

SIMULASI REAKSI KIMIA DI UDARA

Toni Samiaji¹, S. Agung N.², Alfi R.³

¹Bidang Pengkajian Ozon dan Polusi Udara-Pusat Pemanfaatan Sains Atmosfer dan Iklim
Lembaga Penerbangan dan Antariksa Nasional/LAPAN

¹: E-mail : toni_s@bdg.lapan.go.id

²: Instalmentan- Pusat Pemanfaatan Sains Antariksa- LAPAN

³: Alumni ITB

Abstract

To comprehend chemical mechanism reaction and to predict polutan concentration on the ambient air, it is required to simulate chemical reaction.

Reaction rate equation which was ordinary differential equation, was made by developing competition reaction theory, and be solved by numeric. Its solution was solved by Runge-Kutta method of order 4, by using fortran 77.

Result of research of polutan concentration which function of initial concentration and time was obtained that, when total reaction rate of one substance was negative, and its value increased, hence that substance concentration decreased, but when total reaction rate of one substance was positive, and its value decreased, hence that substance concentration increased.

Abstrak

Untuk memahami mekanisme reaksi kimia dan memprediksi konsentrasi polutan di udara ambien, perlu dilakukan simulasi reaksi kimia.

Persamaan kecepatan reaksi dibuat dengan mengembangkan teori reaksi kompetitif. Dengan persamaan-persamaan kecepatan reaksi differential biasa dan dipilih penyelesaiannya secara numerik. Persamaan-persamaan tersebut diselesaikan dengan metoda Runge-Kutta orde 4, dengan bahasa fortran 77.

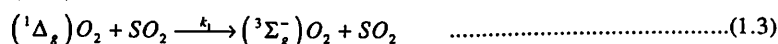
Hasil penelitian dari konsentrasi polutan yang merupakan fungsi waktu dan konsentrasi awal, diperoleh laju total reaksi suatu zat adalah negatif, dan nilainya semakin membesar, maka konsentrasi zat tersebut semakin menurun, tetapi apabila laju total reaksi suatu zat adalah positif dan nilainya semakin mengecil, maka konsentrasi zat tersebut semakin membesar.

