

**MODEL KINETIKA REAKSI BERTINGKAT
UNTUK SINTESA BIODIESEL**

SKRIPSI

Oleh

M. AKBAR
04 02 06 0384



**DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS INDONESIA
GENAP 2007/2008**

**MODEL KINETIKA REAKSI BERTINGKAT
UNTUK SINTESA BIODIESEL**

SKRIPSI

Oleh

M. AKBAR
04 02 06 0384



**SKRIPSI INI DIAJUKAN UNTUK MELENGKAPI SEBAGIAN
PERSYARATAN MENJADI SARJANA TEKNIK**

**DEPARTEMEN TEKNIK KIMIA
FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS INDONESIA
GENAP 2007/2008**

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi dengan judul :

MODEL KINETIKA REAKSI BERTINGKAT UNTUK SINTESA BIODIESEL

yang dibuat untuk melengkapi sebagian persyaratan menjadi Sarjana Teknik pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, sejauh yang saya ketahui bukan merupakan tiruan atau duplikasi dari skripsi yang sudah dipublikasikan dan atau pernah dipakai untuk mendapatkan gelar kesarjanaan di lingkungan Universitas Indonesia maupun di Perguruan Tinggi atau Instansi manapun, kecuali bagian yang sumber informasinya dicantumkan sebagaimana mestinya.

DEPOK, 27 Juni 2008

(M. Akbar)
NPM. 0402060384

PENGESAHAN

Skripsi dengan judul :

MODEL KINETIKA REAKSI BERTINGKAT UNTUK SINTESA BIODIESEL

Oleh :

M. AKBAR

0402060384

Dibuat untuk melengkapi sebagian persyaratan menjadi Sarjana Teknik pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia. Skripsi ini telah diujikan pada tanggal 9 Juli 2008 dan dinyatakan memenuhi syarat/sah sebagai skripsi pada Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia.

Depok, 18 Juli 2008

Mengetahui,

Dosen pembimbing

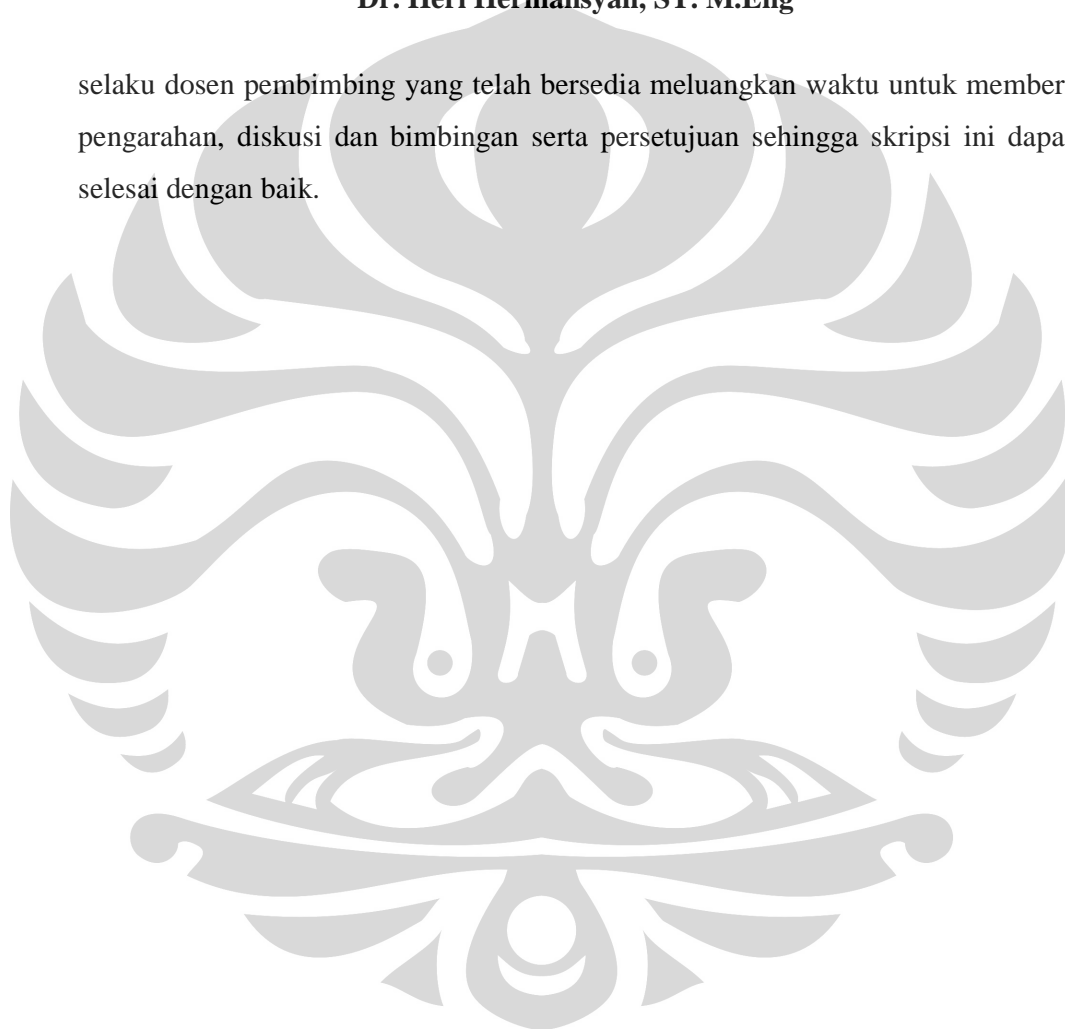
Dr. Heri Hermansyah, ST. M.Eng
NIP. 132 233 311

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada :

Dr. Heri Hermansyah, ST. M.Eng

selaku dosen pembimbing yang telah bersedia meluangkan waktu untuk memberi pengarahan, diskusi dan bimbingan serta persetujuan sehingga skripsi ini dapat selesai dengan baik.



ABSTRAK

M. Akbar NPM 04 02 06 038 4 Departemen Teknik Kimia	Dosen Pembimbing Dr. Heri Hermansyah, ST. M.Eng
MODEL KINETIKA REAKSI BERTINGKAT UNTUK SINTESA BIODIESEL	
ABSTRAK <p>Masalah kelangkaan energi dan semakin mahalnya energi fosil di dunia membuat produk energi alternatif seperti biodiesel menjadi semakin menarik dan diperlukan. Hal ini telah mendorong dilakukannya banyak penelitian untuk mempelajari proses produksi biodiesel dan hal-hal lain yang melingkupinya.</p> <p>Biodiesel diproduksi terutama lewat proses transesterifikasi, yaitu reaksi antara minyak nabati dan alkohol dengan menggunakan katalis alkali, asam, ataupun enzim. Banyak penelitian telah dilakukan untuk mempelajari variabel – variabel yang mempengaruhi jalannya reaksi transesterifikasi, tetapi usaha untuk memodelkan reaksi ini secara kinetika belum banyak tersentuh. Karena itu dalam penelitian ini akan coba dibuat suatu model kinetika reaksi transesterifikasi menggunakan mekanisme reaksi kimia bertingkat. Beberapa usaha pemodelan reaksi transesterifikasi yang telah dilakukan sebelumnya menggunakan metode yang spesifik terhadap jenis katalis reaksi yang digunakan. Sementara model reaksi bertingkat ini bersifat umum dan dapat diterapkan pada berbagai kondisi reaksi. Kevalidan model ini akan diuji lewat penerapan pada beberapa data penelitian transesterifikasi yang telah dipublikasikan sebelumnya di beberapa jurnal ilmiah. Hasil pemodelan menunjukkan bahwa mekanisme reaksi bertingkat mampu untuk memodelkan reaksi transesterifikasi tetapi dengan tingkat keakuratan yang tidak terlalu baik. Dengan demikian, sepertinya model ini masih perlu disempurnakan lagi.</p>	
Kata kunci : Biodiesel, Transesterifikasi, Model kinetika reaksi bertingkat.	

ABSTRACT

M. Akbar
NPM 04 02 06 038 4
Chemical Engineering Departement

Counsellor
Dr. Heri Hermansyah, ST. M.Eng

STEPWISE REACTION MODEL FOR SYNTHESIS OF BIODIESEL

ABSTRACT

The energy scarcity problem and the raising price of fuel from fossil has made the need for an alternative energy product like biodiesel becomes greater. This need has motivated many scientist to do a research on biodiesel production.

Biodiesel is produced through transesterification process where the vegetable oil and alcohol is reacted by means of alkali, acid, or enzyme catalyst. There have been many researches conducted to study the variables which influence the transesterification process, but not so many efforts has been done to put this process kinetically into a model. For that reason, on this research, a kinetic model of the transesterification process is to be made using stepwise chemical reaction mechanism. The validity of this model will be tested through application of a couple of series of transesterification researches data which have already been published on some scientific journals before. The result of the modeling shows that stepwise reaction mechanism is able to predict and model the transesterification reaction but not in fine accuracy. Thus, this stepwise model needs to be perfected.

Keywords : Biodiesel, Transesterification, Stepwise kinetic model.

DAFTAR ISI

PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	i
PENGESAHAN.....	ii
UCAPAN TERIMA KASIH.....	iii
ABSTRAK.....	iv
ABSTRACT.....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 LATAR BELAKANG.....	1
1.2 RUMUSAN MASALAH.....	2
1.3 TUJUAN PENELITIAN.....	3
1.4 SISTEMATIKA PENULISAN.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 BIODIESEL.....	4
2.2 TRANSESTERIFIKASI.....	5
2.3 KINETIKA REAKSI.....	13
2.3.1 Kinetika Reaksi Bertingkat.....	13
2.3.2 Kinetika Reaksi Katalisis Enzim.....	15
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	21
3.1 DIAGRAM ALIR PENELITIAN.....	21
3.2 MODEL REAKSI.....	22
3.3 PENURUNAN MODEL REAKSI.....	23
3.4 DATA EKSPERIMEN.....	25
3.5 ESTIMASI PARAMETER.....	30

3.6	SIMULASI.....	32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		33
4.1	HASIL FITTING KURVA DAN ESTIMASI PARAMETER.....	33
4.1.1	Hasil Fitting Kurva	33
4.1.2	Hasil Estimasi Konstanta Laju Reaksi.....	40
4.2	ANALISA NERACA MASSA	43
4.3	ANALISA KOMPONEN	45
4.4	ANALISA HASIL ESTIMASI NILAI KONSTANTA LAJU REAKSI	50
4.5	PERBANDINGAN EFEK KATALIS.....	52
4.6	ANALISA SENSITIVITAS	53
4.7	SIMULASI KONSENTRASI GLISEROL	57
BAB V KESIMPULAN.....		61
DAFTAR ACUAN		62
DAFTAR PUSTAKA.....		65
LAMPIRAN.....		68

DAFTAR GAMBAR

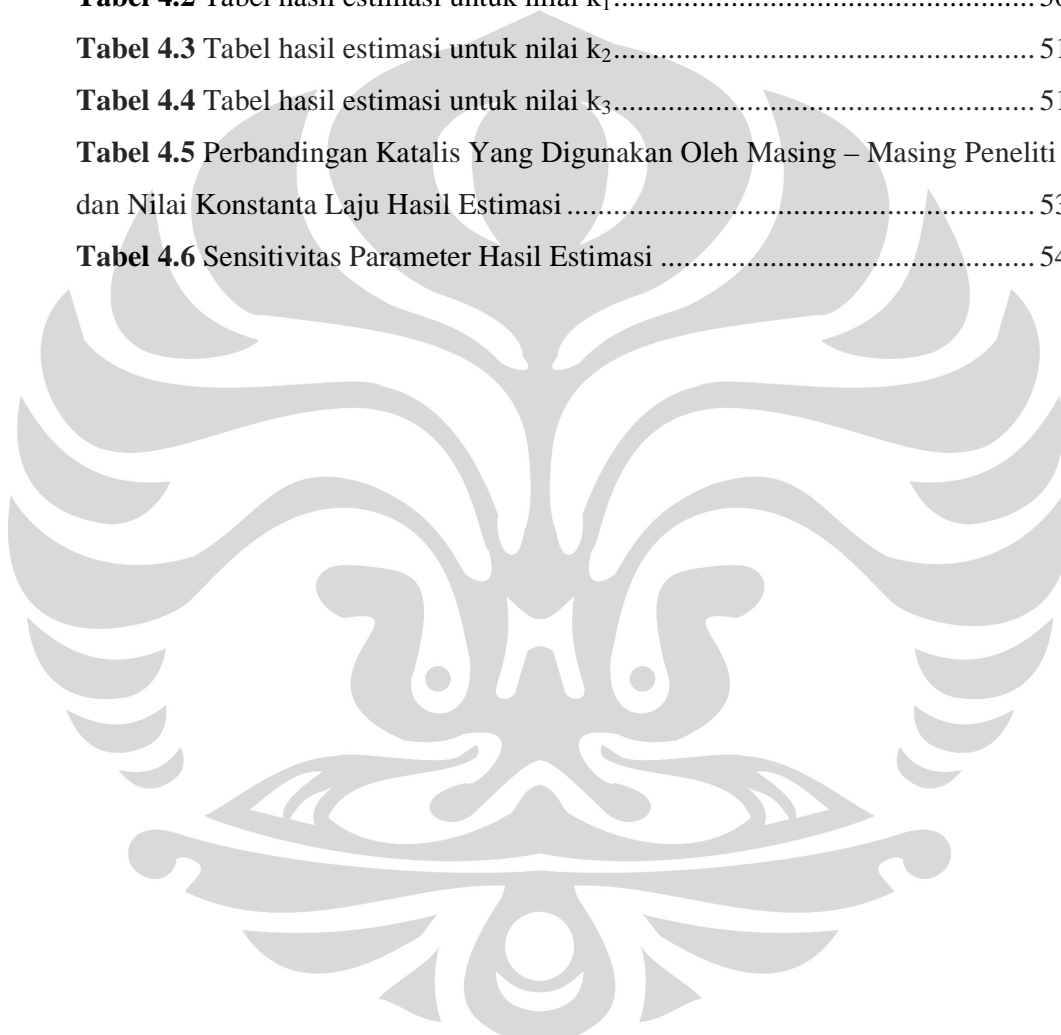
Gambar 2.1	Reaksi transesterifikasi dari trigliserida dengan alkohol	5
Gambar 2.2	Proses reaksi transesterifikasi dari minyak nabati	6
Gambar 2.3	Mekanisme reaksi transesterifikasi berkatalis alkali	8
Gambar 2.4	Reaksi berseri dengan tiga tahapan	13
Gambar 2.5	Skema reaksi enzimatik dengan satu substrat	16
Gambar 2.6	Laju reaksi versus konsentrasi substrat untuk reaksi yang mengikuti kinetika Michaelis-Menten	17
Gambar 2.7	Skema reaksi enzimatik dengan dua substrat	18
Gambar 2.8	Mekanisme kompleks terner acak	19
Gambar 2.9	Mekanisme kompleks terner teratur	20
Gambar 2.10	Mekanisme ping pong bi	20
Gambar 3.1	Diagram alir penelitian	21
Gambar 3.2	Skema reaksi transesterifikasi dengan mekanisme bertingkat	23
Gambar 3.3	Diagram alir prosedur kalkulasi konstanta model	31
Gambar 4.1	Hasil fitting model terhadap data pertama	33
Gambar 4.2	Hasil fitting model terhadap data kedua	34
Gambar 4.3	Hasil fitting model terhadap data ketiga	34
Gambar 4.4	Hasil fitting model terhadap data keempat	34
Gambar 4.5	Hasil fitting model terhadap data kelima	35
Gambar 4.6	Hasil fitting model terhadap data keenam	35
Gambar 4.10	Perbandingan konsentrasi trigliserida	46
Gambar 4.11	Perbandingan konsentrasi digliserida	47
Gambar 4.12	Perbandingan konsentrasi monogliserida	48
Gambar 4.13	Perbandingan konsentrasi biodiesel	49
Gambar 4.14	Grafik sensitivitas k_1	56
Gambar 4.15	Grafik sensitivitas k_2	56
Gambar 4.16	Grafik sensitivitas k_3	56
Gambar 4.17	Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data pertama	57

Gambar 4.18 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kedua 57
Gambar 4.19 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data ketiga 58
Gambar 4.20 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data keempat 58
Gambar 4.21 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kelima 58
Gambar 4.22 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data keenam 59
Gambar 4.23 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data ketujuh 59
Gambar 4.24 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kedelapan 59
Gambar 4.25 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kesembilan 60



DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Hasil perhitungan neraca massa	44
Tabel 4.2 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_1	50
Tabel 4.3 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_2	51
Tabel 4.4 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_3	51
Tabel 4.5 Perbandingan Katalis Yang Digunakan Oleh Masing – Masing Peneliti dan Nilai Konstanta Laju Hasil Estimasi	53
Tabel 4.6 Sensitivitas Parameter Hasil Estimasi	54



DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1 Perhitungan Fitting Untuk Data Pertama	68
Lampiran 2 Perhitungan Fitting Untuk Data Kedua	71
Lampiran 3 Perhitungan Fitting Untuk Data Ketiga	74
Lampiran 4 Perhitungan Fitting Untuk Data Keempat	77
Lampiran 5 Perhitungan Fitting Untuk Data Kelima	79
Lampiran 6 Perhitungan Fitting Untuk Data Keenam	81
Lampiran 7 Perhitungan Fitting Untuk Data Ketujuh	84
Lampiran 8 Perhitungan Fitting Untuk Data Kedelapan	87
Lampiran 9 Perhitungan Fitting Untuk Data Kesembilan	89
Lampiran 10 Contoh Perhitungan Neraca Massa	92

BAB I

PENDAHULUAN

Pada bab ini akan dijelaskan mengenai latar belakang dilakukannya penelitian tentang pemodelan reaksi produksi biodiesel dengan menggunakan biokatalis. Disini juga akan dijelaskan mengenai rumusan masalah, tujuan penelitian, serta sistematika penelitian.

1.1 LATAR BELAKANG

Selama puluhan tahun sejak pertama kali ditemukannya, mesin diesel telah banyak diaplikasikan dalam berbagai bidang kehidupan seperti agrikultur, konstruksi, industri, dan transportasi. Namun seiring makin mahal dan langkanya minyak bumi, serta maraknya masalah lingkungan mengenai emisi gas buang mesin diesel dan semakin meningkatnya suhu bumi akibat pemanasan global, dibutuhkan sebuah bahan bakar alternatif baru yang memiliki potensi menggantikan peran vital minyak diesel dalam kehidupan manusia sekaligus mampu meredam semua efek negatif yang selama ini disebabkan. Solusi itu hadir dalam bentuk biodiesel.

Fatty Acid Methyl Ester (FAME) atau yang biasa disebut dengan biodiesel merupakan sumber energi alternatif yang menjanjikan. Saat ini biodiesel diproduksi secara komersial melalui proses transesterifikasi antara minyak atau lemak dengan alkohol, biasanya metanol. Dengan bantuan katalis asam atau basa, dalam transesterifikasi terjadi proses pemindahan asam lemak gliserida dari gliserol ke metanol untuk menghasilkan FAME dan gliserol. Namun terdapat beberapa kelemahan dalam reaksi katalis berbasis alkali atau asam, yaitu kesulitan untuk rekoveri gliserol, kebutuhan untuk memisahkan garam residu yang terbentuk, dan penggunaan energi yang relatif besar. Karena itu dibutuhkan alternatif katalis lain yang mampu mengatasi kelemahan ini.

Salah satu pilihannya adalah katalis enzim. Penggunaan katalis enzim memungkinkan untuk mensintesa alkil ester yang dibutuhkan, memberi



kemudahan dalam rekoveri gliserol, dan transesterifikasi gliserida yang bebas asam lemak [1].

Dalam proses *bioengineering*, penggunaan enzim sebagai katalis telah dilakukan untuk sekian lama. Banyak industri yang telah mengaplikasikan enzim sebagai biokatalis dalam prosesnya. Enzim lipase memiliki peran penting dalam bioteknologi modern. Lipase terkenal memiliki aktivitas yang tinggi dalam reaksi hidrolisis dan dalam kimia sintesis. Lipase dapat berperan sebagai biokatalis untuk reaksi hidrolisis, alkoholisis (transesterifikasi), asidolisis, dan aminolisis [2]. Dalam beberapa tahun belakangan ini, penggunaan lipase sebagai biokatalis dalam produksi biodiesel banyak diminati dikarenakan sifatnya yang ramah lingkungan [3].

Dalam penelitian ini, akan dicoba untuk dicari suatu model kinetika yang mampu untuk menggambarkan jalannya reaksi transesterifikasi produksi biodiesel. Studi kinetika dari reaksi transesterifikasi ini akan dapat menghasilkan parameter – parameter yang berguna untuk memprediksikan tingkat reaksi pada setiap waktu yang diinginkan dengan kondisi reaksi yang telah ditentukan sebelumnya.

Studi – studi tentang kinetika reaksi transesterifikasi telah banyak dilakukan sebelumnya [3-9]. Pada kebanyakan studi itu, model kinetika yang dipilih adalah model Ping Pong dengan inhibisi kompetitif oleh alkohol, sedangkan dalam penelitian ini akan coba dimodelkan reaksi transesterifikasi dengan mekanisme reaksi bertingkat. Model Ping Pong adalah metode yang spesifik digunakan pada reaksi yang menggunakan biokatalis saja, sedangkan mekanisme reaksi bertingkat bersifat lebih fleksibel sehingga dapat diterapkan pada reaksi transesterifikasi dengan berbagai kondisi operasi.

1.2 RUMUSAN MASALAH

Berdasarkan latar belakang yang telah diuraikan sebelumnya, maka dapat dikemukakan masalah yang akan coba dijawab lewat penelitian ini yaitu bagaimana menurunkan suatu model matematika yang dapat menggambarkan perilaku reaksi sintesa biodiesel berdasarkan kinetika reaksi bertingkat.



1.3 TUJUAN PENELITIAN

Tujuan akhir yang ingin dicapai dalam penelitian ini adalah untuk mendapatkan suatu model matematika yang dapat menggambarkan perilaku reaksi sintesa biodiesel.

1.4 SISTEMATIKA PENULISAN

Susunan penulisan dalam skripsi ini akan mengikuti sistematika sebagai berikut:

BAB I: PENDAHULUAN

Menjelaskan tentang latar belakang sebagai dasar dilakukannya penelitian, perumusan masalah, tujuan penelitian, dan sistematika penulisan.

BAB II: TINJAUAN PUSTAKA

Menguraikan landasan teori – teori dan prinsip dasar yang berkaitan dengan penelitian meliputi biodiesel, transesterifikasi, kinetika reaksi dan enzim. Tinjauan pustaka ini kiranya dapat mendukung dan mengarahkan penelitian nantinya.

BAB III: METODOLOGI PENELITIAN

Berisi penjelasan tentang hal – hal seputar pelaksanaan penelitian, meliputi diagram alir penelitian, model reaksi yang dipilih serta penurunan persamaan kinetiknya, pengestimasi parameter, dan pensimulasian kembali hasil estimasi parameter.

BAB IV: HASIL DAN PEMBAHASAN

Bab ini akan menampilkan data hasil penelitian, pengolahan data dan menyajikan pembahasan terhadap hasil yang diperoleh tersebut.

BAB V: KESIMPULAN

Berisi tentang kesimpulan penelitian secara keseluruhan serta saran yang diperlukan untuk kelanjutan penelitian berikutnya.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

Pada bab ini akan dibahas mengenai teori-teori serta hal-hal yang berhubungan dengan penelitian yang akan dilakukan. Diantaranya yaitu tentang biodiesel, reaksi transesterifikasi dan kinetiknya, jenis-jenis model kinetika reaksi transesterifikasi, dan sebagainya.

2.1 BIODIESEL

Fatty acid methyl ester (FAME) yang biasa dikenal dengan biodiesel adalah bahan bakar alternatif untuk mesin diesel yang berasal dari sumber daya hayati yang dapat diperbaharui seperti minyak tumbuhan (minyak nabati) dan lemak hewan [10]. Namun pengertian biodiesel dewasa ini cenderung kepada ester yang disintesa dari minyak nabati, karena penggunaan minyak nabati secara langsung sebagai bahan bakar masih menimbulkan masalah akibat viskositasnya yang terlalu tinggi. Minyak nabati sebagai sumber utama biodiesel dapat dipenuhi oleh berbagai macam jenis tumbuhan. Mengingat kebutuhan minyak solar yang cukup tinggi dan sifatnya yang tidak dapat diperbaharui menjadikan biodiesel sebagai bahan bakar alternatif potensial dan dapat menggantikan minyak solar [11].

Secara kimia, biodiesel didefinisikan sebagai mono alkil ester dari asam lemak rantai panjang yang diturunkan dari sumber lipida yang dapat diperbaharui. Biodiesel dapat dihasilkan melalui reaksi antara minyak nabati dengan alkohol (metanol atau etanol) dengan bantuan katalis untuk menghasilkan biodiesel.(metil atau etil ester) dan gliserin sebagai produk sampingnya. Sebagai bahan bakar mesin diesel, biodiesel dapat digunakan langsung atau terlebih dahulu dicampur dengan minyak diesel, karena karakteristiknya yang serupa dengan minyak diesel [11].

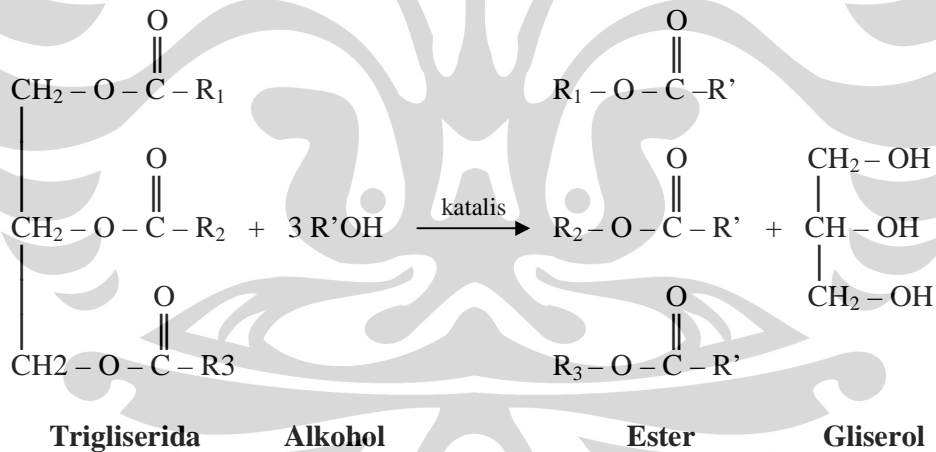
Biodiesel memiliki beberapa kelebihan dibandingkan bahan bakar konvensional antara lain berupa sifatnya yang dapat diperbaharui dan tidak



beracun[10] sehingga merupakan alternatif potensial dalam mengatasi permasalahan keterbatasan sumber energi yang berasal dari fosil. Dengan memproduksi biodiesel, negara pengimpor minyak seperti Indonesia memiliki peluang untuk mengurangi impor di tengah tingginya harga minyak mentah dewasa ini. Keuntungan lain adalah sifatnya yang lebih ramah lingkungan dibanding dengan bahan bakar fosil. Biodiesel dapat mereduksi emisi gas berbahaya seperti karbon monoksida (CO), ozon (O₃), nitrogen oksida (NO_x), sulfur oksida (SO_x), dan hidrokarbon reaktif lainnya [11].

2.2 TRANSESTERIFIKASI

Transesterifikasi (disebut juga alkoholisis) adalah reaksi antara lemak atau minyak nabati dengan alkohol untuk membentuk ester dan gliserol. Biasanya dalam reaksi ini digunakan katalis untuk meningkatkan laju reaksi dan jumlah *yield* produk. Karena reaksi ini adalah reaksi yang reversibel, maka digunakan alkohol berlebih untuk menggeser kesetimbangan ke arah produk.



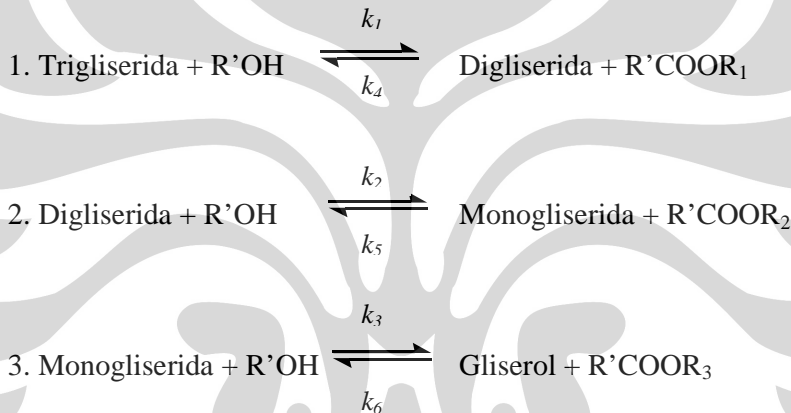
Gambar 1.1 Reaksi transesterifikasi dari trigliserida dengan alkohol [12]

R₁, R₂, dan R₃ adalah hidrokarbon panjang yang sering disebut asam lemak. R₁, R₂, dan R₃ merupakan asam lemak yang tergantung dari tipe minyak nabati. Rantainya bisa sama antar ketiganya atau berlainan. Alkohol yang digunakan juga dapat berbeda, jika metanol yang digunakan maka akan menghasilkan asam lemak metil ester, dan jika etanol yang digunakan menjadi asam lemak etil ester. Yang paling sering digunakan dalam proses produksi



biodiesel adalah metanol karena harganya yang lebih ekonomis dan memiliki kelebihan secara fisika (merupakan alkohol rantai terpendek) serta kimia (bersifat polar). Metanol dapat secara cepat bereaksi dengan trigliserida dan mampu melarutkan NaOH.

Reaksi transesterifikasi sebenarnya terdiri atas beberapa reaksi berurutan yang bersifat reversibel. Trigliserida sebagai penyusun utama minyak nabati akan terkonversi secara bertahap menjadi digliserida, monogliserida, untuk kemudian akhirnya menjadi gliserol [12]. Pada setiap tahapan ini akan dihasilkan satu mol senyawa ester. Meski reaksi bersifat reversibel, tetapi kesetimbangan alami bergerak ke arah pembentukan senyawa ester asam lemak dan gliserol. Proses ini terlihat pada gambar 2.2.



Gambar 2.2 Proses reaksi transesterifikasi dari minyak nabati menjadi ester dan gliserol [12]

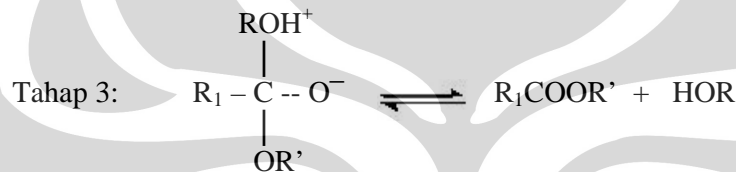
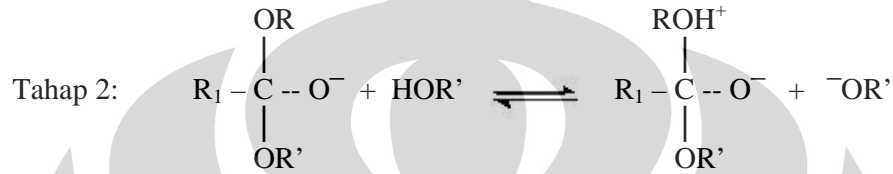
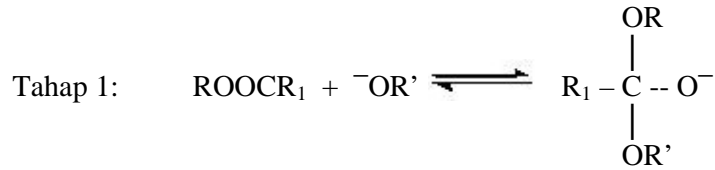
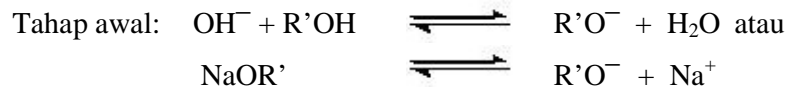
Agar suatu reaksi transesterifikasi dapat bereaksi sempurna, secara stoikiometri dibutuhkan alkohol dan trigliserida dengan rasio molar 3:1. Pada praktiknya, rasio yang dibutuhkan jauh lebih tinggi untuk mendorong terbentuknya ester secara maksimum.

Ada beberapa pilihan katalis reaksi yang dapat digunakan dalam proses transesterifikasi ini, antara lain berupa alkali, katalis asam, atau enzim. Katalis alkali yang biasa digunakan antara lain NaOH, KOH, karbonat, sodium metoksida, sodium etoksida, sodium propoksida, dan sodium butoksida. Katalis asam yang biasa digunakan antara lain asam sulfat, asam sulfonat, dan asam hidroklorida. Sedangkan sebagai katalis enzim dalam proses transesterifikasi biasa digunakan lipase.



Reaksi transesterifikasi berkatalis alkali berlangsung lebih cepat dibandingkan reaksi transesterifikasi yang berkatalis asam, sehingga katalis alkali paling sering digunakan dalam proses yang komersial. Pada transesterifikasi berkatalis alkali, gliserida dan alkohol yang digunakan sedapat mungkin harus berbentuk anhidrat, karena adanya air akan membuat reaksi beralih sebagian menjadi reaksi saponifikasi yang membentuk sabun [12]. Terbentuknya sabun ini akan menurunkan jumlah produksi ester serta menyulitkan dalam proses separasi antara ester, gliserol, dan air pencuci. Dalam reaksi transesterifikasi dengan katalis alkali juga dibutuhkan trigliserida yang memiliki kandungan asam lemak bebas (*free fatty acid / FFA*) yang rendah. Jika trigliserida mengandung banyak air dan asam lemak bebas, maka yang cocok digunakan adalah katalis asam [12]. Trigliserida dengan kandungan air serta asam lemak bebas yang tinggi dapat dipurifikasi terlebih dahulu dengan saponifikasi (dikenal dengan proses perlakuan alkali), baru kemudian dilakukan transesterifikasi menggunakan katalis alkali.

Mekanisme reaksi untuk transesterifikasi berkatalis alkali telah diformulasikan dalam 3 tahap [12]. Tahap pertama adalah serangan terhadap atom karbon karbonil pada molekul trigliserida oleh anion dari alkohol (ion metoksida) untuk membentuk senyawa intermediet tetrahedral. Tahap kedua adalah bereaksinya alkohol (metanol) dengan senyawa intermediet tetrahedral tersebut untuk menghasilkan kembali anion dari alkohol (ion metoksida). Pada tahap terakhir, terjadi pengaturan ulang senyawa intermediet tetrahedral yang menghasilkan terbentuknya senyawa ester asam lemak dan digliserida. Proses pembentukan monogliserida dari digliserida, lalu pembentukan gliserol berlangsung dengan mekanisme yang sama. Gambaran mekanisme ini dapat dilihat pada Gambar 2.3.



