

Aplikasi Finite Difference pada Pemodelan Difusi Ion Logam dalam Aliran Air

Rudy Agustriyanto dan Lie Hwa

Jurusan Teknik Kimia, Fakultas Teknik Universitas Surabaya
Kampus UBAYA Tenggiling - Surabaya

Email: us6193@wolf.ubaya.ac.id dan us6147@fox.ubaya.ac.id

1. Abstrak

Penyebaran suatu ion logam dalam air yang mengalir telah dipelajari. Mekanisme perpindahan massa yang mengontrol adalah pergerakan bulk fluida. Penyelesaian persamaan diferensial diperoleh dengan menggunakan metode explicit finite difference. Persamaan finite difference diperoleh dengan metoda 'backward' dan bukan metoda 'center' [2,3] seperti yang biasa dilakukan pada kasus penyelesaian persamaan diferensial partial eliptik, karena kriteria kestabilan di titik (node) yang dianalisa harus memasukkan variabel kecepatan linier air yang tidak diperoleh di metoda center. Kecepatan linier air diubah-ubah untuk mengamati perilaku stabilitas metode ini. Pendekatan kondisi batas untuk solusinya dengan input berupa fungsi step dan pulsa serta medium semi infinite.

Metal ion Distribution in flowing water is studied. First of all Partial Differential Equation is solved numerically by using explicit finite difference method which is derived from backward Taylor series. It is found that moving of bulk fluid is a controlling mechanism rather than small concentration of solute. The stability criteria for this case must include water velocity which is not obtained from center Taylor series. The changes of water linear velocity is observed to learn the stability criteria of the above method.

2. Pendahuluan

Limbah cair yang dibuang ke aliran air sungai akan sangat berbahaya bagi mahluk hidup di sekitarnya, jika zat-zat terlarut dalam limbah cair tersebut melebihi ambang batas tertentu yang telah diijinkan. Mahluk hidup yang hidup di sepanjang aliran sungai tersebut tentunya mempunyai daya tahan tertentu terhadap sumber-sumber pencemar air, misalnya logam-logam berat. Ikan-ikan tertentu, yang hidup di air sungai tersebut, mungkin masih dapat bertahan hidup jika kandungan logam beratnya tidak terlalu tinggi. Namun logam-logam berat tadi akan terakumulasi di dalam tubuhnya karena zat pencemar tadi tidak dapat dikeluarkan dari dalam tubuh. Sementara itu manusia mengkonsumsi ikan tersebut sebagai lauk-pauk, sehingga logam-logam berat tadi ikut dikonsumsi dan masuk ke dalam tubuh. Akibatnya logam-logam berat tadi terakumulasi terus di dalam tubuh dan orang tersebut menderita keracunan.

Pemodelan untuk penyebaran ion logam nikel dalam aliran air merupakan penelitian pendahuluan untuk memahami mekanisme penyebarannya. Air sungai mengalir dalam suatu pipa terbuka dengan kecepatan tertentu. Tiba-tiba pada bagian hulu sungai dibuang limbah cair yang mengandung logam ion nikel dengan konsentrasi tinggi. Laju limbah cair tersebut cukup kecil dibandingkan dengan laju alir air sungai, namun konsentrasi ion logam nikel cukup tinggi sehingga konsentrasi di bagian hulu menjadi C_{A0} ppm. Distribusi konsentrasi ion logam sepanjang sungai terhadap waktu dicari dengan membuat neraca massa pada elemen *control volume* sungai. Persamaan yang diperoleh merupakan persamaan diferensial parsial orde dua terhadap posisi dan orde satu terhadap waktu.

3. Landasan Teori

Proses penyebaran ion logam nikel (Ni(II)) dalam aliran air merupakan peristiwa perpindahan massa. Perpindahan massa yang terjadi pada peristiwa ini ada dua jenis, yaitu :

- ♦ Ni(II) berdifusi secara molekular, menurut hukum Ficks [2,3]: $J_A = -D_{AB} \cdot \delta C_A / \delta x$ (1)
- ♦ Ni(II) terbawa aliran bulk fluida [2]

Asumsi yang digunakan dalam model ini adalah:

- ♦ Perpindahan massa satu dimensi (searah aliran sungai)
- ♦ Laju alir limbah sangat kecil dibandingkan laju alir air
- ♦ Tidak ada distribusi kecepatan air (profil kecepatan berupa plat datar)
- ♦ Sungai sangat panjang (semi infinite medium)

