



SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA VI

"Pemantapan Riset Kimia dan Asesmen Dalam Pembelajaran
Berbasis Pendekatan Saintifik"

Program Studi Pendidikan Kimia Jurusan PMIPA FKIP UNS
Surakarta, 21 Juni 2014



MAKALAH
PENDAMPING

KIMIA LINGKUNGAN

ISBN : 979363174-0

Mekanisme Reaksi Oksidasi dan Pembakaran untuk Memrediksi Waktu Tunda Ignisi Bahan Bakar Rujukan Bensin

Yuswan Muharam*, Shilka Miladian dan Jacquin Suryadi

Departemen Teknik Kimia, Fakultas Teknik Universitas Indonesia

Kampus UI Depok, Depok 16424, Indonesia

* Keperluan korespondensi, tel/fax: 021-7863515, email: muharam@che.ui.ac.id

ABSTRAK

Mekanisme reaksi oksidasi dan pembakaran bahan bakar rujukan bensin dikembangkan pada penelitian ini. Bahan bakar tersebut terdiri dari n-heptana, isooktana dan toluena. Sub-mekanisme reaksi n-heptana dan isooktana dihasilkan secara otomatis dengan menggunakan kode MOLEC, sedangkan sub-mekanisme reaksi toluena dikembangkan secara manual. Reaksi-reaksi elementer di dalam mekanisme tersebut dilengkapi dengan parameter Arrhenius, yaitu faktor pra-eksponensial, eksponen temperatur dan energi aktivasi. Dari reaksi-reaksi tersebut, laju konsumsi dan produksi semua spesi yang terlibat diturunkan untuk mendapatkan model kinetika, kemudian diselesaikan untuk mendapatkan waktu tunda ignisi oksidasi dan pembakaran bahan bakar rujukan bensin tersebut. Perhitungan dilakukan dengan menggunakan piranti lunak CHEMKIN. Waktu tunda ignisi hasil perhitungan dibandingkan dengan hasil eksperimen dari Gauthier dkk. pada rentang temperatur 900-1150 K, tekanan 25-55 bar, serta rasio ekuivalensi 1 untuk mendapatkan model yang valid. Secara umum, model yang dikembangkan pada penelitian ini adalah valid. Analisis sensitivitas menunjukkan bahwa reaksi yang paling sensitif pada temperatur rendah (700 K) dan sedang (850 K) adalah reaksi abstraksi siklopentena oleh molekul oksigen; pada temperatur tinggi (1000 K) adalah $2\text{OH}(\text{+M}) \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2(\text{+M})$.

Kata Kunci: *mekanisme reaksi, bahan bakar rujukan, waktu tunda ignisi, kinetika*

PENDAHULUAN

Seiring perkembangan zaman, segala sesuatu dituntut untuk lebih cepat dan praktis. Hal ini menjadi salah satu pendorong utama kian meningkatnya jumlah penjualan kendaraan bermotor dari tahun ke tahun. Bertambahnya jumlah kendaraan bermotor menimbulkan berbagai permasalahan transportasi, salah satunya terkait dengan kualitas bahan bakar sebagai sumber energi penggerak transportasi tersebut. Kualitas bahan bakar yang tidak sesuai dengan spesifikasi mesin kendaraan, seperti rasio kompresi, mengakibatkan mesin torak (piston) kendaraan cepat rusak karena terjadi ketukan (*knocking*). Oleh karena itu, bahan bakar kendaraan bermotor menjadi komoditas penting untuk diteliti lebih jauh penggunaannya. Salah satu topik yang menarik perhatian peneliti adalah perilaku dari pembakaran bahan bakar jenis bensin yang umum digunakan oleh masyarakat luas. Terdapat berbagai cara untuk mempelajari karakteristik pembakaran bahan bakar bensin, di antaranya melalui model kinetika reaksi oksidasi dan pembakaran bahan bakar tersebut.

