SIMULASI NUMERIK MODEL KESEIMBANGAN MASSA PADA SUATU REAKTOR

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Matematika

oleh
ROHMIA DWI AGUSTIN
0810940017

PROGRAM STUDI MATEMATIKA
JURUSAN MATEMATIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG

2013

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

SIMULASI NUMERIK MODEL KESEIMBANGAN MASSA PADA SUATU REAKTOR

oleh
ROHMIA DWI AGUSTIN
0810940017

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji
pada tanggal 29 Januari 2013
dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Matematika

Pembimbing I	Pembimbing II
Dr. Wuryansari M. K., M.Si.	**Kwardiniya A., S.Si., M.Si.**
NIP. 196607281993032001	**NIP. 197006221998022001**

Mengetahui,
Ketua Jurusan Matematika
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya

Dr. Abdul Rouf A., M.Sc.
NIP. 196709071992031001

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama	**: Rohmia Dwi Agustin**
NIM	**: 0810940017**
Jurusan	**: Matematika**
Penulis skripsi berjudul	**: Simulasi Numerik Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor**

dengan ini menyatakan bahwa :

1. **skripsi ini adalah hasil pemikiran saya, bukan hasil plagiat dari tulisan orang lain. Rujukan-rujukan yang tercantum pada daftar pustaka hanya digunakan sebagai refrensi.**
2. **Apabila di kemudian hari diketahui bahwa isi skripsi saya merupakan hasil plagiat, maka saya bersedia menanggung akibat hukum dari kondisi tersebut.**

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, 29 Januari 2013
yang menyatakan,

Rohmia Dwi Agustin
NIM 0810940017-94

SIMULASI NUMERIK MODEL KESEIMBANGAN MASSA PADA SUATU REAKTOR

ABSTRAK

Pada skripsi ini dibahas model keseimbangan massa pada suatu reaktor yang terjadi ketika akumulasi massa fluida sama dengan selisih antara massa fluida yang masuk dengan massa fluida yang keluar dari reaktor. Proses pemodelan menghasilkan persamaan diferensial yang ditinjau pada dua kondisi yaitu kondisi *non steady-state* dan *steady-state*. Pada kondisi *non steady-state* konsentrasi massa fluida berubah bersama bertambahnya waktu. Pada kondisi *steady-state* konsentrasi massa fluida tidak lagi mengalami perubahan terhadap waktu. Solusi analitik untuk kondisi *steady-state* dapat ditentukan dengan persamaan karakteristik. Dengan menggunakan skema eksplisit ditentukan solusi numerik untuk kondisi *non steady-state*. Hasil simulasi numerik menunjukkan bahwa untuk jangka waktu yang lama konsentrasi massa fluida hampir tidak berubah terhadap waktu dan mendekati konsentrasi yang diperoleh dari solusi analitik kondisi *steady-state*. Selain itu, ditentukan pula kesalahan pemotongan untuk skema eksplisit tersebut.

Kata kunci : keseimbangan massa pada suatu reaktor, kondisi *steady-state*, skema eksplisit.

NUMERICAL SIMULATION A MODEL OF MASS BALANCE ON A REACTOR

ABSTRACT

This final project concerns with a model of mass balance on a reactor. Mass balance occurs when the accumulated fluid mass equal to the difference between the inflow fluid mass and the outflow fluid mass. Modeling process yields a differential equation which is considered by two conditions, namely non steady state and steady state conditions. At non steady state condition the fluid concentration changes in time, while at steady state condition, fluid concentration does not change in time. The analytic solution for steady state condition is determined by using characteristic equation. By using explicit scheme the numerical solution for non steady state condition is determined. Numerical simulation indicates that for a long time mass concentration fluid was almost unchanged in time and approach concentrations as the analytical solution of steady state condition. Moreover, the truncation error for the explicit scheme is determined.

Keywords : mass balance on a reactor, steady state condition, explicit scheme.

KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah melimpahkan rahmat dan petunjuk-Nya sehingga skripsi yang berjudul **"Simulasi Numerik Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor"** dapat diselesaikan dengan baik.

Banyak pihak yang telah memberikan dukungan secara langsung maupun tidak langsung dalam penyelesaian skripsi ini. Penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Dr. Wuryansari Muharini K., M.Si. selaku pembimbing I dan Kwardiniya A.,S.Si.,M.Si. selaku pembimbing II atas segala bimbingan dan motivasi serta kesabaran yang telah diberikan selama penulisan skripsi ini,
2. Dr. Agus Suryanto selaku dosen penguji atas segala saran dan kritik yang diberikan untuk perbaikan skripsi ini,
3. seluruh bapak / ibu dosen Jurusan Matematika yang telah memberikan ilmunya kepada penulis, serta segenap staf dan karyawan TU Jurusan Matematika atas segala bantuannya,
4. Bapak dan Ibu Thaha, Mbak Dian, Mas Syafiq, Haris beserta saudara yang selalu mengiringi penulis dengan segala doa, nasehat, kasih sayang dan segalanya hingga selesainya skripsi ini,
5. Mas Reymond, Ilham, Ratih, Vidha, Prila, Irva, Medya, Denny, Dawet Community Matematika A 2008, dan teman-teman seperjuangan atas dukungan, bantuan dan doanya.

Penulis menyadari masih banyak kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis dengan senang hati menerima masukan, saran dan kritik yang membangun melalui email agustinmia48@yahoo.com. Akhir kata, semoga tulisan ini bermanfaat bagi penulis khususnya serta semua pihak pada umumnya.

Malang, 29 Januari 2013

Penulis

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN JUDUL i
LEMBAR PENGESAHAN iii
LEMBAR PERNYATAAN v
ABSTRAK vii
ABSTRACT ix
KATA PENGANTAR xi
DAFTAR ISI xiii
DAFTAR GAMBAR xv
DAFTAR LAMPIRAN xvii
BAB I PENDAHULUAN 1
1.1 Latar Belakang 1
1.2 Rumusan Masalah 2
1.3 Pembatasan Kajian 2
1.4 Tujuan 3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA 5
2.1 Keseimbangan Massa 5
2.2 Hukum Fick 5
2.3 Persamaan Diferensial 6
2.4 Skema Beda Hingga 7
2.5 Metode Beda Hingga untuk Persamaan Diferensial Parsial .. 8
BAB III HASIL DAN PEMBAHASAN 11
3.1 Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor 11
3.2 Kondisi Batas dan Syarat Awal 15
3.3 Solusi Analitik Kondisi *Steady-state* 16
3.4 Solusi Numerik Kondisi *Non Steady-state* 18
3.5 Simulasi Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor . 22
BAB IV KESIMPULAN DAN SARAN 29
4.1 Kesimpulan 29
4.2 Saran 29
DAFTAR PUSTAKA 31
LAMPIRAN 33

DAFTAR GAMBAR

Halaman

Gambar 3.1 Ilustrasi keseimbangan massa pada suatu reaktor .. 11

Gambar 3.2 Konsentrasi massa fluida tiga dimensi. (a) Parameter $c_{in} = 100$ *mol/m*^{3}, $D = 2$ *m*^{2}*/det*, $k = 0{,}2$ *det* $^{-1}$, $U = 1$ *m/det*, $\Delta x = 0{,}1$ dan $\Delta t = 0{,}001$. (b) Sama seperti (a), kecuali $D = 0{,}1$ *m*^{2}*/det*. (c) Sama seperti (a), kecuali $U = 0{,}1$ *m/det*. (d) Sama seperti (a), kecuali $k = 10$ *det* $^{-1}$. (e) Sama seperti (a), kecuali $c_{in} = 10$ *mol/m*^{3} 23

Gambar 3.3 Perbandingan solusi kondisi *steady-state* yang diperoleh secara analitik dan numerik. (a) Parameter $c_{in} = 100$ *mol/m*^{3}, $D = 2$ *m*^{2}*/det*, $k = 0{,}2$ *det* $^{-1}$, $U = 1$ *m/det*, $\Delta x = 0{,}1$ dan $\Delta t = 0{,}001$. (b) Sama seperti (a), kecuali $D = 0{,}1$ *m*^{2}*/det*. (c) Sama seperti (a), kecuali $U = 0{,}1$ *m/det*. (d) Sama seperti (a), kecuali $k = 10$ *det* $^{-1}$. (e) Sama seperti (a), kecuali $c_{in} = 10$ *mol/m*^{3} 26

Gambar 3.4 Solusi numerik model kondisi *non steady-state* dengan nilai parameter $\Delta t = 0{,}0025$ 28

DAFTAR LAMPIRAN

Halaman

Listing program untuk kondisi *non steady-state* 33

BAB I
PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Reaktor adalah tempat berlangsungnya suatu reaksi kimia, baik berupa tangki, pipa, dan lain-lain. Salah satu contoh reaktor adalah reaktor nuklir, yang pertama kali ditemukan oleh Enrico Fermi pada tahun 1942 di Universitas Chicago (Smallman dan Bishop, 1995).

