

# Perancangan dan Pembuatan Program Simulasi Kesetimbangan Termodinamika untuk Proses Gasifikasi Biomassa

Hari Ronaldo<sup>1</sup>, Zulfansyah<sup>2</sup>, dan Mazlani<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup>Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik, Universitas Riau

<sup>1</sup>[hari.ronaldo@lecturer.unri.ac.id](mailto:hari.ronaldo@lecturer.unri.ac.id), <sup>2</sup>[zulfansyah@lecturer.unri.ac.id](mailto:zulfansyah@lecturer.unri.ac.id), <sup>3</sup>[mazlani.mazlani@student.unri.ac.id](mailto:mazlani.mazlani@student.unri.ac.id)

## Abstrak

Program simulasi kesetimbangan termodinamika non-stoikiometri untuk proses gasifikasi biomassa dikembangkan dengan bahasa pemrograman Python. Program simulasi dilengkapi dengan antar muka program atau lebih dikenal sebagai GUI (*Graphical Users Interface*), untuk mempermudah interaksi pengguna dalam menggunakan program simulasi. Program dirancang untuk menghitung komposisi gas produser dengan 6 komponen yang terlibat, yaitu CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, dan H<sub>2</sub>O. Rancangan algoritma komputasi perhitungan model kesetimbangan termokimia non-stoikiometri dikonversi ke dalam kode program bahasa Python. GUI terdiri dari fasilitas input data dan output berupa tabel dan grafik hasil perhitungan. Fasilitas input data dirancang sedemikian rupa sehingga pengguna dapat memvariasikan input, yaitu suhu gasifikasi dan rasio equivalen. Hasil perhitungan keluaran program simulasi diverifikasi dengan data hasil perhitungan secara manual untuk meyakinkan bahwa tidak terjadi kesalahan dalam algoritma maupun penulisan kode program. Keluaran hasil perhitungan dari program simulasi juga dibandingkan dengan data hasil percobaan penelitian terdahulu untuk melihat keakuratan model termodinamika dalam memprediksi komposisi CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, dan H<sub>2</sub>. Program simulasi kesetimbangan termodinamika non-stoikiometri untuk proses gasifikasi biomassa dapat memprediksi komposisi gas produser dengan tingkat keakuratan yang cukup baik serta dapat dijadikan sebagai media pembelajaran dalam mempelajari kesetimbangan termodinamika.

Kata kunci: biomassa, GUI, komposisi syngas, non-stoikiometri, python

## Abstract

The non-stoichiometric thermodynamic equilibrium simulation program for the biomass gasification process was developed using the Python programming language. It is featured with a GUI (Graphical Users Interface), to facilitate user interaction. The program is designed to calculate the composition of gas producer with 6 components involved, they are CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, and H<sub>2</sub>O. The design of computational algorithms for calculating non-stoichiometric thermochemical equilibrium models is converted into Python code. The GUI consists of input and output facilities in form of tables and graphs of calculation results. The input facility is designed in such a way that the user can vary the gasification temperature and the equivalent ratio. The calculation results of the simulation program are verified with the calculated data manually to ensure that there are no errors in the algorithm or writing program code. It is also compared with the experimental data from previous studies to see the accuracy of the thermodynamic model in predicting the composition of gas producer. The non-stoichiometric thermodynamic equilibrium simulation program for the biomass gasification process can predict the composition of producer gas with a fairly good level of accuracy and can be used as a learning medium in studying thermodynamic equilibrium.

Keywords: biomass, GUI, syngas composition, non-stoichiometric, python

## 1. Pendahuluan

Biomassa merupakan sumber energi terbarukan yang dapat dikonversi menjadi *syngas* melalui proses gasifikasi biomassa. *Syngas* yang dihasilkan selanjutnya dapat digunakan sebagai bahan baku untuk mensintesis produk senyawa kimia lainnya. Gas yang keluar dari *gasifier* disebut dengan gas produser yang jenis dan komposisinya bergantung pada jenis agen gasifikasi yang digunakan seperti udara, uap, dan oksigen. Selain itu, konfigurasi dan kondisi operasi *gasifier* serta jenis biomassa yang digunakan juga mempengaruhi keluaran *gasifier* (Htut dkk., 2015).

Percobaan skala lab maupun pilot telah banyak dilakukan untuk mendapatkan rancangan optimal yang menghasilkan komposisi gas produser terbaik. Konversi kesetimbangan termodinamika dibutuhkan sebagai rujukan dalam mengukur tingkat keberhasilan dan kinerja gasifikasi. Konversi kesetimbangan termodinamika merupakan konversi maksimal yang dapat dicapai dan dapat dihitung menggunakan model kesetimbangan reaksi termodinamika. Model kesetimbangan non-stoikiometri merupakan salah satu model termodinamika yang dapat digunakan untuk

memprediksi komposisi gas produser pada gasifikasi biomassa. Model non-stoikiometri tidak membutuhkan data tentang reaksi-reaksi yang terlibat pada proses gasifikasi. Sehingga model tersebut banyak digunakan dalam simulasi kesetimbangan reaksi termodinamika.

Proses simulasi dengan teknik perhitungan manual sangatlah tidak mungkin untuk dilakukan, terlebih lagi jika proses simulasi tersebut melibatkan banyak persamaan matematis dan membutuhkan penyelesaian

### Info Makalah:

Dikirim : 06-10-21;

Revisi 1 : 07-13-21;

Diterima : 07-16-21.

