

Model oksidasi dan pembakaran metanol pada rentang tekanan, rasio ekivalensi, dan temperatur lebar = Oxidation and combustion methanol model for wide range of pressure, equivalence ratio, and temperature

Etika Rahayu Trias Asih, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20247558&lokasi=lokal>

Abstrak

Biometanol merupakan metanol yang berasal dari biomassa. Adanya gugus OH menjadikan kimia pembakaran metanol sebagai variasi yang menarik untuk diteliti seperti pembakaran hidrokarbon paraffin. Proses oksidasi dan pembakaran metanol menghasilkan produk intermediet maupun produk akhir yang melewati berbagai proses reaksi elementer.

Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan suatu model kinetika kimia untuk oksidasi dan pembakaran metanol, mendapatkan profil konsentrasi dan waktu tunda ignisi, serta mengetahui kondisi optimum dalam sistem pembakaran metanol. Selain itu, karena reaksi oksidasi dan pembakaran melibatkan banyak reaksi elementer maka perlu dilakukan identifikasi tahapan reaksi-reaksi penting melalui analisis sensitivitas dan analisis laju produksi. Mekanisme kinetika kimia untuk oksidasi dan pembakaran metanol telah dikembangkan.

Validasi hasil pemodelan dengan berbagai data percobaan dilakukan dengan menggunakan software Chemkin 3.7.1. Data tersebut berasal dari percobaan yang menggunakan reaktor alir dan shock tube dengan rentang suhu dari 781-2128 K, tekanan dari 1-15 atm serta rasio ekivalen (ϕ) dari 0,42-2,59. Secara umum, hasil validasi mekanisme menunjukkan bahwa model kinetika telah mereproduksi hasil percobaan dengan baik.

Hasil analisis sensitivitas memperlihatkan bahwa reaksi yang paling sensitif adalah reaksi percabangan rantai, $H+O_2 \rightarrow OH+O$, untuk tekanan rendah dan reaksi dekomposisi termal hidrogen peroksida, $H_2O_2(+M) \rightarrow OH+OH(+M)$, untuk tekanan tinggi. Hasil simulasi reaktor alir menunjukkan bahwa pembakaran tidak sempurna terjadi pada tekanan dan temperatur awal yang tinggi, serta campuran stoikiometri. Kemudian, hasil simulasi shock tube menunjukkan bahwa ignisi tercapai dengan cepat pada tekanan dan temperatur awal yang tinggi.

.....Biomethanol is methanol which comes from biomass. The existence of the OH group makes methanol combustion chemistry an interesting variation to study such as paraffin hydrocarbon combustion. Methanol oxidation produces many intermediate and final products through elementary reaction processes.

This study aims to get the kinetic model for methanol oxidation and combustion, to get concentration and ignition delay time profile, and also to know the optimum condition in methanol combustion system. In addition, oxidation and combustion reaction involve of many elementary reactions, so we have to identify the stages of important reactions by sensitivity and rate of production analysis. Chemical kinetic mechanism for methanol oxidation and combustion has been developed.

The validation of model results with multiple experimental data has been done by using Chemkin 3.7.1 software. The data are from flow reactor and shock tube experiments with range of temperature from 781-2128 K, pressure from 1-15 atm and equivalence ratio (ϕ) from 0,42-2,59. In general, mechanism validation results show that kinetic model has reproduced experimental results well.

Sensitivity analysis results show that the most sensitive reaction is chain branching reaction, $H+O_2 \rightarrow$

$\text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{O}$, for low pressure and thermal decomposition reaction of hydrogen peroxide,
 $\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M}) \rightarrow \text{OH} + \text{OH}(+\text{M})$, for high pressure. Flow reactor simulation results show that partial combustion happens at high initial pressure and temperature, and stoichiometric mixture. Then, shock tube simulation results show that ignition is reached fast at high initial pressure and temperature.