Reaktor nuklir adalah tempat terjadinya reaksi nuklir berantai terkendali. Reaksi nuklir adalah reaksi pembelahan inti atom yang diakibatkan oleh tumbukan inti atom dengan molekul lain. Tumbukan tersebut menghasilkan atom baru yang bermassa lebih kecil. Terdapat berbagai jenis dan ukuran reaktor nuklir, tetapi semua reaktor tersebut memiliki beberapa komponen dasar yang sama, yaitu elemen bahan bakar, moderator netron, alat penyerap panas, *generator* listrik, dan *condensor*. Elemen bahan bakar adalah bahan yang berfungsi sebagai penghasil panas. Netron hasil pembelahan inti yang keluar dari elemen bahan bakar tersebut menghasilkan netron berenergi tinggi, sehingga dapat meningkatkan suhu reaktor. Oleh karena itu, diperlukan adanya suatu material yang berfungsi sebagai penghilang sebagian atau seluruh energi dari netron yang terdapat dalam reaktor. Material ini disebut sebagai moderator netron dan dalam hal ini moderator netron yang digunakan adalah air.

Air masuk ke dalam reaktor melalui pipa. Selanjutnya, molekul air bertumbukan dengan netron berenergi tinggi dari elemen bahan bakar, sehingga air menjadi panas. Kemudian, air panas dialirkan ke luar reaktor menuju alat penyerap panas, dan kalor dari air panas dipindahkan ke air yang mengalir di sekitar alat penyerap panas. Kalor yang dipindahkan memproduksi uap yang memutar turbin. Turbin dan *generator* berfungsi mengubah uap menjadi listrik. *Generator* merupakan tempat daya keluaran listrik yang dialirkan melalui kawat transmisi bertegangan tinggi menuju ke pengguna. Setelah keluar dari turbin, uap didinginkan dan berubah kembali menjadi air oleh *condensor*, kemudian dikembalikan lagi ke alat penyerap panas oleh pompa menuju pipa. Siklus tersebut berjalan terus menerus.

Proses masuknya air ke dalam reaktor, pelepasan energi netron dalam reaktor, dan keluarnya air panas dari dalam reaktor merupakan salah satu contoh keseimbangan massa pada suatu reaktor. Menurut Donati dan Renato (1999), keseimbangan massa terjadi apabila akumulasi fluida di dalam reaktor sama dengan massa fluida yang masuk dan massa fluida yang keluar. Kondisi tersebut dapat diformulasikan secara matematis, sehingga terbentuk suatu persamaan diferensial parsial. Pada Chapra dan Canale (2002) telah dibahas model keseimbangan massa pada suatu reaktor. Namun, pembahasan tersebut hanya memandang model pada kondisi tunak (*steady-state*) saja, yaitu kondisi ketika laju perubahan konsentrasi massa fluida tidak lagi bergantung terhadap waktu, sehingga diperoleh persamaan diferensial biasa. Selain itu, solusi yang dikemukakan hanya berupa solusi numerik. Pada Chapra dan Canale tidak dibahas model pada kondisi tidak tunak (*non steady-state*), yakni ketika laju perubahan konsentrasi massa fluida masih bergantung terhadap waktu, sehingga model masih berupa persamaan diferensial parsial. Oleh karena itu, dalam skripsi ini ditentukan solusi analitik untuk model pada kondisi *steady-state* dan solusi numerik untuk model pada kondisi *non steady-state*. Selanjutnya, solusi numerik kondisi *non steady-state* pada waktu yang lama dibandingkan dengan solusi analitik yang diperoleh pada kondisi *steady-state*.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang pada subbab 1.1, dapat dirumuskan masalah sebagai berikut.

1. Bagaimana solusi analitik kondisi *steady-state*?
2. Bagaimana solusi numerik model pada kondisi *non steady-state*?
3. Apakah kondisi *steady-state* yang diperoleh secara numerik sama dengan yang diperoleh secara analitik?

1.3 Pembatasan Kajian

Skripsi ini difokuskan pada pembahasan dengan beberapa pembatasan sebagai berikut.

1. Reaktor homogen di sepanjang sumbu *x*.

2. Temperatur reaktor dan temperatur fluida di sepanjang reaktor diasumsikan sama, dan tidak berubah terhadap waktu.
3. Keseimbangan massa dalam reaktor hanya dipengaruhi oleh kecepatan aliran fluida, adanya difusi, dan terjadinya kerusakan reaksi fisi.
4. Konsentrasi massa fluida tidak berfluktuasi secara ekstrim, yaitu tidak bernilai sangat tinggi, sangat rendah, dan tidak mengalami perubahan mendadak dalam suatu jarak yang pendek.

1.4 Tujuan

Tujuan pembahasan dalam skripsi ini adalah untuk

1. menentukan solusi analitik kondisi *steady-state*,
2. mengkonstruksi solusi numerik model pada kondisi *non steady-state*,
3. membandingkan solusi kondisi *steady-state* yang diperoleh secara numerik terhadap solusi analitiknya.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

BAB II
TINJAUAN PUSTAKA

Pada bab ini diberikan beberapa definisi sebagai acuan dalam membahas permasalahan yang disampaikan pada pembahasan.

2.1 Keseimbangan Massa

Menurut Donati dan Renato (1999), keseimbangan massa terjadi ketika akumulasi massa fluida sama dengan selisih antara massa yang masuk dan yang keluar. Akumulasi dapat bernilai positif atau negatif.

Menurut Utomo (1984), pada keseimbangan massa terdapat proses transfer massa, karena massa tidak dapat diciptakan dan tidak dapat dimusnahkan, melainkan massa hanya dapat berpindah atau berubah wujud. Adanya transfer massa merupakan salah satu syarat untuk suatu tempat dapat dikatakan sebagai reaktor. Transfer massa adalah gerakan molekul-molekul fluida yang disebabkan adanya perbedaan konsentrasi.

Salah satu cara yang memungkinkan terjadinya transfer massa pada fluida adalah difusi yang merupakan peristiwa mengalir atau berpindahnya bagian fluida yang berkonsentrasi tinggi ke bagian fluida yang berkonsentrasi rendah. Difusi akan terus terjadi hingga seluruh partikel tersebar secara merata atau mencapai keadaan keseimbangan (Utomo, 1984).

2.2 Hukum Fick

Hukum Fick dikemukakan pada tahun 1855 oleh seorang ahli fisiologi Jerman bernama Adolf Fick (1829 – 1901). Hukum tersebut menyatakan hubungan antara fluks difusi dan perubahan konsentrasi massa fluida di sumbu *x*, yaitu

$$J = -D\frac{dc}{dx}, \tag{2.1}$$

dengan J adalah fluks difusi yang merupakan jumlah fluida yang bedifusi di sumbu *x*, c adalah konsentrasi massa fluida, D adalah koefisien difusi. Persamaan tersebut menyatakan bahwa semakin

banyak konsentrasi massa fluida yang berubah di bidang *x*, semakin sedikit nilai fluks difusi, *J*. Hukum ini berlaku untuk keadaan seimbang dimana konsentrasi massa fluida tidak berubah terhadap waktu, sehingga pemakaian hukum ini terbatas pada kondisi *steady-state*. Tanda negatif koefisien difusi (*D*) menunjukkan bahwa aliran konsentrasi fluida menuju ke konsentrasi yang lebih rendah (Smallman dan Bishop, 1995).

2.3 Persamaan Diferensial

Definisi 2.3.1 (Persamaan Diferensial)

Menurut Finizio dan Ladas (1982), persamaan diferensial adalah persamaan yang memuat turunan suatu fungsi yang tidak diketahui. Persamaan diferensial dikatakan mempunyai orde atau tingkat *n* jika turunan tertinggi dalam persamaan diferensial tersebut adalah turunan ke-*n*. Suatu persamaan diferensial mempunyai derajat atau pangkat *k* jika turunan tertinggi dalam persamaan tersebut berpangkat *k*.

Definisi 2.3.2 (Persamaan Diferensial Biasa)

Menurut Finizio dan Ladas (1982), persamaan diferensial biasa adalah persamaan yang memuat turunan suatu fungsi dengan satu variabel bebas.