Fluks perpindahan massa Ni(II) terhadap titik tetap (N_A'') dapat dilukiskan dalam [2] :

$$N_A'' = J_A + C_A \cdot v \quad (2)$$

Dimana :

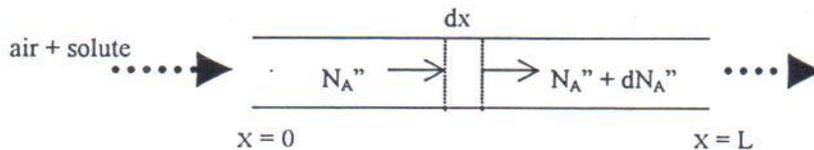
J_A = fluks perpindahan massa

v = kecepatan linear bulk fluida

C_A = Konsentrasi A pada suatu titik dalam aliran fluida

Hubungan konsentrasi zat terlarut (C_A) terhadap posisi dan waktu (t) diperoleh dari persamaan neraca massa.

Perhatikan sistem berikut :



Diambil *element control volume* dV sebagai sistem :

$$N_A'' \cdot A - (N_A'' + dN_A'') \cdot A = \frac{\partial C_A}{\partial t} \cdot A \cdot dx \quad (3)$$

Karena A konstan dan $dV = A \cdot dx$, kemudian substitusi persamaan (1) ke persamaan (2) menjadi :

$$-\frac{\partial}{\partial x} (-D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial x} + C_A v) = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (4)$$

$$D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (5)$$

Suku pertama dan kedua persamaan (4) masing-masing menyatakan kecepatan perpindahan massa akibat driving force konsentrasi dan perpindahan massa akibat pergerakan bulk fluida [6]. Untuk menyelesaikan persamaan differensial ini dibutuhkan sebuah kondisi awal dan dua buah kondisi batas, yaitu:

$$C(x,0) = 0 \quad (6)$$

$$C(0,t) = C_{Ao} \quad (7)$$

$$C(\infty,t) = 0 \quad (8)$$

Penyelesaian persamaan differensial dia atas digunakan metode *explicit finite difference* [1].

Diskritisasi Persamaan Differensial dengan Metode Eksplisit

Untuk mendapatkan bentuk finite difference persamaan (4), dapat digunakan ekspansi deret Taylor [1]. Deret Taylor dapat diekspansi kebelakang (backward) untuk menghitung harga sebelumnya berdasarkan harga sekarang.

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i) h + \frac{f''(x_i) h^2}{2} - \dots \quad (9)$$

Untuk memperoleh turunan pertama, deret dipotong sampai 2 suku,

$$\text{sehingga } f'(x_i) \cong \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h} \quad (10)$$

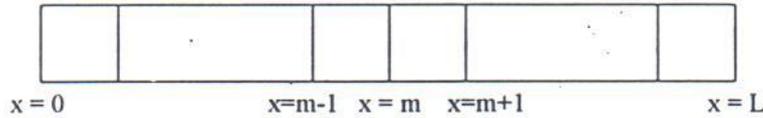
Sedangkan untuk mendapatkan bentuk finite difference untuk turunan kedua, kita dapat menuliskan ekspansi deret taylor ke belakang, yaitu untuk $f(x_{i-2})$ yang dinyatakan dalam $f(x_i)$.

$$f(x_{i-2}) = f(x_i) - f'(x_i)(2h) + \frac{f''(x_i) (2h)^2}{2} - \dots \quad (11)$$

Kemudian persamaan (5) dikalikan dengan 2 dan dikurangkan terhadap persamaan (7), sehingga diperoleh :

$$f''(x_i) \cong \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^2} \quad (12)$$

Berdasarkan deret Taylor di atas, dapat diturunkan persamaan – persamaan sebagai berikut :



$$\left. \frac{\partial C_A}{\partial x} \right|_m \cong \frac{C_{A,m} - C_{A,m-1}}{\Delta x} \quad (13)$$

$$\left. \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \right|_m \cong \frac{C_{A,m} - 2C_{A,m-1} + C_{A,m-2}}{(\Delta x)^2} \quad (14)$$

Sebagai tambahan terhadap ruang diskrit, untuk difusi transient dibutuhkan waktu diskrit. Untuk keperluan ini diperkenalkan integer p, dimana :

$$t = p \cdot \Delta t \quad (15)$$

Dan perkiraan finite difference terhadap derivative waktu dapat dinyatakan sbb:

$$\left. \frac{\partial C_A}{\partial t} \right|_m \cong \frac{C_{A,m}^{p+1} - C_{A,m}^p}{\Delta t} \quad (16)$$

Superskrip p digunakan untuk menandai ketergantungan C_A terhadap waktu, dan derivative waktu dinyatakan dalam suku beda suhu yang dikaitkan dengan waktu baru (p+1) dan waktu sebelumnya (p); sehingga perhitungan harus dilakukan pada waktu-waktu yang berurutan yang dipisahkan oleh interval Δt dan penyelesaian finite difference membatasi penentuan suhu pada ruangan diskrit point dan juga membatasinya menjadi diskrit point dalam waktu.

