

DIKTAT

PRAKTIKUM PENYELESAIAN PEMODELAN MATEMATIS

Dr. Martomo Setyawan, S.T., M.T.
Agus Aktawan, S.T., M.Eng.
Aji Ridho Pangestu, S.T., M.Eng.



**Program Studi Teknik Kimia
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI
UNIVERSITAS AHMAD DAHLAN
2021**



Jl. Kapas 9, Semaki, Umbulharjo, Yogyakarta 55166
Jl. Pramuka 42, Sidikan, Umbulharjo, Yogyakarta 55161
Jl. Prof. Dr. Soepomo S.H., Janturan, Umbulharjo, Yogyakarta 55164
Jl. Ringroad Selatan, Tamanan, Banguntapan, Bantul, Yogyakarta
Telp. (0274) 563515, 551830, 379418, 371120 Fax. (0274) 564604

MODUL
PRAKTIKUM PENYELESAIAN PEMODELAN MATEMATIS

TIM PENYUSUN:

Dr. Martomo Setyawan, S.T., M.T.

Agus Aktawan, S.T., M.Eng.

Aji Ridho Pangestu, S.T., M.Eng.

PROGRAM STUDI TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNOLOGI INDUSTRI
UNIVERSITAS AHMAD DAHLAN
2021

PRAKATA

Puji syukur penulis panjatkan ke kehadirat Allah SWT atas semua rahmat dan hidayah-Nya sehingga Modul Praktikum Penyelesaian Model Matematis ini dapat diselesaikan. Modul praktikum ini disusun untuk memperlancar jalannya praktikum pemodelan matematis bagi mahasiswa semester lima (V) Prodi Teknik Kimia, FTI UAD. Modul ini merupakan versi revisi dan pembaharuan dari Modul Praktikum Komputasi II. Bobot untuk praktikum ini adalah 2 sks yang setara dengan 4 x 50 menit kegiatan pembelajaran. Petunjuk praktikum ini disusun berdasarkan standar kompetensi kelulusan. Dalam modul ini dibahas metode penyelesaian kasus matematik dan penerapannya dalam bidang teknik kimia.

Dengan praktikum Penyelesaian Model Matematis ini diharapkan menambah wawasan mahasiswa dalam mengaplikasikan teori keteknik-kimiaan yang dipelajari dikelas. Dalam modul ini berisi bentuk kasus-kasus baru, metode penyelesaian, dan latihan soal untuk menunjang pemahaman mahasiswa. Selain itu, menjadi bekal dalam *soft skill* penyelesaian kasus berbasis Teknik kimia melalui software MATLAB.

Demikian prakata dari kami, tak lupa kami ucapkan terima kasih kepada pihak-pihak yang telah membantu penyusunan petunjuk praktikum ini. Tak ada gading yang tak retak, begitulah pepatah mengatakan. Untuk itu kritik dan saran yang sifatnya membangun dari pengguna petunjuk praktikum untuk menyempurnakan buku ini akan kami terima dengan senang hati.

Yogyakarta, 22 November 2021

Tim Penyusun

DAFTAR ISI

BAB I PERSAMAAN DIFERENSIAL ORDINER.....	1
1. Persamaan Diferensial Ordiner Non-Simultan.....	1
2. Penyelesaian Persamaan Diferensial Ordiner dengan Toolbox Matlab.....	3
3. Latihan Persamaan Diferensial Ordiner Sederhana.....	5
4. Persamaan Diferensial Ordiner Simultan.....	5
5. Aplikasi Persamaan Diferensial Ordiner dalam Teknik Kimia.....	9
a. Kasus Reaktor Alir Pipa.....	9
b. Kasus Reaksi dalam Reaktor Batch	11
6. Tugas Tentang PDO dalam Teknik Kimia.....	14
a. Kasus Reaktor Batch	14
b. Kasus Reaksi Seri pada Batch Reactor	15
c. Kasus Adsorpsi Methylene Blue	15
BAB II Optimasi Satu Variabel.....	17
1. Penjelasan Umum Tentang Optimasi	17
2. Optimasi dengan Metode Golden Section	18
3. Contoh Optimasi dengan Golden Section.....	19
4. Optimasi Satu Variabel dengan Toolbox Fminbnd	22
5. Aplikasi Optimasi Satu Variabel dalam Teknik Kimia.....	24
a. Kasus Pendinginan dalam Refrigerant	24
b. Kasus Optimasi Suhu di Reaktor Batch (Tugas).....	27
BAB III KASUS OPTIMASI BASIS ZERO FUNCTION.....	27
1. Dasar Model Zero Function	27
2. Penggunaan Toolbox Fzero dan Fsolve	28
3. Contoh kasus sederhana penggunaan fzero dan fsolve.	29
4. Menghitung Kecepatan Alir Fluida dalam Pipa.....	31
5. Kasus Optimasi Suhu Operasi pada Menara Distilasi.....	33
6. Optimasi Suhu Operasi pada Flash Drum.....	39
a. Kasus Flash Drum pada Pemisahan Etanol-Air	41
b. Kasus Flash Drum pada Pemisahan Campuran Asam dan Air (Tugas).....	43
7. Kasus Pemanasan pada Tangki Seri (Tugas).....	43

8. Kasus Perancangan Kondisi Operasi Flash Drum (Uji Kompetensi – Non Tugas)	44
BAB IV OPTIMASI MULTI VARIABEL	46
1. Optimasi Multi Variabel dengan Metode Hooke-Jeeves	46
2. Contoh Optimasi Dua Variabel dengan Metode Hooke-Jeeves.....	47
3. Optimasi Multivariabel dengan Toolbox Fminsearch dan Lsqnonlin.....	49
4. Kasus Optimasi Multi Variabel dalam Teknik Kimia.....	51
a. Ekstraksi Cair-Cair 3 Stages dengan aliran <i>Cross Current</i>	51
b. Optimasi Biaya Pengolahan Limbah Industri (Tugas).....	53
BAB V OPTIMASI DENGAN CONSTRAINT	54
1. Penjelasan Umum Optmasi dengan Constraint	54
2. Jenis-jenis Constraint.....	54
a. <i>Constraint</i> dengan bentuk persamaan yang koefisiennya dapat ditentukan	54
b. <i>Constraint</i> dengan bentuk persamaan yang koefisiennya tidak dapat ditentukan.....	54
c. <i>Constraint</i> dengan bentuk pertidaksamaan yang koefisiennya dapat ditentukan.....	55
d. <i>Constraint</i> dengan bentuk pertidaksamaan yang koefisiennya tidak dapat ditentukan.....	55
3. Penyelesaian Kasus Optimasi dengan Constraint Menggunakan Fmincon....	55
a. Penyelesaian Model <i>Constraint</i> dengan Koefisien yang Dapat Ditentukan .	56
b. Contoh Soal Optimasi dengan Constraint dengan Koefisien Dapat Ditentukan	57
c. Penyelesaian Model <i>Constraint</i> dengan Koefisien yang Tidak Dapat Ditentukan	60
d. Contoh Soal Optimasi dengan Model Non-Linier Constraint.....	60
4. Tugas Optimasi dengan Linier Constraint	61
5. Tugas Optimasi dengan Non-Linier Constraint	62
BAB VI KASUS PD PARSIAL DI TEKNIK KIMIA	63
1. Bentuk Umum PD Parsial	63
2. Metode Penyelesaian dengan Finite Differential Approximation Matriks.....	63
3. Aplikasi PD Parsial pada Distribusi Suhu Pada Logam.....	65
a. Penyelesaian dengan FDA Matriks	65

b. Penyelesaian dengan Toolbox Fsolve-Ode	69
c. Penyelesaian dengan Toolbox BVP4C (lengkapi datanya sendiri).....	71
4. Temperature Distribution Through A Fuel Cell End-plate (Task)	72
BAB VII STUDI KASUS LANJUT DALAM TEKNIK KIMIA.....	73
1. Menghitung Waktu Alir Fluida dalam Tangki (fzero-integral)	73
2. Menghitung Ketinggian Cairan dalam Tangki Sebagai Fungsi Waktu (fzero-ode).....	76
3. Kasus Pencampuran dalam Tangki Garam (fzero-integral, tugas)	78
4. Produksi Asetat Anhidrid dengan PFR (ode)	81
5. Reaksi Fase Gas pada RAP Non-Adiabatis Non-Isothermal (ode, tugas)	84
6. Penentuan Orde Reaksi dan Konstanta Laju Reaksi (fminsearch-ode).....	83
7. Penentuan Konstanta Laju Reaksi Flokulasi (fminsearch-ode, tugas)	85
8. Optimasi Suhu dalam Reaktor Batch Adiabatic (fminsearch-integral).....	85
9. Optimasi Konstanta Laju Reaksi pada CSTR (ode, fminbnd, fminsearch, lsqnonlin, tugas)	87
10. Optimasi Parameter pada Tekanan Uap Murni Komponen (fminsearch/lsqnonlin).....	89
11. Reaksi Orde 1 Fase Cair dalam Katalis Padat Berpori (fzero, ode, bvp4c, integral).....	91
12. Optimasi Suhu dan Komposisi Produk pada Sistem Flash Drum (fsolve, tugas).....	91
DAFTAR PUSTAKA.....	93

BAB I

PERSAMAAN DIFERENSIAL ORDINER

1. Persamaan Diferensial Ordiner Non-Simultan

Penyelesaian permasalahan di dunia teknik khususnya teknik kimia sering dijumpai penyelesaian yang berbentuk persamaan diferensial, salah satu jenis persamaan diferensial yang sering muncul adalah persamaan diferensial ordiner.

Contoh persamaan diferensial ordiner jenis initial value problem adalah:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + 4x \frac{dy}{dx} + 5xy - 2x^2 = 0$$

dengan kondisi awal sebagai berikut.

$$x = x_0$$

$$y = y_0$$

Contoh lain berupa persamaan diferensial simultan

$$\frac{dy}{dx} = 3xy + (yz)^{0,3}$$

$$\frac{dz}{dx} = x^2z + \sqrt{y}$$

dengan kondisi nilai awal sebagai berikut.

$$x = x_0$$

$$y = y_0$$

$$z = z_0$$

Jadi pada jenis persamaan diferensial ini semua harga yang diketahui mengumpul pada suatu titik, **yaitu** x_0 .

Cara penyelesaian numeris untuk kasus ini ada bermacam-macam. Dalam buku ini dibahas Runge-Kutta (termasuk *one-step method*) dengan orde 4.

Runge-Kutta

Misal dijumpai persamaan diferensial order satu berbentuk:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

dengan nilai awal: $x = x_0$; $y = y_0$

Pada cara Runge-Kutta, diambil suatu harga Δx tertentu (makin kecil makin baik).

Rumus Runge-Kutta dapat dipakai untuk menghitung harga y_{i+1} bila harga y_i telah tersedia.

Pendekatan Runge-Kutta untuk interval $x_i \rightarrow x_{i+1}$ adalah sebagai berikut:

$$k_1 = f(x_i, y_i) \cdot \Delta x$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \cdot \Delta x$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right) \cdot \Delta x$$

$$k_4 = f(x_i + \Delta x, y_i + k_3) \cdot \Delta x$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Dengan berdasar x_0 dan y_0 , dapat dihitung x_1 dan y_1 , dan berdasarkan x_1 dan y_1 dapat dihitung x_2 dan y_2 , demikian seterusnya sehingga diperoleh harga y pada berbagai x .

Sebagai contoh akan diselesaikan sebuah persamaan diferensial ordiner sebagai berikut:

$$\frac{dy}{dx} = x^{0,6} + y^{0,5}$$

Dengan nilai awal:

$$x_0 = 0,5$$

$$y_0 = 0,4$$

hitung nilai y sampai $x_n = 1,5$

Jumlah inkremen diinginkan (n) = 20, dengan nilai awal x atau $x_0 = 0,5$ dan batas akhir $x_n = 1,5$. Sehingga jumlah inkremen dx sebanyak $(x_n - x_0)/n$. program dijalankan dengan nilai awal $x_0 = 0,5$ dan ketika nilai x_{akhir} lebih besar dari x_n maka program berhenti berjalan. Pengandaian ini menggunakan bentuk *while* dalam program matlab.

Penyelesaian dengan menggunakan metode runge kutta, contoh programnya menggunakan matlab sebagai berikut:

```
function bab1_pdo1
%penyelesaian PDO
%metode Runge Kutta
%by: Martomo Setyawan
%modifikasi: Aji Ridho P.
clear all;clc
x(1)=0.5;%nilai awal
y(1)=0.4;%nilai akhir
n=20;%jumlah inkremen
x(n+1)=1.5;%nilai terakhir
dx=(x(n+1)-x(1))/n;
%x(2),x(3),...x(n+1)
i=1;
disp('=====');
disp('      x      y');
disp('=====');
while x(i)<=x(n+1)
    k1=f(x(i),y(i)).*dx;
    k2=f(x(i)+dx/2,y(i)+k1/2).*dx;
    k3=f(x(i)+dx/2,y(i)+k2/2).*dx;
    k4=f(x(i)+dx,y(i)+k3).*dx;
    x(i+1)=x(i)+dx;
    y(i+1)=y(i)+1/6*(k1+2*k2+2*k3+k4);
    fprintf(' %4.3f      %4.3f\n',x(i),y(i));
    i=i+1;%array
end
disp('=====');
function fx=f(x,y)
fx=x^0.6+y^0.5;
end
end
```

Hasil Perhitungan :

```
=====
      x      y
=====
    0.500      0.400
    0.550      0.467
    0.600      0.538
      (dan seterusnya)

    1.450      2.366
    1.500      2.507 → hasil akhir
=====
```

2. Penyelesaian Persamaan Diferensial Ordiner dengan Toolbox Matlab

Kasus persamaan diferensial ordiner dapat diselesaikan dengan cepat dan praktis

menggunakan toolbox MATLAB. Toolbox merupakan sejumlah tools/alat bantu yang telah disediakan oleh MATLAB untuk membantu penyelesaian-penyelesaian kasus pemodelan. Toolbox yang digunakan untuk menyelesaikan PDO adalah “ode45”, “ode15”, “ode15s”, dan lainnya. Kali ini akan kita terapkan penyelesaian kasus PDO menggunakan toolbox “ode45”. Soal yang akan kita bahas adalah soal yang sama seperti yang dikerjakan sebelumnya. Untuk mengetahui syntax dari toolbox tersebut, silahkan ketikkan “help ode45” pada command windows MATLAB.

Syntax untuk menggunakan toolbox “ode45”.

[TOUT,YOUT] = ode15s(ODEFUN,TSPAN,Y0,OPTIONS)

Penjelasan: T_{out} = sebagai independent variable, contoh: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$

Y_{out} = output variable yang dicari, contoh: y_0, y_1, \dots, y_n

Odefun = nama fungsi

Tspan = array/ deret untuk independent variable

Y_0 = nilai awal nilai y

Options: perintah khusus untuk kriteria optimasi (akan dijelaskan lebih lanjut oleh Dosen/ Asisten)

Contoh Aplikasi untuk soal yang sama dengan sebelumnya:

```
function bab1_pdo2
%persamaan diferensial ordiner
%dengan ode45
%by: Aji Ridho P.
clear all;clc
x0=0.5;%nilai x awal
y0=0.4;%nilai y awal
xn=1.5;%nilai x akhir
n=20;%jumlah inkremen
xspan=linspace(x0,xn,n+1);
[x,y]=ode45(@fungsi,xspan,y0);

function fx=fungsi(x,y)
fx=x^0.6+y^0.5;
end
```

```
disp(['nilai y = ', num2str(y(end,1))]);  
end
```

Hasil RUN

nilai y = 2.507

Catatan: tampilkanlah nilai y untuk setiap nilai x (x_1, x_2, \dots, x_n). Tampilkan dalam bentuk table!

3. Latihan Persamaan Diferensial Ordiner Sederhana

1. Selesaikanlah persamaan diferensial berikut ini

$$\frac{3dy}{dx} = 7x - 3y^2$$

Saat $x_0 = 3$, nilai $y_0 = 0,5$. Hitunglah distribusi nilai x dan nilai y dengan 50 jumlah data sampai nilai akhir dari x adalah 6.

(Selesaikan dengan program manual menggunakan Runge Kutta)

2. Pada suatu bendungan air sungai terdapat saringan yang berfungsi untuk menampung sampah padatan yang lewat. Partikel yang lolos saringan dimisalkan (F) dan yang tertampung terus terakumulasi sebagai (R). sampah yang tertampung nilainya terus bertambah dengan jalannya waktu (t). Bila laju alir air sungai sebesar 30 L/menit dan setiap menit mengalir sampah sebanyak $x = 0,25$ L. Jumlah padatan yang tertampung sebagai fungsi waktu adalah dR/dt yang ditunjukkan dalam persamaan berikut.

$$\frac{dR}{dt} = 0,01Ft + 0,9R$$

Dengan $F = 0,8x$ dan $R = 0,2x$, dengan kandungan sampah awal sebagai $R_0 = 0,2$ Liter saat $t_0 = 5$ menit. Diinginkan pengamatan jumlah sampah yang terakumulasi dalam waktu satu hari, dengan pengamatan sebanyak 200 kali.

Buatlah distribusi sampah yang terakumulasi (R) sebagai fungsi waktu.

(Selesaikan dengan menggunakan ode45)

4. Persamaan Diferensial Ordiner Simultan

Kadangkala sering dijumpai dalam penyelesaian dalam bentuk persamaan diferensial ordiner simultan. Persamaan ordiner simultan adalah bentuk turunan yang mana terdiri lebih dari satu variabel yang akan di-diferensialkan. Misal integral y dan z terhadap

x, integral x, y, z terhadap x dan lainnya. Yang mana persamaan turunan tersebut terdiri lebih dari satu persamaan diferensial dan saling terikat satu sama lainnya.

Berikut contoh untuk persamaan diferensial simultan yang terdiri dari dua persamaan.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y, z)$$

$$\frac{dz}{dx} = f(x, y, z)$$

dengan keadaan batas

$$x = x_0$$

$$y = y_0$$

$$z = z_0$$

Penyelesaian persamaan diatas adalah menggunakan metode runge kutta. Sama seperti non-simultan, pada kasus ini nilai x_n , y_n , dan z_n dapat dihitung menggunakan rumus runge kutta sebagai berikut.

$$k_1 = f_1(x_i, y_i, z_i) \cdot \Delta x$$

$$l_1 = f_2(x_i, y_i, z_i) \cdot \Delta x$$

$$k_2 = f_1(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}, z_i + \frac{l_1}{2}) \cdot \Delta x$$

$$l_2 = f_2(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}, z_i + \frac{l_1}{2}) \cdot \Delta x$$

$$k_3 = f_1(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}, z_i + \frac{l_2}{2}) \cdot \Delta x$$

$$l_3 = f_2(x_i + \frac{\Delta x}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}, z_i + \frac{l_2}{2}) \cdot \Delta x$$

$$k_4 = f_1(x_i + \Delta x, y_i + k_3, z_i + l_3) \cdot \Delta x$$

$$l_4 = f_2(x_i + \Delta x, y_i + k_3, z_i + l_3) \cdot \Delta x$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$z_{i+1} = z_i + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$

Contoh penggunaan runge kutta untuk penyelesaian persamaan diferensial ordiner simultan

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{x \cdot y} + z^{0,3}$$

$$\frac{dz}{dx} = x + \sqrt{y \cdot z}$$

dengan kondisi batas:

$$x_0 = 0,5 \text{ dengan } x_n = 1,5$$

$$y_0 = 1$$

$$z_0 = 0,8$$

Jumlah inkremen yang diinginkan adalah $n = 100$. Program Matlabnya dapat dituliskan sebagai berikut.

```
function bab1_pdo3
%pdo simultan
%by: Aji Ridho P.
x(1)=0.5;%nilai awal x
n=100;%inkremen
x(n+1)=1.5;%nilai akhir x
y(1)=1;%nilai awal
z(1)=0.8;%nilai awal
dx=(x(n+1)-x(1))/n;
i=1;
disp (' =====');
disp ('          x              y              z          ');
disp (' =====');
while x(i)<x(n+1)
    k1=f1(x(i),y(i),z(i)).*dx;
    l1=f2(x(i),y(i),z(i)).*dx;
    k2=f1(x(i)+dx/2,y(i)+k1/2,z(i)+l1/2).*dx;
    l2=f2(x(i)+dx/2,y(i)+k1/2,z(i)+l1/2).*dx;
    k3=f1(x(i)+dx/2,y(i)+k2/2,z(i)+l2/2).*dx;
    l3=f2(x(i)+dx/2,y(i)+k2/2,z(i)+l2/2).*dx;
    k4=f1(x(i)+dx,y(i)+k3,z(i)+l3).*dx;
    l4=f2(x(i)+dx,y(i)+k3,z(i)+l3).*dx;
    x(i+1)=x(i)+dx;
    y(i+1)=y(i)+1/6.*(k1+2*(k2+k3)+k4);
    z(i+1)=z(i)+1/6.*(l1+2*(l2+l3)+l4);
    i=i+1;
fprintf('    %4.3f      %4.3f      %4.3f\n', x(i),y(i),z(i));
end
function f1=f1(x,y,z)
f1=(x*y)^0.5+z^0.3;
end
function f2=f2(x,y,z)
f2=x+(y*z)^0.5;
end
end
```

Hasil RUN

```

=====
      x          y          z
=====
    0.500      1.000      0.800
    0.510      1.017      0.814
    0.520      1.033      0.828
    0.530      1.050      0.843
    0.540      1.067      0.858
    0.550      1.084      0.873
    0.560      1.102      0.888
    0.570      1.119      0.904
      (dan seterusnya)
    1.470      3.562      3.729
    1.480      3.599      3.780
    1.490      3.638      3.832
    1.500      3.676      3.885 → hasil akhir
=====

```

Selain dengan metode runge kutta, soal diatas juga dapat dengan mudah diselesaikan menggunakan toolbox “ode45, ode 15s, dll”. Karena toolbox tersebut tidak hanya digunakan untuk pdo tunggal, melainkan juga dapat digunakan untuk kasus pdo simultan. Berikut adalah program Matlab-nya.

```

function bab1_pdo4
%pdo simultan
%ode15s
%by: Aji Ridho P.
clear all;clc
%nilai awal
x0=0.5;
y0=1;
z0=0.8;
n=100;%jumlah inkremen
xn=1.5;%nilai akhir
xspan=linspace(x0,xn,n+1);
[x,hasil]=ode15s(@fungsi,xspan,[y0 z0]);
function fx=fungsi(x,var)
y=var(1);
z=var(2);
dydx1=(x*y)^0.5+z^0.3;
dydx2=x+(y*z)^0.5;
fx=[dydx1 dydx2]';
end
disp(['nilai yn = ',num2str(hasil(end,1))]);
disp(['nilai zn = ',num2str(hasil(end,2))]);
end

```

Hasil RUN

nilai $y_n = 3.677$

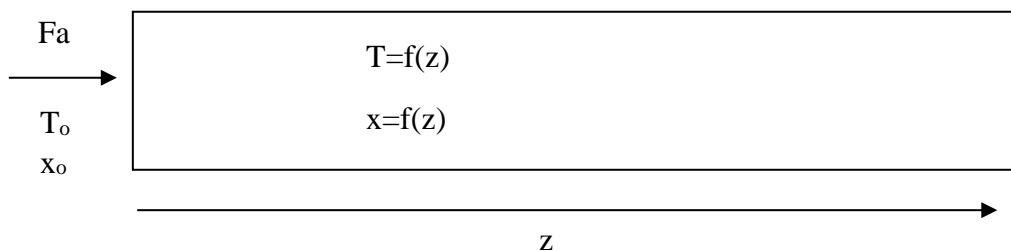
nilai $z_n = 3.8868$

Catatan: tampilkanlah nilai y dan z untuk setiap nilai x (ada 100 inkremen). Tampilkan dalam bentuk table.

5. Aplikasi Persamaan Diferensial Ordiner dalam Teknik Kimia

a. Kasus Reaktor Alir Pipa

Diketahui suatu reaktor alir pipa memiliki panjang z meter. Reaktan A memasuki reaktor dengan suhu awal T_0 dan konversi awal sebagai x_0 .



