DINAMIKA MODEL MATEMATIKA REAKSI OKSIDASI MENGGUNAKAN REAKTOR ALIRAN BOLAK-BALIK DENGAN PENDEKATAN NUMERIK

(SKRIPSI)

Oleh

RAHMAD RIYANTO

JURUSAN MATEMATIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2018

ABSTRACT

MATHEMATICAL MODEL DYNAMICS OF OXIDATION REACTIONS USING REVERSE FLOW REACTOR WITH NUMERICAL APPROACHES

By

Rahmad Riyanto

The dynamics of oxidation reaction methane using reverse flow reactor (RFR) are given by a set of convection - diffusion equation form that containing the non-linear term corresponding to the reaction rate and provided with certain initial and boundary conditions. On this research, 1-D pseudo-homogeneous model used to study the dynamic profiles of dependent variable temperature and feed concentration on oxidation process using numeric simulation approach. Some variations of feed concentration function and RFR operation parameter simulated to see the influence towards temperature and feed concentration profile. The result of numeric simulation shows that the temperature profile with constant, periodic and square vawe function of feed concentration, qualitatively almost the same. But for temperature profile with periodic and square vawe function will have fluctuation because low and high feed concentration that enter the reactor. The lower and faster superficial gas velocity is very influence to temperatur profile which consequence the duration of reactor operation. RFR operation parameter small switching time, medium gas velocity and small specific reactor wall surface will make the reactor operated longer.

Keywords : *oxidation reaction, convection - diffusion equation, reverse flow reactor, switching time*

ABSTRAK

DINAMIKA MODEL MATEMATIKA REAKSI OKSIDASI MENGGUNAKAN REAKTOR ALIRAN BOLAK-BALIK DENGAN PENDEKATAN NUMERIK

Oleh

Rahmad Riyanto

Dinamika reaksi oksidasi metana menggunakan reaktor aliran bolak-balik (RABB) dapat digambarkan dalam bentuk persamaan difusi - konveksi yang mengandung suku tak linear terkait laju reaksi dan dilengkapi dengan syarat awal dan syarat batas tertentu. Pada penelitian ini, model homogen semu 1 dimensi digunakan untuk mempelajari profil dinamika variabel tak bebas temperatur dan konsentrasi gas umpan pada proses oksidasi tersebut melalui simulasi numerik. Beberapa variasi konsentrasi gas umpan dan parameter operasi RABB disimulasikan untuk melihat pengaruhnya terhadap profil temperatur dan konsentrasi gas umpan. Berdasarkan hasil simulasi numerik menunjukkan bahwa profil temperatur dengan konsentrasi gas umpan fungsi periodik, konstan maupun *square wave* secara kualitatif hampir sama. Namun untuk profil temperatur dengan fungsi periodik dan *square vawe* akan mengalami naik turun dikarenakan terdapat konsentrasi gas umpan tinggi dan rendah yang masuk ke dalam reaktor. Besar kecilnya gas umpan sangat berpengaruh pada profil temperatur yang berakibat lamanya pengoperasian reaktor. Parameter operasi RABB waktu balikan kecil, laju alir gas umpan sedang dan luas dinding penampang reaktor kecil akan membuat reaktor dapat beroperasi lebih lama.

Kata kunci : *reaksi oksidasi, persamaan difusi - konveksi, reaktor aliran bolak-balik, waktu balikan*

DINAMIKA MODEL MATEMATIKA REAKSI OKSIDASI MENGGUNAKAN REAKTOR ALIRAN BOLAK-BALIK DENGAN PENDEKATAN NUMERIK

Oleh

RAHMAD RIYANTO

Skripsi

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Memperoleh Gelar
SARJANA SAINS

Pada

Jurusan Matematika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2018

Judul Skripsi : **DINAMIKA MODEL MATEMATIKA REAKSI OKSIDASI MENGGUNAKAN REAKTOR ALIRAN BOLAK-BALIK DENGAN PENDEKATAN NUMERIK**

Nama Mahasiswa : *Rahmad Riyanto*

No. Pokok Mahasiswa : 1417031095

Jurusan : Matematika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

MENYETUJUI

1. Komisi Pembimbing

Dr. Aang Nuryaman, S.Si., M.Si.	**Subian Saidi, S.Si., M.Si.**
NIP 19740316 200501 1 001	NIP 19800821 200812 1 001

2. Ketua Jurusan Matematika

Prof. Dra. Wamiliana, M.A., Ph.D.
NIP 19631108 198902 2 001

MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

Ketua : **Dr. Aang Nuryaman, S.Si., M.Si.** .....

Sekretaris : **Subian Saidi, S.Si., M.Si.** .....

Penguji
Bukan Pembimbing : **Drs. Tiryono Ruby, M.Sc., Ph.D.** .....

2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Prof. Warsito, S.Si., D.E.A., Ph.D.
NIP 19710212 199512 1 001

Tanggal Lulus Ujian Skripsi : **19 Juli 2018**

SURAT PERNYATAAN

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : **Rahmad Riyanto**

Nomor Pokok Mahasiswa : **1417031095**

Jurusan : **Matematika**

Judul Skripsi : **Dinamika Model Matematika Reaksi Oksidasi Menggunakan Reaktor Aliran Bolak-Balik dengan Pendekatan Numerik**

Dengan ini menyatakan bahwa penelitian ini adalah hasil pekerjaan saya sendiri, dan sepanjang pengetahuan saya tidak berisi materi yang telah dipublikasikan atau ditulis orang lain atau telah dipergunakan dan diterima sebagai persyaratan penyelesaian studi pada Universitas atau Institut lain.

Bandar Lampung, 19 Juli 2018
Yang Menyatakan

METERAI TEMPEL
TGL. 20
4E687AFF048182526
6000
ENAM RIBU RUPIAH

Rahmad Riyanto

RIWAYAT HIDUP

Penulis bernama lengkap Rahmad Riyanto, lahir di Kotagajah, pada tanggal 28 Mei 1996. Penulis merupakan anak terakhir dari empat bersaudara dari pasangan Bapak Arismanto dan (Almh) Ibu Ratmalita.