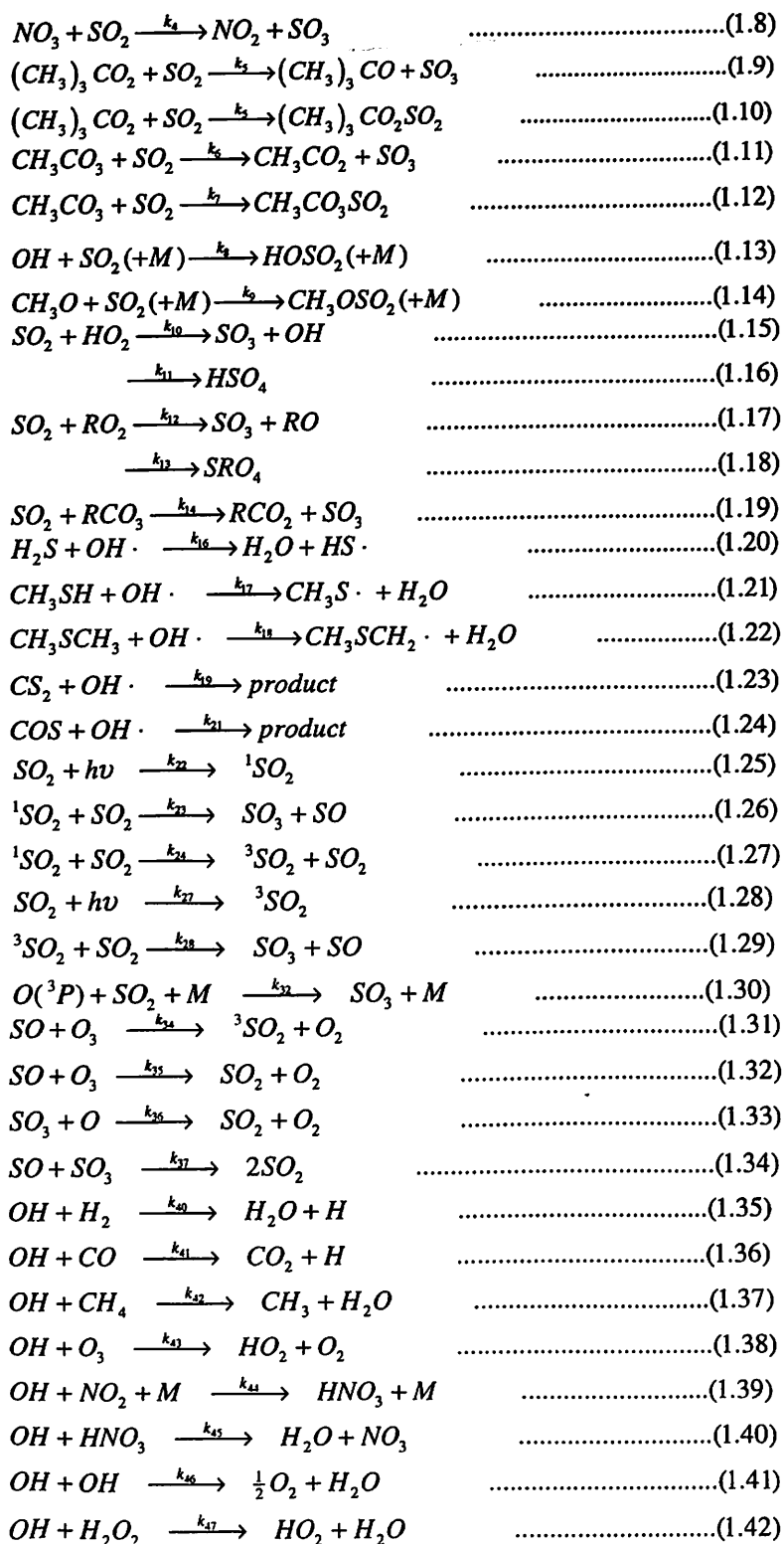
1. PENDAHULUAN

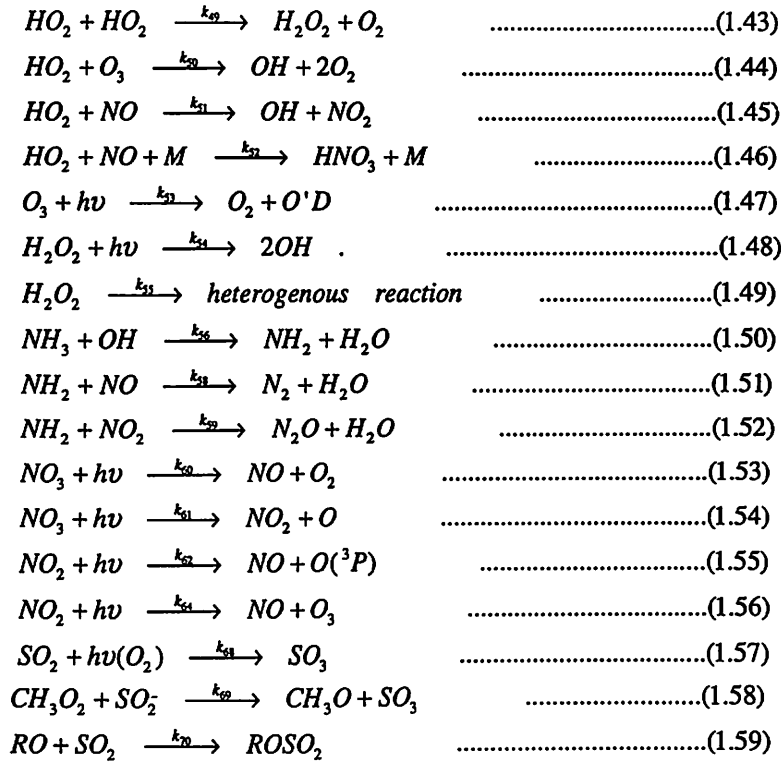
Di atmosfer banyak unsur kimia yang menyusun beraneka ragam gas dengan reaksinya. Selain gas-gas standar penyusun atmosfer, juga gas-gas sekunder yang menyatu dengan gas-gas yang ada menyebabkan polusi, seperti SO₂, NO_x, CH₄ dan sebagainya.

Polusi udara berdampak buruk bagi kesehatan karena bisa mengakibatkan iritasi mata, tenggorokan, dan batuk. Selain itu polusi udara bila larut dalam tetes-tetes awan dapat menjadikan air hujan menjadi asam, atau menimbulkan hujan asam.

Konsentrasi polutan di udara dari waktu ke waktu berubah, karena ada faktor-faktor yang mempengaruhinya. Salah satu faktor yang mempengaruhi diantaranya adalah karena adanya reaksi kimia dengan polutan yang lain. Reaksi kimia yang dipakai dalam pembuatan simulasi dalam makalah ini adalah sebagai berikut







Tujuan dari penelitian ini adalah membuat simulasi reaksi kimia di udara sebagai langkah awal dalam pembuatan model kualitas udara

Sasaran dari penelitian ini adalah melihat karakteristik konsentrasi polutan dan laju reaksi polutan di udara.

2. DATA DAN METODOLOGI PENELITIAN

Data yang digunakan di sini adalah data konstanta kecepatan reaksi diambil dari berbagai literatur. Demikian pula persamaan reaksi kimia diambil dari berbagai literatur.

Dari semua reaksi kimia yang tertera pada sub pendahuluan, kemudian disusun persamaan kecepatan reaksi untuk seluruh reaksi kimia dengan mengembangkan teori untuk reaksi kompetitif, yakni sebagai berikut :

$$\begin{aligned}
\frac{d[SO_2]}{dt} = & [SO_2](-3k_1[\Delta_g O_2] - 2k_2[\Sigma_g^+ O_2] - k_3[O] - k_4[NO_3] \\
& - 2k_5[C_4H_9O_2] - (k_6 + k_7)[C_2H_3O_3] - k_8[OH] - k_9 \\
& [CH_3O] - (k_{10} + k_{11})[HO_2] - (k_{12} + k_{13})[RO_2] - k_{14} \\
& [RCO_3] - k_{22} - k_{23}[\Sigma SO_2] - k_{27} - k_{28}[^3SO_2] - k_{32} \\
& [(^3P)O] - k_{68} - k_{69}[CH_3O_2] - k_{70}[RO]) + k_{35}[SO] \\
& [O_3] + k_{36}[SO_3][O] + k_{37}[SO][SO_3] && \dots\dots\dots(2.1)
\end{aligned}$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = -k_{41}[CO][OH] \quad \dots\dots\dots(2.2)$$