Gambar 3.3 Mekanisme reaksi transesterifikasi berkatalis alkali dari trigliserida dengan alkohol [12]

Sebagai tambahan dari model model tiga tahapan reaksi elementer yang telah dijabarkan sebelumnya, hipotesa lain menyatakan bahwa pada saat yang bersamaan terjadi reaksi *shunt*, yaitu bereaksinya molekul trigliserida secara langsung dengan tiga molekul metanol untuk menghasilkan tiga molekul metil ester [17]. Namun Nouredini dan Zhu [5] dalam studi mereka tentang kinetika transesterifikasi minyak kedelai menyatakan bahwa dengan atau tanpa memperhitungkan terjadinya reaksi *shunt*, hasil pemodelan akan memperoleh hasil yang sama baiknya. Jadi tidak terlalu penting untuk memperhitungkan terjadinya mekanisme reaksi *shunt* ini.

Transesterifikasi dari minyak kedelai dan metanol atau 1-butanol berjalan menurut kinetika reaksi pseudo orde satu atau kinetika orde dua tergantung dari rasio molar alkohol terhadap minyak kedelai yang digunakan. [17], sementara reaksi baliknya berorde dua [5]. Dalam kasus reaksi transesterifikasi minyak palem dengan metanol menggunakan katalis KOH [22], lagi – lagi tiga tahapan reaksi elementer yang diusulkan. Namun, hanya data sampai menit ke 30 saja yang diperhitungkan, dan setiap tahap dimodelkan sebagai reaksi irreversibel



berorde dua terhadap konsentrasi gliserida yang bersangkutan. Kusdiana dan Saka [23] meneliti reaksi transesterifikasi dari minyak *rapeseed* menggunakan metanol superkritis tanpa tambahan katalis. Digunakan temperatur setinggi 500 °C, dan laju reaksi transesterifikasi dimodelkan sebagai reaksi orde satu terhadap konsentrasi minyak.

Jika KOH, NaOH, K₂CO₃ atau katalis yang sejenisnya dicampurkan ke dalam alkohol, maka yang akan terbentuk adalah gugus alkoksida [12]. Sejumlah kecil air akan terbentuk dalam reaksi yang dapat menyebabkan pembentukan sabun selama transesterifikasi.

Freedman et.al.[17] telah meneliti kinetika reaksi transesterifikasi dari minyak kedelai. Hasilnya transesterifikasi dengan kondisi rasio 30:1 antara butanol dan minyak kedelai (MK), 1% H₂SO₄ serta temperatur 77 – 117 °C berupa kurva berbentuk S yang menunjukkan reaksi dimulai dengan laju yang lambat, kemudian semakin cepat dan melambat kembali saat mendekati akhir reaksi. Dengan menggunakan katalis asam atau katalis alkali, reaksi berjalan maju mengikuti kinetika reaksi bertingkat pseudo-orde satu untuk kondisi butanol:MK = 30:1. Sedangkan, dengan menggunakan katalis alkali reaksi berjalan maju mengikuti kinetika reaksi bertingkat orde dua untuk kondisi butanol:MK = 6:1.

Reaksi metanol dan MK dengan perbandingan molar 6:1 bersama 0.5% sodium metoksida pada temperatur 20 – 60 °C merupakan kombinasi antara reaksi bertingkat orde dua dan reaksi *shunt* orde empat. Nilai konstanta laju reaksi pada reaksi yang berkataliskan alkali jauh lebih tinggi daripada yang berkataliskan asam. Nilai konstanta laju juga meningkat seiring dengan peningkatan jumlah katalis yang digunakan. Nilai energi aktivasi (E_a) bervariasi antara 8 sampai 20 kcal/mol. E_a untuk reaksi *shunt* antara trigliserida-gliserol sebesar 20 kcal/mol.

Saat reaksi transesterifikasi berakhir, produk yang diperoleh berupa campuran senyawa ester, gliserol, alkohol, katalis, dan tri-, di-, serta monogliserida. Proses memperoleh produk ester murni tidaklah mudah, mengingat masih terdapatnya pengotor di dalam ester berupa di- dan monogliserida. Monogliserida menyebabkan tingginya turbiditas dalam campuran ester. Masalah ini terutama terjadi pada transesterifikasi lemak hewani seperti lemak sapi. Pengotor-pengotor itu dapat menaikkan nilai *cloud point* dan *pour point* dari



produk. Produk lain seperti gliserol perlu direkoveri disebabkan nilainya yang tinggi sebagai bahan baku dalam dalam industri kimia.

Transesterifikasi adalah suatu proses yang digunakan untuk memproduksi bahan bakar diesel seperti yang dilakukan di Eropa dan Amerika. Proses ini juga digunakan untuk membuat senyawa metil ester yang digunakan sebagai bahan baku deterjen dan kosmetik.

2.2.4.1 Efek katalis

Katalis reaksi transesterifikasi terbagi atas katalis alkali, katalis asam, dan enzim. Reaksi transesterifikasi dengan katalis alkali berlangsung lebih cepat sehingga biodiesel komersial biasanya menggunakan proses dengan katalis alkali untuk proses transesterifikasinya. Namun terdapat beberapa kelemahan dalam reaksi katalis berbasis alkali, yaitu kesulitan untuk *recovery* gliserol, kebutuhan untuk memisahkan garam residu yang terbentuk, dan penggunaan energi yang relatif besar. Beberapa pendekatan katalis menggunakan katalis asam [18] dan enzim [19] telah diujicobakan. Penggunaan katalis asam dapat menghasilkan kandungan yang cukup tinggi, namun reaksi konversi trigliserida menjadi metil ester berjalan dengan laju yang sangat lambat. Penggunaan enzim sebagai katalis memperlihatkan hasil kandungan *free fatty acid* yang cukup tinggi. Penggunaan katalis enzim memungkinkan untuk mensintesa alkil ester yang diinginkan, memberi kemudahan dalam *recovery* gliserol, dan transesterifikasi gliserida yang bebas asam lemak [1]. Namun harga enzim komersial biasanya sangat tinggi karena proses produksinya yang sulit dan memakan waktu.

Enzim yang dapat digunakan sebagai katalis dalam produksi biodiesel adalah enzim yang dapat memotong atau memecah lemak. Karena itu lipase dapat digunakan sebagai katalis karena lipase merupakan enzim pemecah lemak. Lipase yang digunakan harus merupakan lipase yang menyerang semua gugus asam lemak. Penyerangan pada salah satu gugus saja akan menghasilkan diasilgliserol maupun monoasilgliserol. Dalam reaksi produksi biodiesel, dibutuhkan pemutusan seluruh rantai lemak agar lemak yang terputus dapat berikatan dengan alkohol sehingga membentuk alkil ester (biodiesel).



Baru - baru ini telah diteliti penggunaan enzim lipase ter-immobilisasi sebagai katalis dalam metanolisis minyak jagung dengan konversi ester yang dihasilkan lebih dari 98% [12].

2.2.4.2 Efek waktu reaksi

Nilai konversi akan meningkat seiring dengan lamanya waktu reaksi. Freedman et al.[17] telah melakukan transesterifikasi minyak bunga matahari dan kacang kedelai pada kondisi rasio metanol dan minyak 6:1, katalis sodium metoksida serta temperatur 60 °C. 80% hasil telah diperoleh hanya dalam 1 menit waktu reaksi. Setelah 1 jam, konversi yang sama diperoleh untuk masing-masing minyak yaitu sekitar 93 – 98%. Ma et al.[12] telah mempelajari efek dari waktu reaksi pada proses transesterifikasi lemak sapi dengan metanol. Reaksi berjalan amat lambat pada menit pertama dikarenakan metanol dan lemak belum tercampur sempurna. Kemudian menit selanjutnya sampai menit ke lima reaksi berlanjut dengan cepat. Hasil ester lemak yang diperoleh bervariasi antara 1 sampai 38. Produksi lemak kemudian menurun kembali dan mencapai nilai maksimum setelah 15 menit. Jumlah di- dan monogliserida meningkat pada awal reaksi untuk kemudian menurun kembali. Pada kondisi akhir, terdapat lebih banyak sisa monogliserida dibandingkan digliserida.

2.2.4.3 Efek temperatur reaksi

Reaksi transesterifikasi dapat dilakukan pada berbagai temperatur yang berbeda, tergantung pada minyak yang digunakan. Dalam metanolisis minyak jarak, reaksi akan berjalan memuaskan pada 20 – 35 °C dengan rasio molar 6:1 sampai 12:1 dan 0.005 – 0.35% (dari berat minyak) NaOH sebagai katalis [12]. Untuk transesterifikasi minyak kedelai yang sudah disuling dengan metanol (rasio molar 6:1) menggunakan 0.1 % NaOH, digunakan 3 temperatur yang berbeda [17]. Setelah 6 menit reaksi, untuk temperatur reaksi 60, 45, dan 32 °C diperoleh ester masing – masing sebanyak 94, 87, dan 64%. Setelah 1 jam, tingkat produksi ester untuk temperatur 60 dan 45 °C berjalan secara identik, sedangkan untuk temperatur 32 °C sedikit lebih rendah. Temperatur reaksi jelas berpengaruh terhadap laju reaksi dan hasil ester yang diperoleh.



2.2.4.4 Efek kelembaban dan jumlah asam lemak bebas

Telah diketahui bahwa material awal yang akan digunakan dalam proses transesterifikasi berkatalis alkali harus memenuhi beberapa spesifikasi tertentu. Trigliserida yang akan digunakan harus memiliki nilai asam kurang dari 1 dan seluruh material sedapat mungkin bersifat anhidrat [12]. Jika nilai asamnya lebih dari 1, akan dibutuhkan lebih banyak NaOH untuk menetralisasi asam lemak bebas. Keberadaan air juga menyebabkan terbentuknya sabun, yang akan mengonsumsi katalis dan mengurangi efektivitasnya. Sabun yang terbentuk akan meningkatkan viskositas, dan menyulitkan dalam proses separasi gliserol. Ditekankan pula pentingnya minyak bersifat kering dan bebas (<0.5%) dari asam lemak bebas. Jumlah ester yang diperoleh akan berkurang secara signifikan jika kualifikasi – kualifikasi ini tidak dipenuhi.

Efek dari asam lemak bebas dan air pada proses transesterifikasi lemak sapi dengan metanol telah diselidiki oleh Ma et al. [12] yang menunjukkan bahwa untuk memperoleh tingkat konversi terbaik maka kandungan air dalam lemak sapi harus dijaga dibawah 0.06% berat dan kandungan asam lemak bebas harus tidak melebihi 0.5% berat. Dalam hal ini kandungan air menjadi variabel yang lebih penting untuk diperhatikan dibandingkan kandungan asam lemak bebas.

2.2.4.5 Efek rasio molar

Salah satu faktor penting yang dapat mempengaruhi jumlah ester yang diperoleh dalam reaksi transesterifikasi adalah rasio molar antara alkohol dan trigliserida. Rasio stoikiometris dalam reaksi transesterifikasi adalah dibutuhkan 3 mol alkohol dan 1 mol gliserida untuk memperoleh 3 mol ester asam lemak dan 1 mol gliserol. Rasio molar yang dibutuhkan dalam reaksi juga berhubungan dengan jenis katalis yang digunakan. Reaksi berkatalis asam membutuhkan rasio molar 30:1 antara butanol dan minyak kedelai, sementara reaksi berkatalis alkali hanya membutuhkan rasio molar 6:1 untuk memperoleh jumlah ester yang sama [17].

Bradshaw dan Meuly [20] menyatakan bahwa jangkauan rasio molar metanol:minyak nabati yang dapat dipraktikkan dalam reaksi transesterifikasi adalah antara 3.3 sampai 5.25:1. Rasio molar yang lebih besar akan berdampak

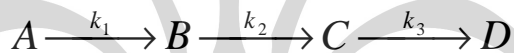


semakin tingginya tingkat konversi ester dalam waktu yang lebih singkat. Diketahui pula bahwa jika terdapat kandungan asam lemak bebas yang tinggi dalam trigliserida maka untuk mencapai konversi ester yang maksimum akan dibutuhkan rasio molar yang lebih besar pula.

2.3 KINETIKA REAKSI

2.3.1 Kinetika Reaksi Bertingkat

Reaksi irreversibel dapat didefinisikan sebagai reaksi yang berjalan satu arah saja, dimulai dengan reaktan awal kemudian menghasilkan zat intermediet atau produk akhir. Reaksi bertingkat dapat dipandang sebagai reaksi irreversibel yang berjalan secara berurutan. Reaksi bertingkat dapat diklasifikasikan ke dalam 2 jenis yaitu yang berorde satu dan gabungan orde satu serta orde dua. Reaksi bertingkat berorde satu merupakan jenis yang paling sederhana. Skema reaksi bertingkat orde satu dengan yang terdiri atas dua tahapan reaksi ditunjukkan oleh Gambar 2.4 di bawah.



Gambar 4.4 Reaksi berseri dengan tiga tahapan

Dalam kasus ini, B dan C disebut sebagai zat intermediet karena ia bukanlah produk akhir. Sebuah situasi yang mirip dengan ini dikenal dalam bidang kimia nuklir, saat terjadi penghancuran senyawa nuklir secara bertingkat. Mekanisme di atas dapat dituliskan dalam persamaan laju berikut

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \quad (2.1)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \quad (2.2)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_C \quad (2.3)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_3 C_C \quad (2.4)$$

Ketiga persamaan di atas menggambarkan perubahan konsentrasi reaktan A, zat intermediet B dan C serta produk D terhadap waktu. Persamaan (2.1) dapat langsung diintegrasikan untuk mendapatkan



$$C_A = C_{A0} \exp(-k_1 t) \quad (2.5)$$

Sedangkan konsentrasi B diperoleh dari persamaan (2.2) dengan mensubstitusikan nilai konsentrasi A yang telah diturunkan sebelumnya pada persamaan (2.5)

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_{A0} \exp(-k_1 t) - k_2 C_B \quad (2.6)$$

yang dapat ditulis ulang sebagai

$$\frac{dC_B}{dt} + k_2 C_B = k_1 C_{A0} \exp(-k_1 t) \quad (2.7)$$

Persamaan (2.7) merupakan persamaan diferensial linear orde satu dengan bentuk $\frac{dy}{dx} + Py = Q$ yang diselesaikan dengan mengalikan persamaan diferensial tersebut dengan faktor integrasi $\mu = e^{\int P dx}$ untuk menghasilkan solusi

$y = \frac{\int Q \mu dx}{\mu}$. Dalam kasus ini solusi tersebut adalah:

$$\begin{aligned} \mu &= e^{\int k_2 dt} = e^{k_2 t} \\ C_B &= \frac{\int k_1 C_{A0} e^{-k_1 t} e^{k_2 t} dt}{e^{k_2 t}} \\ C_B &= \frac{k_1 C_{A0} \int_0^t e^{(k_2 - k_1)t} dt}{e^{k_2 t}} \\ C_B &= \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)] + C_{B0} \exp(-k_2 t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Suku pertama di sebelah kanan dari persamaan (2.8) menggambarkan jumlah B yang dihasilkan dari A, sementara suku kedua memberikan B yang diperoleh jika ia hadir pada awal reaksi. Jika konsentrasi B pada awal reaksi adalah nol, maka persamaan (2.8) berkurang menjadi

$$C_B = \frac{k_1 C_{A0}}{k_2 - k_1} (\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)) \quad (2.9)$$



Jika kita substitusikan persamaan (2.9) ini ke dalam persamaan (2.3) maka akan diperoleh

$$\frac{dC_C}{dt} + k_3 C_C = \left[\frac{k_1 k_2 C_{A0}}{k_2 - k_1} \right] \exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t) \quad (2.10)$$

Dan dengan menerapkan teknik integrasi yang sama seperti sebelumnya, dapat dicari nilai konsentrasi C yaitu

$$C_C = \left[\frac{k_1 k_2 C_{A0}}{(k_2 - k_1)(k_3 - k_1)} \right] \exp(-k_1 t) + \left[\frac{k_1 k_2 C_{A0}}{(k_1 - k_2)(k_3 - k_2)} \right] \exp(-k_2 t) + \left[\frac{k_1 k_2 C_{A0}}{(k_1 - k_3)(k_2 - k_3)} \right] \exp(-k_3 t) \quad (2.11)$$

Untuk menentukan konsentrasi D bisa diperoleh dari neraca massa reaksi

$$C_{A0} = C_A + C_B + C_C + C_D \quad (2.12)$$

Sehingga $C_D = C_{A0} - (C_A + C_B + C_C)$ (2.13)

2.3.2 Kinetika Reaksi Katalisis Enzim

Enzim merupakan sebuah protein dengan berat molekul tinggi yang saling berikatan oleh ikatan peptida. Dalam fungsinya sebagai katalis reaksi, enzim dapat memangkas kebutuhan energi untuk dapat berjalannya suatu reaksi. Mekanisme ini muncul karena berikatannya reaktan (disebut juga substrat) dengan enzim membentuk suatu kompleks enzim-substrat, yang membuat substrat dengan cara tertentu menjadi lebih aktif.

Aksi enzim dalam mengkatalis sebuah reaksi menunjukkan kemiripan dengan apa yang dilakukan oleh katalis berbasis asam atau alkali, namun dengan cara yang lebih rumit.

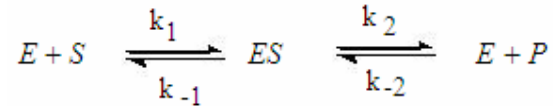
2.3.2.1 Kinetika Michaelis – Menten.

Kasus paling sederhana dari sebuah reaksi yang berkatalis enzim adalah saat hanya terdapat satu substrat tunggal saja, contohnya pada proses hidrolisis ester. Kebergantungan terhadap konsentrasi substrat dalam banyak kasus ditunjukkan oleh Gambar 2.5.

Laju reaksi bervariasi secara linear terhadap konsentrasi substrat pada saat konsentrasi rendah (kinetika orde satu), kemudian menjadi independen terhadap



konsentrasi substrat (kinetika orde nol) saat konsentrasi tinggi. Perilaku semacam ini, yang mirip dengan perilaku reaksi permukaan unimolekular, pertama kali dijelaskan oleh Michaelis & Menten dalam bentuk mekanisme



Gambar 5.5 Skema reaksi enzimatik dengan satu substrat

Di sini E dan S adalah substrat dan enzim, P merupakan produk, dan ES merupakan sebuah kompleks enzim-substrat. Dalam banyak kasus, setidaknya pada tahapan awal, konsentrasi produk sangat rendah sehingga reaksi balik yang dikarakterisasi dengan konstanta k_{-2} dapat diabaikan. Pada akhirnya, laju reaksi $k_2 C_{ES}$ dan dekomposisi $k_{-1} C_{ES}$ dari kompleks enzim-substrat akan setara dengan laju pembentukan $k_1 C_E C_S$ sehingga

$$k_1 C_E C_S = k_{-1} C_{ES} + k_2 C_{ES} \quad (2.14)$$

Konsentrasi enzim total, $C_{E, Total}$, setara dengan jumlah konsentrasi dari enzim bebas, C_E , dan enzim yang terikat dengan substrat, C_{ES} .

$$C_{E, Total} = C_E + C_{ES} \quad (2.15)$$

Dapat ditulis juga sebagai $C_E = C_{E, Total} - C_{ES}$

Dan dengan mensubstitusikan hasil ini kepada persamaan (2.14) diperoleh

$$k_1 (C_{E, Total} - C_{ES}) C_S = k_{-1} C_{ES} + k_2 C_{ES} \quad (2.16)$$

Yang dengan pengaturan ulang diperoleh

$$C_{ES} = \frac{k_1 C_S C_{E, Total}}{k_{-1} + k_2 + k_1 C_S} \quad (2.17)$$

Karena laju pembentukan produk, dituliskan sebagai v , adalah $k_2 C_{ES}$ maka

$$v = k_2 C_{ES} = \frac{k_1 k_2 C_S C_{E, Total}}{k_{-1} + k_2 + k_1 C_S} \quad (2.18)$$

$$v = \frac{k_2 C_S C_{E, Total}}{\frac{k_{-1} + k_2}{k_1} + C_S} \quad (2.19)$$

$$\text{Atau } v = \frac{k_2 C_S C_{E, Total}}{K_m + C_S} \quad (2.20)$$



Persamaan (2.20) dikenal sebagai persamaan Michaelis-Menten dan konstanta K_m , setara dengan $(k_{-1}+k_2)/k_1$, disebut konstanta Michaelis.

Saat C_S jauh sangat kecil, nilainya dapat diabaikan sebagai penyebut dalam perbandingan dengan K_m , sehingga persamaan (2.20) menjadi

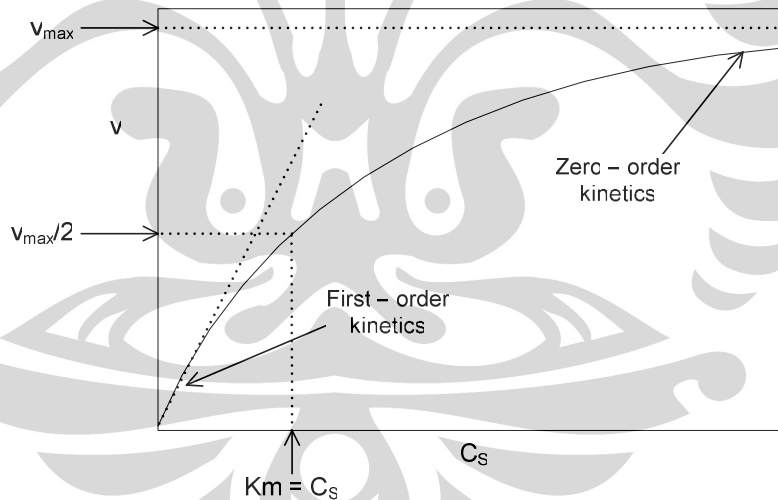
$$v = \frac{k_2 C_S C_{E,Total}}{K_m} \quad (2.21)$$

Sehingga reaksi akan mengikuti kinetika orde pertama terhadap konsentrasi substrat.

Sebaliknya saat konsentrasi substrat jauh lebih besar dibandingkan K_m , $C_S \gg K_m$, maka

$$v = k_2 C_{E,Total} \quad (2.22)$$

Sehingga reaksi akan berjalan dengan kinetika reaksi orde nol. Enzim kemudian akan jenuh terhadap substrat, dan lebih jauh kenaikan konsentrasi substrat tidak akan berdampak lagi terhadap laju reaksi. Semua fenomena ini ditunjukkan pada Gambar 2.6.



Gambar 6.6 Laju reaksi versus konsentrasi substrat untuk reaksi yang mengikuti kinetika Michaelis-Menten [21]

Persamaan (2.20) dapat ditulis sebagai

$$v = \frac{v_{max} C_S}{K_m + C_S} \quad (2.23)$$



dimana v_{\max} , setara dengan $k_2 C_{E, \text{Total}}$, merupakan laju reaksi tercepat pada konsentrasi substrat yang tinggi. Saat C_S setara dengan K_m , maka persamaan (2.23) dapat ditulis ulang menjadi

$$v = \frac{v_{\max} C_S}{C_S + C_S} = \frac{v_{\max}}{2} \quad (2.24)$$

2.3.2.2 Kinetika mekanisme kompleks terner acak

Saat reaksi terjadi antara dua spesies substrat, persamaan laju secara steady-state menjadi lebih rumit dibandingkan dengan reaksi yang hanya melibatkan satu substrat. Sebagian besar reaksi biokimiawi melibatkan sedikitnya 2 substrat sehingga enzim yang terlibat tidak hanya mengubah 1 substrat, melainkan dapat mengkatalisis perubahan 2 substrat dan menghasilkan 2 produk.



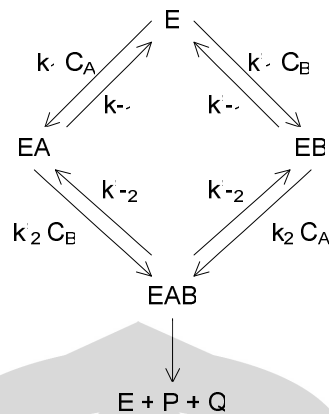
Gambar 7.7 Skema reaksi enzimatik dengan dua substrat

Terdapat tiga kemungkinan mekanisme yang dapat terjadi pada reaksi enzimatik dengan dua substrat, ketiga mekanisme ini akan dijelaskan dalam subbab berikutnya.

Mekanisme pertama yang mungkin adalah mekanisme kompleks terner acak. Dalam mekanisme ini, enzim E membentuk kompleks biner EA dan EB bersama kedua substrat A dan B. Kemudian enzim juga membentuk kompleks terner EAB dengan mengikat A atau B secara acak tanpa pengaturan. Penurunan persamaan laju untuk mekanisme ini sangat rumit. Beberapa penyederhanaan dapat dibuat dengan mengasumsikan laju perubahan EAB menjadi EA atau EB sangat lambat sehingga EA, EB dan EAB dianggap berada dalam kondisi kesetimbangan. Persamaan laju akan berkurang menjadi

$$v = \frac{V C_A C_B}{K_{1A} K_{mB} + K_{mB} C_A + K_m C_B + C_A C_B} \quad (2.25)$$

Dimana v merupakan laju reaksi, V adalah laju reaksi maksimum, K_{1A} , K_{mA} , dan K_{mB} merupakan konstanta.



Gambar 8.8 Mekanisme kompleks terner acak

Jika konsentrasi B dipertahankan konstan, variasi v terhadap C_A menjadi mirip dengan bentuk Michaelis. Hal ini dapat diperlihatkan pada kondisi dimana B dalam kondisi yang berlebih. Karena itu jika C_B cukup besar maka dua suku pertama pada penyebut persamaan (2.25) dapat diabaikan, menghasilkan

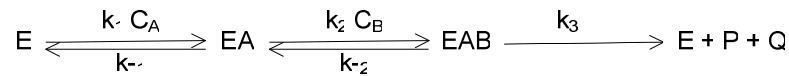
$$v = \frac{VC_A}{K_{mA} + C_A} \quad (2.26)$$

Persamaan (2.26) mirip dengan bentuk persamaan Michaelis-Menten. Dengan demikian K_{mA} merupakan konstanta Michaelis untuk substrat A dalam kondisi substrat B yang berlebih. Mirip dengan itu, jika A dalam kondisi yang berlebih maka

$$v = \frac{VC_B}{K_{mB} + C_B} \quad (2.27)$$

2.3.2.3 Kinetika mekanisme kompleks terner teratur

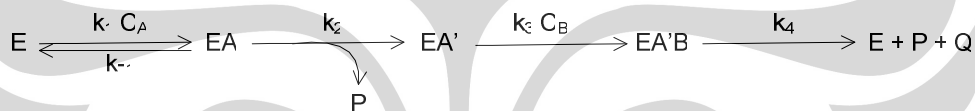
Mekanisme lain yang dapat muncul adalah mekanisme kompleks terner yang teratur. Sebagai contoh, kompleks terner EAB dapat terbentuk dari kompleks biner EA dengan tambahan B, tetapi tidak dari kompleks EB dengan tambahan A. Pada mekanisme ini substrat harus terikat dengan urutan yang khusus dan teratur. Mekanisme ini memiliki bentuk persamaan laju yang sama dengan mekanisme sebelumnya, persamaan (2.25), tetapi memiliki perbedaan pada signifikansi setiap konstantanya.



Gambar 9.9 Mekanisme kompleks terner teratur

2.3.2.3 Kinetika mekanisme Ping Pong Bi Bi

Mekanisme ketiga yang mungkin terjadi untuk reaksi dengan dua substrat disebut sebagai mekanisme ping-pong bi-bi. Dalam mekanisme ini pertama kali substrat A akan berikatan dengan enzim untuk membentuk kompleks EA yang kemudian akan menghasilkan produk pertama reaksi yaitu P sebelum terjadi reaksi kembali dengan B. B kemudian bereaksi dengan kompleks EA' untuk membentuk produk kedua yaitu Q. Secara eksperimen, mekanisme ini disebut sebagai mekanisme ping-pong bi-bi. "Bi" yang pertama mengindikasikan bahwa terdapat dua reaktan pada reaksi ini, dan "bi" yang kedua adalah untuk dua produk yang dihasilkan.



Gambar 10.10 Mekanisme ping pong bi-bi

Dengan mengaplikasikan kondisi steady-state pada mekanisme ini diperoleh persamaan laju berbentuk

$$v = \frac{V C_A C_B}{K_{mB} C_A + K_{mA} C_B + C_A C_B} \quad (2.28)$$

Persamaan ini mirip dengan persamaan (2.25) dengan menghilangkan suku pertama pada penyebutnya.

BAB III

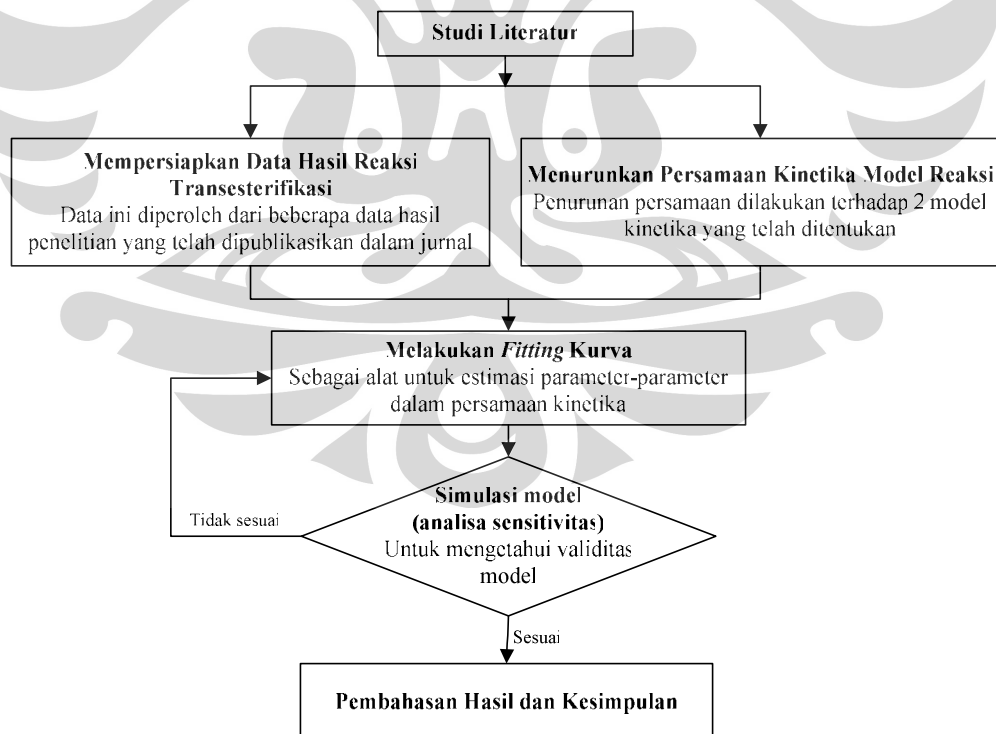
METODOLOGI PENELITIAN

Pada bab ini akan dibahas metode penelitian yang terbagi menjadi tiga tahap utama yaitu persiapan, pelaksanaan penelitian, dan yang terakhir yaitu pengolahan data. Pada bab ini juga akan dibahas mengenai model reaksi yang akan digunakan dan penurunan persamaan model reaksi tersebut, estimasi nilai parameter pada model serta simulasinya.

3.1 DIAGRAM ALIR PENELITIAN

Seperti yang telah dijelaskan sebelumnya, penelitian ini merupakan rangkaian penelitian untuk memodelkan secara kinetika reaksi produksi biodiesel (transesterifikasi).

Diagram alir untuk keseluruhan rangkaian penelitian yaitu :



Gambar 11.1 Diagram alir penelitian



Pada penelitian ini terdapat 5 pekerjaan utama yang harus dilakukan, yaitu:

1. Mencari dan mempersiapkan data hasil transesterifikasi.

Data – data hasil transesterifikasi ini bukanlah berupa data primer, tetapi merupakan data – data hasil pelaksanaan reaksi transesterifikasi yang telah dilakukan oleh peneliti lain dan dipublikasikan dalam jurnal. Data – data tersebut antara lain adalah hasil transesterifikasi yang telah dilakukan oleh Xu, et al.[3], Vicente, et al.[4], Nouredini dan Zhu [5], Marno[13], Lopez et al.[37], serta Vicente, et al.[38]. Dari peneliti Marno[13] akan diambil tiga data, dan dari Vicente, et al.[38] diambil dua set data sehingga total terdapat 9 set data yang akan coba dimodelkan.

2. Menurunkan persamaan kinetika dari model reaksi yang telah ditentukan sebelumnya.

Model kinetika yang digunakan adalah model reaksi bertingkat. Pada tahapan ini dilakukan pengolahan matematis dari persamaan kinetika sehingga diperoleh persamaan analitis yang dapat digunakan untuk memodelkan reaksi transesterifikasi.

3. Melakukan *fitting* kurva.

Pada proses *fitting* kurva, dilakukan penyesuaian antara data – data hasil transesterifikasi yang tersedia dengan model – model reaksi yang telah diturunkan persamaannya. Tujuannya adalah untuk mengestimasi parameter – parameter yang belum diketahui pada persamaan model reaksi.

4. Mensimulasikan kembali hasil pemodelan.

Tujuan dari pensimulasian adalah untuk mengetahui kevalidan nilai parameter hasil estimasi yang telah diperoleh pada langkah sebelumnya. Simulasi yang dilakukan mencakup simulasi konsentrasi produk gliserol dan analisa sensitivitas parameter hasil estimasi.

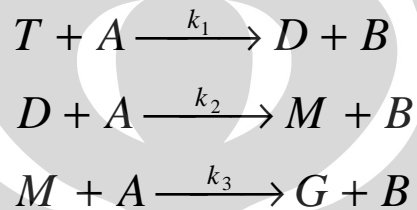
5. Pembahasan hasil penelitian dan pembuatan kesimpulan.

3.2 MODEL REAKSI

Reaksi transesterifikasi ini akan dimodelkan lewat mekanisme reaksi kimia bertingkat. Gambar 3.2 menunjukkan skema konseptual mekanisme reaksi



kimia secara bertingkat dari reaksi transesterifikasi antara trigliserida dan alkohol. Notasi T, D, M, G, A, dan B secara berturut – turut menunjukkan trigliserida, digliserida, monogliserida, gliserol, alkohol dan biodiesel. Trigliserida sebagai substrat awal akan bereaksi dengan alkohol menghasilkan digliserida, yang kemudian secara bertahap bereaksi menjadi monogliserida, dan gliserol. Biodiesel sebagai produk utama terbentuk pada setiap tahap ini. Parameter k_1 , k_2 , dan k_3 merupakan konstanta laju reaksi untuk alkoholisis trigliserida, digliserida, dan monogliserida.