Reaktor beroperasi secara adiabatik, sehingga suhu reaktor berubah tergantung dengan panjang reaktor tersebut. Konversi semakin tinggi dengan semakin besar panjang reaktor. Diketahui persamaan perubahan suhu dan perubahan konversi A disepanjang reaktor adalah sebagai berikut.

$$\frac{dx}{dz} = 3,94 \cdot 10^{12} \cdot e^{\frac{-11400}{T}} \cdot (1 - x)$$

$$\frac{dT}{dz} = 19 \cdot x \cdot 3,94 \cdot 10^{12} \cdot e^{\frac{-11400}{T}} \cdot (1 - x) \cdot (T - 339)$$

dengan suhu awal ($T_0 = 340$ K)

x = konversi reaktor

T = suhu, K

z = panjang reaktor, meter

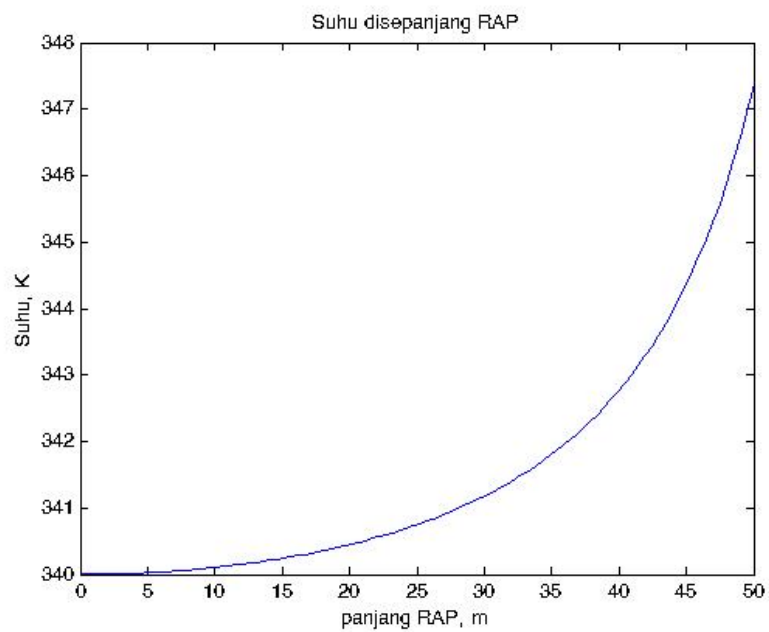
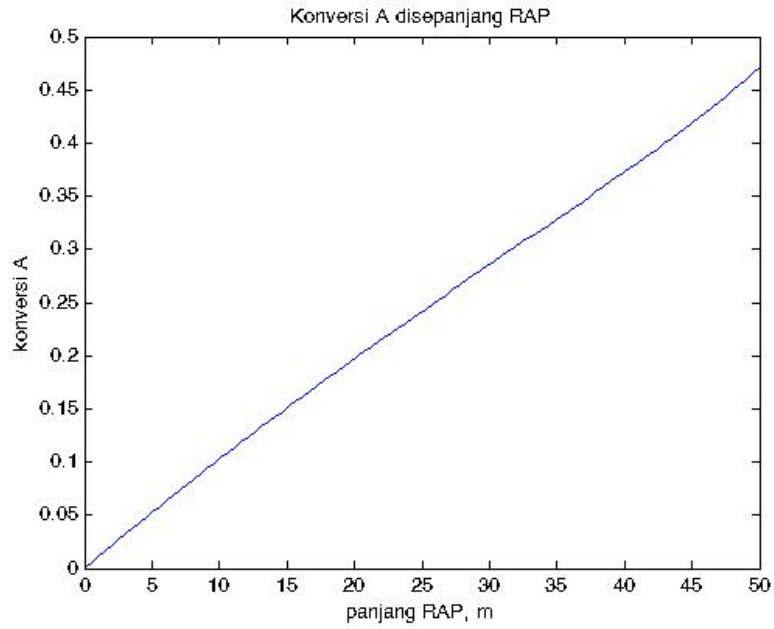
Buatlah grafik distribusi konversi dan suhu disepanjang reaktor yang panjang totalnya

adalah 50 m. Selesaikanlah menggunakan program PDO dengan:

- Runge kutta orde-4 simultan (silahkan dicoba sendiri)
- Toolbox ode15s (akan dicontohkan, lengkapi bagian yang diberi tanda *highlight* atau yang menimbulkan *error* silahkan diperbaiki).

Penyelesaian:

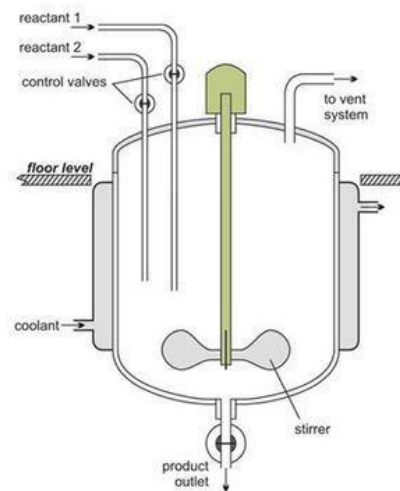
```
function bab1_pdo5
%Kasus Reaktor Alir Pipa
%by: Aji Ridho P.
clear all;clc
%nilai awal
x0=0;%konversi
T0=340;%suhu, K
zn=50;%panjang RAP, m
zspan=linspace(0,zn,100);
[z,var]=ode15s(@fungsi,zspan,[ ]);
function dydx=fungsi(z,y)
x=z(1);
T=z(2);
dxdz=3.94e12*exp(-11400/T).*(1-x);
dTdz=19x*3.94e12.*exp(-11400/T)(1-x)(T-339);
dydz=[dTdz;dxdz];
end
figure(a)
plot(z,y(:,1));
...
...
...
figure(b)
plot(z,y(:,1));
...
...
...
End
Hasil RUN
```

b. Kasus Reaksi dalam Reaktor Batch

- Dalam reactor batch berlangsung reaksi $A \leftrightarrow P$ dimana kecepatan prosesnya adalah:

$$\bullet \quad -\frac{dC_a}{dt} = -r_a = \frac{kC_a}{K+C_a}$$



- Jika harga k = fungsi suhu (T), $K=1,03$ dan mula-mula konsentrasi A pada $t=0$ (awal reaksi) adalah $0,5 \text{ mol/L}$, tentukan konsentrasi A sebagai fungsi waktu (selama 50 menit bereaksi), bila:
- $k = 10^2 \exp\left(\frac{-30}{RT}\right)$ diketahui perubahan suhunya:
- $\frac{\rho C_p dT}{dt} = -r_a \Delta H$, dimana:
- $T_0 = 500 \text{ K}$, $\Delta H = 432 \text{ kJ/mol}$, $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, $C_p = 4,3 \text{ kJ/kg}$.
- Buatlah juga perubahan suhu direaktor sebagai fungsi waktu.
- Penyelesaian: gunakan ode45/ode15s

Penyelesaian:

Note: lengkapi bagian yang kosong/ highlight

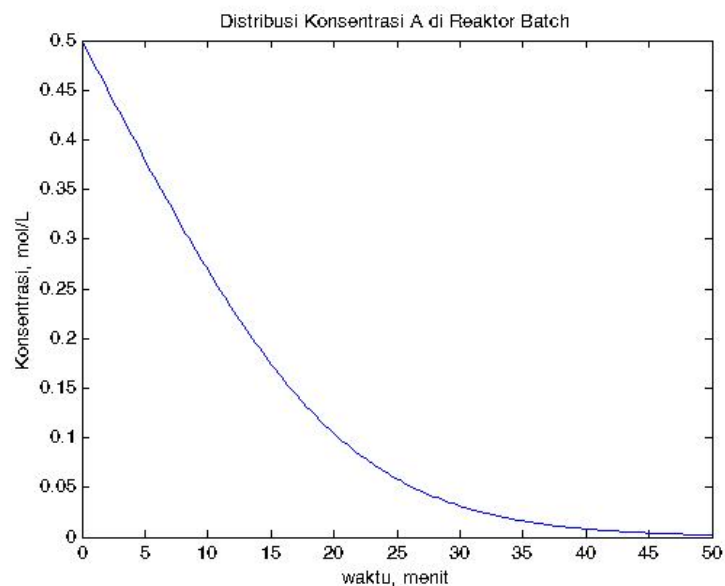
```
function bab1_pdo6
clear all
close all
clc
%data
T0=
dH=
rho=
Cp=
R=
tend=; %men
K=
```

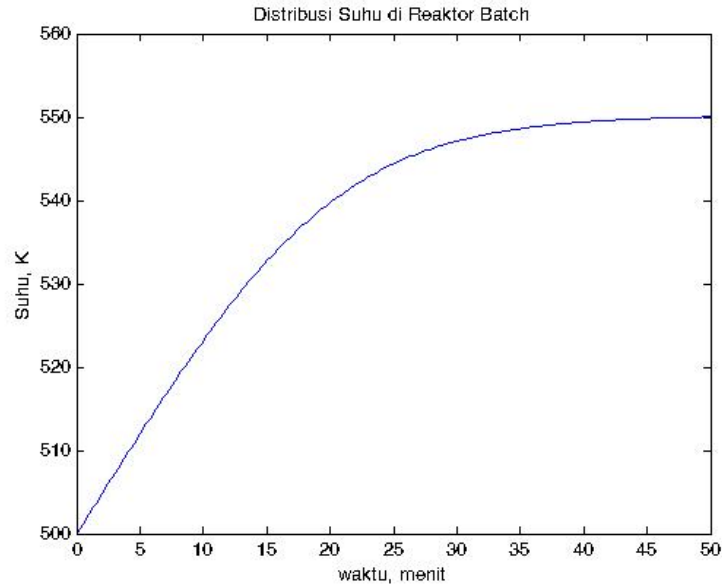
```

Ca0=
%independ var
tspan=linspace(0,,200);
%solver Ca dan T fungsi t
[t,y]=ode45(@kasus2, , [Ca0 T0]);
function ddt=kasus2(t,y)
Ca=y(1);T=y(2);
k=1e2exp(-30/R/T);
dCadt=(-k.*Ca)/(K+Ca);
dTdt=-dCadt.*dH./rho./Cp;
dydt=
end
figure
plot(t,y(:,1));
...
...
...
figure
plot(t,y(:,2));
...
...
...
end

```

Hasil RUN





6. Tugas Tentang PDO dalam Teknik Kimia

a. Kasus Reaktor Batch

Tugas No. 1 Kelas A

- Dalam reactor batch berlangsung reaksi $A \leftrightarrow P$ dimana kecepatan prosesnya adalah:
- $-\frac{dC_a}{dt} = -r_a = \frac{kC_a}{K+C_a}$
- Jika harga $k =$ fungsi suhu (T), $K=f(T)$ dan mula-mula konsentrasi A pada $t=0$ (awal reaksi) adalah 0,5 mol/L, tentukan konsentrasi A sebagai fungsi waktu (selama 50 menit bereaksi), bila:
- $k = 10^2 \exp\left(\frac{-30}{RT}\right)$ dan $K = 1750 \exp\left(-\frac{4000}{T}\right)$
- diketahui perubahan suhunya: $\frac{\rho C_p dT}{dt} = -r_a \Delta H$, dimana:
- $T_0 = 500$ K, $\Delta H = 432$ kJ/mol, $\rho = 1000$ kg/m³, $C_p = 4,3$ kJ/kg.
- Buatlah juga perubahan suhu di reaktor sebagai fungsi waktu.
- Penyelesaian: gunakan ode45/ode15s

Tugas No. 1 Kelas B

- Dalam reactor batch berlangsung reaksi $A \leftrightarrow P$ dimana kecepatan prosesnya adalah:
- $-\frac{dC_a}{dt} = -r_a = \frac{kC_a}{K+C_a}$
- Jika harga $k =$ fungsi suhu (T), $K=1,03$ dan mula-mula konsentrasi A pada $t=0$ (awal reaksi) adalah 0,5 mol/L, tentukan konsentrasi A sebagai fungsi waktu (selama 50

menit bereaksi), bila:

- $k = 10^2 \exp\left(\frac{-30}{RT}\right)$ dan $18C_p = A + BT + CT^2 + DT^3$ dalam kJ/kg
- $\frac{\rho C_p dT}{dt} = -r_a \Delta H$, dimana:
- $T_0 = 500$ K, $\Delta H = 432$ kJ/mol, $\rho = 1000$ kg/m³, $A = 32,243$; $B = 19,238 \times 10^{-4}$; $C = 10,555 \times 10^{-6}$; $D = -3,596 \times 10^{-9}$;
- Buatlah juga perubahan suhu direaktor sebagai fungsi waktu.
- Penyelesaian: gunakan ode45/ode15s

b. Kasus Reaksi Seri pada Batch Reactor

Tugas No. 2 Semua Kelas

Diketahui reaksi: $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \xrightarrow{k_3} D$

Konsentrasi awal A adalah 0,5 mol/L, dimana nilai $k_1 = 0,1$; $k_2 = 0,05$; dan $k_3 = 0,03$.
Buatlah plot perubahan konsentrasi masing-masing reaktan selama 100 menit waktu reaksi.

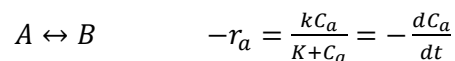
Petunjuk:

$$\begin{aligned} \frac{dC_a}{dt} &= -k_1 C_a & \frac{dC_b}{dt} &= k_1 C_a - k_2 C_b \\ \frac{dC_c}{dt} &= k_2 C_b - k_3 C_c & \frac{dC_d}{dt} &= k_3 C_c \end{aligned}$$

c. Kasus Adsorpsi Methylene Blue

Tugas No.3 – Semua Kelas

Dalam reaktor *batch* telah berlangsung reaksi flokulasi dari *methylene blue* dengan flokulan berupa SDS (*Sodium dodecyl sulfate*) dan PAC (*Poly aluminum chloride*). Dimana *methylene blue* (A) akan terikat ke SDS dan PAC (B) dengan mekanisme reaksi:



Dimana nilai konstanta laju reaksi (k) dan konstanta kesetimbangan (K) merupakan fungsi suhu yaitu:

$$\begin{aligned} k &= A \times \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \\ K &= \alpha \cdot \exp\left(\frac{\beta}{T}\right) \end{aligned}$$

Perubahan suhu sebagai fungsi waktu dirumuskan dengan:

$$\frac{\rho C_p dT}{dt} = -r_a \Delta H_{reaksi}$$

Konsentrasi *methylene blue* mula-mula adalah 0,5 mol/L kemudian dilakukan proses pengendapan selama 50 menit. Buatlah plot grafik perubahan konsentrasi *methylene blue* dalam larutan sebagai fungsi waktu (dC_a/dt) dan perubahan suhu sebagai fungsi waktu (dT/dt).

Diketahui data proses sebagai berikut:

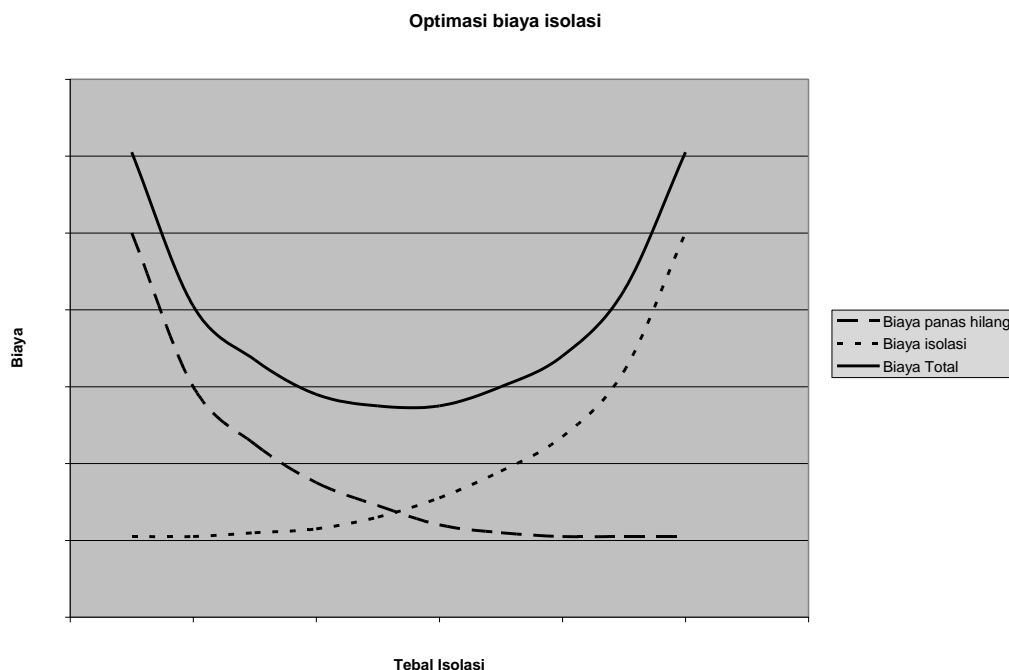
$T_0 = 500 \text{ K}$; $\Delta H_{reaksi} = 432 \text{ kJ/mol}$; densitas = 1000 kg/m^3 ; $C_p = 4,3 \text{ kJ/kg}$. Nilai $A = 100$ dan $E = 30$.
 $\alpha = 1750$; $\beta = -4000$;

BAB II

OPTIMASI SATU VARIABEL

1. Penjelasan Umum Tentang Optimasi

Optimasi merupakan salah satu langkah penting dalam perancangan pabrik/alat. Hal ini terjadi karena dalam suatu alat akan terdapat berbagai persamaan yang mendasari perancangan alat tersebut. Sebagai contoh adalah pemasangan isolasi pada suatu alat akan mengurangi biaya energi yang hilang. Disisi lain, pemasangan isolasi akan membutuhkan biaya sehingga dalam hal ini dicari nilai optimal yang memberikan biaya paling kecil. Dalam bentuk grafik dapat dilihat sebagai berikut.



Gambar 2.1. Optimasi biaya isolasi

Optimasi dapat diartikan sebagai suatu proses untuk mencari kondisi yang optimum, dalam arti paling menguntungkan. Optimasi bisa berupa maksimasi atau minimasi. Bila kita berhadapan dengan masalah keuntungan, keadaan optimum adalah keadaan yang memberikan keuntungan maksimum (maksimasi). Sedangkan bila berhadapan dengan masalah pengeluaran/pengorbanan, keadaan optimum adalah yang memberikan pengeluaran/pengorbanan minimum (minimasi). Secara umum fungsi yang akan dimaksimumkan atau diminimumkan disebut *objective function*, sedangkan harga-harga yang berpengaruh dan bisa dipilih disebut variabel (perubah).

Secara analitis, nilai maksimum atau minimum dari suatu persamaan:

$$y=f(x)$$

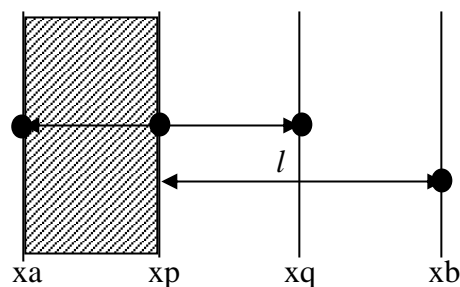
dapat diperoleh pada harga x yang memenuhi

$$\frac{dy}{dx} = 0$$

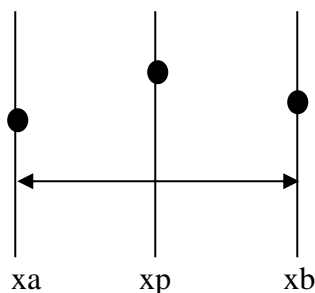
Untuk fungsi yang sukar untuk diturunkan atau mempunyai turunan yang sukar dicari akarnya, proses Optimasi dapat dilakukan secara numeris. Optimasi dengan cara Golden Section merupakan cara yang banyak dipakai untuk optimasi satu variabel secara numeris, baik optimasi minimasi maupun maksimasi.

2. Optimasi dengan Metode Golden Section

Misal suatu fungsi $y = f(x)$ akan dicari nilai maksimal antara x_a dan x_b



Dipilih 2 titik evaluasi misalnya x_p dan x_q , yang terletak diantara x_a dan x_b dan diharapkan dari harga y_p dan y_q ada interval yang dapat dihilangkan. Dalam contoh ini maka interval antara x_a dan x_p dapat dihilangkan karena titik maksimal diperkirakan antara x_p dan x_b sesuai dengan kecenderungan hasil $f(x)$, dengan eliminasi ini maka titik x_p menjadi x_a , x_q menjadi x_p .



Dengan adanya perubahan letak titik maka harus ditentukan titik lagi, diharapkan salah satu titik dapat dipakai lagi. Disinilah letak masalah dimana titik p dan q harus ditentukan dengan menggunakan salah satu titik yang lama, dimisalkan titik p dan q berjarak l dengan a dan b , dalam hal ini l akan dicari.

Dapat dilihat dari gambar bahwa:

$$(x_q - x_a)_{\text{lama}} = (x_p - x_a)_{\text{baru}}$$

selanjutnya :

$$[l - (1-l)](x_b - x_a)_{\text{lama}} = (1-l)(x_a - x_b)_{\text{baru}}$$

$$(2l-1)(x_b - x_a)_{\text{lama}} = (1-l).l.(x_b - x_a)_{\text{lama}}$$

$$2l - 1 = l - (l)^2$$

$$(l)^2 + l - 1 = 0$$

$$l = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0,618$$

Kemungkinan-kemungkinan yang dapat terjadi pada eliminasi dengan golden section adalah sebagai berikut :

a. Maksimasi

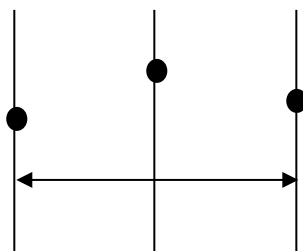
$y_p < y_q$	$x_a = x_p$
	$x_p = x_q$
	$x_b = x_b$
	x_q dicari
$y_p > y_q$	$x_a = x_a$
	$x_b = x_q$
	$x_q = x_p$
	x_p dicari

b. Minimasi

$y_p < y_q$	$x_a = x_a$
	$x_b = x_q$
	$x_q = x_p$
	x_p dicari
$y_p > y_q$	$x_a = x_p$
	$x_p = x_q$
	$x_b = x_b$
	x_q dicari

3. Contoh Optimasi dengan Golden Section

Hitunglah nilai optimum dari x (optimasi variabel x) yang menghasilkan nilai y minimum untuk persamaan $y = 2x^2 - 8x + 12$. Diketahui range nilai x yang diinginkan berada diantara $1 \leq x \leq 20$. Bayangkan bahwa nilai x minimum berada pada titik p dan nilai x maksimum berada pada titik q dengan nilai optimum berada diantara kedua titik tersebut. Jika dianalogikan seperti ilustrasi berikut ini.



p

q

jarak antara p dan q adalah l, dengan pendekatan $l = \frac{\sqrt{5}-1}{2} = 0,618$

Tingkat ketelitian hasil diinginkan yaitu sampai 0,01.

Penyelesaian:

```
function bab2_opt1
clear all;
clc;
% Program Optimasi Golden Section
xa=1;           % batas kiri
xb=20;          % batas kanan
l= (5^(0.5)-1)/2;
tol = 0.01;     % Nilai toleransi
ya=fungs(xa);
yb=fungs(xb);
xp=xa+(1-l)*(xb-xa);
yp=fungs(xp);
xq=xa+l*(xb-xa);
yq=fungs(xq);
fprintf('=====\n');
fprintf('      xa      xb      ya      yb\n');
fprintf('=====\n');
fprintf('      %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\t
%2.3f\n', xa, xb, ya, yb);
while abs(xa-xb)>tol;
if yp>yq %minimasi
    xa=xp;
    ya=yp;
    xp=xq;
    yp=yq;
    xq=xa+l*(xb-xa); yq=fungs(xq);
else
    xb=xq;
    yb=yq;
    xq=xp;
    yq=yp;
    xp=xa+(1-l)*(xb-xa);
yp=fungs(xp);
end
fprintf('      %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\t
%2.3f\n', xa, xb, ya, yb);
end
xopt=(xa+xb)/2;
fprintf('=====\n');
fprintf(' Nilai x optimum      = %3.4f\n', xopt);
fprintf(' Nilai fungsi optimum = %3.4f\n', fungs(xopt))
% Akhir Program
```

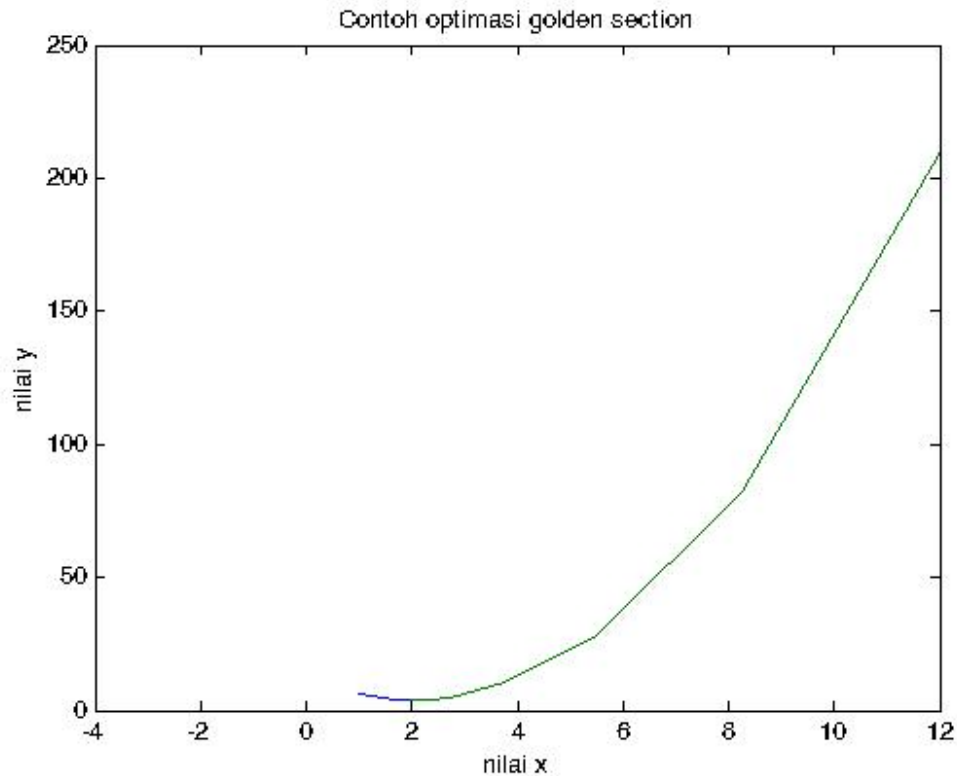
```
% Fungsi dalam file fungs.m
function fungs=fungs(x)
fungs=2*x^2-8*x+12;
end
end
```

Hasil

```
=====
      xa      xb      ya      yb
=====
      1.000      20.000      6.000      652.000
      1.000      12.743      6.000      234.809
      1.000       8.257      6.000       82.309
      1.000       5.485      6.000       28.295
      1.904       2.154      4.018        4.048
=====      dan seterusnya      =====
      1.904       2.059      4.018        4.007
      1.963       2.059      4.003        4.007
      1.963       2.022      4.003        4.001
      1.986       2.022      4.000        4.001
      1.986       2.008      4.000        4.000
      1.995       2.008      4.000        4.000
      1.995       2.003      4.000        4.000
=====

Nilai x optimum      = 1.9988
Nilai fungsi optimum = 4.0000
```

Note: buatlah perintah plot sehingga diperoleh hasil tambahan dalam bentuk grafik dengan hasil sebagai berikut.