Model kinetika adalah seperangkat persamaan laju produksi dan konsumsi spesi-spesi di dalam suatu mekanisme reaksi. Proses pembakaran bahan bakar bensin melibatkan ratusan spesi kimia yang terlibat di dalam ribuan reaksi kimia elementer. Dimulai dari reaksi-reaksi elementer antara molekul bahan bakar dengan radikal-radikal, serta dari campuran spesi awal, proses pembakaran

merupakan reaksi-reaksi dekomposisi dan penyusunan ulang yang menghasilkan spesi-spesi baru yang menyusun mekanisme reaksi.

Bahan bakar bensin mengandung puluhan senyawa hidrokarbon yang berentang dari C_4 hingga C_{12} . Mereka terdiri dari hidrokarbon parafin rantai lurus dan bercabang, olefin dan aromatik. Pembakaran bahan bakar bensin dikarakterisasi oleh pembakaran komponen-komponen utamanya. Pemahaman kimia pembakaran komponen hidrokarbon di dalam bahan bakar bensin dapat mempelajari karakteristik pembakaran bahan bakar bensin seperti waktu tunda ignisi.

Kami telah melakukan penelitian pemodelan kinetika pembakaran sejumlah hidrokarbon, di antaranya adalah parafin rantai lurus C_5 hingga C_{10} [1], isooktana [2], sikloheksana [3], campuran n-heptana dan isooktana [4], metanol [5] dan etanol [6].

Pada penelitian ini kami mengembangkan mekanisme detail untuk oksidasi dan pembakaran bahan bakar rujukan bensin yang terdiri dari n-heptana, isooktana dan toluena. Dari mekanisme ini, model kinetika diturunkan untuk selanjutnya diselesaikan untuk memprediksi waktu tunda ignisi campuran bahan bakar tersebut. Untuk mengetahui validitas model, waktu tunda hasil perhitungan model dibandingkan dengan waktu tunda ignisi hasil eksperimen di *shock tube* yang dilakukan oleh Gauthier dkk. [7].

METODE PENELITIAN

Penelitian perhitungan waktu tunda ignisi bahan bakar rujukan bensin dibagi menjadi 5 tahap, yaitu:

Pengembangan Mekanisme

Mekanisme reaksi oksidasi dan pembakaran campuran n-heptana, isooktana dan toluena dibagi menjadi dua sub-mekanisme. Sub-mekanisme untuk n-heptana dan isooktana dihasilkan secara otomatis dengan menggunakan kode MOLEC [8]. Sub-mekanisme untuk toluena telah dikembangkan pada penelitian sebelumnya [5]. Kedua sub-mekanisme digabung untuk menghasilkan mekanisme campuran bahan bakar n-heptana, isooktana dan toluena.

Setiap reaksi elementer di dalam mekanisme tersebut dilengkapi dengan parameter Arrhenius, yang terdiri dari faktor pra-eksponensial (A), eksponen temperatur (n) dan energi aktivasi (E_a) dan dihubungkan oleh Persamaan (1)

$$k = AT^n \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right] \quad (1)$$

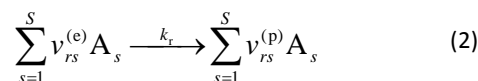
Pengembangan Model Kinetika

Pengembangan model kinetika dilakukan dengan menggunakan aplikasi yang tersedia di *software* Chemkin 3.7.1, yaitu AURORA [9].

Walaupun mekanisme kimia detail dari oksidasi dan pembakaran bahan bakar rujukan bensin terdiri dari ratusan spesi yang terlibat di

dalam ribuan reaksi elementer, namun reaksi-reaksi tersebut dapat dikelompokkan ke dalam jumlah terbatas tipe reaksi. Berdasarkan pengamatan, adalah mungkin untuk merumuskan semua kemungkinan reaksi yang berlangsung dalam oksidasi dan pembakaran hidrokarbon rantai panjang, asalkan koefisien laju reaksinya dapat diturunkan dari aturan yang sederhana. Masing-masing aturan merepresentasikan tipe reaksi tertentu. Apabila tidak tersedia data untuk tipe reaksi tertentu, maka koefisien laju reaksi untuk reaksi yang mirip dalam molekul yang berbeda dapat digunakan.