Penulis menyelesaikan pendidikan dasar di SD Negeri 2 Kotagajah pada tahun 2008, pendidikan menengah pertama di SMP Negeri 2 Kotagajah pada tahun 2011, dan menyelesaikan pendidikan menengah atas di SMA Negeri 1 Kotagajah pada tahun 2014. Kemudian pada tahun 2014, penulis diterima melalui jalur SNMPTN dan terdaftar sebagai mahasiswa reguler Program Studi Matematika, Jurusan Matematika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam di Universitas Lampung. Selama menempuh pendidikan di Universitas Lampung penulis merupakan salah satu mahasiswa penerima beasiswa Bidikmisi.

Pada tahun awal 2017 sebagai bentuk aplikasi bidang ilmu di dunia kerja, penulis telah melaksanakan Kerja Praktik di Dinas Perkebunan dan Petanian Provinsi Lampung. Sebagai bentuk aplikasi bidang ilmu kepada masyarakat, penulis telah melaksanakan Kuliah Kerja Nyata pada tahun 2017 di Desa Sinar Sekampung, Kec. Air Naningan, Kab. Tanggamus, Lampung.

Kata Inspirasi

"Demi masa. Sesungguhnya manusia benar-benar dalam kerugian. Kecuali orang-orang yang beriman dan mengerjakan amal shaleh dan mereka yang saling mengingatkan tentang kebenaran dan saling mengingatkan tentang kesabaran"
(QS. Al-Ashr)

"Barang siapa meninggalkan sesuatu karena Allah, maka Allah akan memberinya ganti yang lebih baik"
(HR. Muslim)

"Jangan biarkan kesulitan membuatmu gelisah, karena bagaimanapun juga hanya di malam yang paling gelap lah bintang-bintang tampak bersinar lebih terang"
(Ali bin Abi Thalib)

"Jika mata dibiasakan melihat yang tidak baik, ketika datang kebaikan padamu, maka hatimu tidak akan peka dan sulit menerimanya"
(Ust. Adi Hidayat, LC)

"Jadilah seseorang yang menebar manfaat, pribadi yang lebih baik dari sebelumnya, dan tangguh dalam menghadapi tantangan"
(R F R)

"Yang patah akan tumbuh, yang hilang akan terganti"
(Anonim)

"Bersabarlah tanpa batas"
(RahmadR)

PERSEMBAHAN

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَٰنِ الرَّحِيمِ

Alhamdulillahirobbil'alamin
Dengan kerendahan hati dan rasa syukur kepada Allah SWT
Kupersembahkan karya ini kepada:

Orang Tua Tercinta Bapak Arismanto dan Almh. Ibu Ratmalita
atas limpahan kasih sayang, do'a dan tetesan keringat dalam merawat dan
menyekolahkanku selama ini demi kesuksesanku. Serta Kakak-kakak Tersayang
Rika Oktarisna, Rully Ferdian dan Getti Damayanti yang selalu memberikan semangat
dan dukungan.

Para Pendidikku, Dosen dan Guruku yang telah memberikan ilmu kepadaku.

Semua sahabat terbaik yang selalu memberikan inspirasi, dukungan, pertolongan,
semangat dan motivasi.

Dan ter-spesial untuk 'R F R' yang telah memberikan inspirasi, kenangan berharga
dan pembelajaran untuk menjadi pribadi yang dewasa dan lebih baik.

Almamater dan Negeriku Tercinta.

SANWACANA

Alhamdulillahirobbil'alamin, puji syukur kehadirat Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Dinamika Model Matematika Reaksi Oksidasi Menggunakan Reaktor Aliran Bolak-Balik dengan Pendekatan Numerik".

Penulis menyadari bahwa dalam penyelesaian skripsi ini tidak terlepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terimakasih kepada :

1. Bapak dan ibu tercinta, serta kakak-kakakku tersayang, yang selalu mendoakan, memberikan motivasi, semangat, dan dukungan baik secara moril maupun materil.
2. Bapak Dr. Aang Nuryaman, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing I yang telah meluangkan waktu untuk membimbing, memberikan masukan, motivasi, serta kritik dan saran yang membangun kepada penulis dalam penyusunan skripsi sehingga skripsi ini menjadi lebih baik lagi.
3. Bapak Subian Saidi, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing II atas bimbingan dan saran yang membangun dalam penyusunan skripsi ini.
4. Bapak Drs. Tiryono Ruby, M.Sc., Ph.D., selaku Dosen Pembahas yang telah memberikan kritik dan saran yang positif dalam penyusunan skripsi ini.

5. Bapak Dr. Muslim Ansori, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan arahan, bimbingan, motivasi semangat bagi penulis selama masa studi.
6. Ibu Prof. Dra. Wamiliana, M.A., Ph.D., selaku Ketua Jurusan Matematika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung.
7. Bapak Prof. Warsito, S.Si., D.E.A., Ph.D., selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung.
8. Seluruh Dosen dan staff Jurusan Matematika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung, khususnya Bapak tamrin dan Bapak Drajat.
9. Beasiswa Pendidikan Mahasiswa Miskin Berprestasi (Bidikmisi) yang telah memberikan bantuan dana selama penulis menyelesaikan studi.
10. Ter-spesial ‘R F R’ yang telah menjadi penyemangat untuk memulai langkah, selalu melangkah, dan terus melangkah ke depan, memberikan insipirasi, dukungan, kebahagiaan dan kenangan berharga serta menjadi pengingat bagi penulis agar menjadi pribadi yang dewasa dan lebih baik.
11. Sahabat-sahabatku, Sobri, Mifta, dan Anggi yang telah memberikan semangat, pertolongan dan motivasi bagi penulis.
12. Teman-teman baik, Wahyu, Agus, Ketut, Dracjat, Alvin, Redi, Rama, Raka, Ncek, Arisca, Fathur, Rois serta Novi, Kasandra, Fitrotin, Uung yang telah memberikan semangat, motivasi, pertolongan dan insprasi dari awal perkuliahan hingga skripsi ini berhasil terbuat.
13. Teman-teman seperjuangan seluruh Keluarga Matematika 2014, serta kakak dan adik tingkat 2013 dan 2015 terimakasih atas kebersamaannya selama ini.

