

ASPEK PERTIMBANGAN DALAM SIMULASI FERMENTASI FASE GAS BERBASIS CFD

Bayu Triwibowo

^{1,2}Prodi Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Semarang, Jl Raya Sekaran, Gunungpati, Semarang 50229, Indonesia

*E-mail penulis: bayu.k46@gmail.com.

Abstract

In the midst of restrictions issue on the use of fossil fuels, the world began to move towards the use of renewable fuels. One such fuel is hydrogen. Hydrogen itself could synthesized from fermentation method. Complex phenomenon will be difficult to be analyzed simultaneously and comprehensively when using conventional techniques. Optimization would be important since yield hydrogen from fermentation method was very small. Cause of few obstacles such as comprehensive phenomenon data not exsted mades this process very difficult to optimize. Simulation of hydrogen fermentation based on CFD would be one of the solution to retrieve phenomenon data comprehensively

Keywords: hydrogen, fermentation, aspect of simulation, CFD

I. PENDAHULUAN

Pada era dimana isu lingkungan dan pembatasan pemakaian bahan bakar fosil pada industri maka pencarian bahan bakar alternatif yang ramah lingkungan menjadi salah satu pusat perhatian pada penelitian dewasa ini. Begitu banyak bahan bakar alternatif yang ditawarkan. Di indonesia sendiri sekarang mulai marak dikembangkan pemakaian bahan bakar yang masih melimpah seperti panas bumi, gas, batubara, hasil pengolahan limbah, dan hidrogen. Namun, pemakaian bahan bakar tersebut masih terbatas karena masih membutuhkan sosialisasi dan penyediaan fasilitas yang memadai.

Hidrogen merupakan salah satu bahan bakar alternatif yang sedang dikembangkan. Memang masih memiliki beberapa kendala terutama masalah penyimpanan (*storage*) dan yield yang terbatas. Hidrogen dapat disintesis dengan berbagai cara seperti elektrolisis dan fermentasi. Cara fermentasi sendiri memiliki kesulitan karena berhubungan dengan mikroba dan sulit diprediksi. Fenomena aliran dalam pelepasan gas hidrogen dari larutan induk juga sulit untuk dioptimasi karena ketidakadaan data yang komprehensif tentang proses di dalamnya. Gambaran yang lebih visual sangat sulit didapatkan. Salah satu cara untuk mengoptimasi proses dan mendapatkan data visual adalah dengan menggunakan metode *Computational Fluid Dynamics* (CFD).

CFD merupakan salah satu metode simulasi yang menggunakan serangkaian *governing equation* untuk mendekati fenomena sebenarnya pada sebuah proses. Telah ditemukannya persamaan-persamaan yang cukup presisi dirasa merupakan keunggulan

CFD untuk memodelkan sebuah fenomena. CFD juga mampu untuk menunjukkan fenomena secara angka dan visual. Pentingnya penggunaan CFD adalah untuk mengetahui fenomena secara komprehensif baik aspek kuantitatif dan kualitatif. Oleh karena itu, perlu diketahui persamaan yang digunakan dan strategi dasar dalam melakukan simulasi berbasis CFD khususnya dalam fermentasi hidrogen.

II. TINJAUAN PUSTAKA

Reaksi dan Fermentasi Hidrogen

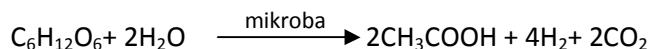
Hidrogen merupakan gas yang ramah lingkungan. Sangat cocok digunakan sebagai bahan bakar alternatif ditengah isu lingkungan terhadap industri. Gas hidrogen merupakan energi baru yang bersih dan efisien dengan energi yang dihasilkan sebesar 122 kJ/g. Ketika terbakar, hidrogen melepaskan energi berupa panas dan menghasilkan uap air sebagai bahan buangan serta tidak mengeluarkan karbon dioksida. Jadi, penggunaan hidrogen sebagai bahan bakar sangat membantu mengurangi polusi karbon dioksida sehingga dapat mengurangi efek rumah kaca, penipisan lapisan ozon atau hujan asam (Mahyudin dan Koesnandar, 2006).