Gambar 12.2 Skema reaksi transesterifikasi dengan mekanisme bertingkat [35].

3.3 PENURUNAN MODEL REAKSI

Setelah ditentukan model-model reaksi yang akan digunakan, maka dapat langsung diturunkan persamaan kinetiknya.

Pemodelan reaksi dengan mekanisme reaksi bertingkat diformulasikan dengan basis asumsi berikut:

1. Reaksi transesterifikasi berlangsung secara bertahap dengan urutan seperti pada Gambar 3.2.
2. Tiap tahapan reaksi dianggap berlangsung secara irreversibel.
3. Alkohol digunakan secara berlebih dan konsentrasinya dalam sistem dianggap konstan, sehingga setiap tahapan reaksi mengikuti kinetika reaksi orde satu.
4. Kondisi pada awal reaksi diberikan sebagai berikut:

$$t = 0, C_T = C_{T0}, C_D = 0, C_M = 0.$$

Persamaan turunan konsentrasi tiap – tiap komponen terhadap waktu dituliskan sebagai:

$$\frac{dC_T}{dt} = -k_1 C_T \quad (3.1)$$



$$\frac{dC_D}{dt} = -k_2 C_D + k_1 C_T \quad (3.2)$$

$$\frac{dC_M}{dt} = -k_3 C_M + k_2 C_D \quad (3.3)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_T + k_2 C_D + k_3 C_M \quad (3.4)$$

$$\frac{dC_G}{dt} = k_3 C_M \quad (3.5)$$

Pada persamaan di atas C_i merupakan konsentrasi dari masing – masing komponen i. Kondisi pada awal reaksi diberikan sebagai :

$$t = 0, C_T = C_{T0}, C_D = 0, C_M = 0 \quad (3.6)$$

Selanjutnya diturunkan persamaan analitis yang nantinya akan digunakan dalam proses *fitting* kurva. Penurunan ini dilakukan terhadap C_T , C_D , dan C_M . Pengaturan ulang dan pengintegralan dari persamaan (3.1) menghasilkan:

$$\begin{aligned} \int_{C_{T0}}^{C_T} \frac{dC_T}{C_T} &= -k_1 \int_0^t dt \\ \ln \frac{C_T}{C_{T0}} &= -k_1 t \\ C_T &= C_{T0} \exp(-k_1 t) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Untuk mendapatkan persamaan analitis dari C_D , dilakukan hal yang sama terhadap persamaan (3.2) sebagai berikut:

$$\frac{dC_D}{dt} = -k_2 C_D + k_1 C_T \quad (3.2)$$

$$\frac{dC_D}{dt} + k_2 C_D = k_1 C_{T0} \exp(-k_1 t) \quad (3.8)$$

Persaman (3.8) merupakan persamaan diferensial linear orde satu dengan bentuk $\frac{dy}{dx} + Py = Q$ yang diselesaikan dengan mengalikan persamaan

diferensial tersebut dengan faktor integrasi $\mu = e^{\int P dx}$ untuk menghasilkan solusi

$y = \frac{\int Q \mu dx}{\mu}$. Dalam kasus ini solusi tersebut adalah:

$$\mu = e^{\int k_2 dt} = e^{k_2 t} \quad (3.9)$$



$$C_D = \frac{\int k_1 C_{T0} e^{-k_1 t} e^{k_2 t} dt}{e^{k_2 t}} \quad (3.10)$$

$$C_D = \frac{k_1 C_{T0} \int_0^t e^{(k_2 - k_1)t} dt}{e^{k_2 t}} \quad (3.10)$$

$$C_D = \frac{k_1 C_{T0}}{k_2 - k_1} [\exp(-k_1 t) - \exp(-k_2 t)] \quad (3.10)$$

Sedangkan untuk C_M persamaannya diturunkan sebagai berikut:

$$\frac{dC_M}{dt} = -k_3 C_M + k_2 C_D \quad (3.3)$$

$$\mu = e^{\int k_3 dt} = e^{k_3 t} \quad (3.11)$$

$$C_M = \frac{\int \frac{k_2 k_1 C_{T0}}{k_2 - k_1} [e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}] e^{k_3 t} dt}{e^{k_3 t}} \quad (3.12)$$

$$C_M = \frac{k_2 k_1 C_{T0}}{k_2 - k_1} \int_0^t [e^{(-k_1 + k_3)t} - e^{(-k_2 + k_3)t}] dt \quad (3.12)$$

$$C_M = \frac{k_1 k_2 C_{T0}}{(k_1 - k_2)(k_2 - k_3)(k_3 - k_1)} [(k_3 - k_2) \exp(-k_1 t) + (k_3 - k_1) \exp(-k_2 t) + (k_2 - k_1) \exp(-k_3 t)] \quad (3.12)$$

Konsentrasi produk biodiesel, C_B , dapat diperoleh dari penerapan neraca massa berbasis gugus gliserida sebagai:

$$3C_{T0} = 3C_T + 2C_D + C_M + C_B \quad (3.13)$$

$$\text{Sehingga } C_B = (3C_{T0}) - (3C_T + 2C_D + C_M) \quad (3.14)$$

3.4 DATA EKSPERIMEN

Telah banyak peneliti yang melakukan riset mengenai transesterifikasi, tetapi sayangnya data hasil transesterifikasi tersebut tidak selalu ditampilkan dalam jurnal yang mereka publikasikan. Untuk kepentingan pemodelan secara kinetika, dibutuhkan data eksperimen transesterifikasi yang lengkap menampilkan seluruh komponen reaksi (trigliserida, digliserida, monogliserida, dan biodiesel)



dalam bentuk konsentrasi dan waktu reaksi. Maka dari sekian banyak jurnal yang memuat data hasil transesterifikasi, dipilih beberapa jurnal yang menampilkan hasil reaksi transesterifikasi secara lengkap dalam bentuk grafik antara fungsi konsentrasi komponen dan waktu reaksi.

Data – data eksperimen yang akan digunakan antara lain hasil transesterifikasi yang telah dilakukan oleh Xu, et al.[3], Vicente, et al.[4], Nouredini dan Zhu [5], Marno [13], Lopez et al.[37], serta Vicente, et al.[38]. Dari peneliti Marno[13] akan diambil tiga data, dan dari Vicente, et al.[38] diambil dua set data sehingga total terdapat 9 set data yang akan coba dimodelkan.

Perincian data eksperimen masing – masing sebagai berikut:

1. Data pertama: eksperimen oleh Xu, et al.[3] (tahun 2005)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0,56	0	0	0
360	0,20	0,06	0,07	0,60
720	0,06	0,04	0,09	1,00
1440	0,03	0,02	0,10	1,25
1920	0,02	0,02	0,10	1,28
2400	0,02	0,02	0,10	1,29
2880	0,01	0,02	0,10	1,33

Eksperimen ini dilakukan antara minyak kedelai dengan metil asetat (masing – masing 5 gram) dibantu oleh 0,5 gram katalis Novozym 435 (enzim) pada suhu 40 °C dan osilasi 150 kali/menit.

2. Data kedua: eksperimen oleh Vicente, et al.[4] (tahun 2006)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0,80	0	0	0
2	0,60	0,10	0,15	0,25
4	0,50	0,05	0,10	0,60
20	0,06	0,01	0,01	2,10
30	0,02	0,01	0,01	2,20
40	0,01	0,01	0,01	2,25
60	0,01	0,01	0,01	2,25
90	0,01	0,01	0,01	2,25
120	0,01	0,01	0,01	2,25

Eksperimen ini dilakukan antara minyak *Brassica carinata* dan metanol dalam sebuah reaktor batch dengan katalis alkali (KOH). Kondisi operasinya adalah pada suhu 25 °C, tekanan atmosferik, rasio molar metanol : minyak sebesar



6:1, konsentrasi katalis 1 % berat minyak, dan kecepatan pengadukan 600 rpm.

3. Data ketiga: eksperimen oleh Nouredini dan Zhu [5] (tahun 1997)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0,80	0	0	0
4	0,70	0,10	0,02	0,15
12	0,45	0,19	0,03	1,05
14	0,30	0,16	0,04	1,25
16	0,25	0,14	0,03	1,40
18	0,20	0,12	0,02	1,60
20	0,18	0,10	0,01	1,65
30	0,15	0,08	0,01	1,80
45	0,11	0,07	0	1,90
60	0,10	0,06	0	1,97
90	0,07	0,05	0	2,10

Eksperimen ini dilakukan antara minyak kedelai dan metanol dalam sebuah reaktor batch dengan katalis alkali (NaOH). Kondisi operasi eksperimen yaitu pada suhu 50 °C, rasio molar alkohol : minyak adalah 6:1, konsentrasi katalis 0,2% berat minyak, dan *Reynold number* (representasi intensitas pencampuran) sebesar 6200.

4. Data keempat: eksperimen oleh Lopez et al.[37] (tahun 2005)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	2,267	0	0	0
5	1,720	0,498	0,500	1,00
15	1,125	0,875	0,635	2,25
30	0,830	0,910	0,7497	2,90
60	0,400	0,675	0,845	3,83
70	0,250	0,658	0,845	4,00

Eksperimen ini dilakukan antara triacetin (senyawa trigliserida sederhana yang digunakan sebagai model untuk trigliserida yang lebih besar seperti banyak ditemukan pada minyak nabati) dengan metanol menggunakan katalis padat ETS-10 (Titanosilikat dengan kation Na dan K). Kondisi reaksi adalah rasio alkohol : triacetin sebanyak 6:1, suhu reaksi 60 °C, dan berat katalis 2 % berat campuran.



5. Data kelima: eksperimen oleh Vicente, et al.[38] (tahun 2005)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0,50	0	0	0
2	0,35	0,040	0,03	1,50
3	0,30	0,030	0,025	1,60
8	0,10	0,005	0,004	1,80
20	0,04	0,002	0,002	2,20
30	0,02	0,001	0,001	2,20
45	0,01	0,001	0,001	2,20
60	0	0,001	0,001	2,20
90	0	0	0	2,20

Eksperimen ini dilakukan antara minyak bunga matahari dan metanol dengan menggunakan katalis alkali (KOH). Kondisi operasi adalah pada suhu 35 °C, tekanan atmosferik, rasio molar metanol : minyak sebesar 6:1, konsentrasi katalis dalam minyak sebesar 0,5 %, dan menggunakan pengaduk berkecepatan 600 rpm.

6. Data keenam: eksperimen oleh Vicente, et al.[38] (tahun 2005)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1,625	0	0	0
3	0,750	0,180	0,200	1,00
5	0,400	0,080	0,125	1,50
10	0,250	0,050	0,050	2,00
15	0,130	0,020	0,020	2,25
20	0,090	0,015	0,015	2,35
25	0,040	0,010	0,010	2,37
30	0	0	0	2,40
45	0	0	0	2,44
60	0	0	0	2,47
90	0	0	0	2,50
120	0	0	0	2,50

Data eksperimen ini merupakan variasi dari set data eksperimen sebelumnya. Hal ini dapat dipahami karena keduanya dilakukan oleh peneliti yang sama, sehingga kondisi operasi pada eksperimen kali ini memiliki kemiripan dengan eksperimen sebelumnya. Perbedaannya terletak pada suhu reaksi yaitu 25 °C, dan katalis yang digunakan sebanyak 1,5 % dari berat minyak.



7. Data ketujuh: eksperimen oleh Marno [13] (tahun 2008)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1,637583	0,271527	0,000169	0,059277
30	1,132754	0,344568	0,000987	1,401218
120	0,790637	0,429547	0,001267	2,244519
360	0,453545	0,635172	0,017970	2,857643
720	0,228531	0,757078	0,042493	3,332987
1200	0,080482	0,795325	0,044367	3,716694
1800	0,04844	0,723883	0,034155	3,962849
3000	0,042285	0,586895	0,025155	4,252079

Eksperimen ini dilakukan antara minyak kelapa sawit dan metil asetat dengan perbandingan mol 1:12 dalam reaktor *batch* (labu erlenmeyer 25 ml) dan temperatur reaksi 37 °C. Katalis yang digunakan adalah biokatalis berupa enzim lipase bebas dari *candida rugosa*. Konsentrasi *free* enzim yang digunakan adalah 4% wt dari substrat campuran minyak goreng dan metil asetat (g enzim/g larutan).

8. Data kedelapan: eksperimen oleh Marno [13] (tahun 2008)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1,637583	2,263844	0,000169	0,204082
30	1,258652	2,352144	0,000207	1,218997
120	0,848006	2,697063	0,000310	1,839377
360	0,447603	2,927694	0,000373	2,655743
720	0,250580	3,054326	0,000382	3,151196
1200	0,176348	2,772279	0,000309	3,640831
1800	0,170702	2,559257	0,000224	3,848958
3000	0,167127	2,345542	0,000153	3,976847

Eksperimen ini dilakukan antara minyak kelapa sawit dan metil asetat dengan perbandingan mol 1:12 dalam reaktor *batch* (labu erlenmeyer 25 ml) dan temperatur reaksi 37 °C. Katalis yang digunakan adalah biokatalis berupa enzim lipase yang terimmobilisasi dengan metode adsorpsi. Konsentrasi enzim yang digunakan adalah 4% wt dari substrat campuran minyak goreng dan metil asetat (g enzim/g larutan).



9. Data kesembilan: eksperimen oleh Marno [13] (tahun 2008)

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	8,007469	1,246509	0,001448	0,026861
30	7,086770	1,465083	0,032516	1,259285
120	4,908419	2,709201	0,117012	5,384400
360	2,515404	5,622198	0,663212	7,631847
720	1,297857	5,976354	1,434798	9,743614
1200	0,716957	5,254699	1,794435	12,12079
1800	0,612887	4,585890	1,265454	14,11167
3000	0,541639	3,990486	0,812943	15,01720

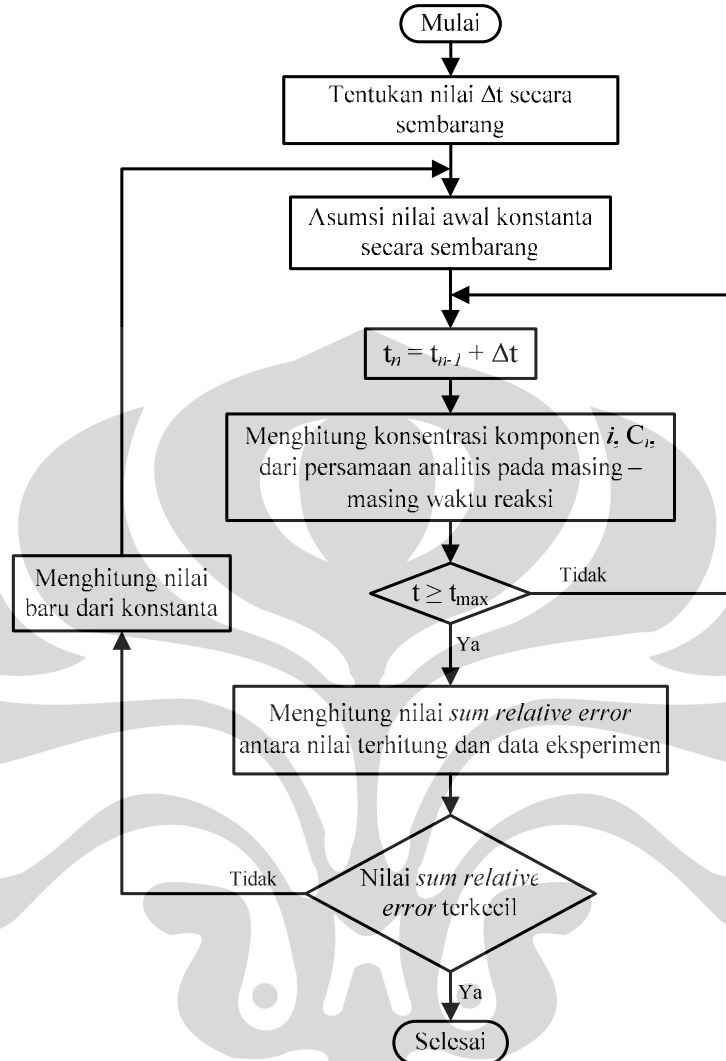
Eksperimen ini dilakukan antara minyak kelapa sawit dan metal asetat dengan perbandingan mol 1:12 dalam reaktor *batch* (labu erlenmeyer 25 ml) dan temperatur reaksi 37 °C. Katalis yang digunakan adalah biokatalis berupa *novozym 435*. Konsentrasi enzim yang digunakan adalah 4%wt dari substrat campuran minyak goreng dan metil asetat (g enzim/g larutan).

3.5 ESTIMASI PARAMETER

Kurva perubahan konsentrasi substrat dan komponen lain terhadap waktu telah diketahui dari data-data yang diperoleh lewat jurnal, maka kemudian dapat dilakukan *fitting* antara kurva tersebut dengan persamaan – persamaan kinetika yang telah diturunkan sebelumnya.

Proses *fitting* kurva ini bertujuan untuk mengestimasi nilai dari parameter – parameter yang belum diketahui pada persamaan kinetika yang telah diturunkan sebelumnya.

Terdapat 3 konstanta / parameter yang tidak diketahui pada mekanisme ini, yaitu k_1 , k_2 , dan k_3 . Ketiga konstanta ini diestimasi nilainya tidak secara simultan tetapi secara berurutan karena ketiga konstanta ini bersifat saling interdependen. Metode estimasi dilakukan dengan cara melakukan *fitting* dari persamaan analitis yang telah diturunkan sebelumnya, terhadap data reaksi transesterifikasi yang telah ada. Diagram alir proses pengestimasian dapat dilihat pada Gambar 3.3.



Gambar 13.3 Diagram alir prosedur kalkulasi konstanta model untuk mekanisme reaksi bertingkat.

Uraian langkah pengestimasi dapat diterangkan sebagai berikut, pertama kali diasumsikan nilai awal konstanta secara sembarang. Kemudian menghitung konsentrasi masing – masing komponen (trigliserida, digliserida, monogliserida, dan biodiesel) dari mulai awal reaksi ($t = 0$) sampai reaksi berakhir. Konsentrasi tiap komponen ini dihitung masing – masing menggunakan persamaan (3.7), (3.10), (3.12) dan (3.13). Nilai konsentrasi hasil perhitungan lewat pemodelan ini dapat dibandingkan dengan nilai konsentrasi yang diperoleh dari eksperimen. *Sum relative error* antara data perhitungan dan data eksperimen dihitung sebagai



$$\sum_{t=0}^{t=n} \left(\frac{C_{t,perhitungan} - C_{t,eksperimen}}{(C_{t,perhitungan} + C_{t,eksperimen})/2} \right)^2 \quad (3.15)$$

Estimasi konstanta model dilakukan dengan melakukan metode *trial and error* guna mendapatkan konstanta yang mampu memberikan nilai *sum relative error* terkecil.

3.6 SIMULASI

Pada tahap ini hasil langkah sebelumnya berupa parameter – parameter yang telah terestimasi diuji ulang dengan cara mensimulasikan kembali parameter – parameter tersebut untuk memperoleh data transesterifikasi yang sesuai dengan model. Tujuan dari pensimulasian adalah untuk mengetahui kevalidan nilai parameter hasil estimasi. Caranya dengan melihat sensitivitas error dari parameter hasil estimasi dan error parameter yang telah disimpangkan. Hasil simulasi ulang ini akan menjadi bahan dalam analisa untuk dapat menyimpulkan apakah model telah cukup baik atau belum dalam memodelkan reaksi transesterifikasi.

Selain itu pensimulasian juga dilakukan terhadap konsentrasi gliserol yang diproduksi dan sensitivitas nilai konstanta model yang telah diperoleh. Sebagaimana telah diterangkan sebelumnya, reaksi transesterifikasi membebaskan gliserol sebagai salah satu produk akhirnya. Dalam data eksperimen tidak diketahui berapa konsentrasi gliserol pada setiap waktu selama reaksi berlangsung. Karena itu nantinya lewat pensimulasian inilah akan dapat dilihat bagaimana kecenderungan konsentrasi gliserol pada setiap waktu selama berjalannya reaksi.

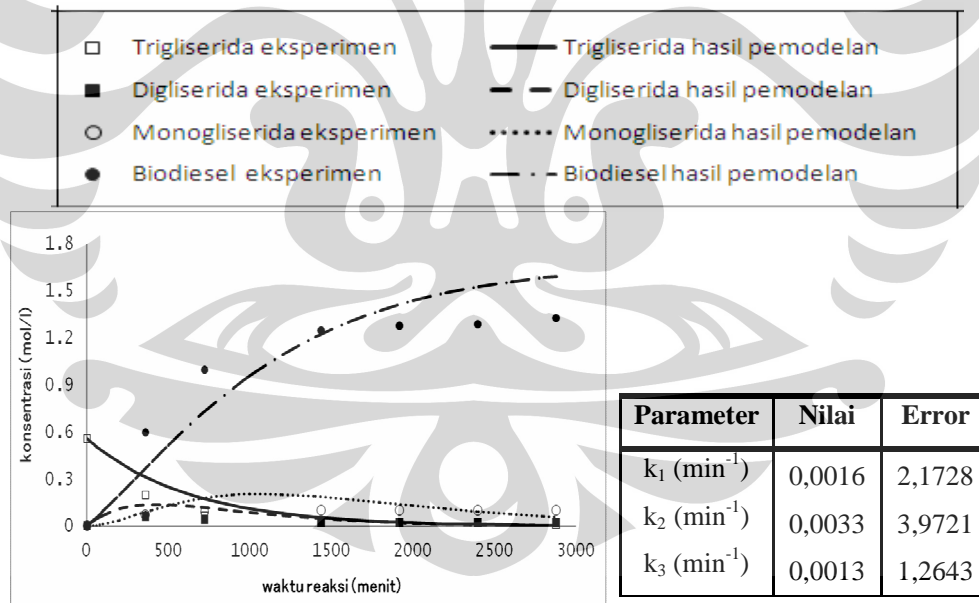
BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

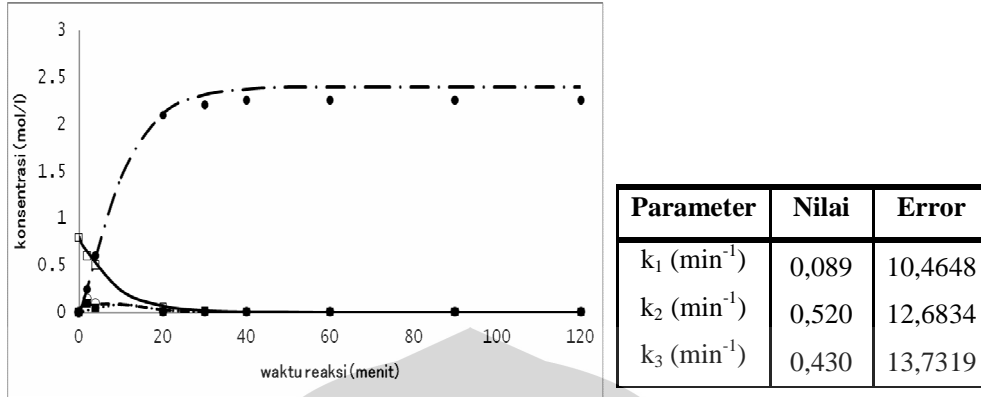
4.1 HASIL FITTING KURVA DAN ESTIMASI PARAMETER

4.1.1 Hasil Fitting Kurva

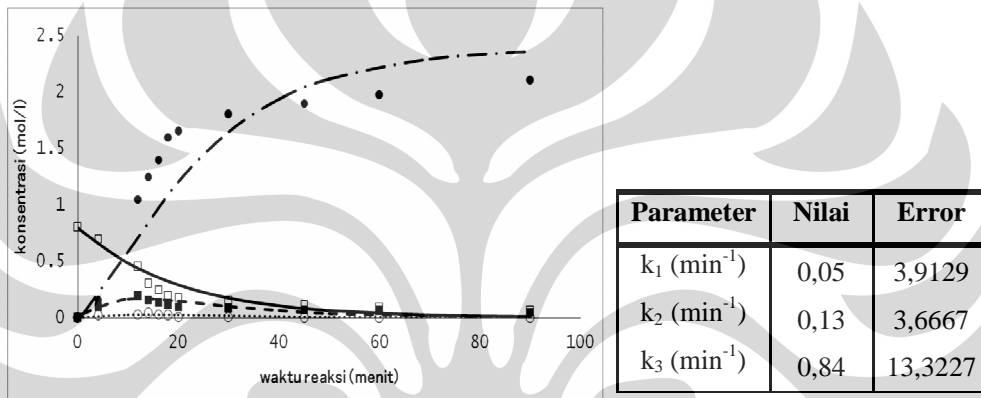
Fitting kurva dilakukan guna mengestimasi nilai parameter – parameter yang tak diketahui pada persamaan model. Pada metode reaksi bertingkat, parameter tersebut adalah k_1 , k_2 , dan k_3 . Hasil plot antara data hasil eksperimen dengan data yang diperoleh lewat pemodelan diberikan pada gambar – gambar di bawah yang secara berurutan menunjukkan hasil pemodelan pada data pertama sampai data kesembilan.



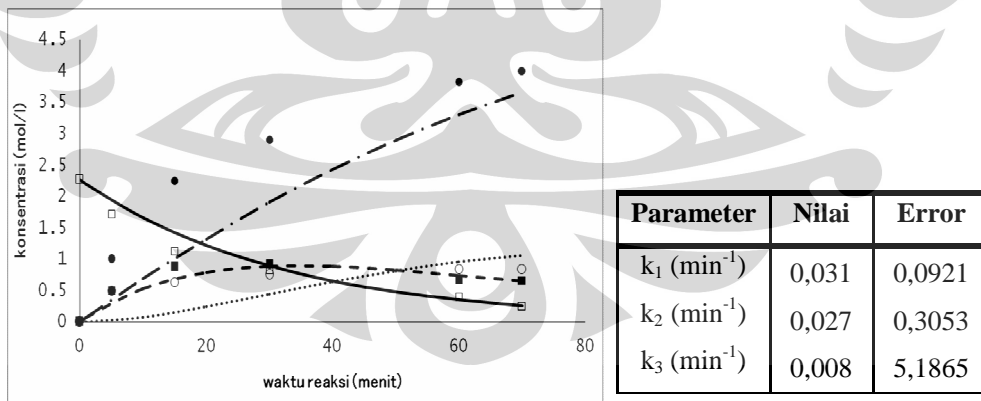
Gambar 14.1 Hasil fitting model terhadap data pertama (eksperimen oleh Xu, et al.[3]).



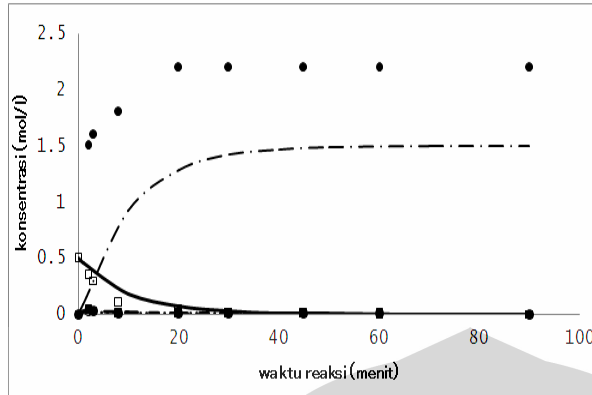
Gambar 15.2 Hasil fitting model terhadap data kedua (hasil eksperimen Vicente, et al.[4]).



Gambar 16.3 Hasil fitting model terhadap data ketiga (hasil eksperimen Nouredini dan Zhu[5]).

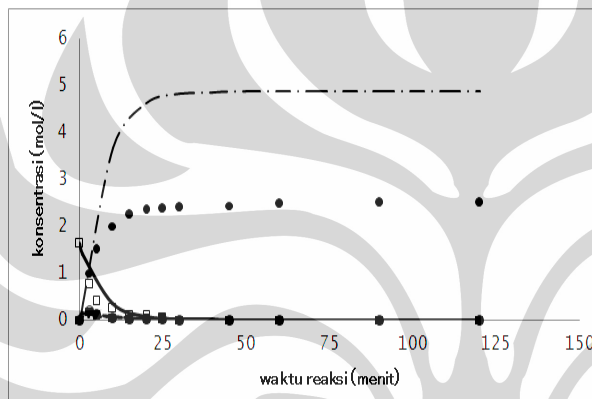


Gambar 17.4 Hasil fitting model terhadap data keempat (hasil eksperimen Lopez, et al.[37]).



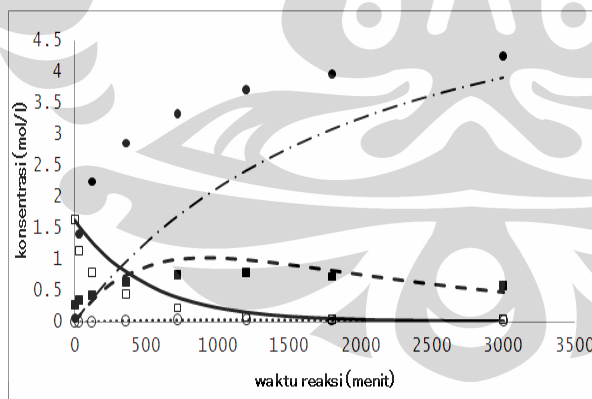
Parameter	Nilai	Error
k_1 (min^{-1})	0,101	9,3021
k_2 (min^{-1})	1,667	9,8343
k_3 (min^{-1})	2,000	9,9839

Gambar 18.5 Hasil fitting model terhadap data kelima (hasil eksperimen Vicente, et al.[38]).



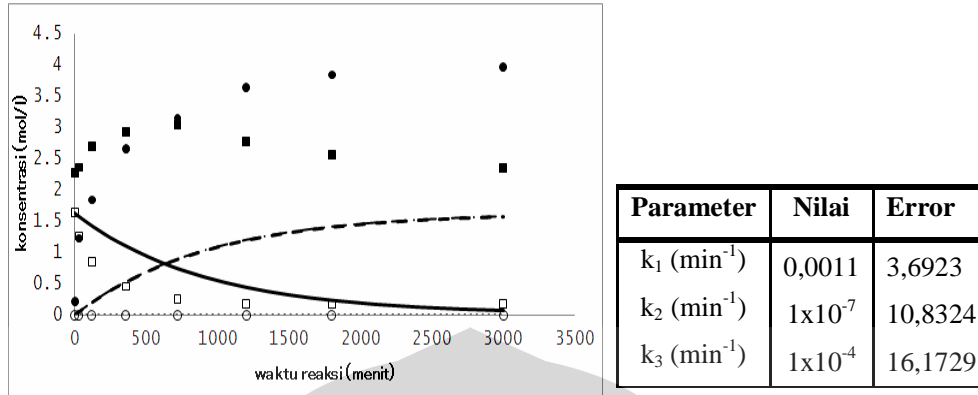
Parameter	Nilai	Error
k_1 (min^{-1})	0,156	0,6736
k_2 (min^{-1})	1,076	0,6729
k_3 (min^{-1})	1,108	0,5320

Gambar 19.6 Hasil fitting model terhadap data keenam (hasil eksperimen Vicente, et al.[38]).

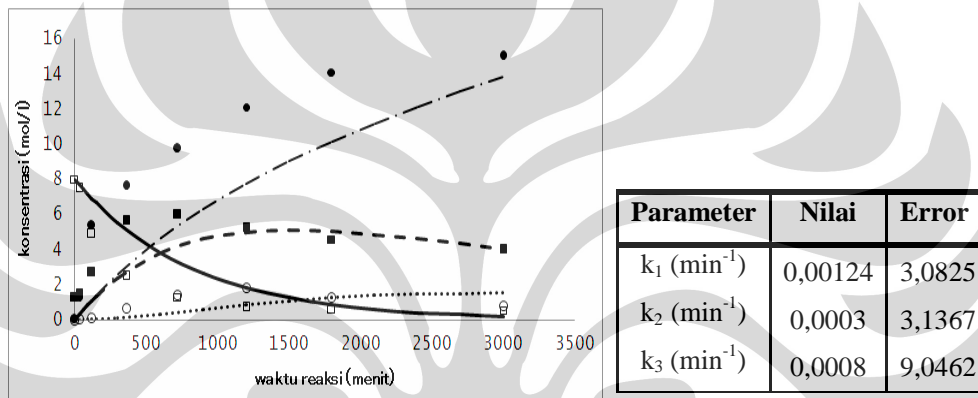


Parameter	Nilai	Error
k_1 (min^{-1})	0,002	3,9733
k_2 (min^{-1})	0,0005	1,5720
k_3 (min^{-1})	0,013	2,2536

Gambar 20.7 Hasil fitting model terhadap data ketujuh (hasil eksperimen Marno[13]).



Gambar 21.8 Hasil fitting model terhadap data kedelapan (hasil eksperimen Marno[13]).



Gambar 22.9 Hasil fitting model terhadap data kedsembilan (hasil eksperimen Marno[13]).

Gambar 4.1 s.d. Gambar 4.9 menunjukkan hasil fitting model pada data eksperimen pertama sampai kesembilan. Seperti dapat dilihat, konsentrasi biodiesel terus mengalami peningkatan seiring berjalannya reaksi untuk kemudian akhirnya konstan yang menandakan reaksi telah mencapai kesetimbangan. Pada data pertama, ketiga dan keempat, kurva konsentrasi biodiesel menunjukkan kenaikan yang tidak terlalu curam, yang berarti kenaikan jumlah konsentrasi biodiesel tidak berjalan terlalu cepat. Kurva yang terbentuk cenderung sigmoid (berbentuk S). Hal ini mengindikasikan adanya kelambatan atau laju reaksi yang rendah pada tahap awal yang kemudian diikuti oleh kenaikan tajam dan akhirnya melambat kembali saat mendekati akhir. Kurva semacam ini merupakan tipikal reaksi autokatalisis atau reaksi dengan perubahan mekanisme. Karena reaksi transesterifikasi minyak nabati tidak dikenal termasuk dalam reaksi autokatalisis, maka kemungkinan yang kedua yang dapat diterima. Hipotesa yang dapat



diajukan adalah perubahan mekanisme yang mengontrol reaksi yaitu mekanisme transfer massa (yang berjalan lambat) pada tahap awal reaksi, kemudian diikuti oleh mekanisme kinetika (yang berjalan cepat), dan tahap akhir reaksi yang berjalan lambat kembali saat kesetimbangan telah tercapai.