Semoga dengan kebaikan, bantuan, dan dukungan yang telah diberikan mendapat balasan pahala yang setimpal dari Allah SWT dan mudah-mudahan skripsi ini bermanfaat.

Akhir kata, penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari sempurna untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun.

Bandar Lampung, 19 Juli 2018
Penulis

Rahmad Riyanto

DAFTAR ISI

Halaman

DAFTAR GAMBAR xv

DAFTAR TABEL xvii

I. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang 1
1.2. Tujuan 3
1.3. Manfaat 4

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Reaktor Aliran Bolak-Balik 5
2.2. Laju Reaksi 8
2.3. Persamaan Diferensial Parsial 9
2.4. Persamaan Difusi – Konveksi 11
2.5. Kondisi Awal dan Kondisi Batas 13
2.6. Metode Beda Hingga 14

III. METODE PENELITIAN

3.1. Waktu dan Tempat Penelitian 18
3.2. Metode Penelitian 18

IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1. Penentuan Model 19
4.2. Hasil Simulasi Numerik 24

V. KESIMPULAN

DAFTAR PUSTAKA

LAMPIRAN

DAFTAR GAMBAR

Gambar **Halaman**

1.1. Skema reaktor aliran bolak-balik 6
1.2. Fenomena *heat trap* pada operasi aliran bolak-balik 7
1.3. Fenomena perpindahan pada 1 dimensi 12
4.1. Grafik fungsi konsentrasi gas umpan (C_{in}) 25
4.2. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan konsentrasi gas umpan fungsi periodik 26
4.3. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan konsentrasi gas umpan fungsi konstan 27
4.4. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan konsentrasi gas umpan fungsi *square wave* 28
4.5. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi gas umpan pada $t = 360$ detik dengan variasi fungsi konsentrasi gas umpan 29
4.6. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan $t_f = 180$ detik 30
4.7. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan $t_f = 60$ detik 31
4.8. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan $t_f = 30$ detik pada balikan 1-3 32
4.9. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan $t_f = 30$ detik pada balikan 4-6 33
4.10. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi gas umpan pada $t = 360$ detik dengan variasi waktu balikan 34
4.11. Variasi frekuensi gelombang (ω) pada konsentrasi gas umpan fungsi periodik 35
4.12. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan frekuensi gelombang 5π 36
4.13. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan frekuensi gelombang $\pi/5$ 37
4.14. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan frekuensi gelombang $\pi/2$ 38
4.15. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi pada $t = 360$ detik dengan variasi frekuensi gelombang konsentrasi gas umpan fungsi periodik 39
4.16. Variasi amplitudo gelombang (B) pada konsentrasi gas umpan fungsi periodik 40
4.17. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan amplitudo gelombang 0.05 41

4.18. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan amplitudo gelombang 0.15 42
4.19. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan amplitudo gelombang 0.25 43
4.20. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi pada $t = 360$ detik dengan variasi amplitudo gelombang konsentrasi gas umpan fungsi periodik 44
4.21. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan laju alir gas $0{,}1\ m/s$ 45
4.22. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan laju alir gas $0{,}3\ m/s$ 46
4.23. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan laju alir gas $0{,}5\ m/s$ 47
4.24. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi pada $t = 360$ detik dengan variasi laju alir gas 48
4.25. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan luas penampang dinding reaktor 0 50
4.26. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan luas penampang dinding reaktor 1/0,00735 51
4.27. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan luas penampang dinding reaktor 2/0,00735 52
4.28. Dinamika temperatur dan konsentrasi dengan luas penampang dinding reaktor 4/0,00735 53
4.29. Perbandingan kondisi temperatur dan konsentrasi pada $t = 360$ detik dengan variasi luas penampang dinding reaktor 54
4.30. Dinamika temperatur dan konsentrasi kondisi rektor padam 56
4.31. Kondisi temperatur dan konsentrasi pada $t = 480$ detik..... 56

DAFTAR TABEL

Tabel **Halaman**

1. Beberapa formula metode beda hingga 17
2. Nilai parameter operasi RABB yang digunakan pada simulasi 23

I. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Saat ini pemanasan global merupakan salah satu masalah terbesar bagi dunia. Penelitian yang telah dilakukan para ahli selama beberapa dekade terakhir ini menunjukan bahwa makin panasnya bumi salah satunya adalah akibat gas-gas rumah kaca yang dihasilkan oleh aktivitas manusia. Setiap gas rumah kaca memiliki efek pemanasan global yang berbeda-beda. Banyaknya jumlah metana di atmosfer dipercaya sebagai salah satu yang menyebabkan semakin panasnya bumi. Kontribusi emisi metana pada efek rumah kaca menunjukan 17% dari semua emisi gas-gas rumah kaca lainnya.

Salah satu strategi untuk mengurangi pengaruh pemanasan global adalah dengan mengkonversi gas CH_4 menjadi gas CO_2 menurut persamaan reaksi oksidasi (pembakaran) :

$$\mathrm{CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O;} \qquad \Delta H_{298} = -802{,}7\ kJ/mol$$

Setiap 1 mol gas CH_4 yang dioksidasi akan melepaskan energi panas sebesar 802,7 kJ. Konversi gas CH_4 menjadi gas CO_2 akan menurunkan pengaruh pemanasan sebesar 87%. Keberadaan gas metana yang cukup kecil di udara (0,1-

1% volume) menyebabkan konversi gas metana menjadi gas CO_2 membutuhkan katalis agar reaksi tersebut dapat berlangsung. Di sisi lain temperatur metana yang rendah (sekitar 303 K) sangat jauh dari temperatur reaksi sehingga membutuhkan pemanasan awal gas umpan.

Metode operasi aliran bolak-balik yang diterapkan pada reaktor unggun diam katalik atau Reaktor Aliran Bolak-Balik (RABB) adalah metode yang tepat untuk mengoksidasi gas CH_4 menjadi CO_2. RABB mempunyai keunggulan dibandingkan reaktor unggun diam katalitik konvensional dalam hal kemampuan beroperasi secara ototermal.