Gas hidrogen merupakan gas sangat mudah terbakar dan akan terbakar pada konsentrasi terendah 4% H₂ di udara bebas (*Low Explosion Limit (LEL)*). Entalpi pembakaran hidrogen adalah -286 kJ/mol. Hidrogen terbakar menurut persamaan kimia (Young, 1991) :



Reaksi fermentasi untuk produksi H₂ menggunakan bakteri anaerobik yang dibiakkan dengan substrat yang kaya karbohidrat, dapat berlangsung pada suhu mesofil (25-40°C), termofil (40-65°C), termofil ekstrim (65-80°C) dan hypertermofil (>80 °C) (Mahyudin dan Koesnandar, 2006).

Glukosa yang difерентasi dapat menghasilkan hidrogen dengan jumlah beragam tergantung pada metode fermentasi dan produk akhirnya. Bila asam asetat sebagai produk akhir, maka diperoleh 4 mol H₂/mol glukosa berdasarkan reaksi berikut:



Bila butirat sebagai produk akhir maka akan dihasilkan 2 mol H₂/mol glukosa berdasarkan reaksi berikut: (Mahyudin dan Koesnandar, 2006)



Computational Fluid Dynamics (CFD)

Telah banyak *software* yang menjadi induk dari analisis berbasis CFD, dalam kasus ini digunakan persamaan dan pendekatan metode dengan basis perhitungan dari Fluent-ANSYS.

CFD merupakan analisa sistem yang melibatkan aliran fluida, perpindahan massa dan panas, serta fenomena yang terkait lainnya seperti reaksi kimia dengan menggunakan simulasi komputer. Metode ini dapat mensimulasikan sampai dengan fenomena yang berhubungan dengan sistem multifase, dispersi gas atau pergerakan partikel tersuspensi.

Secara umum, kerangka kerja CFD meliputi formulasi persamaan-persamaan transport yang berlaku, formulasi kondisi batas yang sesuai dan pemilihan strategi komputasi untuk mengimplementasikan teknik numerik yang digunakan. Suatu kode

CFD terdiri dari tiga elemen utama yaitu *pre-processor*, *solver* dan *post processor* (Versteeg dan Malalasekera, 1995).

Pre-processing meliputi masukan dari permasalahan aliran ke suatu program CFD dan transformasi dari masukan tersebut ke bentuk yang sesuai untuk digunakan oleh *solver*. Langkah-langkah dalam tahap ini meliputi:

- Pendefinisian geometri yang ingin dianalisa
- *Grid generation*, yaitu pembagian daerah domain menjadi bagian-bagian lebih kecil yang tidak tumpang tindih
- Memilih fenomena fisik dan kimia yang ingin dimodelkan
- Pendefinisian property fluida
- Pemilihan *boundary condition* (kondisi batas) pada kontrol volume atau sel yang berhimpit dengan batas domain

Secara umum metode *numeric solver* terdiri dari langkah-langkah sebagai berikut :

- Prediksi variable aliran yang tidak diketahui.
- *Diskretisasi* yaitu integrasi persamaan-persamaan pengendali (*governing equation*) sebuah kontrol volume menjadi persamaan diskret di titik tengah kontrol volume tersebut.
- Penyelesaian persamaan-persamaan diskret dalam bentuk persamaan aljabar linear.