### Penulis Korespondensi:

Telp : +62-8526-5904-741

e-mail : [hari.ronaldo@lecturer.unri.ac.id](mailto:hari.ronaldo@lecturer.unri.ac.id)

numerik. Dengan demikian peran ilmu komputasi dan komputer sangatlah penting dalam proses simulasi. Program simulasi dibangun menggunakan bahasa program, seperti C++, Java, C#, dan Python. Setiap bahasa program memiliki kelebihan dan kekurangan, serta pemilihan bahasa program bergantung pada produk yang akan dihasilkan. Python merupakan salah satu bahasa pemrograman *free* dan *open source* serta lintas platform (Raharjo, 2015). Sintak dan simantik bahasa Python sangat sederhana sehingga banyak digunakan di tingkat akademisi dalam pengajaran pemrograman. Selain itu, sudah banyak pustaka python yang mendukung kebutuhan komputasi teknik seperti matplotlib, numpy dan scipy. Python juga mendukung pembuatan program berbasis GUI menggunakan pustaka seperti Tkinter, Pyside2, dan WxPython. Meskipun demikian masih jarang dijumpai baik literatur maupun program simulasi yang dikembangkan menggunakan Python untuk komputasi teknik maupun dalam pembuatan program simulasi..

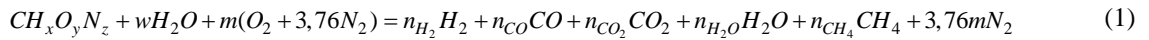
Ada banyak program simulasi untuk kebutuhan teknik kimia yang sudah komersial, namun sangat jarang yang bersifat *free* dan *opensource*. Sehingga pengembangan dari program tersebut hanya bergantung dari perusahaan pengembangnya. Dengan demikian program simulasi kesetimbangan termodinamika non-stoikiometri akan lebih baik jika dibangun dengan bahasa Python.

Penelitian ini bertujuan untuk membuat program simulasi kesetimbangan termodinamika non-stoikiometri untuk proses gasifikasi biomassa yang dilengkapi dengan GUI untuk memudahkan pengguna dalam mengoperasikan program. Program simulasi yang dihasilkan bersifat *open source*. Kode program diunggah di portal Github agar dapat dipelajari dan dikembangkan secara berkala dan kolaborasi.

## 2. Metode

### Identifikasi Sistem

Simulasi proses gasifikasi biomassa diterapkan dengan asumsi-asumsi, yaitu sistem tunak. Biomassa dianggap terdiri dari unsur C, H, O, dan N sehingga molekul  $CH_xO_yN_z$  sebagai model molekul untuk biomassa. Reaksi dalam sistem terjadi dalam kondisi setimbang, produk yang dihasilkan adalah metana ( $CH_4$ ), karbon monoksida (CO), karbon dioksida ( $CO_2$ ), hidrogen ( $H_2$ ), nitrogen ( $N_2$ ), dan air ( $H_2O$ ), dan semua gas yang terlibat dalam proses dianggap sebagai gas ideal. Karena itu, seluruh reaksi yang terjadi di dalam proses gasifikasi biomassa dapat digambarkan dalam reaksi global pada Persamaan 1.



### Minimisasi Energi Bebas Gibbs

Proses simulasi non-stoikiometri tidak membutuhkan data mekanisme reaksi. Kondisi kesetimbangan yang stabil dalam sistem pereaksi akan tercapai ketika energi bebas Gibbs bernilai minimum. Metode non-stoikiometri berprinsip pada minimisasi energi bebas Gibbs total. *Input* yang dibutuhkan pada metode non-stoikiometri adalah komposisi unsur umpan hasil dari analisis *ultimate*, suhu referensi ( $T_r$ ), konstanta universal ( $R$ ), massa atom relatif setiap unsur ( $M_{r_j}$ ), kapasitas panas ( $C_p$ ) setiap komponen yang terdiri dari nilai A, B, C, dan D, Entalpi standar ( $\Delta H_{f,i}(T_r)$ ) dan energi Gibbs pembentukan ( $\Delta G_{f,i}(T_r)$ ) tiap komponen. Jumlah karbon yang diketahui dari analisis *ultimate* harus sama dengan jumlah total semua karbon dalam campuran gas yang dihasilkan. Sehingga untuk setiap unsur  $j$ , dinyatakan pada Persamaan 2.

$$\sum_{i=1}^N a_{i,j}n_i = A_j \quad (2)$$

di mana  $a_{i,j}$  adalah jumlah atom dari unsur  $j$  dalam spesies  $i$ , dan  $A_j$  adalah jumlah total atom unsur yang memasuki reaktor. Masalah optimisasi ini memiliki dua kelompok batasan yaitu neraca massa unsur dan non-negatifitas jumlah mol  $n_i$  dari senyawa kimia gas produser. Empat neraca massa dari setiap unsur pada Persamaan 1 dinyatakan pada Persamaan 3 – 6.

$$A_C = n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} \quad (3)$$

$$A_H = 4n_{CH_4} + 2n_{H_2} + 2n_{H_2O} \quad (4)$$

$$A_O = n_{CO} + 2n_{CO_2} \quad (5)$$

$$A_N = 2n_{N_2} \quad (6)$$

Dimana  $A_C$ ,  $A_H$ ,  $A_O$ , dan  $A_N$  adalah jumlah mol unsur C, H, O, dan N pada umpan. Jumlah mol unsur O dan unsur N pada umpan bergantung pada jumlah mol unsur O dan N pada biomassa dan agen gasifikasi maka  $A_O$  dan  $A_N$  dapat dituliskan dalam fungsi rasio ekuivalen dan komposisi agen gasifikasi yang dapat dinyatakan pada Persamaan 7 dan 8.