Strategi untuk menghindari reaktor bersifat isotermal adalah dengan membuat suatu prosedur operasi terkait dengan waktu balikan (*switching time*) secara periodik terhadap laju akumulasi panas di dalam reaktor khususnya pada bagian inert. Laju akumulasi panas ini akan dapat memperlihatkan reaktor akan padam (bersifat isotermal).

Perilaku dinamika gas umpan di dalam reaktor katalitik selama reaksi berlangsung terus dikaji untuk memperoleh data yang dibutuhkan untuk merancang reaktor yang baik dan sesuai. Dinamika gas umpan di dalam reaktor dapat dipandang sebagai masalah dinamika fluida dalam media berpori dengan gas umpan sebagai fluida dan katalis sebagai media berporinya. Masalah tersebut biasanya digambarkan dalam bentuk model matematika berupa persamaan difusi - konveksi yang didalamnya terkandung suku tak linear yang terkait dengan laju reaksi.

Simulasi digunakan untuk mempelajari bagaimana perilaku dinamika gas umpan disepanjang reaktor khususnya yang terkait dengan konsentrasi dan temperatur gas umpan selama reaksi oksida berlangsung. Salah satu model matematika yang menggambarkan dinamika temperatur dan konsentrasi pada oksidasi CH_4 menggunakan RABB telah dikemukan oleh Khinast, *et. al.* (1999), yaitu model homogen semu 1 dimensi, dimana sepanjang reaktor dinamika gas umpan dianggap mengalami keadaan yang sama (homogen).

Dalam Nuryaman (2016), telah dikaji dinamika konsentrasi dan temperatur pada kondisi *start up* yaitu kondisi reaktor dalam satu kali balikan. Pada penelitian ini akan dikaji dinamika konsentrasi dan temperatur pada beberapa variasi waktu balikan (*switching time*). Lebih lanjut akan dikaji dinamika konsentrasi dan temperatur dengan konsentrasi gas umpan fungsi periodik, fungsi konstan dan fungsi *square wave*. Serta akan dikaji sensitivitas parameter yang terkait pada model.

2.1. Tujuan

Adapun tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mendapatkan profil konsentrasi dan temperatur di dalam reaktor dalam kasus konsentrasi gas umpan fungsi periodik, *square wave*, dan konstan serta pengaruh parameter operasi RABB (waktu balikan, frekuensi dan amplitudo gelombang gas umpan, laju alir gas, dan luas penampang dinding reaktor) terhadap profil tersebut.

3.1. Manfaat

Manfaat dari penilitian ini yaitu:

1. Mengetahui model matematika untuk reaktor aliran bolak-balik.
2. Dapat menvisualisasikan profil temperatur dan konsentrasi pada reaktor aliran bolak-balik.
3. Mengetahui nilai parameter operasi reaktor aliran bolak-balik agar reaktor dapat beroperasi lebih lama.

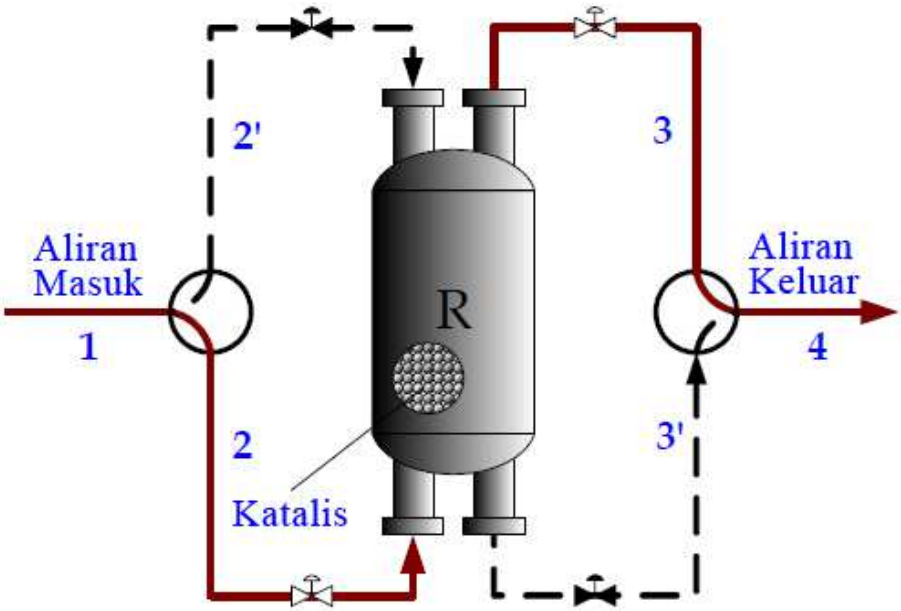
II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Reaktor Aliran Bolak-Balik

Reaktor tak tunak merupakan reaktor yang memiliki variabel proses bervariasi terhadap waktu. Ketidaktunakan ini dapat diimplementasikan pada variabel proses reaktor utama berupa temperatur, tekanan, laju alir, dan konsentrasi. Perubahan variabel proses (terutama temperatur) terhadap waktu memberikan kesempatan mempertahankan laju reaksi di permukaan katalis pada laju yang optimal.