Post processing merupakan tahap visualisasi dari tahapan sebelumnya. *Post processor* semakin berkembang dengan majunya *engineering workstation* yang mempunyai kemampuan grafik dan visualisasi cukup besar. Alat visualisasi tersebut antara lain :

- Plot vektor atau kontur dalam bentuk 2D dan 3D
- *Particle tracking*
- Manipulasi tampilan (translasi, skala dan sebagainya)
- Animasi *display* hasil dinamik

ASPEK PERTIMBANGAN DALAM SIMULASI CFD

Telah dijabarkan sebelumnya bahwa CFD merupakan sebuah kalkulator dengan serangkaian persamaan yang digunakan secara simultan dan numerik untuk memodelkan sebuah fenomena secara matematis. Maka pemetaan mengenai aspek yang mempengaruhi fenomena sangat penting dalam validasi dan keberhasilan simulasi.

Aspek Geometris

Aparatus untuk fermentasi hidrogen skala laboratorium biasanya dilakukan dalam sebuah tangki dimana didalamnya terjadi interaksi yang intens antara mikroba, substrat, dan *yeast* secara intens sehingga hidrogen dapat terbentuk.

Cakra (2011) melakukan penelitian tentang produksi biohidrogen dalam CSTR secara eksperiment dan simulasi menggunakan CFD. Dari hasil penelitian diperoleh bahwa pada *clearance* 0,25 H memberikan yield gas hidrogen yang paling tinggi. Pada eksperimen *double impeller*, yield gas H₂ tertinggi dicapai pada konfigurasi 0,25-0,5-0,25H. Hasil simulasi menunjukkan bahwa *clearance*, konfigurasi impeler dan kecepatan pengadukan yang berbeda, menghasilkan pola alir yang berbeda yang mempengaruhi intensitas turbulensi aliran dan distribusi kecepatan aliran biogas secara aksial. Selain itu juga berpengaruh pada laju alir massa biogas dan konsentrasi H₂ rata-rata di outlet. Penelitian ini membuktikan bahwa desain dari peralatan dapat berpengaruh terhadap proses fermentasi hidrogen. Terutama menyangkut faktor hidrodinamika.

Pemilihan Model Multifasa

Dalam kasus aliran multifase, ada dua pendekatan untuk perhitungan numerik yaitu:

Pendekatan Euler-Langrange

Pada pendekatan ini, *fluid phase* adalah kontinum dengan menyelesaikan *time-averaged Navier-Stokes equation* sedangkan fase terdispersi diselesaikan dengan melacak sejumlah besar partikel, gelembung, atau droplet melalui perhitungan medan aliran. Fasa terdispersi bisa bertukar momentum, massa dan energi dengan *fluid phase*. Asumsi dasar dari pemodelan ini adalah bahwa fasa terdispersi menempati fraksi volume yang lebih kecil. Lintasan partikel atau droplet dihitung secara individual pada selang waktu tertentu selama perhitungan *fluid phase*. Oleh karena itu model ini sesuai untuk memodelkan *spray dryer*, pembakaran batu bara, pembakaran bahan bakar cair, dan beberapa aliran partikel bermuatan, tetapi tidak cocok untuk memodelkan campuran cair-cair, *fluidized bed* atau aplikasi lainnya dimana fraksi volume fase kedua tidak dapat diabaikan.

Pendekatan Euler-Euler

Dalam pendekatan Euler-Euler, fase yang berbeda dianggap sebagai *interpenetrating continua*. Volume sebuah fase tidak dapat ditempati oleh fase lain, dimana volume fraksi ini diasumsikan merupakan fungsi dari ruang dan waktu dan jumlahnya sama dengan satu. Persamaan konservasi untuk setiap fase diturunkan untuk mendapatkan satu set persamaan yang memiliki struktur yang sama untuk semua fase. Ada tiga model multifasa untuk pendekatan Euler-Euler yaitu *volume of fluid* (VOF) model, *mixture model* dan *Eulerian model*. Ketiga model ini memiliki ke-khas-an masing-masing suku perhitungan sehingga digunakan untuk aplikasi yang berbeda-beda.