Gambar 3. Grafik yang optimasi nilai x dengan Golden Section

4. Optimasi Satu Variabel dengan Toolbox Fminbnd

Program Matlab telah menyediakan toolbox khusus untuk proses optimasi satu variable maupun multivariable. Optimasi satu variable dapat diselesaikan dengan toolbox sebagai berikut.

a. Toolbox fminbnd

`[X,FVAL,EXITFLAG] = fminbnd(FUN,x1,x2,options)`

attempts to find a local minimizer X of the function FUN in the interval $x1 < X < x2$. FUN is a function handle. FUN accepts scalar input X and returns a scalar function value F evaluated at X .

b. Toolbox fminsearch

`[X,FVAL,EXITFLAG,OUTPUT] = fminsearch(FUN,X0,Options)`

Starts at $X0$ and attempts to find a local minimizer X of the function FUN . FUN is a function handle. FUN accepts input X and returns a scalar function value F evaluated at X . $X0$ can be a scalar, vector or matrix.

c. Toolbox fminunc

`[X,FVAL,EXITFLAG] = fminunc(FUN,X0)`

Starts at X0 and attempts to find a local minimizer X of the function FUN. FUN accepts input X and returns a scalar function value F evaluated at X. X0 can be a scalar, vector or matrix.

d. Toolbox lsqnonlin

`[X,RESNORM,RESIDUAL,EXITFLAG] = lsqnonlin(FUN,X0,LB,UB)`

Defines a set of lower and upper bounds on the design variables, X, so that the solution is in the range $LB \leq X \leq UB$. Use empty matrices for LB and UB if no bounds exist.

Set $LB(i) = -Inf$ if $X(i)$ is unbounded below; set $UB(i) = Inf$ if $X(i)$ is unbounded above.

Toolbox yang akan kita gunakan untuk optimasi 1 variabel adalah fminbnd. Toolbox ini dilengkapi dengan batas atas (x_2) dan batas bawah (x_1) pada fminbnd. Sehingga dalam konsepnya serupa dengan perhitungan metode Golden Section. Toolbox fminsearch, fminunc, dan lsqnonlin juga dapat digunakan untuk optimasi multivariable. Program yang akan kita contohkan disini adalah optimasi menggunakan fminbnd. Sementara itu, penggunaan lsqnonlin dan yang lain pada optimasi satu variable akan dijelaskan oleh Dosen/ Asisten dikelas.

Soal

Hitunglah nilai optimum dari x (optimasi variabel x) yang menghasilkan nilai y minimum untuk persamaan $y = 2x^2 - 8x + 12$. Diketahui range nilai x yang diinginkan berada diantara $1 \leq x \leq 20$.

Penyelesaian:

```
function bab2_opt2
%optimasi 1 variabel
%dengan toolbox fminbnd
%by: Aji Ridho P.
clear all;clc
x1=1;%batas bawah
x2=20;%batas atas
[xopt,fx]=fminbnd(@opt,x1,x2)
function y=opt(x)
y=2*x^2-8*x+12;
end
fprintf('x optimum= %2.3f\n',xopt);
fprintf('y minimum= %2.3f\n',fx);
end
```

Hasil RUN

x optimum= 2.000

y minimum= 4.000

Terlihat bahwa dengan toolbox memberikan hasil yang sama. Sehingga sebagai seorang engineer, dalam proses optimasi dengan software lebih cepat dan efisien menggunakan bantuan toolbox Matlab. Sehingga, kita dapat memanfaatkan toolbox tersebut sebaik mungkin dan memahami penggunaannya untuk membantu proses optimasi.

5. Aplikasi Optimasi Satu Variabel dalam Teknik Kimia

a. Kasus Pendinginan dalam Refrigerant

Cairan sebanyak 500.000 kg/hari dengan kapasitas panas 1 kcal/kg⁰C, didinginkan dari suhu 30 ⁰C menjadi 5 ⁰C dengan refrigerant bersuhu Tr yang mengembun, dalam sebuah alat penukar panas yang berlawanan arah. Harga refrigerant = 0,5-0,022Tr \$/ton day. Dan harga HE = \$ 20.000 (A/100) ^{0,6} dengan luas 100 m², koefisien perpindahan panas keseluruhan = 300 kcal/m².jam. Apabila panas pengembunan refrigerant = 329.235 kcal/kg, dan umur alat sampai 10 tahun dengan operasi 330 hari/tahun, tentukan suhu refrigerant yang memberikan biaya terkecil.

Algoritma Perhitungan:

Dari permasalahan diatas maka akan dicari suhu refrigerant yang memberikan biaya terkecil. Oleh karena itu, akan dioptimasi rumus menghitung biaya dan dibuat proses minimasi. Rumus menghitung biaya proses refrigerasi adalah:

$$\text{Biaya (dolar / waktu)} = \text{biaya operasi} + \text{harga alat}$$

dengan :

$$\begin{aligned} \text{biaya operasi} &= a - b \cdot Tr \\ (\text{USD/waktu}) &= 0,5-0,022Tr \text{ } \$/(\text{ton.day}) \\ &= \text{merupakan fungsi Tr dan massa refrigerant} \end{aligned}$$

Nilai diatas harus dikalikan dengan massa refrigerant (w) agar satuan diruas kanan menjadi USD/waktu.

$$\begin{aligned} \text{Harga alat (USD/waktu)} &= af (ab/100)^{0,6} \\ &= \$ 20.000 (A/100)^{0,6} \text{ USD} \end{aligned}$$

Harga alat diatas masih dalam USD, sehingga ruas kanan perlu dibagi dengan waktu operasi alat dan satuan menjadi USD/waktu.

**perlu diperhatikan satuan biaya operasi dan pembelian alat harus disamakan*

Untuk menghitung biaya alat diperlukan harga A

A = luas transfer panas (m²)

Luas transfer panas dapat dihitung bila Tr terhitung dan ΔT terhitung.

Dalam hal ini Tr yang akan kita trial, sehingga dapat dihitung ΔT

$$\Delta T = \frac{(T_1 - T_r) - (T_2 - T_r)}{\ln \frac{(T_1 - T_r)}{(T_2 - T_r)}}$$

massa refrigerant (w) = Q / panas pengembunan refrigerant (diketahui dari soal)

Q = m. Cp (T₁-T₂) (diketahui dari soal) dengan m = umpan cairan

A = Q / (U. ΔT)

Penentuan Tr akan mempengaruhi harga A dan berarti menentukan biaya keseluruhan proses, dalam hal ini dicari Tr yang memberikan biaya proses keseluruhan terkecil. Optimasi Tr yang memberikan biaya terkecil akan kita lakukan menggunakan toolbox fminbnd. Diketahui Tr optimum diantara -40°C sampai 5°C.

Penyelesaian: (lengkapilah bagian yang kosong)

```
function bab2_opt3
%optimasi kasus refrigerasi
%by: Aji Ridho P.
clear all;
clc
%data
f=.....;%kg/hari
cp=;%kcal/kg/C
T1=30;%T in, C
T2=.....;%T out, C
alfa=.....;%panas pengembunan, kcal/kg
af=.....;%harga HE per 100m^2
a=.....;%coef
b=.....;%coef
U=.....;%kcal/m^2.jam
Tra=-40;%batas bawah
Trb=5;%batas atas
```

```

umur=.....;%hari
%ditanya Tr
[Tr,    ]=fminbnd(@optimasi,[],[]);
function biaya=opt (Tr)
dT=((T1-Tr)-(T2-Tr))/log((T1-Tr)/(T2-Tr));%Celcius
Q=f*cp*(T1-T2);%kcal/hari
w=Q/alfa;%kg/hari
A=...;%m^2
biayaRefg=(a-b*Tr)*w/1000;%USD/hari
biayaHE=af*(A/100)^0.6/umur;
biaya=biayaRefg+biayaHE;
end
fprintf('Tr optimum= %2.3f C\n',Tr);
fprintf('biaya minimal USD %2.2f/hari\n',....);
end

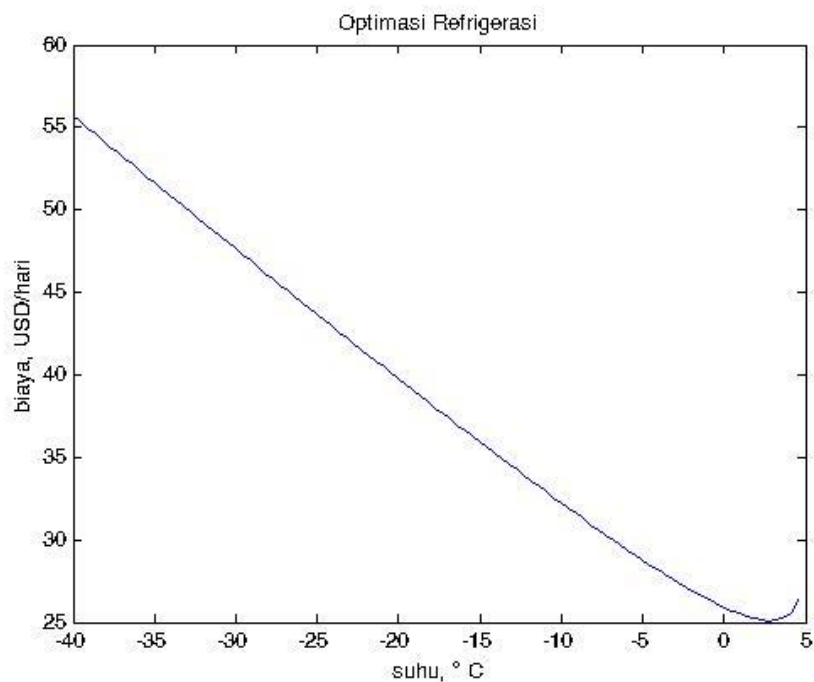
```

Hasil RUN

Tr optimum= 2.797 C

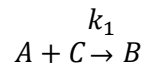
biaya minimal USD 25.09/hari

Buatlah array, sehingga diperoleh hasil sebagai berikut ini.



b. Kasus Optimasi Suhu di Reaktor Batch (Tugas)

Suatu reaksi fasa cair orde 1:



Dijalankan dalam sebuah reaktor *batch* yang beroperasi secara isothermis. Harga-harga k_1 mengikuti persamaan:

$$k_1 = A_1 \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right) \quad -r_A = k.C_a = -dC_a/dt; \quad -\ln(1-X_A) = kt$$

Carilah suhu optimum yang memberikan konversi A besar dan reaksi berjalan pada orde 1 (pseudo first order reaction). Gunakan toolbox `fminbnd` untuk agar diperoleh konversi yang sesuai. Data: $A_1 = 0,145$ (1/men); $E_1 = 1167,8$ (cal/gmol); $C_{a0}, 2$ gmol/L; $\theta = 60$ menit, $R = 1,987$ cal/gmol/K.

Diketahui, suhu berada diantara range 300 s.d 400 K.

Hasil RUN: suhu optimum= 400.000 Kelvin; X_a akhir= 0.865;

C_a akhir= 0.270 mol/L

BAB III

KASUS OPTIMASI BASIS ZERO FUNCTION

1. Dasar Model Zero Function

Metode Newton Raphson merupakan salah satu metode untuk menyelesaikan suatu persamaan yang didasarkan pada deret Taylor. Langkah penyelesaian dengan metode Newton Raphson diawali dengan menentukan tebakan nilai x_1 . Kemudian x_1 dievaluasi untuk menentukan hasil akar persamaan. Kemudian ditentukan kembali nilai x berikutnya (x_2), kemudian x_3 , dan seterusnya hingga diperoleh x yang memberikan hasil fungsi optimum.

Penggunaan Newton Raphson sebelumnya telah dibahas pada Praktikum Komputasi I. Oleh karena itu, dalam praktikum komputasi lanjut ini akan dibahas penerapan Newton Raphson menggunakan Toolbox Matlab. Toolbox yang digunakan ada `fzero` dan `fsolve`. `Fzero` digunakan bila hanya terdiri dari satu persamaan yang akan diselesaikan. `Fsolve`

digunakan bila terdapat lebih dari satu variable yang akan diselesaikan. Konsep optimasi dengan fzero dan fsolve adalah:

$$F(x) = \text{persamaan} = 0 \dots\dots\dots (\text{model 1})$$

$$A(x) = B(x) \dots\dots\dots (\text{model 2})$$

$$A(x,y) = B(x,y) \dots\dots\dots (\text{model 3})$$

$$A(x,y) - B(x,y) = 0 \dots\dots\dots (\text{model 3.a})$$

Inti dari semua persamaan diatas adalah bahwa nilai variable diruas kiri sama dengan variable ruas kanan. Sehingga dalam penyelesaiannya, apabila kedua ruas dikurangkan maka akan menghasilkan nilai nol. Oleh karena itu, fzero dan fsolve diterapkan pada kasus-kasus persamaan non-linier. Dalam Teknik Kimia, model fzero dan fsolve dapat ditemukan dalam proses *steady state*. Karena tidak ada perubahan suatu variable terhadap waktu, alias nol.

$$dT/dt \text{ atau } dX/dt \text{ atau } dCa/dt = \text{steady state} = 0 \dots\dots\dots (\text{model 4})$$

Kali ini ada beberapa kasus yang melibatkan *steady state* dalam Teknik Kimia yang akan kita bahas. Toolbox yang dapat digunakan adalah fzero dan fsolve, yang mana prinsip dasar kerja toolbox tersebut adalah mengoptimasi variabel yang menghasilkan fungsi bernilai nol seperti model 1 s.d model 4 diatas. Penggunaan toolbox tersebut adalah sebagai berikut.

2. Penggunaan Toolbox Fzero dan Fsolve

Penggunaan toolbox zero function didasarkan pada sintak berikut ini.

$$[X,FVAL,EXITFLAG] = \text{fzero}(\text{FUN},X0,\text{OPTIONS})$$

Fzero digunakan untuk optimasi satu variabel yang berbasis zero function. X adalah sebagai variabel tunggal yang akan ditrial dan nantinya menjadi output variabel yang memberikan

hasil dari fungsi (FVAL) bernilai nol. Exitflag sebagai penanda kriteria tingkat keberhasilan optimasi. Trial awal untuk variabel x dalam hal ini adalah sebagai X₀.

[X,FVAL,EXITFLAG] = fsolve(FUN,X0,OPTIONS)

Fsolve sama seperti halnya fzero, yaitu untuk optimasi berbasis zero function. Akan tetapi, fsolve digunakan untuk optimasi multivariable. Artinya, bila ada lebih dari satu persamaan (bisa simultan atau non simultan) ingin optimasi yang menghasilkan nilai fungsi nol, maka penyelesaiannya dengan fsolve. X sebagai variabel yang akan ditrial, X bisa berisi X₁, X₂, X₃, dan seterusnya dengan FVAL sebagai hasil dari fungsi. Trial adalah sebagai X₀, untuk multivariable bisa juga dituliskan sebagai [X₀ X₁ X₂ ..dst].

3. Contoh kasus sederhana penggunaan fzero dan fsolve.

Dimisalkan terdapat silinder dengan volume 50 m³ dengan panjang silinder 5 m. Hitunglah jari-jari silinder dengan optimasi menggunakan fzero.

Bila menggunakan fzero

```
function yt_zero1
clear all;clc
%by Aji Ridho P.
V_data=50;%vol silindr, m^3
h=5;%panjang silinder, m

%dicari r
r0=2;%m
%solver
[r,hasil_fungsi,exitflag]=fzero(@silinder,r0)
function fx=silinder(r)
V=pi*r^2*h;
fx=V-V_data;
end
end
```

Menggunakan fsolve

```
function yt_zero2
```

```

clear all;clc
%by Aji Ridho P.
V_data=50;%vol silindr, m^3
h=5;%panjang silinder, m

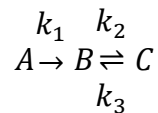
%dicari r
r0=2;%m
%solver
[r,hasil_fungsi,exitflag]=fsolve(@silinder,r0)
function fx=silinder(r)
V=pi*r^2*h;
fx=V-V_data;
end
end

```

Hasil RUN, jari-jari: 1.7841 m

Contoh kinetika reaksi orde 1:

Kita memiliki reaksi seri dalam batch reactor sebagai berikut:



Reaksi telah berlangsung sangat lama dan tercapaikan kondisi *steady state*. Maka, kita dapat membuat persamaan *rate of reaction* terhadap A, B, dan C sebagai berikut.

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \dots\dots\dots (1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -k_2 C_B + k_1 C_A + k_3 C_C \dots\dots\dots (2)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_C \dots\dots\dots (3)$$

Dimisalkan nilai $k_1 = 0,05 \text{ men}^{-1}$, $k_2 = 0,04 \text{ men}^{-1}$, dan $k_3 = 0,0001 \text{ men}^{-1}$ maka tentukanlah nilai konsentrasi A, B, dan C saat *steady state*.

Penyelesaian

```

function yt_zero3
clear all;
clc
% Aji Ridho Pangestu
k1=0.5;% 1/men
k2=0.01;% 1/men

```

```

k3=0.0001;% 1/men

%trial konsentrasi
Catr=2;
Cbtr=1;
Cctr=0.5;
C0=[Catr Cbtr Cctr];

%solver
[C,fval,exitflag]=fsolve(@batch,C0)
function fx=batch(Chasil)
Ca=Chasil(1);
Cb=Chasil(2);
Cc=Chasil(3);

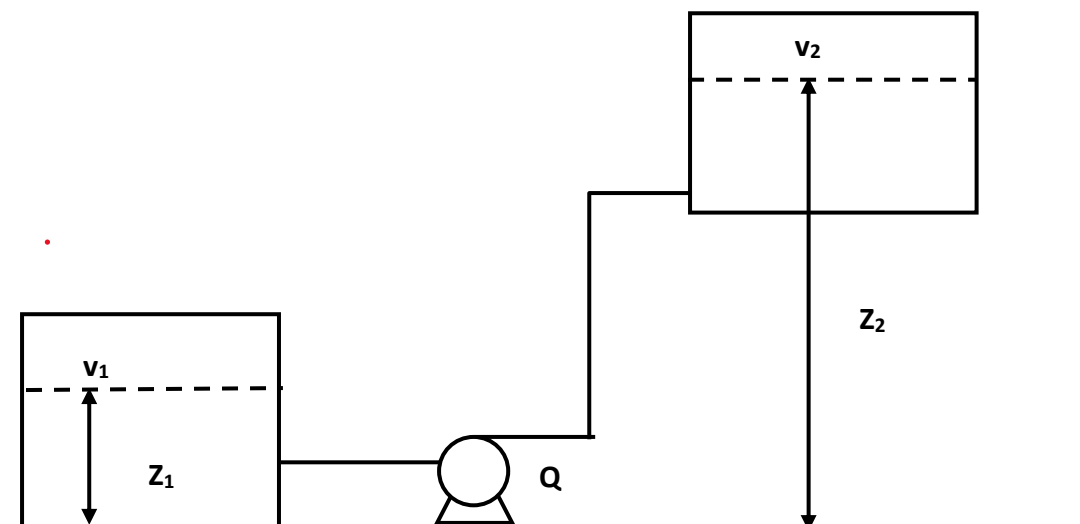
dCadts=-k1*Ca;
dCbdt=-k2*Cb+k1*Ca+k3*Cc;
dCcdt=k2*Cb-k3*Cc;

fx=[dCadts;dCbdt;dCcdt];
end
end

```

4. Menghitung Kecepatan Alir Fluida dalam Pipa

Dibayangkan bahwa terdapat tangki 1 yang berisi air dengan ketinggian z_1 dan tangki 2 dengan ketinggian air z_2 dari permukaan tanah. Ilustrasi ini dapat dilihat pada gambar berikut ini.



Mula-mula tangki 1 berisi cairan, misalkan air dengan volume V_1 . Tangki 1 memiliki diameter d_{p1} . Suatu saat air dari tangki 1 akan dipindahkan ke tangki 2 dengan bantuan pompa. Debit aliran dalam pipa adalah Q dengan panjang pipa yaitu L_e . Yang ingin kita cari adalah kecepatan aliran air yang melewati sepanjang pipa.

Soal diatas dapat kita selesaikan dengan bantuan persamaan Bernoulli. Kita ambil titik 1 pada cairan ditangki 1 yang berjarak z_1 dari tanah. Titik kedua adalah cairan ditangki 2 yang berjarak z_2 dari tanah. Air mengalir dari titik 1 ke titik 2 dengan bantuan gaya pompa. Sehingga Bernoulli pada titik 1 kemudian akan diperhitungkan dengan pengurangan oleh *head* pompa (W) dan gaya beserta gesekan pompa sebesar F . Persamaan Bernoulli dikedua titik dapat dituliskan sebagai berikut.

$$\frac{P_1}{\rho g} + z_1 + \frac{v_1}{2g} - F - W = \frac{P_2}{\rho g} + z_2 + \frac{v_2}{2g}$$

Variable lain dapat dihitung dengan rumus:

$$F = \frac{f \cdot L_e \cdot v^2}{2 \cdot g \cdot d_p} \quad f = \frac{0,0596}{Re^{0,215}} \quad Re = \frac{\rho v d_p}{\mu} \quad Q = \frac{\pi}{4} d_p^2 v \quad W = -H_m$$

Dengan *head* pompa:

$$H_m = 3718,5 - 2,3496Q + 7,8474 \cdot 10^{-4} Q^2 - 9,5812 \cdot 10^{-8} Q^3$$

Persamaan Bernoulli diatas dapat diselesaikan dengan beberapa asumsi yaitu.

- Tekanan pada tangki di titik 1 sama dengan posisi titik 2
- Kecepatan fluida awal di posisi titik 1 sama dengan posisi titik 2

Persamaan kemudian berubah menjadi:

$$\cancel{\frac{P_1}{\rho g}} + z_1 + \cancel{\frac{v_1}{2g}} - F - W = \cancel{\frac{P_2}{\rho g}} + z_2 + \cancel{\frac{v_2}{2g}}$$

$$z_2 - z_1 + \frac{f \cdot L v^2}{2 \cdot g \cdot d_p} - H_m = 0 \dots\dots\dots \text{(persamaan 5)}$$

Kemudian persamaan akhir (5) tersebut kita selesaikan dengan Matlab. Kecepatan alir fluida (v) sebagai variable yang akan kita trial sehingga hasil persamaan 5 terpenuhi yaitu nilainya nol. Diketahui data: $z_2 = 5$ m; $z_1 = 1,5$ m; $L = 100$ m; $d_p = 3$ inch. Densitas air adalah 1000 kg/m³ dan viskositasnya 0,001 kg/m/s.

Penyelesaian dengan Matlab.

```
function yt_zero4
clear all;
clc
% by: Aji Ridho P.
%data:
z2=5;%m
z1=1.5;%m
Le=100;%m
dp=3*2.54/100;%m
g=9.8;%m/s^2
rho=1000;%kg/m^3
miu=0.001;%kg/m/s

%trial v
v0=250;%m/s
[v_opt,hasil_fungsi,exitflag]=fzero(@tank,v0)
function fx=tank(v)
    Re=rho*v*dp/miu;
    f=0.0596/Re^0.215;
    A=1/4*dp^2*pi;
    Q=A*v;
    Hm=3718.5-2.3496*Q+7.8474e-4*Q^2-9.5812e-8*Q^3;
    fx=z2-z1+f*Le*v^2/2/g/dp-Hm;
end
end
Hasil, v = 178.3035 m/s
```

5. Kasus Optimasi Suhu Operasi pada Menara Distilasi

Distilasi adalah proses pemisahan dua komponen (fluida) atau lebih yang didasarkan pada perbedaan titik didih. Komponen yang volatil (mudah menguap) akan keluar sebagai hasil atas dan yang fasenya masih cair akan menjadi hasil bawah/ *bottom product*. Oleh

karena itu, konsep perhitungan pada Menara distilasi ini didasarkan pada proses kesetimbangan uap dan cair. Perhitungan detail tentang desain menara distilasi akan kalian pelajari pada mata kuliah Operasi Pemisahan Bertingkat maupun Perancangan Alat Proses. Kali ini, akan kita bahas mengenai penentuan suhu operasi umpan maupun suhu kesetimbangan pada *top product* dan *bottom product*.

Beberapa hal yang perlu kita perhatikan dalam menentukan suhu operasi di menara distilasi adalah komposisi, suhu, dan tekanan. Beberapa kemungkinan kasus yang dapat kita temui di menara distilasi adalah:

- Komposisi umpan dan suhu operasi diketahui. Tekanan operasi dan komposisi produk dapat dicari.
- Komposisi umpan dan tekanan operasi diketahui. Suhu operasi dan komposisi produk dapat dicari.
- Tekanan dan suhu diketahui sehingga komposisi dapat dicari.

Dalam perancangan kondisi yang sering kita temui adalah komposisi umpan diketahui, suhu umpan kemudian dicari. Kemudian komposisi produk *top* dan *bottom* sudah kita tentukan/targetkan dengan kondisi tekanan MD tertentu. Sehingga kemudian yang akan kita cari adalah suhu operasi di *top* dan *bottom*.

Contoh kali ini kita misalkan bahwa kita memiliki suatu campuran hidro karbon dari C_3 hingga C_5 . Adapun komposisi umpan memasuki menara adalah sebagai berikut.

Komponen	Fraksi umpan (Z_i)
C_3H_8	0,05
iC_4H_{10}	0,15

nC_4H_{10}	0,25
iC_5H_{12}	0,20
nC_5H_{12}	0,35

Kemudian, akan dirancang bahwa kita ingin mengambil pentana sebagai *bottom product* sedangkan propana dan butana sebagai *top product* dengan kondisi operasi pada 8,5 bar.

Komposisi *top product* dan *bottom product* dapat dilihat sebagai berikut.