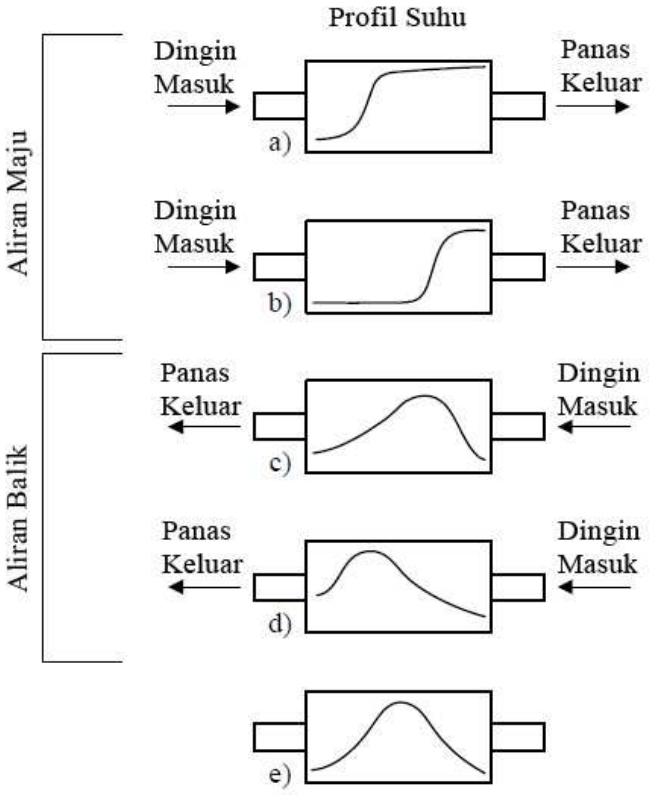
Salah satu alternatif pengoperasian reaktor tak tunak adalah dengan cara mengubah aliran yang melalui reaktor secara periodik. Konsep ini dikenal dengan Reaktor Aliran Bolak-balik (RABB) atau *Reverse Flow Reactor* (RFR). RABB dapat didefinisikan sebagai reaktor unggun diam yang arah alirannya diubah secara periodik dalam selang waktu tertentu, selang waktu ini disebut waktu balikan.

Secara sederhana, konsep RABB dapat dilihat pada Gambar 2.1, proses dibagi menjadi 2 siklus. Selama siklus pertama, aliran berlangsung dengan urutan 1-2-R-3-4, dan pada siklus berikutnya melewati 1-2’-R-3’-4 (Budhi, 2005).



Gambar 2.1. Skema reaktor aliran bolak-balik (Budhi, 2005).

RABB akan menciptakan suatu fenomena yang dikenal dengan nama "efek jebakan panas" atau *heat trap effect* pada kasus reaksi eksotermik. Efek ini dapat dimanfaatkan untuk mencapai dan mempertahankan temperatur yang lebih tinggi dibandingkan terhadap temperatur pada saat operasi dengan mode aliran searah (*single direction flow mode*). Fenomena *heat trap effect* ini diilustrasikan pada Gambar 2.2.



Gambar 2.2. Fenomena *heat trap* pada operasi aliran bolak-balik (Liu, *et. al.*, 2000).

Gambar 2.2(a) menunjukkan profil temperatur reaktor untuk pembakaran reaksi eksotermik dioperasikan dengan mode aliran searah. Pada Gambar 2.2(b) temperatur mula-mula naik secara perlahan kemudian meningkat secara drastis pada zona dimana panas reaksi dibebaskan. Ketika arah aliran dibalik dari sisi *oulet* menuju *inlet*, maka energi yang tersimpan di reaktor secara sendirinya digunakan untuk memanaskan umpan. Hal ini menyebabkan temperatur umpan pada zona *outlet* akan lebih tinggi dibandingkan temperatur umpan mula-mula pada sisi *inlet*. Hal ini ditunjukkan pada Gambar 2.2(c) dan Gambar 2.2(d). Setelah sejumlah siklus tertentu, distribusi temperatur di sepanjang reaktor lebih merata, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.2(e) (Liu, *et. al.*, 2000).

2.2. Laju Reaksi

Laju reaksi pada reaksi kimia menujukkan perubahan konsentrasi dari zat selama waktu tertentu. Persamaan matematika yang menghubungkan konsentrasi dan waktu disebut persamaan laju reaksi atau hukum laju reaksi. Bila suatu reaksi ditunjukan sebagai

$$a\mathrm{A} + b\mathrm{B} \rightarrow c\mathrm{C} + d\mathrm{D} \tag{2.1}$$

hukum laju reaksi berhubungan dengan konsentrasi A dan B, seperti persamaan berikut :

$$r = k[\mathrm{A}]^{\alpha}[\mathrm{B}]^{\beta} \tag{2.2}$$

dimana :

r = laju reaksi (mol s^{-1})

k = konstanta laju reaksi

A, B = konsentrasi reaktan yang bereaksi (molar)

α, β = orde reaksi terhadap A,B

(House, 2007)

2.2.1. Persamaan Arrhenius

Pada akhir abad 18, Svante August Arrhenius mengusulkan sebuah persamaan yang menggambarkan pengaruh temperatur terhadap konstanta laju reaksi. Persamaan ditunjukan sebagai:

$$k = \eta e^{-E_a/RT} \tag{2.3}$$

dimana :

k = konstanta laju reaksi

η = faktor frekuensi (atau faktor pre-eksponensial)

E_a = energi aktivasi (kJ/mol)

R = konstanta gas ideal (8.314 J/mol.K)

T = temperatur mutlak (K)

(House, 2007)

2.3. Persamaan Diferensial Parsial

Persamaan diferensial parsial adalah persamaan yang terdiri dari turunan parsial. Berbeda dari persamaan diferensial biasa, dimana fungsi tak diketahui bergantung hanya pada satu variabel. Pada PDP, fungsi tak diketahui bergantung pada beberapa variabel (contohnya temperatur $\varphi(x, t)$ bergantung pada jarak x dan waktu t).

Persamaan diferensial parsial dapat diklasifikasikan berdasarkan banyak hal. Pengklasifikasian persamaan diferensial parsial adalah konsep penting karena teori umum dan metode penyelesaiannya sering digunakan hanya pada jenis persamaan. Enam klasifikasi umum persamaan diferensial parsial antara lain :

1. Orde persamaan diferensial parsial.

   Orde dari persamaan diferensial ditentukan berdasarkan turunan parsial tertinggi dari persamaan.

2. Jumlah variabel.

   Jumlah variabel ditentukan dari banyaknya variabel bebas.