Species Transport dalam Pemodelan Multifase

ANSYS FLUENT dapat memodelkan pencampuran dan *species transport* kimia dengan menyelesaikan persamaan konservasi yang menjelaskan konveksi, difusi dan reaksi untuk masing-masing komponen. Ketika diinginkan menyelesaikan persamaan konservasi untuk spesies kimia, ANSYS FLUENT memprediksi fraksi massa lokal untuk masing-masing spesies, Y_i , dengan menyelesaikan persamaan difusi konveksi untuk spesies ke- i . Secara umum persamaannya dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho^q \alpha^q Y_i^q) + \nabla \cdot (\rho^q \alpha^q \vec{v}^q Y_i^q) = -\nabla \cdot \alpha^q \vec{j}_i^q + \alpha^q R_i^q + \alpha^q S_i^q + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{p^i q^j} - \dot{m}_{q^j p^i}) + \mathcal{R}(1)$$

dimana R_i^q adalah laju produksi spesies homogen i karena reaksi kimia untuk fase q , $\dot{m}_{q^j p^i}$ adalah transfer massa antara spesies i dan j dari fase q ke p dan \mathcal{R} adalah laju reaksi heterogen. α^q adalah fraksi volume untuk fase q dan S_i^q adalah laju yang ditambahkan dari fase terdispersi ditambah beberapa *user defined sources*. Sedangkan \vec{j}_i^q adalah difusi fluks dari spesies i untuk fase q yang muncul karena adanya gradien konsentrasi dan temperatur.

Pemodelan Turbulensi

Turbulensi adalah suatu keadaan dimana aliran fluida bersifat acak, kecepatan fluida di suatu titik selalu berubah-ubah terhadap waktu. Turbulensi adalah fenomena tiga dimensi, tergantung waktu dan non linear. Pada aliran turbulen, secara kontinu

terbentuk pusaran-pusaran besar yang kemudian terpecah menjadi pusaran-pusaran yang lebih kecil dan akhirnya menghilang.

Pemodelan turbulensi yang paling umum digunakan adalah *standard k-ε model* dimana model ini merupakan model semi empiris yang didasarkan pada model persamaan transport untuk energi kinetik turbulen (k) dan laju disipasi ($ε$). Dalam menurunkan model $k-ε$, asumsi yang digunakan adalah alirannya turbulen dan efek viskositas molekular diabaikan. Model $k-ε$ standar valid jika alirannya *fullyturbulent*. Energi kinetik turbulen k dan laju disipasi $ε$ diperoleh dari persamaan transport berikut ini:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] + G_k + G_b - \rho ε - Y_M + S_k \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho ε) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho ε u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_ε}\right)\frac{\partial ε}{\partial x_j}\right] + C_{1ε}\frac{ε}{k}(G_k + C_{3ε}G_b) - C_{2ε}\rho\frac{ε^2}{k} + S_ε \quad (3)$$

Persamaan Dasar Konversi

Momentum balance untuk fase q dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) &= -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \\ \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{vm,q}) \end{aligned} \quad (4)$$

dimana $\bar{\tau}_q$ adalah *stress-strain tensor* fase q yang dapat didefinisikan melalui persamaan berikut ini:

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left(\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \cdot \vec{v}_q \bar{I} \quad (5)$$

μ_q dan λ_q adalah *shear* dan *bulk viscosity* dari fase q , \vec{F}_q adalah *external body force*, $\vec{F}_{lift,q}$ adalah *lift force*, $\vec{F}_{vm,q}$ adalah *virtual mass force*, \vec{R}_{pq} adalah gaya interaksi antar fase dan p adalah tekanan.