Definisi 2.3.3 (Persamaan Diferensial Parsial)

Menurut Duchateau dan Zachman (1986), persamaan diferensial parsial adalah persamaan yang memuat satu atau lebih turunan pasial dari suatu fungsi yang tidak diketahui. Persamaan diferensial parsial dikatakan linear jika variabel tak bebas dan turunan parsialnya muncul dalam persamaan dengan cara linear yaitu tidak memuat perkalian antara variabel tak bebas dengan turunannya atau perkalian antar turunan, atau perkalian dengan dirinya sendiri.

2.4 Skema Beda Hingga

Menurut Triatmodjo (2002), deret Taylor merupakan dasar untuk menyelesaikan persamaan diferensial secara numerik. Bentuk umum deret Taylor untuk fungsi $u(x)$ di sekitar titik x_0 adalah

$$u(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(x - x_0)^n}{n!} u^{(n)}(x_0) \ ,$$

dengan $u^{(n)}(x_0) = \frac{d^n u(x_0)}{dx^n}$. Jika suatu fungsi $u(x)$ diketahui di titik x_r dan semua turunan fungsi u terhadap x diketahui pada titik tersebut, maka deret Taylor fungsi u pada titik x_{r+1} yang terletak pada jarak Δx dari titik x_r adalah

$$u(x_{r+1}) = u(x_r) + u'(x_r)\frac{\Delta x}{1!} + u''(x_r)\frac{\Delta x^2}{2!} + \ldots + u^{(n)}(x_r)\frac{\Delta x^n}{n!} + R_n \ ,$$

dengan $\Delta x = x_{r+1} - x_r$, dan $R_n = \frac{(\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!} u^{(n+1)}(\xi)$ merupakan kesalahan pemotongan atau suku sisa yang dapat ditulis sebagai $O(\Delta x)^{(n+1)}$, dengan $x_r \le \xi \le x_{r+1}$.

Skema beda hingga adalah suatu pendekatan diferensial berdasarkan deret Taylor. Menurut Noye (1982), terdapat tiga macam skema beda hingga yang merupakan pendekatan turunan pertama fungsi u terhadap x, yaitu skema beda maju, skema beda mundur dan skema beda pusat.

Misalkan $u_r = u(x_r)$. Pada skema beda maju, turunan u terhadap x di titik x_r didekati oleh nilai u pada x_{r+1}, yaitu

$$\frac{du}{dx}(x_r) = \frac{u(x_{r+1}) - u(x_r)}{\Delta x} = \frac{u_{r+1} - u_r}{\Delta x} \ . \qquad (2.2)$$

Pada skema beda mundur, turunan u terhadap x di titik x_r didekati oleh nilai u pada x_{r-1}, yaitu

$$\frac{du}{dx}(x_r) = \frac{u(x_r) - u(x_{r-1})}{\Delta x} = \frac{u_r - u_{r-1}}{\Delta x} \ .$$

Sementara itu, pada skema beda pusat, turunan u terhadap x di titik x_r didekati oleh nilai u pada x_{r+1} dan x_{r-1}, yaitu

$$\frac{du}{dx}(x_r) = \frac{ux_{r+1} - u(x_{r-1})}{\Delta x} = \frac{u_{r+1} - u_{r-1}}{\Delta x}.$$

Pendekatan untuk turunan ke dua fungsi u terhadap x dapat ditentukan dengan

$$u_{xx}(x_r) = \frac{u_x(x_r) - u_x(x_{r-1})}{\Delta x} = \frac{\frac{u_{r+1} - u_r}{\Delta x} - \frac{u_r - u_{r-1}}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$= \frac{u_{r+1} - 2u_r + u_{r-1}}{\Delta x^2} \qquad (2.3)$$

dan disebut sebagai skema beda pusat orde dua.

2.5 Metode Beda Hingga untuk Persamaan Diferensial Parsial

Menurut Noye (1982), salah satu metode numerik yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial parsial adalah metode beda hingga. Metode beda hingga yang paling umum digunakan adalah metode eksplisit, implisit dan Crank-Nicholson.

1. Metode eksplisit

Pada metode ini, digunakan skema beda maju untuk turunan terhadap t dan skema beda pusat untuk turunan terhadap x. Sebagai contoh, pandang persamaan diferensial parsial

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = b\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}. \qquad (2.4)$$

Jika metode eksplisit diterapkan pada persamaan (2.4), maka diperoleh skema beda hingga

$$\frac{u_r^{s+1} - u_r^s}{\Delta t} = b\frac{u_{r+1}^s - 2u_r^r + u_{r-1}^s}{\Delta x^2} \qquad \begin{matrix} r = 2,\ldots,N \\ s = 1,2,\ldots,M \end{matrix} \qquad (2.5)$$

$$u_r^{s+1} = u_r^s + b\vartheta(u_{r-1}^s - 2u_r^s + u_{r+1}^s)$$

dengan $u_r^s = u(x_r, t_s)$ dan $\vartheta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$. Metode ini disebut sebagai metode eksplisit sebab nilai u pada t_{s+1} dapat dinyatakan secara

eksplisit sebagai fungsi dari nilai u pada t_s.

2. Metode implisit

Pada metode ini, diterapkan skema beda mundur untuk turunan terhadap *t* dan skema beda pusat untuk turunan terhadap *x*. Jika metode implisit diterapkan pada persamaan (2.4), maka diperoleh

$$\frac{u_r^s - u_r^{s-1}}{\Delta t} = b\frac{u_{r+1}^s - 2u_r^s + u_{r-1}^s}{\Delta x^2} \qquad \begin{matrix} r = 2,3,\ldots,N+1 \\ s = 2,3,\ldots,M+1 \end{matrix}$$

atau dapat dinyatakan sebagai

$$\frac{u_r^{s+1} - u_r^s}{\Delta t} = b\frac{u_{r+1}^{s+1} - 2u_r^{s+1} + u_{r-1}^{s+1}}{\Delta x^2} \qquad \begin{matrix} r = 2,3,\ldots,N+1 \\ s = 1,2,\ldots,M \end{matrix} \qquad (2.6)$$

$$u_r^s = u_r^{s+1} - b\vartheta\left(u_{r-1}^{s+1} - 2u_r^{s+1} + u_{r+1}^{s+1}\right).$$

3. Metode Crank-Nicholson

Metode ini menerapkan skema beda maju untuk turunan pertama terhadap *t* dan turunan terhadap *x* didekati dengan rata-rata ruas kanan persamaan (2.5) dan persamaan (2.6), yakni

$$\frac{u_r^{s+1} - u_r^s}{\Delta t} = \frac{1}{2}\left(\frac{\left(u_{r+1}^{s+1} - 2u_r^{s+1} + u_{r-1}^{s+1}\right) + \left(u_{r+1}^s - 2u_r^s + u_{r-1}^s\right)}{\Delta x^2}\right)$$

$$u_r^{s+1} - u_r^s = \frac{1}{2}\vartheta\left(u_{r+1}^{s+1} - 2u_r^{s+1} + u_{r-1}^{s+1} + u_{r+1}^s - 2u_r^s + u_{r-1}^s\right).$$

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

BAB III
HASIL DAN PEMBAHASAN

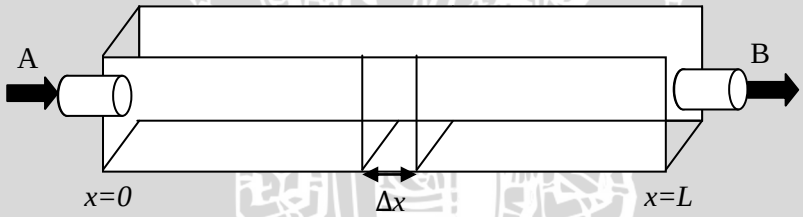
3.1 Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor

Massa pada suatu reaktor dikatakan seimbang apabila memenuhi kondisi matematis sebagai berikut,

$$Akumulasi = F_{in} - F_{out} \tag{3.1}$$

dimana *Akumulasi* merupakan akumulasi massa fluida di dalam reaktor, F_{in} merupakan aliran massa fluida yang masuk ke dalam reaktor, dan F_{out} merupakan aliran massa fluida yang keluar dari dalam reaktor.

Proses terjadinya keseimbangan massa dapat diilustrasikan pada Gambar 3.1 yang menunjukkan reaktor homogen di sumbu *x*. Sisi A dan B terbuka berturut-turut menyatakan tempat fluida masuk dan tempat fluida keluar. Misalkan reaktor homogen berada di sepanjang sumbu *x* dengan $x \in [0, L]$.