$$A_O = F_O + \alpha\beta \quad (7)$$

$$A_N = F_N + \alpha\beta\theta \quad (8)$$

Dimana  $F_O$  merupakan jumlah mol unsur oksigen pada biomassa,  $F_N$  merupakan jumlah mol unsur nitrogen pada biomassa,  $\alpha$  merupakan rasio ekuivalen,  $\beta$  merupakan rasio antara nitrogen dan oksigen pada agen gasifikasi, dan  $\theta$  merupakan jumlah kebutuhan oksigen untuk pembakaran sempurna yang dapat dinyatakan dengan Persamaan 9.

$$\theta = 2F_C + 0,5F_H \quad (9)$$

Koefisien 2 dan 0,5 pada  $F_C$  dan  $F_H$  berasal dari jumlah mol unsur O yang dibutuhkan untuk pembakaran sempurna setiap mol unsur tersebut. Satu mol unsur C membutuhkan 2 mol unsur O untuk membentuk  $CO_2$  dan satu mol unsur H membutuhkan 0,5 mol unsur O untuk membentuk  $H_2O$ .  $F_C$  dan  $F_H$  merupakan jumlah mol unsur C dan H pada biomassa yang nilainya sama dengan  $A_C$  dan  $A_H$  jika agen gasifikasi hanya terdiri dari komponen oksigen dan nitrogen.  $F_C$ ,  $F_H$ ,  $F_O$ , dan  $F_N$  dapat dihitung dengan menggunakan Persamaan 10.

$$F_i = \frac{w_i W}{M_i}, (i = C, H, O, N) \quad (10)$$

Menghitung energi bebas Gibbs tiap komponen ( $\Delta G_{f,i}^0$ ) yang dinyatakan pada Persamaan 11.

$$\Delta G^o = \Delta H^o - T\Delta S^o \quad (11)$$

Hubungan panas reaksi standar dengan suhu dinyatakan pada Persamaan 12.

$$\Delta H^o = \Delta H_0^o + R \int_{T_0}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} dT \quad (12)$$

Ketergantungan suhu terhadap perubahan entropi standar dari reaksi dikembangkan secara serupa.

$$dS = C_p \frac{dT}{T} - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_p dP \quad (13)$$

Persamaan 13 ditulis untuk entropi keadaan standar dari spesies  $i$  pada keadaan standar  $P$  konstan yang dinyatakan pada Persamaan 14.

$$d\Delta S^o = \Delta C_p^o \frac{dT}{T} \quad (14)$$

Hasil integrasi Persamaan 14 dinyatakan pada Persamaan 15.

$$\Delta S^o = \Delta S_0^o + R \int_{T_0}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} \frac{dT}{T} \quad (15)$$

Dimana  $\Delta S^o$  dan  $\Delta S_0^o$  adalah perubahan entropi standar reaksi pada suhu  $T$  dan pada suhu referensi  $T_0$  masing-masing. Penggabungan Persamaan 11, 12, dan 15 dinyatakan pada Persamaan 16.

$$\Delta G^o = \Delta H_0^o + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} dT - T\Delta S_0^o - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} \frac{dT}{T} \quad (16)$$

Dimana,

$$\Delta S_0^o = \frac{\Delta H_0^o - \Delta G_0^o}{T} \quad (17)$$

sehingga,

$$\Delta G^o = \Delta H_0^o - \frac{T}{T_r} (\Delta H_0^o - \Delta G_0^o) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} \frac{dT}{T} \quad (18)$$

Suku-suku integral pada Persamaan 18, dinyatakan dalam Persamaan 19 dan 20.

$$\int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} dT = \left( A + \frac{B}{2} T_r (\tau + 1) + \frac{C}{3} T_r^2 (\tau^2 + \tau + 1) + \frac{D}{\tau T_r^2} \right) \times (T - T_r) \quad (19)$$

$$\int_{T_r}^T \frac{\Delta C_p^o}{R} dT = \left( A + \left[ B T_r + \left( C T_r^2 + \frac{D}{\tau^2 T_r^2} \right) \left( \frac{\tau + 1}{2} \right) \right] \left( \frac{\tau - 1}{\ln \tau} \right) \right) \times \ln \tau \quad (20)$$

dimana,  $\tau = \frac{T}{T_r}$

Energi bebas pembentukan tiap komponen dapat disusun sebagai berikut:

$$\Delta G_{CH_4}(T) = \Delta H_{f,CH_4}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,CH_4}(T_r) - \Delta G_{f,CH_4}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCH_4}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCH_4}}{R} \frac{dT}{T} \quad (21)$$

$$\Delta G_{CO}(T) = \Delta H_{f,CO}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,CO}(T_r) - \Delta G_{f,CO}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCO}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCO}}{R} \frac{dT}{T} \quad (22)$$

$$\Delta G_{CO_2}(T) = \Delta H_{f,CO_2}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,CO_2}(T_r) - \Delta G_{f,CO_2}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCO_2}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pCO_2}}{R} \frac{dT}{T} \quad (23)$$

$$\Delta G_{H_2}(T) = \Delta H_{f,H_2}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,H_2}(T_r) - \Delta G_{f,H_2}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pH_2}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pH_2}}{R} \frac{dT}{T} \quad (24)$$

$$\Delta G_{N_2}(T) = \Delta H_{f,N_2}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,N_2}(T_r) - \Delta G_{f,N_2}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pN_2}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pN_2}}{R} \frac{dT}{T} \quad (25)$$

$$\Delta G_{H_2O}(T) = \Delta H_{f,H_2O}(T_r) - \frac{T}{T_r} (\Delta H_{f,H_2O}(T_r) - \Delta G_{f,H_2O}(T_r)) + R \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pH_2O}}{R} dT - RT \int_{T_r}^T \frac{\Delta C_{pH_2O}}{R} \frac{dT}{T} \quad (26)$$