$$\begin{aligned}
\frac{d[O_3]}{dt} = & [O_3](-k_{34} + k_{35})[SO] - k_{43}[OH] - k_{50}[HO_2] - k_{53} + k_{64}[NO_2] \\
& - k_{70}[RO] + k_{35}[SO][O_3] + k_{36}[SO_3][O] + k_{37}[SO][SO_3] && \dots\dots\dots(2.3)
\end{aligned}$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = [NO_2](-k_{44}[OH] - k_{59}[NH_2] - (k_{62} + k_{64})) + k_4[NO_3][SO_2] + k_{51}[HO_2][NO] + k_{61}[NO_3] \quad \dots\dots\dots(2.4)$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = [NO](-k_{31} + k_{32})[HO_2] - k_{38}[NH_2] + k_{60}[NO_3] + (k_{62} + k_{64})[NO_2] \quad \dots\dots(2.5)$$

$$\frac{d[CH_4]}{dt} = -k_{42}[CH_4][OH] \quad \dots\dots\dots(2.6)$$

$$\frac{d[H_2O]}{dt} = [OH] \left(\begin{aligned} &k_{16}[H_2S] + k_{17}[CH_4S] + k_{18}[C_2H_6S] + k_{10}[H_2] \\ &+ k_{42}[CH_4] + k_{45}[HNO_3] + k_{47}[H_2O_2] + k_{36}[NH_3] \end{aligned} \right) - k_{13}[H_2O][SO_3] + [NH_2](k_{38}[NO] + k_{59}[NO_2]) \quad \dots\dots\dots(2.7)$$

$$\frac{d[O]}{dt} = [SO_2](k_1[\Delta_f O_2] + k_2[\Sigma_f^* O_2] - k_3[O]) - k_{36}[O][SO_3] + k_{61}[NO_3] \quad \dots\dots\dots(2.8)$$

$$\frac{d[O'D]}{dt} = -k_{53}[O_3] \quad \dots\dots\dots(2.9)$$

$$\frac{d[O^3P]}{dt} = -k_{32}[O^3P][SO_2] + k_{62}[NO_2] \quad \dots\dots\dots(2.10)$$

$$\frac{d[\Delta_f O_2]}{dt} = [SO_2](-3k_1[\Delta_f O_2] + k_2[\Sigma_f^* O_2]) \quad \dots\dots\dots(2.11)$$

$$\frac{d[\Sigma_f^* O_2]}{dt} = -3k_2[\Sigma_f^* O_2][SO_2] \quad \dots\dots\dots(2.12)$$

$$\frac{d[NO_3]}{dt} = [NO_3](-k_4[SO_2] - (k_{60} + k_{61})) + k_{45}[OH][HNO_3] \quad \dots\dots\dots(2.13)$$

$$\frac{d[(CH_3)_3CO_2]}{dt} = -2k_5[(CH_3)_3CO_2][SO_2] \quad \dots\dots\dots(2.14)$$

$$\frac{d[CH_3CO_3]}{dt} = -(k_6 + k_7)[CH_3CO_3][SO_2] \quad \dots\dots\dots(2.15)$$

$$\frac{d[HO_2]}{dt} = [HO_2]((-k_{10} - k_{11})[SO_2] - k_{49}[HO_2] - k_{30}[O_3] - (k_{51} + k_{52})[NO]) + [OH](k_{43}[O_3] + k_{47}[H_2O_2]) \quad \dots\dots\dots(2.16)$$

$$\frac{d[OH]}{dt} = [OH](-k_3[SO_2] - k_{16}[H_2S] - k_{17}[CH_4S] - k_{18}[C_2H_6S] - k_{19}[CS_2] - k_{21}[COS] - k_{40}[H_2] - k_{41}[CO] - k_{42}[CH_4] - k_{43}[O_3] - k_{44}[NO_2] - k_{45}[HNO_3] - k_{47}[H_2O_2] - k_{36}[NH_3]) + [HO_2](k_{10}[SO_2] + k_{30}[O_3] + k_{51}[NO] + k_{54}[H_2O_2]) \quad \dots\dots(2.17)$$

$$\frac{d[{}^3SO_2]}{dt} = k_{24}[{}^1SO_2][SO_2] - k_{28}[SO_2][{}^3SO_2] + k_{27}[SO_2] + k_{34}[SO][O_3] \quad \dots\dots\dots(2.18)$$

$$\frac{d[RO_2]}{dt} = (-k_{12} - k_{13})[SO_2][RO_2] \quad \dots\dots\dots(2.19)$$

$$\frac{d[RCO_3]}{dt} = -k_{14}[RCO_3][SO_2] \quad \dots\dots\dots(2.20)$$

$$\frac{d[{}^1SO_2]}{dt} = (-k_{23} - k_{24})[{}^1SO_2][SO_2] + k_{22}[SO_2] \quad \dots\dots\dots(2.21)$$

$$\frac{d[SO]}{dt} = [SO](-k_{34} - k_{35})[O_3] - k_{37}[SO_3] + [SO_2](k_{23}[{}^1SO_2] + k_{28}[{}^3SO_2]) \quad \dots\dots\dots(2.22)$$

$$\frac{d[SO_3]}{dt} = [SO_2](k_1[{}^1\Delta_f O_2] + k_2[{}^1\Sigma_f^* O_2] + k_3[O] + k_4[NO_3] + k_5[C_2H_6O_2] + k_6[C_2H_3O_3] + k_{10}[HO_2] + k_{14}[RCO_3] + k_{23}[{}^1SO_2] + k_{28}[{}^3SO_2] + k_{32}[{}^3O] + k_{68} + k_{69}[CH_3O_2]) + [SO_3](-k_{15}[H_2O] - k_{36}[O] - k_{37}[SO]) \quad \dots\dots(2.23)$$