Gambar 3.1 Ilustrasi keseimbangan massa pada suatu reaktor

Pandang suatu daerah pada reaktor dengan panjang Δx. Fluida yang digunakan adalah fluida pada fase cair. Pada fase ini perubahan volume fluida sepanjang lebar grid Δx sangat kecil, sehingga volume dapat dianggap konstan. Sementara itu, pada fase gas perubahan volume fluida seiring dengan perubahan konsentrasi fluida, sehingga volume tersebut tidak bernilai konstan. Selanjutnya, fluida bergerak dari A melalui reaktor menuju B. Reaksi fisi menghasilkan atom baru yang bermassa lebih kecil, sehingga

konsentrasi massa fluida juga berubah. Perubahan konsentrasi massa tersebut terjadi seiring berubahnya waktu (t). Perubahan tersebut berlangsung pada suatu elemen volume yang konstan yang dapat dirumuskan sebagai

$$Akumulasi = \frac{\partial c}{\partial t}, \tag{3.2}$$

dengan $\frac{\partial c}{\partial t}$ merupakan laju perubahan konsentrasi massa fluida terhadap waktu dengan satuan $mol/det \cdot m^3$, dan c adalah konsentrasi massa fluida dengan satuan mol/m^3. Jika persamaan (3.1) disubstitusikan ke persamaan (3.2), maka diperoleh

$$\frac{\partial c}{\partial t} = F_{in} - F_{out}. \tag{3.3}$$

Persamaan (3.3) merupakan laju perubahan konsentrasi massa fluida setiap saat.

Keseimbangan massa dalam sebuah reaktor dipengaruhi oleh tiga hal, yakni kecepatan aliran fluida, difusi dan reaksi kerusakan.

1. Kecepatan aliran

Misal $c(x)$ menyatakan konsentrasi massa fluida di x. Gambar 3.1 menjelaskan bahwa fluida yang mengalir adalah jenis fase cair, sehingga pada keseimbangan massa ini digunakan persamaan kontinuitas yang menyebutkan bahwa debit aliran fluida yang masuk sama dengan debit aliran fluida yang keluar. Debit aliran fluida adalah kecepatan aliran fluida yang melewati suatu bidang x tiap satuan waktu pada luas penampang tertentu. Pada Gambar tersebut juga digambarkan luas penampang reaktor pada A dan B adalah berbeda. Oleh karena itu, kecepatan aliran saat fluida masuk berbeda dari kecepatan aliran saat fluida keluar. Banyaknya fluida yang mengalir masuk ke dalam reaktor melalui A menyebabkan kecepatan aliran fluida juga semakin besar. Oleh karena itu, laju perubahan konsentrasi massa fluida sama dengan kecepatan aliran saat fluida masuk ke dalam reaktor yang dirumuskan sebagai

$$\frac{\partial c}{\partial t} = Uc(x), \tag{3.4}$$

dengan persamaan (3.4) terjadi pada A dan U menyatakan kecepatan aliran dengan satuan m/det dan c adalah konsentrasi massa fluida dengan satuan mol/m^3. Dalam hal ini, kecepatan aliran di suatu titik adalah konstan terhadap waktu, sehingga dikatakan *steady*. Contoh aliran *steady* adalah arus air yang mengalir dengan tenang yang kelajuan alirnya rendah.

Adanya reaksi fisi (pembelahan inti) di dalam reaktor mengakibatkan konsentrasi massa di dalam reaktor berbeda dari konsentrasi massa fluida yang masuk ke dalam reaktor. Perbedaan konsentrasi massa fluida tersebut dinamakan sebagai gradien konsentrasi. Banyaknya fluida yang ada di dalam reaktor mengakibatkan kecepatan fluida semakin bertambah, sehingga laju perubahan konsentrasi massa fluida sebanding dengan kecepatan aliran di B yaitu

$$\frac{\partial c}{\partial t} = U\left[c(x) + \frac{\partial c(x)}{\partial x}\right]. \tag{3.5}$$

Dengan $\frac{\partial c(x)}{\partial x}$ adalah gradien konsentrasi massa fluida di x. Persamaan (3.5) merupakan kecepatan aliran fluida di F_{out}. Selanjutnya, persamaan (3.4) dan (3.5) disubstitusikan ke persamaan (3.3), diperoleh

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} &= F_{in} - F_{out} \\ &= Uc(x) - U\left[c(x) + \frac{\partial c(x)}{\partial x}\right] \\ &= Uc(x) - Uc(x) - U\frac{\partial c(x)}{\partial x} \\ &= -U\frac{\partial c(x)}{\partial x}.\end{aligned} \tag{3.6}$$

2. Difusi

Hukum Ficks dapat diterapkan pada proses difusi model keseimbangan massa pada suatu reaktor. Persamaan (2.1) dapat diterapkan dengan syarat konsentrasi massa (c) tidak sangat tinggi, tidak sangat rendah, atau tidak berubah mendadak dalam suatu jarak

yang pendek. Kondisi molekul-molekul yang berdifusi mempengaruhi koefisien difusi (*D*). Oleh karena itu, Hukum Ficks dapat diterapkan pada F_{in}, yakni

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -D\frac{\partial c(x)}{\partial x}, \tag{3.7}$$

dengan *D* adalah koefisien difusi dalam satuan m^3/det.

Difusi terus terjadi hingga seluruh partikel tersebar luas secara merata atau mencapai keadaan keseimbangan, dimana perpindahan molekul tetap terjadi walaupun tidak ada perbedaan konsentrasi. Reaksi fisi di dalam reaktor mengakibatkan terjadinya perubahan gradien konsentrasi setiap sumbu *x*. Oleh karena itu, laju perubahan konsentrasi berbanding lurus dengan proses difusi di F_{out}, yakni

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -D\left[\frac{\partial c(x)}{\partial x} + \frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2}\right]. \tag{3.8}$$

Persamaan (3.7) dan (3.8) disubstitusikan ke persamaan (3.3), serta diperoleh

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} &= F_{in} - F_{out}\\ &= -D\frac{\partial c(x)}{\partial x} - \left\{-D\left[\frac{\partial c(x)}{\partial x} + \frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2}\right]\right\}\\ &= -D\frac{\partial c(x)}{\partial x} + D\frac{\partial c(x)}{\partial x} + D\frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2}\\ &= D\frac{\partial^2 c(x)}{\partial x^2}.\end{aligned} \tag{3.9}$$

3. Kerusakan reaksi fisi

Dalam mencapai keseimbangan massa, reaksi fisi tidak sepenuhnya berlangsung secara sempurna. Ada kalanya terjadi kerusakan terhadap reaksi tersebut yang berdampak negatif terhadap laju perubahan konsentrasi massa fluida. Kerusakan tersebut dapat terjadi di setiap *x* yang dirumuskan sebagai

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -kc(x), \tag{3.10}$$

dengan *k* adalah koefisien kerusakan reaksi fisi yang satuannya $1/det$.

Berdasarkan persamaan (3.6), (3.9), dan (3.10) model keseimbangan massa pada suatu reaktor adalah

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U\frac{\partial c}{\partial x} - kc. \tag{3.11}$$

3.2 Kondisi Batas dan Syarat Awal

Kecepatan aliran fluida pada A adalah kecepatan aliran fluida pada x=0. Fluida yang masuk dengan kecepatan U di titik tersebut bertumbukan dengan molekul lain yang terdapat di dalam reaktor, sehingga konsentrasi massa fluida berdifusi. Difusi yang terjadi pada x=0 sesuai dengan Hukum Fick, sehingga kondisi batasnya diperoleh

$$Uc_{in} = Uc(x=0,t) - D\frac{\partial c}{\partial x}(x=0,t)$$

$$Uc_{in} = Uc_0 - D\frac{\partial c_0}{\partial x}. \tag{3.12}$$

Persamaan (3.12) merupakan kondisi batas di x=0 dengan c_{in} adalah konsentrasi massa fluida *input*. Dalam hal ini, tanda minus koefisien difusi D sesuai dengan Hukum Fick yang berlaku pada proses ini, yaitu aliran konsentrasi fluida menuju ke konsentrasi yang lebih rendah.

