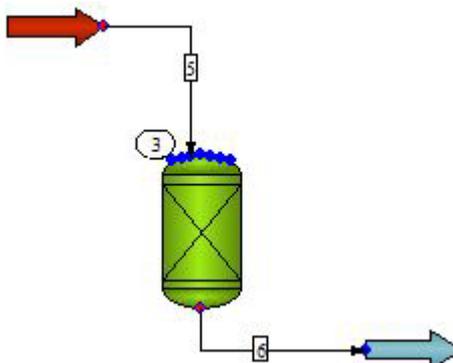
Berdasarkan jenis reaksi esterifikasi yaitu reaksi kesetimbangan, maka dapat dilakukan simulasi dengan reaktor equilibrium pada software CHEMCAD. Reaktor equilibrium tersebut dilakukan secara isothermal dan dilanjutkan dengan cara pendekatan ΔT , sehingga hal ini memiliki kesamaan konsep dengan *Gibbs reactor* dimana hanya menginputkan dua data yaitu aliran umpan, suhu dan/atau tekanan yang dapat diatur, dan tidak diperlukan stoikiometri reaksi. Karena hanya menginputkan dua data tersebut maka chemcad menghitung laju produk, komposisi, dan kondisi termal dengan meminimalkan energi bebas Gibbs, yang berdasarkan pada kesetimbangan massa keseluruhan. Pada dasarnya reaktor Gibbs memiliki prinsip bahwa pada kesetimbangan kimia maka total energi Gibbs sistem memiliki nilai minimum. Dengan mencoba meminimalkan energi total sistem, konstanta kesetimbangan individu tidak dipertimbangkan. Sebaliknya, komponen reaksi yang mungkin dicatat, dan distribusi komponen ini ditetapkan menggunakan teknik matematika umum untuk memberikan energi bebas minimum kepada sistem. Jadi, untuk sistem reaksi apa pun, semua komponen penting dicatat dan solusi dilakukan tanpa sepengetahuan sebelumnya tentang kimia sistem. Hasil yang dicapai akan memenuhi semua kesetimbangan yang diharapkan dan akurat dalam batas data termodinamika. Untuk mendapatkan hasil yang sama dengan menggunakan konstanta kesetimbangan individu akan membutuhkan informasi tentang reaksi yang terlibat (Reaktor Ekuilibrium menggunakan metode ini). Tujuan dari penelitian ini untuk mencari komponen rasio reaktan dan suhu reaksi yang dapat memberikan hasil maksimal [5].

2. METODOLOGI PENELITIAN

Penentuan rasio umpan dan suhu optimal pada produksi metil asetat dilakukan dengan simulasi proses produksi metil asetat menggunakan studi kasus reaktor equilibrium yang dilakukan dengan *software* simulasi CHEMCAD 7.1.5.

Umpan yang digunakan dalam pembuatan metil asetat adalah asam asetat, metanol, dan asam sulfat sebagai katalis. Produk samping dari reaksi esterifikasi metil asetat adalah air, sehingga dalam pengoperasian di CHEMCAD, komponen yang dipilih adalah *acetic acid*, *metanol*, *sulfuric acid*, *water*, dan *methyl acetate*. Langkah selanjutnya adalah menyusun proses reaksinya, dengan reaktor yang dipilih adalah *equilibrium reactor* seperti pada Gambar 1. Suhu dan tekanan feed pada reaktor sebesar 25°C dan 101.3 kPa. Komposisi reaktan *feed*

di-inputkan, sesuai dengan perhitungan stoikiometri, dengan rasio yang ditentukan yaitu dari 1:1 sampai dengan 1:9, pada keadaan ini asam asetat sebagai umpan dengan laju alir yang tetap sebesar 34.6577 kmol/jam, sehingga reaksi pembatas dalam proses ini adalah asam asetat [2,6]. Pada initial input kondisi operasi reaktor ditetapkan pada suhu 50°C dan tekanan 101.3 kPa. Operasi reaktor ditetapkan dengan memilih “Approach delta T” sehingga mengarahkan simulasi pada minimisasi energi bebas gibbs.



Gambar 1. Rangkaian reaktor equilibrium produksi metil asetat

Untuk mengetahui pengaruh konsentrasi reaktan pada jumlah metil asetat yang dihasilkan maka, dapat dilakukan dengan mengatur jumlah reaktan yang berlebih (metanol) pada bagian “*sensitivity study*” di CHEMCAD. Dalam pengaturan tersebut jumlah mol metanol diatur mulai rasio terkecil (1:1) hingga rasio terbesar (1:9) sesuai penelitian terdahulu [2,6], sehingga pada simulasi ini terdiri dari 8 step perubahan jumlah mol metanol. Metil asetat merupakan variabel terikat dalam simulasi ini, sehingga pada bagian “*sensitivity study*”, hanya mengatur variabel yang berubah pada simulasi ini. Variabel yang berubah adalah laju mol metil asetat.