Sementara pada tiga data lainnya, konsentrasi biodiesel meningkat tajam sejak awal reaksi seperti tanpa ada halangan transfer massa. Fenomena ini dapat dijelaskan dengan memperhatikan penggunaan pengaduk berkecepatan tinggi pada data eksperimen ke dua, lima dan enam yang dapat membantu proses transfer massa sehingga laju reaksi yang lambat pada tahap awal tidak teramati lagi. Fakta bahwa pada data eksperimen pertama dan ketiga sebenarnya juga telah dilakukan pengadukan, berarti pengadukan itu belum mampu membuat reaktan awal bercampur sempurna.

Kurva konsentrasi trigliserida terus menurun selama reaksi sampai akhirnya habis. Penurunan konsentrasi trigliserida terjadi karena bereaksi dengan alkohol membentuk digliserida, dimana reaksi ini merupakan tahap awal dari reaksi keseluruhan. Seiring dengan curamnya kenaikan kurva konsentrasi biodiesel pada tahap awal reaksi, maka kurva konsentrasi trigliserida menunjukkan perilaku yang sama tapi dengan arah yang berkebalikan. Jika reaksi tahap awal ini berjalan lambat, maka kurva penurunan konsentrasi trigliserida akan terlihat tidak begitu curam.

Konsentrasi zat intermediet, digliserida dan monogliserida, selama reaksi selalu rendah. Hal ini karena kedua zat intermediet tersebut tidak terakumulasi tetapi masing-masing langsung bereaksi kembali untuk membentuk zat baru, yaitu monogliserida dan gliserol. Konsentrasi digliserida hanya menunjukkan kenaikan sedikit pada awal reaksi untuk kemudian menurun kembali setelahnya. Dapat disimpulkan bahwa kedua zat ini terkonversi menjadi produk tanpa kesulitan yang berarti

Sedikit kejanggalan terlihat pada konsentrasi monogliserida untuk data pertama. Seperti terlihat pada Gambar 4.1, data eksperimen menunjukkan konsentrasi monogliserida selama reaksi terus meningkat (meskipun tetap kecil) dan tidak menunjukkan tanda-tanda penurunan. Artinya telah terjadi akumulasi monogliserida atau dengan kata lain reaksi tahap akhir yang seharusnya



membentuk gliserol dan biodiesel tertahan karena monogliserida tidak bereaksi. Hal ini menunjukkan adanya bentuk reaksi enzimatik yang tidak sempurna saat membentuk biodiesel, terutama pada tahap akhir. Kemungkinan reaksi transesterifikasi yang terjadi pada eksperimen pertama ini tidak selesai, yaitu enzim hanya mampu untuk mengkatalisis reaksi hingga pemutusan rantai digliserida saja. Bisa jadi saat mencapai tahap akhir reaksi ini enzim telah jenuh sehingga terjadi akumulasi monogliserida. Dugaan lain yang dapat dibuat adalah pengaruh jenis substrat alkohol dan non-alkohol sebagai alkil akseptor terhadap keefektifan enzim yang digunakan. Sebagaimana diketahui bahwa pengaplikasian metal asetat sebagai alkil akseptor (sebagaimana dilakukan pada eksperimen pertama ini) merupakan inovasi baru dalam proses produksi biodiesel sehingga membutuhkan penelitian lebih lanjut guna mengetahui apa saja pengaruhnya terhadap proses.

Jika dibandingkan, umumnya kurva digliserida pada kebanyakan data eksperimen menunjukkan konsentrasi tertingginya lebih di atas konsentrasi tertinggi monogliserida, artinya terjadi akumulasi digliserida sebelum akhirnya zat itu terkonversi menjadi monogliserida. Sedangkan monogliserida sendiri konsentrasinya selalu rendah selama reaksi, artinya setiap monogliserida yang terbentuk langsung bereaksi kembali dengan cepat untuk membentuk produk. Dari pengamatan ini dapat diperkirakan nantinya nilai laju reaksi penguraian monogliserida akan lebih tinggi dibanding laju reaksi penguraian digliserida.

Secara umum, hasil fitting antara data eksperimen dengan hasil pemodelan menunjukkan kesesuaian yang cukup baik untuk seluruh komponen reaksi kecuali pemodelan untuk konsentrasi biodiesel. Pada data pertama, kegagalan pemodelan konsentrasi biodiesel masih berhubungan dengan kegagalan memodelkan konsentrasi monogliserida. Terlihat pada Gambar 4.1 hasil pemodelan biodiesel lebih tinggi dari data eksperimen yang ada, terutama pada tahap akhir reaksi. Hal ini disebabkan terakumulasinya monogliserida sehingga konsentrasi biodiesel lebih rendah dari perkiraan model. Kurva pemodelan gagal untuk mengakomodasi fenomena ini sehingga hasil pemodelan biodiesel menjadi kurang sesuai.

Sementara untuk data kedua, tidak ditemui masalah pada model untuk dapat secara tepat memerkirakan jalannya reaksi. Terlihat pada Gambar 4.2



seluruh kurva hasil pemodelan sangat baik dalam mewakili data eksperimen. Sedikit ketidaksesuaian terlihat pada kurva konsentrasi biodiesel hasil pemodelan yang menunjukkan harga lebih tinggi dibanding data eksperimen. Hal ini berarti ada sesuatu yang menahan laju produksi biodiesel sehingga tidak setinggi yang diperkirakan oleh model. Hipotesa yang dapat dibuat adalah adanya reaksi balik pada reaksi transesterifikasi. Karena asumsi awal pemodelan adalah seluruh tahap reaksi berjalan secara irreversibel, maka reaksi balik ini luput dari perhitungan. Dengan melihat masih tersisanya zat intermediet pada akhir reaksi, maka hipotesa reaksi balik menjadi cukup masuk akal. Tapi tetap saja, model reaksi bertingkat irreversibel ini cukup baik dalam memodelkan reaksi.

Untuk data ketiga, model reaksi yang diajukan cukup baik dalam menggambarkan data hasil eksperimen kecuali, lagi – lagi, untuk konsentrasi biodiesel. Sedikit ketidaksesuaian terjadi pada pemodelan biodiesel di pertengahan reaksi.

Untuk data keempat, setelah dimodelkan seperti terlihat pada Gambar 4.4 ternyata kecocokan antara data eksperimen dengan hasil pemodelan tidak begitu bagus. Sulit untuk mengatakan reaksi ini dapat terwakili dengan baik oleh pemodelan. Setidaknya hal itu terlihat pada hasil pemodelan terhadap produk biodiesel dan monogliserida yang tidak begitu sesuai. Dengan melihat kembali data hasil eksperimen, terlihat bahwa pada data terakhirpun masih terdapat konsentrasi triacetin (senyawa trigliserida sederhana yang dalam penelitian ini dipakai sebagai model untuk minyak nabati) yang cukup banyak. Begitu pula dengan zat intermediet, diacetin dan monoacetin, masih terakumulasi dalam jumlah yang tidak sedikit. Karena itu dapat diperkirakan sebenarnya reaksi ini belumlah mencapai kesetimbangan, dan data yang disajikan hanya sebagian saja dari data keseluruhan reaksi sampai tahap akhirnya. Literatur asal data ini diambil [37] sendiri menyebutkan bahwa residu diacetin dan monoacetin masih ditemukan pada campuran setelah 8 hari. Jadi dengan data yang tersedia tidak bisa dimodelkan reaksi telah selesai, yaitu telah melalui 3 tahap reaksi. Mungkin saat data ini disajikan reaksi baru berlangsung 2 tahap saja. Jika asumsi ini dapat diterima maka data konsentrasi biodiesel hasil eksperimen yang belum menunjukkan tanda – tanda akan konstan dapat dijelaskan sebagai masih berada



dalam tahapan pertengahan reaksi. Begitu pula konsentrasi biodiesel hasil pemodelan yang lebih rendah dari data eksperimen, aneh karena pada pemodelan dengan data percobaan lain biasanya selalu sama atau lebih tinggi, dapat dijelaskan dengan cara yang sama.

Pada data kelima, hasil pemodelan yang diperoleh pada trigliserida terlihat sangat baik. Kurva hasil pemodelan berimpit dengan data – data hasil eksperimen. Namun tidak demikian yang terjadi pada tiga zat komponen reaksi yang lain. Kurva pemodelan untuk digliserida dan monogliserida terlihat memiliki puncak yang lebih rendah dari titik konsentrasi tertinggi data eksperimen. Dampaknya adalah hasil pemodelan biodiesel yang meleset jauh dari data eksperimen. Kurva pemodelan konsentrasi biodiesel berada jauh di bawah data eksperimen.

Dan pada data keenam, konsentrasi trigliserida yang menurun drastis dan konsentrasi zat intermediet yang hanya menunjukkan kenaikan sedikit pada tahap awal untuk kemudian terus menurun sampai akhir reaksi dapat dimodelkan dengan baik oleh hasil perhitungan. Hanya kurva konsentrasi biodiesel saja yang menunjukkan kejanggalan. Hasil pemodelan memberikan nilai yang jauh lebih tinggi dibandingkan data eksperimen. Perkiraan penyebabnya adalah terjadinya reaksi balik dengan laju yang lebih besar dari reaksi maju, terutama pada konversi monogliserida dan digliserida menjadi biodiesel. Sebab pemodelan terhadap konversi trigliserida menunjukkan hasil yang baik sekali, sehingga penghambatan pasti terjadi pada zat intermediet saja. Analisa lain yang dapat menjelaskan kejanggalan ini juga akan dibahas dari sisi neraca massa pada analisa selanjutnya.

4.1.2 Hasil Estimasi Konstanta Laju Reaksi

Terdapat 3 konstanta / parameter yang tidak diketahui pada mekanisme ini, yaitu k_1 , k_2 , dan k_3 . Hasil estimasi ketiga parameter untuk kesembilan data telah ditampilkan sebelumnya bersama kurva hasil fitting.

Hasil estimasi parameter berupa nilai konstanta laju reaksi yang diperoleh pada mekanisme reaksi bertingkat ini menunjukkan kecenderungan yang bervariasi. Pada data pertama (percobaan Xu, et al.[3]), nilai k_2 merupakan yang terbesar sedangkan k_3 merupakan nilai terkecil. Artinya reaksi tahap akhir, yaitu konversi monogliserida menjadi gliserol dan biodiesel, merupakan tahap penentu laju. Lazimnya tahapan reaksi yang menjadi penentu laju adalah tahap awal, yaitu



konversi trigliserida menjadi digliserida. Kondisi yang terjadi pada pemodelan kali ini dapat dijelaskan dengan memperhatikan kondisi – kondisi berlangsungnya reaksi. Telah dijelaskan sebelumnya bahwa pada percobaan ini reaksi enzimatik yang terjadi tidak sempurna saat membentuk biodiesel, terutama pada tahap akhir. Hal tersebut bisa jadi karena saat mencapai tahap akhir reaksi ini enzim telah jenuh sehingga menyebabkan nilai k_3 menjadi kecil.

Sedangkan kelambatan reaksi pada tahap awal diperkirakan karena adanya hambatan transfer massa antara trigliserida dan metil asetat. Nilai k_2 yang besar menandakan bahwa tahap pertengahan reaksi berjalan dengan cepat dan tanpa hambatan. Sementara itu nilai error yang diperoleh untuk masing – masing parameter terestimasi juga rendah.

Untuk data kedua (data percobaan oleh Vicente, et al.[4]), harga parameter hasil estimasi yang diperoleh cukup baik, merupakan tipikal perilaku yang diinginkan untuk terjadi dalam sebuah reaksi transesterifikasi. Hasil pemodelan menunjukkan kecenderungan nilai k_1 , k_2 , dan k_3 yang semakin membesar, berarti tahap penentu laju adalah tahap awal reaksi. Nilai k_2 dan k_3 yang besar, lebih dari 3 kali lipat k_1 , menunjukkan reaksi hanya berjalan lambat di awal saja. Begitu produk biodiesel dan digliserida terbentuk pada tahap awal reaksi, maka konversi zat intermediet seterusnya berjalan dengan lancar. Hal ini karena produk biodiesel dapat bertindak sebagai co – solvent untuk mengatasi hambatan transfer massa yang mungkin terjadi. Dapat disimpulkan pula bahwa dengan tingginya nilai k_2 dan k_3 maka tidak terjadi akumulasi zat intermediet selama reaksi, atau konsentrasi zat intermediet selama reaksi berlangsung akan selalu rendah karena zat intermediet tersebut terurai dengan cepat.

Selanjutnya pada data ketiga (data percobaan yang dilakukan oleh Nouredini dan Zhu [5]), hasil pengestimasi pada data ini menunjukkan pola yang sama dengan data sebelumnya, yaitu nilai urutan nilai k_1 , k_2 , dan k_3 yang semakin membesar. Perbedaannya hanya pada nilai k_3 yang sangat jauh selisihnya baik terhadap k_1 atau k_2 . Efeknya adalah pada produksi gliserol sebagai salah satu produk akhir reaksi yang akan terbentuk dengan mudah. Dapat dibayangkan nantinya kurva produksi gliserol terhadap waktu akan memiliki kenaikan yang curam. Nilai k_1 yang kecil berarti tahap awal reaksi merupakan tahapan yang



paling lambat dari keseluruhan reaksi dan karenanya menjadi tahap penentu laju. Sedangkan error yang diperoleh untuk k_1 dan k_2 cukup rendah, namun error terhadap estimasi k_3 jauh lebih tinggi. Error ini menandakan besarnya ketidaksesuaian antara data asli hasil eksperimen dan data hasil pemodelan. Dengan cukup tingginya nilai error k_3 , dapat disimpulkan harga konstanta hasil estimasi belum cukup meyakinkan.

Seperti hasil fitting model melalui kurva yang telah dianalisa sebelumnya, hasil pengestimasi parameter pada data keempat (percobaan oleh Lopez, et al.[37]) memberikan nilai yang unik. Tahapan penentu lajunya adalah tahap akhir reaksi, sedangkan laju reaksi paling cepat justru terjadi pada tahap awal. Fenomena ini dapat dijelaskan oleh sifat triacetin yang berlaku sebagai reaktan awal. Triacetin bersifat mudah larut dalam alkohol dan produk reaksi, tidak seperti senyawa trigliserida lain yang lebih berat yang bersifat immiscible terhadap alkohol. Karena penggunaan triacetin dalam penelitian oleh Lopez, et al. ini dianggap sebagai model untuk senyawa trigliserida lain yang lebih kompleks, maka sifat mudah larutnya dianggap sebagai suatu keuntungan.

Sementara tahap akhir reaksi yang menurut hasil estimasi parameter merupakan penentu laju memiliki nilai error tertinggi, berlipat kali nilai error dari k_1 dan k_2 hasil estimasi. Hal ini menunjukkan pemodelan reaksi untuk tahapan akhir tidak terlalu mewakili data eksperimen. Alasannya tentu karena data transesterifikasi yang disajikan pada sumber awal bukanlah data lengkap reaksi yang telah berjalan sampai selesai, tapi hanya sebagian saja. Dan karena nilai error untuk k_1 dan k_2 hasil estimasi bernilai kecil, berarti sampai dengan pertengahan reaksi, pemodelan yang dilakukan sudah cukup valid.

Hasil pengestimasi parameter model untuk data kelima (penelitian oleh Vicente, et al.[38]) memperlihatkan bahwa yang menjadi penentu laju adalah tahapan awal reaksi. Dua tahapan reaksi berikutnya memiliki laju yang jauh lebih cepat, terlihat dari besarnya nilai k_2 dan k_3 hasil estimasi. Artinya konversi zat – zat intermediet menjadi produk akhir berlangsung dengan mudah tanpa terakumulasi sebelumnya. Sayangnya nilai error yang diperoleh untuk data percobaan ini juga besar. Secara umum memang pemodelan yang dilakukan tidak memperoleh hasil yang baik. Secara grafis, sebagaimana telah dibahas



sebelumnya, kurva pemodelan tidak benar – benar mewakili data eksperimen. Kesimpulannya pemodelan dengan mekanisme reaksi bertingkat yang irreversibel tidak cukup akurat untuk memodelkan hasil eksperimen. Perlu dicoba model lain atau dilakukan penyempurnaan model dengan cara memperhitungkan reaksi balik dari setiap tahapan reaksi yang reaksi. Penyempurnaan ini mungkin dapat lebih mendekati keadaan yang sesungguhnya.

Dan pada data keenam (juga penelitian oleh Vicente, et al.[38]) hasil estimasi parameter menunjukkan nilai parameter k_1 merupakan yang terendah dibandingkan dua parameter lainnya, yang berarti bahwa tahap awal reaksi tetap menjadi tahapan penentu laju. Sementara k_2 dan k_3 hasil estimasi nilainya jauh lebih besar dibanding k_1 , yang berarti proses penguraian kedua zat intermediet menjadi produk berjalan dengan cepat tanpa hambatan.

Salah satu faktor yang mempengaruhi laju reaksi adalah temperatur operasi. Untuk mengetahui efek temperatur terhadap nilai konstanta laju reaksi, data ke lima dan enam dapat dibandingkan secara langsung karena kedua data ini diperoleh dari peneliti yang sama dengan perbedaan hanya pada kondisi operasi. Hasilnya adalah data kelima yang reaksinya dilaksanakan pada temperatur 35 °C memiliki nilai konstanta laju yang lebih besar dibandingkan data ke enam yang reaksinya dilaksanakan pada temperatur 25 °C. Menjadi jelaslah efek kenaikan temperatur terhadap reaksi yaitu memperbesar nilai konstanta laju atau dapat mempercepat jalannya reaksi.

4.2 ANALISA NERACA MASSA

Perhitungan neraca massa dilakukan terhadap data eksperimen dan data hasil perhitungan lewat pemodelan. Perhitungan neraca massa untuk asam lemak residu ini dilakukan untuk membantu menjelaskan dan menginterpretasi hasil fitting. Rumus perhitungan neraca massa:

$$3T_0 = 3 T_t + 2D_t + M_t + B_t \quad (4.1)$$

Dimana: T_0 = konsentrasi trigliserida awal (saat $t = 0$)

T_t = konsentrasi trigliserida pada saat t

D_t = konsentrasi digliserida pada saat t

M_t = konsentrasi monogliserida pada saat t

B_t = konsentrasi produk biodiesel pada saat t

Tabel 1.1 Hasil perhitungan neraca massa pada masing - masing data eksperimen

Data pertama (Xu, et al.[3])			Data kedua (Vicente, et al.[4])		
Waktu (min)	Model	Eksperimen	Waktu (min)	Model	Eksperimen
0	1,68	1,68	0	2,4	2,40
360	1,68	1,39	2	2,4	2,40
720	1,68	1,35	4	2,4	2,30
1440	1,68	1,48	20	2,4	2,31
1920	1,68	1,48	30	2,4	2,29
2400	1,68	1,49	40	2,4	2,31
2880	1,68	1,50	60	2,4	2,31
Data ketiga (Nouredini & Zhu [5])			Data keempat (Lopez, et al.[37])		
Waktu (min)	Model	Eksperimen	Waktu (min)	Model	Eksperimen
0	2,4	2,40	0	6,801	6,801
4	2,4	2,47	5	6,801	7,656
12	2,4	2,81	15	6,801	8,010
14	2,4	2,51	30	6,801	7,9597
16	2,4	2,46	60	6,801	7,225
18	2,4	2,46	70	6,801	6,911
20	2,4	2,40			
30	2,4	2,42			
45	2,4	2,37			
60	2,4	2,39			
90	2,4	2,41			
Data kelima (Vicente, et al.[38])			Data keenam (Vicente, et al.[38])		
Waktu (min)	Model	Eksperimen	Waktu (min)	Model	Eksperimen
0	1,5	1,500	0	4,875	4,875
2	1,5	2,660	3	4,875	3,810
3	1,5	2,585	5	4,875	2,985
8	1,5	2,114	10	4,875	2,900
20	1,5	2,326	15	4,875	2,700
30	1,5	2,263	20	4,875	2,665
45	1,5	2,233	25	4,875	2,520
60	1,5	2,203	30	4,875	2,400
90	1,5	2,200	45	4,875	2,440
			60	4,875	2,470
			90	4,875	2,500
			120	4,875	2,500
Data ketujuh (Marno[13])			Data kedelapan (Marno[13])		
Waktu (min)	Model	Eksperimen	Waktu (min)	Model	Eksperimen
0	4,913	5,515	0	4,913	9,6447
30	4,913	5,489	30	4,913	9,6994
120	4,913	5,477	120	4,913	9,7778
360	4,913	5,507	360	4,913	9,8543
720	4,913	5,575	720	4,913	10,012
1200	4,913	5,593	1200	4,913	9,7147
1800	4,913	5,590	1800	4,913	9,4798
3000	4,913	5,578	3000	4,913	9,1695
Data kesembilan (Marno[13])					
Waktu (min)	Model	Eksperimen			
0	24,022	26,544			



30	24,022	26,748
120	24,022	25,645
360	24,022	27,086
720	24,022	27,025
1200	24,022	26,576
1800	24,022	26,388
3000	24,022	25,436

Keterangan : Model = neraca massa untuk data hasil pemodelan

Eksperimen = neraca massa data eksperimen

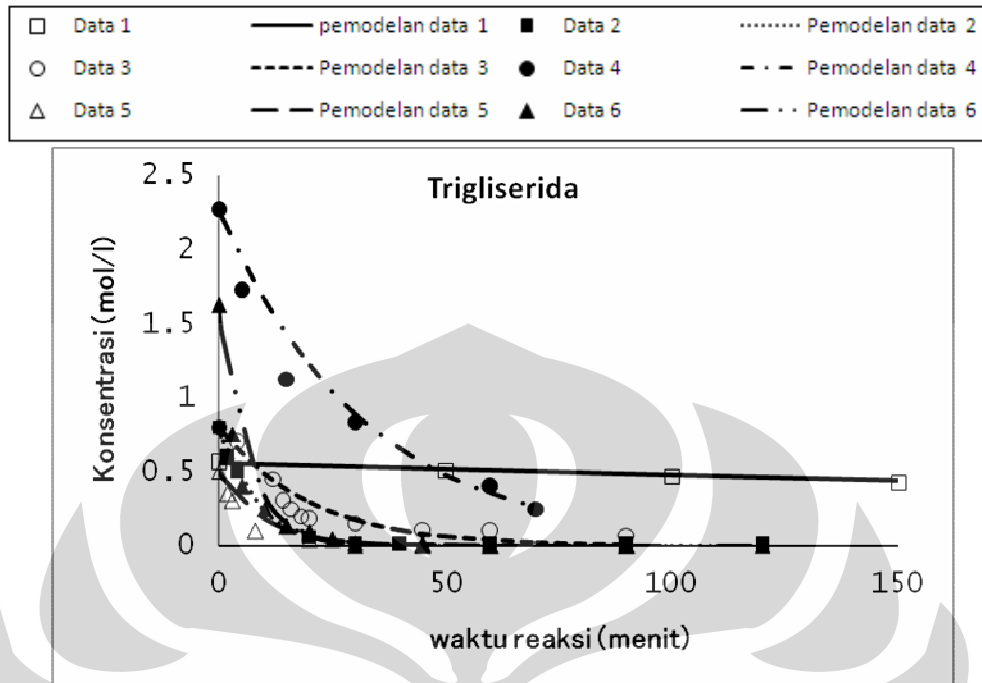
Contoh cara perhitungan neraca massa dapat dilihat pada lampiran 7. Hasil perhitungan neraca massa menunjukkan bahwa beberapa data eksperimen yang digunakan sebagai bahan pemodelan untuk penelitian ini memiliki neraca massa yang tidak seimbang. Sementara perhitungan neraca massa untuk data konsentrasi hasil perhitungan lewat pemodelan selalu memberikan hasil yang seimbang.

Neraca massa yang tidak seimbang ini terlihat pada data keempat, kelima dan keenam. Dampaknya adalah pada kurva hasil pemodelan yang nampak kurang mewakili data hasil eksperimen. Dapat dilihat kembali kurva hasil fitting untuk ketiga data tersebut sangat tidak sesuai dengan hasil eksperimen. Penyimpangan paling mencolok terlihat pada pemodelan untuk konsentrasi produk biodiesel.

Dalam hal pengambilan data eksperimen untuk studi kinetika, harus sedapat mungkin dihindari terjadinya error. Biasanya, bagian terbesar dari kesalahan dalam eksperimen muncul dari ketidakakuratan pengukuran dan perhitungan analitis, serta sebagian kecil lagi dari kelalaian pengukuran waktu. Jelasnya, untuk menghasilkan sebuah studi kinetika yang baik, eksperimen yang dilakukan di laboratorium harus diulang beberapa kali guna memastikan diperolehnya data yang benar.

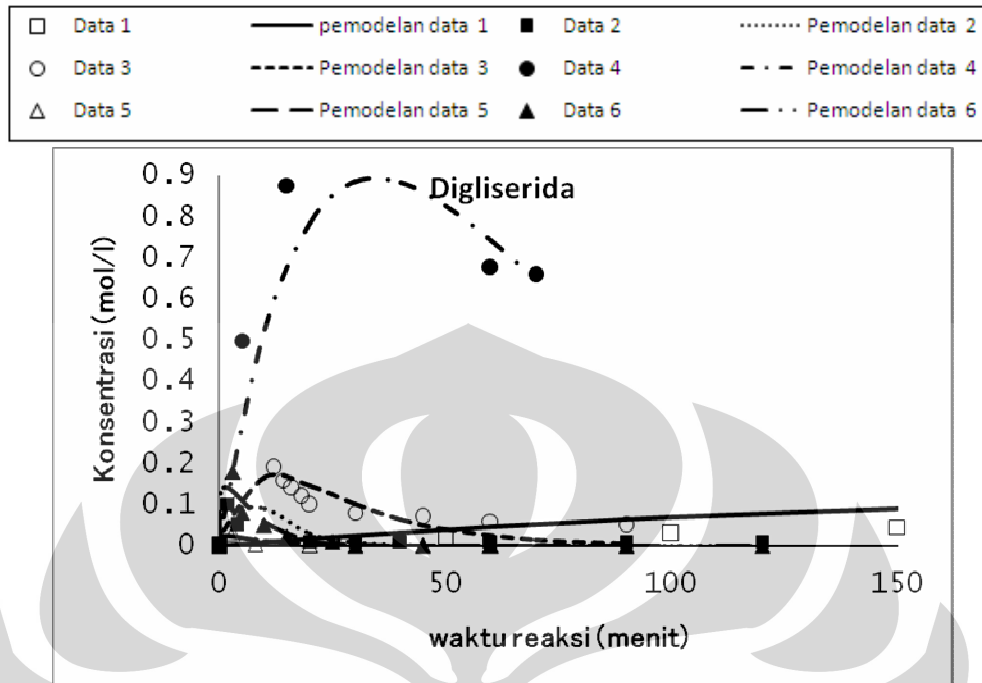
4.3 ANALISA KOMPONEN

Analisis komponen dilakukan untuk membandingkan keenam data eksperimen yang telah dimodelkan berdasarkan masing-masing komponen yang menyusun reaksi secara keseluruhan.



Gambar 23.10 Perbandingan konsentrasi trigliserida untuk enam data eksperimen

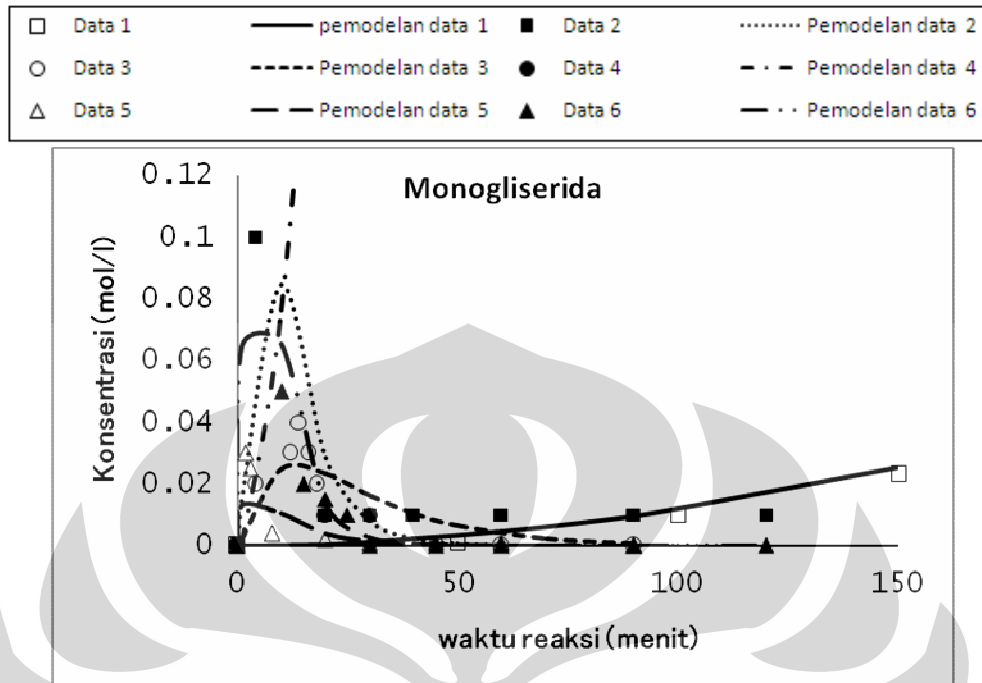
Data konsentrasi trigliserida hasil pemodelan untuk keenam data eksperimen terlihat pada Gambar 4.10 di atas. Trigliserida pada tahap awal reaksi akan bereaksi dengan alkohol untuk membentuk digliserida dan biodiesel. Karena itu kurva konsentrasi trigliserida terhadap waktu seharusnya akan terus menurun seiring berjalannya reaksi. Terlihat bahwa untuk data eksperimen kelima dan keenam penurunan konsentrasi trigliserida sangat curam. Hal ini dapat diinterpretasikan bahwa keduanya memiliki nilai konstanta laju yang besar. Karena pada tahap awal ini konstanta laju yang berkaitan adalah k_1 , maka nilai k_1 untuk data kelima dan keenam diperkirakan akan bernilai besar. Sementara itu kurva konsentrasi data pertama sangat landai cenderung datar. Dapat disimpulkan bahwa reaksi tahap awal pada eksperimen pertama berlangsung lambat, dan memiliki nilai k_1 yang kecil. Data eksperimen keempat menunjukkan kurva konsentrasi yang unik. Untuk data ini, konsentrasi trigliserida terlihat baru menurun dan belum konstan. Dugaan yang dapat dibuat adalah bahwa reaksi belum selesai (belum semua trigliserida bereaksi). Data eksperimen lainnya terlihat memiliki kecenderungan yang sama yaitu menurun.



Gambar 24.11 Perbandingan konsentrasi digliserida untuk enam data eksperimen

Data konsentrasi digliserida untuk eksperimen pertama terlihat baru menaik dan belum terlihat puncaknya, menandakan bahwa untuk data pertama ini konstanta k_2 akan bernilai kecil. Reaksi tahap kedua pada eksperimen pertama ini juga terlihat sangat lambat berjalan. Sementara data keempat memperlihatkan belum tercapainya kesetimbangan reaksi, karena kurva konsentrasi digliserida untuk data keempat ini baru sampai menurun (masih ada sisa digliserida pada akhir reaksi). Adanya sisa digliserida pada akhir reaksi ini mengherankan karena normalnya pada kondisi setimbang konsentrasi digliserida akan sangat kecil atau habis.

Semakin tinggi dan besar kurva konsentrasi digliserida yang terbentuk, menunjukkan bahwa digliserida terakumulasi atau sulit terurai menjadi monogliserida dan biodiesel, yang berarti juga nilai k_2 akan semakin kecil. Hasil interpretasi gambar 4.11 di atas menunjukkan bahwa nilai k_2 data pertama akan paling kecil, sementara harga k_2 data kelima dan keenam akan bernilai paling besar.



Gambar 25.12 Perbandingan konsentrasi monogliserida untuk enam data eksperimen

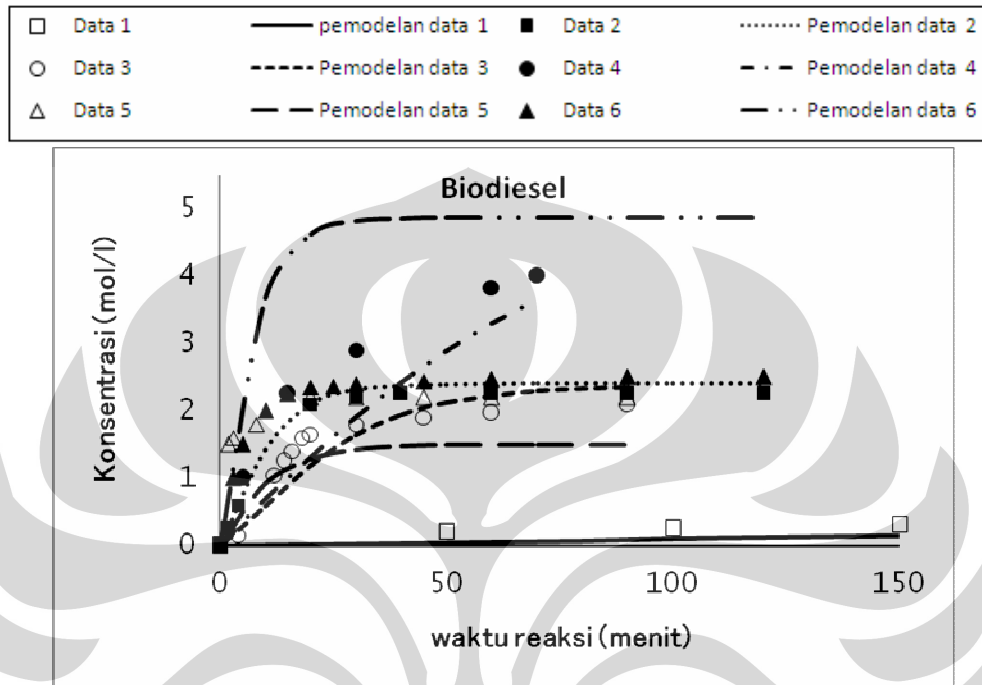
Yang menunjukkan keunikan dari Gambar 4.12 di atas adalah data pertama dan keempat, dimana kurva konsentrasi monogliserida pada kedua eksperimen tersebut terlihat menanjak dan belum terlihat puncaknya. Karena itu jika dibandingkan dengan keempat data eksperimen yang lain, dipastikan nilai k_3 data pertama dan keempat akan bernilai paling kecil.