3. Kelinearan.

   Berdasarkan kelinearan, PDP dapat digolongan sebagai linear dan tak linear. Disebut linear, jika variabel tak bebas φ dan semua turunannya dalam bentuk linear (hasil kali tidak diperbolehkan). Bila tidak memenuhi syarat ini, persamaan tersebut adalah tak linier. Agar lebih jelas, suatu persamaan diferensial parsial linear orde dua dalam variabel ruang x dan waktu t berbentuk :

$$\boldsymbol{A}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\boldsymbol{B}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x\partial t}+\boldsymbol{C}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+\boldsymbol{D}\frac{\partial\varphi}{\partial x}+\boldsymbol{E}\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\boldsymbol{F}\varphi=\boldsymbol{G} \qquad (2.4)$$

   dimana $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D},\boldsymbol{E},\boldsymbol{F}$, dan $\boldsymbol{G}$, kontans atau fungsi dalam x dan t.

4. Kehomogenan.

   Persamaan (2.4) disebut homogen jika sisi kanan $\boldsymbol{G}(x,t)$ adalah nol untuk semua x dan t. Jika $\boldsymbol{G}(x,t)$ tidak nol, maka Persamaan (2.4) disebut tidak homogen.

5. Jenis Koefisien.

   Jika koefisien $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D},\boldsymbol{E}$ dan $\boldsymbol{F}$ pada Persamaan (2.4) adalah konstan, maka Persamaan (2.4) disebut memiliki koefisien konstan (selainnya, koefisien variabel).

6. Tiga tipe umum persamaan linear.

   Semua PDP seperti pada Persamaan (2.4) dibagi menjadi tiga tipe, yaitu persamaan diferensial eliptik, parabolik, dan hiperbolik. Yang membedakan atas tiga tipe persamaan diferensial parsial tersebut adalah pada nilai diskriminan $\boldsymbol{B}^2-4\boldsymbol{AC}$ pada Persamaan (2.4) tersebut.

a. Persamaan diferensial parsial dikatakan **persamaan hiperbolik** jika nilai diskriminan $\boldsymbol{B}^2 - 4\boldsymbol{AC} > 0$. Salah satu contoh persamaan hiperbolik adalah persamaan gelombang :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \tag{2.5}$$

b. Persamaan diferensial parsial dikatakan **persamaan parabolik** jika nilai diskriminan $\boldsymbol{B}^2 - 4\boldsymbol{AC} = 0$. Salah satu contoh persamaan parabolik adalah persamaan difusi :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - u \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \tag{2.6}$$

c. Persamaan diferensial parsial dikatakan **persamaan eliptik** jika nilai diskriminan $\boldsymbol{B}^2 - 4\boldsymbol{AC} < 0$. Salah satu contoh persamaan eliptik adalah pada persamaan Laplace :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0 \tag{2.7}$$

(Farlow,1982)

2.4. Persamaan Difusi – Konveksi

Persamaan umum difusi - konveksi adalah

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{u} \cdot \vec{\nabla} \varphi = D \nabla^2 \varphi \tag{2.8}$$

dimana $\vec{\nabla}$ adalah operator del, yang mendefinisikan operator turunan parsial sebagai

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

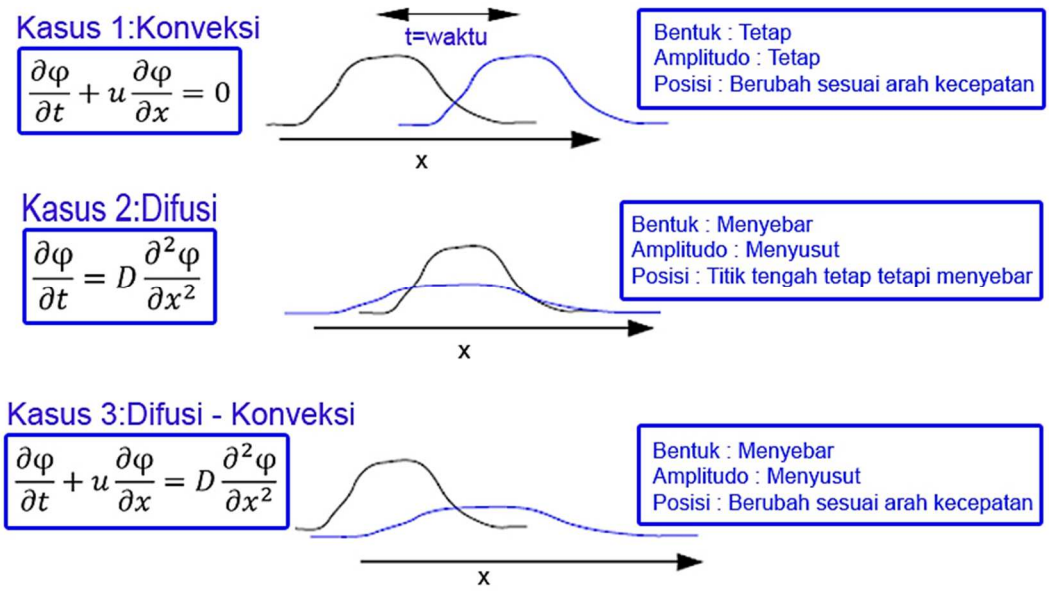
dan ∇^2 adalah operator Laplace yang mendefinisikan operator turunan kedua pada dimensi-n sebagai

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial {x_i}^2}$$

Persamaan difusi - konveksi ada kasus 1 dimensi :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u\frac{\partial \varphi}{\partial x} = D\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \tag{2.9}$$

dimana D adalah koefisien dispersi dan u adalah kecepatan molekular (Panigrahi, 2016).



Gambar 2.3. Fenomena perpindahan pada 1 dimensi

2.5. Kondisi Awal dan Kondisi Batas

Menurut Strauss (1992), kondisi awal biasanya berhubungan dengan waktu awal t_0. Sebagai contoh untuk persamaan difusi kondisi awal adalah :

$$\varphi(\mathbf{x}, t_0) = \phi(\mathbf{x}) \tag{2.10}$$

dimana $\phi(\mathbf{x}) = \phi(x, y, z)$ adalah fungsi yang ditentukan. Pada penyebaran subtansi, $\phi(\mathbf{x})$ adalah konsentrasi awal. Untuk aliran panas, $\phi(\mathbf{x})$ adalah temperatur awal.