Bila persamaan (9), (10) dan (12) disubstitusi ke persamaan (4), penyelesaian finite difference akan bergantung pada specific time dimana konsentrasinya dihitung dalam perkiraan finite difference terhadap derivative spatial.

Bentuk eksplisit persamaan finite difference untuk interior node m adalah :

$$D_{AB} \frac{C_{A,m}^p - 2C_{A,m-1}^p + C_{A,m-2}^p}{(\Delta x)^2} - v \frac{C_{A,m}^p - C_{A,m-1}^p}{\Delta x} = \frac{C_{A,m}^{p+1} - C_{A,m}^p}{\Delta t}$$

atau :

$$C_{A,m}^{p+1} = C_{A,m}^p + \frac{D_{AB} \Delta t}{(\Delta x)^2} [C_{A,m}^p - 2C_{A,m-1}^p + C_{A,m-2}^p] - \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} [C_{A,m}^p - C_{A,m-1}^p]$$

atau :

$$C_{A,m}^{p+1} = \left[1 + \frac{D_{AB} \Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} \right] C_{A,m}^p + \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} \frac{C_{A,m-1}^p}{\Delta x} + \frac{D_{AB} \Delta t}{(\Delta x)^2} C_{A,m-2}^p \quad (17)$$

Akurasi metode finite difference dapat ditingkatkan dengan mngecilkan harga Δx dan Δt . Pemilihan harga Δx biasanya berdasarkan kompromi antara akurasi dan persyaratan kestabilan komputasi. Bila Δx telah ditentukan, harga Δt tidak bisa ditetapkan sembarangan akan tetapi ditentukan berdasarkan kriteria stabilitas.

Persamaan finite difference pada persamaan (13) mensyaratkan bahwa koefisien untuk $C_{A,m}^p$ harus lebih besar atau sama dengan nol. Sehingga kriteria stabilitas untuk persamaan tersebut adalah sbb:

$$\left[1 + \frac{D_{AB} \Delta t}{(\Delta x)^2} - v \frac{\Delta t}{\Delta x} \right] \geq 0 \quad (18)$$

4. Metode Penelitian

1. Penyelesaian persamaan diferensial parsial dengan metode finite difference, dimana mula-mula air tidak mengandung ion logam (pada $t=0$ detik). Limbah dibuang secara kontinyu hingga konsentrasi di bagian hulu ($x=0$) pada saat awal ($t=0$) sebesar 100 ppm.
2. Distribusi konsentrasi ion nikel dicari dengan menggunakan persamaan (13), dengan memperhatikan syarat kestabilan di persamaan (14).

5. Hasil Penelitian dan Pembahasan

Penyelesaian persamaan diferensial dengan finite difference sebenarnya ada 3 macam cara, yaitu metode backward seperti yang telah dijelaskan di atas, selain itu masih ada metode forward dan central finite difference. Namun kedua metode yang lain (forward maupun central) tidak dapat diterapkan untuk kasus ini.