Ada perbedaan pada kurva konsentrasi monogliserida untuk data pertama dan keempat. Meskipun keduanya menunjukkan kenaikan, pada data keempat kenaikan kurva itu terlihat menanjak curam yang berarti monogliserida terakumulasi dan sulit terurai. Sementara pada data pertama meskipun terlihat menanjak tetapi tidak curam, yang berarti pembentukan monogliserida berjalan lambat, begitu pula konversinya menjadi biodiesel. Jika kedua data eksperimen ini dibandingkan secara grafis, nilai k_3 data pertama masih akan lebih kecil dari nilai k_3 data keempat, karena kurva pemodelan untuk data pertama terlihat lebih landai (lebih lambat).

Kurva konsentrasi monogliserida yang ideal akan menunjukkan kenaikan sedikit di awal reaksi untuk kemudian turun kembali dan habis. Semakin rendah puncak kurva konsentrasi monogliserida, berarti semakin cepat monogliserida



terkonversi menjadi biodiesel dan gliserol. Maka menurut interpretasi grafik ini, yang akan memiliki nilai k_3 paling besar adalah data kelima.



Gambar 26.13 Perbandingan konsentrasi biodiesel untuk enam data eksperimen

Kurva konsentrasi biodiesel normalnya akan terlihat menaik sejak awal reaksi untuk kemudian konstan pada tahap akhir. Hal itu karena biodiesel merupakan produk utama transesterifikasi yang telah mulai terproduksi semenjak tahap awal reaksi. Pada Gambar 4.13 di atas terlihat gradien kenaikan kurva biodiesel yang bervariasi, ada kurva yang naiknya cepat sekali seperti terlihat pada data keenam, atau menunjukkan kenaikan konsentrasi biodiesel dengan cepat seperti terlihat pada data kedua, ketiga, dan kelima. Ada pula kurva yang terlihat lambat naik seperti terlihat pada data pertama.

Untuk data eksperimen keempat, kurva biodiesel terlihat belum konstan dan masih menanjak. Hal ini dapat diduga sebagai reaksi yang belum selesai. Semakin besar kecuraman kurva akan berarti biodiesel semakin cepat dan mudah terbentuk. Biodiesel terbentuk pada keseluruhan 3 tahap reaksi, berarti konsentrasinya akan dipengaruhi oleh nilai k_1 , k_2 , dan k_3 . Kurva biodiesel tertinggi terlihat pada data kelima, yang dapat diinterpretasikan bahwa data 5 memiliki



nilai k_1 , k_2 , dan k_3 yang besar. Sementara data pertama memiliki kurva biodiesel terendah yang berarti bahwa data eksperimen pertama memiliki nilai k_1 , k_2 , dan k_3 yang kecil.

4.4 ANALISA HASIL ESTIMASI NILAI KONSTANTA LAJU REAKSI

Terdapat 3 konstanta / parameter yang tidak diketahui pada mekanisme ini, yaitu k_1 , k_2 , dan k_3 . Hasil estimasi ketiga parameter berikut analisisnya diberikan pada tabel – tabel berikut di bawah, yang secara berurutan menunjukkan hasil estimasi parameter terhadap data pertama sampai keenam.

Tabel 2.2 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_1

Parameter	Data	Sumber	Nilai
k_1 (min^{-1})	1	Xu, et al.[3]	0,0016
	2	Vicente, et al.[4]	0,089
	3	Noureddini & Zhu [5]	0,050
	4	Lopez, et al.[37]	0,031
	5	Vicente, et al.[38]	0,101
	6	Vicente, et al.[38]	0,156
	7	Marno [13]	0,002
	8	Marno [13]	0,0011
	9	Marno [13]	0,00124

Reaksi tahap pertama yang melibatkan parameter k_1 merupakan reaksi penguraian trigliserida untuk membentuk monogliserida dan biodiesel. Dalam tahapan ini alamnya akan terjadi hambatan transfer massa karena alkohol dan trigliserida bersifat tidak saling larut sehingga sulit bereaksi. Nilai k_1 hasil estimasi menunjukkan hasil yang rendah pada data pertama, ketiga, dan keempat. Sementara untuk tiga eksperimen lain yang dilakukan oleh Vicente diperoleh nilai k_1 yang besar. Penyebabnya adalah pada seluruh eksperimennya, Vicente menggunakan pengaduk dengan kecepatan 600 rpm yang mampu menghilangkan batasan transfer massa di awal reaksi. Selain itu penggunaan suhu yang tinggi juga mempercepat reaksi sehingga nilai k menjadi besar. Nilai k_1 terkecil diperoleh pada data pertama, padahal temperatur yang digunakan pada eksperimen ini sudah cukup tinggi (40°C), sehingga diduga penyebabnya adalah pengadukan yang kurang sempurna atau jumlah katalis yang kurang. Secara umum, nilai k_1



merupakan yang terkecil dibandingkan nilai k_2 atau k_3 yang berarti tahap awal reaksi merupakan tahap paling lambat dari keseluruhan reaksi.

Tabel 3.3 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_2

Parameter	Data	Sumber	Nilai
k_2 (min^{-1})	1	Xu, et al.[3]	0,0033
	2	Vicente, et al.[4]	0,520
	3	Noureddini & Zhu [5]	0,130
	4	Lopez, et al.[37]	0,027
	5	Vicente, et al.[38]	1,667
	6	Vicente, et al.[38]	1,076
	7	Marno [13]	0,0005
	8	Marno [13]	0,0000001
	9	Marno [13]	0,0003

Secara teori, seharusnya pada reaksi tahap kedua akan berlangsung lebih cepat dari reaksi tahap awal. Karena hambatan transfer massa yang terjadi di tahap awal reaksi seharusnya sudah berkurang. Biodiesel yang telah terbentuk sejak tahapan awal akan bertindak sebagai co-solvent yang membantu terjadinya reaksi antara digliserida dengan alkohol membentuk monogliserida dan biodiesel. Teori ini terbukti benar karena pada seluruh data eksperimen, hasil estimasi k_2 memberikan nilai yang lebih besar dari k_1 . Nilai parameter k_2 paling besar diperoleh dari data kelima, dan yang terkecil diperoleh dari estimasi parameter data pertama. Nilai k_2 yang kecil pada data pertama ini tentunya berkorelasi dengan nilai k_1 yang juga rendah. Dapat dikatakan bahwa pada eksperimen pertama reaksi berjalan sangat lambat yang ditunjukkan oleh rendahnya nilai konstanta laju reaksi untuk data tersebut.

Tabel 4.4 Tabel hasil estimasi untuk nilai k_3

Parameter	Data	Sumber	Nilai
k_3 (min^{-1})	1	Xu, et al.[3]	0,0013
	2	Vicente, et al.[4]	0,430
	3	Noureddini & Zhu [5]	0,840
	4	Lopez, et al.[37]	0,008
	5	Vicente, et al.[38]	2,000
	6	Vicente, et al.[38]	1,108
	7	Marno [13]	0,013
	8	Marno [13]	0,000105
	9	Marno [13]	0,0008



Nilai k_3 yang besar akan berarti cepatnya penguraian digliserida memproduksi biodiesel dan gliserol. Pada data pertama, diduga reaksi tahap akhir ini terganggu. Hal tersebut ditunjukkan lewat rendahnya nilai k_3 hasil estimasi untuk data pertama. Data keempat juga menunjukkan nilai k_3 yang rendah padahal perbandingan minyak : alkohol yang tersedia sangat mencukupi yaitu sebesar 1:6. Penyebabnya diduga tidak berkaitan dengan aspek kinetika reaksi tetapi memang hanya data yang disajikan belum lengkap. Diduga data yang disajikan hanya sampai pertengahan reaksi saja sehingga tidak mencukupi bila digunakan untuk mengestimasi k_3 . Akibatnya, nilai k_3 yang diperoleh untuk data keempat terbilang kecil.

Keempat data lainnya menunjukkan nilai k_3 yang besar jika dibandingkan dengan nilai k_1 atau k_2 . Nilai k_3 terbesar didapat dari data kelima. Eksperimen kelima ini merupakan eksperimen yang berjalan paling cepat pada semua tahapan reaksi. Sedangkan eksperimen yang berlangsung paling lama adalah eksperimen pertama, terlihat dari nilai konstanta laju setiap tahapannya yang selalu memberikan nilai paling kecil.

4.5 PERBANDINGAN EFEK KATALIS

Katalis mempunyai peran besar dalam menentukan laju reaksi. Jika dibandingkan antara sesama reaksi yang berkataliskan alkali, dapat ditunjukkan pada dua percobaan yang sama – sama dilakukan oleh Vicente, yaitu pada data kedua dan keenam. Kedua data hasil eksperimen ini diperoleh pada kondisi temperatur yang sama yaitu 25 °C, dan berbeda dalam penggunaan katalis. Untuk data kedua jumlah katalis yang digunakan sebanyak 1% dari berat minyak, sedangkan untuk data keenam digunakan katalis sebanyak 1,5% dari berat minyak. Hasilnya, konstanta laju hasil estimasi untuk data keenam jauh lebih besar dibandingkan untuk data kedua. Jelaslah bahwa meningkatkan jumlah katalis yang digunakan dalam reaksi akan membuat reaksi lebih cepat mencapai kesetimbangan. Dari enam set data eksperimen yang telah dicoba untuk dimodelkan sebelumnya, kebanyakan peneliti melakukan transesterifikasi dengan menggunakan katalis alkali, hanya satu peneliti yang menggunakan katalis enzim dalam reaksinya. Data hasil estimasi parameter dan kaitannya dengan jenis katalis yang digunakan telah dirangkumkan pada Tabel 4.5 di bawah.

**Tabel 5.5** Perbandingan Katalis Yang Digunakan Oleh Masing – Masing Peneliti dan Nilai Konstanta Laju Hasil Estimasi

Data	Sumber	Katalis	Nilai Parameter		
			k_1	k_2	k_3
1	Xu, et al.[3]	Enzim (Novozym 435)	0,0016	0,0033	0,0013
2	Vicente, et al.[4]	Alkali (KOH)	0,089	0,520	0,430
3	Noureddini & Zhu [5]	Alkali (NaOH)	0,050	0,130	0,840
4	Lopez, et al.[37]	Alkali (ETS – 10)	0,031	0,027	0,008
5	Vicente, et al.[38]	Alkali (KOH)	0,101	1,667	2,000
6	Vicente, et al.[38]	Alkali (KOH)	0,156	1,076	1,108
7	Marno [13]	Free lipase	0,002	0,0005	0,013
8	Marno [13]	Immobilised lipase	0,0011	0,0000001	0,000105
9	Marno [13]	Enzim (Novozym 435)	0,00124	0,0003	0,0008

Katalis alkali telah dikenal mampu membantu reaksi transesterifikasi berjalan lebih cepat dibandingkan jika digunakan katalis asam. Dalam Tabel 4.5 terlihat nilai konstanta laju terbesar dihasilkan lewat penggunaan katalis alkali pada eksperimen yang dilakukan oleh Vicente, et al.[38] (set data nomor lima). Sedangkan katalis enzim memberikan nilai konstanta laju terkecil pada eksperimen oleh Xu, et al.[3]. Akan tetapi tidak dapat langsung begitu saja dikatakan bahwa kinerja katalis enzim lebih buruk daripada katalis alkali, karena keenam set data diperoleh lewat percobaan dengan kondisi reaksi yang berbeda – beda. Telah dibuktikan pula bahwa selain katalis, kenaikan temperatur dan pengadukan dapat pula mendorong reaksi berjalan lebih cepat. Kondisi pengadukan, temperatur, dan perbandingan konsentrasi molar minyak nabati terhadap alkohol yang digunakan pada masing – masing reaksi berbeda untuk keenam data. Sebab itulah perbandingan langsung antarkatalis tidak dapat dilakukan.

4.6 ANALISA SENSITIVITAS

Pengujian sensitivitas parameter - parameter hasil estimasi dilakukan dengan menghitung nilai *sum relative error* dari parameter yang diperoleh, kemudian dihitung pula *sum relative error* parameter yang nilainya ditambah dan dikurangi 50%. Perbandingan antara ketiga besaran ini akan membantu menunjukkan tingkat kebenaran hasil estimasi. Tabel 4.6 berikut di bawah akan



menyajikan sensitivitas parameter hasil estimasi pada masing- masing data percobaan.

Terlihat bahwa parameter hasil estimasi memiliki sensitivitas yang tinggi, kecuali pada beberapa parameter saja yang sensitivitasnya rendah. Besarnya deviasi terhadap error bervariasi mulai dari 0,5 % sampai +2227,4 %.

Parameter hasil estimasi yang dinilai meragukan antara lain pada perhitungan error untuk k_1 , k_2 , dan k_3 berdasarkan set data kedua (Vicente, et al.[4]). Pada data percobaan ini, deviasi error dari parameter yang disimpangkan nilainya kecil saja. Disimpulkan bahwa untuk data ini hasil estimasi parameter tidak terlalu meyakinkan. Secara umum juga dapat dikatakan bahwa hasil estimasi untuk data kedua merupakan yang terburuk karena selain error yang dihasilkan cukup besar juga parameter hasil estimasi memiliki sensitivitas yang rendah.

Tabel 6.6 Sensitivitas Parameter Hasil Estimasi

Data	P	Nilai	Error	Deviasi	Data	P	Nilai	Error	Deviasi
1 (Xu, et al.[3])	k_1	0,0008	9,8367	+352,7 %	2 (Vicente, et al.[4])	k_1	0,0445	10,5985	+ 1,27 %
		0,0016	2,1728	Minimum			0,0890	10,4648	Minimum
		0,0024	7,8174	+259,8 %			0,1335	12,4915	+ 19,37 %
	k_2	0,00164	6,8892	+73,4 %		k_2	0,26	13,6641	+ 7,73 %
		0,00327	3,9721	Minimum			0,52	12,68338	Minimum
		0,00491	4,5409	+14,3 %			0,78	13,09681	+ 3,26 %
	k_3	0,00065	3,1974	+ 152,9%		k_3	0,215	14,61361	+ 6,42 %
		0,00130	1,2643	Minimum			0,43	13,73189	Minimum
		0,00195	2,1761	+ 72,1 %			0,645	14,13138	+ 2,91 %
3 (Noureddini & Zhu [5])	k_1	0,025	4,3378	+ 10,9 %	4 (Lopez, et al.[37])	k_1	0,0155	2,1438	+2227,4%
		0,050	3,9129	Minimum			0,0310	0,0921	Minimum
		0,075	8,4922	+ 117,0%			0,0465	2,0137	+2086,1%
	k_2	0,065	3,8856	+ 5,9 %		k_2	0,0135	0,7940	+ 160,1 %
		0,130	3,6667	Minimum			0,0270	0,3053	Minimum
		0,195	5,7942	+ 58,0 %			0,0405	0,7406	+ 142,6 %
	k_3	0,420	16,2382	+ 21,9 %		k_3	0,004	5,2114	+ 0,5 %
		0,840	13,3227	Minimum			0,008	5,1865	Minimum
		1,260	13,9163	+ 4,5 %			0,012	5,2117	+ 0,5 %



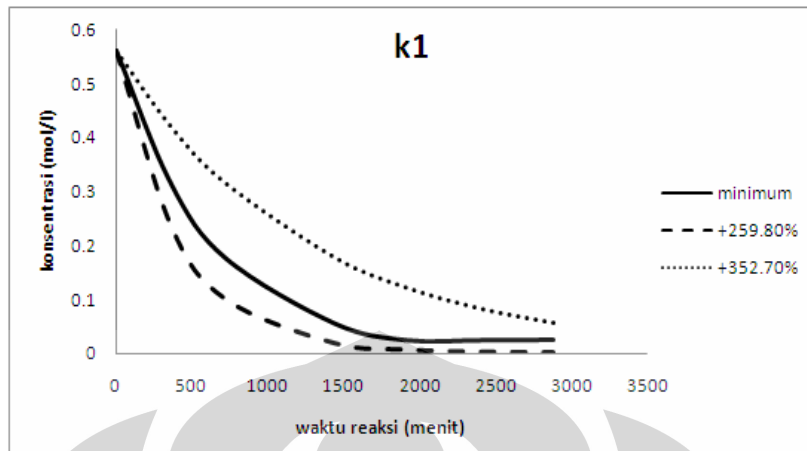
5 (Vicente, et al.[38])	k ₁	0.051	14,7286	+ 58,3 %	6 (Vicente, et al.[38])	k ₁	0,078	6,8726	+ 920,3 %
		0.101	9,3021	Minimum			0,156	0,6736	Minimum
		0.152	12,9642	+ 39,4 %			0,234	5,6472	+ 738,4 %
	k ₂	0.833	11,2291	+ 14,2 %		k ₂	0,538	3,7638	+ 459,3 %
		1.667	9,8344	Minimum			1,076	0,6729	Minimum
		2.501	10,4284	+ 6,1 %			1,614	1,7237	+ 156,2 %
	k ₃	1	11,2046	+ 12,2 %		k ₃	0,554	3,5289	+ 563,3%
		2	9,9839	Minimum			1,108	0,5320	Minimum
		3	10,6156	+ 6,3 %			1,662	1,5719	+ 195,5 %
7 (Marno [13])	k ₁	0.001	6,8475	72,3 %	8 (Marno [13])	k ₁	0,00055	6,3312	+ 71,5 %
		0.002	3,9733	Minimum			0,0011	3,6923	Minimum
		0.003	6,6979	68,6 %			0,00165	4,6992	+ 27,3 %
	k ₂	0.00025	2,0757	32,0 %		k ₂	5E-08	10,8322	- 0,002 %
		0.0005	1,5721	Minimum			1E-07	10,8324	Minimum
		0.00075	1,9944	26,9 %			1,5E-07	10,8327	+ 0,002 %
	k ₃	0.0065	4,0514	79,8 %		k ₃	0,000035	16,1754	+ 0,016 %
		0.013	2,2536	Minimum			0,00007	16,1729	Minimum
		0.0195	2,9839	32,4 %			0,000105	16,1737	+ 0,005 %
9 (Marno [13])	k ₁	0,00062	6,3808	106,9 %					
		0,00124	3,0825	Minimum					
		0,00186	4,3029	39,6 %					
	k ₂	0,00015	3,2203	2,7 %					
		0,0003	3,1367	Minimum					
		0,00045	3,3407	6,5 %					
	k ₃	0,0004	9,2129	1,8 %					
		0,0008	9,0462	Minimum					
		0,0012	9,2469	2,2 %					

Ket: P : Parameter

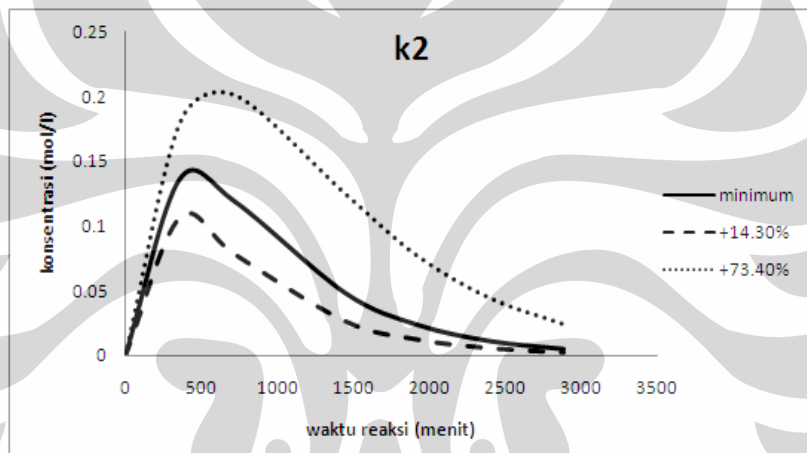
Hasil estimasi parameter k₃ untuk data keempat (Lopez, et.al.[37]) juga memiliki deviasi error yang kecil yaitu hanya 0,5 % saja. Hal ini berarti nilai k₃ hasil estimasi dianggap tidak terlalu baik karena sensitivitasnya rendah.

Untuk data - data selebihnya, parameter hasil estimasi mempunyai sensitivitas yang baik sehingga dapat dikatakan cukup meyakinkan.

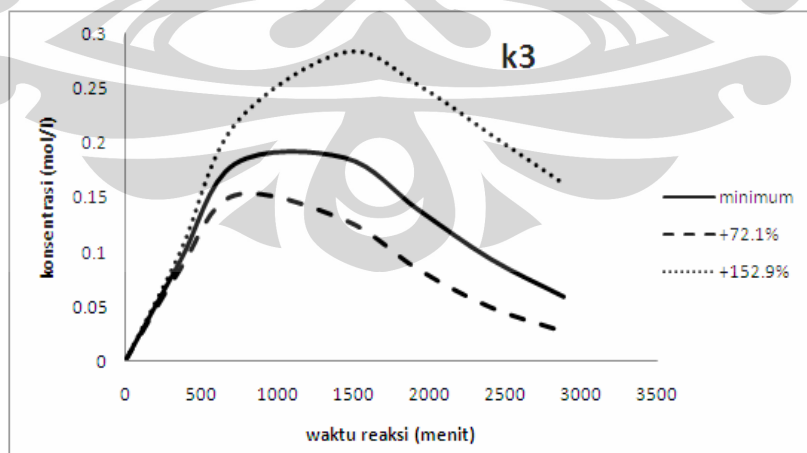
Gambar 4.14 s.d. 4.16 memperlihatkan grafik sensitivitas konsentrasi yang terhadap perubahan nilai k₁, k₂, dan k₃ untuk data pertama.



Gambar 27.14 Grafik sensitivitas k_1



Gambar 28.15 Grafik error untuk nilai k_2

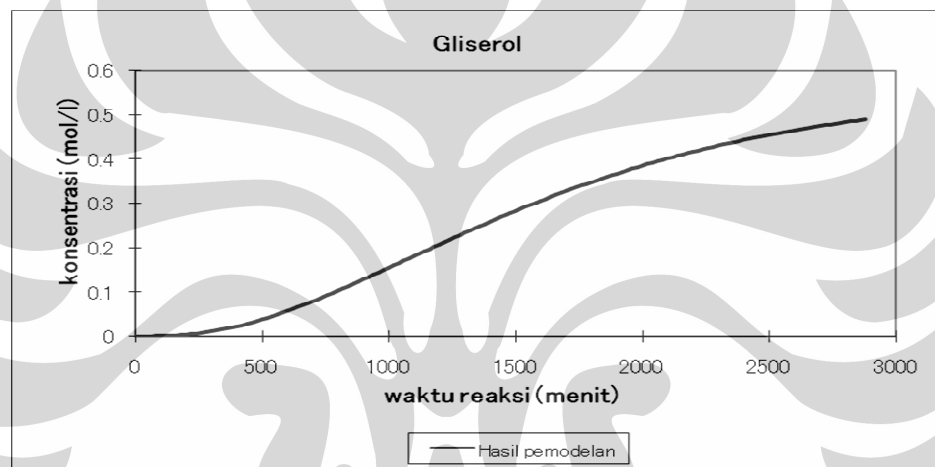


Gambar 29.16 Grafik error untuk nilai k_3

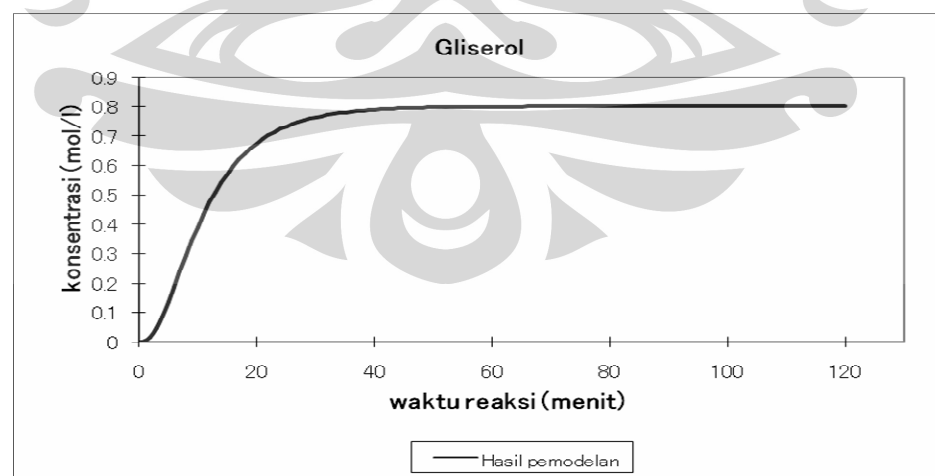


4.7 SIMULASI KONSENTRASI GLISEROL

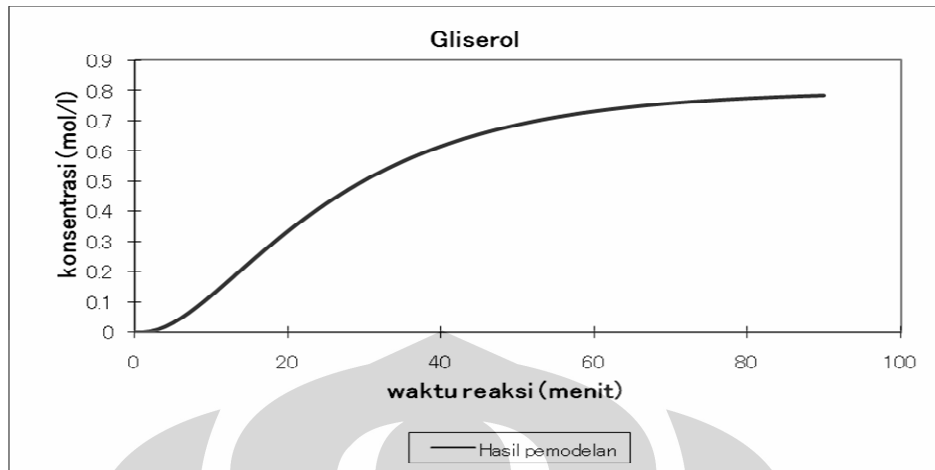
Gliserol merupakan salah satu produk akhir reaksi transesterifikasi selain biodiesel. Produk utama reaksi memang biodiesel, tetapi gliserol juga merupakan salah satu bahan baku yang bernilai tinggi dalam industri kimia. Karena itu penting juga untuk mengetahui tingkat produksi gliserol dalam reaksi. Dari pemodelan yang telah dilakukan sebelumnya, dapat diketahui konsentrasi gliserol yang terbentuk selama reaksi berjalan. Konsentrasi gliserol pada tiap – tiap waktu reaksi yang dihitung dengan pemodelan ditunjukkan pada gambar 4.11 sampai 4.16 di bawah.



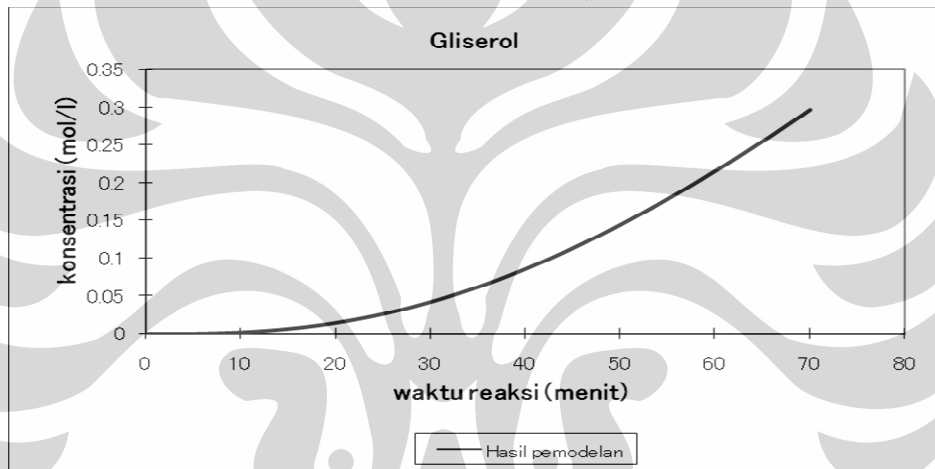
Gambar 30.17 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data pertama (eksperimen oleh Xu, et al.[3]).



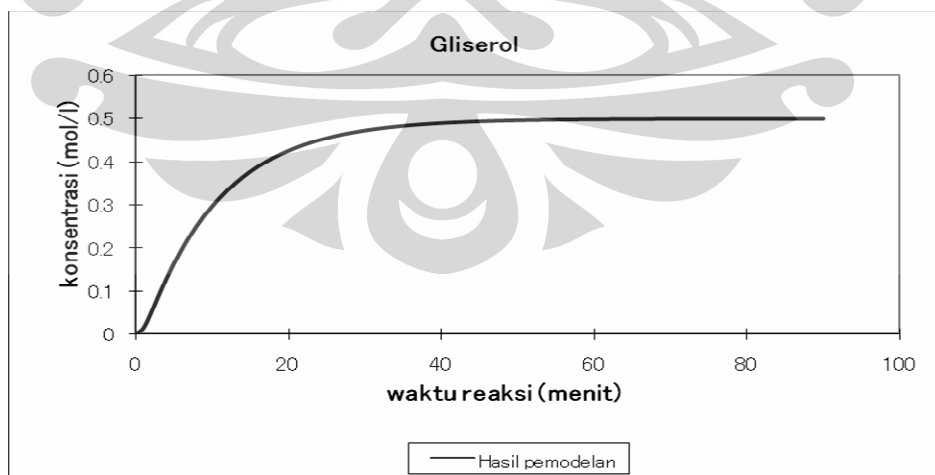
Gambar 31.18 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kedua (hasil eksperimen Vicente, et al.[4]).



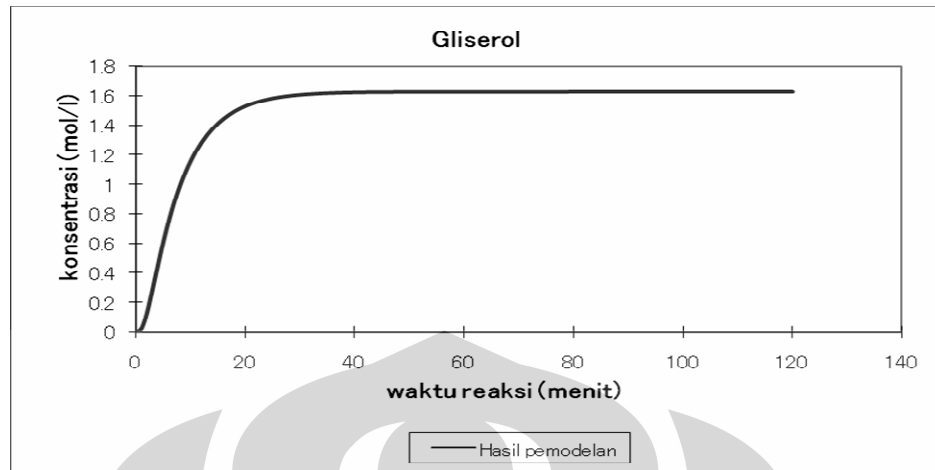
Gambar 32.19 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data ketiga (hasil eksperimen Nouredini dan Zhu[5]).



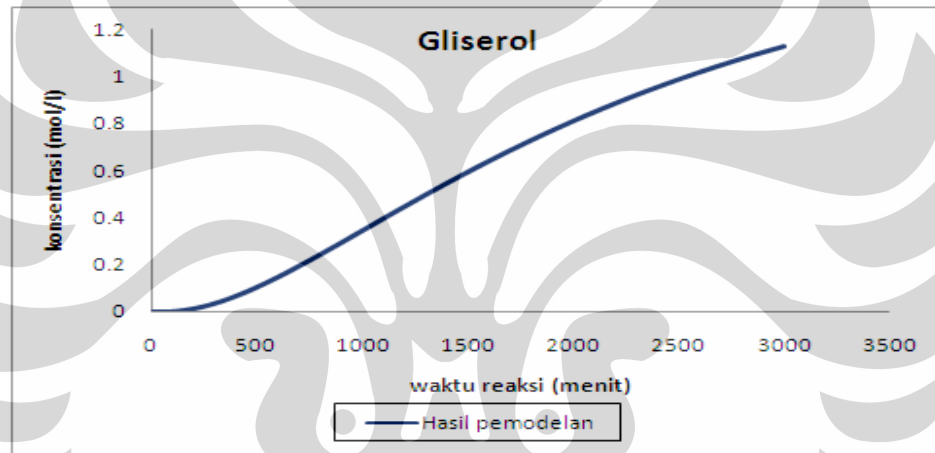
Gambar 33.20 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data keempat (hasil eksperimen Lopez, et al.[37]).



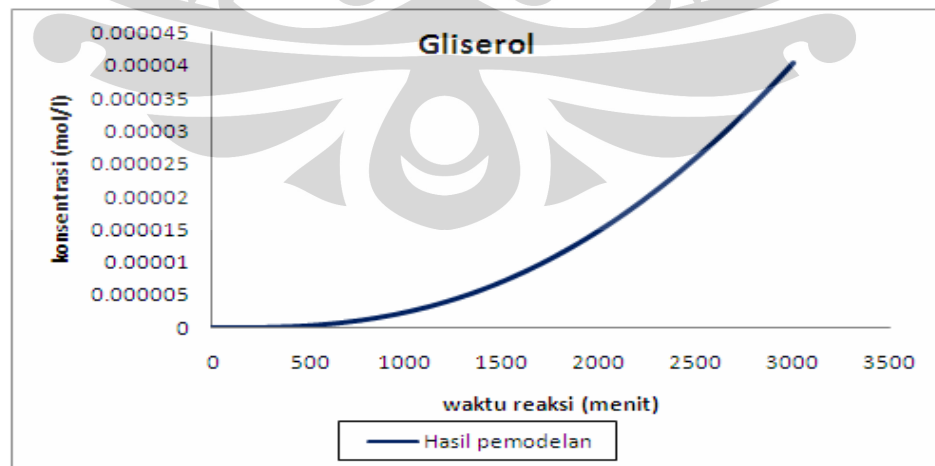
Gambar 34.21 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kelima (hasil eksperimen Vicente, et al.[38]).



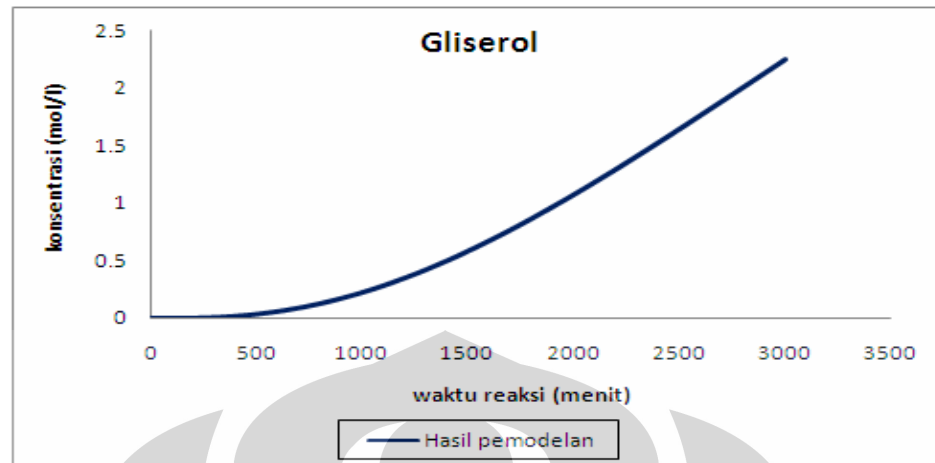
Gambar 35.22 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data keenam (hasil eksperimen Vicente, et al.[38]).