Energi bebas Gibbs total untuk masing-masing gas produk gasifikasi yang terdiri dari  $N$  spesies ( $i = 1, \dots, N$ ) dinyatakan pada Persamaan 27.

$$G_{total} = \sum_{i=1}^N n_i \Delta G_{f,i}^0 + n_i RT \ln \left( \frac{n_i}{\sum_{i=1}^N n_i} \right) \quad (27)$$

Energi bebas Gibbs total dari sistem kompleks secara matematis harus bernilai minimum dengan menghitung nilai  $n_i$  yang tidak diketahui. Masalah optimasi ini dapat diselesaikan dengan menggunakan metode pengali Lagrange. Metode non-stoikiometri dengan empat unsur memiliki empat Pengali Lagrange yang dinyatakan sebagai  $\lambda_C$ ,  $\lambda_H$ ,  $\lambda_O$ , dan  $\lambda_N$ . Fungsi Lagrange  $L$  dapat dinyatakan pada Persamaan 28.

$$L = G_{total} - \sum_{j=1}^k \lambda_j \left( \sum_{i=1}^N a_{i,j} n_i - A_j \right) \quad (28)$$

Fungsi ini bernilai minimum jika semua turunan parsialnya bernilai nol. Kondisi tersebut dapat ditulis sebagai sistem 10 persamaan, 6 diantaranya non-linear. Persamaan linear dan nonlinear pada program diselesaikan menggunakan fungsi yang tersedia pada pustaka `scipy.optimize.fsolve` Python 3.7 untuk menghitung komposisi mol gas produser yaitu metana, karbon monoksida, karbon dioksida, hidrogen, nitrogen, dan air.

`Scipy.optimize` adalah pustaka program yang menyediakan fungsi `fsolve` untuk untuk menyelesaikan sistem persamaan linear dan nonlinear, baik yang memiliki batasan maupun tanpa batasan (Nagar, 2017). Sebagai contoh, fungsi `fsolve` digunakan untuk menemukan akar (nol) dari sistem persamaan non-linear.

$$f(x) = 0 \quad (29)$$

Dimana  $x$  adalah vektor dan  $f(x)$  adalah fungsi yang mengembalikan nilai vektor. Sintak penggunaan fungsi *fsolve* adalah,

`x = fsolve(fun, x_tebakan)`

`fun` adalah fungsi penol yang akan diselesaikan dengan nilai tebakan awal yaitu `x_tebakan`. Fungsi *fsolve* digunakan untuk menyelesaikan sistem 10 persamaan, yaitu Persamaan 30 – 39.

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{CH_4}} \right) = \Delta G_{CH_4}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{CH_4}}{n_{total}} \right) - \lambda_C - 4\lambda_H = 0 \quad (30)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{CO}} \right) = \Delta G_{CO}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{CO}}{n_{total}} \right) - \lambda_C - \lambda_O = 0 \quad (31)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{CO_2}} \right) = \Delta G_{CO_2}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{CO_2}}{n_{total}} \right) - \lambda_C - 2\lambda_O = 0 \quad (32)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{H_2}} \right) = \Delta G_{H_2}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{H_2}}{n_{total}} \right) - 2\lambda_H = 0 \quad (33)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{N_2}} \right) = \Delta G_{N_2}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{N_2}}{n_{total}} \right) - 2\lambda_N = 0 \quad (34)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial n_{H_2O}} \right) = \Delta G_{H_2O}(T) + RT \ln \left( \frac{n_{H_2O}}{n_{total}} \right) - 2\lambda_H - \lambda_O = 0 \quad (35)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \lambda_C} \right) = n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} - A_C \quad (36)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \lambda_H} \right) = 4n_{CH_4} + 2n_{H_2} + 2n_{H_2O} - A_H \quad (37)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \lambda_O} \right) = n_{CO} + 2n_{CO_2} - A_O \quad (38)$$

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \lambda_N} \right) = 2n_{N_2} - A_N \quad (39)$$

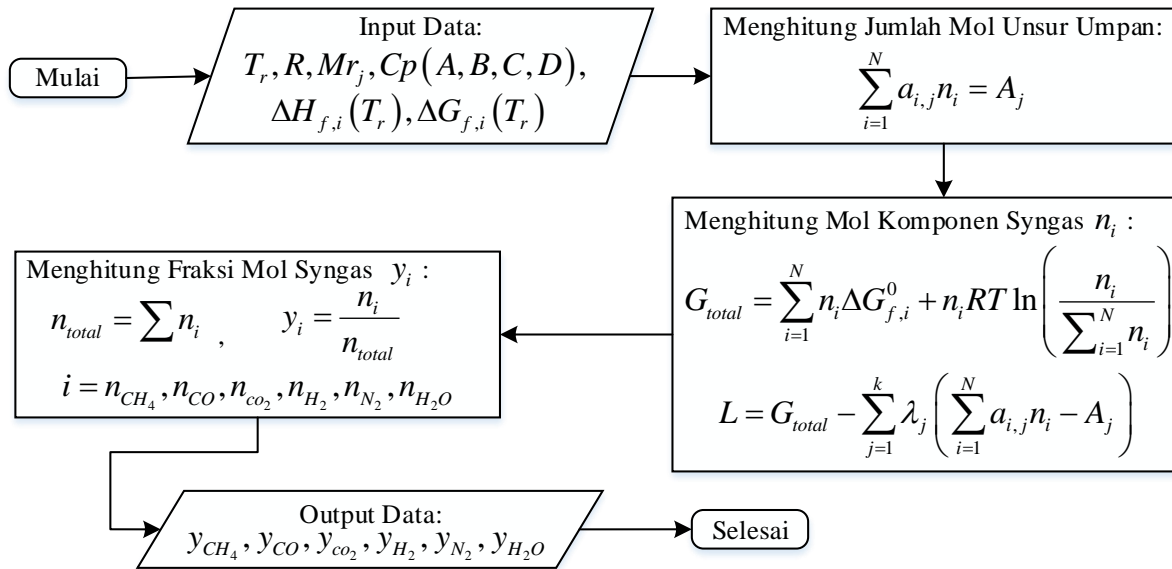
Dimana:

$$n_{total} = n_{CH_4} + n_{CO} + n_{CO_2} + n_{H_2} + n_{N_2} + n_{H_2O} \quad (40)$$