Pada $x = L$ konsentrasi massa fluida mencapai keseimbangan dan seluruh partikel telah tersebar secara merata. Hal ini disebabkan karena adanya difusi secara terus menerus dan perpindahan molekul tetap terjadi walaupun tidak ada perbedaan konsentrasi. Oleh karena itu, pada titik $x = L$ perubahan konsentrasi massa fluida bernilai nol yang dapat dirumuskan sebagai

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x=L,t) = 0. \tag{3.13}$$

Saat t=0, fluida belum mengalami perlakuan apapun dan belum terjadi reaksi fisi.Oleh karena itu, saat t=0 konsentrasi massa

fluida adalah nol setiap *x*.

$$c(t=0,x)=0\,. \tag{3.14}$$

3.3 Solusi Analitik Kondisi *Steady-state*

Kondisi *steady-state* adalah kondisi ketika konsentrasi massa fluida tidak bergantung terhadap waktu, yaitu $\frac{\partial c}{\partial t}=0$. Persamaan (3.11) pada kondisi *steady-state* adalah

$$0=D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-U\frac{\partial c}{\partial x}-kc\,, \tag{3.15}$$

yang merupakan persamaan diferensial biasa (PDB) orde dua. Dengan memisalkan

$$c=e^{hx} \tag{3.16}$$

diperoleh

$$0=Dh^2e^{hx}-Uhe^{hx}-ke^{hx}\,. \tag{3.17}$$

Persamaan (3.17) dibagi dengan Dh^2e^{hx}, sehingga diperoleh

$$0=h^2-\frac{U}{D}h-\frac{k}{D}\,,$$

dengan $h_{1,2}=\frac{U\pm\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}$. Jadi, solusi umum persamaan (3.15) adalah

$$c(x)=C_1e^{\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)x}+C_2e^{\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)x}\,. \tag{3.18}$$

Dengan menggunakan dua kondisi batas (3.12) dan (3.13), dapat ditentukan C_1 dan C_2. Kondisi batas (3.12) menyatakan

$$Uc_{in}=Uc\ (0)-D\frac{\partial c\,(0)}{\partial x}\,. \tag{3.19}$$

Nilai $c(0)$ dan $\frac{\partial c}{\partial x}(0)$ berturut-turut adalah

$$c(0)=C_1+C_2 \tag{3.20}$$

dan

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0)=\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_1+\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_2. \quad (3.21)$$

Persamaan (3.20) dan (3.21) disubstitusikan ke dalam persamaan (3.19), diperoleh

$$Uc_{in}=U\left[C_1+C_2\right]-D\left[\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_1+\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_2\right]$$

$$Uc_{in}=C_1\left[U-\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2}\right)\right]+C_2\left[U-\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2}\right)\right]. \quad (3.22)$$

Sementara itu, kondisi batas (3.13) menghasilkan persamaan

$$\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_1e^{\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L}+\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)C_2e^{\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L}=0. \quad (3.23)$$

Persamaan (3.22) dan (3.23) dapat dinyatakan dalam bentuk matriks yaitu,

$$\underbrace{\begin{bmatrix} U-\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2}\right) & U-\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2}\right) \\ \left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)e^{\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L} & \left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)e^{\left(\frac{U-\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L} \end{bmatrix}}_{E}\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}=\underbrace{\begin{bmatrix} Uc_{in} \\ 0 \end{bmatrix}}_{R}.$$

Nilai C_1 dan C_2 dapat diperoleh dengan menggunakan E^{-1} yaitu

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}=E^{-1}\cdot R$$

$$=\begin{bmatrix} \frac{2Uc_{in}W\left(U^2-ZU+2Dk\right)}{\left(-2U+U+Z\right)\left(YU^2+YZU+2YDk-WU^2+WZU-2WDk\right)} \\ \frac{Uc_{in}Y\left(U+Z\right)}{\left(YU^2+YZU+2YDk-WU^2+WZU-2WDk\right)} \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

dengan

$$W = exp\left(-\left(\frac{-U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L\right),$$

$$Y = exp\left(\left(\frac{U+\sqrt{U^2+4Dk}}{2D}\right)L\right),$$

$$Z = \sqrt{U^2+4Dk}\ .$$

Jadi, solusi analitik model keseimbangan massa pada suatu reaktor untuk kondisi *steady-state* adalah $c(x)$ pada persamaan (3.18) dengan C_1 dan C_2 diberikan pada persamaan (3.24).

3.4 Solusi Numerik Kondisi *Non Steady-state*

3.4.1 Penurunan Skema Numerik

Metode beda hingga yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan (3.11) adalah metode eksplisit, sehingga diperoleh bentuk diskrit

$$\frac{c_r^{s+1}-c_r^s}{\Delta t} = D\left(\frac{c_{r+1}^s-2c_r^s+c_{r-1}^s}{\Delta x^2}\right)-U\left(\frac{c_{r+1}^s-c_{r-1}^s}{2\Delta x}\right)-kc_r^s, \tag{3.25}$$

kedua ruas dikalikan Δt menghasilkan

$$\begin{aligned} c_r^{s+1}-c_r^s &= \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}\left(c_{r+1}^s-2c_r^s+c_{r-1}^s\right)-\frac{U\Delta t}{2\Delta x}\left(c_{r+1}^s-c_{r-1}^s\right)-\Delta tkc_r^s \\ c_r^{s+1} &= \left(D\vartheta-\frac{U\mu}{2}\right)c_{r+1}^s-\left(2D\vartheta+\Delta tk-1\right)c_r^s+\left(D\vartheta+\frac{U\mu}{2}\right)c_{r-1}^s \end{aligned} \tag{3.26}$$

dengan $c_r^s = c\left(x_r,t_s\right)$, $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}=\vartheta$, dan $\frac{\Delta t}{\Delta x}=\mu$.

Turunan pertama pada kondisi batas didekati dengan beda pusat. Kondisi batas $x=0$ menghasilkan

$$Uc_{in}^{s} = Uc_{0}^{s} - D\frac{c_{r+1}^{s} - c_{r-1}^{s}}{2\Delta x}$$

dan dapat diubah dalam bentuk

$$Uc_{in}^{s} = Uc_{0}^{s} - \frac{D}{2\Delta x}c_{r+1}^{s} + \frac{D}{2\Delta x}c_{r-1}^{s},$$

sehingga untuk $r = 0$ adalah

$$c_{-1}^{s} = \frac{2U\Delta x}{D}c_{in}^{s} - \frac{2U\Delta x}{D}c_{0}^{s} + c_{1}^{s}. \qquad (3.27)$$

Sementara itu, kondisi batas $x = L$ menghasilkan

$$c_{N+1}^{s} = c_{N-1}^{s}. \qquad (3.28)$$

Syarat awal yang ditunjukkan pada persamaan (3.14) menyatakan bahwa pada saat $t = 0$ konsentrasi massa fluida bernilai nol untuk setiap *r*, yakni

$$c_{r}^{0} = 0, \qquad (3.29)$$

dengan $c_{r,s} = c(x_r, t_s)$, $r = 0,1,\ldots,N-1,N$, dan $s = 0,1,\ldots,M-1,M$.

1. Saat $s = 0$ dan $r = 0$, skema persamaan (3.26) menjadi

   $$c_{0}^{1} = \left(D\vartheta - \frac{U\mu}{2}\right)c_{1}^{0} - \left(2D\vartheta + \Delta tk - 1\right)c_{0}^{0} + \left(D\vartheta + \frac{U\mu}{2}\right)c_{-1}^{0}. \qquad (3.30)$$

   Persamaan (3.27), dan (3.29) disubstitusikan ke dalam persamaan (3.30), diperoleh

   $$c_{0}^{1} = \left(2U\Delta x\vartheta + \frac{U^{2}\mu\Delta x}{D}\right)c_{in}^{0}. \qquad (3.31)$$

2. Saat $s = 0$ dan $r = 1,2,\ldots,N$ skema numerik persamaan (3.26) menjadi

   $$c_{r}^{1} = 0. \qquad (3.32)$$

Sistem persamaan saat $s = 0$ dan $r = 0,1,\ldots,N-1,N$ yang ditunjukkan oleh persamaan (3.31) dan (3.32) dalam bentuk matriks adalah

$$\vec{c}^{1} = \vec{P}c_{in}^{0}, \qquad (3.33)$$

dengan $P = \begin{bmatrix} 2U\vartheta\Delta x + \dfrac{U^2\mu\Delta x}{D} \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, dan $\vec{c}^{\,1} = \begin{bmatrix} c_0^1 \\ c_1^1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{N-1}^1 \\ c_N^1 \end{bmatrix}$.

Selanjutnya, pada saat $s = 1, \ldots, M$ dan $r = 0, \ldots, N$ akan diuraikan sebagai berikut.