$$\frac{d[CH_3O]}{dt} = [SO_2](k_{69}[CH_3O_2] - k_9[CH_3O]) \quad \dots\dots\dots(2.24)$$

$$\frac{d[CH_3O_2]}{dt} = -k_{60}[CH_3O_2][SO_2] \dots\dots\dots(2.25)$$

$$\frac{d[RO]}{dt} = [SO_2](k_{12}[RO_2] - k_{70}[RO]) \dots\dots\dots(2.26)$$

$$\frac{d[NH_2]}{dt} = k_{56}[NH_3][OH] - k_{58}[NH_2][NO] - k_{59}[NH_2][NO_2] \dots\dots\dots(2.27)$$

$$\frac{d[NH_3]}{dt} = -k_{56}[NH_3][OH] \dots\dots\dots(2.28)$$

$$\frac{d[H_2S]}{dt} = -k_{16}[H_2S][OH] \dots\dots\dots(2.29)$$

$$\frac{d[CH_4S]}{dt} = -k_{17}[CH_4S][OH] \dots\dots\dots(2.30)$$

$$\frac{d[C_2H_6S]}{dt} = -k_{18}[C_2H_6S][OH] \dots\dots\dots(2.31)$$

$$\frac{d[H_2]}{dt} = -k_{40}[H_2][OH] \dots\dots\dots(2.32)$$

$$\frac{d[HNO_3]}{dt} = k_{44}[OH][NO_2] - k_{45}[HNO_3][OH] + k_{52}[HO_3][NO] \dots\dots\dots(2.33)$$

$$\frac{d[H_2O_2]}{dt} = -k_{47}[H_2O_2][OH] + k_{49}[HO_2]^2 - k_{54}[H_2O_2] - k_{55}[H_2O_2] \dots\dots\dots(2.34)$$

$$\frac{d[H]}{dt} = k_{40}[OH][H_2] + k_{41}[OH][CO] - k_{48}[H][O_2] \dots\dots\dots(2.35)$$

$$\frac{d[CS_2]}{dt} = -k_{19}[CS_2][OH] \dots\dots\dots(2.36)$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = -k_{21}[CO][OH] \dots\dots\dots(2.37)$$

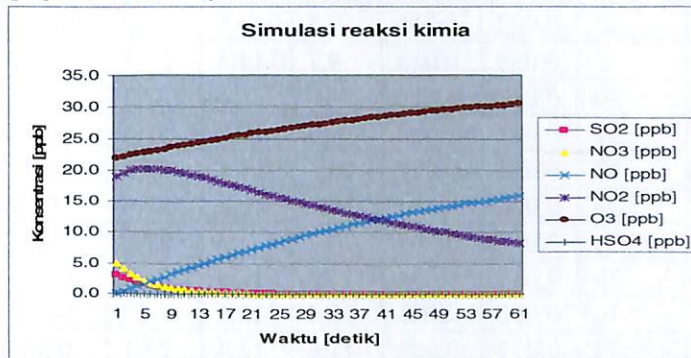
$$\frac{d[HSO_4]}{dt} = k_{11}[SO_2][HO_2] \dots\dots\dots(2.38)$$

Persamaan-persamaan kecepatan reaksi tersebut merupakan persamaan differential biasa, kemudian dicari solusinya dengan metoda Runge-Kutta. Kemudian menentukan inputnya, membuat program dengan bahasa fortran 77 dan merunning model.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1 HASIL

Sebagai hasil dari running program fortran 77 untuk reaksi kompetitif ini digambarkan pada Gambar 3.1. Dari gambar ini nampak bahwa dengan durasi 1 menit konsentrasi ozon dan gas NO naik terus, sedangkan gas SO₂ dan NO₃ turun mendekati nilai yang konstan. Tetapi gas NO₂ awalnya naik kemudian turun.



Gambar 3.1 Perubahan konsentrasi polutan sebagai fungsi dari waktu

Gambar 3.1 bila ditabulasikan maka diperoleh seperti Tabel 3.1.

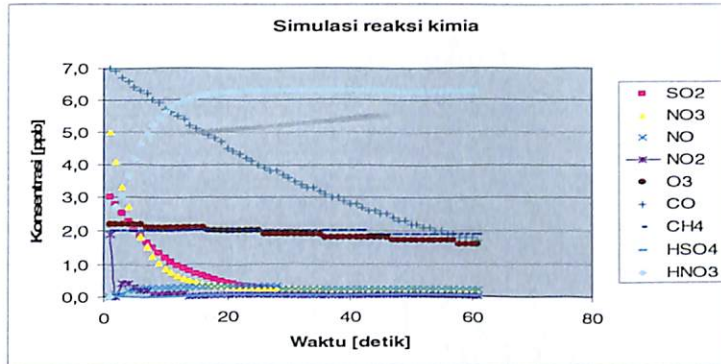
Tabel 3.1 Perubahan konsentrasi polutan terhadap waktu,