Selanjutnya apabila telah ditemukan rasio metanol yang menghasilkan metil asetat dengan maksimal, maka rasio tersebut digunakan untuk mencari suhu operasi yang dapat menghasilkan produk lebih banyak. Suhu operasi yang disimulasikan adalah 35, 40, 45, 50, dan 55 °C.

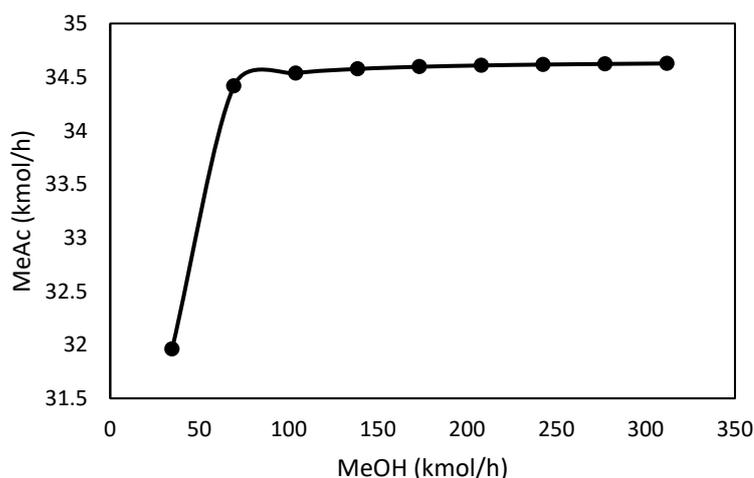
3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil dari simulasi proses pada reaksi metil asetat dapat dilihat pada Tabel 1. Hasil reaksi dari reaktor equilibrium menghasilkan metil asetat yang cenderung konstan.

Tabel 1. Hasil simulasi reaktor equilibrium pada produksi metil asetat

Run	Rasio	Metanol (kmol/jam)	Metil Asetat (kmol/jam)	Konversi Asam Asetat (%)
0	1:1	34.6577	31.96	0.922162
1	1:2	69.3154	34.4159	0.993023
2	1:3	103.973	34.5353	0.996468
3	1:4	138.631	34.5758	0.997637
4	1:5	173.288	34.5962	0.998226
5	1:6	207.946	34.6085	0.99858
6	1:7	242.604	34.6167	0.998817
7	1:8	277.261	34.6225	0.998984
8	1:9	311.919	34.6269	0.999111

Namun dari hasil reaksi tersebut terjadi kenaikan walaupun tidak terlalu signifikan, tetapi kenaikan yang terjadi dikarenakan adanya pengaruh penambahan metanol. Terjadinya penambahan reaktan akan mengakibatkan arah reaksi kesetimbangan menuju produk [3]. Dari hasil tersebut konversi pada asam asetat bisa mencapai 99.9% sehingga penggunaan reaktor equilibrium dengan suhu yang telah ditentukan yaitu 50°C dapat membentuk metil asetat yang lebih baik. Jika dibandingkan dengan penelitian terdahulu, dengan rasio asam asetat dan metanol 1:1, bahwa konversi yang didapatkan sebesar 70%, saat digunakan simulasi CHEMCAD konversi bisa mencapai 92.2%. Perbedaan yang terjadi karena penelitian terdahulu melakukannya dalam keadaan nyata, sedangkan dalam simulasi dianggap dalam keadaan ideal [2]. Pada perbandingan 1:9 yang dihasilkan lebih tinggi dibandingkan dengan rasio lainnya yakni 34.6269 kmol/jam, sehingga hal ini membuktikan hukum Le Chatelier [3]. Kenaikan jumlah metil asetat diperkirakan akan naik secara tidak signifikan apabila dalam suhu 50°C, seperti yang direpresentasikan pada gambar 2. Pada gambar tersebut rasio 1:1 hingga 1:4 kenaikan produk yang dihasilkan sangat signifikan, dimana konsumsi asam asetat sebagai pereaksi bisa mencapai 92% hingga 99.9%, dan selanjutnya penambahan metanol dengan rasio 1:5 sampai dengan 1:9 tidak memberikan kenaikan yang secara signifikan. Ketidak signifikan perubahan ini dikarenakan saat reaksi mendekati kesetimbangan, metil asetat sulit untuk dipisahkan terhadap rasio molar reaktan yang lebih tinggi [6]. Namun dari grafik tersebut semakin bertambahnya metanol maka metil asetat yang terbentuk juga semakin banyak.