Jika banyak terdapat reaksi elementer, jumlah bersih dari reaktan yang dikonsumsi atau produk yang dihasilkan akan muncul dari penambahan kontribusi dari tiap reaksi elementer. Pada umumnya, spesi akan mengambil bagian pada beberapa reaksi sebagai reaktan dan di reaksi lainnya sebagai produk. Laju produksi dan konsumsi merupakan hasil bersih dari seluruh reaksi elementer dimana spesi tersebut terlibat. Untuk suatu mekanisme yang terdiri dari R reaksi elementer, yang tersusun dari S spesi,



dimana $r=1, 2, \dots, R$, $\nu_{rs}^{(e)}$ dan $\nu_{rs}^{(p)}$ menunjukkan koefisien stoikiometri reaktan dan produk, maka laju pembentukan spesi i diperoleh dari penambahan seluruh persamaan laju dimana spesi i terlibat,

$$\left(\frac{\partial c_i}{\partial t}\right)_{\text{chem}} = \sum_{r=1}^R k_r (v_r^{(p)} - v_r^{(e)}) \prod_{s=1}^S c_s^{v_r^{(e)}} \quad (3)$$

dimana $i=1, 2, \dots, S$. Notasi c_s menunjukkan konsentrasi s yang terlibat.

Validasi

Tahap ini dilakukan dengan membandingkan waktu tunda ignisi hasil perhitungan dengan waktu tunda ignisi hasil percobaan. Data percobaan merupakan waktu tunda ignisi campuran bahan bakar 3 komponen, yaitu n-heptana, iso-oktanadan toluena masing-masing 17%, 69% dan 14%. Data ini diperoleh dari Gauthier dkk. [7] dengan menggunakan *shock tube* di rentang temperatur 9000 K – 11500 K, rentang tekanan 25 bar – 55 bar dan rasio ekuivalensi (Φ) sebesar 1.

Untuk mendapatkan kesesuaian yang baik antara hasil perhitungan dengan hasil percobaan, maka dilakukan pengaturan faktor pra-eksponensial reaksi-reaksi yang memberikan sensitivitas tinggi terhadap waktu tunda ignisi.

Analisis Sensitivitas

Analisis sensitivitas dilakukan untuk mengidentifikasi reaksi-reaksi yang memberikan sensitivitas tinggi terhadap waktu tunda ignisi. Reaksi-reaksi yang memberikan sensitivitas tinggi memerlukan nilai parameter Arrhenius yang akurat.

Analisis sensitivitas dilakukan dengan mengubah-ubah nilai faktor pra-eksponensial

pada rentang yang diperbolehkan. Jika perubahan sedikit saja dari nilai faktor pra-eksponensial suatu reaksi memberikan perubahan nilai waktu tunda ignisi yang sangat besar, maka dikatakan reaksi tersebut memberikan sensitivitas tinggi terhadap waktu tunda ignisi.

Simulasi

Tahap ini mensimulasikan model kinetika dengan memvariasikan temperatur awal (T), tekanan awal (P) dan rasio ekuivalensi (Φ). Tujuannya adalah untuk mengetahui pengaruh variabel-variabel tersebut terhadap waktu tunda ignisi.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Validasi

Model kinetika oksidasi dan pembakaran campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena terdiri dari 3895 reaksi elementer yang melibatkan 1593 spesi. Validasi dilakukan pada rentang temperatur 973 K – 1137 K pada tekanan 25 bar, dan 908 K – 1104 K pada tekanan 55 bar.