T [detik]	SO ₂ [ppb]	NO ₃ [ppb]	NO [ppb]	NO ₂ [ppb]	O ₃ [ppb]	HSO ₄ [ppb]
0	3,0	5,0	0,0	19,0	21,9	0,0
1	2,581	4,069	0,4	19,5	22,1	0,0041
2	2,220	3,312	0,8	19,9	22,3	0,0073
3	1,908	2,695	1,2	20,1	22,5	0,0098
4	1,640	2,193	1,6	20,2	22,7	0,0119
5	1,410	1,785	2	20,2	22,9	0,0135
6	1,211	1,453	2,4	20,1	23,1	0,0149
7	1,041	1,182	2,8	20	23,3	0,016
8	0,894	0,962	3,2	19,9	23,5	0,017
9	0,768	0,783	3,6	19,7	23,7	0,0178
10	0,660	0,637	3,9	19,4	23,9	0,0184
11	0,566	0,519	4,3	19,2	24,1	0,019
12	0,486	0,422	4,6	19	24,3	0,0194
13	0,418	0,344	5	18,7	24,5	0,0198
14	0,359	0,280	5,3	18,4	24,6	0,0202
15	0,308	0,228	5,6	18,1	24,8	0,0205
16	0,264	0,185	6	17,8	25	0,0207
17	0,227	0,151	6,3	17,6	25,2	0,0209
18	0,195	0,123	6,6	17,3	25,4	0,0211
19	0,167	0,010	6,9	17	25,5	0,0212
20	0,144	0,081	7,2	16,7	25,7	0,0214
21	0,123	0,066	7,5	16,4	25,9	0,0215
22	0,106	0,054	7,8	16,1	26	0,0216
23	0,091	0,044	8,1	15,9	26,2	0,0216
24	0,078	0,036	8,4	15,6	26,3	0,0217
25	0,067	0,029	8,7	15,3	26,5	0,0218
26	0,057	0,024	8,9	15	26,6	0,0218
27	0,049	0,019	9,2	14,8	26,8	0,0219
28	0,042	0,016	9,5	14,5	26,9	0,0219
29	0,036	0,013	9,7	14,3	27,1	0,0219
30	0,031	0,010	10	14	27,2	0,022
31	0,027	0,008	10,2	13,8	27,4	0,022
32	0,023	0,007	10,5	13,5	27,5	0,022
33	0,020	0,006	10,7	13,3	27,6	0,022
34	0,017	0,005	11	13	27,8	0,022
35	0,015	0,004	11,2	12,8	27,9	0,0221
36	0,012	0,003	11,4	12,6	28	0,0221
37	0,011	0,002	11,6	12,4	28,1	0,0221

38	0,009	0,002	11,9	12,1	28,3	0,0221
39	0,008	0,002	12,1	11,9	28,4	0,0221
40	0,007	0,001	12,3	11,7	28,5	0,0221
41	0,006	0,001	12,5	11,5	28,6	0,0221
42	0,005	0,001	12,7	11,3	28,7	0,0221
43	0,004	0,001	12,9	11,1	28,9	0,0221
44	0,004	0,001	13,1	10,9	29	0,0221
45	0,003	0,000	13,3	10,7	29,1	0,0221
46	0,003	0,000	13,5	10,5	29,2	0,0221
47	0,002	0,000	13,7	10,3	29,3	0,0221
48	0,002	0,000	13,9	10,1	29,4	0,0221
49	0,002	0,000	14	10	29,5	0,0221
50	0,001	0,000	14,2	9,8	29,6	0,0221
51	0,001	0,000	14,4	9,6	29,7	0,0221
52	0,001	0,000	14,6	9,4	29,8	0,0221
53	0,001	0,000	14,7	9,3	29,9	0,0221
54	0,001	0,000	14,9	9,1	30	0,0221
55	0,001	0,000	15,1	8,9	30	0,0221
56	0,001	0,000	15,2	8,8	30,1	0,0221
57	0,000	0,000	15,4	8,6	30,2	0,0221
58	0,000	0,000	15,5	8,5	30,3	0,0221
59	0,000	0,000	15,7	8,3	30,4	0,0221
60	0,000	0,000	15,8	8,2	30,5	0,0221

Sumber : Hasil perhitungan model

Gambar 3.1 menunjukkan perubahan konsentrasi polutan ketika konsentrasi awal ozon dan NO₂ cukup besar, bila konsentrasi awal ozon dan NO₂ adalah kecil, maka hasil simulasi ini digambarkan pada Gambar 3.2. Dari gambar ini terlihat bahwa konsentrasi gas NO₂ awalnya turun kemudian naik, kemudian turun lagi. Jadi berbeda dengan konsentrasi gas NO₂ pada Gambar 3.1. Ini dikarenakan konsentrasi awal NO₂ dan O₃ seperti diperlihatkan Tabel 3.1 dan 3.2 adalah berbeda, sehingga setelah dihitung persamaan 2.60 sampai dengan persamaan 2.97 menghasilkan Tabel 3.1 dan Tabel 3.2 (atau Gambar 3.1 dan 3.2). Sebagai tambahan pada gambar 3.2 ini ditampilkan pula konsentrasi metan (CH₄), CO dan asam nitrat. Nampak bahwa tidak semua konsentrasi polutan menjadi turun, akan tetapi ada juga yang naik seperti asam nitrat (HNO₃).



Gambar 3. 2 Perubahan konsentrasi polutan sebagai fungsi dari waktu

Gambar 3.3 menunjukkan laju reaksi sebagai fungsi dari waktu. Dari gambar ini nampak bahwa laju total dari reaksi pembentukan dan penguraian gas NO_3 dengan bertambahnya waktu maka laju total akan semakin besar, sedangkan laju total asam nitrat awalnya berkurang kemudian naik, kemudian turun lagi.