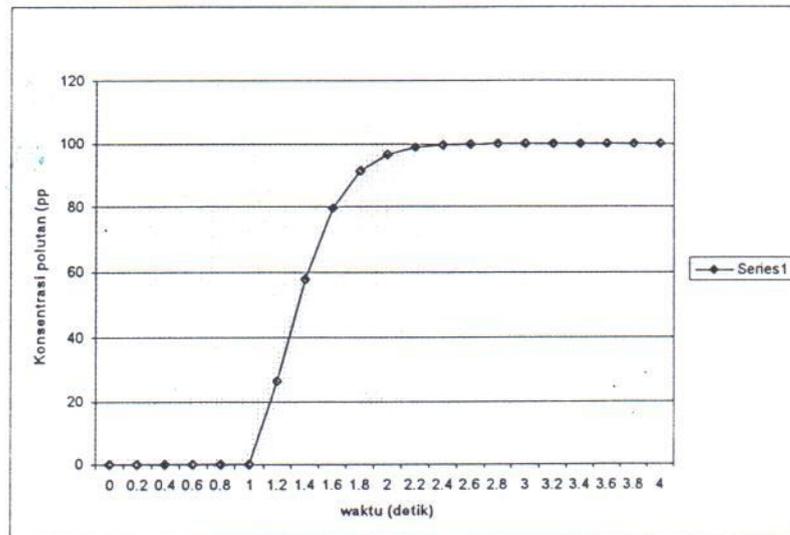
Pada central finite difference, koefisien untuk $C_{A,m}^P$ ternyata tidak melibatkan v , padahal v sangat berpengaruh pada kestabilan. Sedangkan untuk forward finite difference, harga $C_{A,m}^{P+1}$ ternyata tidak melibatkan $C_{A,m-1}^P$, padahal untuk node kedua $C_{A,m-1}^P$ sangat berperan karena merupakan kondisi batas.

Hasil simulasi pada posisi 3 m dari ujung bila pada saat $t=0$ diberikan gangguan step function sebesar 100 ppm NiCl₂ dimana air mengalir dengan kecepatan linear 2 m/s dapat dilihat pada tabel 5.1 dan gambar 5.1. Pada perhitungan digunakan increment $\Delta x = 0.5$ m dan $\Delta t = 0.2$ m.

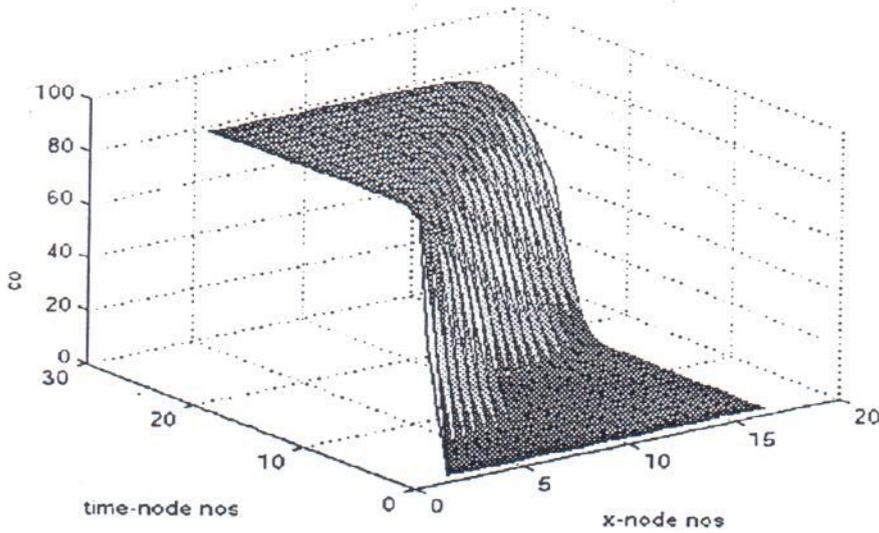
Tabel 5.1. Konsentrasi NiCl₂ pada jarak 3 m dari tempat pembuangan (ujung)

t (detik)	0.00	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00	1.20	1.40	1.60	1.80	2.00	2.20
CA (ppm)	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	26.21	57.67	79.69	91.44	96.72	98.83

2.40	2.60	2.80	3.00	3.20	3.40	3.60	3.80	4.00
99.61	99.88	99.96	99.99	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00



Gambar 5.1. Konsentrasi NiCl₂ vs waktu pada jarak 3 m dari ujung



Gambar 5.2. Profil konsentrasi solut (co) terhadap node posisi (x-node nos.) dan waktu (time-node nos.)