3. Saat $s = 1, \ldots, M$ dan $r = 0$, persamaan (3.26) menjadi

$$c_0^{s+1} = (2D\vartheta)c_1^s - \left(2D\vartheta + \Delta tk - 1 + \frac{U^2\mu\Delta x}{D} + 2U\vartheta\Delta x\right)c_0^s + \left(2U\vartheta\Delta x + \frac{U^2\mu\Delta x}{D}\right)c_{in}^s. \tag{3.34}$$

4. Saat $s = 1, \ldots, M$ dan $r = 1, \ldots, N-1$, persamaan (3.26) menjadi

$$c_r^{s+1} = \left(D\vartheta - \frac{U\mu}{2}\right)c_{r+1}^s - (2D\vartheta + \Delta tk - 1)c_r^s + \left(D\vartheta + \frac{U\mu}{2}\right)c_{r-1}^s. \tag{3.35}$$

5. Saat $s = 1, \ldots, M$ dan $r = N$, persamaan (3.28) disubstitusikan ke dalam persamaan (3.26) sehingga dipeoleh

$$c_N^s = (2D\vartheta)c_{N-1}^s - (2D\vartheta + \Delta tk - 1)c_N^s. \tag{3.36}$$

Sistem persamaan saat $s = 1, \ldots, M$ yang ditunjukkan oleh persamaan (3.34), (3.35), dan (3.36) dalam bentuk matriks tridiagonal adalah

$$\vec{c}^{\,s+1} = I\vec{c}^{\,s} + \vec{P}c_{in}^s, \tag{3.37}$$

dengan $\vec{c}^{\,s} = \begin{bmatrix} c_0^s \\ c_1^s \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{N-1}^s \\ c_N^s \end{bmatrix}$, $P = \begin{bmatrix} 2U\vartheta\Delta x + \dfrac{U^2\mu\Delta x}{D} \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, $\vec{c}^{\,s+1} = \begin{bmatrix} c_0^{s+1} \\ c_1^{s+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_{N-1}^{s+1} \\ c_N^{s+1} \end{bmatrix}$

untuk setiap $s = 1, \ldots, M$, dan

$$I = \begin{bmatrix} -\left(2D\vartheta + k\Delta t - 1 + \frac{U^2\mu\Delta x}{D} + 2U\vartheta\Delta x\right) & 2D\vartheta & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \left(D\vartheta + \frac{U\mu}{2}\right) & -\left(2D\vartheta + \Delta tk - 1\right) & \left(D\vartheta - \frac{U\mu}{2}\right) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \left(D\vartheta + \frac{U\mu}{2}\right) & -\left(2D\vartheta + \Delta tk - 1\right) & \left(D\vartheta - \frac{U\mu}{2}\right) & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \left(D\vartheta + \frac{U\mu}{2}\right) & -\left(2D\vartheta + \Delta tk - 1\right) & \left(D\vartheta - \frac{U\mu}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 2D\vartheta & -\left(2D\vartheta + \Delta tk - 1\right) \end{bmatrix}.$$

3.4.2 Kesalahan Pemotongan Skema Numerik

Pada persamaan (3.25) telah dilakukan pemotongan suku-suku sisa dalam deret Taylor, sehingga terdapat kesalahan pemotongan pada ruas kiri, yaitu

$$\frac{c_r^{s+1} - c_r^s}{\Delta t} = \frac{\left(c_r^s + \Delta t \frac{\partial c_r^s}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\frac{\partial^2 c_r^s}{\partial t^2} + \frac{(\Delta t)^3}{3!}\frac{\partial^3 c_r^s}{\partial t^3} + \ldots\right) - c_r^s}{\Delta t}$$

$$\frac{c_r^{s+1} - c_r^s}{\Delta t} = \frac{\partial c_r^s}{\partial t} + O(\Delta t). \qquad (3.38)$$

Dengan cara yang sama, diperoleh kesalahan pemotongan skema numerik pada setiap suku di ruas kanan, yaitu

$$D\left(\frac{c_{r+1}^s - 2c_r^s + c_{r-1}^s}{\Delta x^2}\right) = D\left(\frac{\partial^2 c_r^s}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)\right)$$

dan

$$U\left(\frac{c_{r+1}^s - c_{r-1}^s}{2\Delta x}\right) = U\left(\frac{\partial c_r^s}{\partial x} + O(\Delta x^2)\right).$$

Secara keseluruhan diperoleh kesalahan pemotongan pada ruas kanan, yaitu

$$D\left(\frac{c_{r+1}^s - 2c_r^s + c_{r-1}^s}{\Delta x^2}\right) - U\left(\frac{c_{r+1}^s - c_{r-1}^s}{2\Delta x}\right) - kc_r^s = D\left(\frac{\partial^2 c_r^s}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)\right) - U\left(\frac{\partial c_r^s}{\partial x} + O(\Delta x^2)\right) - kc_r^s \quad . \tag{3.39}$$

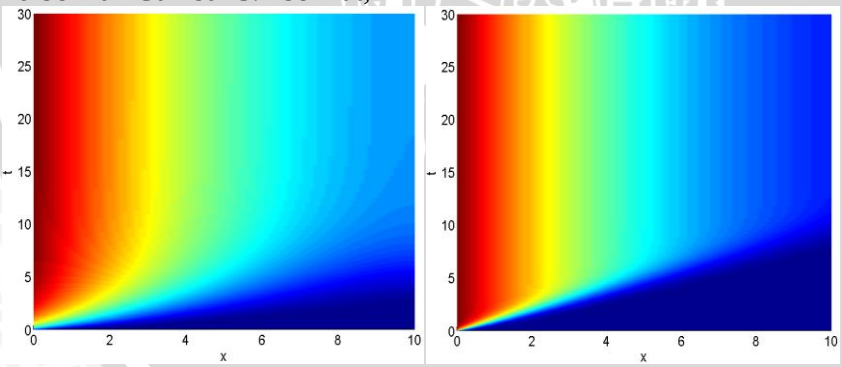
Berdasarkan persamaan (3.38) dan (3.39), dapat disimpulkan bahwa kesalahan pemotongan skema numerik tersebut berorde satu untuk Δt dan berorde dua untuk Δx, yaitu

$$\frac{\partial c_r^s}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c_r^s}{\partial x^2} - U\frac{\partial c_r^s}{\partial x} - kc_r^s + O(\Delta t, \Delta x^2)\,. \tag{3.40}$$

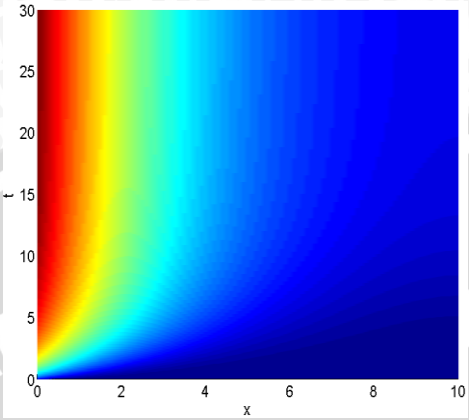
3.5 Simulasi Model Keseimbangan Massa pada Suatu Reaktor

Fenomena model keseimbangan massa pada suatu reaktor secara numerik dan analitik dapat diamati melalui simulasi numerik. Simulasi numerik untuk kondisi *steady-state* maupun *non steady-state* dilakukan menggunakan *software* Matlab. Program dapat dilihat pada Lampiran.

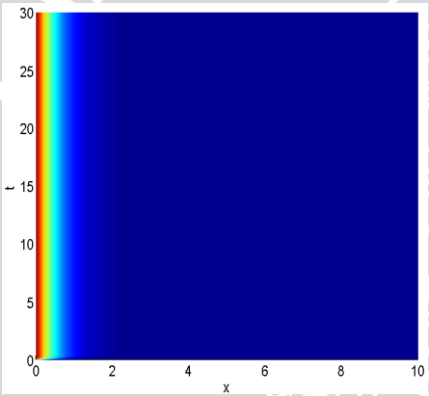
Hasil simulasi tiga dimensi untuk kondisi *non steady-state* ditunjukkan sebagai konsentrasi massa fluida. Hal ini dapat dilihat dari perubahan warna pada setiap perlakuan nilai parameter yang diberikan Gambar 3.2 berikut,



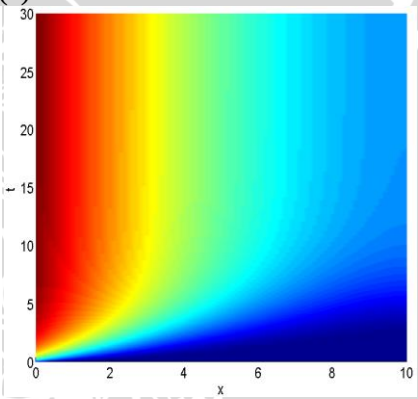
(a) (b)



(c)



(d)



(e)

Gambar 3.2 Konsentrasi massa fluida tiga dimensi. (a) Parameter D = 2 m^2/det, U = 1 m/det, k = 0,2 det^{-1}, c_{in} = 100 mol/m^3, $\Delta x = 0{,}1$ dan $\Delta t = 0{,}001$. (b) Sama seperti (a), kecuali D = 0,1 m^2/det. (c) Sama seperti (a), kecuali U = 0,1 m/det. (d) Sama seperti (a), kecuali k = 10 det^{-1}. (e) Sama seperti (a), kecuali $c_{in} = 10\ mol/m^3$.