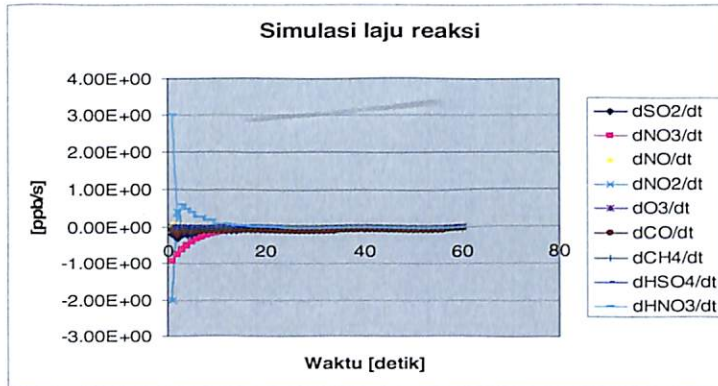
Untuk memperjelas Gambar 3.2, maka hasil running ditabulasikan pada Tabel 3.2.

Tabel 3.2. Perubahan konsentrasi polutan terhadap waktu,

T [dt]	SO_2 (ppb)	NO_3 (ppb)	NO (ppb)	NO_2 (ppb)	O_3 (ppb)	CO (ppb)	CH_4 (ppb)	HSO_4 (ppb)	HNO_3 (ppb)
0	3,0	5,0	0,0	1,9	2,2	7,0	2,0	0,0	0,0
1	2,8	4,1	0,1	0,0	2,2	6,9	2,0	0,00	2,72
2	2,5	3,3	0,1	0,4	2,2	6,7	2,0	0,01	3,03
3	2,3	2,7	0,2	0,4	2,2	6,6	2,0	0,01	3,63
4	2,0	2,2	0,2	0,3	2,2	6,4	2,0	0,01	4,17
5	1,8	1,8	0,3	0,2	2,2	6,3	2,0	0,01	4,60
6	1,7	1,5	0,3	0,2	2,1	6,2	2,0	0,01	4,94
7	1,5	1,3	0,3	0,1	2,1	6	2,0	0,01	5,21
8	1,4	1,1	0,3	0,1	2,1	5,9	2,0	0,01	5,43
9	1,2	0,9	0,3	0,1	2,1	5,7	2,0	0,01	5,61
10	1,1	0,8	0,3	0,1	2,1	5,6	2,0	0,01	5,75
11	1,0	0,6	0,3	0,1	2,1	5,5	2,0	0,01	5,86
12	0,9	0,6	0,3	0,1	2,1	5,4	2,0	0,01	5,96
13	0,8	0,5	0,3	0,0	2,1	5,2	2,0	0,01	6,03
14	0,7	0,4	0,3	0,0	2,1	5,1	2,0	0,01	6,09
15	0,6	0,4	0,3	0,0	2,1	5	2,0	0,01	6,13
16	0,6	0,3	0,3	0,0	2	4,9	2,0	0,01	6,17
17	0,5	0,3	0,3	0,0	2	4,8	2,0	0,01	6,20
18	0,5	0,3	0,3	0,0	2	4,7	2,0	0,01	6,22
19	0,4	0,3	0,3	0,0	2	4,5	2,0	0,01	6,24
20	0,4	0,3	0,3	0,0	2	4,4	2,0	0,01	6,26
21	0,3	0,2	0,3	0,0	2	4,3	2,0	0,01	6,27
22	0,3	0,2	0,3	0,0	2	4,2	2,0	0,01	6,28

23	0,3	0,2	0,3	0,0	2	4,1	2,0	0,01	6,29
24	0,2	0,2	0,3	0,0	2	4	2,0	0,01	6,29
25	0,2	0,2	0,3	0,0	1,9	3,9	2,0	0,01	6,29
26	0,2	0,2	0,3	0,0	1,9	3,8	2,0	0,01	6,30
27	0,2	0,2	0,3	0,0	1,9	3,8	2,0	0,01	6,30
28	0,2	0,2	0,2	0,0	1,9	3,7	2,0	0,01	6,30
29	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,6	2,0	0,01	6,30
30	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,5	2,0	0,01	6,30
31	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,4	2,0	0,01	6,30
32	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,3	2,0	0,01	6,30
33	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,3	2,0	0,01	6,30
34	0,1	0,2	0,2	0,0	1,9	3,2	2,0	0,01	6,30
35	0,1	0,2	0,2	0,0	1,8	3,1	2,0	0,01	6,30
36	0,1	0,2	0,2	0,0	1,8	3	2,0	0,01	6,30
37	0,1	0,2	0,2	0,0	1,8	3	2,0	0,01	6,29
38	0,1	0,2	0,2	0,0	1,8	2,9	2,0	0,01	6,29
39	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,8	2,0	0,01	6,29
40	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,8	2,0	0,01	6,29
41	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,7	2,0	0,01	6,29
42	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,6	1,9	0,01	6,28
43	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,6	1,9	0,01	6,28
44	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,5	1,9	0,01	6,28
45	0,0	0,2	0,2	0,0	1,8	2,5	1,9	0,01	6,28
46	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,4	1,9	0,01	6,28
47	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,3	1,9	0,01	6,27
48	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,3	1,9	0,01	6,27
49	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,2	1,9	0,01	6,27
50	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,2	1,9	0,01	6,27
51	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,1	1,9	0,00	6,27
52	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2,1	1,9	0,00	6,26
53	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2	1,9	0,00	6,26
54	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	2	1,9	0,00	6,26
55	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	1,9	1,9	0,00	6,26
56	0,0	0,2	0,2	0,0	1,7	1,9	1,9	0,00	6,26
57	0,0	0,2	0,2	0,0	1,6	1,8	1,9	0,00	6,25
58	0,0	0,2	0,2	0,0	1,6	1,8	1,9	0,00	6,25
59	0,0	0,2	0,2	0,0	1,6	1,8	1,9	0,00	6,25
60	0,0	0,2	0,2	0,0	1,6	1,7	1,9	0,00	6,25