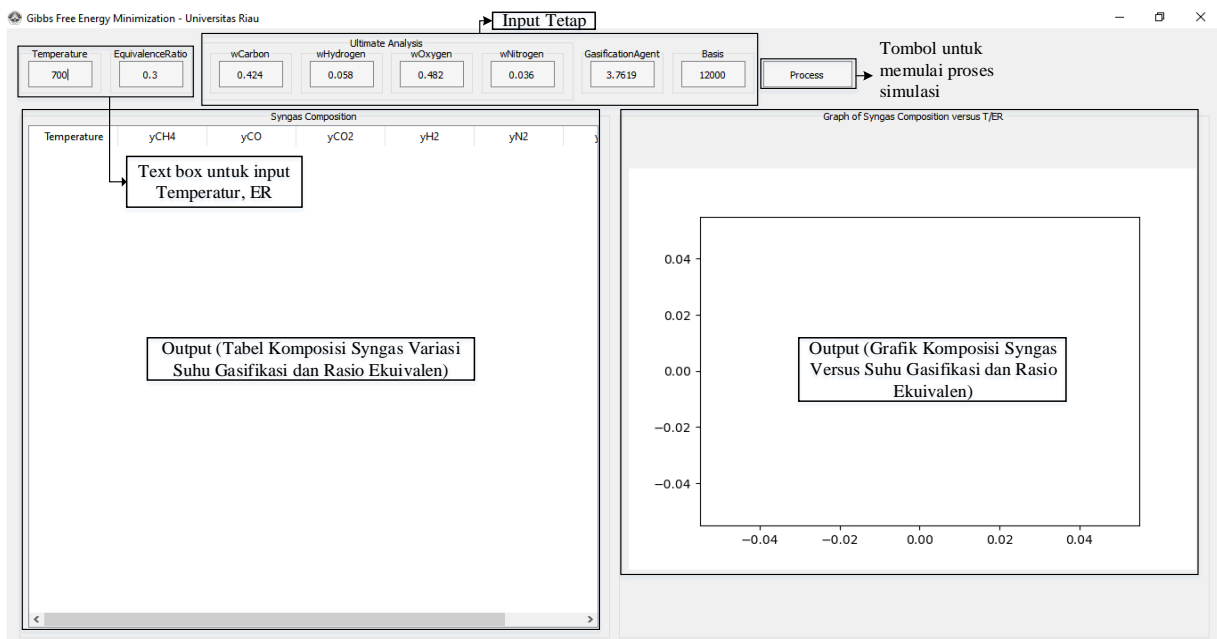
Untuk menghitung fraksi mol masing-masing komponen dapat digunakan Persamaan 41.

$$y_i = \frac{n_i}{n_{total}} \quad (41)$$

Algoritma perhitungan model kesetimbangan termodinamika non-stoikiometri proses gasifikasi biomassa dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1. Algoritma Perhitungan Model Kesetimbangan Termodinamika Non-stoikiometri Proses Gasifikasi Biomassa.



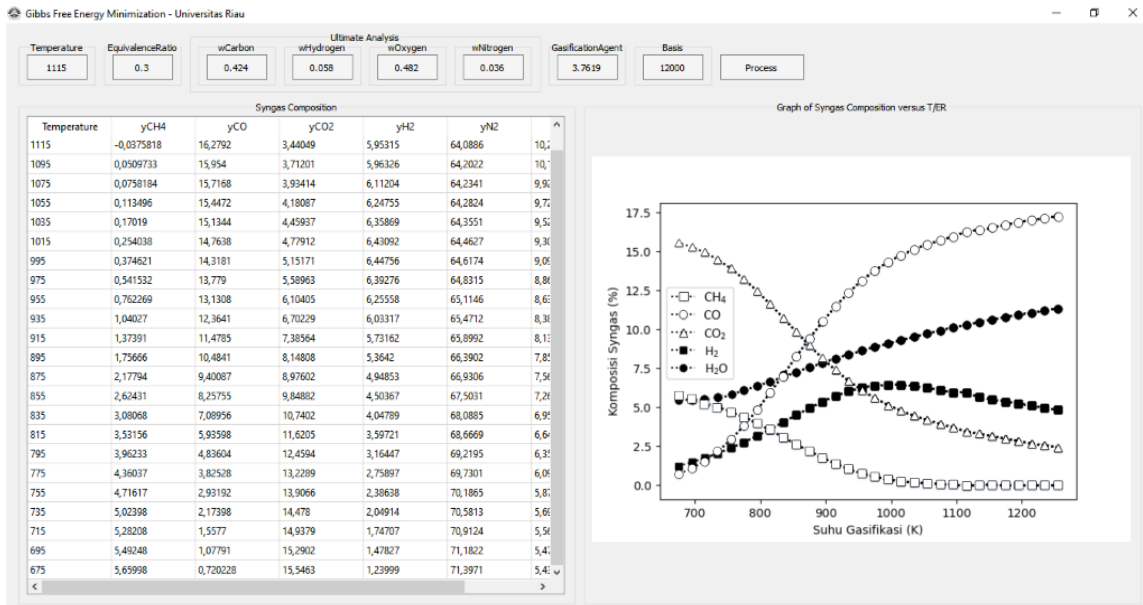
Gambar 2. Rancangan Antar Muka Program Simulasi Kesetimbangan Termikimia Non-stoikiometri Gasifikasi Biomassa