Gambar 36.23 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data ketujuh (hasil eksperimen Marno[13]).



Gambar 37.24 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kedelapan (hasil eksperimen Marno[13]).



Gambar 38.25 Hasil simulasi konsentrasi gliserol terhadap data kesembilan (hasil eksperimen Marno[13]).

Kebanyakan kurva produksi gliserol menunjukkan bentuk yang menanjak pada awal reaksi untuk kemudian konstan. Saat konsentrasi gliserol cenderung konstan berarti reaksi telah mendekati kesetimbangannya. Karena gliserol merupakan produk dari tahapan akhir reaksi, maka laju pembentukan gliserol pada setiap waktu dipengaruhi oleh nilai k_3 . Semakin besar nilai parameter k_3 berarti laju pembentukan gliserol semakin cepat dan mudah.

Untuk data pertama (eksperimen oleh Xu, et al[3]), laju produksi gliserol terlihat agak lambat. Hal ini sesuai dengan hasil estimasi parameter yang menunjukkan bahwa nilai k_3 untuk data ini adalah yang terkecil. Sementara laju pembentukan gliserol yang cepat terlihat pada hasil simulasi data kedua, keempat dan kelima. Grafik hasil simulasi pada masing – masing data eksperimen ini menunjukkan kenaikan jumlah konsentrasi gliserol yang cepat dan dalam waktu singkat untuk kemudian konstan.

Satu grafik yang menunjukkan bentuk agak berbeda terlihat pada Gambar 4.20 yang merupakan hasil simulasi gliserol terhadap data penelitian oleh Lopez, et al[37]. Pada grafik ini konsentrasi gliserol baru terlihat naik dan belum konstan. Pada akhirnya konsentrasi gliserol haruslah konstan, karena seluruh monogliserida yang nantinya membentuk gliserol akan habis. Maka itu, penafsiran dari grafik ini pastilah bahwa reaksi belum berjalan sempurna sampai tahap akhirnya. Dimana penafsiran ini semakin memperkuat kesimpulan serupa yang telah diungkapkan sebelumnya.

BAB V

KESIMPULAN

1. Model kinetika reaksi bertingkat irreversibel mampu untuk menggambarkan hasil eksperimen reaksi transesterifikasi.
2. Nilai estimasi parameter hasil pemodelan sebagai berikut:

Data	Sumber	Nilai Parameter		
		k_1	k_2	k_3
1	Xu, et al.[3]	0,0016	0,0032	0,0013
2	Vicente, et al.[4]	0,123	0,423	0,537
3	Noureddini & Zhu [5]	0,05	0,130	0,84
4	Lopez, et al.[37]	0,031	0,027	0,008
5	Vicente, et al.[38]	0,101	1,667	2,000
6	Vicente, et al.[38]	0,156	1,076	1,108
7	Marno [13]	0,002	0,0005	0,013
8	Marno [13]	0,0011	0,0000001	0,000105
9	Marno [13]	0,00124	0,0003	0,0008

3. Sensitivitas dari parameter hasil estimasi di atas cukup baik kecuali pada data kedua dan ketiga dimana parameter k_1 , k_2 , dan k_3 memiliki sensitivitas yang rendah. Sebaliknya, harga parameter hasil estimasi cukup meyakinkan.
4. Model kinetika reaksi bertingkat mampu untuk memprediksi produksi gliserol.

DAFTAR ACUAN

- [1]H.M. Chang, H.F. Liao, C.C. Lee, C.J. Shieh, Optimized synthesis of lipase-catalyzed biodiesel by novozym 435, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 80 (2005) 307 – 312.
- [2]A. Pandey, S. Benjamin, C.R. Soccol, P. Nigam, N. Krieger, V.T. Soccol, The realm of microbial lipases in biotechnology, *Biotechnol.Appl. Biochem.* 29 (1999) 119 – 131.
- [3]Y. Xu, W. Du, D. Liu, Study on the kinetics of enzymatic interesterification of triglycerides for biodiesel production with methyl acetate as the acyl acceptor, *Journal of Molecular Catalysis B:Enzymatic* 32 (2005) 241 – 245.
- [4]G. Vicente, M. Martinez, J. Aracil, Kinetics of *brassica carinata* oil methanolysis, *Energy and Fuels* 20 (2006) 1722 – 1726.
- [5]H. Noureddini, D.Zhu, Kinetics of transesterification of soybean oil, *JAOCS* 74 (1997) no.11.
- [6]S.K. Karmee, P. Mahesh, R. Ravi, A. Chadha, Kinetic study of the base-catalyzed transesterification of monoglycerides from *pongamia* oil, *JAOCS* 81 (2004) 425 – 430.
- [7]K. Komers, F. Skopal, R. Stloukal, J. Machek, Kinetics and mechanism of the KOH-catalyzed methanolysis of rapeseed oil for bbiodiesel production, *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* 104 (2002) 728 – 737.
- [8]S. Al-Zuhair, Production of biodiesel by lipase-catalyzed transesterification of vegetable oils: a kinetic study, *Biotechnol. Prog.* 21 (2005) 1442 – 1448.
- [9]E. Minami, S. Saka, Kinetics of hydrolysis and methyl esterification for biodiesel production in two-step supercritical methanol process, *Fuel* 85 (2006) 2479 – 2483.
- [10]T. Krawczyk, Boidiesel – Alternative fuel makes inroads but hurdless remain, *INFORM* 7 (1996) 801 – 829.
- [11]Y. Hertanto, Preparasi biodiesel dari minyak kelapa BARCO dengan variasi jumlah NaOH, Skripsi, Program Sarjana Departemen Teknik Gas dan Petrokimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2000).

- [12]F. Ma, M.H. Hanna, Biodiesel production: a review, *Bioresource Technology* 70 (1999) 1-15.
- [13]S.K. Marno, Interesterifikasi kelapa sawit dengan metal asetat menggunakan biokatalis untuk memproduksi biodiesel, Skripsi, Program Sarjana Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2008).
- [14]A.W. Schwab, M.O. Bagby, B. Freedman, Preparation and properties of diesel fuels from vegetable oils, *Fuel* 66 (1987) 1372 – 1378.
- [15]C.E. Goering, Final report for project on Effect of nonpetroleum fuels on durability of direct-injection diesel engines under contract 59-2171-1-6-057-0, USDA, ARS, Peoria, IL (1984).
- [16]D. Pioch, P. Lozano, M.C. Rasoanantoandro, J. Graille, A. Guida, Biofuels from catalytic cracking of tropical vegetable oils, *Oleagineux* 48 (1993) 289 – 291.
- [17]B. Freedman, R.O. Butterfield, E.H. Pryde, Transesterification kinetics of soybean oil, *JAOCs* 63 (1986) 1375 – 1380.
- [18]M. Canakci, J.H. Van Gerpen, Biodiesel production via acid catalysis, *Biokhim. Microbiol.* 30 (1999) 527 – 534.
- [19]L.A. Nelson, T.A. Foglia, W.N. Marmer, Lipase catalyzed production of biodiesel, *JAOCs* 73 (1996) 1191 – 1195.
- [20]G.B. Bradshaw, W.C. Meuly, Preparation of detergents, US Patent 2 (1944) 383 – 579.
- [21]J.E. House, Principles of chemical kinetics, Dubuque, Wm.C.Brown Publishers (1997) pp 43 – 44.
- [22]D. Darnoko, M. Cheryan, Kinetics of palm oil transesterification in a batch reactor, *JAOCs* 77 (2000) 1263 – 1267.
- [23]D. Kusdiana, S. Saka, Kinetics of transesterification in rapeseed oil to biodiesel fuel as treated in supercritical methanol, *Fuel* 80 (2001) 693 – 698.
- [24]M. Wirahadikusumah, Biokimia protein, enzim, dan asam amino, Bandung, Penerbit ITB (1989).
- [25]F.A. Bettelheim, J. March, Introduction to organic & biochemistry 2nd ed., Philadelphia, Harcourt Brace College Publishers (1995).

- [26]O. Kirk, T. Vedel, C. Crone, Industrial enzyme applications, *Current Opinion on Biotechnology* 13 (2002) 345 – 351.
- [27]D.B. Marks, A.D. Marks, C.M. Smith, *Biokimia kedokteran, sebuah pendekatan klinis*, Jakarta, EGC (2000).
- [28]Timotius, *Mikrobiologi dasar*, Salatiga, Universitas Kristen Satya Wacana (1982).
- [29]Fardiaz, *Mikrobiologi pangan*, Jakarta, Gramedia Pustaka Utama (1992).
- [30]O.P. Ward, Hydrolitic enzyme, dalam M. Young (ed.), *Comprehensive biotechnology: The principles, application, and regulation of biotechnology in industry, agriculture, and medicine*, Oxford, Pergamon Press (1985).
- [31]K.R. Kiran, S. Divakar, Lipase catalyzed synthesis of organic acid esters of lactic acid in non-aqueous media, *J. Biotechnol* 87 (2001) 109 – 21.
- [32]A. Liese, K. Seelbach, C. Wandrey, editors, *Industrial biotransformation*, Weinheim, Wiley-VCH (2000).
- [33]E.N. Vulfson, Industrial applications of lipase, dalam: P. Wooley, S.B. Peterson, editor, *Lipase – Their structure, biochemistry and applications*, Cambridge, Cambridge University Press (1994) pp 271 – 88.
- [34]H. Fukuda, A. Kondo, H. Noda, Biodiesel fuel production by transesterification of oil, *J. Biosci. Bioeng* 92 (2001) 405 – 416.
- [35]H. Hermansyah, A. Wijanarko, M. Gozan, R. Arbianti, T.S. Utami, M. Kubo, N. S. Kitakawa, T. Yonemoto, Consecutive reaction model for triglyceride hydrolysis using lipase (2007).
- [36]H. Hermansyah, M. Kubo, N. S. Kitakawa, T. Yonemoto, Mathematical model for stepwise hydrolysis of triolein using *Candida rugosa* lipase in biphasic oil-water system, *Biochemical Engineering Journal* 31 (2006) 125 – 132
- [37]D.E. Lopez, J.G. Goodwin Jr., D.A. Bruce, E. Lotero, Transesterification of triacetin with methanol on solid acid and base catalysts, *Applied Catalysis A: General* 295 (2005) 97 – 105.
- [38]G. Vicente, M. Martinez, J. Aracil, A. Esteban, Kinetics of sunflower oil methanolysis, *Ind. Eng. Chem. Res.* 44 (2005) 5447 – 5454.

DAFTAR PUSTAKA

- Al-Zuhair, Sulaiman, Production of biodiesel by lipase-catalyzed transesterification of vegetable oils: a kinetic study, *Biotechnol. Prog.* 21 (2005) 1442 – 1448.
- Bettelheim, F.A., J. March, Introduction to organic & biochemistry 2nd ed., Philadelphia, Harcourt Brace College Publishers (1995).
- Bradshaw, G.B., W.C. Meuly, Preparation of detergens, US Patent 2 (1944) 383 – 579.
- Canakci, M., J.H. Van Gerpen, Biodiesel production via acid catalysis, *Biokhim. Microbiol.* 30 (1999) 527 – 534.
- Chang, H.M., H.F. Liao, C.C. Lee, C.J. Shieh, Optimized synthesis of lipase-catalyzed biodiesel by novozym 435, *Journal of Chemical Technology and Biotechnology* 80 (2005) 307 – 312.
- Darnoko, D., M. Cheryan, Kinetics of palm oil transesterification in a batch reactor, *JAOCS* 77 (2000) 1263 – 1267.
- Fardiaz, Mikrobiologi pangan, Jakarta, Gramedia Pustaka Utama (1992).
- Freedman, B., R.O. Butterfield, E.H. Pryde, Transesterification kinetics of soybean oil, *JAOCS* 63 (1986) 1375 – 1380.
- Fukuda, H., A. Kondo, H. Noda, Biodiesel fuel production by transesterification of oil, *J. Biosci. Bioeng* 92 (2001) 405 – 416.
- Harwood, H.J., Oleochemicals as a fuel: Mechanical and economic feasibility, *JAOCS* 61 (1984) 315 – 324.
- Hermansyah, Heri, Anondho Wijanarko, Misri Gozan, Rita Arbianti, Tania S. Utami, M. Kubo, N. S. Kitakawa, T. Yonemoto, Consecutive reaction model for triglyceride hydrolysis using lipase (2007).
- Hermansyah, Heri, Masaki Kubo, N. S. Kitakawa, T. Yonemoto, Mathematical model for stepwise hydrolysis of triolein using *Candida rugosa* lipase in biphasic oil-water system, *Biochemical Engineering Journal* 31 (2006) 125 – 132
- Hertanto, Yudi, Preparasi biodiesel dari minyak kelapa BARCO dengan variasi jumlah NaOH. Skripsi. program sarjana, Departemen Teknik Gas dan Petrokimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2000).
- House, J.E., Principles of chemical kinetics, Dubuque, Wm.C.Brown Publishers (1997) pp 43 – 44.

- Karmee, S.K., P. Mahesh, R. Ravi, A. Chadha, Kinetic study of the base-catalyzed transesterification of monoglycerides from *Pongamia* oil, *JAACS* 81 (2004) 425 – 430.
- Kiran, K.R., S. Divakar, Lipase catalyzed synthesis of organic acid esters of lactic acid in non-aqueous media, *J. Biotechnol* 87 (2001) 109 – 21.
- Kirk, O., T. Vedel, C. Crone, Industrial enzyme applications, *Current Opinion on Biotechnology* 13 (2002) 345 – 351.
- Komers, Karel, F. Skopal, R. Stloukal, J. Machek, Kinetics and mechanism of the KOH-catalyzed methanolysis of rapeseed oil for biodiesel production, *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* 104 (2002) 728 – 737.
- Krawczyk T., Biodiesel – Alternative fuel makes inroads but hurdles remain, *INFORM* 7 (1996) 801 – 829.
- Kusdiana, D., S. Saka, Kinetics of transesterification in rapeseed oil to biodiesel fuel as treated in supercritical methanol, *Fuel* 80 (2001) 693 – 698.
- Liese, A., K. Seelbach, C. Wandrey, editors, *Industrial biotransformation*, Weinheim, Wiley-VCH (2000).
- Lopez, Dora E., J.G. Goodwin Jr., D.A. Bruce, E. Lotero, Transesterification of triacetin with methanol on solid acid and base catalysts, *Applied Catalysis A: General* 295 (2005) 97 – 105.
- Ma, Fangrui, M.H. Hanna, Biodiesel production: a review, *Bioresource Technology* 70 (1999) 1-15.
- Marks, D.B., A.D. Marks, C.M. Smith, *Biokimia kedokteran, sebuah pendekatan klinis*, Jakarta, EGC (2000).
- Marno, Septhian K., *Interesterifikasi kelapa sawit dengan metal asetat menggunakan biokatalis untuk memproduksi biodiesel*, Skripsi, Program Sarjana Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2008).
- Minami, Eiji, S. Saka, Kinetics of hydrolysis and methyl esterification for biodiesel production in two-step supercritical methanol process, *Fuel* 85 (2006) 2479 – 2483.
- Nelson, L.A., T.A. Foglia, W.N. Marmer, Lipase catalyzed production of biodiesel, *JAACS* 73 (1996) 1191 – 1195.
- Noureddini, H., D.Zhu, Kinetics of transesterification of soybean oil, *JAACS* 74 (1997) no.11.

Pandey, A., S. Benjamin, C.R. Soccol, P. Nigam, N. Krieger, V.T. Soccol, The realm of microbial lipases in biotechnology, *Biotechnol. Appl. Biochem.* 29 (1999) 119 – 131.

Timotius, *Mikrobiologi dasar*, Salatiga, Universitas Kristen Satya Wacana (1982).

Vicente, Gemma., M. Martinez, J. Aracil, Kinetics of *brassica carinata* oil methanolysis, *Energy and Fuels* 20 (2006) 1722 – 1726.

Vicente, Gemma, M. Martinez, J. Aracil, A. Esteban, Kinetics of sunflower oil methanolysis, *Ind. Eng. Chem. Res.* 44 (2005) 5447 – 5454.

Vulfson, E.N., Industrial applications of lipase, dalam: P. Wooley, S.B. Peterson, editor, *Lipase – Their structure, biochemistry and applications*, Cambridge, Cambridge University Press (1994) pp 271 – 88.

Ward, O.P., Hydrolitic enzyme, dalam M. Young (ed.), *Comprehensive biotechnology: The principles, application, and regulation of biotechnology in industry, agriculture, and medicine*, Oxford, Pergamon Press (1985).

Wirahadikusumah, M., *Biokimia protein, enzim, dan asam amino*, Bandung, Penerbit ITB (1989).

Xu, Y., W. Du, D. Liu, Study on the kinetics of enzymatic interesterification of triglycerides for biodiesel production with methyl acetate as the acyl acceptor, *Journal of Molecular Catalysis B:Enzymatic* 32 (2005) 241 – 245.

LAMPIRAN

Lampiran 1 Perhitungan Fitting Untuk Data Pertama (eksperimen oleh Xu, et al.[3] (tahun 2005))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0.56	0	0	0
360	0.2	0.06	0.07	0.6
720	0.06	0.04	0.09	1
1440	0.03	0.02	0.1	1.25
1920	0.02	0.02	0.1	1.28
2400	0.02	0.02	0.1	1.29
2880	0.01	0.02	0.1	1.33

sum error k1= 2.172761257 sum error k2 = 3.972098321 sum error k3= 1.26432988
 $\Delta t = 20$
k1 = 0.0016 k2 = 0.00327 k3 = 0.0013

Calculated result						
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)	
0	0.56	0	0	0	0	
20	0.542363686	0.017068999	0.000562391	0.018208554	4.9245E-06	
40	0.5252828	0.032519845	0.00215915	0.036952761	3.8206E-05	
60	0.508739849	0.046471908	0.004663183	0.056173454	0.00012506	
80	0.492717892	0.059036469	0.007958097	0.075815289	0.00028754	
100	0.477200522	0.070317246	0.011937422	0.09582652	0.00054481	
120	0.462171846	0.080410893	0.016503886	0.116158788	0.00091337	
140	0.447616475	0.08940746	0.021568736	0.136766919	0.00140733	
160	0.433519503	0.097390825	0.027051107	0.157608735	0.00203857	
180	0.419866492	0.104439104	0.032877438	0.178644878	0.00281697	
200	0.406643461	0.110625028	0.038980919	0.199838643	0.00375059	
220	0.393836868	0.116016294	0.045300988	0.221155818	0.00484585	
240	0.381433599	0.120675905	0.051782852	0.242564541	0.00610764	
260	0.369420951	0.124662472	0.058377047	0.264035155	0.00753953	
280	0.357786623	0.128030511	0.065039029	0.28554008	0.00914384	
300	0.346518699	0.13083071	0.071728792	0.30705369	0.0109218	
320	0.335605641	0.133110185	0.07841051	0.328552196	0.01287366	
340	0.325036272	0.134912719	0.085052211	0.350013533	0.0149988	
360	0.314799769	0.136278982	0.091625465	0.371417263	0.01729578	
380	0.304885649	0.137246738	0.098105104	0.392744474	0.01976251	
400	0.295283757	0.137851042	0.104468956	0.413977688	0.02239625	
420	0.285984263	0.13812442	0.110697595	0.435100777	0.02519372	
440	0.276977641	0.138097039	0.116774119	0.45609888	0.0281512	
460	0.268254668	0.137796867	0.122683933	0.476958328	0.03126453	
480	0.259806412	0.137249819	0.128414558	0.49766657	0.03452921	
500	0.25162422	0.136479897	0.13395544	0.518212107	0.03794044	
520	0.243699713	0.13550932	0.139297793	0.538584428	0.04149317	
540	0.236024776	0.134358646	0.144434432	0.558773947	0.04518215	

560	0.228591549	0.133046884	0.149359636	0.578771949	0.04900193
580	0.22139242	0.131591598	0.154069007	0.598570537	0.05294698
600	0.214420016	0.13000901	0.158559353	0.618162579	0.05701162
620	0.207667197	0.12831409	0.162828568	0.637541661	0.06119014
640	0.201127047	0.126520643	0.166875529	0.656702043	0.06547678
660	0.194792869	0.124641388	0.170699999	0.675638618	0.06986574
680	0.188658176	0.122688036	0.174302532	0.69434687	0.07435126
700	0.182716685	0.120671357	0.177684395	0.712822836	0.07892756
720	0.176962312	0.11860125	0.180847489	0.731063075	0.08358895
740	0.171389164	0.116486801	0.183794278	0.749064629	0.08832976
760	0.165991533	0.11433634	0.186527725	0.766824996	0.0931444
780	0.160763893	0.112157497	0.189051231	0.784342097	0.09802738
800	0.155700888	0.10995725	0.191368582	0.801614253	0.10297328
820	0.150797335	0.107741973	0.193483897	0.818640151	0.10797679
840	0.146048212	0.105517477	0.195401582	0.835418829	0.11303273
860	0.141448654	0.103289053	0.197126288	0.851949643	0.118136
880	0.136993953	0.101061509	0.198662873	0.868232252	0.12328167
900	0.132679545	0.098839203	0.200016365	0.884266594	0.12846489
920	0.128501013	0.096626081	0.201191932	0.900052869	0.13368097
940	0.124454076	0.094425702	0.20219485	0.915591516	0.13892537
960	0.120534592	0.092241271	0.203030479	0.930883202	0.14419366
980	0.116738546	0.090075664	0.203704237	0.945928798	0.14948155
1000	0.11306205	0.08793145	0.204221578	0.960729372	0.15478492
1020	0.10950134	0.08581092	0.204587973	0.975286168	0.16009977
1040	0.106052768	0.083716103	0.204808893	0.989600596	0.16542224
1060	0.102712804	0.081648789	0.20488979	1.003674219	0.17074862
1080	0.099478027	0.079610549	0.204836086	1.017508736	0.17607534
1100	0.096345124	0.077602746	0.204653157	1.031105979	0.18139897
1120	0.093310886	0.07562656	0.204346324	1.044467895	0.18671623
1140	0.090372208	0.073682997	0.203920842	1.057596541	0.19202395
1160	0.087526078	0.071772903	0.20338189	1.07049407	0.19731913
1180	0.084769583	0.069896981	0.202734564	1.083162726	0.20259887
1200	0.082099899	0.0680558	0.201983871	1.095604833	0.20786043
1220	0.079514292	0.066249806	0.201134722	1.10782279	0.21310118
1240	0.077010116	0.064479334	0.200191926	1.119819059	0.21831862
1260	0.074584804	0.062744618	0.199160189	1.131596164	0.22351039
1280	0.072235873	0.061045798	0.198044106	1.143156679	0.22867422
1300	0.069960919	0.059382929	0.196848161	1.154503225	0.23380799
1320	0.06775761	0.05775599	0.195576726	1.165638463	0.23890967
1340	0.065623692	0.056164891	0.194234054	1.176565089	0.24397736
1360	0.063556977	0.054609477	0.192824282	1.187285831	0.24900926
1380	0.061555351	0.053089539	0.191351431	1.197803439	0.25400368
1400	0.059616762	0.051604813	0.1898194	1.208120687	0.25895902
1420	0.057739227	0.050154992	0.188231973	1.218240362	0.26387381
1440	0.055920821	0.048739728	0.186592812	1.228165268	0.26874664
1460	0.054159683	0.047358634	0.184905465	1.237898216	0.27357622
1480	0.05245401	0.046011294	0.183173361	1.247442021	0.27836134
1500	0.050802054	0.044697261	0.181399813	1.256799504	0.28310087
1520	0.049202124	0.043416063	0.17958802	1.265973484	0.28779379
1540	0.04765258	0.042167208	0.177741067	1.274966776	0.29243914
1560	0.046151838	0.040950184	0.175861928	1.283782191	0.29703605
1580	0.044698359	0.039764463	0.173953467	1.29242253	0.30158371

1600	0.043290655	0.038609505	0.17201844	1.300890587	0.3060814
1620	0.041927284	0.037484756	0.170059497	1.309189139	0.31052846
1640	0.04060685	0.036389656	0.168079184	1.317320952	0.31492431
1660	0.039328002	0.035323637	0.166079945	1.325288775	0.31926842
1680	0.038089429	0.034286125	0.164064124	1.33309534	0.32356032
1700	0.036889862	0.033276543	0.162033968	1.340743359	0.32779963
1720	0.035728075	0.032294311	0.159991631	1.348235523	0.33198598
1740	0.034602875	0.03133885	0.157939171	1.355574503	0.3361191
1760	0.033513113	0.03040958	0.155878557	1.362762944	0.34019875
1780	0.03245767	0.029505924	0.153811672	1.36980347	0.34422473
1800	0.031435467	0.028627305	0.15174031	1.376698678	0.34819692
1820	0.030445457	0.027773152	0.149666184	1.38345114	0.35211521
1840	0.029486625	0.026942898	0.147590927	1.390063401	0.35597955
1860	0.028557991	0.026135979	0.145516092	1.396537978	0.35978994
1880	0.027658602	0.025351838	0.143443157	1.40287736	0.3635464
1900	0.026787538	0.024589926	0.141373524	1.409084009	0.36724901
1920	0.025943907	0.023849698	0.139308528	1.415160354	0.37089787
1940	0.025126845	0.023130618	0.137249431	1.421108798	0.37449311
1960	0.024335514	0.022432157	0.135197431	1.426931713	0.3780349
1980	0.023569106	0.021753793	0.133153658	1.432631439	0.38152344
2000	0.022826834	0.021095014	0.131119183	1.438210287	0.38495897
2020	0.022107939	0.020455316	0.129095015	1.443670536	0.38834173
2040	0.021411685	0.019834203	0.127082105	1.449014435	0.39167201
2060	0.020737357	0.019231189	0.125081348	1.454244201	0.39495011
2080	0.020084267	0.018645797	0.123093586	1.459362019	0.39817635
2100	0.019451745	0.018077557	0.121119606	1.464370044	0.40135109
2120	0.018839143	0.017526012	0.119160149	1.469270397	0.4044747
2140	0.018245834	0.016990712	0.117215903	1.474065171	0.40754755
2160	0.01767121	0.016471215	0.115287514	1.478756424	0.41057006
2180	0.017114684	0.015967092	0.11337558	1.483346185	0.41354264
2200	0.016575684	0.015477921	0.111480658	1.48783645	0.41646574
2220	0.016053659	0.015003288	0.109603263	1.492229185	0.41933979
2240	0.015548074	0.014542792	0.107743871	1.496526323	0.42216526
2260	0.015058412	0.014096038	0.105902919	1.500729769	0.42494263
2280	0.014584171	0.013662642	0.104080809	1.504841394	0.42767238
2300	0.014124866	0.013242228	0.102277907	1.50886304	0.430355
2320	0.013680026	0.012834429	0.100494546	1.512796519	0.432991
2340	0.013249195	0.012438888	0.098731029	1.51664361	0.43558089
2360	0.012831932	0.012055256	0.096987625	1.520406066	0.43812519
2380	0.012427811	0.011683192	0.095264576	1.524085607	0.44062442
2400	0.012036417	0.011322365	0.093562095	1.527683924	0.44307912
2420	0.011657349	0.010972451	0.09188037	1.531202681	0.44548983
2440	0.011290219	0.010633135	0.090219562	1.53464351	0.44785708
2460	0.010934652	0.01030411	0.088579809	1.538008016	0.45018143
2480	0.010590282	0.009985077	0.086961224	1.541297776	0.45246342
2500	0.010256758	0.009675744	0.0853639	1.544514338	0.4547036
2520	0.009933737	0.009375829	0.083787909	1.547659221	0.45690252
2540	0.00962089	0.009085054	0.082233301	1.55073392	0.45906075
2560	0.009317895	0.008803152	0.08070011	1.553739899	0.46117884
2580	0.009024443	0.008529861	0.07918835	1.556678598	0.46325735
2600	0.008740232	0.008264927	0.077698018	1.55955143	0.46529682
2620	0.008464973	0.008008102	0.076229097	1.56235978	0.46729783

2640	0.008198382	0.007759147	0.074781551	1.56510501	0.46926092
2660	0.007940187	0.007517826	0.073355334	1.567788455	0.47118665
2680	0.007690123	0.007283912	0.071950383	1.570411424	0.47307558
2700	0.007447935	0.007057185	0.070566623	1.572975202	0.47492826
2720	0.007213374	0.00683743	0.069203967	1.575481052	0.47674523
2740	0.0069862	0.006624437	0.067862318	1.577930209	0.47852705
2760	0.006766181	0.006418003	0.066541565	1.580323886	0.48027425
2780	0.006553091	0.006217933	0.06524159	1.582663273	0.48198739
2800	0.006346711	0.006024033	0.063962263	1.584949537	0.48366699
2820	0.006146832	0.005836118	0.062703448	1.587183821	0.4853136
2840	0.005953247	0.005654006	0.061464998	1.589367248	0.48692775
2860	0.005765759	0.005477524	0.06024676	1.591500916	0.48850996
2880	0.005584175	0.005306499	0.059048572	1.593585904	0.49006075

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
360	0.198914	0.604119	0.07161
720	0.974526	0.982439	0.450025
1440	0.36405	0.699213	0.365168
1920	0.06695	0.03083	0.107924
2400	0.247166	0.307011	0.004425
2880	0.321156	1.348486	0.265179

Lampiran 2 Perhitungan Fitting Untuk Data Kedua (eksperimen oleh Vicente, et al.[4] (tahun 2006))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0.8	0	0	0
2	0.6	0.1	0.15	0.25
4	0.5	0.05	0.1	0.6
20	0.06	0.01	0.01	2.1
30	0.02	0.01	0.01	2.2
40	0.01	0.01	0.01	2.25
60	0.01	0.01	0.01	2.25
90	0.01	0.01	0.01	2.25
120	0.01	0.01	0.01	2.25

sum error k1= 10.46480175 sum error k2 = 12.68337982 sum error k3= 13.7318899

$\Delta t = 1$

k1 = 0.089

k2 = 0.52

k3 = 0.43

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	0.8	0	-1.55378E-16	0	0
1	0.731876459	0.052916802	0.01315042	0.085386598	0.00205632
2	0.669553939	0.079870829	0.037703095	0.193893431	0.01287214
3	0.612538457	0.091773166	0.061369716	0.317468581	0.03431866
4	0.560378096	0.095078003	0.079678126	0.449031579	0.06486577

5	0.512659421	0.093592598	0.091799579	0.583036963	0.1019484
6	0.469004202	0.089553094	0.098419781	0.715461425	0.14302292
7	0.429066418	0.084263908	0.100701941	0.843570989	0.18596773
8	0.392529513	0.078477653	0.099819012	0.965637141	0.22917382
9	0.359103888	0.072620836	0.096772273	1.080674392	0.271503
10	0.328524602	0.066927866	0.092346272	1.18822419	0.31220126
11	0.300549278	0.061520581	0.087122839	1.288188165	0.3508073
12	0.274956177	0.056455383	0.081515891	1.380704814	0.38707255
13	0.251542441	0.051751137	0.075809282	1.46606112	0.42089714
14	0.230122489	0.047405642	0.070190432	1.544630819	0.45228144
15	0.21052654	0.043405311	0.064777495	1.616832262	0.48129065
16	0.192599274	0.039730838	0.059640147	1.683100355	0.50802974
17	0.176198593	0.036360472	0.054814914	1.743868363	0.53262602
18	0.161194503	0.03327188	0.050316184	1.799556547	0.55521743
19	0.147468077	0.030443189	0.046143954	1.850565436	0.57594478
20	0.134910518	0.027853525	0.042289194	1.897272202	0.59494676
21	0.12342229	0.025483284	0.038737488	1.940029073	0.61235694
22	0.112912336	0.023314227	0.035471479	1.979163059	0.62830196
23	0.103297351	0.021329487	0.03247248	2.014976494	0.64290068
24	0.094501124	0.019513525	0.029721511	2.047748067	0.65626384
25	0.086453935	0.017852063	0.027199943	2.077734126	0.66849406
26	0.079092	0.016332001	0.024889895	2.105170104	0.6796861
27	0.072356966	0.01494133	0.022774448	2.130271995	0.68992726
28	0.06619545	0.013669052	0.020837753	2.153237794	0.69929775
29	0.060558614	0.012505096	0.019065063	2.174248901	0.70787123
30	0.05540178	0.011440247	0.017442727	2.193471438	0.71571525
31	0.050684073	0.010466068	0.015958147	2.211057496	0.72289171
32	0.0463681	0.009574842	0.014599728	2.227146289	0.72945733
33	0.042419651	0.008759505	0.013356815	2.241865222	0.73546403
34	0.03880743	0.008013596	0.012219632	2.255330886	0.74095934
35	0.035502806	0.007331204	0.011179212	2.267649963	0.74598678
36	0.032479585	0.00670692	0.010227342	2.278920064	0.75058615
37	0.029713804	0.006135796	0.009356497	2.289230498	0.7547939
38	0.027183542	0.005613306	0.008559787	2.298662973	0.75864336
39	0.024868743	0.005135309	0.007830908	2.307292244	0.76216504
40	0.02275106	0.004698015	0.007164088	2.315186704	0.76538684
41	0.020813706	0.004297958	0.006554045	2.322408921	0.76833429
42	0.019041327	0.003931968	0.005995946	2.329016138	0.77103076
43	0.017419874	0.003597143	0.005485369	2.335060723	0.77349761
44	0.015936494	0.003290831	0.005018268	2.340590587	0.77575441
45	0.014579431	0.003010602	0.004590942	2.34564956	0.77781902
46	0.013337928	0.002754236	0.004200005	2.350277739	0.77970783
47	0.012202145	0.0025197	0.003842356	2.354511809	0.7814358
48	0.011163078	0.002305137	0.003515163	2.358385329	0.78301662
49	0.010212493	0.002108844	0.003215832	2.361929002	0.78446283
50	0.009342854	0.001929267	0.00294199	2.365170916	0.78578589
51	0.008547268	0.001764981	0.002691466	2.368136767	0.78699628
52	0.007819431	0.001614685	0.002462276	2.370850062	0.78810361
53	0.007153571	0.001477188	0.002252603	2.373332308	0.78911664
54	0.006544413	0.001351399	0.002060784	2.37560318	0.7900434
55	0.005987127	0.001236321	0.001885299	2.377680677	0.79089125
56	0.005477297	0.001131043	0.001724757	2.379581266	0.7916669