Terdapat tiga jenis kondisi batas yang penting, yaitu :

1. Kondisi Dirichlet, jika φ telah ditentukan.
2. Kondisi Neumann, jika turunan normalnya $\frac{\partial \varphi}{\partial n}$ ditentukan.
3. Kondisi Robin, jika $\frac{\partial \varphi}{\partial n} + \alpha_0 \varphi$ telah ditentukan, dengan $\alpha_0$adalah sebuah fungsi yang bergantung pada variabel yang sama dengan φ.

Pada masalah 1-dimensi dimana domain pada interval $0 \leq x \leq L$, batas hanya terdiri dari dua titik ujung, dan kondisi tersebut dalam bentuk sederhana :

1. Kondisi Dirichlet, $\varphi(0, t) = f(t)$ dan $\varphi(L, t) = g(t)$.
2. Kondisi Neumann, $\frac{\partial}{\partial x}\varphi(0, t) = h(t)$ dan $\frac{\partial}{\partial x}\varphi(L, t) = i(t)$.
3. Kondisi Robin, $\frac{\partial}{\partial x}\varphi(0, t) + \alpha_0 \varphi(0, t) = j(t)$ dan $\frac{\partial}{\partial x}\varphi(L, t) + \alpha_0 \varphi(L, t) = k(t)$.

2.6. Metode Beda Hingga

Metode beda hingga bekerja dengan merubah daerah variabel bebas menjadi grid berhingga yang disebut *mesh* dimana variabel terikat diaproksimasi. Misalkan φ adalah bergantung pada x dan t. Dengan menggunakan deret Taylor, akan dikonstruksi turunan parsial φ terhadap x.

$$\varphi(x_0 + \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) + \Delta x\, \varphi_x(x_0, t) + \frac{\Delta x^2}{2!}\varphi_{xx}(x_0, t) + \cdots + \frac{\Delta x^{n-1}}{(n-1)!}\varphi_{n-1}(x_0, t) + O(\Delta x^n) \tag{2.11}$$

Dengan memangkas Persamaan (2.11) pada $O(\Delta x^2)$ diperoleh

$$\varphi(x_0 + \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) + \Delta x\, \varphi_x(x_0, t) + O(\Delta x^2) \tag{2.12}$$

Dari Persamaan (2.12) diperoleh

$$\varphi_x(x_0, t) = \frac{\varphi(x_0 + \Delta x, t) - U(x_0, t)}{\Delta x} - O(\Delta x) \tag{2.13}$$

Dalam skema numerik, variabel x dipartisi menjadi diskret yang disebut grid, $x_1, x_2, \dots, x_N$ dan t dipartisi pada sebanyak $M, t = t_0, t_1, t_2, \dots, t_M$. Jika Δx diasumsikan konstan dan $x_{i+1} = x_i + \Delta x$, maka dari (2.13) diperoleh

$$\varphi_x(x_i, t_n) = \frac{\varphi(x_{i+1}, t_n) - \varphi(x_i, t_n)}{\Delta x} - O(\Delta x) \tag{2.14}$$

Dengan mengabaikan bentuk $O(\Delta x)$ sebagai bentuk error. Diperoleh

$$\varphi_x(x_i, t_n) \approx \frac{\varphi(x_{i+1}, t_n) - \varphi(x_i, t_n)}{\Delta x} \tag{2.15}$$

Bentuk Persamaan (2.15) disebut aproksimasi beda maju orde 1 untuk $\varphi_x(x_i, t_n)$.

Selanjutnya dengan mengganti Δx menjadi $-\Delta x$ pada Persamaan (2.11) diperoleh

$$\varphi_x(x_0, t) = \frac{\varphi(x_0, t) - \varphi(x_0 - \Delta x, t)}{\Delta x} + O(\Delta x) \tag{2.16}$$

Dengan mengevalusi di (t_n, x_i) dan melakukan aproksimasi pada Persamaan (2.16) diperoleh

$$\varphi_x(x_i, t_n) \approx \frac{\varphi(x_i, t_n) - \varphi(x_{i-1}, t_n)}{\Delta x} \tag{2.17}$$

Bentuk Persamaan (2.17) dikenal sebagai aproksimasi beda mundur orde 1 untuk $\varphi_x(x_i, t_n)$.

Selain bentuk Persamaan (2.15) dan (2.17) juga dapat meningkatkan orde aproksimasi agar lebih akurat dengan mengambil pemangkasan deret Taylor untuk $O(\Delta x^3)$ dari bentuk Persamaan (2.11), dengan menggunakan Δx dan $-\Delta x$,

$$\varphi(x_0 + \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) + \Delta x \varphi_x(x_0, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \varphi_{xx}(x_0, t) + O(\Delta x^3) \tag{2.18}$$

$$\varphi(x_0 - \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) - \Delta x \varphi_x(x_0, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \varphi_{xx}(x_0, t) - O(\Delta x^3) \tag{2.19}$$

Dengan mengurangkan Persamaan (2.18) dan (2.19) diperoleh

$$\varphi_x(x_0, t) = \frac{\varphi(x_0 + \Delta x, t) - \varphi(x_0 - \Delta x, t)}{2\Delta x} - O(\Delta x^2) \tag{2.20}$$

Dengan melakukan aproksimasi bentuk Persamaan (2.20) di (x_i, t_n) diperoleh persamaan beda pusat orde 2 sebagai berikut

$$\varphi_x(x_0, t_n) \approx \frac{\varphi(x_{i+1}, t_n) - \varphi(x_{i-1}, t_n)}{2\Delta x} \tag{2.21}$$

Untuk mengkontruksi turunan parsial pada orde yang lebih tinggi dengan cara melakukan pemangkasan untuk $O(\Delta x^4)$ dan dengan menggunakan Δx dan $-\Delta x$,

$$\varphi(x_0 + \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) + \Delta x \varphi_x(x_0, t) + \frac{\Delta x^2}{2!}\varphi_{xx}(x_0, t) + \frac{\Delta x^3}{3!}\varphi_{xxx}(x_0, t) + O(\Delta x^4) \tag{2.22}$$

$$\varphi(x_0 - \Delta x, t) = \varphi(x_0, t) - \Delta x \varphi_x(x_0, t) + \frac{\Delta x^2}{2!}\varphi_{xx}(x_0, t) - \frac{\Delta x^3}{3!}\varphi_{xxx}(x_0, t) + O(\Delta x^4) \tag{2.23}$$