Persamaan konservasi energi untuk aplikasi model Eulerian dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q h_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q h_q) &= \alpha_q \frac{\partial p_q}{\partial t} + \bar{\tau}_q : \nabla \vec{u}_q - \nabla \cdot \vec{q}_q + \\ S_q + \sum_{p=1}^n (\mathcal{Q}_{pq} + \dot{m}_{pq} h_{pq} - \dot{m}_{qp} h_{qp}) \end{aligned} \quad (6)$$

Dimana, h_q adalah entalpi spesifik dari fase q dan \vec{q}_q adalah *heat flux*, S_q adalah *source term* termasuk entalpi karena adanya reaksi atau radiasi, \mathcal{Q}_{pq} adalah intensitas transfer panas antara fase p dan q dan h_{pq} adalah entalpi antar fase (misal, entalpi uap pada temperatur *droplet* dalam kasus penguapan).

Metode Solver

Ada 2 metode numerik dalam ANSYS FLUENT :

1. Solver berbasis tekanan (*pressure-based solver*)
2. Solver berbasis densitas (*density-based solver*)

Pada kedua metode tersebut, medan kecepatan diperoleh dari persamaan momentum. Dalam pendekatan berbasis densitas, kecepatan diperoleh dari persamaan kontinuitas sedangkan pada pendekatan berbasis tekanan, kecepatan ditentukan dari

persamaan keadaan. Di sisi lain, pada pendekatan berbasis tekanan, tekanan diperoleh dengan memecahkan persamaan tekanan atau tekanan koreksi yang diperoleh dengan memanipulasi persamaan kontinuitas dan momentum. Dengan menggunakan metode tersebut, ANSYS FLUENT akan menyelesaikan persamaan integral untuk konservasi massa dan momentum, dan (jika perlu) untuk energi dan skalar lain seperti turbulensi dan spesies kimia.

Solver yang berbasis tekanan menggunakan algoritma umum yang disebut dengan metode proyeksi. Dalam metode proyeksi, dimana kendala konservasi massa (kontinuitas) dari kecepatan dicapai dengan menyelesaikan persamaan tekanan (atau koreksi tekanan). Persamaan tekanan diturunkan dari persamaan kontinuitas dan momentum sehingga kecepatan yang dikoreksi oleh tekanan, dapat sesuai dengan kontinuitas. Karena persamaannya nonlinier dan dihubungkan satu sama lain, maka proses penyelesaian melibatkan iterasi dimana seluruh himpunan persamaan diselesaikan berulang kali sampai dicapai konvergen.

Solver berbasis densitas menyelesaikan persamaan kontinuitas, momentum, dan (jika perlu) energi dan transportasi spesies secara bersamaan (digabungkan bersama-sama). Persamaan skalar tambahan akan diselesaikan sesudahnya dan berurutan (terpisah dari satu sama lain dan dari set gabungan). Karena persamaannya non-linear (dan digabung), beberapa iterasi dari loop solusi harus dilakukan sebelum solusi konvergensi diperoleh.

Strategi Dasar Simulasi: Penentuan *Pre-processor*, *Solver*, dan *Post-processor*

Tahap pre-processing :

1. Membuat model geometri
2. Membuat grid menggunakan meshing® untuk aliran fluida, dan mendefinisikan grid untuk interior solid.

Pada tahap solver yang perlu dilakukan :

1. Memilih jenis solver yang digunakan dengan jenis *pressure-based*
2. Memilih persamaan yang akan digunakan dengan model transient
3. Memodelkan turbulensi menggunakan *standard k-ε*
4. Memodelkan *system multiphase* menggunakan *eulerian model*
5. Mendefinisikan masing-masing fase yang akan digunakan dalam simulasi
6. Memasukkan properties masing-masing fase
7. Mendefinisikan material fase gas
8. Menentukan kondisi batas
9. Menginisialisasi system
10. Memilih solver/jenis persamaan dan orde persamaan
 - *pressure velocity coupling* menggunakan *phase coupled SIMPLE*
 - Gradient dimodelkan dengan *Green-Gauss Node based*
 - Persamaan momentum diselesaikan menggunakan *first order upwind*
 - Persamaan fraksi volume diselesaikan menggunakan *first order upwind*
 - Persamaan energy kinetic turbulen diselesaikan menggunakan *first order upwind*
 - Persamaan laju *turbulent dissipation* diselesaikan menggunakan *first order upwind*
 - System transient diformulasikan dengan *first order implicit condition*
11. Menghitung penyelesaian model matematis
12. *Under relaxation factors* yang digunakan untuk mengontrol penyelesaian disesuaikan.

