

# Pemodelan kinetika oksidasi dan pembakaran campuran ISO-oktana dan N-heptana dengan menggunakan kode generasi mekanisme secara otomatis = Kinetic modelling of the the oxidation and combustion of iso-octane and n-heptane mixture using an automatic generation of mechanisms

Mohamad Niko Alfredo, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20249633&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Campuran iso-oktana dengan n-heptana merupakan bahan bakar acuan utama gasoline yang disebut juga sebagai PRF (primary reference fuel) dalam penentuan nilai RON (research octane number). Nilai RON pada PRF menyatakan n jumlah persen iso-oktana yang terkandung dalam campuran tersebut. Penelitian ini mengembangkan mekanisme kinetika kimia untuk reaksi oksidasi dan pembakaran PRF, yang dapat memprediksi produk antara yang dihasilkan, pengaruh komposisi iso-oktana dan n-heptana, tekanan, temperatur dan rasio ekuivalensi. Model kinetika kimia oksidasi dan pembakaran PRF yang dikembangkan memiliki rentang validitas yang luas dan representatif terhadap kondisi oksidasi dan pembakaran yang sebenarnya. Model kinetika reaksi yang diperoleh divalidasi dengan menggunakan data percobaan yang diperoleh untuk profil konsentrasi dari eksperimen Dagaut dkk. [1] pada reaktor jet-stirred untuk RON 10, 50, 70, dan 90 yang dilakukan pada rentang temperatur 550 K - 1150 K, tekanan 10 atm dan rasio ekuivalen 1. Selain itu juga dilakukan validasi terhadap waktu tunda ignisi (ignition delay time) dengan menggunakan data percobaan Fieweger dkk. [3] pada reaktor shock tube pada variasi RON 0, 60, 80, 90, dan 100. Dengan tekanan operasi 40 atm dan rasio ekuivalen 1. Secara umum, hasil validasi mekanisme menunjukkan bahwa model kinetika mampu mereproduksi hasil percobaan dengan baik. Hasil analisis sensitivitas yang dilakukan 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 PRF dengan nilai RON 90 pada tekanan 10 atm, dan 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 and n-heptane mixture known as Primary Reference Fuel were use as reference for gasoline in determining Research Octane Number (RON). The nominal after RON shows the mole percentage of iso-octane in the mixture. This research aim to make mechanisms of chemistry kinetics to react oxidation and combustion iso-octane and n-heptane mixture, 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, required an oxidation chemistry kinetics model and combustion of iso-octane and n-heptane mixture which totally causing has wide validity spread and representative to an actual condition of oxidation and combustion. Model kinetics obtained, through calculation, were validated by using attempt data obtained for profile concentration from Dagout experiments at reactor jet-stirred on RON 10, 50, 70 and 90, range temperature 550 K-1150 K, pressure at 10 atm and equivalence ratio 1,0. And also Fieweger experiments at shock tube for ignition delay times profile with range temperature 550-1150 K, pressure 40 tm and equivalence ratio 1,0. 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 for RON 90 happened at initial pressure 10 atm and temperature 1200 K at stoichiometric mixture. Then, result of simulation shock tubes indicates that ignition is reached swiftly at high initial pressure and temperature.