Sumber : Hasil perhitungan model

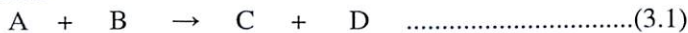


Gambar 3.3 Laju reaksi sebagai fungsi dari waktu

3.2. PEMBAHASAN

Dari Gambar 3.1 dan 3.2 nampak bahwa perubahan konsentrasi polutan terhadap waktu itu beragam, dikarenakan konsentrasi suatu polutan merupakan fungsi perubahan konsentrasi polutan tersebut dan polutan yang lain terhadap waktu (atau merupakan turunan konsentrasi polutan terhadap waktu). Kemudian bila konsentrasi awalnya (konsentrasi awal tidak sama dengan emisi, dalam hal ini karena masih merupakan simulasi sederhana, maka emisi diabaikan) diubah, maka perubahan konsentrasi polutan tersebut ikut berubah (lihat persamaan 3.13), jadi konsentrasi polutan itu merupakan fungsi dari waktu dan konsentrasi awal (lihat persamaan 3.13).

Penyelesaian persamaan kecepatan reaksi umumnya berbentuk eksponensial, misalnya untuk reaksi berorde 2, bila zat A bereaksi dengan zat B membentuk zat C dan zat D



Bila saat $t = 0$, $[A] = a$, $[B] = b$, $[C] = [D] = 0$ (belum terjadi reaksi)

Atau a dan b adalah konsentrasi awal zat A dan B

Bila $t > 0$, $[A] = a-x$, $[B] = b-x$, $[C] = [D] = x$

dimana $[A]$ adalah konsentrasi zat A, sedangkan $a-x$ adalah konsentrasi zat A ketika waktu sudah berjalan, x adalah konsentrasi zat C dan D ketika waktu sudah berjalan.

Maka kecepatan reaksi pembentukan zat C atau D berbentuk

$$\frac{dx}{dt} = k(a-x)(b-x) \dots\dots\dots(3.2)$$

(Sumber: Takahashi Katsuaki, et al., 1987)

Untuk menyelesaikan persamaan di atas, kita bisa

$$\frac{1}{(a-x)(b-x)} = \frac{X}{(a-x)} + \frac{Y}{(b-x)} \dots\dots\dots(3.3)$$

di mana

$$X(b-x)+Y(a-x)=1 \dots\dots\dots(3.4)$$

diubah menjadi

$$bX+aY-(X+Y)x=1$$

maka diperoleh

$$bX+aY=1 \dots\dots\dots(3.5)$$

dan

$$X+Y=0 \dots\dots\dots(3.6)$$

sehingga

$$X = -\frac{1}{(a-b)} \dots\dots\dots(3.7)$$

$$Y = \frac{1}{(a-b)} \dots\dots\dots(3.8)$$

maka untuk mengintegalkan persamaan (3.2) diperoleh

$$\frac{1}{a-b} \int \left(-\frac{1}{a-x} + \frac{1}{b-x} \right) dx = k \int dt \dots\dots\dots(3.9)$$

solusi dari persamaan (3.9) adalah seperti berikut ini

$$\frac{1}{a-b} (\ln(a-x) - \ln(b-x)) = kt + c \dots\dots\dots(3.10)$$

dengan memasukkan syarat batas yakni jika t=0 maka x=0 pada persamaan (3.10) diperoleh

$$c = \frac{1}{a-b} \ln \frac{a}{b} \dots\dots\dots(3.11)$$

sehingga persamaan (3.10) menjadi

$$\frac{1}{a-b} \ln \frac{b(a-x)}{a(b-x)} = kt \dots\dots\dots(3.12)$$

bila x dikeluarkan dari persamaan (3.12) maka

$$x = \frac{ab(e^{kt(a-b)} - 1)}{ae^{kt(a-b)} - b} \dots\dots\dots(3.13)$$

Dari gambar 3.3 nampak bahwa laju reaksi total untuk tiap polutan berbeda-beda. Ada yang positif, ada yang negatif, ada pula yang berfluktuasi (untuk lebih jelasnya lihat Tabel 3.3). Ini bisa terjadi karena laju reaksi suatu zat tergantung dari konsentrasi yang lain yang menyusunnya, yang mana konsentrasi tersebut selalu berubah setiap waktu seperti ditunjukkan persamaan 2.1 sampai dengan persamaan 2.38. Bila laju total reaksi suatu zat adalah negatif, dan nilainya semakin membesar (nilai negatifnya semakin mengecil), maka konsentrasi zat tersebut semakin menurun (lihat SO₂ dan NO₃), tetapi apabila laju total reaksi suatu zat adalah positif dan nilainya semakin mengecil, maka konsentrasi zat tersebut semakin membesar (lihat HNO₃).