Gambar 1 menampilkan perbandingan waktu tunda ignisi hasil perhitungan model dengan hasil percobaan. Pada gambar tersebut terlihat bahwa secara umum model mampu mereproduksi hasil eksperimen dengan baik. Pada tekanan 55 bar terlihat bahwa kurva waktu tunda ignisi hasil perhitungan berada pada simbol-simbol hasil eksperimen dengan deviasi secara kualitatif sangat rendah. Pada tekanan 25 bar, waktu tunda ignisi diprediksi oleh model sedikit di atas hasil percobaan.

Analisis Sensitivitas

Analisis sensitivitas mekanisme yang sudah valid dilakukan pada tekanan awal 55 bar, rasio ekuivalensi 1 dan berbagai temperatur awal, yaitu daerah temperatur awal rendah (700 K), sedang (850 K), dan tinggi (1000 K).

Temperatur awal rendah

Tabel 1 memuat reaksi-reaksi yang mempunyai koefisien sensitivitas paling tinggi atau paling sensitif pada reaksi oksidasi dan pembakaran campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena pada temperatur awal rendah.

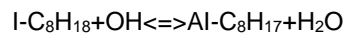
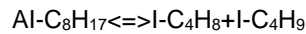
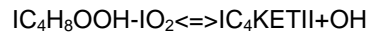
Berdasarkan data pada Tabel 1, terlihat bahwa terjadi pembentukan radikal-radikal aktif HO₂ melalui abstraksi atom H pada 3 reaksi sensitif teratas. Radikal HO₂ ini akan memicu terjadinya reaksi konsumsi dan produksi secara berantai dalam proses oksidasi dan pembakaran bahan bakar bensin. Untuk reaksi yang melibatkan senyawa oksigen, jalannya reaksi akan berlangsung secara lambat karena energi aktivasinya tinggi (> 167 kJ/mol), selanjutnya radikal yang dihasilkan reaksi tersebut akan memulai reaksi rantai dan populasi radikal meningkat secara eksponensial dengan cepat akibat adanya percabangan rantai setelah tahap propagasi (tahap di mana senyawa lain akan mengalami reaksi dengan HO₂ hasil reaksi).

Temperatur awal sedang

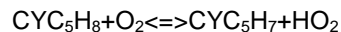
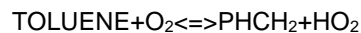
Analisis sensitivitas pada temperatur awal sedang dilakukan pada temperatur awal 850 K dengan campuran bahan bakar-udara stoikiometri dan tekanan awal 55 bar. Tabel 2 memuat reaksi yang mempunyai koefisien sensitivitas paling tinggi atau paling sensitif pada reaksi oksidasi dan

pembakaran campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena pada temperatur awal sedang.

Dari daftar reaksi sensitif pada temperatur sedang di atas, yang paling menonjol adalah reaksi berikut:



Pada tiga reaksi ini, terjadi keterkaitan antara satu dengan yang lain, yaitu adanya pembentukan radikal OH yang kemudian akan segera dikonsumsi oleh bahan bakar, di mana bahan bakar akan dengan cepat terdekomposisi secara unimolekular. Hal ini menandakan ketiga reaksi di atas mempunyai sensitivitas yang besar, terlihat dari nilai koefisien sensitivitasnya yang cukup signifikan. Sedangkan, reaksi dengan koefisien sensitivitas negatif yang paling besar masih didominasi oleh reaksi pembentukan radikal aktif HO₂, yaitu:



Jenis kedua reaksi ini diketahui sebagai reaksi yang *reversible*, berjalan lambat, serta memiliki energi aktivasi yang besar.

Temperatur awal tinggi

Analisis sensitivitas dilakukan pada temperatur awal 1000 K pada campuran bahan bakar-udara stoikiometri dan tekanan awal 55 bar. Pada temperatur tinggi, terlihat perbedaan yang mencolok bila dibandingkan dengan hasil analisis sensitivitas pada temperatur sedang dan rendah, yakni reaksi yang melibatkan *third body* menjadi jauh lebih memberi sensitivitas tinggi dibandingkan reaksi lainnya. Reaksi-reaksi yang mempunyai koefisien sensitivitas paling tinggi pada temperatur awal tinggi dimuat pada Tabel 3.