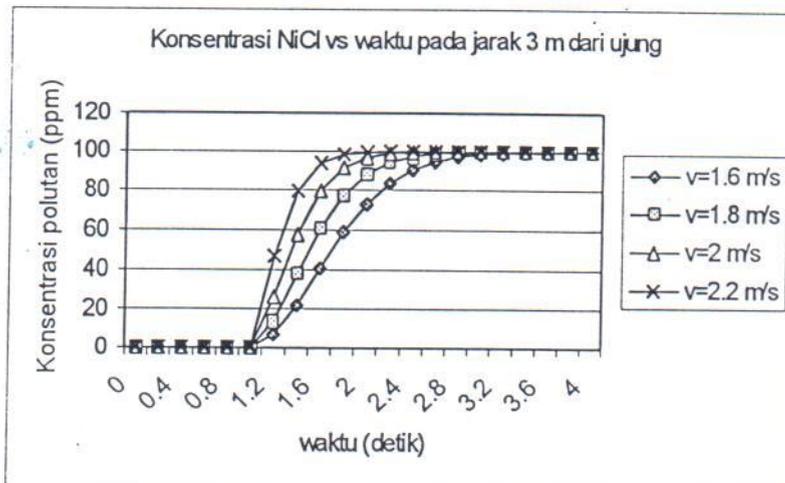
Pengaruh Difusivitas

Hasil simulasi bila diinputkan harga $D_{AB} = 0$ ternyata memberikan hasil yang tepat sama dengan tabel 5.1 dan gambar 5.1 (Tabel 5.1 menggunakan harga D_{AB} NiCl = $1.756E-9$ m²/s [5]). Hal ini disebabkan harga D_{AB} terlalu kecil bila dibandingkan dengan kecepatan air (v). Sehingga persamaan (4) dapat disederhanakan menjadi sbb:

$$-v \frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (15)$$

Harga difusivitas senyawa-senyawa lainnya ternyata juga bernilai sangat kecil bila dibandingkan dengan harga kecepatan alir sehingga model persamaan (15) juga berlaku.

Pengaruh Laju Alir



Gambar 5.3. Konsentrasi NiCl₂ vs waktu pada jarak 3 m dari ujung pada harga v yang bervariasi

Pada gambar 5.3 dapat kita lihat bahwa dengan semakin bertambahnya laju alir maka waktu yang dibutuhkan untuk mencapai kondisi steady state akan semakin berkurang (semakin cepat). Perlu dicatat bahwa hasil tersebut untuk kondisi laju alir diperbesar sementara Δx dan Δt dijaga tetap yaitu pada $\Delta x = 0.5$ m dan $\Delta t = 0.2$ detik

Kriteria Stabilitas

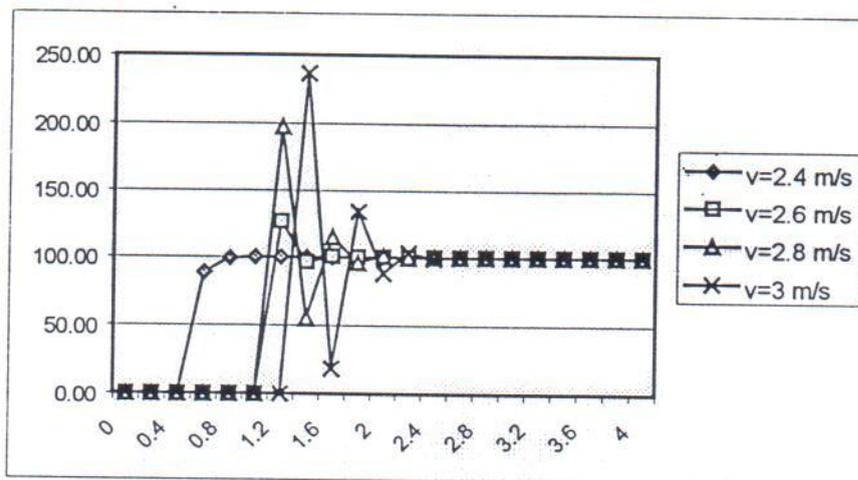
Hasil-hasil yang diperoleh di atas menggunakan harga-harga v , Δx , dan Δt yang diikat oleh kriteria stabilitas, persamaan (14). Harga ruas kiri persamaan (14) untuk $\Delta x = 0.5$ m, $\Delta t = 0.2$ m untuk berbagai harga v ditabelkan pada tabel 5.2 di bawah ini.

Tabel 5.2. Hubungan kecepatan linier air dan koefisien konsentrasi di titik yang dievaluasi

V (m/s)	1.6	1.8	2.0	2.2
$1 + D_{AB} \cdot \Delta t / (\Delta x)^2 - v \cdot \Delta t / \Delta x$	0.36	0.28	0.2	0.12

Tampak bahwa semuanya masih memenuhi kriteria stabilitas karena lebih besar atau sama dengan nol.

Sekarang kita tinjau bagaimana kalau v diperbesar terus sedangkan harga Δx dan Δt dijaga tetap. Suatu saat ruas kiri persamaan (14) akan bernilai lebih kecil daripada nol sehingga melanggar kriteria stabilitas. Hasil simulasi bila v diperbesar terus ditunjukkan pada gambar 5.3. Tampak bahwa pada $v = 2.4$ m/s perhitungan masih menunjukkan hasil yang memuaskan, namun pada $v = 2.6$ m/s sampai dengan 3 m/s hasil perhitungan beresilasi yang secara fisis tidak mungkin.