III. KESIMPULAN

Kebutuhan akan bahan bakar alternatif selain bahan bakar fosil menjadikan hidrogen mulai banyak diteliti. Yield hidrogen melalui proses fermentasi sendiri sangat minimal dan sulit dioptimasi. Hal ini berkaitan dengan sulitnya penanganan proses yang berkaitan dengan mikroba dan minimalnya data yang komprehensif secara empiris dan visual terutama mengenai fenomena dalam proses fermentasi hidrogen. Ketersediaan persamaan-persamaan yang telah dibuktikan mampu memodelkan fenomena nyata secara matematis memungkinkan CFD menjadi alat untuk mengetahui fenomena secara detail pada fermentasi hidrogen. Apabila telah tersedia data yang komprehensif secara eksperimen dan simulasi, secara kuantitatif dan kualitatif, maka proses optimasi fermentasi hidrogen sebagai salah satu bahan bakar alternatif terbarukan yang sangat potensial dapat ditingkatkan secara eksponensial.

DAFTAR PUSTAKA

- Anggraini E.D. dan Renata S.(2011), *Pengaruh Faktor Hidrodinamika terhadap Proses Produksi Hidrogen Secara Fermentatif di Dalam Reaktor Berpengaduk*, Skripsi, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya.
- ANSYS Inc. (2011), Teory Guide of ANSYS FLUENT 14.0.
- Kinasih N.A., Safitri R.H. (2010), *Pengaruh Faktor Hidrodinamika terhadap Proses Produksi Hidrogen Secara Fermentatif di Dalam Reaktor Berpengaduk*, Skripsi, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya.
- Mahyudin A.R., Koesnandar (2006), “Biohydrogen Production: Prospects and Limitations to Practical Application”, *Akta Kimia Indonesia*, Vol. 1, No. 2, hal. 73-78.
- Marnof N. dan Subianto (2011), *Pengaruh Faktor Hidrodinamika (off-bottom clearance) terhadap Proses Produksi Hidrogen Secara Fermentatif di Dalam Reaktor Berpengaduk*, Skripsi, Institut Teknologi Sepuluh Nopember, Surabaya
- Nugroho, A., Widiyastuti, Altway, A., Winardi, S. (2004), “Pengukuran Kecepatan Kritis Impeller untuk Suspensi Solid-Liquid dengan Metode Konduktometri”, *Prosiding Seminar Nasional Teknik Kimia “Kejuangan” Pengembangan Teknologi Kimia untuk Pengolahan Sumber Daya Alam Indonesia*, ISSN 1693 – 4393.
- Nurtono T., Nirwana W.O.C., Anwar N., Kusdianto, Nia S.M., Widjaja A., Winardi S. (2012), “A Computational Fluid Dynamics (CFD) Study into Hydrodynamic Factor that Affects a Bio-Hydrogen Production Process in a Stirred tank Reactor”, *Procedia Engineering*, Vol. 50, hal.232 – 245.
- Versteeg H.K., Malalasekera W. (1995), *an Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Prentice Hall, London.
- Wahyu K Christina, Astried IG., (2011), “Pengaruh Faktor Hidrodinamika (Jenis Impeller) Terhadap Proses Produksi Hidrogen Secara Fermentatif Di Dalam Rektor Berpengaduk” Surabaya.
- Young, S.A. (1991), “Apparatus and Method For Generating Hydrogen and Oxygen By Electrolytic Dissociation of Water”, *United States Patent*, Patent Number 5037518