Dari Tabel 3 terlihat bahwa terjadi konsumsi radikal OH dan HO₂ oleh komponen bahan bakar yang cukup signifikan, terutama oleh senyawa toluena dan isooktana. Radikal aktif ini akan berkurang konsentrasinya karena mengabstraksi atom H yang terdapat pada senyawa toluena dan isooktana. Dengan demikian ketiga reaksi di atas dapat dijadikan dasar bahwa pada rentang temperatur tinggi, dengan semakin meningkatnya temperatur, maka konsentrasi radikal OH dan HO₂ akan semakin aktif bereaksi dengan bahan bakar karena adanya reaksi pemutusan atom H. Akibatnya bahan bakar akan semakin cepat mengalami ignisi. Di samping itu, keterlibatan *third body* juga mempengaruhi reaktivitas reaksi secara keseluruhan, karena perannya sebagai penyedia energi dalam pemutusan ikatan atom H.

Simulasi

Kondisi operasi pada simulasi ini adalah pada tekanan awal 5, 25 dan 55 bar; temperatur awal 700 K – 1100 K; serta rasio ekuivalensi 0,8 (miskin bahan bakar); 1,0 (stoikiometri) dan 1,5 (kaya bahan bakar). Tabel 4 sampai Tabel 6 memperlihatkan komposisi campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena untuk setiap campuran yang sudah dinormalisasi dan merupakan komposisi yang digunakan untuk melakukan simulasi.

Variasi rasio ekuivalensi

Simulasi pengaruh rasio ekuivalensi dilakukan pada tekanan awal 5 bar. Profil waktu tunda ignisi hasil simulasi ditunjukkan pada Gambar 2.

Pada Gambar 2 dapat terlihat bahwa semakin kecil rasio ekuivalensi, waktu tunda ignisi semakin cepat. Hal ini menunjukkan bahwa pada campuran yang miskin bahan bakar, oksigen berada dalam

keadaan berlebih. Ini menyebabkan reaksi oksidasi spesi-spesi berlangsung cepat dan bergerak ke arah sempurna. Waktu tunda ignisi menjadi cepat. Sebaliknya, pada campuran yang kaya bahan bakar, oksigen yang diperlukan untuk mengoksidasi spesi-spesi tidak cukup. Akibatnya reaksi oksidasi berjalan lambat dan bergerak menjauhi sempurna. Waktu tunda ignisi menjadi lambat.

Pada Gambar 2 dapat pula dilihat bahwa semakin tinggi temperatur, waktu tunda ignisi semakin cepat. Pada rentang temperatur yang rendah, reaksi oksidasi lebih dominan dibandingkan reaksi pemutusan rantai; sebaliknya pada rentang temperatur tinggi, reaksi pemutusan rantai lebih dominan. Reaksi yang digerakkan oleh temperatur ini menyebabkan waktu tunda ignisi berlangsung cepat. Energi kinetika yang dimiliki reaktan-reaktan pada temperatur tinggi mampu melampaui hambatan energi aktivasi sehingga fraksi tumbukan antar molekul yang menyebabkan terjadinya pemutusan ikatan pada reaktan dan penyusunan ulang atom-atom menjadi molekul baru menjadi tinggi.

Variasi tekanan awal

Pengaruh tekanan awal pada waktu tunda ignisi diperlukan pada gambar 3.