57	0.005010881	0.001034729	0.001577887	2.381320012	0.7923765
58	0.004584182	0.000946618	0.001443523	2.382910695	0.79302568
59	0.004193819	0.000866009	0.0013206	2.384365925	0.79361957
60	0.003836697	0.000792264	0.001208145	2.385697236	0.79416289
61	0.003509985	0.0007248	0.001105266	2.38691518	0.79465995
62	0.003211094	0.00066308	0.001011148	2.38802941	0.79511468
63	0.002937655	0.000606616	0.000925044	2.389048759	0.79553068
64	0.002687501	0.00055496	0.000846273	2.389981305	0.79591127
65	0.002458648	0.000507702	0.000774209	2.390834442	0.79625944
66	0.002249284	0.000464469	0.000708282	2.39161493	0.79657797
67	0.002057747	0.000424918	0.000647968	2.392328955	0.79686937
68	0.001882521	0.000388734	0.000592791	2.392982179	0.79713595
69	0.001722216	0.000355632	0.000542312	2.393579777	0.79737984
70	0.001575562	0.000325348	0.000496132	2.394126488	0.79760296
71	0.001441395	0.000297643	0.000453884	2.394626643	0.79780708
72	0.001318654	0.000272298	0.000415234	2.395084208	0.79799381
73	0.001206365	0.00024911	0.000379875	2.39550281	0.79816465
74	0.001103638	0.000227897	0.000347527	2.395885765	0.79832094
75	0.001009658	0.000208491	0.000317933	2.396236111	0.79846392
76	0.000923681	0.000190737	0.00029086	2.396556623	0.79859472
77	0.000845026	0.000174495	0.000266092	2.396849841	0.79871439
78	0.000773068	0.000159636	0.000243433	2.397118091	0.79882386
79	0.000707238	0.000146042	0.000222704	2.397363499	0.79892402
80	0.000647013	0.000133606	0.000203739	2.397588008	0.79901564
81	0.000591917	0.000122229	0.00018639	2.3977934	0.79909946
82	0.000541513	0.000111821	0.000170518	2.397981302	0.79917615
83	0.000495401	0.000102299	0.000155998	2.398153203	0.7992463
84	0.000453215	9.35874E-05	0.000142714	2.398310466	0.79931048
85	0.000414622	8.5618E-05	0.000130561	2.398454337	0.7993692
86	0.000379315	7.83272E-05	0.000119443	2.398585957	0.79942291
87	0.000347015	7.16573E-05	0.000109272	2.398706369	0.79947206
88	0.000317465	6.55554E-05	9.99671E-05	2.398816528	0.79951701
89	0.000290431	5.9973E-05	9.14545E-05	2.398917306	0.79955814
90	0.0002657	5.48661E-05	8.36667E-05	2.399009502	0.79959577
91	0.000243074	5.0194E-05	7.65422E-05	2.399093847	0.79963019
92	0.000222375	4.59197E-05	7.00243E-05	2.39917101	0.79966168
93	0.000203439	4.20095E-05	6.40614E-05	2.399241602	0.79969049
94	0.000186115	3.84322E-05	5.86063E-05	2.399306183	0.79971685
95	0.000170267	3.51595E-05	5.36157E-05	2.399365265	0.79974096
96	0.000155768	3.21655E-05	4.90501E-05	2.399419315	0.79976302
97	0.000142504	2.94265E-05	4.48732E-05	2.399468763	0.7997832
98	0.000130369	2.69207E-05	4.10521E-05	2.399514	0.79980166
99	0.000119267	2.46283E-05	3.75563E-05	2.399555385	0.79981855
100	0.000109111	2.25311E-05	3.43582E-05	2.399593246	0.799834
101	9.98198E-05	2.06125E-05	3.14325E-05	2.399627883	0.79984814
102	9.13197E-05	1.88572E-05	2.87559E-05	2.39965957	0.79986107
103	8.35435E-05	1.72514E-05	2.63072E-05	2.39968856	0.7998729
104	7.64294E-05	1.57824E-05	2.4067E-05	2.39971508	0.79988372
105	6.99211E-05	1.44385E-05	2.20176E-05	2.399739342	0.79989362
106	6.3967E-05	1.3209E-05	2.01427E-05	2.399761538	0.79990268
107	5.85199E-05	1.20842E-05	1.84275E-05	2.399781845	0.79991097
108	5.35367E-05	1.10551E-05	1.68583E-05	2.399800421	0.79991855

109	4.89778E-05	1.01137E-05	1.54227E-05	2.399817416	0.79992549
110	4.48071E-05	9.25251E-06	1.41094E-05	2.399832964	0.79993183
111	4.09916E-05	8.46462E-06	1.29079E-05	2.399847188	0.79993764
112	3.7501E-05	7.74382E-06	1.18088E-05	2.399860201	0.79994295
113	3.43076E-05	7.0844E-06	1.08032E-05	2.399872105	0.7999478
114	3.13862E-05	6.48113E-06	9.88325E-06	2.399882996	0.79995225
115	2.87135E-05	5.92924E-06	9.04165E-06	2.399892959	0.79995632
116	2.62684E-05	5.42433E-06	8.27171E-06	2.399902074	0.79996004
117	2.40315E-05	4.96243E-06	7.56734E-06	2.399910413	0.79996344
118	2.19851E-05	4.53986E-06	6.92295E-06	2.399918042	0.79996655
119	2.0113E-05	4.15327E-06	6.33343E-06	2.399925021	0.7999694
120	1.84003E-05	3.7996E-06	5.79411E-06	2.399931406	0.79997201

error				
t	T	D	M	
0	0	0	0	0
2	0.012006	0.0500945	1.43170221	
4	0.012969	0.3861768	0.05116784	
20	0.590847	0.8898059	1.52528327	
30	0.881753	0.0180499	0.29421827	
40	0.60632	0.5204988	0.10919533	
60	0.793638	2.9116589	2.46123736	
90	3.596602	3.9131697	3.86834544	
120	3.970668	3.9939253	3.99074016	

Lampiran 3 Perhitungan Fitting Untuk Data Ketiga (eksperimen oleh Nouredini dan Zhu [5] (tahun 1997))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0.8	0	0	0
4	0.7	0.1	0.02	0.15
12	0.45	0.19	0.03	1.05
14	0.3	0.16	0.04	1.25
16	0.25	0.14	0.03	1.4
18	0.2	0.12	0.02	1.6
20	0.18	0.1	0.01	1.65
30	0.15	0.08	0.01	1.8
45	0.11	0.07	0	1.9
60	0.1	0.06	0	1.97
90	0.07	0.05	0	2.1

sum error k1= 3.912872029 sum error k2 = 3.666746368 sum error k3= 13.3226551

$\Delta t = 1$

k1 = 0.05

k2 = 0.13

k3 = 0.84

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	0.8	0	4.82469E-18	0	0
1	0.76098354	0.036566997	0.001879002	0.042036386	0.00057046

2	0.723869934	0.066892916	0.005587257	0.089017107	0.00364989
3	0.688566381	0.091825551	0.009579591	0.141070164	0.01002848
4	0.654984602	0.112105103	0.013258009	0.197577978	0.01965229
5	0.623040626	0.128377503	0.016424643	0.257698471	0.03215723
6	0.592654577	0.141206105	0.019046667	0.320577394	0.04709265
7	0.563750472	0.151081933	0.021155766	0.385428953	0.06401183
8	0.536256037	0.158432682	0.022805574	0.451560952	0.08250571
9	0.510102521	0.163630605	0.02405403	0.518377196	0.10221284
10	0.485224528	0.166999433	0.024956412	0.585371138	0.12281963
11	0.461559848	0.168820444	0.025562891	0.652116676	0.14405682
12	0.439049309	0.169337782	0.025917967	0.718258542	0.16569494
13	0.417636621	0.168763126	0.026060669	0.783503214	0.18753958
14	0.397268243	0.167279776	0.026025014	0.847610705	0.20942697
15	0.377893242	0.165046241	0.025840543	0.91038725	0.23121997
16	0.359463171	0.162199376	0.025532845	0.971678889	0.25280461
17	0.341931946	0.158857142	0.02512404	1.03136584	0.27408687
18	0.325255728	0.155121011	0.024633209	1.089357586	0.29499005
19	0.309392819	0.151078082	0.024076781	1.145588598	0.31545232
20	0.294303553	0.146802931	0.023468868	1.20001461	0.33542465
21	0.279950199	0.14235923	0.022821567	1.252609376	0.354869
22	0.266296867	0.137801162	0.022145213	1.303361863	0.37375676
23	0.253309416	0.133174666	0.021448613	1.352273808	0.39206731
24	0.24095537	0.128518522	0.020739245	1.399357603	0.40978686
25	0.229203837	0.123865295	0.020023428	1.44463447	0.42690744
26	0.218025434	0.119242169	0.019306481	1.488132877	0.44342591
27	0.207392209	0.114671673	0.018592853	1.529887175	0.45934326
28	0.197277571	0.11017231	0.01788624	1.569936427	0.47466388
29	0.18765623	0.105759112	0.017189687	1.608323397	0.48939497
30	0.178504128	0.101444124	0.016505678	1.645093689	0.50354607
31	0.169798379	0.097236822	0.015836213	1.680295005	0.51712859
32	0.161517214	0.09314448	0.015182878	1.713976519	0.53015543
33	0.153639927	0.089172492	0.014546899	1.746188337	0.54264068
34	0.146146819	0.085324646	0.013929197	1.776981053	0.55459934
35	0.139019155	0.08160337	0.013330436	1.806405361	0.56604704
36	0.132239111	0.078009937	0.012751054	1.83451174	0.5769999
37	0.125789733	0.074544653	0.012191304	1.86135019	0.58747431
38	0.119654895	0.07120701	0.01165128	1.886970013	0.59748681
39	0.113819257	0.067995826	0.011130943	1.911419633	0.60705397
40	0.108268227	0.064909359	0.010630144	1.934746457	0.61619227
41	0.102987923	0.061945417	0.010148641	1.956996757	0.62491802
42	0.097965143	0.059101436	0.009686119	1.978215581	0.6332473
43	0.093187326	0.056374565	0.0092422	1.998446691	0.64119591
44	0.088642527	0.053761724	0.00881646	2.017732512	0.64877929
45	0.08431938	0.051259663	0.008408435	2.0361141	0.65601252
46	0.080207075	0.048865009	0.008017633	2.053631125	0.66291028
47	0.07629533	0.046574306	0.00764354	2.070321859	0.66948682
48	0.072574363	0.044384049	0.007285627	2.086223187	0.67575596
49	0.069034869	0.042290714	0.006943358	2.101370607	0.68173106
50	0.065667999	0.04029078	0.00661619	2.115798254	0.68742503
51	0.062465333	0.038380751	0.006303581	2.129538918	0.69285033
52	0.059418863	0.036557175	0.006004991	2.142624073	0.69801897
53	0.05652097	0.03481665	0.005719885	2.155083904	0.70294249

54	0.05376441	0.033155844	0.005447738	2.166947344	0.70763201
55	0.051142289	0.031571499	0.005188034	2.178242102	0.71209818
56	0.04864805	0.030060439	0.004940265	2.188994708	0.71635125
57	0.046275457	0.028619575	0.00470394	2.19923054	0.72040103
58	0.044018576	0.027245911	0.004478578	2.208973872	0.72425693
59	0.041871765	0.025936544	0.004263713	2.218247905	0.72792798
60	0.039829655	0.024688667	0.004058893	2.227074809	0.73142279
61	0.03788714	0.023499569	0.003863682	2.235475761	0.73474961
62	0.036039362	0.022366638	0.003677657	2.243470982	0.73791634
63	0.034281701	0.021287356	0.003500411	2.251079772	0.74093053
64	0.032609763	0.020259304	0.003331551	2.258320551	0.74379938
65	0.031019366	0.019280154	0.0031707	2.265210893	0.74652978
66	0.029506534	0.018347671	0.003017496	2.27176756	0.7491283
67	0.028067483	0.017459713	0.002871588	2.278006536	0.75160122
68	0.026698616	0.016614224	0.002732644	2.283943061	0.75395452
69	0.025396509	0.015809234	0.002600341	2.289591664	0.75619392
70	0.024157907	0.015042859	0.002474372	2.29496619	0.75832486
71	0.022979712	0.014313293	0.002354443	2.300079835	0.76035255
72	0.021858978	0.013618811	0.002240272	2.304945172	0.76228194
73	0.020792903	0.012957762	0.002131589	2.309574177	0.76411775
74	0.019778821	0.012328569	0.002028136	2.313978261	0.76586447
75	0.018814197	0.011729726	0.001929668	2.318168291	0.76752641
76	0.017896617	0.011159792	0.001835947	2.322154617	0.76910764
77	0.017023789	0.010617394	0.001746749	2.325947095	0.77061207
78	0.016193529	0.010101221	0.00166186	2.32955511	0.77204339
79	0.015403761	0.009610022	0.001581075	2.332987597	0.77340514
80	0.014652511	0.009142603	0.001504197	2.336253063	0.77470069
81	0.0139379	0.008697826	0.00143104	2.339359609	0.77593323
82	0.01325814	0.008274605	0.001361426	2.342314942	0.77710583
83	0.012611533	0.007871906	0.001295186	2.345126403	0.77822137
84	0.011996461	0.007488742	0.001232157	2.347800975	0.77928264
85	0.011411387	0.007124173	0.001172185	2.350345307	0.78029225
86	0.010854847	0.006777304	0.001115123	2.352765727	0.78125273
87	0.01032545	0.006447281	0.001060831	2.355068256	0.78216644
88	0.009821872	0.006133292	0.001009176	2.357258625	0.78303566
89	0.009342854	0.005834561	0.00096003	2.359342287	0.78386256
90	0.008887197	0.005550351	0.000913272	2.361324434	0.78464918

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
4	0.004415	0.013029	0.164378
12	0.000607	0.013225	0.021316
14	0.07784	0.001979	0.179203
16	0.129033	0.021585	0.025883
18	0.227464	0.065185	0.043103
20	0.232309	0.143849	0.647799
30	0.030116	0.055872	0.240972
45	0.069862	0.095539	4
60	0.740673	0.695405	4
90	2.400553	2.561079	4

33	0.815019998	0.891297291	0.506970956	2.066374467	0.05371175
34	0.79014198	0.892097694	0.526912944	2.119465729	0.05784738
35	0.766023349	0.892127599	0.546707085	2.171967671	0.06214197
36	0.742640925	0.891430401	0.566334423	2.223881999	0.06659425
37	0.719972236	0.890047639	0.585777298	2.275210714	0.07120283
38	0.697995496	0.888019069	0.605019283	2.32595609	0.07596615
39	0.676689584	0.885382732	0.624045126	2.376120659	0.08088256
40	0.656034022	0.882175018	0.642840701	2.425707197	0.08595026
41	0.63600896	0.878430734	0.661392946	2.474718708	0.09116736
42	0.61659515	0.874183159	0.679689825	2.523158406	0.09653187
43	0.597773937	0.869464108	0.697720268	2.571029705	0.10204169
44	0.57952723	0.864303987	0.715474131	2.618336205	0.10769465
45	0.561837493	0.858731844	0.732942151	2.66508168	0.11348851
46	0.544687726	0.852775429	0.750115903	2.711270061	0.11942094
47	0.528061445	0.846461239	0.766987756	2.756905431	0.12548956
48	0.511942672	0.839814568	0.783550837	2.80199201	0.13169192
49	0.496315916	0.832859557	0.799798994	2.846534146	0.13802553
50	0.481166157	0.825619235	0.815726756	2.890536303	0.14448785
51	0.466478835	0.818115568	0.831329302	2.934003056	0.15107629
52	0.452239836	0.810369496	0.846602425	2.976939073	0.15778824
53	0.438435475	0.802400978	0.861542502	3.019349118	0.16462105
54	0.425052483	0.794229027	0.876146464	3.061238033	0.17157203
55	0.412077999	0.785871753	0.890411762	3.102610733	0.17863849
56	0.399499555	0.777346394	0.904336346	3.143472203	0.18581771
57	0.38730506	0.768669353	0.917918634	3.183827482	0.19310695
58	0.375482795	0.759856233	0.931157485	3.223681665	0.20050349
59	0.364021398	0.750921869	0.944052177	3.263039892	0.20800456
60	0.352909853	0.741880358	0.956602385	3.30190734	0.2156074
61	0.342137482	0.732745089	0.968808153	3.340289223	0.22330928
62	0.331693931	0.723528774	0.980669878	3.37819078	0.23110742
63	0.321569164	0.714243474	0.992188284	3.415617276	0.23899908
64	0.31175345	0.704900626	1.003364408	3.452573991	0.24698152
65	0.302237354	0.69551107	1.014199576	3.489066221	0.255052
66	0.293011732	0.686085073	1.02469539	3.525099267	0.2632078
67	0.284067717	0.676632353	1.034853704	3.560678438	0.27144623
68	0.275396713	0.667162103	1.044676614	3.595809041	0.27976457
69	0.266990386	0.65768301	1.05416644	3.630496381	0.28816016
70	0.258840658	0.648203281	1.06332571	3.664745755	0.29663035

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
5	0.014637	0.23417	3.374191
15	0.055032	0.061161	1.487537
30	0.005588	0.000853	0.257054
60	0.015647	0.008912	0.015349
70	0.001207	0.000225	0.052356

Lampiran 5 Perhitungan Fitting Untuk Data Kelima (eksperimen oleh Vicente, et al.[38] (tahun 2005))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	0.5	0	0	0
2	0.35	0.04	0.03	1.5
3	0.3	0.03	0.025	1.6
8	0.1	0.005	0.004	1.8
20	0.04	0.002	0.002	2.2
30	0.02	0.001	0.001	2.2
45	0.01	0.001	0.001	2.2
60	0	0.001	0.001	2.2
90	0	0	0	2.2

sum error k1= 9.302080144 sum error k2 = 9.834385437 sum error k3= 9.98390168

$\Delta t = 1$

k1 = 0.101

k2 = 1.667

k3 = 2

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	0.5	0	0	0	0
1	0.451966516	0.023061034	0.013124533	0.08485385	0.01184792
2	0.408547464	0.025199845	0.019813535	0.204144382	0.04643916
3	0.369299548	0.023601104	0.020151661	0.324747488	0.08694769
4	0.333822061	0.021489046	0.018739204	0.436816523	0.12594969
5	0.301752788	0.019453968	0.017051383	0.538782319	0.16174186
6	0.272764313	0.017590618	0.015436366	0.631089461	0.1942087
7	0.246560672	0.015901785	0.013958043	0.714556369	0.2235795
8	0.222874336	0.014374346	0.012618039	0.79001026	0.25013328
9	0.201463475	0.012993484	0.011406037	0.858216571	0.274137
10	0.18210949	0.011745246	0.010310327	0.919870711	0.29583494
11	0.164614783	0.010616917	0.009319852	0.975601963	0.31544845
12	0.14880074	0.009596983	0.008424523	1.02597929	0.33317775
13	0.134505905	0.00867503	0.007615205	1.071517022	0.34920386
14	0.12158433	0.007841646	0.006883635	1.112680082	0.36369039
15	0.109904092	0.007088323	0.006222345	1.149888732	0.37678524
16	0.09934594	0.006407369	0.005624584	1.18352286	0.38862211
17	0.089802076	0.005791833	0.005084247	1.213925859	0.39932184
18	0.081175063	0.005235429	0.004595819	1.241408134	0.40899369
19	0.073376821	0.004732477	0.004154312	1.26625027	0.41773639
20	0.066327733	0.004277842	0.00375522	1.288705898	0.42563921
21	0.059955828	0.003866883	0.003394468	1.309004281	0.43278282
22	0.054196054	0.003495403	0.003068371	1.327352661	0.43924017
23	0.048989603	0.00315961	0.002773602	1.343938367	0.44507718
24	0.044283321	0.002856076	0.002507151	1.358930735	0.45035345
25	0.040029156	0.002581702	0.002266296	1.372482831	0.45512285
26	0.036183677	0.002333685	0.00204858	1.384733019	0.45943406
27	0.032707621	0.002109495	0.001851779	1.395806368	0.4633311
28	0.029565499	0.001906843	0.001673884	1.405815934	0.46685377
29	0.026725231	0.001723658	0.001513079	1.414863912	0.47003803

30	0.024157819	0.001558071	0.001367722	1.423042678	0.47291639
31	0.021837051	0.001408392	0.00123633	1.430435734	0.47551823
32	0.019739231	0.001273092	0.001117559	1.437118562	0.47787012
33	0.017842943	0.00115079	0.001010199	1.443159391	0.47999607
34	0.016128826	0.001040237	0.000913152	1.448619896	0.48191779
35	0.014579378	0.000940305	0.000825428	1.453555827	0.48365489
36	0.013178782	0.000849973	0.000746132	1.458017578	0.48522511
37	0.011912736	0.000768318	0.000674453	1.462050702	0.48664449
38	0.010768316	0.000694508	0.00060966	1.465696376	0.48792752
39	0.009733836	0.000627789	0.000551092	1.468991821	0.48908728
40	0.008798736	0.000567479	0.00049815	1.471970683	0.49013563
41	0.007953468	0.000512963	0.000450295	1.474663374	0.49108327
42	0.007189403	0.000463684	0.000407036	1.477097387	0.49193988
43	0.006498739	0.00041914	0.000367933	1.479297571	0.49271419
44	0.005874425	0.000378874	0.000332587	1.481286391	0.49341411
45	0.005310086	0.000342477	0.000300637	1.483084151	0.4940468
46	0.004799962	0.000309576	0.000271755	1.484709205	0.49461871
47	0.004338845	0.000279836	0.000245649	1.486178145	0.49513567
48	0.003922025	0.000252953	0.00022205	1.487505969	0.49560297
49	0.003545248	0.000228653	0.000200718	1.488706233	0.49602538
50	0.003204667	0.000206687	0.000181436	1.489791191	0.49640721
51	0.002896804	0.000186831	0.000164006	1.49077192	0.49675236
52	0.002618517	0.000168883	0.00014825	1.491658434	0.49706435
53	0.002366964	0.000152659	0.000134008	1.492459783	0.49734637
54	0.002139577	0.000137993	0.000121135	1.493184148	0.4976013
55	0.001934034	0.000124737	0.000109498	1.493838927	0.49783173
56	0.001748237	0.000112753	9.89785E-05	1.494430802	0.49804003
57	0.00158029	0.000101922	8.94699E-05	1.494965818	0.49822832
58	0.001428476	9.21303E-05	8.08748E-05	1.495449437	0.49839852
59	0.001291247	8.32796E-05	7.31054E-05	1.495886596	0.49855237
60	0.0011672	7.52792E-05	6.60824E-05	1.496281758	0.49869144
61	0.001055071	6.80474E-05	5.9734E-05	1.496638958	0.49881715
62	0.000953714	6.15103E-05	5.39956E-05	1.496961843	0.49893078
63	0.000862093	5.56012E-05	4.88084E-05	1.49725371	0.4990335
64	0.000779275	5.02597E-05	4.41195E-05	1.497517537	0.49912635
65	0.000704412	4.54314E-05	3.98811E-05	1.49775602	0.49921028
66	0.000636741	4.1067E-05	3.60498E-05	1.497971592	0.49928614
67	0.000575571	3.71218E-05	3.25866E-05	1.498166455	0.49935472
68	0.000520278	3.35556E-05	2.94561E-05	1.498342599	0.49941671
69	0.000470297	3.0332E-05	2.66264E-05	1.49850182	0.49947275
70	0.000425117	2.74181E-05	2.40685E-05	1.498645746	0.4995234
71	0.000384277	2.47841E-05	2.17563E-05	1.498775845	0.49956918
72	0.000347361	2.24032E-05	1.96662E-05	1.498893446	0.49961057
73	0.000313991	2.0251E-05	1.77769E-05	1.498999749	0.49964798
74	0.000283827	1.83055E-05	1.60692E-05	1.49909584	0.4996818
75	0.00025656	1.6547E-05	1.45254E-05	1.4991827	0.49971237
76	0.000231913	1.49574E-05	1.313E-05	1.499261215	0.49974
77	0.000209634	1.35205E-05	1.18687E-05	1.499332188	0.49976498
78	0.000189495	1.22216E-05	1.07285E-05	1.499396343	0.49978755
79	0.000171291	1.10475E-05	9.69783E-06	1.499454334	0.49980796
80	0.000154836	9.9862E-06	8.76619E-06	1.499506755	0.49982641
81	0.000139961	9.02685E-06	7.92405E-06	1.499554139	0.49984309

82	0.000126515	8.15967E-06	7.16281E-06	1.499596972	0.49985816
83	0.000114361	7.3758E-06	6.4747E-06	1.49963569	0.49987179
84	0.000103375	6.66723E-06	5.85269E-06	1.499670688	0.49988411
85	9.34441E-05	6.02673E-06	5.29044E-06	1.499702324	0.49989524
86	8.44672E-05	5.44776E-06	4.78221E-06	1.499730921	0.4999053
87	7.63527E-05	4.92441E-06	4.3228E-06	1.49975677	0.4999144
88	6.90177E-05	4.45133E-06	3.90752E-06	1.499780137	0.49992262
89	6.23874E-05	4.02371E-06	3.53213E-06	1.499801258	0.49993006
90	5.6394E-05	3.63716E-06	3.19281E-06	1.499820351	0.49993678

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
2	0.023829	0.20611	0.167268
3	0.042882	0.057006	0.046121
8	0.579316	0.936457	1.075765
20	0.245241	0.526607	0.372048
30	0.035463	0.190377	0.09648
45	0.375348	0.959552	1.156522
60	4	2.958276	3.069698
90	4	4	4

Lampiran 6 Perhitungan Fitting Untuk Data Keenam (eksperimen oleh Vicente, et al. [38] (tahun 2005))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1.625	0	0	0
3	0.75	0.18	0.2	1
5	0.4	0.08	0.125	1.5
10	0.25	0.05	0.05	2
15	0.13	0.02	0.02	2.25
20	0.09	0.015	0.015	2.35
25	0.04	0.01	0.01	2.37
30	0	0	0	2.4
45	0	0	0	2.44
60	0	0	0	2.47
90	0	0	0	2.5
120	0	0	0	2.5

sum error k1= 0.67359682 sum error k2 = 0.672894351 sum error k3= 0.53202649

$\Delta t = 1$

k1 = 0.1561

k2 = 1.0762

k3 = 1.1084

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	1.625	0	0	0	0
1	1.390144663	0.141866066	0.06415929	0.356674589	0.02882998
2	1.189232113	0.169723182	0.127281269	0.840576027	0.13876344
3	1.017356723	0.161679244	0.150241426	1.349329916	0.29572261

4	0.870321858	0.14393206	0.148130148	1.828040158	0.46261593
5	0.744537407	0.125045784	0.13522082	2.256075392	0.62019599
6	0.636932124	0.107626412	0.119174988	2.629775815	0.76126648
7	0.544878642	0.092294172	0.103341181	2.952434549	0.884486
8	0.466129315	0.079031118	0.088944884	3.229604936	0.99089468
9	0.398761341	0.067634907	0.076295393	3.467150771	1.08230836
10	0.341129815	0.057868698	0.065345832	3.670527326	1.16065565
11	0.291827564	0.049508152	0.055930282	3.844570721	1.227734
12	0.249650788	0.042353944	0.047857422	3.993482325	1.28513785
13	0.213569668	0.036233032	0.040944613	4.120880319	1.33425269
14	0.182703221	0.030996522	0.035028433	4.229868858	1.37627182
15	0.15629779	0.026516748	0.029966405	4.323106729	1.41221906
16	0.133708639	0.022684393	0.025635651	4.402869647	1.44297132
17	0.114384216	0.019405905	0.021930688	4.471104855	1.46927919
18	0.097852681	0.016601242	0.018761149	4.529478324	1.49178493
19	0.083710389	0.014201925	0.016049676	4.579415305	1.51103801
20	0.071612031	0.012149373	0.013730078	4.622135082	1.52750852
21	0.061262205	0.010393468	0.011745721	4.658680728	1.54159861
22	0.052408201	0.008891338	0.010048155	4.689944565	1.55365231
23	0.044833835	0.007606305	0.008595932	4.716689953	1.56396393
24	0.038354164	0.006506994	0.007353593	4.739569928	1.57278525
25	0.032810976	0.005566562	0.006290805	4.759143144	1.58033166
26	0.028068925	0.004762047	0.005381618	4.775887513	1.58678741
27	0.024012225	0.004073805	0.004603832	4.790211881	1.59231014
28	0.020541826	0.003485033	0.003938457	4.802465999	1.59703468
29	0.017572991	0.002981354	0.003369246	4.812949074	1.60107641
30	0.01503323	0.00255047	0.002882301	4.821917069	1.604534
31	0.012860532	0.00218186	0.002465733	4.829588952	1.60749188
32	0.011001846	0.001866523	0.002109369	4.836152045	1.61002226
33	0.009411789	0.001596762	0.00180451	4.841766599	1.61218694
34	0.008051538	0.001365987	0.001543711	4.846569701	1.61403876
35	0.006887878	0.001168566	0.001320604	4.850678629	1.61562295
36	0.005892398	0.000999678	0.001129742	4.854193708	1.61697818
37	0.005040791	0.000855198	0.000966464	4.857200766	1.61813755
38	0.004312264	0.000731599	0.000826785	4.859773224	1.61912935
39	0.003689028	0.000625864	0.000707293	4.861973895	1.61997782
40	0.003155866	0.00053541	0.00060507	4.86385651	1.62070365
41	0.002699761	0.000458029	0.000517622	4.865467038	1.62132459
42	0.002309574	0.000391832	0.000442812	4.866844803	1.62185578
43	0.00197578	0.000335202	0.000378814	4.868023444	1.6223102
44	0.001690227	0.000286756	0.000324065	4.86903174	1.62269895
45	0.001445945	0.000245312	0.000277229	4.869894311	1.62303151
46	0.001236968	0.000209858	0.000237162	4.870632218	1.62331601
47	0.001058193	0.000179528	0.000202886	4.871263477	1.62355939
48	0.000905257	0.000153582	0.000173564	4.871803503	1.6237676
49	0.000774423	0.000131385	0.000148479	4.872265481	1.62394571
50	0.000662499	0.000112397	0.00012702	4.872660691	1.62409808
51	0.00056675	9.61522E-05	0.000108662	4.872998783	1.62422844
52	0.00048484	8.22557E-05	9.29577E-05	4.873288012	1.62433995
53	0.000414768	7.03676E-05	7.95228E-05	4.873535439	1.62443534
54	0.000354823	6.01976E-05	6.80297E-05	4.873747107	1.62451695
55	0.000303542	5.14975E-05	5.81976E-05	4.873928183	1.62458676

56	0.000259672	4.40547E-05	4.97865E-05	4.874083089	1.62464649
57	0.000222142	3.76877E-05	4.25911E-05	4.874215607	1.62469758
58	0.000190037	3.22408E-05	3.64355E-05	4.874328972	1.62474129
59	0.000162572	2.75812E-05	3.11696E-05	4.874425953	1.62477868
60	0.000139076	2.3595E-05	2.66648E-05	4.874508918	1.62481066
61	0.000118976	2.01849E-05	2.2811E-05	4.874579892	1.62483803
62	0.00010178	1.72676E-05	1.95142E-05	4.874640609	1.62486144
63	8.70705E-05	1.4772E-05	1.66939E-05	4.874692551	1.62488146
64	7.44865E-05	1.2637E-05	1.42812E-05	4.874736985	1.6248986
65	6.37213E-05	1.08107E-05	1.22172E-05	4.874774998	1.62491325
66	5.45119E-05	9.24824E-06	1.04515E-05	4.874807516	1.62492579
67	4.66335E-05	7.91162E-06	8.94097E-06	4.874835335	1.62493651
68	3.98937E-05	6.76818E-06	7.64877E-06	4.874859134	1.62494569
69	3.4128E-05	5.79E-06	6.54332E-06	4.874879493	1.62495354
70	2.91956E-05	4.9532E-06	5.59764E-06	4.874896909	1.62496025
71	2.49761E-05	4.23733E-06	4.78863E-06	4.874911808	1.624966
72	2.13664E-05	3.62492E-06	4.09655E-06	4.874924554	1.62497091
73	1.82784E-05	3.10103E-06	3.50449E-06	4.874935458	1.62497512
74	1.56367E-05	2.65285E-06	2.998E-06	4.874944786	1.62497871
75	1.33768E-05	2.26944E-06	2.56471E-06	4.874952766	1.62498179
76	1.14435E-05	1.94145E-06	2.19404E-06	4.874959593	1.62498442
77	9.78958E-06	1.66086E-06	1.87694E-06	4.874965433	1.62498667
78	8.37473E-06	1.42082E-06	1.60568E-06	4.874970429	1.6249886
79	7.16436E-06	1.21547E-06	1.37361E-06	4.874974702	1.62499025
80	6.12892E-06	1.0398E-06	1.17509E-06	4.874978359	1.62499166
81	5.24313E-06	8.89525E-07	1.00526E-06	4.874981486	1.62499286
82	4.48536E-06	7.60966E-07	8.59972E-07	4.874984162	1.62499389
83	3.83711E-06	6.50986E-07	7.35683E-07	4.874986451	1.62499478
84	3.28254E-06	5.56901E-07	6.29358E-07	4.874988409	1.62499553
85	2.80813E-06	4.76414E-07	5.38399E-07	4.874990084	1.62499618
86	2.40228E-06	4.0756E-07	4.60586E-07	4.874991517	1.62499673
87	2.05509E-06	3.48657E-07	3.94019E-07	4.874992743	1.6249972
88	1.75807E-06	2.98267E-07	3.37073E-07	4.874993792	1.62499761
89	1.50399E-06	2.55159E-07	2.88357E-07	4.874994689	1.62499795
90	1.28662E-06	2.18282E-07	2.46682E-07	4.874995457	1.62499825
91	1.10067E-06	1.86735E-07	2.1103E-07	4.874996113	1.6249985
92	9.41593E-07	1.59746E-07	1.8053E-07	4.874996675	1.62499872
93	8.05508E-07	1.36659E-07	1.54439E-07	4.874997156	1.6249989
94	6.89091E-07	1.16908E-07	1.32119E-07	4.874997567	1.62499906
95	5.89499E-07	1.00012E-07	1.13024E-07	4.874997918	1.6249992
96	5.04301E-07	8.55575E-08	9.6689E-08	4.874998219	1.62499931
97	4.31416E-07	7.31921E-08	8.27149E-08	4.874998477	1.62499941
98	3.69065E-07	6.2614E-08	7.07604E-08	4.874998697	1.6249995
99	3.15726E-07	5.35646E-08	6.05337E-08	4.874998885	1.62499957
100	2.70095E-07	4.58231E-08	5.1785E-08	4.874999046	1.62499963
101	2.31059E-07	3.92004E-08	4.43007E-08	4.874999184	1.62499969
102	1.97665E-07	3.35349E-08	3.7898E-08	4.874999302	1.62499973
103	1.69097E-07	2.86883E-08	3.24208E-08	4.874999403	1.62499977
104	1.44658E-07	2.45421E-08	2.77351E-08	4.874999489	1.6249998
105	1.23751E-07	2.09951E-08	2.37267E-08	4.874999563	1.62499983
106	1.05866E-07	1.79607E-08	2.02975E-08	4.874999626	1.62499986
107	9.05655E-08	1.53649E-08	1.7364E-08	4.87499968	1.62499988

