

Model kinetika oksidasi dan pembakaran toluena pada rentang tekanan, temperatur rasio ekivalensi = Toluene oxidation and combustion kinetic model in wide ranges of pressure, temperature and equivalence ratio

Sukirman, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20249615&lokasi=lokal>

Abstrak

Suatu mekanisme kinetika kimia terinci untuk pembakaran toluena telah dilakukan dan dievaluasi pada rentang yang lebar dari suatu reaksi pembakaran. Dalam hal ini mencakup beberapa diantaranya adalah diterapkan dalam alat uji shock tubes, perfectly stirred reactor (PSR) dan plug flow reactor (PFR). Mekanisme reaksi yang dihasilkan dengan menggunakan program aplikasi Chemkin terdiri dari 617 reaksi elementer dan 107 spesies yang mana membutuhkan keahlian yang cukup untuk mengembangkan suatu mekanisme kinetika kimia yang bisa diaplikasikan pada reaksi oksidasi dengan temperatur sedang hingga temperature tinggi. Dekomposisi termal dari toluene dan reaksi reaksi serangan spesies radikal yang mengarah pada terbentuknya spesies teroksigenasi (oxygenated species) diberikan perhatian khusus. Model kinetika toluena yang menyeluruh akan mendukung untuk mendapatkan profil konsumsi bahan bakar yang efisien baik itu untuk aplikasi shock tubes, perfectly stirred reactor maupun plug flow reactor. Penelitian ini menggunakan data sekunder yang dipakai sebagai acuan untuk validasi adalah hasil percobaan yang dilakukan terhadap campuran homogen pada rentang tertentu nisbah kesetaraan (equivalence ratios) pada tekanan yang dimampatkan dari 25 sampai 45 bar dan temperature 920 K hingga 1100 K. Data yang dipakai untuk validasi ini adalah data sekunder dari hasil percobaan Davidson [D.F. Davidson, B.M. Gauthier, R.K. Hanson, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1175 - 1182] dengan memvariasikan konsentrasi oksigen, sementara konsentrasi toluenanya dijaga tetap untuk mengetahui seberapa jauh pengaruh dari oksigen dalam berkontribusi terhadap pola ignisi. Percobaan tambahan dengan memvariasikan fraksi mol dari bahan bakar pada harga nisbah kesetaraan tertentu menunjukkan bahwa waktu tunda ignisi menjadi lebih pendek dengan makin tingginya konsentrasi bahan bakar. Prakiraan dari berbagai mekanisme kinetika rinci juga diperbandingkan dimana hasilnya menunjukkan belum didapatkannya keakuratan data mekanisme kinetika untuk toluene terhadap data percobaan untuk penentuan waktu tunda ignisi maupun jumlah panas yang dilepaskan. Analisa fluks dilakukan untuk mengidentifikasi arah reaksi yang paling dominan dan reaksi mana yang menunjukkan penyimpangan dari data yang bersumber dari percobaan dan data hasil simulasi.

.....A detailed chemical kinetic mechanism for the combustion of toluene has been assembled and investigated for a wide range of combustion regimes. The later includes shock tubes, perfectly stirred reactor (PSR) and Plug Flow Reactor (PFR). The reaction mechanism features 617 elementary reactions and 107 species and represents an attempt to develop a chemical kinetic mechanism applicable to intermediate and high temperature oxidation. Toluene thermal decomposition and radical attack reactions leading to oxygenated species are given a particular attention.

The final toluene kinetic model results in excellent fuel consumption profiles in both flame and plug flow reactors and sensible predictions of temporal evolution of hydrogen radical and pyrolysis products in shock tube experiments. Experiments are conducted for homogeneous mixtures over a range of equivalence ratios at compressed pressures from 25 to 45 bar and compressed temperatures from 920 to 1100 K. Experiments

varying oxygen concentration while keeping the mole fraction of toluene constant reveal a strong influence of oxygen in promoting ignition.

Additional experiments varying fuel mole fraction at a fixed equivalence ratio show that ignition delay becomes shorter with increasing fuel concentration. Moreover, autoignition of benzene shows significantly higher activation energy than that of toluene. In addition, the experimental pressure traces for toluene show behavior of heat release significantly different from the results of Davidson et al. [D.F. Davidson, B.M. Gauthier, R.K. Hanson, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1175-1182]. Predictability of various detailed kinetic mechanisms is also compared. Results demonstrate that the existing mechanisms for toluene fail to predict the experimental data with respect to ignition delay and heat release. Flux analysis is further conducted to identify the dominant reaction pathways and the reactions responsible for the mismatch of experimental and simulated data.