### Perancangan GUI

GUI merupakan antar muka pengguna untuk proses *input-output data*. Pustaka program yang digunakan untuk membuat GUI adalah *PySide2*, karena dapat digunakan secara gratis dan mendukung program berbasis Python. Rancangan GUI program minimasi energi bebas Gibbs dapat dilihat pada Gambar 2. Data input yang dibutuhkan untuk proses simulasi adalah Temperatur gasifikasi dan ER yang terletak di sudut kiri GUI. Kemudian data hasil analisis *ultimate* biomassa ( $w_j$ ) berdasarkan *dry weight basis* yang merupakan data komposisi unsur penyusun biomassa, yaitu C, H, O, dan N, rasio antara nitrogen dan oksigen pada agen gasifikasi ( $\beta$ ), dan basis ( $W$ ). Setelah semua data yang dibutuhkan untuk simulasi diinput, pengguna dapat menekan tombol *Process* yang terdapat pada GUI untuk memulai simulasi, dan hasil simulasi ditampilkan dalam bentuk tabel yang berisi data komposisi gas produser ( $y_i$ ) (kiri bawah GUI) dan grafik ER/T VS  $y_i$  (kanan bawah GUI).

### 3. Hasil dan Pembahasan

Program simulasi yang telah dibuat dijalankan dengan data awal berdasarkan penelitian yaitu analisa *ultimate* pelepah sawit C, H, N, O masing-masing adalah 42,4%, 5,8%, 3,6%, 48,2%, agen gasifikasi 3,7619 dengan basis 12000 gram. Hasil simulasi secara keseluruhan dapat dilihat pada Gambar 3.

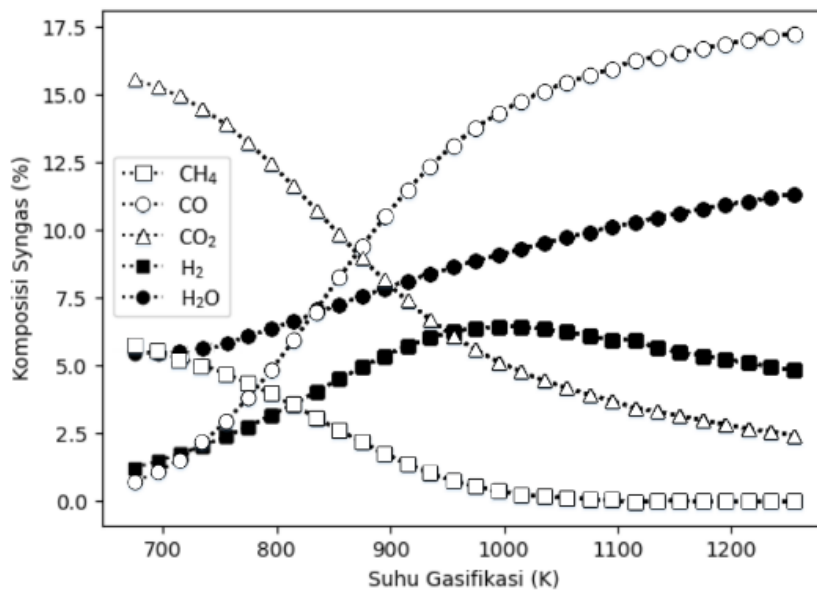


Gambar 3. Program Simulasi Setelah Dijalankan

Program simulasi dapat digunakan untuk menganalisa pengaruh dari variasi temperatur gasifikasi dan ER. Pengguna program dapat mengganti temperatur dan ER pada antar muka GUI yang tersedia, kemudian menekan tombol proses untuk menghitung kembali komposisi gas produser. Data hasil simulasi sebelumnya tetap terekam pada tabel antar muka GUI, dan grafik akan diperbaharui secara otomatis sesuai dengan data yang terdapat pada tabel GUI.

#### Pengaruh Suhu Gasifikasi terhadap Komposisi Gas Produser

Temperatur memiliki peran penting dalam proses gasifikasi biomassa secara keseluruhan karena mempengaruhi reaksi kesetimbangan yang terlibat dalam proses gasifikasi biomassa. Meskipun temperatur merupakan parameter penting dalam proses gasifikasi biomassa, temperatur merupakan parameter yang tidak dapat dikontrol secara langsung dalam sistem nyata, sehingga temperatur bergantung pada rasio ekuivalen (Silva dkk., 2019). Grafik pengaruh suhu gasifikasi terhadap komposisi gas produser diperlihatkan pada Gambar 4.



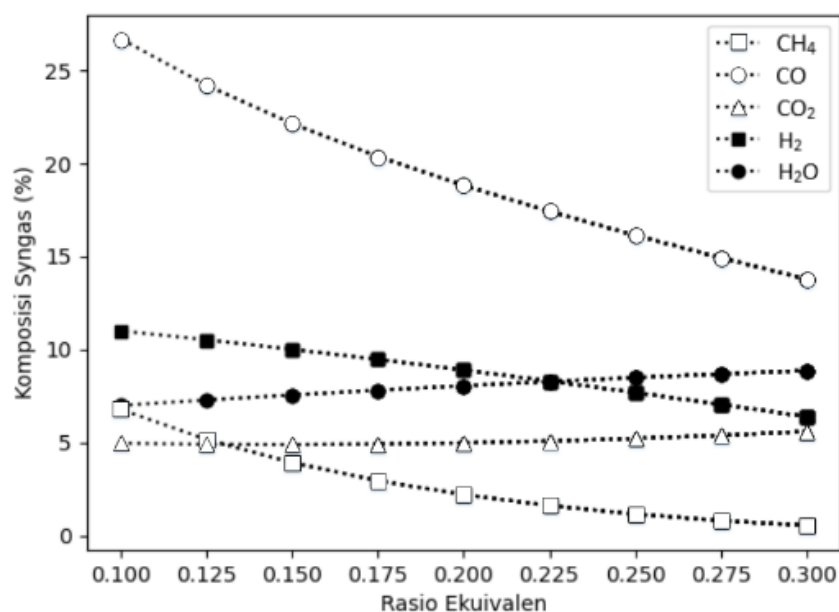
Gambar 4. Pengaruh Suhu Gasifikasi Terhadap Komposisi Syngas pada Rasio Ekuivalen 0,30