Komposisi hasil atas:

Komponen	Fraksi atas (y_i)
C_3H_8	0,11
iC_4H_{10}	0,33
nC_4H_{10}	0,54
iC_5H_{12}	0,02
nC_5H_{12}	0,00

T

Komposisi hasil bawah:

Komponen	Fraksi bawah (x_i)
C_3H_8	0,00
iC_4H_{10}	0,00
nC_4H_{10}	0,02
iC_5H_{12}	0,34
nC_5H_{12}	0,64

Untuk menentukan suhu umpan, suhu puncak menara, dan suhu bawah menara kita akan menggunakan konsep kesetimbangan uap-cair. Konsep ini didasarkan bahwa fraksi total cairan maupun uap dalam suatu campuran adalah 100%.

$$\sum x_i = \sum y_i = 1$$

Penentuan suhu umpan didasarkan dengan titik didih/ *bubble point* campuran umpan yang mana ketika terjadi perubahan fasa menjadi gas, tercapai $\sum y_i = 1$. Konsep penentuan suhu *bottom product* juga sama layaknya suhu umpan, yaitu menggunakan konsep titik didih campuran. Sementara itu, penentuan suhu *top product* didasarkan pada pengembunan. Sehingga ketika uap menjadi cair kembali, tercapai $\sum x_i = 1$. Konsep kesetimbangan dengan hukum Dalton juga dirumuskan dengan:

$$y_i = k_i x_i$$

Dan kesetimbangan dapat dihitung dengan:

$$k_i = \frac{P_i}{P_{tot}}$$

Program untuk menentukan suhu umpan, suhu atas menara, dan suhu bawah menara dapat dijelaskan sebagai berikut.

$$\text{Data Antoine: } P^0 = \exp\left(A - \frac{B}{C+T}\right) \Leftrightarrow \ln(P^0) = A - \frac{B}{C+T}$$

%[propane isobutana n-butana isopentane n-pentana]

$$P_{\text{propana}} = \exp(15.726 - (1872.46 / (T - 25.16))) ;$$

$$P_{\text{isobutana}} = \exp(15.5381 - (2032.73 / (T - 33.15))) ;$$

$$P_{\text{n-butana}} = \exp(15.6728 - (2154.9 / (T - 34.42))) ;$$

$$P_{\text{isopentana}} = \exp(15.6338 - (2348.67 / (T - 40.05))) ;$$

$$P_{\text{n-pentana}} = \exp(15.8333 - (2477.07 / (T - 39.94))) ;$$

Tekanan dalam mmHg dan suhu dalam Kelvin.

Penyelesaian:

```
function yt_zero5
```

```

clear all;clc
%by : Aji Ridho P.
%data
%C3H8   iC4H10  nC4H10   iC5H12   nC5H12
z=[0.05 0.15 0.25 0.2 0.35];%feed
yd=[0.11 0.33 0.54 0.02 0];%top product
xb=[0 0 0.02 0.34 0.64];%bottom product
P=8.5/1.01325*760;%mmHg

%Antoine
A=[15.726 15.5381 15.6728 15.6338 15.8333];
B=[1872.46 2032.73 2154.9 2348.67 2477.07];
C=[-25.16 -33.15 -34.42 -40.05 -39.94];

%what is the problem?
%determine Ttop, Tfeed, Tbot
%trial
Ttop1=303.15;%as K
Tfeed1=330.15;%feed
Tbot1=400;%bottom

%solver
[T,fval,exitflag]=fsolve(@md,[Ttop1 Tfeed1 Tbot1])
hasil=T-273.15
function fx=md(T)
%Tt = T(1); Tf=T(2); Tb= T(3)
%there is 2 variations:
%1. component : 5 = C3, iC4, nC4,iC5,nC5
%   as row
for i=1:length(z)
%2. temperature : 3 = Tt,Tf,Tb
%   as column
for j=1:length(T)

%matriks model
%P = [ 1 2 3 ]
%     [ 4 5 6 ]
% P = column = 3, row =2
% P is as matriks of 2 x 3
% P(2,3) = P(i,j)
P0(i,j)=exp(A(i)-B(i)/(C(i)+T(j)));
k(i,j)=P0(i,j)./P;
end
%feed ==> bubble point
%liquid ==> vap (y) ==> sigma vap = 1
yfeed(i)=z(i).*k(i,2);

%top product ==> dew point
%vap ==> liq(x)
xtop(i)=yd(i)./k(i,1);

```

```

%bottom product ==> bubble point
ybottom(i)=xb(i).*k(i,3);
end

%total of fraction
sigmayf=sum(yfeed);
sigmaxt=sum(xtop);
sigmayb=sum(ybottom);

%total of fraction is eq = 1
totalofyf=1;
totalofxt=1;
totalofyb=1;

%fsolve
%fx = 0
fxtop=sigmayf-totalofyf;
fxfeed=sigmaxt-totalofxt;
fxbottom=sigmayb-totalofyb;

fx=[fxtop;fxfeed;fxbottom];
end
end

```

*silahkan tambahkan program sendiri di editor supaya hasil RUN seperti berikut.

Program yang berwarna hijau (diatas) bertujuan untuk penjelasan, sehingga tidak wajib ditulis sebagai program utama.

HASIL RUN

Hasil Atas Menara	
Fraksi cair	fraksi uap
0.040	0.110
0.284	0.330
0.624	0.540
0.052	0.020
0.000	0.000
suhu atas MD = 66.65 Celcius	

Kondisi Umpan Menara	
Fraksi cair	fraksi uap
0.050	0.183
0.150	0.240
0.250	0.305
0.200	0.113
0.350	0.160
suhu umpan MD = 82.20 Celcius	

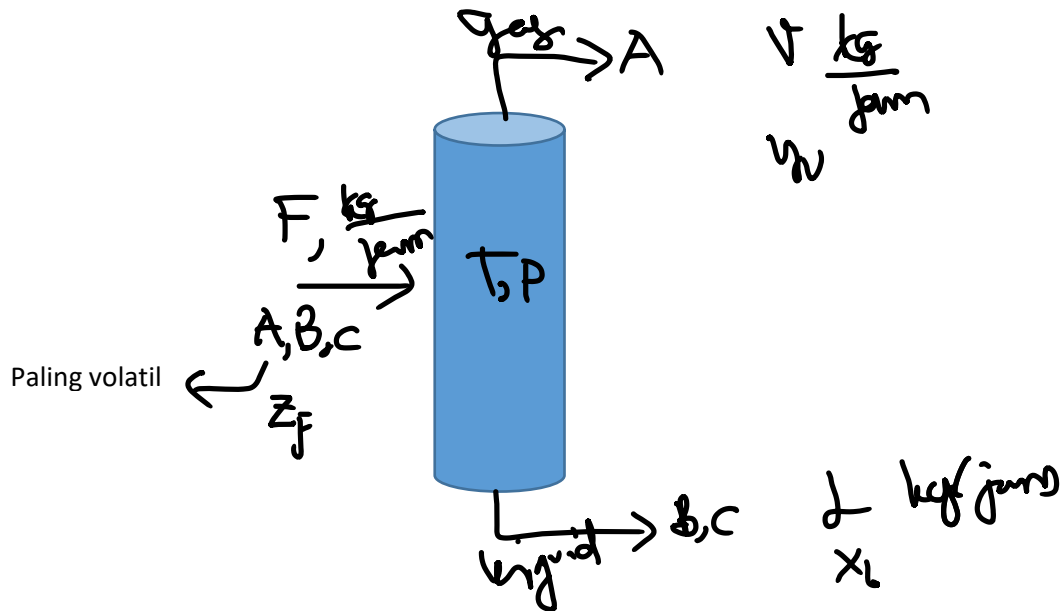
Hasil Bawah Menara	
Fraksi cair	fraksi uap
0.000	0.000
0.000	0.000
0.020	0.044
0.340	0.369
0.640	0.587
suhu bawah MD = 112.77 Celcius	

6. Optimasi Suhu Operasi pada Flash Drum

Flash drum merupakan salah satu alat pemisah fase cair-cair yang memiliki selisih titik didih yang cukup tinggi antara komponen satu dengan komponen yang lain. Konsep pemisahan pada flash drum didasarkan pada perbedaan titik didih/ volatilitas komponen.

Umumnya umpan masuk flash drum dibuat sedemikian rupa sama dengan kondisi operasi flash drum. Sehingga diinginkan komposisi di fraksi uap dan fraksi liquid yang diinginkan. Flash drum dapat beroperasi secara adiabatik (tanpa penambahan atau pengurangan panas) dalam hal ini nilai panas (Q) = 0. Bisa juga beroperasi secara non-adiabatik sehingga diperlukan pemanas (Q_{flash}) untuk memenuhi kebutuhan operasi.

Berikut gambaran untuk model tangka flash drum:



Pada kasus ini diberikan contoh pemisahan etanol-air di flash drum. Dasar-dasar perhitungan pada flash drum meliputi sebagai berikut.

$$F = L + V \dots\dots(i)$$

Dimana :

F = laju alir umpan (mol/jam)

L = laju alir *bottom product (liquid)* (mol/jam)

V = laju alir uap (distilat) (mol/jam)

Kemudian neraca massa/mol untuk komponen z dalam *flash drum* adalah

$$F \cdot z_f = L \cdot x_L + V \cdot y_v \dots\dots(ii)$$

Dimana:

z_f = fraksi komponen z dalam umpan

y_v = fraksi komponen z dalam uap/distilat

x_L = fraksi komponen z dalam *bottom product*

total fraksi dalam komponen adalah 1 yang dirumuskan sebagai berikut.

$$\sum z_f = \sum x_L = \sum y_v = 1 \dots\dots\dots(iii)$$

Dalam perhitungan flash drum sangat erat kaitan antara suhu dan tekanan yang dinyatakan dalam persamaan Antoine yaitu.

$$\ln P^0 = A - B / (C+T) \dots\dots\dots(iv)$$

Dengan:

P^0 = tekanan uap komponen (atm, mmHg, sesuai data)

A,B,C = konstanta antoine untuk komponen tertentu. Setiap komponen memiliki data antoine yang berbeda

T = suhu komponen/senyawa (K atau celcius)

Kemudian hubungan antara konstanta keseimbangan terhadap tekanan uap adalah

$$k(i) = P^0 / P_t \dots\dots\dots(v)$$

dengan:

$k(i)$ = konstanta keseimbangan untuk komponen i

P_t = tekanan total komponen (atm, mmHg, sesuai data)

Hubungan antara konstanta keseimbangan terhadap fraksi baik uap maupun cair adalah sebagai berikut.

$$y(i) = x(i).k(i) \dots\dots\dots(vi)$$

$$x(i) = z(i) / (1 + V/F (k(i) - 1)) \dots\dots\dots(vii)$$

a. Kasus Flash Drum pada Pemisahan Etanol-Air

Dalam suatu Flash Drum akan dipisahkan campuran etanol air, dengan kandungan etanol sebesar 75% mol. Total umpan yang masuk ke flash drum per jam adalah sebesar 1000 kmol. Bila flash drum beroperasi pada tekanan 1,519875 bar. Tentukan suhu operasi flash

drum dan komposisi etanol bila hasil bawah kolom sebanyak 35% dari total feed. (1,01325 bar = 1 atm);

Diketahui data antoine:

$$P_{\text{ethanol}}^0 = \exp (18,9119-3803,98/(T-41,68))$$

$$P_{\text{air}}^0 = \exp (18,3035-3816,44/(T-46,13))$$

P in mmHg dan T in Kelvin

Penyelesaian dengan MATLAB

```
function yt_zero6
clear all;
clc
%by: Aji Ridho P.
%data : Etanol Air
zf=[0.75 0.25];%fraction of feed
F=1000;%kmol/jam
P=1.519875/1.01325*760;%mmHg
L=0.35*F;%L/F = 0.35
V=F-L;
A=[18.9119 18.3035];
B=[3803.98 3816.44];
C=[-41.68 -46.13];
%membutuhkan V/F ==> VperF
VperF=V/F;

%trial T
T0=85+273.15;%Kelvin
%solver
[T,fval,exitflag]=fsolve(@flash,T0);
function fx=flash(T)
for i=1:length(zf)%komponen
    P0(i)=exp(A(i)-B(i)/(T+C(i)));
    k(i)=P0(i)/P;
    xl(i)=zf(i)/(1+VperF*(k(i)-1));
    yv(i)=k(i).*xl(i);
end
sigmaxl=sum(xl)-1;sigmayv=sum(yv)-1;
fx=[sigmaxl; sigmayv];
end
disp('=====')
disp('    Design of Flash Drum');
disp('=====')
fprintf('Umpan masuk = %2.3f kmol/jam\n',F);
fprintf('Hasil atas = %2.3f kmol/jam\n',V);
```



```

fprintf('Hasil bawah = %2.3f kmol/jam\n',L);
disp('=====')
disp(' Neraca Massa dan fraksi di Flash Drum');
fprintf('Suhu operasi FD= %2.3f Celcius\n',T-273.15);
disp('=====')
disp(' Komponen      Feed      Vapor      Liquid');
disp('=====')
fprintf(' Etanol    %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\n',F.*zf(1),L.*xl(1),V.*yv(1));
fprintf(' Air       %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\n',F.*zf(2),L.*xl(2),V.*yv(2));
fprintf(' Etanol    %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\n',zf(1),xl(1),yv(1));
fprintf(' Air       %2.3f\t %2.3f\t %2.3f\n',zf(2),xl(2),yv(2));
disp('=====')

end

```

b. Kasus Flash Drum pada Pemisahan Campuran Asam dan Air (Tugas)

Pada prarancangan pabrik Nitrogliserin diperlukan untuk memisahkan campuran asam terhadap air dengan impuritis nitrogliserin dan gliserin. Flash drum beroperasi dalam keadaan vakum 0,25 atm dengan hasil atas 85,2667% dari total umpan. Data komposisi umpan dan vapor pressure dapat dilihat pada tabel berikut.

Komponen	Input Flash Drum (kmol/jam)	Vapor Pressure				
		A	B	C	D	E
HNO ₃	8,3526	71,7653	-4376,8	-22,769	-4,6E-07	1,19E-05
H ₂ O	158,5604	29,8605	-3152,2	-7,3037	2,42E-09	1,81E-06
C ₃ H ₅ N ₃ O ₉	0,1276	42,9395	-6208,7	-10,088	-0,00119	8,82E-07
C ₃ H ₈ O ₃	0,0304	-62,7929	-3658,5	34,249	-0,05194	2,28E-05
H ₂ SO ₄	28,5528	2,0582	-4192,4	3,2578	-0,00112	5,54E-07

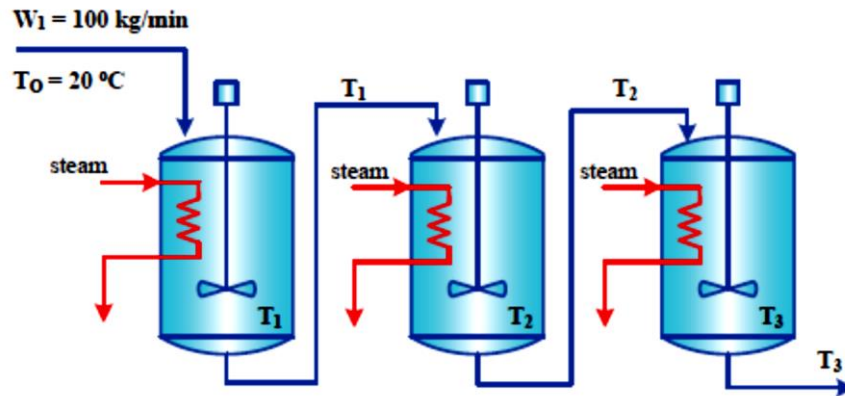
$$P = 10^{(A + B/T + C \log T + DT + ET^2)}$$

(P dalam mmHg, dan T dalam Kelvin)

Tentukanlah suhu operasi flash drum, dan komposisi hasil atas dan hasil bawahnya!

7. Kasus Pemanasan pada Tangki Seri (Tugas)

- Tiga buah tangki tersusun seri digunakan untuk memanaskan minyak mentah sebelum diumpankan ke fraksinasi untuk pemisahan lanjut (data seperti pada gambar disamping).
- Masing-masing tangki volumenya tetap yaitu $M=1000$ kg, dengan suhu awal 20°C . Pemanas berupa steam jenuh suhu 250°C . Tangki dilengkapi pengaduk sehingga suhu ditangki dengan keluarannya sama. Ilustrasi proses ditunjukkan pada gambar berikut.



- Diketahui distribusi panas di masing-masing tangki adalah
- $\frac{dT_1}{dt} = \frac{WC_p(T_0 - T_1) + Ua(T_{steam} - T_1)}{MC_p}$ (untuk tangki 1)
- $\frac{dT_2}{dt} = \frac{WC_p(T_1 - T_2) + Ua(T_{steam} - T_2)}{MC_p}$ (untuk tangki 2)
- $\frac{dT_3}{dt} = \frac{WC_p(T_2 - T_3) + Ua(T_{steam} - T_3)}{MC_p}$ (untuk tangki 3)
- Buatlah plot perubahan suhu untuk masing-masing tangka (satu grafik), diketahui data:
- $Ua = 10 \text{ kJ/men}^\circ\text{C}$
- $C_p = 2 \text{ kJ/kg}$
- Waktu alir selama 90 menit

8. Kasus Perancangan Kondisi Operasi Flash Drum (Uji Kompetensi – Non Tugas)

Cairan sejumlah 100 gmol/menit dengan fraksi mol A, B, C masing-masing 0,4; 0,3; 0,3 dimasukkan dalam *flash drum* sehingga Sebagian cairan tersebut menguap. Suhu cairan masuk 360 K dan tekanan dalam *flash drum* adalah 76 cmHg. Sistem mengikuti hukum Rault-Dalton. Jika panas yang dimasukkan ke *flash drum* adalah 5e5 cal/men, hitunglah suhu bahan-bahan keluar reboiler, jumlah produk hasil atas (V) dan hasil bawahnya (L), dan komposisi hasil atas (y_i) dan hasil bawah (x_i).

Persamaan-persamaan tekanna uap:

$$P_A^0 = \exp(15,35 - 3764/T)$$

$$P_B^0 = \exp(16,07 - 4497/T)$$

$$P_C^0 = \exp(15,95 - 4934/T)$$

$$\text{Trial awal: } L/F = 0,5 \text{ dan } T_{\text{trial}} = 375 \text{ K}$$

$$x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F} + \frac{P_i^0}{P_t} \left(1 - \frac{L}{F}\right)} \quad y_i = \frac{P_i^0}{P_t} x_i \quad H_f = (\sum C_{pl}^i z_i)(T_f - 298)$$

$$H_l = (\sum C_{pl}^i x_i)(T - 298) \quad H_v = (\sum C_{pv}^i y_i)(T - 298) + \sum y_i \lambda_i$$

Optimasilah L/F dan T dengan toolbox yang sesuai untuk persamaan berikut ini.

$$fx1 = Q + FH_f - VH_v - LH_l = 0$$

$$fx2 = \sum(x_i) - 1 = 0$$

Data pendukung:

$C_{p,l,A} = 30$; $C_{p,l,B} = 35$; $C_{p,l,C} = 40$; cal/gmol/K

$C_{p,v,A} = 25$; $C_{p,v,B} = 30$; $C_{p,v,C} = 35$; cal/gmol/K

$\lambda_A = 7e3$; $\lambda_B = 8e3$; $\lambda_C = 9e3$; cal/gmol

BAB IV

OPTIMASI MULTI VARIABEL

1. Optimasi Multi Variabel dengan Metode Hooke-Jeeves

Sebagaimana telah dibahas sebelumnya mengenai optimasi satu variable. Optimasi yang melibatkan lebih dari satu variabel juga sangat mungkin kita temui. Kasus sederhana, misalkan kita memiliki persamaan yang melibatkan variabel x_1, x_2, x_3 sampai x_n . Kemudian, nilai masing-masing x akan kita optimasi yang menghasilkan fungsi $y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ optimum (biasanya optimasi minimasi). Optimasi multivariabel yang sering digunakan adalah metode Hooke-Jeeves karena selain mudah cara ini juga cepat dalam mencari penyelesaiannya.

Misalkan persamaan dengan dua variabel.

$$y = (x_1 - 2)^2 + 0.5(3 - x_2)^2 + 3$$

Secara sederhana dapat kita tentukan nilai y minimum yaitu dengan kondisi pada tanda kurung bernilai nol. Kondisi tersebut menghasilkan nilai $y = 3$ dengan nilai $x_1 = 2$, dan $x_2 = 3$. Jika kita substitusikan $x_1 = 2$ dan $x_2 = 3$ ke persamaan maka:

$$y = (2 - 2)^2 + 0.5(3 - 3)^2 + 3$$
$$y = 3$$

Langkah penyelesaian apabila kita lakukan dengan Hooke jeeves, adalah sebagai berikut.

1. Pertama tentukan nilai awal x_1 dan x_2 , misal $x_1 = 4$ dan $x_2 = 8$ dan substitusi ke fungsi untuk mendapatkan nilai y awal.

Apakah boleh selain angka tersebut diatas? Boleh.

Yang terpenting nilai awal trial kita coba selalu diatas kemungkinan awal, yaitu $x_1 = 2$ dan $x_2 = 3$.

2. Tentukan interval awal x_1 dan x_2 , misal $\Delta x_1 = 1$ dan $\Delta x_2 = 2$.

Semakin tinggi interval maka ketelitian hasil semakin tinggi.

3. Mencoba menghitung pengaruh dari x_1 dengan kondisi nilai $x_2 = 8$ (tetap). Pertama yaitu pengaruh $x_1 + \Delta x_1$. Kemudian nilai $x_1 + \Delta x_1$ dan x_2 disubstitusikan ke persamaan untuk mendapatkan nilai y (Langkah urutan 3). Bila nilai y hitung diatas nilai y awal lanjut step 4. Bila ternyata y hitung lebih kecil dari y awal, $x_1 + \Delta x_1$ ditetapkan sebagai nilai x_1 selanjutnya.

4. Mencoba dengan $x_1 - \Delta x_1$, dengan perhitungan yang sama seperti step 3, bila nilai y

- hitung lebih kecil dari y awal, maka nilai $x_1 - \Delta x_1$ ditetapkan sebagai nilai x selanjutnya.
- Selanjutnya evaluasi nilai x_2 dengan nilai baru sebagai $x_2 + \Delta x_2$ dan nilai x_1 baru diperoleh dari step 3 atau 4. Pertama dicoba $x_2 + \Delta x_2$ dan apabila nilai y hitung lebih kecil dari y awal, maka $x_2 + \Delta x_2$ ditetapkan sebagai x_2 baru.
 - Bila $x_2 + \Delta x_2$ memberikan nilai y hitung lebih besar dari y awal, maka evaluasi selanjutnya terhadap $x_2 - \Delta x_2$. Kemudian nilai $x_2 - \Delta x_2$ ditetapkan sebagai x_2 baru.
 - Step ke 3 sampai 6 dilakukan berulang sehingga nilai x_1 baru dan x_2 baru memberikan nilai y baru. Program akan dikatakan memberikan nilai x_1 dan x_2 optimum ketika diperoleh nilai selisih antara nilai y_{baru} dan nilai $y_{\text{sebelumnya}}$ mendekati atau sama dengan nol.

Ilustrasi perhitungan dapat dilihat pada table dibawah ini.

Tabel 4.1. Simulasi perhitungan menggunakan metode Hooke – Jeeves.

x_1	x_2	$y = f(x_1, x_2)$	Keterangan	Urutan Step
4	8	19.5	basis	1
Explorasi $\Delta x_1=1, \Delta x_2=2$				2
5	8	24.5	gagal	3
3	8	16.5	sukses,	4
3	10	28.5	gagal, ganti	5
3	6	8.5	sukses, diteruskan	6
diulangi, pengurangan				
2	4	4.5	sukses, diteruskan	Pengulangan step 3 sampai 5
1	2	4.5	gagal	
1	4	4.5	gagal	
3	4	4.5	gagal	
explorasi dengan $\Delta x_1=0,5, \Delta x_2=1$				
2,5	4	3.8	sukses	
2,5	5	5.3	gagal	
2,5	3	3.3	sukses	
2	2	3.5	gagal	
dst sampai diperoleh selisih antara y_{akhir} dan y_{sebelum} sama atau mendekati nol.				

2. Contoh Optimasi Dua Variabel dengan Metode Hooke-Jeeves

Selesaikanlah persamaan berikut yang menghasilkan nilai x_1 dan nilai x_2 optimum dengan output y minimum.

$$y = (2-x_1)^2 + 0,5(x_2-3)^2 + 3$$

(Secara logika nilai $x_1 = 2$, nilai $x_2 = 3$, dengan nilai $y = 3$, seperti penjabaran sebelumnya).

Pada perhitungan kali ini digunakan nilai x_1 dan x_2 adalah 5.