Dengan menambahkan Persamaan (2.22) dan (2.23) dan dengan melakukan aproksimasi diperoleh

$$\varphi_{xx}(x_i, t_n) = \frac{\varphi(x_{i+1}, t_n) - 2\varphi(x_i, t_n) + \varphi(x_{i-1} t_n)}{\Delta x^2} \tag{2.24}$$

Dari penurunan di atas dapat menggunakan Tabel 1 yang akan membantu dalam penggunaan metode beda hingga. Untuk mempermudah digunakan notasi

$$U_i^n = \varphi(x_i, t_n)$$

Tabel 1. Beberapa formula metode beda hingga

Turunan Parsial	Aproksimasi Beda Hingga	Tipe dan Orde
$\frac{\partial U}{\partial x} = \varphi_x$	$\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x}$	Beda Maju Orde 1
$\frac{\partial U}{\partial x} = \varphi_x$	$\frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x}$	Beda Mundur Orde 1
$\frac{\partial U}{\partial x} = \varphi_x$	$\frac{U_{i+1}^n - U_{i-1}^n}{2\Delta x}$	Beda Pusat Orde 2
$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} = \varphi_{xx}$	$\frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta x^2}$	Turunan parsial spasial ke 2
$\frac{\partial U}{\partial t} = \varphi_t$	$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t}$	Beda Maju Orde 1
$\frac{\partial U}{\partial t} = \varphi_t$	$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{\Delta t}$	Beda Mundur Orde 1
$\frac{\partial U}{\partial t} = \varphi_t$	$\frac{U_i^{n+1} - U_i^{n-1}}{2\Delta t}$	Beda pusat Orde 2
$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \varphi_{tt}$	$\frac{U_i^{n+1} - 2U_i^n + U_i^{n-1}}{\Delta t^2}$	Turunan Parsial Temporal ke 2

(Couson and Mingham, 2010).

III. METODE PENELITIAN

3.1. Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilaksanakan pada semester genap tahun ajaran 2017/2018 bertempat di Jurusan Matematika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung.

3.2. Metode Penelitian

Metode penelitian ini yaitu :

1. Menentukan model matematika dan kondisi awal serta kondisi batas yang akan digunakan serta nilai-nilai parameter yang tekait.
2. Menentukan persamaan terdikritisasi dari model matematika yang diperoleh dengan metode beda hingga.
3. Mensimulasikan persamaan terdikritisasi untuk mendapatkan profil konsentrasi dan temperatur di dalam reaktor dalam kasus konsentrasi gas umpan fungsi periodik, *square wave*, dan konstan serta pengaruh parameter operasi operasi RABB (waktu balikan, frekuensi dan amplitudo gelombang gas umpan, laju alir, dan luas penampang dinding reaktor) terhadap profil.
4. Menarik kesimpulan.

KESIMPULAN

Dari hasil dan pembahasan, maka dapat disimpulan bahwa profil temperatur dengan konsentrasi gas umpan fungsi periodik, konstan maupun *square wave* secara kualitatif hampir sama. Namun untuk profil temperatur dengan fungsi periodik dan *square wave* akan mengalami naik turun dikarenakan terdapat konsentrasi gas umpan tinggi dan rendah yang masuk ke dalam reaktor.

Semakin kecil waktu balikan (t_f) maka profil temperatur pada reaktor akan semakin merata, hal ini akan membuat reaktor lebih lama dalam beroperasi. Sedangkan semakin kecil waktu balikan maka konsentrasi gas umpan di dalam reaktor akan lebih cepat bereaksi dikarenakan kondisi temperatur sudah mendekati suhu reaksi. Sedangkan untuk variasi frekuensi gelombang (ω) secara kualitatif tidak terdapat perbedaan profil temperatur dan untuk profil konsentrasi masih terlihat bentuk gelombang dengan amplitudo semakin ke kanan semakin kecil. Semakin tinggi gelombang (B), maka kenaikan profil temperatur akan semakin tinggi. Besar kecilnya laju alir gas sangat berpengaruh pada profil temperatur yang berakibat lamanya pengoperasian reaktor.

Reaktor aliran bolak-balik dapat beroperasi lebih optimal lama untuk mengkonversi gas umpan dengan kondisi waktu balikan kecil, laju alir sedang dan luas penampang dinding reaktor kecil.

DAFTAR PUSTAKA

Budhi, Y.W. 2005. *Reverse Flow Reactor Operation for Control of Catalyst Surface Coverage.* Disertasi. Eindhoven University of Technology, The Netherlands.

Couson, D.M. and Mingham C.G. 2010. *Introductory Finite Difference Methods for PDEs*. Ventus Publishing ApS, United Kingdom.

Farlow, S.J. 1982. *Partial Differential Equations for Scientist and Engineers*. Mc Graw-Hill Inc., Canada.

House, J.E. 2007. *Principles of Chemical Kinetics.* 2nd Ed. Academic Press, United States of America.

Khinast, J., Jeong, Y.O., and Luss, D. 1999. Dependence of Cooled Reverse-Flow Reactor Dynamics on Reactor Model. *AIChE Journal.* **45**(2):299-309.

Liu, B., Litto, R., and Hayes, R.E. 2005. Catalytic Combustion for Reduction of Fugitive Methane Emissions From Natural Gas Compressor Stations. *Greenhouse Gas Control Technology.* **1**(7):329-336.

Nuryaman, Aang. 2016. Simulasi Numerik Model Matematika Dinamika Reaksi Oksidasi dengan Konsentrasi Gas Umpan Periodik. *Prosiding Seminar Nasional Sains Matematika Informatika dan Aplikasinya IV*. **4**(4):139-145.

Panigrahi, P.K. 2016. *Transport Phenomena in Microfluidic System.* John Wiley and Sons Singapore Pte Ltd, Singapore.

Strauss, W.A. 1992. *Partial Differential Equation an Introduction*. John Wiley and Sons, Inc., United States of America.