Gambar 4 memperlihatkan bahwa semakin tinggi suhu gasifikasi maka komposisi gas  $\text{CH}_4$  mengalami penurunan yang disebabkan karena peningkatan suhu gasifikasi meningkatkan perengkahan termal kandungan tar ke dalam gas produk dan meningkatkan reaksi endotermik seperti pembentukan kembali uap  $\text{CH}_4$ .  $\text{CO}$  mengalami peningkatan komposisi seiring dengan peningkatan suhu gasifikasi yang disebabkan karena peningkatan suhu reaksi mendukung produk dalam reaksi endotermik yang berarti lebih banyak menghasilkan gas  $\text{CO}$  dan  $\text{H}_2$  yang sesuai dengan prinsip Le Chatelier (Tian dkk., 2018).

$\text{CO}_2$  mengalami penurunan komposisi seiring dengan peningkatan suhu gasifikasi. Komposisi  $\text{CO}_2$  yang tinggi pada suhu rendah disebabkan oleh pengaruh reaksi pergeseran air-gas yang, sedangkan pada suhu tinggi reaksi Boudouard menjadi dominan yang mengarah pada pengurangan komposisi  $\text{CO}_2$  (Yahaya dkk., 2019).  $\text{H}_2$  mengalami peningkatan komposisi hingga suhu 1075 K kemudian mengalami penurunan komposisi hingga suhu 1255 K. Peningkatan komposisi  $\text{H}_2$  dapat dijelaskan berdasarkan prinsip Le Chatelier yang sama seperti peningkatan komposisi  $\text{CO}$ .

### Pengaruh Rasio Ekuivalen terhadap Gas Produser

Rasio ekuivalen (ER) adalah parameter yang mengkuantifikasi jumlah udara/oksigen per unit massa bahan bakar, dibandingkan dengan jumlah teoritis udara/oksigen yang dibutuhkan untuk pembakaran sempurna (Atnaw dkk., 2013). Grafik pengaruh rasio ekuivalen terhadap komposisi *syngas* dapat dilihat pada Gambar 5.



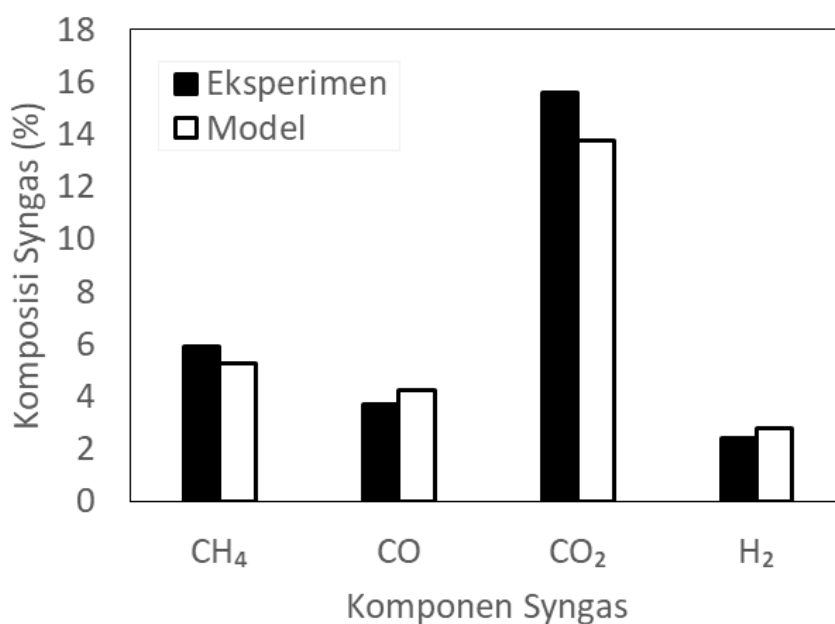
Gambar 5. Pengaruh Rasio Ekuivalen Terhadap Komposisi *Syngas* pada Suhu Gasifikasi 975 K

Gambar 5 memperlihatkan bahwa dengan meningkatnya ER maka kandungan gas utama yang mudah terbakar yaitu  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}$ , dan  $\text{H}_2$  menurun, sedangkan kandungan  $\text{CO}_2$  meningkat. Hal tersebut disebabkan karena, ketika ER meningkat jumlah oksigen yang disuplai dalam reaktor meningkat. Komponen gas yang dihasilkan selama proses gasifikasi terbakar jika terjadi peningkatan oksigen dan penurunan kandungan gas yang mudah terbakar. Sehingga suhu di dalam reaktor meningkat. Peningkatan ER berpengaruh baik pada kenaikan maupun penurunan kandungan gas yang mudah terbakar dalam gas tersebut (Lan dkk., 2019).