Penyelesaian dengan Matlab

```
function opt_multil
clear all;
clc;
%by: Aji Ridho Pangestu
x1awal=5;%nilai awal x1
x2awal=5;%nilai awal x2
dx=0.7;
dx1=0.5;dx2=dx1; %nilai inkremen
i=1;%array
%pemberhentian program berbasis dx
while and (dx1>0.001,dx2>0.001)
    %basis awal
    x1=x1awal;x2=x2awal;
    fxawal=fungsi(x1,x2);
    %analisis x1 kondisi pertama
    x1=x1awal+dx1; x2=x2awal;
    fx=fungsi(x1,x2);
    tanda1=0;%tanda x1
    tanda2=0;%tanda x2
    %pengandaian kondisi pertama
    if fx<fxawal
        fxawal=fx;
        x1awal=x1;
        tanda1=1;
    else%analisis x1 kondisi kedua
        x1=x1awal-dx1;
        fx=fungsi(x1,x2);
        %pengandaian kondisi kedua
        if fx<fxawal
            fxawal=fx;
            x1awal=x1;
            tanda1=-1;
        end
    end
    %analisis x2 kondisi pertama
    x1=x1awal;
    x2=x2awal+dx2;
    fx=fungsi(x1,x2);
    %pengandaian kondisi pertama
    if fx<fxawal
        fxawal=fx;
        x2awal=x2;
        tanda2=1;
    else %analisis x2 kondisi kedua
        x2=x2awal-dx2;
```

```

    fx=fungsi(x1,x2);
    %pengandaian kondisi kedua
    if fx<fxawal
        fxawal=fx;
        x2awal=x2;
        tanda2=-1;
    end
end
%membuat looping untuk x1
if abs(tanda1)<=0
    dx1=dx1*dx;
else
    i=i+1;%bisa utk disp hasil
    %looping untuk x2
    if abs(tanda2)<=0
        dx2=dx2*dx;
    else
        %pemberhentian program berbasis fx
        while fx<fxawal
            x1=x1awal+dx1*tanda1;
            x2=x2awal+dx2*tanda2;
            fx=fungsi(x1,x2);
            x1awal=x1;
            x2awal=x2;
            fxawal=fx;
        end
    end
end
end
fprintf(' X1 optimal = %2.4f\n',x1awal);
fprintf(' X2 optimal = %2.4f\n',x2awal);
fprintf(' Nilai Fungsi optimal = %2.4f\n',fxawal);
end
function fx=fungsi(x1,x2)
fx=(x1-2)^2+0.25*(x2-3)^2+3;
end

```

3. Optimasi Multivariabel dengan Toolbox Fminsearch dan Lsqnonlin

Kasus optimasi yang melibatkan lebih satu variabel dapat diselesaikan dengan beberapa toolbox yaitu diantaranya fminsearch, lsqnonlin, fminunc, dan lsqcurvefit. Ke-empat toolbox tersebut didasarkan pada proses optimasi yang memberikan hasil persamaan bernilai minimum. Beberapa penjelasan untuk sintaks penggunaan masing-masing toolbox seperti berikut. Lsqcurvefit tidak kita pelajari karena penggunaannya sama seperti lsqnonlin. Fminunc juga tidak kita pelajari detail karena penggunaannya sama seperti fminsearch.

a. Toolbox fminsearch

$[X,FVAL,EXITFLAG,OUTPUT] = \text{fminsearch}(\text{FUN},X0,\text{Options})$

Starts at X0 and attempts to find a local minimizer X of the function FUN. FUN is a function handle. FUN accepts input X and returns a scalar function value F evaluated at X. X0 can be a scalar, vector or matrix.

b. Toolbox lsqnonlin

`[X,RESNORM,RESIDUAL,EXITFLAG] = lsqnonlin(FUN,X0,LB,UB)`

Defines a set of lower and upper bounds on the design variables, X, so that the solution is in the range $LB \leq X \leq UB$. Use empty matrices for LB and UB if no bounds exist. Set $LB(i) = -Inf$ if $X(i)$ is unbounded below; set $UB(i) = Inf$ if $X(i)$ is unbounded above.

Contoh Sederhana Penggunaan Fminsearch dan Lsqnonlin

Selesaikanlah persamaan berikut yang menghasilkan nilai x_1 dan nilai x_2 optimum dengan nilai y minimum.

$$y = (2-x_1)^2 + 0,5(x_2-3)^2 + 3$$

(Secara logika nilai $x_1 = 2$, nilai $x_2 = 3$, dengan nilai $y = 3$, seperti penjabaran sebelumnya).

Pada perhitungan kali ini digunakan nilai x_1 dan x_2 adalah 5.

Penyelesaian:

```
function opt_multi3
clear all;clc
%by: Aji Ridho Pangestu
%cotoh optimasi multivar
%trial x1 dan x2
x10=5;x20=5;
%solver
[x,hasil_y,exitflag]=fminsearch(@optimasi,[x10 x20]);
function fx=optimasi(x)
x1=x(1);x2=x(2);
fx=(2-x1)^2+0.5*(x2-3)^2+3;
end
fprintf(' X1 optimal = %2.4f\n',x(1));
fprintf(' X2 optimal = %2.4f\n',x(2));
fprintf(' Nilai Fungsi optimal = %2.4f\n',hasil_y);
end
```

Hasil RUN:

X1 optimal = 2.0000

X2 optimal = 3.0000

Nilai Fungsi optimal = 3.0000

dengan lsqnonlin adalah:

```
function opt_multi4
clear all;clc
%by: Aji Ridho Pangestu
%cotoh optimasi multivar
%trial x1 dan x2
x10=5;x20=5;
%solver
[x,residual]=lsqnonlin(@optimasi,[x10 x20],[[]],[[]]);
function fx=optimasi(x)
x1=x(1);x2=x(2);
fx=(2-x1)^2+0.5*(x2-3)^2+3;
end
fprintf(' X1 optimal = %2.4f\n',x(1));
fprintf(' X2 optimal = %2.4f\n',x(2));
fprintf(' Nilai Fungsi optimal = %2.4f\n',optimasi(x));
end
```

Hasil RUN

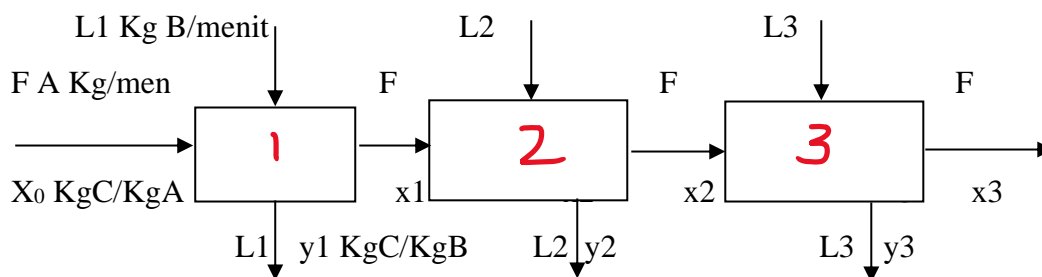
X1 optimal = 2.0000

X2 optimal = 3.0015

Nilai Fungsi optimal = 3.0000

4. Kasus Optimasi Multi Variabel dalam Teknik Kimia

a. Ekstraksi Cair-Cair 3 Stages dengan aliran *Cross Current*



Campuran A dan C akan diambil C-nya dengan jalan ekstraksi dengan solven B dalam ekstraktor 3 tingkat, yang beroperasi secara *cross current*. Hubungan antara C dalam fase B (y) dan C dalam fase A (x) adalah $y=kx^2$, ingin dicari distribusi jumlah solven (L_1, L_2 dan L_3) yang memberikan x_3 minimal. Dengan jumlah total $L_1+L_2+L_3=L$ (tetap).

Diketahui:

$$x_1 = (-F + (F^2 + 4FL_1kx_0)^{0.5}) / (2L_1k) \dots\dots\dots(1)$$

$$x_2 = (-F + (F^2 + 4FL_2kx_1)^{0.5}) / (2L_2k) \dots\dots\dots(2)$$

$$x_3 = (-F + (F^2 + 4FL_3kx_2)^{0.5}) / (2L_3k) \dots\dots\dots(3)$$

F = 100 kg/menit

$x_0 = 0,2$

k = 20

$L_{total} = 180$ kg pelarut B/ menit

Hitunglah laju arus solven L_1 dan L_2 yang memberikan nilai x_3 minimum.

Penyelesaian:

```
function opt_multi2
clear all;clc
%by: Aji Ridho Pangestu
%kasus ekstraksi cair-cair 3 stages
%data
F=100;%umpan (A dan C), kg/men
L=180;%pelarut B, kg/men
x0=0.2;%fraksi umpan C yg akan di ekstrak
k=20;%konstanta, y=kx^2

%ditanya L1 dan L2
L1_trial=30;%kg/men
L2_trial=40;

%solver
[L_hasil,hasil,exitflag]=fminsearch(@optimasi,[L1_trial
L2_trial]);
function fx=optimasi(L_final)
L1=L_final(1);L2=L_final(2);
L3=L-L1-L2;%dari NM total
x1=(-F+(F^2+4*F*L1*k*x0)^0.5)/(2*L1*k);
x2=(-F+(F^2+4*F*L2*k*x1)^0.5)/(2*L2*k);
x3=(-F+(F^2+4*F*L3*k*x2)^0.5)/(2*L3*k);
%minimasi x3
fx=x3;
end
fprintf('nilai L1= %2.3f kg/men\n',L_hasil(1));
fprintf('nilai L2= %2.3f kg/men\n',L_hasil(2));
fprintf('nilai L3= %2.3f kg/men\n',L3);
fprintf('fraksi akhir x3= %2.3f\n',hasil);

end
```

Hasil RUN

nilai $L_1 = 47.373$ kg/men

nilai $L_2 = 59.804$ kg/men

nilai $L_3 = 72.823$ kg/men

fraksi akhir $x_3 = 0.038$

b. Optimasi Biaya Pengolahan Limbah Industri (Tugas)

Disuatu daerah industri terdapat pabrik A, B, dan C. Setiap pabrik tersebut menghasilkan limbah industri sebanyak Q (L/jam). Pabrik X merupakan vendor untuk mengolah limbah pabrik industri. Pabrik X ingin mencari mana dari pabrik A, B, dan C yang memberikan biaya pengolahan limbah terkecil. Biaya pengolahan limbah sebagai fungsi debit (Q) dan jarak (P dan L) dari lokasi pabrik X. data lokasi dan limbah yang dihasilkan oleh pabrik A, B, dan C adalah.

Pabrik No	P	L	Qi
A	120	59	860
B	250	550	467
C	1000	850	150

Hubungan antara biaya (C) terhadap P , L , dan Q adalah:

$$C = ((P_x - P)^2 + (L_x - L)^2)^{1,1} Q^{0,5}$$

Optimasilah P_x dan L_x untuk menghasilkan biaya (C) terendah, dan pabrik manakah yang memberikan biaya pengolahan limbah terkecil? Nilai P_x dan L_x tidak ada Batasan nilai dengan nilai awal $P_x = 200$ dan $L_x = 100$;

BAB V

OPTIMASI DENGAN CONSTRAINT

1. Penjelasan Umum Optmasi dengan Constraint

Sebagaimana optimasi *single variable* atau *multi variable*, optimasi dengan *constraint* memiliki tujuan yang sama, yaitu untuk mencari nilai variabel yang optimum. Optimasi tipe ini, seringkali dijumpai dalam kasus permasalahan matematis bersyarat. Syarat yang dimaksud disini adalah syarat-syarat tertentu yang berlaku pada fungsi/persamaan matematis yang ada. Secara sederhana, contohnya adalah kita diminta untuk optimasi x_1 dan x_2 yang memberikan nilai y minimum. Syaratnya adalah hasil penjumlahan x_1 dan x_2 bernilai angka 5. Syarat seperti contoh tersebut, harus dipenuhi agar memberikan nilai y yang sesuai dengan ketentuan persyaratan/ *constraint*. Optimasi dengan *constraint* umumnya berupa optimasi multi-variabel, karena *constraint* dapat terbentuk bila melibatkan lebih dari satu variabel.

2. Jenis-jenis Constraint

Ada beberapa jenis *constraint* yang dapat kita temukan dalam pemodelan matematis, yaitu bentuk persamaan dan pertidaksamaan.

a. Constraint dengan bentuk persamaan yang koefisiennya dapat ditentukan

Tipe ini yang paling umum kita temukan, yaitu bentuk persamaan. Misalnya, kita diminta mencari nilai y minimum dari persamaan $y = x_1 + 3x_2x_1 + \exp(x_1) - 10$. *Constraint*-nya adalah:

$$x_1 + x_2 = 5 \dots\dots\dots (1)$$

$$2x_2 - x_1 = 1 \dots\dots\dots (2)$$

Kedua persamaan diatas merupakan bentuk persamaan, ciri-cirinya adalah ditandai dengan tanda sama dengan “=” antara sisi ruas kiri dan ruas kanan. Koefisien pada masing-masing *constraint* dapat ditentukan yakni pada persamaan pertama koefisien x_1 dan x_2 masing-masing adalah 1. Sementara itu, pada persamaan kedua koefisien x_1 dan x_2 adalah -1 dan 2.

b. Constraint dengan bentuk persamaan yang koefisiennya tidak dapat ditentukan

Jenis ini sama dengan *constraint* sebelumnya yaitu antara ruas kiri dan ruas kanan itu bernilai sama/ *equal*. Akan tetapi, koefisiennya tidak dapat ditentukan. Contoh:

$$x_2x_1 + 3x_2 = 8 \dots\dots\dots (3)$$

$$3x_2 - x_1/x_2 = 3 \dots\dots\dots (4)$$

Kedua persamaan diatas adalah bentuk persamaan, tetapi koefisien yang melekat pada x_1 dan x_2 tidak dapat ditentukan. Mengapa? Karena x_1 dan x_2 terikat dengan operasi perkalian, pembagian, atau bisa juga perpangkatan. Sehingga x_1 dan x_2 tidak dapat dipisahkan.

c. Constraint dengan bentuk pertidaksamaan yang koefisiennya dapat ditentukan

Bentuk berikutnya adalah model pertidaksamaan. Bentuk ini antara ruas ruas kanan dan kiri dihubungkan dengan tanda berupa \leq atau \geq atau $<$ atau $>$. Ke-empat konjungsi tersebut dapat menjadi bentuk *constraint* dengan bentuk pertidaksamaan. Contohnya:

$$x_1 + x_2 \leq 5 \dots\dots\dots (5)$$

$$2x_2 - x_1 \geq 1 \dots\dots\dots (6)$$

Kedua persamaan diatas adalah bentuk *constraint* pertidaksamaan. Karena dalam penyelesaiannya, hasil operasi antara x_1 dan x_2 berada dalam range nilai tertentu. Oleh karen itu, dalam penyelesaiannya dimungkinkan diperoleh akar persamaan lebih dari satu.

d. Constraint dengan bentuk pertidaksamaan yang koefisiennya tidak dapat ditentukan

Model ini sama halnya seperti persamaan yang koefisiennya tidak dapat dipisahkan, bedanya hanya terletak pada penghubung antara ruas kiri dan kanan. Sebagai contoh:

$$x_2x_1 + 3x_2 \leq 8 \dots\dots\dots (7)$$

$$3x_2 - x_1/x_2 \geq 3 \dots\dots\dots (8)$$

Bentuk *constraint* diatas adalah pertidaksamaan yang koefisien masing-masing variabel tidak dapat ditentukan. Oleh karena itu, penyelesaian pada MATLAB juga berbeda dengan kasus yang koefisiennya dapat diketahui.

3. Penyelesaian Kasus Optimasi dengan Constraint Menggunakan Fmincon

Model optimasi dengan *constraint* baik model 1, 2, 3, atau 4 dapat diselesaikan hanya menggunakan satu toolbox yaitu fmincon. Toolbox ini dapat digunakan untuk menyelesaikan model *constraint* baik bentuknya persamaan maupun pertidaksamaan, baik yang koefisiennya dapat diketahui atau tidak. Sintak penggunaan fmincon adalah sebagai berikut.

$$[X,FVAL,EXITFLAG] = \text{fmincon}(\text{FUN},X0,A,B,Aeq,Beq,LB,UB, \text{NONLCON})$$

A dan B = koefisien yang melekat pada bentuk pertidaksamaan

Aeq dan Beq = koefisien yang melekat pada bentuk persamaan

LB	= batas bawah nilai x
UB	= batas atas nilai x
FUN	= nama fungsi utama
NONLCON	= nama fungsi <i>nonlinier constraint</i>
X	= akar persamaan x
Fval	= hasil persamaan $y = f(x)$

Untuk mengetahui maksud dari sintak diatas, perhatikan penjelasan berikut.

min F(X) subject to: $A * X \leq B$, $Aeq * X = Beq$ (linear constraints) (a)

X $C(X) \leq 0$, $Ceq(X) = 0$ (nonlinear constraints) (b)

LB $\leq X \leq$ UB (bounds) (c)

a. Penyelesaian Model *Constraint* dengan Koefisien yang Dapat Ditentukan

Bentuk persamaan yang dapat kita temui sebagaimana telah dijelaskan sebelumnya yaitu ada model *constraint* yang koefisiennya dapat ditentukan. Contoh pers (1, 2, 5, 6) yang mana dalam MATLAB dikenali sebagai model persamaan (a) diatas. Ada juga bentuk yang koefisiennya tidak dapat ditentukan, MATLAB mengenali sebagai persamaan (b) diatas. Jadi yang harus kita lakukan pertama adalah mengetahui bentuk persamaannya terlebih dahulu, kemudian menentukan koefisiennya.

Contoh *constraint* dari persamaan sebelumnya:

$$x_1 + x_2 = 5 \text{ (1)}$$

$$2x_2 - x_1 \geq 1 \text{ (6)}$$

Model yang dikenali MATLAB:

$$A * X \leq B \text{ (a.1)}$$

$$Aeq * X = Beq \text{ (a.2)}$$

Kita lihat bahwa bentuk persamaan (1) sama dengan bentuk persamaan (a.2), sehingga dapat kita tentukan bahwa:

Aeq = koefisien yang melekat pada X, sehingga:

Aeq = 1 (melekat pada x_1) dan 1 (melekat pada x_2)

$$Aeq = [1 \ 1]$$

Sementara itu, Beq adalah ruas kanan yang menjadi hasilnya.

$$Beq = 5 \text{ (ruas kanan persamaan 1)}$$

Sementara itu, persamaan (6) sama dengan persamaan (a.1) yaitu:

$$2x_2 - x_1 \geq 1$$

$$A \cdot X \leq B$$

Sehingga koefisiennya berapa? Eitzzz....!! Perhatikan sekali lagi, bentuk yang dikenali MATLAB itu bentuk apa?? Yah bentuk dengan tanda " \leq " sementara persamaan yang kita peroleh adalah bentuk " \geq ". Sehingga persamaan kita harus kita ubah dahulu.

$$2x_2 - x_1 \geq 1 \text{ diubah menjadi } x_1 - 2x_2 \leq -1$$

dapat kita tentukan bahwa:

A = koefisien yang melekat pada X

A = 1 untuk x_1 dan -2 untuk x_2

$$A = [1 \ -2]$$

Sementara itu, nilai B = -1.

b. Contoh Soal Optimasi dengan Constraint dengan Koefisien Dapat Ditentukan

Tentukan nilai x yang memberikan hasil terkecil untuk persamaan berikut

$$y = f(x) = -x_1 x_2 x_3$$

dengan *constraint*:

$$30 \leq x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 41$$

Carilah nilai x_1 , x_2 , dan x_3 dengan trial awal $x_1 = x_2 = x_3 = 6$.

Penyelesaian:

Bentuk soal diatas kita lihat adalah model *constraint* pertidaksamaan (*inequality*) dengan koefisien yang dapat ditentukan. Ada berapa banyak *constraint* yang diketahui? Apakah satu atau dua? Eitzz...! Jangan terjebak, persamaannya memang cuma satu, tetapi didalamnya terdapat dua *constraint*, mari kita bedah.

$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 41 \text{(bentuk 1)}$$

$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 \geq 30 \text{(bentuk 2)}$$

Bentuk (2) harus kita ubah dahulu dalam versi yang dikenali MATLAB

$$-x_1 - 2x_2 - 2x_3 \leq -30 \text{(bentuk 2 baru)}$$

Karena ada 2 persamaan (bentuk 1) dan (bentuk 2 baru) yang keduanya sama-sama bentuk pertidaksamaan/ *inequality*, maka:

$$[X, FVAL, EXITFLAG] = \text{fmincon}(\text{FUN}, X0, A, B, Aeq, Beq, LB, UB, \text{NONLCON})$$

Koefisien untuk *equality* dapat kita coret/ kosongkan, karena tidak ada *constraint* bentuk tersebut. Batas atas dan bawah juga dikosongkan karena tidak ditentukan, NONLCON juga kita kosongkan karena bentuk *constraint*-nya bukan non-linier. Sehingga yang kita tentukan adalah nilai A dan B. Persamaan diatas kita tuliskan kembali:

$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 41 \dots\dots\dots(\text{bentuk 1})$$

$$-x_1 - 2x_2 - 2x_3 \leq -30 \dots\dots\dots(\text{bentuk 2 baru})$$

Maka kita urutkan dulu dari bentuk 1 dan bentuk 2 baru.

Untuk bentuk 1 = [1 2 2]

untuk bentuk 2 baru = [-1 -2 -2];

Sehingga: A = [1 2 2; -1 -2 -2]

Sementara itu nilai B = [41; -30]

Sampai sini sudah jelas bukan? Bila sudah kita tau isi sintak fmincon-nya, selanjutnya adalah langsung saja kita buat programnya di MATLAB.

Penyelesaian dengan MATLAB

```
function opt_cons1
clear all
clc
%by: Aji Ridho P.
%a. optimasi dg constraint koef dpt ditentukan

%trial awal x1,x2,x3
x10=6;
x20=x10;
x30=x10;

%bedah constraint
A=[1 2 2;-1 -2 -2];
B=[41; -30];

%yg tidak ada dikosongkan
Aeq=[];Beq=[];LB=[];UB=[];NONLCON=[];

%solver fmincon
[x,hasil_fx,exitflag]=fmincon(@optimasi,[x10 x20
x30],A,B,Aeq,Beq,LB,UB,NONLCON)

%fungsi
function fx=optimasi(x)
```



```
%definisi
x1=x (1) ; x2=x (2) ; x3=x (3) ;
fx=-x1*x2*x3;
end
end
```

Hasil RUN

Active inequalities (to within options.TolCon = 1e-06):

```
lower    upper    ineqlin    ineqnonlin
         1
x = 13.6664    6.8334    6.8334
hasil_fx = -638.1574 dan exitflag = 5
```

Bila kita lihat, exitflag adalah angka 5, artinya persamaan diatas belum konvergen. Mengapa? Karena ada 3 variabel yang ingin dicari, tetapi *constraint* hanya ada 2. Sehingga sangat dimungkinkan variasi jawaban bila trial awal berbeda. Oleh karena itu dibutuhkan satu *constraint* lagi. Mari kita kerjakan kembali soal diatas dengan *constraint* sebagai berikut.

$$30 \leq x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 41 \text{ dan}$$

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = 33$$

bila kita uraikan maka:

$$x_1 + 2x_2 + 2x_3 \leq 41 \text{ (bentuk 1)}$$

$$-x_1 - 2x_2 - 2x_3 \leq -30 \text{ (bentuk 2 baru)}$$

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = 33 \text{ (bentuk 3)}$$

Kita ketahui bahwa bentuk *constraint* diatas adalah penggabungan antara bentuk *equality* dan *inequality*. Sehingga koefisiennya dapat kita tentukan:

$$\text{Sehingga: } A = [1 \ 2 \ 2; -1 \ -2 \ -2]$$

$$\text{Sementara itu nilai } B = [41; -30]$$

$$\text{Nilai } A_{eq} = [1 \ 1 \ 2];$$

$$\text{Nilai } B_{eq} = [33];$$

Penyelesaian di MATLAB

Pada program MATLAB sebelumnya nilai A_{eq} dan B_{eq} masih kosong, sehingga perlu kita

ganti nilainya sesuai dengan analisis diatas. Sehingga diperoleh hasilnya menjadi:

Hasil RUN:

$x = 12.5000 \quad 8.0000 \quad 6.2500$

hasil_fx = -625

exitflag = 1

Sehingga, nilai $x_1 = 12,5$; $x_2 = 8$; dan $x_3 = 6,25$ dengan nilai $fx_{\min} = -625$

c. Penyelesaian Model *Constraint* dengan Koefisien yang Tidak Dapat Ditentukan

Kasus berikutnya adalah dengan model koefisien yang tidak dapat ditentukan. MATLAB mengenalinya sebagai:

$C(X) \leq 0$, $Ceq(X) = 0$ (nonlinear constraints) (b)

Seperti telah dibahas sebelumnya, kedua model koefisien yang tidak dapat ditentukan dapat berupa model *equality* atau *inequality*.

$x_2 x_1 + 3x_2 = 8$ (3)

$3x_2 - x_1/x_2 \geq 3$ (8)

Penyelesaian model seperti *constraint* diatas, menggunakan fungsi NONLCON pada toolbox fmincon. Langsung saja kita ke Latihan soal.

d. Contoh Soal Optimasi dengan Model Non-Linier Constraint

Hitunglah nilai x_1 dan x_2 yang memberikan nilai y minimum.

$y = \exp(x_1) (4x_1^2 + 2x_2^2 + 4x_1x_2 + 2x_2 + 1)$

dengan *constraint*:

$1,5 + x_1x_2 - x_1 - x_2 \leq 0$

$-x_1x_2 \leq 10$

Trial awal $x_1 = -1$ dan $x_2 = 1$

Penyelesaian dengan MATLAB

$[X, FVAL, EXITFLAG] = \text{fmincon}(\text{FUN}, X0, A, B, Aeq, Beq, LB, UB, \text{NONLCON})$

Karena koefisien variabel pada *constraint* tidak dapat kita tentukan, maka kita menggunakan hanya fitur NONLCON.