108	7.74764E-08	1.31443E-08	1.48545E-08	4.874999726	1.62499989
109	6.6279E-08	1.12446E-08	1.27076E-08	4.874999766	1.62499991
110	5.67E-08	9.61946E-09	1.0871E-08	4.8749998	1.62499992
111	4.85053E-08	8.22919E-09	9.29986E-09	4.874999829	1.62499993
112	4.1495E-08	7.03986E-09	7.95579E-09	4.874999853	1.62499994
113	3.54979E-08	6.02241E-09	6.80597E-09	4.874999875	1.62499995
114	3.03675E-08	5.15202E-09	5.82232E-09	4.874999893	1.62499996
115	2.59786E-08	4.40741E-09	4.98085E-09	4.874999908	1.62499996
116	2.2224E-08	3.77043E-09	4.26098E-09	4.874999922	1.62499997
117	1.90121E-08	3.2255E-09	3.64516E-09	4.874999933	1.62499997
118	1.62643E-08	2.75933E-09	3.11834E-09	4.874999943	1.62499998
119	1.39137E-08	2.36053E-09	2.66765E-09	4.874999951	1.62499998
120	1.19028E-08	2.01938E-09	2.28211E-09	4.874999958	1.62499998

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
3	0.091536	0.0115	0.080735
5	0.362471	0.193049	0.006171
10	0.095064	0.021285	0.070801
15	0.033749	0.078506	0.159141
20	0.051782	0.044098	0.007815
25	0.038995	0.324456	0.207364
30	4	4	4
45	4	4	4
60	4	4	4
90	4	4	4
120	4	4	4

Lampiran 7 Perhitungan Fitting Untuk Data Ketujuh (eksperimen oleh Marno[13] (tahun 2008))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1.637583	0.271527	0.000169	0.059277
30	1.132754	0.344568	0.000987	1.401218
120	0.790637	0.429547	0.001267	2.244519
360	0.453545	0.635172	0.01797	2.857643
720	0.228531	0.757078	0.042493	3.332987
1200	0.080482	0.795325	0.044367	3.716694
1800	0.04844	0.723883	0.034155	3.962849
3000	0.042285	0.586895	0.025155	4.252079

sum error k1= 3.973285599 sum error k2 = 1.572049935 sum error k3= 2.253582321

$\Delta t = 30$

k1 = 0.002

k2 = 0.0005

k3 = 0.013

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	1.637582873	0	3.44334E-18	0	0

30	1.542217471	0.094646626	0.000633278	0.096169677	8.54982E-05
60	1.452405717	0.182372357	0.002191419	0.188595335	0.00061338
90	1.367824193	0.263601214	0.004292611	0.277781002	0.001864855
120	1.288168313	0.338732211	0.006683448	0.364095812	0.003998902
150	1.21315123	0.408140818	0.009197155	0.447816137	0.007093669
180	1.142502803	0.472180338	0.011725335	0.5291542	0.011174397
210	1.075968619	0.531183199	0.014198843	0.608277521	0.016232211
240	1.013309085	0.585462177	0.016574865	0.685322148	0.022236747
270	0.954298558	0.635311541	0.018828172	0.760401694	0.029144603
300	0.898724536	0.68100814	0.020945222	0.83361351	0.036904975
330	0.846386893	0.72281242	0.022920177	0.905042923	0.045463383
360	0.797097158	0.76096938	0.024752215	0.974766171	0.05476412
390	0.750677833	0.795709481	0.026443726	1.042852434	0.064751834
420	0.706961759	0.827249492	0.027999098	1.109365259	0.075372524
450	0.665791512	0.855793296	0.02942391	1.174363582	0.086574155
480	0.627018832	0.881532641	0.030724391	1.23790245	0.098307009
510	0.590504098	0.904647849	0.031907061	1.300033565	0.110523864
540	0.556115817	0.925308492	0.032978506	1.36080568	0.123180058
570	0.523730153	0.943674014	0.033945221	1.420264912	0.136233485
600	0.493230483	0.95989433	0.034813522	1.478454989	0.149644538
630	0.464506976	0.974110381	0.035589487	1.535417444	0.16337603
660	0.437456195	0.986454664	0.036278924	1.591191783	0.17739309
690	0.41198073	0.997051722	0.03688736	1.645815626	0.191663061
720	0.38798884	1.006018617	0.037420033	1.699324833	0.206155383
750	0.365394129	1.013465364	0.037881897	1.751753608	0.220841483
780	0.344115231	1.019495348	0.038277628	1.803134603	0.235694667
810	0.32407552	1.024205709	0.038611634	1.853499007	0.25069001
840	0.305202831	1.027687717	0.038888067	1.902876625	0.265804258
870	0.287429202	1.030027108	0.039110836	1.951295961	0.281015727
900	0.270690628	1.031304416	0.039283616	1.998784286	0.296304212
930	0.254926833	1.031595276	0.039409865	2.045367703	0.311650899
960	0.24008105	1.030970713	0.03949283	2.091071214	0.327038281
990	0.226099818	1.029497413	0.039535565	2.135918775	0.342450077
1020	0.21293279	1.027237981	0.039540938	2.179933351	0.357871165
1050	0.20053255	1.024251178	0.039511643	2.223136972	0.373287503
1080	0.188854443	1.020592153	0.039450209	2.265550777	0.388686069
1110	0.177856417	1.016312649	0.039359011	2.307195062	0.404054797
1140	0.167498865	1.01146121	0.039240279	2.348089325	0.419382519
1170	0.157744491	1.00608337	0.039096105	2.388252304	0.434658908
1200	0.148558167	1.000221826	0.038928452	2.427702017	0.449874429
1230	0.139906812	0.993916611	0.038739162	2.466455799	0.465020288
1260	0.131759274	0.98720525	0.038529962	2.504530336	0.480088387
1290	0.124086211	0.980122909	0.038302472	2.541941696	0.495071281
1320	0.116859993	0.972702534	0.038058211	2.578705362	0.509962135
1350	0.110054597	0.964974983	0.037798603	2.614836261	0.524754691
1380	0.103645516	0.956969153	0.037524981	2.650348786	0.539443224
1410	0.097609671	0.94871209	0.037238595	2.685256831	0.554022517
1440	0.091925326	0.940229109	0.036940617	2.719573807	0.568487822
1470	0.086572012	0.931543887	0.036632141	2.753312669	0.582834833
1500	0.08153045	0.922678568	0.036314194	2.786485938	0.597059661
1530	0.076782487	0.913653852	0.035987736	2.81910572	0.611158799
1560	0.072311023	0.904489081	0.035653665	2.851183726	0.625129105

1590	0.068099957	0.89520232	0.03531282	2.882731291	0.638967777
1620	0.064134124	0.885810435	0.034965987	2.91375939	0.652672327
1650	0.060399243	0.876329167	0.034613899	2.944278658	0.666240564
1680	0.056881865	0.866773192	0.034257241	2.974299398	0.679670574
1710	0.053569323	0.857156196	0.033896653	3.003831606	0.692960702
1740	0.050449689	0.847490924	0.03353273	3.032884976	0.70610953
1770	0.047511728	0.837789246	0.03316603	3.061468916	0.71911587
1800	0.04474486	0.828062202	0.032797071	3.089592565	0.73197874
1830	0.042139122	0.81832006	0.032426336	3.117264797	0.744697355
1860	0.039685131	0.808572357	0.032054275	3.144494238	0.75727111
1890	0.037374049	0.798827947	0.031681307	3.171289275	0.769699572
1920	0.035197553	0.789095039	0.031307819	3.197658063	0.781982462
1950	0.033147808	0.779381241	0.030934175	3.223608541	0.79411965
1980	0.031217429	0.769693595	0.030560708	3.249148435	0.806111141
2010	0.029399468	0.760038609	0.03018773	3.274285268	0.817957066
2040	0.027687376	0.750422296	0.029815529	3.29902637	0.829657672
2070	0.026074989	0.740850198	0.029444372	3.323378885	0.841213315
2100	0.0245565	0.73132742	0.029074504	3.347349777	0.85262445
2130	0.023126441	0.721858654	0.028706154	3.370945837	0.863891625
2160	0.021779662	0.712448207	0.028339531	3.394173691	0.875015474
2190	0.020511313	0.703100024	0.027974828	3.417039806	0.885996709
2220	0.019316827	0.693817711	0.027612222	3.439550494	0.896836113
2250	0.018191902	0.684604557	0.027251878	3.461711921	0.907534536
2280	0.017132489	0.675463552	0.026893942	3.483530108	0.91809289
2310	0.01613477	0.666397409	0.026538553	3.50501094	0.928512142
2340	0.015195154	0.657408578	0.026185833	3.526160169	0.938793309
2370	0.014310257	0.648499266	0.025835896	3.546983419	0.948937454
2400	0.013476893	0.639671454	0.025488844	3.56748619	0.958945683
2430	0.01269206	0.630926904	0.02514477	3.587673863	0.968819139
2460	0.011952932	0.622267183	0.024803757	3.607551701	0.978559001
2490	0.011256847	0.61369367	0.024465879	3.62712486	0.988166477
2520	0.010601299	0.605207569	0.024131202	3.646398383	0.997642803
2550	0.009983928	0.59680992	0.023799786	3.66537721	1.006989239
2580	0.009402509	0.588501614	0.023471683	3.684066181	1.016207067
2610	0.00885495	0.580283399	0.023146936	3.702470036	1.025297588
2640	0.008339277	0.572155891	0.022825586	3.72059342	1.034262119
2670	0.007853636	0.56411958	0.022507666	3.738440886	1.043101991
2700	0.007396276	0.556174847	0.022193203	3.756016896	1.051818548
2730	0.00696555	0.548321962	0.02188222	3.773325827	1.060413142
2760	0.006559908	0.540561096	0.021574735	3.790371969	1.068887134
2790	0.006177889	0.532892329	0.021270763	3.807159532	1.077241892
2820	0.005818116	0.525315657	0.020970313	3.823692644	1.085478787
2850	0.005479296	0.517830993	0.02067339	3.839975357	1.093599195
2880	0.005160206	0.510438178	0.020379998	3.856011647	1.101604491
2910	0.004859699	0.503136986	0.020090136	3.871805415	1.109496052
2940	0.004576693	0.495927126	0.0198038	3.887360491	1.117275255
2970	0.004310167	0.48880825	0.019520983	3.902680638	1.124943474
3000	0.004059162	0.481779956	0.019241677	3.917769546	1.132502079

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
30	0.093724	1.29512982	0.1904969
120	0.229125	0.05588976	1.8564906
360	0.301843	0.03247486	0.1008131
720	0.267582	0.07974399	0.0161193
1200	0.353365	0.05208818	0.0170508
1800	0.00629	0.01802468	0.0016454
3000	2.721356	0.03869864	0.0709661

Lampiran 8 Perhitungan Fitting Untuk Data Kedelapan (eksperimen oleh Marno[13] (tahun 2008))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	1.637583	2.263844	0.000169	0.204082
30	1.258652	2.352144	0.000207	1.218997
120	0.848006	2.697063	0.00031	1.839377
360	0.447603	2.927694	0.000373	2.655743
720	0.25058	3.054326	0.000382	3.151196
1200	0.176348	2.772279	0.000309	3.640831
1800	0.170702	2.559257	0.000224	3.848958
3000	0.167127	2.345542	0.000153	3.976847

sum error k1= 3.692345331 sum error k2 = 10.8324203 sum error k3= 16.173673
 $\Delta t = 30$
k1 = 0.0011 k2 = 0.0000001 k3 = 0.000105

Calculated result					
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	1.637582873	0	0	0	0
30	1.584424574	0.053158219	8.00916E-08	0.053158379	8.435E-11
60	1.532991871	0.104590686	3.16555E-07	0.104591321	6.688E-10
90	1.483228746	0.154353421	7.03813E-07	0.154354835	2.237E-09
120	1.435081005	0.202500627	1.23647E-06	0.202503116	5.255E-09
150	1.388496208	0.249084746	1.90932E-06	0.249088595	1.017E-08
180	1.343423621	0.294156517	2.7173E-06	0.294162004	1.743E-08
210	1.299814155	0.337765035	3.65554E-06	0.337772428	2.743E-08
240	1.257620316	0.379957798	4.71931E-06	0.379967358	4.059E-08
270	1.216796149	0.420780763	5.90406E-06	0.420792743	5.729E-08
300	1.177297193	0.460278397	7.20535E-06	0.460293041	7.791E-08
330	1.13908043	0.498493721	8.61893E-06	0.498511267	1.028E-07
360	1.102104239	0.535468361	1.01407E-05	0.53548904	1.323E-07
390	1.066328348	0.571242592	1.17665E-05	0.571266626	1.668E-07
420	1.031713794	0.60585538	1.34927E-05	0.605882985	2.066E-07
450	0.998222878	0.639344428	1.53154E-05	0.639375815	2.519E-07
480	0.965819125	0.671746214	1.72311E-05	0.671781585	3.031E-07
510	0.934467245	0.703096031	1.92362E-05	0.703135585	3.606E-07
540	0.904133093	0.733428029	2.13274E-05	0.733471957	4.244E-07
570	0.87478363	0.762775247	2.35014E-05	0.762823735	4.95E-07

600	0.846386893	0.791169652	2.5755E-05	0.79122288	5.726E-07
630	0.818911956	0.818642175	2.80851E-05	0.818700317	6.573E-07
660	0.792328894	0.845222741	3.04889E-05	0.845285967	7.496E-07
690	0.766608757	0.870940304	3.29634E-05	0.871008779	8.495E-07
720	0.741723532	0.895822878	3.5506E-05	0.895896762	9.573E-07
750	0.717646118	0.919897568	3.81138E-05	0.919977015	1.073E-06
780	0.694350291	0.9431906	4.07844E-05	0.943275761	1.197E-06
810	0.671810681	0.965727347	4.35152E-05	0.965818368	1.33E-06
840	0.650002738	0.987532359	4.63038E-05	0.987629382	1.472E-06
870	0.628902713	1.00862939	4.91479E-05	1.008732552	1.622E-06
900	0.608487625	1.029041421	5.20452E-05	1.029150856	1.781E-06
930	0.588735241	1.048790689	5.49936E-05	1.048906526	1.95E-06
960	0.569624047	1.067898708	5.79908E-05	1.068021073	2.128E-06
990	0.55113323	1.086386293	6.10349E-05	1.086515309	2.315E-06
1020	0.533242651	1.104273586	6.4124E-05	1.104409371	2.512E-06
1050	0.515932827	1.121580071	6.7256E-05	1.121722742	2.719E-06
1080	0.499184904	1.138324604	7.04291E-05	1.138474271	2.936E-06
1110	0.482980643	1.154525426	7.36416E-05	1.154682198	3.163E-06
1140	0.467302395	1.170200186	7.68918E-05	1.17036417	3.4E-06
1170	0.452133087	1.185365961	8.01779E-05	1.18553726	3.648E-06
1200	0.437456195	1.200039274	8.34983E-05	1.200217987	3.905E-06
1230	0.423255737	1.214236111	8.68516E-05	1.214422335	4.174E-06
1260	0.409516246	1.227971938	9.02361E-05	1.228165768	4.453E-06
1290	0.396222759	1.241261722	9.36504E-05	1.241463249	4.742E-06
1320	0.383360798	1.25411994	9.70932E-05	1.254329254	5.043E-06
1350	0.370916354	1.266560603	0.000100563	1.26677779	5.354E-06
1380	0.358875875	1.278597264	0.000104059	1.278822409	5.676E-06
1410	0.347226247	1.290243038	0.000107579	1.290476224	6.009E-06
1440	0.335954783	1.301510615	0.000111122	1.30175192	6.354E-06
1470	0.325049207	1.31241227	0.000114687	1.312661773	6.71E-06
1500	0.314497641	1.322959882	0.000118273	1.323217659	7.076E-06
1530	0.304288595	1.333164944	0.000121879	1.333431068	7.455E-06
1560	0.294410949	1.343038576	0.000125504	1.343313118	7.844E-06
1590	0.284853945	1.352591536	0.000129147	1.352874566	8.245E-06
1620	0.275607176	1.361834234	0.000132806	1.362125819	8.658E-06
1650	0.26666057	1.370776741	0.000136481	1.371076948	9.082E-06
1680	0.258004384	1.379428801	0.00014017	1.379737696	9.518E-06
1710	0.24962919	1.387799844	0.000143874	1.388117488	9.965E-06
1740	0.241525867	1.395898992	0.00014759	1.396225446	1.042E-05
1770	0.233685589	1.40373507	0.000151319	1.404070393	1.09E-05
1800	0.226099818	1.411316618	0.000155059	1.411660869	1.138E-05
1830	0.218760293	1.418651899	0.00015881	1.419005135	1.187E-05
1860	0.211659018	1.425748906	0.00016257	1.426111182	1.238E-05
1890	0.204788262	1.432615375	0.00016634	1.432986744	1.29E-05
1920	0.19814054	1.43925879	0.000170118	1.439639304	1.343E-05
1950	0.191708612	1.445686389	0.000173904	1.4460761	1.397E-05
1980	0.185485475	1.451905181	0.000177696	1.452304138	1.452E-05
2010	0.179464349	1.457921942	0.000181495	1.458330194	1.509E-05
2040	0.173638678	1.46374323	0.0001853	1.464160826	1.567E-05
2070	0.168002116	1.469375392	0.00018911	1.469802377	1.625E-05
2100	0.162548526	1.474824566	0.000192925	1.475260986	1.686E-05
2130	0.157271966	1.480096693	0.000196744	1.480542591	1.747E-05

2160	0.152166692	1.48519752	0.000200566	1.485652939	1.81E-05
2190	0.147227142	1.490132607	0.000204391	1.49059759	1.873E-05
2220	0.142447937	1.494907334	0.000208219	1.495381923	1.938E-05
2250	0.137823871	1.499526908	0.000212049	1.500011142	2.005E-05
2280	0.13334991	1.503996364	0.00021588	1.504490282	2.072E-05
2310	0.12902118	1.508320576	0.000219712	1.508824217	2.141E-05
2340	0.124832967	1.512504258	0.000223545	1.51301766	2.21E-05
2370	0.120780709	1.516551972	0.000227379	1.517075171	2.281E-05
2400	0.116859993	1.520468132	0.000231212	1.521001165	2.354E-05
2430	0.113066549	1.524257009	0.000235045	1.52479991	2.427E-05
2460	0.109396246	1.527922733	0.000238877	1.528475538	2.502E-05
2490	0.105845086	1.531469304	0.000242707	1.532032045	2.578E-05
2520	0.102409202	1.534900588	0.000246536	1.535473299	2.655E-05
2550	0.099084852	1.538220329	0.000250364	1.538803042	2.733E-05
2580	0.095868415	1.541432146	0.000254188	1.542024893	2.812E-05
2610	0.092756388	1.544539544	0.000258011	1.545142356	2.893E-05
2640	0.089745382	1.547545912	0.00026183	1.548158819	2.975E-05
2670	0.086832118	1.55045453	0.000265646	1.551077561	3.058E-05
2700	0.084013422	1.55326857	0.000269459	1.553901755	3.142E-05
2730	0.081286226	1.555991102	0.000273268	1.55663447	3.228E-05
2760	0.078647558	1.558625098	0.000277073	1.559278677	3.314E-05
2790	0.076094545	1.561173432	0.000280874	1.561837248	3.402E-05
2820	0.073624406	1.563638883	0.000284671	1.564312965	3.491E-05
2850	0.071234452	1.566024143	0.000288463	1.566708516	3.582E-05
2880	0.068922079	1.568331814	0.00029225	1.569026505	3.673E-05
2910	0.066684769	1.570564416	0.000296031	1.57126945	3.766E-05
2940	0.064520085	1.572724384	0.000299808	1.573439787	3.86E-05
2970	0.06242567	1.574814078	0.000303579	1.575539874	3.955E-05
3000	0.060399243	1.576835778	0.000307344	1.577571991	4.051E-05

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
30	0.052519	3.654208	3.9937994
120	0.264486	2.960625	3.9366018
360	0.713478	1.908616	3.5873484
720	0.979914	1.194369	2.7542244
1200	0.723839	0.626627	1.3182836
1800	0.077965	0.334343	0.1308588
3000	0.880144	0.153632	0.452557

Lampiran 9 Perhitungan Fitting Untuk Data Kesembilan (eksperimen oleh Marno[13] (tahun 2008))

Experimental result				
time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)
0	8.007469	1.246509	0.001448	0.026861
30	7.508677	1.465083	0.032516	1.259285
120	4.908419	2.709201	0.117012	5.3844
360	2.515404	5.622198	0.663212	7.631847

720	1.297857	5.976354	1.434798	9.743614
1200	0.716957	5.254699	1.794435	12.12079
1800	0.612887	4.58589	1.265454	14.11167
3000	0.541639	3.990486	0.812943	15.0172

sum error k1= 3.08254 sum error k2 = 3.136689676 sum error k3= 9.04616796

$\Delta t = 30$

k1 = 0.00124

k2 = 0.0003

k3 = 0.0008

Calculated result

time (min)	T (mol/l)	D (mol/l)	M (mol/l)	B (mol/l)	G (mol/l)
0	8.007469	0	-1.5617E-15	0	0
30	7.715063	0.291085365	0.00130947	0.293735915	1.0537E-05
60	7.433335	0.568933272	0.00511699	0.579415761	8.2837E-05
90	7.161895	0.834050477	0.011247878	0.857370445	0.00027474
120	6.900368	1.086925017	0.019536018	1.127917025	0.00063999
150	6.64839	1.328026904	0.029823491	1.391359262	0.00122846
180	6.405613	1.557808778	0.041960224	1.647988157	0.00208631
210	6.171702	1.776706548	0.055803656	1.898082463	0.0032562
240	5.946333	1.985140004	0.071218407	2.14190918	0.00477745
270	5.729193	2.183513404	0.088075973	2.379724026	0.00668623
300	5.519982	2.372216047	0.106254425	2.611771896	0.00901567
330	5.318412	2.551622821	0.125638123	2.838287301	0.01179608
360	5.124201	2.722094727	0.146117439	3.059494784	0.01505506
390	4.937083	2.883979392	0.167588498	3.275609331	0.01881765
420	4.756798	3.037611556	0.189952918	3.486836752	0.02310645
450	4.583096	3.183313548	0.213117576	3.693374065	0.02794179
480	4.415737	3.321395737	0.236994365	3.895409844	0.03334179
510	4.254489	3.452156972	0.261499978	4.093124571	0.03932255
540	4.09913	3.575885007	0.286555693	4.286690967	0.04589819
570	3.949443	3.692856902	0.312087163	4.476274305	0.05308103
600	3.805223	3.80333942	0.338024223	4.662032722	0.06088162
630	3.66627	3.907589404	0.364300699	4.844117509	0.0693089
660	3.53239	4.005854137	0.390854228	5.022673397	0.07837027
690	3.403399	4.0983717	0.417626084	5.197838821	0.08807165
720	3.279119	4.1853713	0.44456101	5.36974619	0.09841762
750	3.159376	4.267073606	0.47160706	5.538522129	0.10941147
780	3.044007	4.343691053	0.498715444	5.704287722	0.12105526
810	2.93285	4.415428152	0.525840385	5.867158745	0.13334994
840	2.825752	4.482481773	0.552938974	6.027245883	0.14629539
870	2.722566	4.545041434	0.579971038	6.184654947	0.15989048
900	2.623147	4.603289564	0.60689901	6.339487075	0.17413316
930	2.527358	4.657401768	0.633687805	6.49183893	0.18902052
960	2.435068	4.707547075	0.660304703	6.641802888	0.2045488
990	2.346148	4.753888179	0.686719234	6.789467217	0.22071352
1020	2.260474	4.796581675	0.712903071	6.934916255	0.23750948
1050	2.17793	4.835778282	0.738829923	7.078230571	0.25493081
1080	2.098399	4.871623055	0.76447544	7.219487128	0.27297106
1110	2.021773	4.904255599	0.789817112	7.358759436	0.2916232
1140	1.947944	4.933810268	0.814834183	7.4961177	0.31087969
1170	1.876812	4.960416353	0.839507561	7.63162896	0.3307325
1200	1.808277	4.984198277	0.863819733	7.765357228	0.35117316

1230	1.742245	5.005275767	0.887754688	7.897363615	0.37219282
1260	1.678624	5.023764029	0.911297839	8.027706462	0.39378225
1290	1.617327	5.039773915	0.93443595	8.156441454	0.41593188
1320	1.558268	5.053412083	0.957157065	8.283621737	0.43863184
1350	1.501365	5.064781153	0.979450444	8.409298031	0.461872
1380	1.44654	5.073979852	1.001306493	8.533518729	0.48564196
1410	1.393718	5.081103161	1.02271671	8.656330006	0.50993114
1440	1.342824	5.08624245	1.043673623	8.777775913	0.53472874
1470	1.293788	5.089485616	1.064170731	8.897898469	0.5600238
1500	1.246544	5.090917205	1.084202458	9.016737752	0.58580521
1530	1.201024	5.090618539	1.103764094	9.134331987	0.61206175
1560	1.157167	5.088667836	1.122851751	9.250717624	0.6387821
1590	1.114911	5.085140322	1.141462317	9.36592942	0.66595482
1620	1.074198	5.080108343	1.159593409	9.480000511	0.69356845
1650	1.034972	5.073641469	1.177243329	9.592962492	0.72161145
1680	0.997179	5.065806601	1.194411029	9.704845477	0.75007227
1710	0.960765	5.056668066	1.211096069	9.815678173	0.77893932
1740	0.925681	5.046287713	1.227298578	9.92548794	0.80820102
1770	0.891879	5.034725005	1.243019224	10.03430085	0.8378458
1800	0.85931	5.022037107	1.258259176	10.14214176	0.8678621
1830	0.827931	5.008278972	1.273020074	10.24903434	0.89823841
1860	0.797698	4.99350342	1.287303998	10.35500116	0.92896325
1890	0.768569	4.977761223	1.30111344	10.46006371	0.9600252
1920	0.740503	4.961101172	1.314451274	10.56424248	0.99141292
1950	0.713463	4.94357016	1.327320734	10.66755698	1.02311512
1980	0.687409	4.925213245	1.339725383	10.7700258	1.0551206
2010	0.662308	4.906073721	1.351669094	10.87166665	1.08741825
2040	0.638122	4.886193185	1.363156025	10.97249641	1.11999706
2070	0.61482	4.865611596	1.374190598	11.07253115	1.15284612
2100	0.592369	4.844367342	1.384777479	11.17178618	1.18595463
2130	0.570738	4.82249729	1.394921556	11.27027609	1.2193119
2160	0.549896	4.80003685	1.404627926	11.36801478	1.25290736
2190	0.529816	4.777020027	1.41390187	11.46501549	1.28673058
2220	0.510469	4.75347947	1.422748841	11.56129085	1.32077123
2250	0.491828	4.729446529	1.43117445	11.65685288	1.35501915
2280	0.473869	4.704951295	1.439184444	11.75171303	1.38946428
2310	0.456564	4.680022657	1.446784698	11.84588223	1.42409672
2340	0.439892	4.654688337	1.453981199	11.93937089	1.45890672
2370	0.423829	4.628974941	1.460780034	12.03218893	1.49388464
2400	0.408352	4.602907996	1.467187378	12.12434583	1.52902103
2430	0.393441	4.576511993	1.473209479	12.21585061	1.56430655
2460	0.379073	4.549810425	1.478852653	12.30671188	1.59973205
2490	0.365231	4.522825824	1.484123271	12.39693787	1.6352885
2520	0.351894	4.495579796	1.489027746	12.4865364	1.67096704
2550	0.339044	4.468093061	1.493572531	12.57551499	1.70675895
2580	0.326663	4.440385477	1.497764103	12.66388077	1.74265569
2610	0.314735	4.412476082	1.501608961	12.75164058	1.77864886
2640	0.303242	4.384383119	1.505113613	12.83880095	1.8147302
2670	0.292168	4.356124066	1.508284575	12.92536814	1.85089164
2700	0.281499	4.327715668	1.511128357	13.01134811	1.88712524
2730	0.27122	4.299173962	1.513651461	13.0967466	1.92342324
2760	0.261316	4.270514306	1.515860377	13.18156906	1.959778

2790	0.251774	4.2417514	1.517761573	13.26582077	1.99618207
2820	0.24258	4.212899319	1.51936149	13.34950674	2.03262815
2850	0.233721	4.183971526	1.520666541	13.43263181	2.06910907
2880	0.225187	4.154980905	1.521683103	13.51520061	2.10561783
2910	0.216964	4.125939778	1.522417514	13.5972176	2.1421476
2940	0.209041	4.096859926	1.522876069	13.67868706	2.17869167
2970	0.201407	4.067752612	1.523065016	13.75961312	2.21524349
3000	0.194053	4.0386286	1.522990552	13.83999974	2.25179668

error			
t	T	D	M
0	0	0	0
30	0.000735	1.787566	3.404573
120	0.113817	0.730513	2.038379
360	0.466443	0.483179	1.632861
720	0.749525	0.124253	1.110501
1200	0.747069	0.002792	0.490238
1800	0.112071	0.008243	3.25E-05
3000	0.892881	0.000144	0.369584

Lampiran 10 Contoh Perhitungan Neraca Massa

Untuk data eksperimen pertama (eksperimen oleh Xu, et al.[3] (tahun 2005)):

Berdasarkan data eksperimen diketahui bahwa saat $t = 0$ konsentrasi masing – masing komponen adalah sbb.:

$$T_{0 \text{ eksperimen}} = 0,56 \text{ mol/l}$$

$$D_{0 \text{ eksperimen}} = 0 \text{ mol/l}$$

$$M_{0 \text{ eksperimen}} = 0 \text{ mol/l}$$

$$B_{0 \text{ eksperimen}} = 0 \text{ mol/l}$$

Maka untuk waktu $t = 0$ neraca massa data eksperimen adalah:

$$3T_{0 \text{ eksperimen}} = 3T_{0 \text{ eksperimen}} + 2D_{0 \text{ eksperimen}} + M_{0 \text{ eksperimen}} + B_{0 \text{ eksperimen}}$$

$$3 \times 0,56 \text{ mol/l} = (3 \times 0,56 \text{ mol/l}) + (2 \times 0) + 0 + 0$$

$$1,68 \text{ mol/l} = 1,698 \text{ mol/l} \quad (\text{setara})$$

Dan saat $t = 360$ menit, data konsentrasi masing-masing komponen menurut eksperimen adalah:

$$T_{360 \text{ eksperimen}} = 0,2 \text{ mol/l}$$

$$D_{360 \text{ eksperimen}} = 0,006 \text{ mol/l}$$

$$M_{360 \text{ eksperimen}} = 0,07 \text{ mol/l}$$

$$B_{360 \text{ eksperimen}} = 0,6 \text{ mol/l}$$

Maka neraca massa data eksperimen adalah:

$$\begin{aligned} 3T_{0 \text{ eksperimen}} &= 3T_{360 \text{ eksperimen}} + 2D_{360 \text{ eksperimen}} + M_{360 \text{ eksperimen}} + B_{360 \text{ eksperimen}} \\ 3 \times 0,56 \text{ mol/l} &= (3 \times 0,2 \text{ mol/l}) + (2 \times 0,006 \text{ mol/l}) + 0,07 \text{ mol/l} + 0,6 \text{ mol/l} \\ 1,68 \text{ mol/l} &\neq 1,39 \text{ mol/l} \quad (\text{tidak setara}) \end{aligned}$$

Sementara, untuk data hasil pemodelan menunjukkan bahwa pada saat $t = 0$ konsentrasi masing-masing komponen adalah sbb.:

$$T_{0 \text{ pemodelan}} = 0,56 \text{ mol/l}$$

$$D_{0 \text{ pemodelan}} = 0 \text{ mol/l}$$

$$M_{0 \text{ pemodelan}} = 0 \text{ mol/l}$$

$$B_{0 \text{ pemodelan}} = 0 \text{ mol/l}$$

Maka untuk waktu $t = 0$ neraca massa data hasil pemodelan adalah:

$$\begin{aligned} 3T_{0 \text{ eksperimen}} &= 3T_{0 \text{ pemodelan}} + 2D_{0 \text{ pemodelan}} + M_{0 \text{ pemodelan}} + B_{0 \text{ pemodelan}} \\ 3 \times 0,56 \text{ mol.l} &= (3 \times 0,56 \text{ mol/l}) + (2 \times 0) + 0 + 0 \\ 1,68 \text{ mol/l} &= 1,698 \text{ mol/l} \quad (\text{setara}) \end{aligned}$$

Dan saat $t = 360$ menit, data konsentrasi masing-masing komponen menurut hasil pemodelan adalah:

$$T_{360 \text{ pemodelan}} = 0,31 \text{ mol/l}$$

$$D_{360 \text{ pemodelan}} = 0,14 \text{ mol/l}$$

$$M_{360 \text{ pemodelan}} = 0,92 \text{ mol/l}$$

$$B_{360 \text{ pemodelan}} = 0,37 \text{ mol/l}$$

Maka untuk waktu $t = 360$ menit neraca massa data hasil pemodelan adalah:

$$\begin{aligned} 3T_{0 \text{ eksperimen}} &= 3T_{360 \text{ pemodelan}} + 2D_{360 \text{ pemodelan}} + M_{360 \text{ pemodelan}} + B_{360 \text{ pemodelan}} \\ 3 \times 0,56 \text{ mol/l} &= (3 \times 0,31 \text{ mol/l}) + (2 \times 0,14 \text{ mol/l}) + 0,92 \text{ mol/l} + 0,37 \text{ mol/l} \\ 1,68 \text{ mol/l} &= 1,68 \text{ mol/l} \quad (\text{setara}) \end{aligned}$$