### Verifikasi Model dengan Eksperimen

Data hasil pemodelan dibandingkan dengan data hasil eksperimen, hal ini bertujuan untuk melihat keakuratan model dengan eksperimen. Data pembandingan yang digunakan adalah data dari eksperimen yang dilakukan oleh (Atnaw dkk., 2013). Jenis biomassa yang disimulasi adalah pelepah sawit pada suhu gasifikasi 775 K dan ER 0,27. Grafik perbandingan komposisi *Syngas* antara hasil pemodelan dan eksperimen (Atnaw dkk., 2013) dapat dilihat pada Gambar 6.





Gambar 6. Perbandingan Komposisi *Syngas* antara Hasil Eksperimen Atnaw dkk. (2013) dengan Hasil Model

Gambar 6 dapat dijelaskan bahwa komposisi gas yang diperoleh dari hasil pemodelan memperlihatkan kesamaan *trend* terhadap komposisi gas yang dihasilkan dari eksperimen. Perbedaan ini diakibatkan karena komposisi biomassa (pelepah sawit) yang diinputkan pada model merupakan analisis *ultimate* biomassa berdasarkan *dry weight basis* yang memberikan data komposisi unsur penyusun biomassa seperti C, H, O, dan N dengan kadar air 0%. Biomassa yang digunakan pada eksperimen untuk proses gasifikasi dengan kadar air  $16 \pm 2\%$ . Keakuratan komposisi gas hasil pemodelan untuk setiap komponen CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, dan H<sub>2</sub> secara berturut-turut adalah 88,96%; 85,54%; 88,06%; dan 83,91%.

### Kesimpulan

Python merupakan bahasa pemrograman yang mudah digunakan. Program simulasi kestimbangan termodinamika dengan model non-stoikiometri dapat dijalankan dengan baik, mampu digunakan untuk mempelajari pengaruh dari temperatur, dan ER, serta memiliki tingkat keakuratan yang baik jika dibandingkan dengan hasil percobaan. Program simulasi ini dapat dikembangkan lebih lanjut dengan penambahan fitur berupa pemodelan dan simulasi *gasifier*. Kode program secara lengkap dapat diakses pada portal Github dengan alamat <https://github.com/Mazlanizn/PyGibbs>.

### Ucapan Terima Kasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada komunitas Python yang aktif diberbagai *platform online* yang tidak dapat disebutkan satu persatu. Berkat berbagi ilmu dan pengetahuan dari komunitas *online* Python penelitian ini dapat terlaksana.

### Daftar Notasi

$i$	= Mol unsur ke- $i$
$j$	= Mol unsur ke- $j$
$y_i$	= Fraksi mol untuk spesies $i$ [%]
$k$	= Konstanta kestimbangan [mol/L]
$n_i$	= Jumlah mol senyawa
$P$	= Tekanan [Atm]
$P_0$	= Tekanan pada keadaan standar [Atm]
$\Delta G$	= Energi bebas Gibbs dari reaksi pada suhu tertentu [J.mol <sup>-1</sup> ]
$\Delta H$	= Entalpi dari reaksi pada suhu tertentu [J.mol <sup>-1</sup> ]
$\Delta S$	= Entropi dari reaksi pada suhu tertentu [J.mol <sup>-1</sup> ]
$A$	= Faktor pra-eksponensial [s <sup>-1</sup> ]
$E_a$	= Energi aktivasi [J.mol <sup>-1</sup> ]
$T$	= Suhu [K]
$R$	= Konstanta gas universal [J.mol <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]
$\Delta G_{f,i}^0$	= Energi bebas Gibbs dari pembentukan spesies $i$ [J.mol <sup>-1</sup> ]

- $a_{i,j}$  = Jumlah atom dari unsur  $j$ th dalam spesies  $i$ th  
 $A_j$  = Jumlah total atom unsur yang memasuki reaktor  
 $L$  = Fungsi Lagrange  
 $\lambda_j$  = Pengali Lagrangian untuk elemen  $j$

#### Daftar Pustaka

- Atnaw, S. M., Sulaiman, S. A., & Yusup, S. (2013). Syngas production from downdraft gasification of oil palm fronds. *Energy*, *61*, 491-501.
- Htut, Y. M., Khine, M. M., & Win, M. M. (2015). Using a Simple Modeling and Simulation Scheme for Complicated Gasification System. *International Journal of Scientific and Research Publications*, *1(12)*, 2250-3153.
- Lan, W., Chen, G., Zhu, X., Wang, X., Wang, X., & Xu, B. (2019). Research on the characteristics of biomass gasification in a fluidized bed. *Journal of the Energy Institute*, *92(3)*, 613-620.
- Raharjo, B. (2015). *Mudah belajar python untuk aplikasi desktop dan web*. Bandung, Indonesia: Informatika.
- Silva, I. P., Lima, R. M., Silva, G. F., Ruzene, D. S., & Silva, D. P. (2019). Thermodynamic equilibrium model based on stoichiometric method for biomass gasification: A review of model modifications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *114(8)*, 109305.
- Tian, Y., Zhou, X., Lin, S., Ji, X., Bai, J., & Xu, M. (2018). Syngas production from air-steam gasification of biomass with natural catalysts. *Science of The Total Environment*, *645*, 518-523.
- Yahaya, A. Z., Somalu, M. R., Muchtar, A., Sulaiman, S. A., & Daud, W. R. W. (2019). Effect of particle size and temperature on gasification performance of coconut and palm kernel shells in downdraft fixed-bed reactor. *Energy*, *175*, 931-940.
- Nagar, S. (2017). *Introduction to Python for Engineers and Scientists: Open Source Solutions for Numerical Computation*. New York: Appers.
- Smith, J. M., van Ness, H. C., & Abbott, M. M. (2001). *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. New York, USA: McGraw-Hill Higher Education.