Program MATLAB:

`function opt_cons3`

```

clear all
clc
%by: Aji Ridho P.
%trial x1 dan x2
x10=-1;
x20=1;
%kosongkan yg lain
A=[];B=[];Aeq=[];Beq=[];LB=[];UB=[];

%solver
[x,hasil_y,exitflag]=fmincon(@optimasi,[x10
x20],A,B,Aeq,Beq,LB,UB,@nonlcon)

%fungsi y
function y=optimasi(x)
x1=x(1);x2=x(2);
y=exp(x1)*(4*x1^2+2*x2^2+4*x1*x2+2*x2+1);
end

%fungsi nonlcon
function [c_ineq, c_eq]=nonlcon(x)
x1=x(1);x2=x(2);
c_ineq=[x1*x2-x1-x2+1.5;-x1*x2-10];
c_eq=[];
end
end

```

Hasil RUN:

x = -9.5474 1.0474

hasil_y = 0.0236

exitflag = 1

4. Tugas Optimasi dengan Linier Constraint

Soal 1. Hitunglah nilai x_1 dan x_2 yang memberikan nilai f_x minimum.

$$f_x = x_1^2 - x_1x_2/3 + x_2^2$$

dengan *constraint*:

$$x_1 + x_2 \leq 2$$

$$x_1 + x_2/4 - 1 \leq 0$$

$$-x_1 + x_2 \geq -1$$

$$x_1 + x_2 = 2$$

Trial awal x_1 dan x_2 adalah 0,25

Soal 2. Hitunglah nilai x_1 dan x_2 yang memberikan nilai f_x minimum.

$$f_x = 0,5 x_1^2 + x_2^2 - x_1 x_2 - 2x_1 - 6x_2$$

dengan *constraint*:

$$x_1 + x_2 \leq 2$$

$$-x_1 + 2x_2 - 2 \leq 0$$

$$2x_1 + x_2 \leq 3$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

Trial awal x_1 dan x_2 adalah 0,25

5. Tugas Optimasi dengan Non-Linier Constraint

Soal 3. Hitunglah nilai x_1 dan x_2 yang memberikan nilai f_x minimum.

$$f_x = 4x_1 + x_2 x_3 + x_1^2 x_3^2 - 17x_1 \cdot \exp(x_2)$$

dengan *constraint*:

$$10x_1 - x_2 + x_3^2 \geq 15$$

$$\exp(x_1) + \log(x_2) + x_3 \leq 10$$

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 14$$

$$x_1 + x_2 = x_3$$

$$x_1 \geq 0$$

$$x_2 \geq 0$$

$$x_3 \geq 0$$

dengan trial awal, $x_1 = x_2 = x_3 = 0,75$

BAB VI

KASUS PD PARSIAL DI TEKNIK KIMIA

1. Bentuk Umum PD Parsial

Penyelesaian kasus-kasus dalam teknik kimia sebagian besar menghasilkan persamaan diferensial parsial sebagai persamaan penyelesaiannya, misalnya transfer panas, transfer massa dan transfer momentum yang melibatkan lebih dari satu variabel akan menghasilkan persamaan diferensial parsial. Persamaan diferensial parsial dapat diselesaikan secara numeris dengan metode pendekatan beda hingga (finite difference approximation). Dengan metode ini akan dikenal berbagai cara penyelesaian yaitu cara implisit, eksplisit, crank nicholson yang semuanya berbasis pada pendekatan beda hingga.

Seperti apakah contoh dari persamaan diferensial partsial itu sendiri? PD parsial berarti bahwa kita memerlukan penurunan dua kali atau turunan perkalian. Misal:

$$y = u.v$$

$$y' = u.dv + v.du$$

Contoh bentuk lain:

$$y = a. (dT/dx)$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{d\left(\frac{a.dT}{dx}\right)}{dx}$$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{a.d.dT}{dx.dx} + \frac{dT}{dx} \cdot \frac{da}{dx} = \frac{ad^2T}{dx^2} + \frac{da}{dx} \cdot \frac{dT}{dx}$$

Bila nilai a tidak berubah terhadap x maka: $da/dx = 0$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{ad^2T}{dx^2}$$

$$\frac{d^2T}{dx^2} - \frac{dy}{dx} = 0$$

2. Metode Penyelesaian dengan Finite Differential Approximation Matriks

Untuk menyelesaikan persamaan tersebut kita menggunakan beberapa pendekatan.

1. Metode *forward*

Metode *forward* berarti bila diketahui BC (*Boundary condition*) di keadaan awal sehingga kita dapat memperkirakan nilainya untuk keadaan berikutnya. Misal, suhu awal saat berjarak $x=0$ adalah $T = 400^\circ\text{C}$. Maka kita dapat memperkirakan distribusi suhu saat $x = 1, 2, 3, \dots$, dst dengan selisih sebesar Δx . Untuk perhitungannya dapat dijabarkan sebagai berikut.

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (\text{orde pertama})$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{-f(x+2\Delta x) + 4f(x+\Delta x) - 3f(x)}{2\Delta x} \quad (\text{orde kedua})$$

2. Metode *backward*

Metode *backward* dapat digunakan bila diketahui data pada kondisi terakhir misal kondisi saat $x = (N+1)$ distribusi suhunya sebesar T_s . Berarti kita dapat memperkirakan berapa distribusi suhu saat $x = (N), (N-1), (N-2)$, dst.

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x} \quad (\text{orde pertama})$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{3f(x) - 4f(x-\Delta x) + f(x-2\Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{orde kedua})$$

3. Metode *centered*

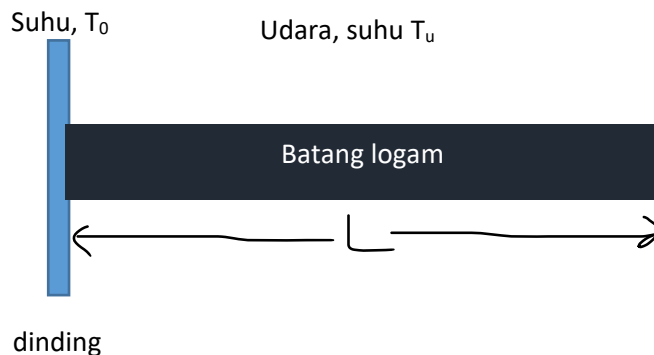
Metode *centered* digunakan untuk pendekatan nilai berdasarkan beda dari titik pusat. Metode ini dapat digunakan untuk memperkirakan nilai sebelumnya ($x = (N-1), (N-2), \dots$, dst) dan nilai setelahnya ($x = (N+1), (N+2)$, dst). Metode *centered* sangat cocok bila bentuk persamaannya terdapat dua kali turunan (d^2x / dy^2).

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{orde pertama})$$

$$\frac{d^2f}{dx^2} = \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} \quad (\text{orde kedua})$$

Ketiga model diatas akan kita temukan dalam proses penyelesaian menggunakan konsep MATRIKS. Mode *backward* umumnya digunakan pada kondisi suatu variabel yang diketahui keadaannya pada titik akhir. Sehingga perhitungannya mundur, biasanya digunakan pada kondisi kondisi batas akhir. Sementara itu, metode *forward* umumnya digunakan pada kondisi batas awal. Karena yang diketahui hanya kondisi awal, sehingga kondisi setelahnya dapat terhitung dengan metode *forward*.

3. Aplikasi PD Parsial pada Distribusi Suhu Pada Logam

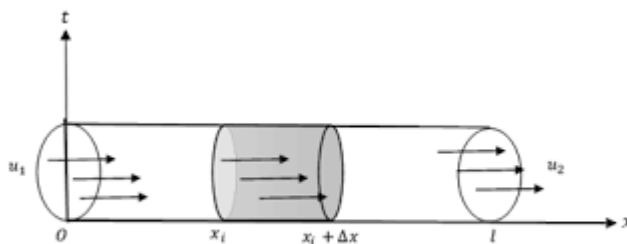


Batang silinder terbuat dari logam dengan konduktivitas panas k . Batang logam dengan diameter D dan panjang L . Batang logam menempel pada dinding yang bersuhu T_0 dengan suhu udara luar T_u , ($T_0 > T_u$). Carilah distribusi suhu pada batang logam tersebut.

a. Penyelesaian dengan FDA Matriks

Untuk menyelesaikan kasus ini kita harus menjabarkan pemodelan matematisnya sehingga diperoleh persamaan aljabar atau persamaan PD parsial sehingga dapat diselesaikan dengan MATLAB.

Lalu seperti apa pemodelannya?



Gambar 1 Perambatan Panas pada Batang Logam

Panas terjadi secara konduksi ke arah aksial dan konveksi ke arah radial. Dalam kasus ini kita ambil elemen volume pada tebal logam sebesar Δx .

Neraca panas di logam di elemen volume

Asumsi: *Steady state*

(Panas masuk) – (panas keluar) + (panas terbentuk) = (panas terakumulasi)

$$q_{kon}|_x - (q_{kon}|_{x+\Delta x} + q_{conv}|_{x+\Delta x-x} = dq$$

$$-\frac{k\pi}{4}D^2 \cdot \frac{dT}{dx}\Big|_x - \left(-\frac{k\pi}{4}D^2 \cdot \frac{dT}{dx}\Big|_{x+\Delta x} - h\pi D\Delta x(T_u - \bar{T}) \right) = 0$$

Kemudian disederhanakan (penyederhanaan dijelaskan oleh asisten), sehingga menjadi bentuk persamaan berikut.

$$k \cdot \frac{d^2 T}{dx^2} = \frac{4h}{D} (T - T_u)$$

Untuk kasus batang logam, diketahui saat $x = 0$ (menempel dinding logam) suhu logam sebesar T_0 . Kemudian karena terjadi distribusi suhu secara konduksi dan konveksi maka suhu saat diujung logam ($x=L$) bernilai tertentu. Dalam hal ini perubahan suhu sudah sangat kecil, sehingga pada ujung logam nilai $dT/dx = 0$.

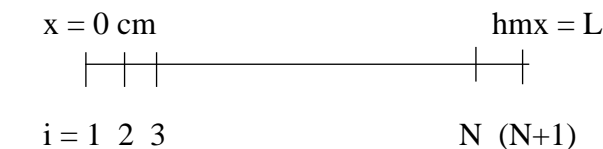
Sehingga kita mendapatkan *Boundary condition (BC)* sebagai berikut.

$$x = 0 \rightarrow T = T_0$$

$$x = L \rightarrow T = \text{tertentu} \rightarrow dT/dx = 0$$

Bentuk dari $\frac{d^2 T}{dx^2}$ dapat diselesaikan dengan metode *centered orde kedua* dengan pendekatan sebagai berikut.

Dengan i = banyaknya data, maka dapat kita ilustrasikan bahwa.



$$\frac{d^2 T}{dx^2} = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{d^2 T}{dx^2} = \frac{4h}{kD} (T - T_u)$$

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} = \frac{4h}{kD} (T - T_u)$$

Disederhanakan sehingga menjadi:

$$T_{i-1} - \left(2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right) T_i + T_{i+1} = \frac{-4h\Delta x^2}{kD} T_u$$

Karena saat $i=1$, maka $x = x_0$ dan diketahui datanya.

Kemudian yang belum diketahui $2 \leq i \leq N$

Kemudian kita masukkan nilai $i=2$, sehingga:

$$-\left(2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right) T_2 + T_3 = \frac{-4h\Delta x^2}{kD} T_u - Ts \dots (i)$$

Kemudian kita masukkan nilai $i=N$, sehingga:

$$T_{N-1} - \left(2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right) T_N + T_{N+1} = \frac{-4h\Delta x^2}{kD} T_u \dots (ii)$$

Saat $i = \text{data terakhir} = (N+1)$, diketahui nilainya $dT/dx = 0$.

Kemudian kita selesaikan dT/dx dengan metode *backward* karena ingin memanggil data sebelum $x = (N+1)$

$$\left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=N+1} = \frac{3T_{N+1} - 4T_N + T_{N-1}}{2\Delta x} = 0$$

$$T_{N+1} = \frac{4T_N - T_{N-1}}{3} \dots (\text{iii})$$

Kemudian persamaan (iii) disubstitusi ke persamaan (ii) sehingga didapat.

$$\frac{2}{3}T_{N+1} - \left(-\frac{4}{3} + 2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right)T_N = \frac{-4h\Delta x^2}{kD}T_u \dots (\text{iv})$$

Kemudian persamaan (i) sampai (iv) dituangkan dalam bentuk matriks.

$$[A] [T] = [B]$$

$$[T] = \text{inv}[A] \cdot [B]$$

$$[A] = \begin{bmatrix} -\left(2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right) & 1 & 0 \\ 1 & -\left(2 + \frac{4h\Delta x^2}{kD}\right) & 1 \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

$$[T] = \begin{bmatrix} T_2 \\ T_3 \\ T_N \end{bmatrix}$$

$$[B] = \begin{bmatrix} \frac{-4h\Delta x^2}{kD}T_u - T_s \\ \frac{-4h\Delta x^2}{kD}T_u \\ \frac{-4h\Delta x^2}{kD}T_u \end{bmatrix}$$

Untuk menyelesaikan ini kita gunakan program MATLAB, dengan data yang diketahui adalah sebagai berikut.

$$k = 0,1 \text{ cal/s/cm}^\circ\text{C}$$

$$h = 0,007 \text{ cal/s/cm}^2/\circ\text{C}$$

$$d = 5 \text{ cm}$$

$$L = 30 \text{ cm}$$

$$T_s = 400^\circ\text{C} \text{ (suhu dinding)}$$

$$T_u = 30^\circ\text{C} \text{ (suhu udara)}$$

Program MATLAB (lengkapi yang tidak ditampilkan)

```

% Kasus distribusi suhu pada Logam
% Persamaan PD Parsial
% By: Aji Ridho Pangestu
%  $d^2T/dx^2 = 4h(T-T_u)/k/D$ 
% BC: 1.  $x=0$ ;  $T=T_0$ 
%      2.  $x=L$ ;  $T$  tertentu,  $dT/dx = 0$ 
clear all;
clc;
k=0.1; % heat trans conductiviti (cal/s/cm/c)
h=0.007; % rod-air heat trans coef (cal/s/cm^2/C)
d=5; % rod diameter (cm)
L=30; % rod length (cm)
Ts=400; % wall temp (C)
Tu=30; % air temp (C)
N=100; % jumlah inkremen
dx=L/N; % jumlah data/ kenaikan nilai x
alpha=4*h/k/d;
A=zeros(N-1,N-1); % matrix A
B=zeros(N-1,1); % matrix B
% saat i = 2
A(1,1)=-(2+alpha*dx^2);
A(1,2)=1;
B(1)=-alpha*dx^2*Tu-Ts;
% dari i = 1 sampai i = N-1
for j=2:N-2
    A(j,j-1)=1;
    A(j,j)=-(2+alpha*dx^2);
    A(j,j+1)=1;
    B(j)=-alpha*dx^2*Tu;
end
% saat i = N
A(N-1,N-2)=2/3;
A(N-1,N-1)=(-4/3+2+alpha*dx^2);
B(N-1)=-alpha*dx^2*Tu;
x=inv(A)*B;
T(1)=Ts;
for j=1:N-1
    T(j+1)=x(j);
end
T(N+1)=(4*T(N)-T(N-1))/3;

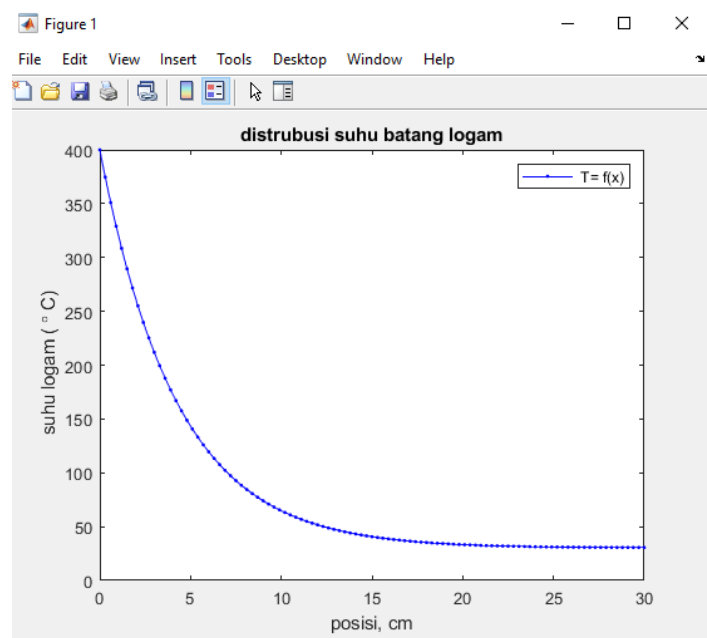
```

Hasil

DISTRIBUSI SUHU PADA LOGAM

x (cm)	T (drg C)
0	400.0000
0.3000	374.6485
0.6000	351.0340
0.9000	329.0376
1.2000	308.5483
1.5000	289.4628
1.8000	271.6851
28.5000	30.6508
28.8000	30.6367
29.1000	30.6258
29.4000	30.6180
29.7000	30.6134
30.0000	30.6119

Dalam bentuk grafik



b. Penyelesaian dengan Toolbox Fsolve-Ode

Penyelesaian berdasarkan ode dan fzero diharuskan untuk merubah bentuk persamaan PD parsial/ orde dua kedalam bentuk PD Ordiner. Langkah penyesuaian persamaannya adalah sebagai berikut.

$$\frac{d^2T}{dx^2} = \frac{4h}{kD}(T - T_u)$$

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{dT}{dx}\right) = \frac{4h}{kD}(T - T_u)$$

$$\frac{dT}{dx} = u \dots (a)$$

$$\frac{du}{dx} = \frac{4h}{kD}(T - T_u) \dots (b)$$

Kedua persamaan diatas akan diselesaikan dengan PD Ordiner, dengan kondisi batas:

@x=0; T=T_{wall}.....(c)

@x=L; dT/dx = 0

Kemudian dijabarkan seperti persamaan sebelumnya menjadi:

$$T_{N+1} = \frac{4T_N - T_{N-1}}{3} \dots (d)$$

Persamaan (a) dan (b) diselesaikan dengan PD Ordiner, dengan BC diselesaikan hingga terpenuhi ruas kiri-ruas kanan = 0 menggunakan fzero/fsolve.

Penyelesaian dengan Fzero-Ode (Silahkan Lengkapi dan Benarkan Programnya – Kuis)

```
function pd_parsial
%b. penyelesaian dg fzero-ode
% by : Aji Ridho Pangestu
clearall;
clc;
k=; % heat trans conductiviti (cal/s/cm/c)
h=; % rod-air heat trans coef (cal/s/cm^2/C)
d=; % rod diamater (cm)
L=; % rod legth (cm)
Twall=; % wall temp (C)
Tu=; % air temp (C)
N=; % jumlah inkremen
xspan=linspace(,);
dx=xspan()-xspan;
%solver fzero
%untuk BC (2), dT/dx= 0 ... (1)
u_trial=0;
[T,fval]=fminbnd(@cari_suhu,T_trial);
function fx=cari_suhu(t)
y0=[u T];%nilai awal
[x,var_pdo]=ode15s(@pdo,tspan,y0);
u_akhir=var_pdo(:,);
fx=u_akhir;
```

```

function dydx=pdo(t,var)
    T=var(2);u=var(1);
    dTdx=T;
    dydx=4*h/k/d*(T-Tu);
    dydx=[dydx;dudx];
    if
plot...
end

```

Hasil RUN sama seperti grafik dengan penyelesaian FDA Matriks dan BVP4c

c. Penyelesaian dengan Toolbox BVP4C (lengkapi datanya sendiri)

```

function pd_parsial_bvp4c
%distribusi suhu batang logam
%cara bvp4c
%by: Aji Ridho Pangestu
clear all
clc
%data
k=; % heat trans conductiviti (cal/s/cm/c)
h=; % rod-air heat trans coef (cal/s/cm^2/C)
d=; % rod diameter (cm)
L=; % rod length (cm)
Ts=; % wall temp (C)
Tu=; % air temp (C)

%steady state
%d^2T/dx^2= 2h/(kr) (T-Tu)

%solver bvp4c
yinit=[Ts 0];%[T dT/dx]
xinit=linspace(0,L,250);
solinit=bvpinit(xinit,yinit);
Tout=bvp4c(@fungsi_pdo,@fungsi_bc,solinit);
%ekstrak hasil T
T_ekstrak=deval(Tout,xinit);
T_hasil=T_ekstrak(1,:);

function fx=fungsi_pdo(x,var)
T=var(1);
u=var(2);
dTdx=u;
dudx=4*h/k/d*(T-Tu);
fx=[dTdx;dudx];
end
function bc=fungsi_bc(bckiri,bckanan)
Tkiri=bckiri(1);
ukiri=bckiri(2);

```

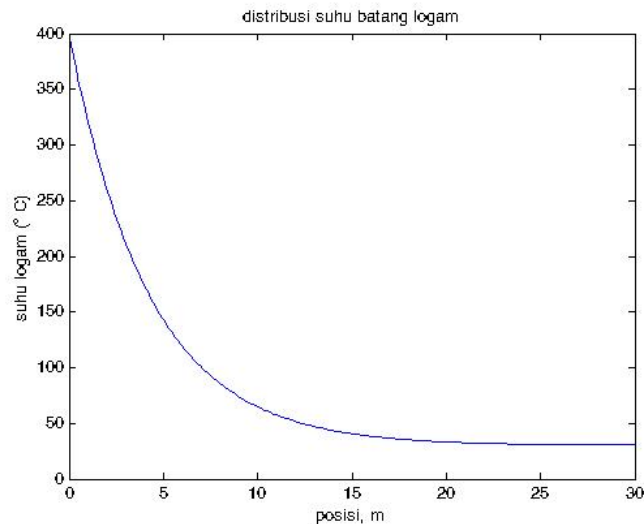
```

Tkanan=bckanan(1);
ukanan=bckanan(2);
bc=[Tkiri-Ts;ukanan];

end
plot(xinit,T_hasil);
xlabel('posisi, m');
ylabel('suhu logam (\circ C)');
title('distribusi suhu batang logam');
end

```

Hasil RUN



4. Temperature Distribution Through A Fuel Cell End-plate (Task)

Plot the one-dimensional heat transfer through a fuel cell end plate with a thickness of 0.01 m and an initial temperature of 343.15 K. The plate is insulated on its left side, and is exposed to air at 298 K on the right side only. Heat of convection was occurred only on the exposed surface only. The convection on top, bottom, back, and front side were ignored. The heat of conduction pass through left to the right side across a dimentional area of $A \text{ m}^2$. The plate has the material properties of polymer end plate with a conductivity of 0.2 W/m-K, a density of 1740 kg/m^3 , and specific heat of 1464 J/kg.K . Air has a heat transfer coefficient of $17 \text{ W/m}^2\text{-K}$. Plot the temperature distribution through x direction with an increment number of 100 and steady state condition. Please describe the heat balance of the system and than prove that the distribution of temperature on x-direction was:

$$\frac{d^2T}{dx^2} = \frac{\rho C_p}{k} \frac{dT}{dt}$$

Please justify the boundary condition of the above case, please write down your assumed and also the reasons. Please write your MATLAB program using both of the BVP4c and ODE-Fsolve optimization toolbox.

BAB VII

STUDI KASUS LANJUT DALAM TEKNIK KIMIA

1. Menghitung Waktu Alir Fluida dalam Tangki (fzero-integral)

Dalam perhitungan waktu alir fluida dalam tangki, konsep yang kita gunakan adalah menggunakan neraca massa pada tangki. Dimisalkan kita memiliki tangki 1 dan tangki 2. Fluida pada tangki 1 akan dialirkan ke tangki 2 dengan bantuan pompa sentrifugal. Karena itu, tinggi cairan di tangki 2 berubah dari z_{2i} menjadi z_{2f} . sementara itu, ketinggian cairan di tangki 1 turun dari z_{10} ke z_1 . Dalam kasus ini, dapat kita cari waktu pengaliran dari z_{2i} menjadi z_{2f} dan nilai perubahan tinggi cairan di masing-masing tangki. Perhitungan didasarkan pada neraca massa tangki yaitu sebagai berikut.

Neraca massa ditangki 2:

massa masuk – massa keluar = massa akumulasi

$$Q_{in} \times \rho_f = \frac{dm}{dt}$$

$$\pi r_p^2 v \times \rho_f = \rho_f \frac{d(\pi r_{t2}^2 z_2)}{dt}$$

$$dt = \left(\frac{r_{t2}}{r_p} \right)^2 \frac{1}{v} dz_2$$

Kemudian di-integralkan sehingga diperoleh waktu pengisian tangki 2:

$$t = \left(\frac{r_{t2}}{r_p} \right)^2 \int_{z_{2i}}^{z_{2f}} \frac{1}{v} dz_2 \dots \dots \dots (1)$$

Kecepatan alir fluida (v) dicari menggunakan rumus Bernoulli, sebagaimana telah dijelaskan pada Bab sebelumnya, yaitu:

$$z_2 - z_1 + \frac{f \cdot L v^2}{2 \cdot g \cdot D} - H_m = 0 \dots \dots \dots (2)$$

Dengan asumsi, fluidanya sama dan tekanan tangki 1 dan tangki 2 juga sama. Persamaan (1) diselesaikan dengan cara integrasi dan persamaan (2) diselesaikan dengan konsep zero function dengan fzero.

Ketika tangki 2 terisi, maka tangki 1 mengalami pengurangan volume. Jumlah volume tangki 1 yang berkurang sama dengan volume tangki 2 yang bertambah. Pertambahan volume tangki 2 adalah:

$$\Delta V_2 = (z_{2f} - z_{2i})\pi r_{t2}^2$$

Volume akhir tangki 1 adalah

$$V_{t1} = V_{t1awal} - \Delta V = \pi r_{t1}^2 z_{10} - \Delta V_2 \dots \dots \dots (3)$$

Ketinggian cairan di tangki 1 dapat dihitung dengan nilai ΔV pada tangki 1.

$$\Delta V_2 = \Delta V_1 = \pi r_{t1}^2 (z_{10} - z_{1f}) = (z_{2f} - z_{2i})\pi r_{t2}^2$$

$$z_{1f} = z_{10} - \left(\frac{r_{t2}}{r_{t1}}\right)^2 (z_{2f} - z_{2i}) \dots \dots \dots (4)$$

Latihan

Diketahui mula-mula tinggi cairan di tangki 1 dan tangki 2 adalah 5 m dan 6 m. Kemudian, tangki 2 diisi dengan cairan dari tangki 1 dengan bantuan pompa hingga tinggi cairan di tangki 2 menjadi 10 m. Jarak antara kedua tangki adalah 200 m dengan diameter tangki 1 dan tangki 2 adalah 3,5 m dan 3 m. Diketahui densitas cairan adalah 1 gr/mL, viskositas 0,01 gr/cm-s, dan diameter pipa adalah 4 cm. Tentukanlah kecepatan aliran fluida, waktu pengisian tangki 2, volume akhir tangki 1, dan ketinggian cairan pada tangki 1.