Dari Gambar 3 kita melihat bahwa bahan bakar yang dimasukkan dengan tekanan awal 5 bar akan memiliki waktu tunda ignisi yang lebih lambat. Berbeda ketika tekanan awal dinaikkan menjadi 25 bar, bahan bakar memiliki waktu tunda ignisi yang lebih cepat. Demikian pula, jika tekanan awal dinaikkan lagi menjadi 55 bar, bahan bakar akan lebih cepat lagi terignisi. Dengan demikian, semakin besar tekanan awal yang diberikan pada reaktan, maka reaksi semakin cepat. Kejadian ini dipengaruhi oleh dua faktor yaitu kenaikan temperatur dan keterlibatan spesi M atau biasa disebut sebagai *third body*.

Ketika tekanan awal semakin tinggi maka secara bersamaan temperatur semakin tinggi pula dan waktu tunda ignisi akan semakin cepat.

Reaksi-reaksi yang melibatkan *third body* (M) juga berpengaruh dalam menurunkan waktu tunda ignisi ketika tekanan awal dinaikkan, terutama pada reaksi unimolekular. *Third body* merupakan spesi-spesi selain reaktan di dalam campuran reaksi, yang membawa energi pada molekul saat terjadi proses dekomposisi unimolekular.

Pada kondisi awal, ketika sistem diberikan tekanan dengan nilai tertentu, maka besarnya tekanan awal yang diterima oleh *third body* itu sama dengan tekanan awal yang diterima oleh sistem tersebut. Tekanan awal merupakan suatu bentuk energi yang akan dipindahkan pada reaktan. Dengan demikian, saat reaktan bertemu dengan *third body*, maka akan terjadi suatu perpindahan energi dari *third body* ke reaktan. Energi yang diterima akan meningkatkan gerakan molekul. Tumbukan antar molekul pun akan semakin sering seiring dengan meningkatnya tekanan di dalam sistem. Tumbukan ini pula yang menyebabkan reaktan terdekomposisi secara unimolekular ketika energi yang diterima cukup untuk memutuskan ikatan kimia dari molekul itu sendiri.

Dekomposisi unimolekular ini biasa terjadi di awal tahapan reaksi berantai. Selain itu, dekomposisi unimolekular pada umumnya menghasilkan radikal-radikal yang aktif mengkonsumsi bahan bakar. Semakin cepat radikal-radikal mengkonsumsi bahan bakar ini terbentuk, maka semakin cepat pula reaksi berlangsung. Dan salah satu cara untuk mempercepat reaksi berantai tersebut adalah dengan menaikkan tekanan awal.

KESIMPULAN

1. Model kinetika oksidasi dan pembakaran campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena mampu memprediksi waktu tunda ignisi hasil eksperimen dengan baik.
2. Analisis sensitivitas menunjukkan bahwa :
 - a. Pada temperatur rendah, reaksi yang memiliki koefisien sensitivitas paling positif adalah reaksi $H + O_2 (+M) \rightarrow HO_2 (+M)$, dan reaksi yang memberikan sensitivitas paling negatif adalah $CYC_5H_8 + O_2 \rightarrow CYC_5H_7 + HO_2$.
 - b. Pada temperatur sedang, reaksi yang paling memiliki koefisien sensitivitas paling positif adalah reaksi $IC_4H_9O_2 \rightarrow IC_4H_8O_2H-I$, dan reaksi yang memberikan sensitivitas paling negatif adalah $TOLUENE + O_2 \rightarrow PHCH_2 + HO_2$ dan $CYC_5H_8 + O_2 \rightarrow CYC_5H_7 + HO_2$.
 - c. Pada temperatur tinggi, reaksi yang paling memiliki koefisien sensitivitas paling positif adalah reaksi $2OH (+M) \rightarrow H_2O_2 (+M)$, serta reaksi yang memiliki koefisien sensitivitas paling negatif adalah reaksi $I-C_8H_{18} + OH \rightarrow AI-C_8H_{17} + H_2O$.
3. Hasil simulasi waktu tunda ignisi pada variasi rasio ekuivalensi menunjukkan bahwa campuran bahan bakar miskin bahan bakar ($\phi = 0,8$) memiliki waktu tunda ignisi yang paling cepat dibandingkan dengan campuran bahan bakar stokiometri ($\phi = 1,0$), dan kaya bahan bakar ($\phi = 1,5$).