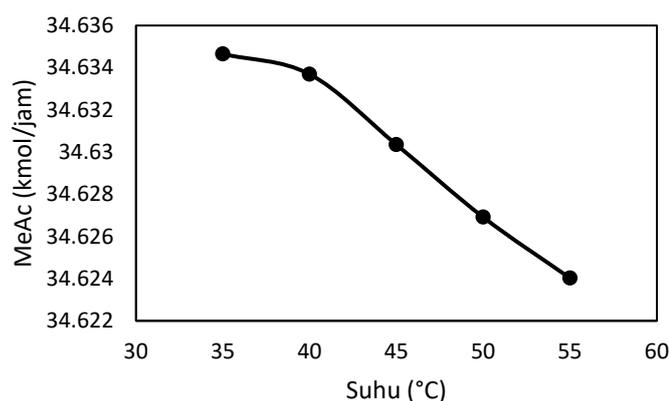
Gambar 2. Grafik jumlah produksi metil asetat terhadap metanol

Berdasarkan simulasi *feed ratio*, hasil yang diperoleh menunjukkan nilai maksimal pada rasio 1:9, kemudian rasio ini disimulasikan tiap suhu yang berbeda mulai suhu 35°C hingga 55°C pada 101.3 kPa, data yang didapatkan adalah sebagai berikut:

Tabel 2. Hasil simulasi reaksi esterifikasi pada variabel suhu

No	T (°C)	MeAc (kmol/jam)	Konversi Asam Asetat (%)
1	35	34.63465	99.93349
2	40	34.63369	99.93072
3	45	34.63035	99.92109
4	50	34.62691	99.91116
5	55	34.62402	99.90282

Tabel 2 menunjukkan bahwa jumlah metil asetat terbanyak dihasilkan pada suhu 35°C. Hal ini dengan sesuai dengan asas Le Chatelier pada proses reaksi kesetimbangan yakni apabila suhu meningkat maka arah reaksi akan mengarah berbalik menuju reaktan jika reaksi bersifat eksotermis [7]. Pada simulasi ini reaksi lebih baik dilakukan pada suhu 35°C dengan konversi mencapai 99.9%. Jumlah metil asetat akan berangsur turun sesuai dengan naiknya suhu reaksi sesuai pada Gambar 3.



Gambar 3. Grafik jumlah produksi metil asetat terhadap suhu reaksi

Simulasi menggunakan reaktor equilibrium dapat menambah jumlah metil asetat yang dihasilkan karena tidak terbatas oleh *fraction conversion* seperti pada *conversion reactor*. Hasil simulasi yang diperoleh lebih baik daripada simulasi dasar sebelumnya (konversi tercapai hingga 99.9%).

4. KESIMPULAN

Reaktor *equilibrium* pada pembuatan metil asetat dilakukan dengan berbagai macam *feed ratio* yaitu dari 1:1 hingga 1:9, dan didapatkan hasil terbaik pada rasio umpan 1:9. Dengan umpan yang terbaik disimulasikan kembali untuk mencari hasil maksimal pada variabel suhu yang berbeda dan didapatkan pada suhu 35 °C. Sehingga, reaktor *equilibrium* memiliki potensi untuk pengoptimalan kembali dalam mencari suhu yang lebih tepat untuk mendapatkan konversi yang lebih besar.

REFERENSI

- [1] Wibowo, Agung Ari., Lusiani, Cucuk Evi., Ginting., Rizqy Romadhona., Hartanto, Dhoni., 2018. *Simulasi CHEMCAD: Studi Kasus Distilasi Ekstraktif pada Campuran Ternern n-Propil Asetat/n-Propanol/Air*, Jurnal Teknik Kimia dan Lingkungan, Vol II, No.2, 77.
- [2] Ganesh, B., Rani, K Yamuna., Satyavathi, B., Venkateswarlu, CH., 2011, *Development of Kinetic Models for Acid-Catalyzed Methyl Acetate Formation Reaction: Effect of Catalyst Concentration and Water Inhibition*, International Journal of Chemical Kinetics, Vol. XLIII, No.5, 263-277.
- [3] Giwa, Abdulwahab., 2013, *Methyl Acetate Reactive Distillation Process Modeling, Simulation and Optimization Using Aspen Plus*, ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences, Vol. VIII, No.5, Mei.386.
- [4] Widodo, Hernowo., dan Maesaroh, Elsa., 2016, *Studi Kinetika Reaksi Metil Asetat dari Asam Asetat dan Metanol dengan Variabel Waktu, Konsentrasi Katalis dan Perbandingan Reaktan*, Jurnal Ilmiah WIDYA, Vol. III, No. 4, Agustus, 28-34.
- [5] Chemstation, Inc., 2006, *Physical Properties Version 5.6 Users Guide*, Chemstation, Houston.
- [6] Zuo, Cuncun., Pan, Langsheng., Cao, Shasha., Li, Chunshan., and Zhang, Suojiang., 2014, *Catalysts, Kinetics, and Reactive Distillation for Methyl Acetate Synthesis*, Industrial & Engineering Chemistry Research, Vol. XLIII, No 26. 10540.

- [7] Dasmeh, Pourta., Searless, Debra., Ajloo, Davood., Evans, Denis J., and Williams, Stephen R., 2009, *On violations of Le Chatelier's Principle for a Temperature Change in Small Systems Observed for Short Times*, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.131, No. XXI, 1.