Penyelesaian (Lengkapi data yang ada)

```
function case1_aliranfluida
clear all;
clc
%Menghitung Waktu Alir Fluida dalam Tangki
%by: Aji Ridho Pangestu
%data
z10=;%tinggi cairan awal tangki 1, cm
z20=600;%tinggi cairan awal tangki 2, cm
z2f=;%tinggi cairan akhir tangki 2, cm
Le=;%panjang pipa, cm
```



```

dt1=3.5e2;%diameter tangki 1, cm
rt1=%jari-jari,cm
dt2=3e2;%diameter tangki 2, cm
rt2=dt2/2;%jari-jari, cm
rho=1;%densitas cairan, gr/cm^3
miu=%viskositas cairan, gr/cm/s
dp=4;%diameter pipa, cm
g=%gravitasi bumi, cm/s^2
n=500;%jumlah titik utk perhitungan

%1. menentukan kecepatan alir (v)
%perubahan z2 dan z1 setiap saat
z2=linspace(z20,z2f,n);
z1=z10-(rt2/rt1).^2.*(z2-z20);
%trial v untuk setiap z2&z1
v0=200.*ones(1,n);%cm/s
%solver fzero dengan looping (lengkapi solvernya)

[v,hasil_fungsi,exitflag]=fzero(@tank,v0(i),z2(i),z1(i));

function fx=tank(v,z2,z1)
    Re=rho*v*dp/miu;
    f=0.0596/Re^0.215;
    A=....;
    Q=A*v;
    Hm=....;
    fx=.....;
end

%2. menghitung waktu pengisian tangki
%integrasi
hasil_integral=integral(@integrasi,z20,z2f);
    function fx=integrasi(z2)
        fx=1./v(end).*z2.^0;
    end
t=(dt2./dp).^2./60.*hasil_integral;

%menampilkan hasil (lengkapi sendiri), pembahasan dijelaskan
dosen
end

```

Hasil RUN diperoleh sebagai berikut

z1 (m)	z2 (m)	v (m/s)
5.00	6.00	2.72
4.99	6.01	2.72
4.99	6.02	2.72
4.98	6.02	2.72
4.98	6.03	2.72
4.97	6.04	2.71
4.96	6.05	2.71
4.96	6.06	2.71
4.95	6.06	2.71
4.95	6.07	2.71
4.94	6.08	2.71

(dan seterusnya)

2.14	9.90	1.92
2.13	9.90	1.92
2.13	9.91	1.91
2.12	9.92	1.91
2.11	9.93	1.91
2.11	9.94	1.91
2.10	9.94	1.91
2.10	9.95	1.90
2.09	9.96	1.90
2.08	9.97	1.90
2.08	9.98	1.90
2.07	9.98	1.90
2.07	9.99	1.89
2.06	10.00	1.89
waktu pengaliran= 198.08 menit		

2. Menghitung Ketinggian Cairan dalam Tangki Sebagai Fungsi Waktu (fzero-ode)

Perhitungan ketinggian cairan dalam tangki, menggunakan basis neraca massa sebagaimana telah dijelaskan pada poin 1 diatas. Dimisalkan kita akan mengisi suatu tangki 2 dengan cairan pada tangki lain. Karena semakin lama akan semakin banyak cairan yang masuk, sehingga tinggi permukaan cairan di tangki 2 akan bertambah. Perubahan ketinggian cairan sebagai fungsi 1, dijabarkan pada point 1 dan merupakan fungsi diferensial dengan persamaan sebagai berikut.

$$dt = \left(\frac{r_{t2}}{r_p} \right)^2 \frac{1}{v} dz_2$$

$$\frac{dz_2}{dt} = \left(\frac{r_p}{r_{t2}} \right)^2 v \dots \dots \dots (5)$$

Kecepatan aliran fluida dalam pipa (v) dihitung dengan rumus Bernouli dengan persamaan (4).

Latihan

Dengan kondisi sama pada Latihan poin (1) diatas, hitunglah perubahan ketinggian cairan pada tangki 2 (z₂) dengan waktu pengaliran selama 10 menit. Pada realitanya, kecepatan aliran fluida yang melewati pipa terus berubah, bilamana ketinggian cairan di tangki 1 dan tangki 2 berubah. Hal ini dikarenakan adanya tekanan hidrostatik dari cairan. Oleh karena itu, trial v dilakukan disetiap perubahan z₂.

Penyelesaian

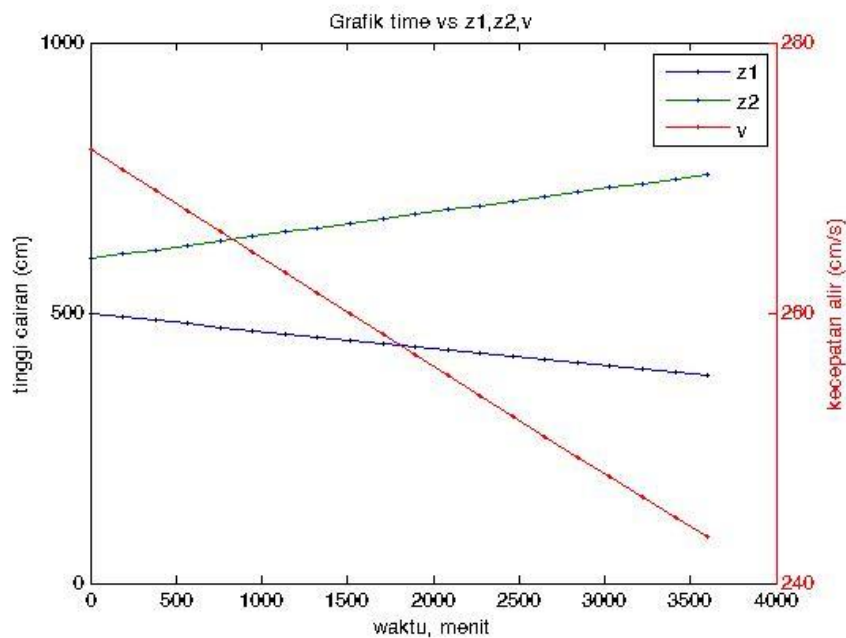
```
function case2_tinggicairan2
clear all;close all;
clc
%Menghitung tinggi cairan dalam tangki vs time
%by: Aji Ridho Pangestu
%data → silahkan dilengkapi dari soal sebelumnya
.....(isi data)
.....(isi data)
1. menghitung v disetiap z2
%trial v
v0=200.*ones(1,n);%cm/s
%solver
[v,fval,exitflag]=fsolve(@tank,v0);
%fungsi menghitung kecepatan alir, v_akhir
function fx=tank(v)
    for i=1:n
        Re(i)=rho*v(i)*dp/miu;
        f(i)=0.0596/Re(i)^0.215;
        A=1/4*dp^2*pi;
        Q(i)=A.*v(i);
        Hm(i)=3718.5-2.3496.*Q(i)+7.8474e-
4.*Q(i).^2-9.5812e-8.*Q(i).^3;
        %z2 dihitung dg ode
```

```

[t,z2]=ode45(@pdo,tspan,z20,[],v(i));
z1(i)=z10-(rt2/rt1).^2.*(z2(i)-z20);
fx(i)=z2(i)-z1(i)+f(i)*Le*v(i)^2/2/g/dp-
Hm(i);
end
end
%fungsi pd ordiner
function dz2dt=pdo(t,z2,v)
dz2dt=(dp/dt2).^2.*v;
end
%plot grafik silahkan lengkapi sendiri
.....(isi plot)
.....(isi plot)
End

```

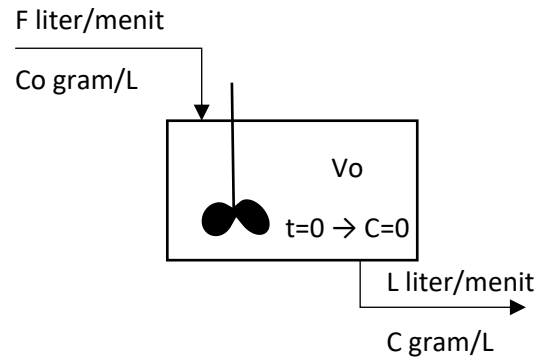
Hasil RUN



3. Kasus Pencampuran dalam Tangki Garam (fzero-integral, tugas)

Tangki berpengaduk berisi V_0 liter air murni. Mulai suatu saat ($t=0$) dialirkan ke dalam tangki F liter/menit larutan garam dalam air dengan konsentrasi tetap sebesar C_0 gram garam/liter. Dari dalam tangki dikeluarkan L liter/menit larutan garam. Tentukan konsentrasi larutan garam keluar dari tangki. (Larutan di dalam tangki diaduk sempurna)

Penyelesaian:



Neraca massa total (neraca massa larutan garam dalam tangki berpengaduk)

$$\rho_f \cdot F \cdot \Delta t - \rho_L \cdot L \cdot \Delta t = \rho_L \cdot \Delta V \quad [\text{gram}] \quad \dots(6)$$

atau

$$\rho_f \cdot F - \rho_L \cdot L = \rho_L \cdot \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad [\text{gram/menit}] \quad \dots(7)$$

ASUMSI

Karena konsentrasi garam relatif rendah, maka dianggap densitas larutan garam sama dengan densitas air.

Pengadukan sempurna, konsentrasi garam dalam larutan dalam tangki homogen, konsentrasi garam dalam larutan yang keluar sama dengan yang di dalam tangki.

Maka, persamaan (7) menjadi:

$$F - L = \frac{\Delta V}{\Delta t}$$

$$\lim \Delta t \rightarrow 0$$

$$F - L = \frac{dV}{dt} \quad \dots(8)$$

$$\text{Kondisi batas: } t = 0 \rightarrow V = V_o \quad \dots(9)$$

$$t = t \rightarrow V = V \quad \dots(10)$$

$$(F - L) \int_0^t dt = \int_{V_o}^V dV$$

$$(F - L) \cdot t = (V - V_o)$$

$$V = V_o + (F - L) \cdot t \quad \dots(11)$$

Neraca massa komponen (neraca massa garam dalam tangki berpengaduk)

$$F \cdot C_o - L \cdot C = \frac{\Delta(V \cdot C)}{\Delta t} \quad [\text{gram garam/menit}] \quad \dots(12)$$

$\lim \Delta t \rightarrow 0$

$$F \cdot C_o - L \cdot C = \frac{d(V \cdot C)}{dt}$$

$$F \cdot C_o - L \cdot C = V \frac{dC}{dt} + C \frac{dV}{dt} \quad \dots(13)$$

$$\text{Kondisi batas: } t = 0 \rightarrow V = V_o \quad \dots(14)$$

$$t = t \rightarrow V = V \quad \dots(15)$$

Sehingga diperoleh,

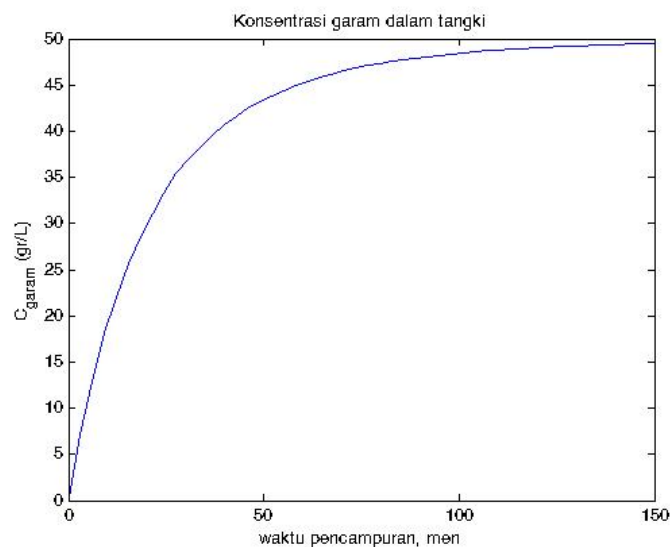
$$F \cdot C_o - L \cdot C = (V_o + (F - L) \cdot t) \frac{dC}{dt} + C \cdot (F - L) \quad \dots(16)$$

$$(V_o + (F - L) \cdot t) \frac{dC}{dt} = F \cdot C_o - L \cdot C - F \cdot C + L \cdot C$$

$$(V_o + (F - L) \cdot t) \frac{dC}{dt} = F \cdot (C_o - C) \dots\dots (16. a) \quad \text{dengan, } a = F - L$$

$$\int_0^C \frac{dC}{(C_o - C)} = F \int_0^t \frac{dt}{(V_o + (F - L) \cdot t)} \dots\dots\dots (17)$$

Persamaan (17) diselesaikan dengan konsep zero function yaitu ruas kanan sama dengan ruas kiri. Kemudian masing-masing ruas dihitung dengan konsep integrasi. C adalah yang akan dicari, sehingga C menjadi trial untuk zero function kali ini. Silahkan selesaikan persamaan diatas sehingga diperoleh hasil sebagai berikut. Tips: gunakan jumlah data $n = 50$, trial untuk data 1 s.d 25 adalah linspace 0 s.d 40 dengan n data, dan sisa trialnya gunakan $C_{\text{trial}} = 45$. Hasil perhitungan seperti grafik berikut ini.



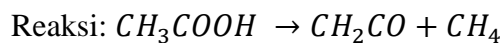
Bandingkan dengan metode penyelesaian analitis, yaitu penyederhanaan persamaan (17) menjadi bentuk sebagai berikut.

$$C = C_0 \left[1 - \frac{1}{\exp \left(F \int_0^t \frac{dt}{(V_0 + (F - L) \cdot t)} \right)} \right] \dots \dots \dots (18)$$

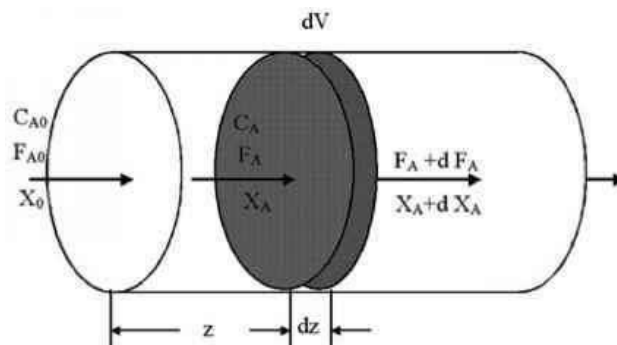
Buktikan bahwa penyederhanaan persamaan (17) memberikan hasil seperti diatas (persamaan 18). Kemudian buatlah program MATLAB-nya, buatlah plot grafik dan bandingkan hasilnya dengan metode zero function – integrasi. Apakah hasilnya berbeda? Jelaskan penjabaran Anda. Diketahui data: aliran umpan masuk 2,5 L/menit, arus keluar 2 L/menit, mula-mula tangki berisi air 50 L, waktu pencampuran selama 150 menit dengan larutan garam yang masuk dengan konsentrasi 50 gr/L. Buktikan juga bila penyelesaian dilakukan pada persamaan (16.a) menggunakan metode diferensial. Apakah plot grafik yang dihasilkan sama? Jelaskan pengaruhnya.

4. Produksi Asetat Anhidrid dengan PFR (ode)

Produksi asetat anhidrid berlangsung pada plug flow reactor dengan reaksi sebagai berikut.



Simulasi reaksi yang terjadi terlihat pada gambar berikut.



Reaksi ini berlangsung pada orde satu dengan laju reaksi:

$$k = 8,2 \times 10^{14} \exp \left(-\frac{34222}{T \text{ (Kelvin)}} \right), [\text{sec}^{-1}]$$

Neraca mol dalam keadaan *steady state* untuk reactor PFR adalah

$$\bullet \quad \frac{dX}{dV} = \frac{-r_a}{F_{a0}} = \frac{kC_a}{F_{a0}} \quad \text{dan} \quad C_a = \frac{C_{a0}(1-X)T_0}{(1+\epsilon X)T}$$

Perubahan suhu reactor dapat dirumuskan sebagai berikut

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Ua(T_a - T) + (-r_a)(-\Delta H_r)}{F_a C_{pa} + F_b C_{pb} + F_c C_{pc}}$$

Buatlah plot perubahan konversi reaktor dan suhu reaktor sebagai fungsi V bila reaksi berlangsung secara adiabatik. Diketahui panas reaksi standar adalah 80770 J/mol. Data perhitungan adalah sebagai berikut.

- Volume reaktor = 5 dm³, suhu masuk umpan = 1035 K, tekanan reaktor = 1,6 atm, suhu pemanas masuk = 1250 K, konsentrasi umpan (A) mula-mula sebesar, C_{a0}=18,85 mol/m³.
- $\Delta H_r = \Delta H_{r0} + \Delta a(T - T_r) + 0,5\Delta b(T^2 - T_r^2) + \frac{\Delta c}{3}(T^3 - T_r^3)$
- $C_{pa} = 26,63 + 0,183T - 45,86 \times 10^{-6}T^2$ (dalam J/mol/K)
- $C_{pb} = 20,04 + 0,0945T - 30,95 \times 10^{-6}T^2$
- $C_{pc} = 13,39 + 0,077T - 18,71 \times 10^{-6}T^2$
- $\Delta a = 6,8$; $\Delta b = -2 \times 5,75 \times 10^{-3}$; $\Delta c = -3 \times 1,27 \times 10^{-6}$;
- F_{a0} = 0,03754 mol/s, suhu referensi = 298 K.

Penyelesaian : (**lengkapi data yang kurang dan program yang kurang/typo*)

```
function case4_asetat_anhidrid
%kasus 4: Produksi Asetat Anhidrid dengan PFR
%by: Aji Ridho Pangestu
clear all; close all
clc
%data
dHr0=;%J/mol
Vr=;%m^3
T0=;%K
X0=;
Ua=;%adiabatic
Ta=;%K
Ca0=;%mol/m^3
Fa0=;%mol/s
Tr=;%K
%arrhenius data
A=;
EperR=;
```



```

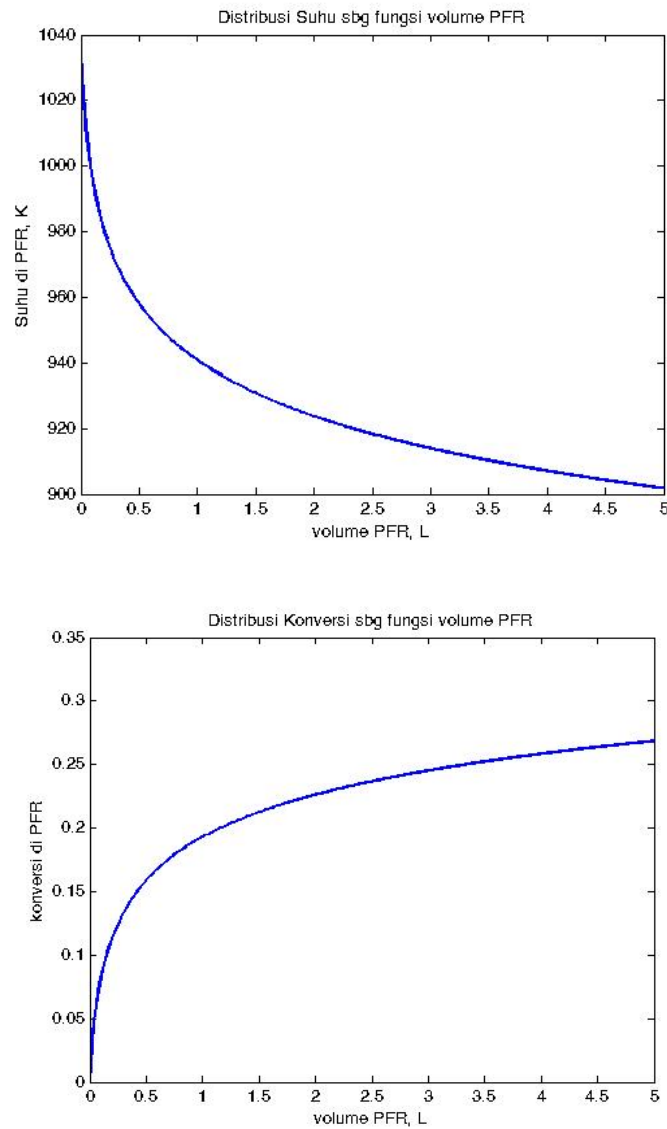
%heat of comb data
da=;
db=-2*5.75e-3;
dc=-3*1.27e-6;
%heat capacity data
a=[26.63 20.04 13.39];
b=[0.18];
c=[-18.71e-6];
%independent var
vspan=linspace(0,Vr,250);
%solver
[x,n]=ode23(@pdo5,tspan,T0 X0);
function dydv=pdo5(t,y)

Ca=Ca0*(1-X)*(T0/T)/(1+X);
k=A*exp(-EperR/T);
dXdv=k*Ca/Fa0;
Fa=
Fb=Fa0*X;
Fc=Fa0*X;
Cpa=a+b*T+c*T^2;
Cpb=a+b*T+c*T^2;
Cpc=a+b*T+c*T^2;
dHr=dHr0+da*(T-Tr)+0.5db*(T^2-Tr^2)+dc/3*(T^3-Tr^3);
dTdv=(Ua*(Ta-T)+kCa*(-dHr))/(Fa*Cpa+FbCpb+Fc*Cpc);
[dTdv;dXdv]
end
figure
plot(v*1000,y(:,1),'LineWidth',2);
title('Distribusi Konversi sbg fungsi volume PFR');
xlabel('volume PFR, L');
ylabel('Suhu di PFR, K');

figure
plot(v*1000,y(:,2),'LineWidth',2);
title('Distribusi Suhu sbg fungsi volume PFR');
xlabel('volume PFR, L');
ylabel('konversi di PFR');
end

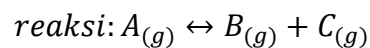
```

Hasil RUN



5. Reaksi Fase Gas pada RAP Non-Adiabatis Non-Isothermal (ode, tugas)

Reaksi fase gas bersifat reversible dengan kondisi eksotermis berlangsung dengan reaksi sebagai berikut.



Reaksi dijalankan pada sebuah RAP dengan diameter D dan Panjang L . *Rate of reaction* dirumuskan sebagai berikut.

$$r_A = k \left(C_A - \frac{C_B C_C}{K} \right)$$

Dengan: $k = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$ dan $K = \exp\left(\alpha + \frac{\beta}{T}\right)$

Perubahan entalpi reaksi mengikuti persamaan:

$$\Delta H_r = \Delta H_r^0 + (Cp_b + Cp_c - Cp_a)(T - T_{ref})$$

Dengan ΔH_r^0 adalah perubahan entalpi reaksi pada suhu T_{ref} . Umpan berjumlah F_0 (gmol/s) bersuhu T_0 dengan komposisi 90% A dan 10% inert (I). Tekanan sepanjang reaktor dianggap tetap. Untuk menjaga agar suhu reaktor tidak terlalu tinggi, pendingin berupa cairan jenuh bersuhu T_s dialirkan diluar tabung (didalam anulus). Pendingin meninggalkan anulus dalam keadaan uap jenuh T_s (suhu pendingin tetap). Bila kapasitas panas dianggap konstan, tentukanlah perubahan konversi (X) dan suhu gas (T) pada berbagai posisi (z), pada keadaan steady state. Diketahui persamaan perubahan konsentrasi dan suhu sebagai fungsi suhu sebagai berikut.

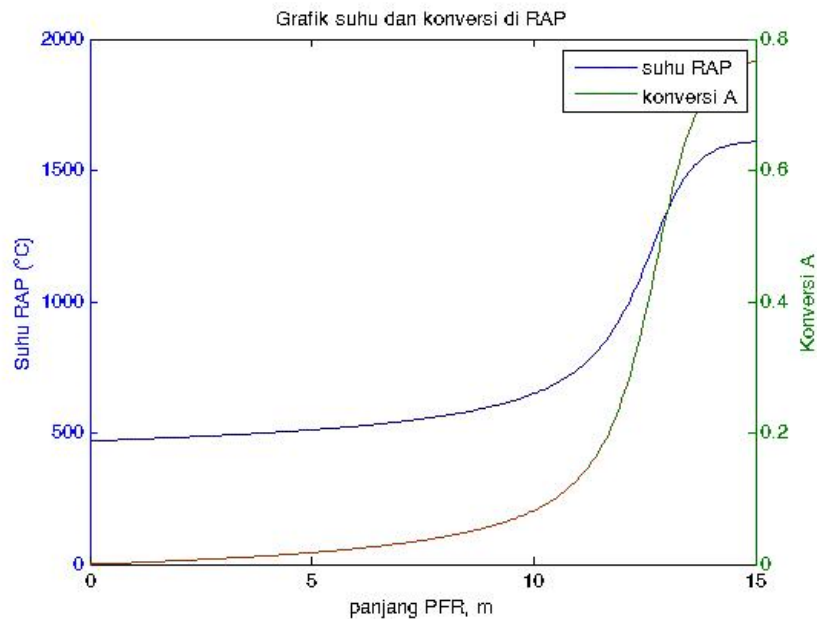
$$\frac{dT}{dz} = \frac{0,9F_0(-\Delta H_r) \frac{dx}{dz} - U\pi D(T - T_s)}{F_0(0,9(1-x)Cp_a + 0,9x(Cp_b + Cp_c) + 0,1Cp_i)}$$

$$\frac{dx}{dz} = \frac{\pi D^2 P}{3,6F_0 R T} k \left(\left(\frac{0,9(1-x)}{1+0,9x} \right) - \left(\frac{0,9x}{1+0,9x} \right)^2 \frac{P}{RT} \frac{1}{K} \right)$$

Data:

- $U = 0,0085 \text{ cal/cm}^2\text{/s/K}$
- $F_0 = 10 \text{ gmol/s}$
- $X_0 = 0$
- $P = 7 \text{ atm}$
- $D = 35 \text{ cm}$
- $L = 10 \text{ m}$
- $Cp_a = 20 \text{ cal/gmol/K}$
- $Cp_b = 10 \text{ cal/gmol/K}$
- $Cp_c = 15 \text{ cal/gmol/K}$
- $Cp_i = Cp_b$
- $\Delta H_r^0 = -35000 \text{ cal/gmol}$
- $R = 82 \text{ cm}^3\text{atm/gmol/K}$
- $A = 10000/\text{s}$
- $E/R = 6500 \text{ K}$
- $\alpha = -12,3$
- $\beta = 4400 \text{ K}$
- $T_{ref} = 0^\circ\text{C}$
- $T_0 = 470 \text{ K}$
- $T_s = 421 \text{ K}$

Kerjakan soal diatas, sehingga diperoleh hasil sebagai berikut.