4. Hasil simulasi menunjukkan bahwa semakin tinggi tekanan dan temperatur awal, maka waktu tunda ignisi oksidasi dan pembakaran semakin cepat pula.
5. Waktu tunda ignisi paling cepat terjadi pada tekanan 55 bar, temperatur 1000 K, dan campuran bahan bakar miskin bahan bakar ($\phi = 0,8$) yaitu 0,406 milidetik.
6. Waktu tunda ignisi paling lambat terjadi pada tekanan 5 bar, temperatur 700 K, dan campuran bahan bakar kaya bahan bakar ($\phi = 1,5$) yaitu 118 milidetik.

DAFTAR RUJUKAN

- [1] Muharam, Y. and Warnatz, J., 2007, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 9, 4218.
- [2] Muharam, Y. and Yuhana, Y.A., 2010, *Seminar Teknik Kimia Soehadi Rekswardojo 2010*.
- [3] Muharam, Y., Supriyadi, C., Hadiwijaya, C. and Suryadi, J., 2011, *Prosiding Seminar Nasional Fundamental dan Aplikasi Teknik Kimia 2011*.
- [4] Muharam, Y. and Alfredo, M.N., 2011, *Proceeding of the 12th International Conference on QiR (Quality in Research)*.
- [5] Muharam, Y., Rahayu, E. and Theo A.A., 2008, *Prosiding Seminar Nasional Rekayasa Kimia Dan Proses 2008*.
- [6] Muharam, Y. and Sambudi, N.S., 2007, *Proceeding of the 10th International Conference on QiR (Quality in Research)*.
- [7] Gauthier, B.M., Davidson, D.F. and Hanson, R.K., 2004, *Comb.and Flame*, 139, 300.

[8] Nehse, M., Warnatz, J., Chevalier, C., Louessard, P. and Melenk, H., 1996, *MOLEC: A Program for the Generation of Chemical Reaction Equations, User's Manual*, Interdisziplinäres Zentrum fuer Wissenschaftliches Rechnen, Universitaet Heidelberg.

[9] CHEMKIN 3.7.1, Reaction Design.

TANYA JAWAB

Nama penanya : Eva F

Nama pemakalah : Yuswan M

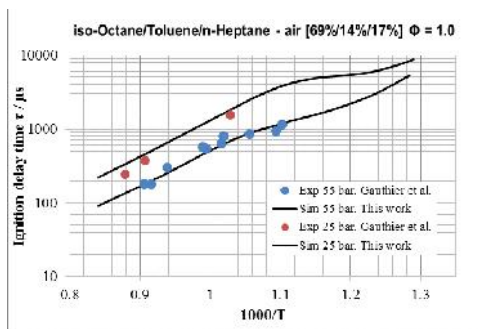
Pertanyaan :

1. Seandainya model diterapkan untuk jenis bahan bakar lain, apakah masih valid? (misal BBG atau metana)
2. Jika waktu tunda Ignisi lama, apa yang terjadi? dan bagaimana sebaliknya?

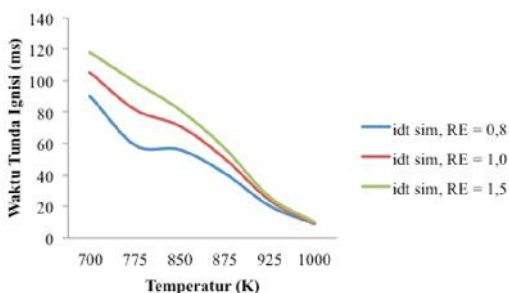
Jawaban :

1. Untuk BBG dan metana, dibutuhkan model yang lain dan perlu diuji kevalidannya lagi terhadap percobaan.
2. Waktu tunda Ignisi lama artinya bahan bakar tersebut sulit terbakar, jika diterapkan pada mesin bensin waktu tunda ignisi lama lebih baik, karena tahan terhadap tekanan dan temperatur sehingga mencegah autoignisi yang berakibat knocking. Waktu tunda ignisi cepat artinya bahan bakar mudah terbakar, mudah autoignisi, tapi jika diterapkan pada mesin diesel waktu yang cepat lebih baik.