Tabel 3.3 Laju reaksi total

T [det]	dSO ₂ /dt	dNO/dt	dNO ₂ /dt	dO ₂ /dt	dCO/dt	dCH ₄ /dt
1	-0,2	0,08	-2.000	0,0003	-0,1	-0,00081
2	-0,3	0,06	0,4	-0,009	-0,2	-0,0012
3	-0,2	0,05	-0,04	-0,008	-0,1	-0,0011
4	-0,2	0,04	-0,08	-0,009	-0,1	-0,0012
5	-0,2	0,03	-0,06	-0,009	-0,1	-0,0012
6	-0,2	0,02	-0,05	-0,01	-0,1	-0,0012
7	-0,2	0,02	-0,04	-0,01	-0,1	-0,0012
8	-0,1	0,01	-0,03	-0,01	-0,1	-0,0012
9	-0,1	0,007	-0,02	-0,01	-0,1	-0,0012
10	-0,1	0,004	-0,02	-0,01	-0,1	-0,0012
11	-0,1	0,002	-0,01	-0,01	-0,1	-0,0012
12	-0,1	0,0004	-0,01	-0,01	-0,1	-0,0012

13	-0,09	-0,001	-0,008	-0,01	-0,1	-0,0012
14	-0,08	-0,002	-0,006	-0,01	-0,1	-0,0012
15	-0,07	-0,003	-0,005	-0,01	-0,1	-0,0012
16	-0,07	-0,003	-0,004	-0,01	-0,1	-0,0012
17	-0,06	-0,004	-0,003	-0,01	-0,1	-0,0012
18	-0,05	-0,004	-0,003	-0,01	-0,1	-0,0012
19	-0,05	-0,005	-0,002	-0,01	-0,1	-0,0012
20	-0,04	-0,005	-0,002	-0,01	-0,1	-0,0012
21	-0,04	-0,005	-0,001	-0,01	-0,1	-0,0012
22	-0,03	-0,005	-0,001	-0,01	-0,1	-0,0012
23	-0,03	-0,005	-0,0009	-0,01	-0,1	-0,0012
24	-0,03	-0,005	-0,0008	-0,01	-0,1	-0,0012
25	-0,02	-0,005	-0,0006	-0,01	-0,09	-0,0012
26	-0,02	-0,005	-0,0005	-0,01	-0,09	-0,0012
27	-0,02	-0,005	-0,0004	-0,01	-0,09	-0,0012
28	-0,02	-0,005	-0,0003	-0,01	-0,09	-0,0012
29	-0,02	-0,004	-0,0003	-0,01	-0,09	-0,0012
30	-0,01	-0,004	-0,0002	-0,01	-0,08	-0,0012
31	-0,01	-0,004	-0,0002	-0,01	-0,08	-0,0012
32	-0,01	-0,004	-0,0002	-0,01	-0,08	-0,0012
33	-0,01	-0,004	-0,0001	-0,01	-0,08	-0,0012
34	-0,01	-0,004	-0,0001	-0,01	-0,08	-0,0012
35	-0,009	-0,004	-0,0001	-0,01	-0,07	-0,0012
36	-0,008	-0,004	-0,00009	-0,01	-0,07	-0,0012
37	-0,007	-0,004	-0,00008	-0,01	-0,07	-0,0012
38	-0,006	-0,003	-0,00007	-0,01	-0,07	-0,0012
39	-0,006	-0,003	-0,00007	-0,009	-0,07	-0,0012
40	-0,005	-0,003	-0,00006	-0,009	-0,07	-0,0012
41	-0,004	-0,003	-0,00005	-0,009	-0,06	-0,0012
42	-0,004	-0,003	-0,00005	-0,009	-0,06	-0,0012
43	-0,004	-0,003	-0,00005	-0,009	-0,06	-0,0012
44	-0,003	-0,003	-0,00004	-0,009	-0,06	-0,0012
45	-0,003	-0,003	-0,00004	-0,009	-0,06	-0,0012
46	-0,003	-0,003	-0,00004	-0,009	-0,06	-0,0012
47	-0,002	-0,003	-0,00004	-0,009	-0,06	-0,0012
48	-0,002	-0,003	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
49	-0,002	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
50	-0,002	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
51	-0,002	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
52	-0,001	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
53	-0,001	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
54	-0,001	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
55	-0,001	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012
56	-0,0009	-0,002	-0,00003	-0,009	-0,05	-0,0012

57	-0,0008	-0,002	-0,00002	-0,009	-0,04	-0,0012
58	-0,0007	-0,002	-0,00002	-0,009	-0,04	-0,0012
59	-0,0006	-0,002	-0,00002	-0,009	-0,04	-0,0012
60	-0,0006	-0,002	-0,00002	-0,009	-0,04	-0,0012

Sumber : Hasil perhitungan model

4. KESIMPULAN

Dari hasil dan pembahasan, maka dapat ditarik kesimpulan sebagai berikut :

1. Konsentrasi NO merupakan fungsi dari konsentrasi NO, HO₂, NH₂, NO₃ dan NO₂ yang mana dalam simulasi ini konsentrasinya semakin membesar dari 0 ppb menjadi 15,8 ppb dalam waktu 1 menit.
2. Bila laju total reaksi suatu zat adalah negatif, dan nilainya semakin membesar, maka konsentrasi zat tersebut semakin menurun.
3. Apabila laju total reaksi suatu zat adalah positif dan nilainya semakin mengecil, maka konsentrasi zat tersebut semakin membesar.

DAFTAR PUSTAKA

- Jerome O. Nriagu, 1978 : Sulfur in the environment, pp. 299-321.
 Kobayashi Masamitsu, Syouwa 60 : Koutou Gakkaou Kagaku,
 Suuken Syuppang Kabusiki Kaisya, pp. 91 – 95, Syouwa 60.
 Ootake Tsutao, 1990 : Kagaku kougaku, Iwanami Syouten, pp. 18 – 28, Tokyo, 1990.
 Takahashi Katsuaki, at al , 1987 : Gendai no butsurei kagaku I, Asa Kusa Syouten, pp. 229 -238, Tokyo 1987.