6. Penentuan Orde Reaksi dan Konstanta Laju Reaksi (fminsearch-ode)

Reaktan A mengalami isomerisasi menjadi produk B dalam suatu batch reactor dengan persamaan reaksi: $A \rightarrow B$

Reaksi berlangsung kurang lebih hampir 20 menit dan diambil sampel pada kelipatan waktu tertentu. Konsentrasi A diukur dengan metode spektrofotometri dan diperoleh hasil sebagai berikut.

t (men)	0	3	5	8	10	12	15	17,5
$C_a(\text{mol/L})$	4,0	2,89	2,25	1,45	1,0	0,65	0,25	0,07

Diketahui *rate of reaction*: $-r_a = kC_a^n$ dan $\frac{dC_a}{dt} = r_a$

Hitunglah konstanta laju reaksi dan orde reaksi yang memberikan *Sum Square of Error* (SSE) terkecil. Gunakan trial awal $k = 0,35$ dan $n = 1$. Gunakan toolbox yang sesuai.

Penyelesaian:

Pertama, membuat input variabel yang berupa data t (men) dan C_A (mol/L) sebagaimana data seperti pada tabel diatas. Dari comand windows, menu home, pilih new variabel. Masukkan data waktu eksperimen pada kolom pertama dan konsentrasi A pada kolom kedua. Simpanlah dengan nama **case6** dengan ekstensi ***mat**. Kemudian buatlah program dengan editor seperti biasanya.

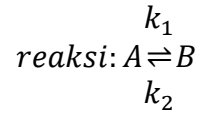
```
function case6_optimasi_k_n
%case 6. Penentuan Orde Reaksi dan Konstanta Laju Reaksi
%by: Aji Ridho Pangestu
clear all
clc
%data eksperimen
%memanggil data *mat yang telah dibuat
load('case6.mat');
t_data=case6(:,1);
Ca_data=case6(:,2);
k_trial=0.35;
n_trial=1;
%optimasi k dan n ==> bandingkan dg eksperimen ==> SSE
terkecil
[var,fval,exitflag,output]=fminsearch(@batch,[k_trial
n_trial])
function fx=batch(var) %fungsi optimasi
    k=var(1);
    n=var(2);
    %dCa/dt= -kCa^n ==> ode
    [t,Ca]=ode45(@dCadt,t_data,Ca_data(1),[],k,n);
    Ca_hitung=Ca(:,1);
    fx=sse(Ca_hitung-Ca_data);
end
function dCadt=dCadt(t,Ca,k,n)
    dCadt=-k*Ca^n;
end
end
```

Hasil RUN

$k = 0,1991 \text{ (mol/L)}^{0,5027} \text{men}^{-1}$ dan $n = 0,5025$

7. Penentuan Konstanta Laju Reaksi Flokulasi (fminsearch-ode, tugas)

Reaksi flokulasi berlangsung secara reversible dengan persamaan reaksi sebagai berikut.



Rate of reaction terhadap A dapat dituliskan sebagai berikut.

$$\frac{dC_a}{dt} = r_a = -k_1 C_a + k_2 (C_{a0} - C_a)$$

Reaksi dijalankan dalam reactor batch, dan didapatkan hasil pengamatan sebagai berikut.

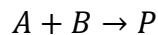
t (men)	0	5	10	15	20	25
C _a (mol/L)	2,5	0,0980	0,0572	0,0343	0,1013	0,0855

Hitunglah nilai k_1 dan k_2 yang memberikan SSE terkecil. Gunakan trial awal $k_1 = 0,2$ dan $k_2 = 0,5$.

Jawaban: $k_1 = 0,8834 \text{ men}^{-1}$ dan $k_2 = 0,0262 \text{ men}^{-1}$

8. Optimasi Suhu dalam Reaktor Batch Adiabatic (fminsearch-integral)

Reaktan A dan B fasa cair bereaksi dalam suatu reactor batch berpengaduk dengan persamaan reaksi sebagai berikut.



Reaksi berjalan secara adiabatic dan panas reaksi bersifat eksotermis. Kecepatan reaksi mengikuti persamaan berikut.

$$r_a = k \left(C_a - \frac{C_b}{K} \right)$$

Dimana : $k = A \exp \left(-\frac{E}{RT} \right)$ dan $K = \alpha \exp \left(\frac{\beta}{T} \right)$

Waktu reaksi dirumuskan dengan:

$$t = \int_{x_0}^{x_N} \frac{1}{k[(1-x) - Kx]} dx$$

Dari neraca panas diperoleh persamaan:

$$T = T_0 - \frac{C_{a0}\Delta H_r}{\rho C_p}(x - x_0)$$

Diketahui panas reaksi -80 kkal/mol, densitas campuran 1100 gr/L, kapasitas panas = 1,2 kal/gr/K, konsentrasi A mula-mula adalah 1 gr/mol, konstanta Arrhenius 25, energi aktivasi 10000 kal/mol, $R = 1,987$ kal/mol/K, $\alpha = 1750$ dan $\beta = -5000$. Hitunglah suhu awal (T_0) yang memberikan waktu reaksi minimum, bila konversi akhir sebesar 35%.

Penyelesaian: “lengkapi dan benarkan data yang kurang/typo/salah”

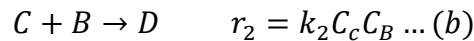
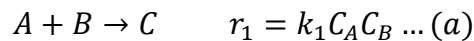
```
function case8_batchAdiabatik
%case 8. Optimasi suhu dalam reaktor batch adiabatik
%by: Aji Ridho Pangestu
clear all
clc
%data
dHr=;%panas reaksi ekso, kal/gmol
rho=1100;%densitas, g/L atau kg/m^3
Cp=;%kapasitas panas, kal/g/K
Ca0=1;%konsentrasi A awal, gmol/L
A=25;%konstanta tumbukan
E=;%energi aktivasi
R=;%cal/mol/K
Xa0=0;%konversi awal
Xan=0.35;%konversi akhir
alfa=1750;
beta=;
%dicari T0 ==> waktu terkecil
T0_trial=200+273.15;%K`
%solver ==> fminsearch
[T0,FVAL,EXITFLAG,OUTPUT]=fminunc(@kasus7,T0_trial)
%fungsi optimasi
function t=kasus7(T0)
%waktu terkecil ==> integral
%solver integral ==> quad
t=@integral,Xa0,Xan,[],[],T0);
end
%fungsi integrasi
function fx=integrasi(T0,Xa)
    T=T0-(dHr.*Ca0.*Xa)./(rho.*Cp);
    K=A.*exp(-E./(R.*T));
    k=alfa.*exp(beta./T);
    fx=1./(k.*(1-Xa)-K.*Xa));
end
end
```

Hasil RUN

Diperoleh suhu awal (T_0) = 681,2454 K dan waktu reaksi minimum didapatkan 41,87 men.

9. Optimasi Konstanta Laju Reaksi pada CSTR (ode, fminbnd, fminsearch, lsqnonlin, tugas)

Suatu reaktor CSTR dioperasikan secara isothermal dimana perubahan volume akibat reaksi dapat diabaikan. Dalam mode overflow dengan volume fluida konstan dan reaksi bersifat elementer. Reaksi berlangsung secara parallel dengan persamaan reaksi sebagai berikut.



Neraca mol untuk setiap komponen A, B, C, dan D adalah:

$$\frac{dN_A}{dt} = v(C_{A0} - C_A) + V(-k_1 C_A C_B) \dots (c)$$

$$\frac{dN_B}{dt} = v(C_{B0} - C_B) + V(-k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_B) \dots (d)$$

$$\frac{dN_C}{dt} = v(C_{C0} - C_C) + V(k_1 C_A C_B - k_2 C_C C_B) \dots (e)$$

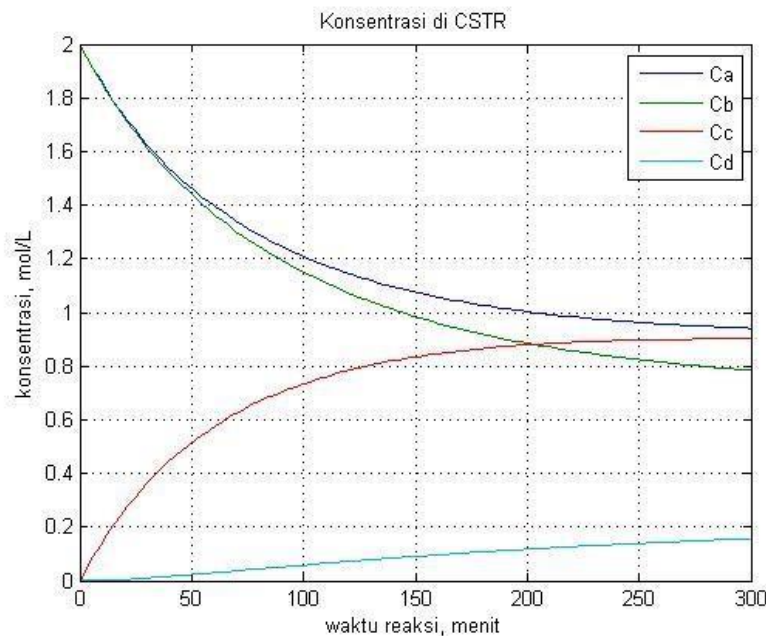
$$\frac{dN_D}{dt} = v(C_{D0} - C_D) + V(k_2 C_C C_B) \dots (f)$$

Dengan: $N_i = C_i V$

Dari kasus soal diatas, jawablah pertanyaan berikut ini:

- Buatlah grafik perubahan mol masing-masing komponen bila reaksi berlangsung selama 300 menit dengan volume reaktor 100 L. Reaktan masuk reaktor dengan flow rate 0,25 L/menit, $k_1 = 0,004 \text{ L.mol}^{-1}.\text{men}^{-1}$ dan $k_2 = 0,001 \text{ L.mol}^{-1}.\text{men}^{-1}$. Pada initial condition hanya terdapat A dan B masing-masing 2 mol/L.

Jawab:



- b. Tentukan konsentrasi A, B, C, dan D bila reaksi berjalan secara steady state (gunakan data yang diperlukan pada soal a).

Jawab:

konsentrasi akhir $C_a = 0.9402$ mol/L konsentrasi akhir $C_b = 0.7060$ mol/L

konsentrasi akhir $C_c = 0.8256$ mol/L konsentrasi akhir $C_d = 0.2342$ mol/L

- c. Berapa waktu yang dibutuhkan agar reaktan B menjadi 0,75 mol/L? berapa konsentrasi akhir senyawa A, C, dan D?

Jawab:

waktu agar B menjadi 0,75 mol/L adalah 375.06 menit konsentrasi akhir $C_a = 0.9272$ mol/L, konsentrasi akhir $C_c = 0.8955$ mol/L konsentrasi akhir $C_d = 0.1772$ mol/L

konsentrasi akhir $C_c = 0.8955$ mol/L konsentrasi akhir $C_d = 0.1772$ mol/L

- d. Tentukan berapa konsentrasi C maksimum yang diperoleh bila reaksi berjalan selama 300 menit. Pada menit ke berapa C_{makx} tercapai? Berapa konsentrasi A, B, dan D saat C_{makx} ?

Jawab:

waktu agar C maksimum adalah 273.078 menit konsentrasi akhir $C_a = 0.8723$ mol/L konsentrasi akhir $C_b = 0.7223$ mol/L konsentrasi akhir $C_c = 0.9777$ mol/L konsentrasi akhir $C_d = 0.1500$ mol/L

- e. Reaksi berlangsung secara isothermis dengan $V = 100 \text{ L}$, $C_{A0}=C_{B0}=2 \text{ mol/L}$ dengan v sebesar $0,25 \text{ L/menit}$, dan $t = 300 \text{ menit}$. Tentukanlah nilai k_1 dan k_2 bila diketahui hasil eksperimen sebagai berikut. Tampilkan juga plot grafiknya.

t, menit	$C_a \text{ (mol/L)}$	$C_b \text{ (mol/L)}$	$C_c \text{ (mol/L)}$	$C_d \text{ (mol/L)}$
0	2	2	0	0
6.0606	1.7855	1.7818	0.2108	0.0037
30.3030	1.2766	1.2248	0.6716	0.0518
69.6970	0.9429	0.8057	0.9200	0.1371
100.0000	0.8347	0.6476	0.9782	0.1871
175.7576	0.7442	0.4778	0.9894	0.2664
200.0000	0.7370	0.4540	0.9799	0.2831
245.4545	0.7342	0.4268	0.9583	0.3075
260.6061	0.7350	0.4209	0.9509	0.3141
275.7576	0.7362	0.4162	0.9437	0.3201
300.0000	0.7389	0.4103	0.9325	0.3286

Jawab:

nilai $k_1 = 0.001 \text{ L/mol/men}$ nilai $k_2 = 0.003 \text{ L/mol/men}$

10. Optimasi Parameter pada Tekanan Uap Murni Komponen (fminsearch/lsqnonlin)

Diketahui data hubungan antara tekanan uap suatu zat dengan suhu sebagai berikut

T, Kelvin	280	300	320	340	360	380	400
P^0 , cmHg	2	5	12	25	49	89	148

Hubungan antara P^0 (cmHg) dan T (K) dapat didekati dengan persamaan berikut.

$$P^0 = \exp\left(A + \frac{B}{T}\right)$$

Dari data tersebut, carilah nilai A dan B yang memberikan SSE minimum.

$$SSE = \sum [P_{hitung}^0 - P_{data}^0]^2 = f(A, B)$$

Gunakan toolbox yang sesuai untuk optimasi tersebut. Diketahui trial $A = 12$; trial $B = -4200$; Kemudian buatlah plot P^0 vs T dengan $T = \text{linspace}(298.15, 400, 100)$.

Penyelesaian: *lengkapi program yang kurang/ perbaiki yang salah

```
function case10_tekanan_uap_murni
%case 10. kasus optimasi parameter pada tekanan uap murni
```

```

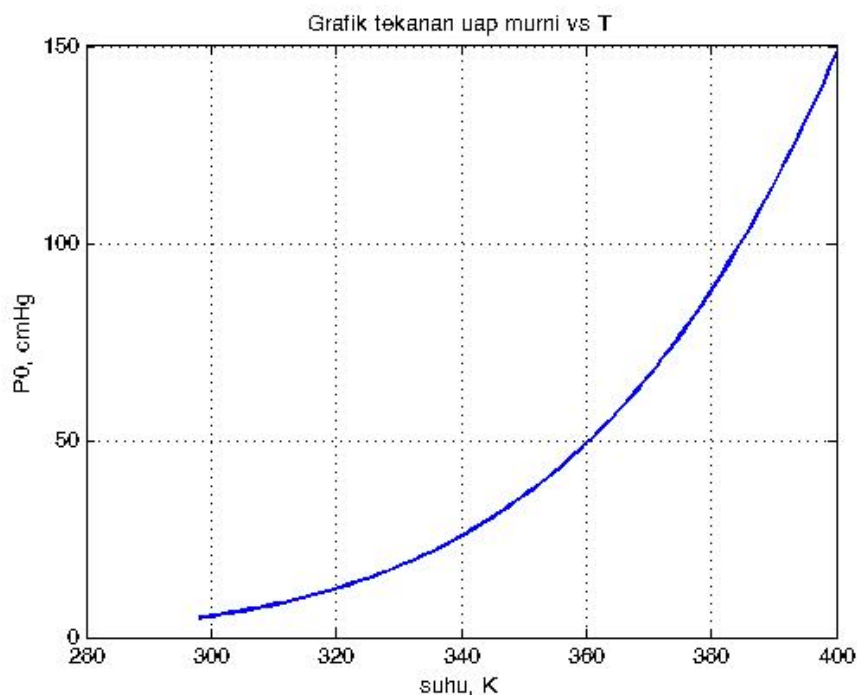
%by: Aji Ridho Pangestu
clear all;clc
%data
T_data=linspace(280,400,7);%K
P0_data=[2; 5; 12; 25; 49; 89; 148];%cmHg
A0=12;
B0=-4200;
%solver
[y,SSE,exitflag]=f...(@optimasi5,[A0 B0]);
function fx=optimasi5(y)
A=y(1);B=y(2);
P0_hitung=exp(A+B./T_data);
%hitung SSE
fx=(P0_hitung-P0_data);
end
fprintf('nilai A);
fprintf('nilai B,y(2));
Tspan=linspace(298.15,400,100);
P0=exp(y(1)+y(2)./Tspan);
figure
plot(Tspan,P0,'LineWidth',2);grid on
xlabel('suhu, K');
ylabel('P0, cmHg');
title('Grafik tekanan uap murni vs T');
end

```

Hasil RUN

nilai A= 14.958

nilai B= -3983.038



11. Reaksi Orde 1 Fase Cair dalam Katalis Padat Berpori (fzero, ode, bvp4c, integral, latihan responsi)

Reaksi orde 1 fase cair; $A \rightarrow \text{Produk}$, dijalankan dengan bantuan katalisator padat berpori. Katalisator berbentuk bola dengan jari-jari 2 cm. Reaksi terjadi di permukaan pori dengan konstanta laju reaksi adalah k . Luas permukaan pori tiap volume katalis adalah a . Harga $ka = 1 \text{e-3 detik}^{-1}$. Untuk bisa mencapai permukaan pori, A harus mendifusi ke dalam bola lewat pori. Harga difusivitas efektif sebesar $1 \text{e-4 cm}^2/\text{detik}$. Konsentrasi A di cairan disekitar bola adalah $C_{Af} = 5 \text{e-4 gmol/cm}^3$. Carilah distribusi konsentrasi A dalam katalisator dan harga factor efektivitas. Untuk penyelesaian PD, gunakan ode45/ode15s dengan harga C_A pada $r = 0$ akan di trial sampai diperoleh $C_{Af} = 5 \text{e-4 mol/cm}^3$. Untuk proses evaluasi C_A pada $r = 0$, gunakan modle zero function fzero/fsolve. Kamu juga dapat menyelesaikan dengan konsep toolbox bvp4c. Trial awal C_A adalah $0,00045 \text{ mol/cm}^3$.

Diketahui PD:

$$\frac{d^2 C_A}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dC_A}{dr} = \frac{ka}{De} C_A$$

Modifikasi : $\frac{dC_A}{dr} = u$ dan $\frac{du}{dr} = -\frac{2}{r}u + \frac{ka}{De}C_A$

Boundary condition: @ $x = 0$; $C_A = C_{A0}$; $du/dr = ka.C_A/(3De)$

Dengan: $\lim_{\Delta r \rightarrow 0} \frac{u}{r} = \frac{du}{dr}$

Forward methods 2nd order: $\frac{du}{dr} = \frac{-u(i+2)+4f(i+1)-3f(i)}{2\Delta r}$

Factor efektifitas (%) = $\frac{300}{R^3 C_{Af}} \int_0^R r^2 C_A dr$

Silahkan kerjakan soal diatas sebagai latihan responsi

Jawaban:

$C_{A0} = 1,1332 \text{e-5 mol/cm}^3$ (saat $r = 0$)

Faktor efektivitas = 39,99%

12. Optimasi Suhu dan Komposisi Produk pada Sistem Flash Drum (fsolve, tugas)

Cairan sejumlah 100 gmol/menit dengan fraksi mol A, B, C masing-masing 0,4; 0,3; 0,3 dimasukkan dalam flash drum sehingga Sebagian cairan tersebut menguap. Suhu cairan masuk 360 K dan tekanan dalam flash drum adalah 76 cmHg. Sistem mengikuti hukum Rault-Dalton. Jika

panas yang dimasukkan ke *flash drum* adalah 5e5 cal/men, hitunglah suhu bahan-bahan keluar reboiler, jumlah produk hasil atas (V) dan hasil bawahnya (L), dan komposisi hasil atas (y_i) dan hasil bawah (x_i).

Persamaan-persamaan tekanna uap:

$$P_A^0 = \exp(15,35 - 3764/T)$$

$$P_b^0 = \exp(16,07 - 4497/T)$$

$$P_c^0 = \exp(15,95 - 4934/T)$$

Trial awal: $L/F = 0,5$ dan $T_{\text{trial}} = 375 \text{ K}$

$$x_i = \frac{z_i}{\frac{L}{F} + \frac{P_i^0}{P_t} \left(1 - \frac{L}{F}\right)} \quad y_i = \frac{P_i^0}{P_t} x_i \quad H_f = (\sum C_{pl}^i z_i)(T_f - 298)$$

$$H_l = (\sum C_{pl}^i x_i)(T - 298) \quad H_v = (\sum C_{pv}^i y_i)(T - 298) + \sum y_i \lambda_i$$

Optimasilah L/F dan T dengan toolbox yang sesuai untuk persamaan berikut ini.

$$fx1 = Q + FH_f - VH_v - LH_l = 0$$

$$fx2 = \sum(x_i) - 1 = 0$$

Data pendukung:

$C_{pl,A} = 30$; $C_{pl,B} = 35$; $C_{pl,C} = 40$; cal/gmol/K

$C_{pv,A} = 25$; $C_{pv,B} = 30$; $C_{pv,C} = 35$; cal/gmol/K

$\lambda_A = 7e3$; $\lambda_B = 8e3$; $\lambda_C = 9e3$; cal/gmol

Jawaban:

Equation solved, fsolve stalled.

fsolve stopped because the relative size of the c
default value of the step size tolerance squared
is near zero as measured by the default value of

<stopping criteria details>

```
jumlah umpan      (F) = 100 gmol/men
jumlah hasil atas (V) = 59.0266 gmol/men
jumlah hasil baah (L) = 40.9734 gmol/men
hasil trial suhu   = 382.3388 Kelvin
hasil trial L/F    = 0.40973
```

komposisi hasil atas:

```
xa = 0.17239
xb = 0.304
xc = 0.52361
```

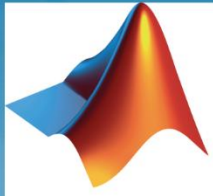
komposisi hasil bawah:

```
ya = 0.558
yb = 0.29722
yc = 0.14478
```

```
>> |
```

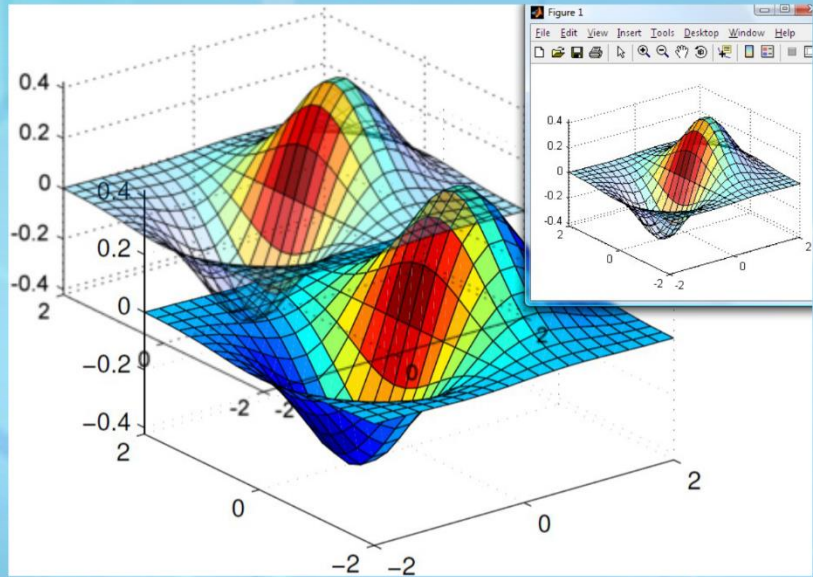
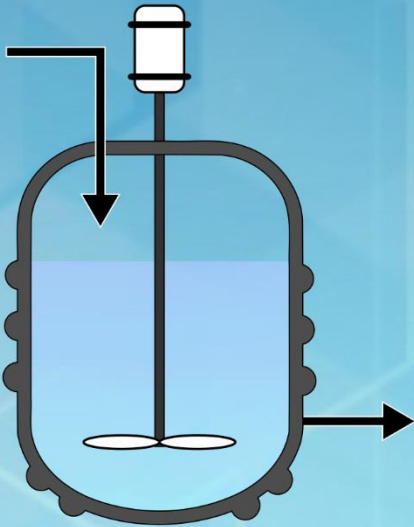
DAFTAR PUSTAKA

- Chapra, Steven C., and Raymond P. Canale. 2006. *Numerical methods for engineers*. Boston: McGraw-Hill Higher Education.
- Levenspiel, Octave. 1999. *Chemical reaction engineering*. New York: Wiley.
- Sediawan, Wahyu Budi dan Agus Prasetya. 1997. *Pemodelan Matematis dan Penyelesaian Numeris dalam Teknik Kimia*. ANDI: Yogyakarta.
- Smith, J. M., and H. C. Van Ness. 1959. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. New York: McGraw-Hill.



MathWorks®

Accelerating the pace of engineering and science



MATLAB®