Gambar 5.4. Konsentrasi $NiCl_2$ vs waktu, pada jarak 3 m dari ujung bila harga v terus diperbesar

Harga ruas kiri kriteria kestabilan, persamaan (14), untuk kondisi yang ditunjukkan pada gambar 5.4 dapat diamati pada tabel berikut.

Tabel 5.3. Hubungan kecepatan linier air dan koefisien konsentrasi di titik yang dievaluasi pada kisaran $V=2.4$ s.d 3.0 m/s

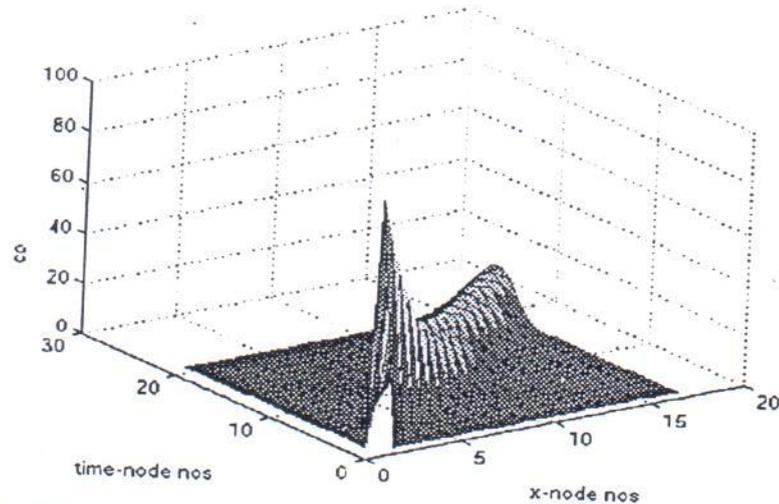
V (m/s)	2.4	2.6	2.8	3.0
$1 + D_{AB} \cdot \Delta t / (\Delta x)^2 - v \cdot \Delta t / \Delta x$	0.04	-0.04	-0.12	-0.2

Jelas bahwa pada $v = 2.6$ sampai dengan 2.8 m/s harga ruas kiri persamaan (14) bernilai negatif sehingga melanggar kriteria stabilitas. Sedangkan pada $v = 2.4$ m/s masih bernilai positif, sehingga hasil perhitungan konsentrasi cukup memuaskan.

Untuk mengatasi problem di atas, maka tentu saja harus dicari harga Δx dan Δt lain sehingga memenuhi kriteria stabilitas.

Input Berupa Fungsi Pulsa

Dengan cara yang sama dengan input yang berupa fungsi step, berikut ini akan ditampilkan gambar 3 dimensi, jika input berupa fungsi pulsa.



Gambar 5.5. Profil konsentrasi solut terhadap node posisi dan waktu untuk input berupa fungsi pulsa

6. Kesimpulan

Pergerakan fluida mempunyai peran yang sangat penting dalam simulasi ini, karena:

- merupakan faktor yang mengontrol proses perpindahan massa
- kriteria kestabilan menjadi sangat ketat (increment waktu atau jarak menjadi makin kecil) jika kecepatan ditingkatkan

7. Daftar Pustaka

1. Chapra S.C, Canale R.P, "Numerical Methods for Engineers", 2nd ed, p. 525-527, Mc Graw Hill Book Company, New York, (1988)
2. Geankoplis, C.J., "Transport Processes and Unit Operations", 3rd ed., p. 381-402, Prentice Hall International Editions, Singapore, (1995)
3. Incropera F.P and David DeWitt P, "Introduction to Heat and Mass Transfer", 3rd ed, p.248-262, John Willey and Sons, New York, (1996)
4. Lindfield G and Penny J, "Numerical Methods Using Matlab", 1st ed, p. 180-210, Ellis Horwood Ltd, New York, (1995)
5. Reid R.C, Prausnitz J.M and Polling B.E, "The Properties of Gases and Liquids", 4th ed, Mc Graw Hill Book Company, New York, (1987)
6. Thibodeaux L.J, "Chemodynamics - Environmental Movement of Chemicals in Air, Water, and Soil", 1st ed, p. 79,101, John Willey and Sons, New York, (1979)