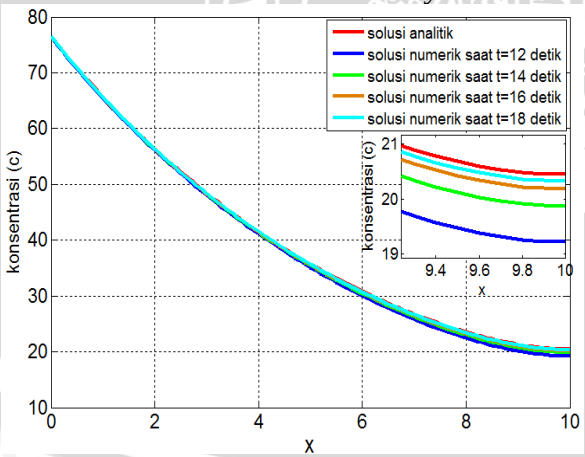
Terdapat perbedaan nilai parameter D pada Gambar 3.2 (a) dan (b). Pada Gambar 3.2 (a) difusi lebih menyebar ke kanan daripada Gambar 3.2 (b). Oleh karena itu, terlihat bahwa semakin besar nilai koefisien difusi D, difusi yang terjadi semakin cepat.

Pada Gambar 3.2 (a) dan Gambar 3.2 (c) terdapat perbedaan nilai parameter *U*. Pada kedua gambar tersebut diperlihatkan bahwa semakin besar parameter *U*, semakin cepat aliran fluida yang terjadi di sepanjang reaktor, sehingga mengakibatkan penyebaran *c* semakin banyak di sepanjang reaktor.

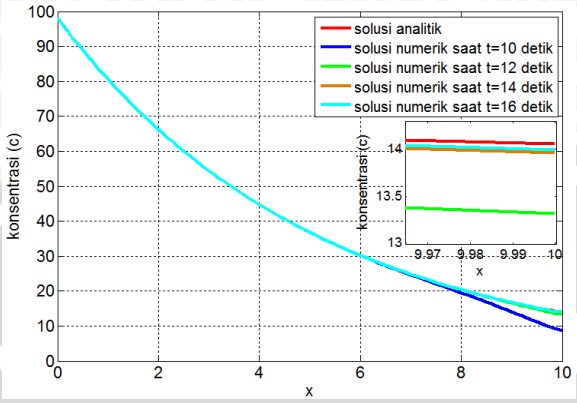
Terdapat perbedaan nilai parameter *k* pada Gambar 3.2 (a) dan Gambar 3.2 (d), yaitu parameter *k* makin besar. Kedua gambar tersebut memperlihatkan bahwa semakin besar nilai parameter *k*, semakin besar kerusakan reaksi fisi di dalam reaktor, sehingga semakin sedikit penyebaran konsentrasi massa fluida ke kanan.

Pada Gambar 3.2 (a) dan Gambar 3.2 (e) terdapat perbedaan nilai parameter c_{in}. Banyaknya konsentrasi massa fluida (*c*) yang menyebar di sepanjang reaktor hampir sama untuk kedua gambar. Dari kedua gambar tersebut dapat disimpulkan bahwa parameter c_{in} tidak mempengaruhi kecepatan aliran fluida sepanjang sumbu *x*. Parameter tersebut hanya mempengaruhi laju reaksi fisi yang terjadi dalam reaktor.

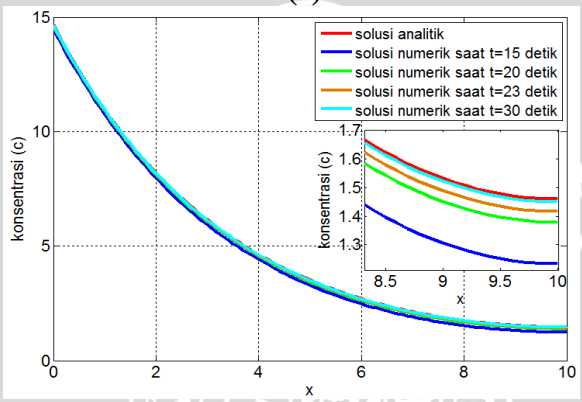
Selanjutnya, Gambar 3.3 menunjukkan perbandingan solusi analitik kondisi *steady-state* dan solusi numerik kondisi *non steady-state* untuk beberapa waktu yang berbeda. Pada gambar-gambar tersebut, grafik berwarna merah adalah solusi analitik kondisi *steady-state*. Sementara itu, grafik berwarna biru tua, hijau, cokelat, dan biru muda adalah solusi numerik kondisi *non steady state*.



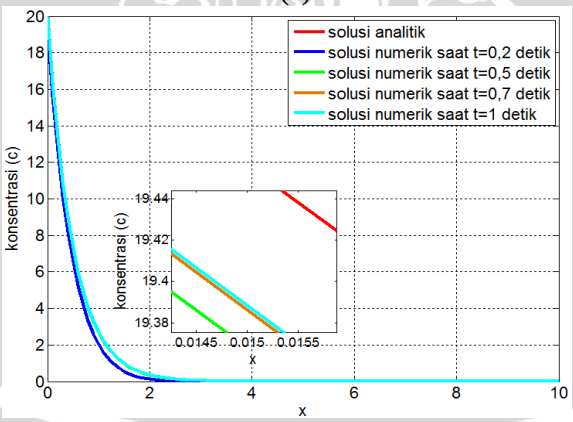
(a)


solusi analitik
solusi numerik saat t=10 detik
solusi numerik saat t=12 detik
solusi numerik saat t=14 detik
solusi numerik saat t=16 detik
konsentrasi (c)
x

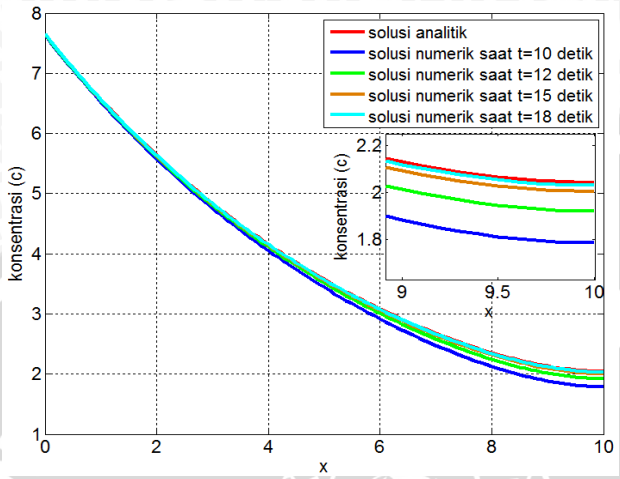
(b)


solusi analitik
solusi numerik saat t=15 detik
solusi numerik saat t=20 detik
solusi numerik saat t=23 detik
solusi numerik saat t=30 detik
konsentrasi (c)
x

(c)


solusi analitik
solusi numerik saat t=0,2 detik
solusi numerik saat t=0,5 detik
solusi numerik saat t=0,7 detik
solusi numerik saat t=1 detik
konsentrasi (c)
x

(d)



(e)

Gambar 3.3 Perbandingan kondisi *steady-state* yang diperoleh secara analitik dan numerik. (a) Parameter $D = 2\ m^2/det$, dan $U = 1\ m/det$, $k = 0{,}2\ det^{-1}$, $c_{in} = 100\ mol/m^3$, $\Delta x = 0{,}1$ dan $\Delta t = 0{,}001$. (b) Sama seperti (a), kecuali $D = 0{,}1\ m^2/det$. (c) Sama seperti (a), kecuali $U = 0{,}1\ m/det$. (d) Sama seperti (a), kecuali $k = 10\ det^{-1}$. (e) Sama seperti (a), kecuali $c_{in} = 10\ mol/m^3$.