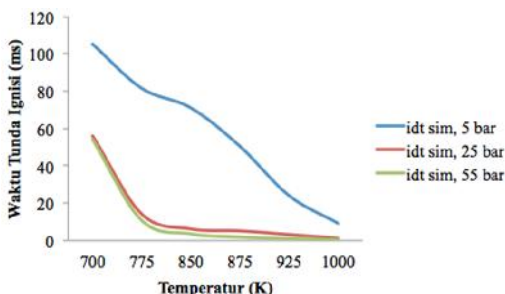
DAFTAR GAMBAR



Gambar 1. Plot logaritmik waktu tunda ignisi hasil perhitungan dan hasil percobaan



Gambar 2. Perbandingan waktu tunda ignisi pada tekanan awal 5 bar untuk rasio ekuivalensi 0,8; 1,0 dan 1,5



Gambar 3. Perbandingan waktu tunda ignisi pada rasio ekuivalensi 1 pada tekanan awal 5, 25 dan 55 bar

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Daftar reaksi paling sensitif beserta nilai koefisien sensitivitas pada temperatur awal 700 K

Reaksi	Koefisien Sensitivitas
--------	------------------------

$H+O_2(+M) \rightleftharpoons HO_2(+M)$	2,546
$CYC_5H_8+O_2 \rightleftharpoons CYC_5H_7+HO_2$	-6,826
$TOLUENE+O_2 \rightleftharpoons PHCH_2+HO_2$	-5,648
$I-C_8H_{18}+OH \rightleftharpoons AI-C_8H_{17}+H_2O$	-0,997

Tabel 2. Daftar reaksi yang paling sensitif beserta nilai koefisien sensitivitas pada temperatur awal 850 K

Reaksi	Koefisien Sensitivitas
$IC_4H_8OOHIO_2 \rightleftharpoons IC_4KETII+OH$	0,647
$AI-C_8H_{17} \rightleftharpoons I-C_4H_8+I-C_4H_9$	0,601
$I-C_8H_{18}+OH \rightleftharpoons AI-C_8H_{17}+H_2O$	-0,998
$TOLUENE+O_2 \rightleftharpoons PHCH_2+HO_2$	-1,096
$CYC_5H_8+O_2 \rightleftharpoons CYC_5H_7+HO_2$	-1,262

Tabel 3. Daftar reaksi yang paling sensitif beserta nilai koefisien sensitivitas pada temperatur awal 1000 K

Reaksi	Koefisien Sensitivitas
$2OH(+M) \rightleftharpoons H_2O_2(+M)$	1,252
$TOLUENE+HO_2 \rightleftharpoons PHCH_2+H_2O_2$	-0,355
$I-C_8H_{18}+OH \rightleftharpoons AI-C_8H_{17}+H_2O$	-0,996

Tabel 4. Komposisi campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena dalam campuran miskin bahan bakar

Komponen	Komposisi
Toluena	0,0027729
n-Heptana	0,0024282
Isooktana	0,0088029
O ₂	0,2021292
N ₂	0,7838668

Tabel 5. Komposisi campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena dalam campuran stoikiometri

Komponen	Komposisi
Toluena	0,0034541
n-Heptana	0,0030246
Isooktana	0,0109653
O ₂	0,2014239
N ₂	0,7811319

Tabel 6. Komposisi campuran bahan bakar rujukan bensin dan toluena dalam campuran kaya bahan bakar

Komponen	Komposisi
Toluena	0,0051364
n-Heptana	0,0044977
Isooktana	0,0163057
O ₂	0,1996823
N ₂	0,7743779