

Pemodelan kinetika oksidasi dan pembakaran ISO-Oktana dengan menggunakan kode generasi mekanisme secara otomatis = Modelling of oxidation and combustion kinetics of iso-octane by using an automatic generation of mechanisms

Yuli Aulia Yuhana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20249612&lokasi=lokal>

Abstrak

Iso-oktana dapat dikompres sampai volume kecil tanpa mengalami pembakaran spontan. Hal itu terjadi karena iso-oktana memiliki temperatur autoignition yang tinggi (417_C). Iso-oktana merupakan suatu senyawa kimia yang dapat digunakan untuk meningkatkan bilangan oktan yang terkandung dalam suatu bahan bakar. Sebagai tambahan, pencampuran iso-oktana dengan n-heptana dijadikan acuan utama untuk bahan bakar (primary reference fuel) yang menyatakan jumlah persen iso-oktana yang terkandung dalam campuran tersebut menunjukkan bilangan okтана.

Penelitian ini bertujuan membuat mekanisme kinetika kimia untuk reaksi oksidasi dan pembakaran iso-oktana, mengetahui ignition delay time, polutan yang mungkin dihasilkan dan pengaruh temperatur, tekanan dan rasio ekuivalensi pada reaksi oksidasi dan pembakaran iso-oktana. Untuk mencapai semua tujuan tersebut, diperlukan suatu model kinetika kimia oksidasi dan pembakaran iso-oktana yang menyeluruh (comprehensive) sehingga memiliki rentang validitas yang luas dan representatif terhadap kondisi oksidasi dan pembakaran yang sebenarnya.

Model kinetika yang diperoleh, melalui perhitungan, akan divalidasi dengan menggunakan data percobaan yang diperoleh untuk profil konsentrasi dari eksperimen Dagout pada reaktor jetstirred dengan 0,1 % iso-oktana, rentang temperatur 550 K - 1150 K, tekanan 10 atm dan rasio ekuivalen 0,3 - 1,5 dan eksperimen Fieweger dkk. pada shock tube untuk profil ignition delay times dengan rentang temperatur 550 - 1700 K, tekanan 1 - 45 atm dan rasio ekuivalen 0,3 - 1,5.

Secara umum, hasil validasi mekanisme menunjukkan bahwa model kinetika telah mereproduksi hasil percobaan dengan baik. Hasil analisis sensitivitas yang dilakukan pada setiap kondisi operasi pembakaran dapat mengidentifikasi reaksi-reaksi yang paling penting dan relevan dalam kondisi tersebut. Hasil simulasi reaktor jet-stirred menunjukkan bahwa kondisi optimum pembakaran sempurna terjadi pada tekanan 10 atm, temperatur 1200 K dan campuran stoikiometri. Kemudian, hasil simulasi shock tube menunjukkan bahwa ignisi tercapai dengan cepat pada tekanan dan temperatur awal yang tinggi.

.....Iso-octane can be compressed until small volume without experiencing spontaneous combustion. That because iso-octane have high temperature autoignition (417_C). Iso-octane is a chemistry compound which applicable to increase octane number which implied in a fuel, mixing of iso-octane and nheptane is primary reference fuel which expressing number of gratuities iso-octane which implied in the mixture shows octane number.

This research aim to make mechanisms of chemistry kinetics to react oxidation and combustion iso-octane, knows ignition delay times, pollutant that is possibly and temperature influence, pressure and equivalence ratio at reaction of oxidation and combustion iso-octane. To reach all purpose of the, required an oxidation chemistry kinetics model and combustion of iso-octane which totally causing has wide validity spread and representative to an actual condition of oxidation and combustion.

Model kinetics obtained, through calculation, will be validation by using attempt data obtained for profile concentration from Dagout experiments at reactor jet-stirred with 0,1 % isooctane, range temperature 550 K-1150 K, pressure at 10 atm and equivalence ratio 0,3-1,5 and Fieweger experiments at shock tube for ignition delay times profile with range temperature 550-1700 K, pressure 1-45 atm and equivalence ratio 0,3-1,5.

Generally, result of validity of mechanisms indicates that kinetics model has reproduced result of attempt carefully. Sensitivity analysis result in each operating condition of combustion can identify reactions most important and relevant under the condition. Result of simulation of jet-stirred reactor indicates that optimum condition of a perfect combustion happened at initial pressure 10 atm, temperature 1200 K and stoichiometric mixture. Then, result of simulation shock tube indicates that ignisi is reached swiftly at high initial pressure and temperature.