Pada Gambar 3.3 (a), grafik berwarna biru tua, hijau, *orange*, dan biru muda berturut-turut menyatakan solusi numerik untuk t=12, t=14, t=16, dan t=18 detik. Sementara itu, grafik berwarna merah merupakan solusi analitik model untuk kondisi *steady-state*. Gambar tersebut memperlihatkan bahwa grafik solusi numerik untuk t yang lama akan mendekati solusi analitik kondisi *steady-state*.

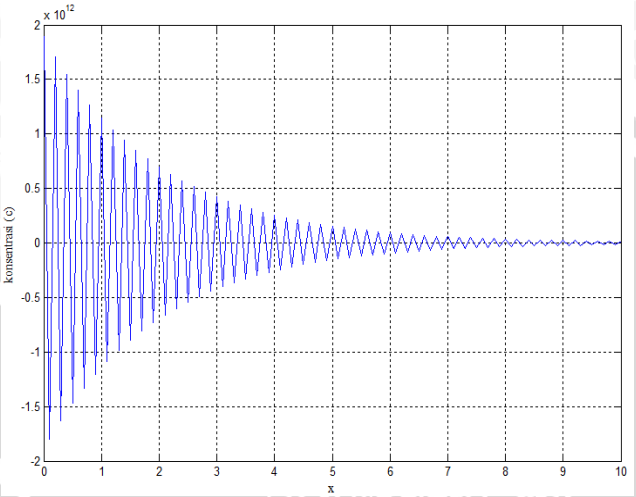
Pada Gambar 3.3 (b), grafik berwarna merah merupakan solusi analitik model untuk kondisi *steady-state*. Sementara itu, grafik berwarna biru tua, hijau, *orange*, dan biru muda berturut-turut menyatakan solusi numerik untuk waktu t=10, t=12, t=14, dan t=16 detik. Pada Gambar 3.3 (a) dan (b) terdapat perbedaan nilai parameter D. Dapat dilihat bahwa semakin kecil nilai D, waktu yang semakin sedikit bagi solusi numerik untuk mendekati solusi analitik kondisi *steady-state*.

Gambar 3.3 (c) menunjukkan perbandingan solusi analitik kondisi *steady-state* dan solusi numerik untuk beberapa waktu yang berbeda dengan nilai U yang lebih kecil. Grafik berwarna biru tua, hijau, *orange*, dan biru muda berturut-turut menyatakan solusi numerik untuk waktu t=15, t=20, t=23, dan t=30 detik. Dari Gambar 3.3 (a) dan (c), diketahui bahwa jika parameter U lebih kecil, maka waktu yang diperlukan solusi numerik untuk mendekati solusi analitik semakin besar, karena aliran fluida semakin lambat.

Pada Gambar 3.3 (d) parameter k bernilai lebih besar dari pada Gambar 3.3 (a). Semakin besar nilai parameter k, semakin cepat solusi numerik mendekati solusi analitik, karena kerusakan reaksi fisi yang terjadi di dalam reaktor semakin besar.

Selanjutnya, pada Gambar 3.3 (e), grafik berwarna biru tua, hijau, *orange*, dan biru muda berturut-turut menyatakan solusi numerik untuk waktu t=10, t=12, t=15, dan t=18 detik. Sementara itu, grafik berwarna merah merupakan solusi analitik kondisi *steady-state*. Gambar tersebut memperlihatkan grafik solusi numerik untuk t yang lama akan mendekati solusi analitik kondisi *steady-state*. Parameter c_{in} pada Gambar tersebut bernilai lebih kecil daripada Gambar 3.2 (a), dan waktu yang diperlukan untuk mendekati solusi analitik kondisi *steady-state* relatif sama. Parameter c_{in} tidak mempengaruhi waktu untuk mendekati solusi analitik.

Selain simulasi-simulasi tersebut, telah dilakukan pula simulasi numerik dengan nilai parameter seperti pada Gambar 3.3 (a), namum dengan menggunakan Δt yang berbeda. Simulasi ini menghasilkan solusi numerik seperti diperlihatkan pada Gambar 3.4. Dapat dilihat bahwa konsentrasi massa fluida (c) berfluktuasi secara ekstrim. Selain itu, diperoleh pula nilai konsentrasi massa fluida yang bernilai negatif. Jelas bahwa hal ini mustahil. Oleh karena itu, perlu dilakukan pembatasan pada nilai Δt atau Δx dengan melakukan analisis kestabilan pada skema numerik.



Gambar 3.4 Solusi numerik model kondisi *non steady-state* dengan nilai parameter $\Delta t = 0{,}0025$.

BAB IV
KESIMPULAN DAN SARAN

4.1 Kesimpulan

Berdasarkan pembahasan yang telah dilakukan, diperoleh kesimpulan sebagai berikut.

1. Solusi analitik model keseimbangan massa pada kondisi *steady-state* telah diperoleh dengan menggunakan persamaan karakteristik.
2. Dengan menggunakan skema eksplisit, diperoleh solusi numerik kondisi *non steady-state* yang memiliki kesalahan pemotongan $O(\Delta t, \Delta x^2)$.
3. Pada simulasi numerik yang dilakukan, telah ditunjukkan bahwa untuk *t* yang lama solusi numerik mendekati kondisi *steady-state* yang diperoleh secara analitik.
4. Interpretasi hasil numerik telah dilakukan dengan mengubah-ubah nilai parameter yang terdapat pada model.

4.2 Saran

Pada pengkajian selanjutnya perlu ditentukan suatu syarat untuk ukuran langkah Δt dan Δx agar skema numerik stabil.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA

DAFTAR PUSTAKA

Chapra, S. C. dan R. P. Canale. 2002. *Numerical Methods for Engineers with Software and Programming Applications 4th* Edition. USA: McGraw-Hill

Donati, G. dan Renato, P. 1999. Batch and Semibatch Catalytic Reactors (from Theory to Practice). *Catalysis Today*. 52. hal. 183-195

Duchateau, P. dan D. W. Zachman. 1986. *Schaum's Outline Series Theory and Problems of Partial Differential Equations*. New York: McGraw Hill

Finizio, N. dan G. Ladas. 1982. *Ordinary Differential Equations with Modern Application.* New York: McGraw Hill

Noye, J. 1982. *Numerical Solution of Partial Differntial Equation*. Amsterdam: North-Holland Publishing Company

Smallman, R. E. dan R. J. Bishop. 1995. *Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering* 6^{th} *Edition.* Butterwort-Heinemann: Reed Education and Professional Publishing Ltd

Triatmodjo, B. 2002. *Metode Numerik Dilengkapi dengan Program Komputer*. Yogyakarta: Beta Offset

Utomo, T. 1984. *Teori Dasar Fenomena Transpor*. Bandung: Binacipta

LAMPIRAN

Listing program* untuk kondisi *non steady-state

```
clear all
clc
D=2;
deltax=0.1;
deltat=0.001;
U=1;
k=0.2;
cin=100;
miu=deltat/deltax;
lambda=deltat/deltax^2;
x=0:deltax:10;
n=length(x);
m=10000
t(1)=0;
for i=2:m
    t(i)=t(i-1)+deltat;
end;
A=zeros(n,n);
c=zeros(n,m);
cinput=zeros(n,1);
cinput(1,1)=((2*lambda*U*deltax)+((U^2*miu*delta
x)/D))*cin;
for i=1:n
    c(i,1)=0;
end
figure(7);
plot(x,c(:,1));
for i=2:m
    for j=1:n
    if j==1
        A(j,j)=-((2*D*lambda)+(k*deltat)-
1+(2*U*deltax*lambda)+((U^2*miu*deltax)/D));
        A(j,j+1)=(2*D*lambda);
    elseif j==n
        A(j,j-1)=(2*D*lambda);
        A(j,j)=-((2*D*lambda)+(k*deltat)-1);
    else
        A(j,j-1)=(D*lambda)+((U*miu)/2);
```

```
        A(j,j)=-((2*D*lambda)+(k*deltat)-1);
        A(j,j+1)=(D*lambda)-((U*miu)/2);
    end
    end
    c(1:n,i)=A*c(1:n,i-1)+cinput;
    figure(5);
    plot(x,c(:,i),'g');
    xlabel('x');
    ylabel('c');
end;
figure(6);
surface(x,t,c');
shading interp;
xlabel('x');
ylabel('t');
zlabel('c');
```