

BAB 3

METODOLOGI

3.1. Hipotesa

Untuk mencapai tujuan dari studi pengembangan model matematis sel tunam membran pertukaran proton, diperolehnya karakteristik reaktan di dalam kanal distribusi terhadap kinerja densitas arus, maka ditetapkan beberapa asumsi atau pernyataan sementara yang bersumber pada korelasi hukum Faraday (persamaan 2-28) dan hubungan gas ideal (persamaan 2-19). Hukum Faraday menunjukkan bentuk hubungan arus terhadap laju reaktan yang dinyatakan dalam parameter konsentrasi (mol). Sehingga melalui pendekatan gas reaktan sebagai gas ideal dapat diperoleh hubungan persamaan distribusi tekanan terhadap distribusi konsentrasi.

Dalam pemodelan perlu dinyatakan sebuah penyederhanaan/idealisasi, guna memfokuskan tujuan yang diharapkan, terkait variabel fisik utama yang akan terlibat dalam persamaan matematis pengatur (governing laws) yaitu konservasi momentum, massa, spesies dan energi. Sebagaimana yang telah diberikan dalam batasan masalah (ruang lingkup) model yang dibangun merupakan model isothermal dan kondisi tunak, dengan mengambil kondisi operasional sel tunam pada temperatur tetap. Untuk penyelesaian model distribusi momentum, digunakan model 2 dimensi hal ini didasarkan pada pengamatan rasio perbandingan antara tinggi/lebar kanal yang sangat kecil terhadap panjang lintasan (path) kanal dalam pelat elektroda. Sementara untuk distribusi massa, sesuai proses fisik yang terjadi difusi terjadi pada membran ke arah 1 dimensi (normal).

Dari hasil distribusi tekanan, kecepatan dan konsentrasi dapat diketahui karakteristik distribusi reaktan dalam kanal tipe paralel dan serpentine. Dan model domain komputasi yang dibangun diperoleh luas permukaan difusi untuk analisa lanjut memprediksi densitas arus yang dihasilkan.

3.2. Modelling

Modelisasi merupakan sebuah analisa komputasional sebuah model fisik melalui metode numerik sistem persamaan diferensial matematis yang mengatur sebuah fenomena fisik. Melalui teknik analisa numerik akan diselesaikan persamaan matematis tersebut bersama dengan sebuah kondisi batas operasional fisik. Teknik analisa numerik yang dapat digunakan antara lain metode beda hingga (*finite difference*), elemen hingga (*finite element*) atau volume hingga (*finite volume*).

Model fisik sebuah sel tunam terdiri dari pelat kanal gas dan membrane elektrolit polimer yang tersusun oleh lapisan difusi gas dan katalis. Persamaan fisik tentang kesetimbangan dinamik momentum, spesies dan massa digunakan untuk menyelesaikan proses transport spesies dan momentum untuk menghasilkan distribusi tekanan, kecepatan, dan fraksi spesies. Sebagaimana dijelaskan bahwa performance sel tunam dianalisa melalui kurva polarisasi yang menyatakan relasi tegangan dan densitas arus yang terjadi. Fenomena dinamik berperan penting dalam proses reaksi elektrokimia untuk menghasilkan energi arus listrik. Sifat aliran gas reaktan berperan dalam proses transport di dalam struktur sel tunam seperti tekanan lokal yang terjadi menentukan saturasi uap air yang mempunyai pengaruh kepada *water flooding*.

Sebagai lingkup sistem pemodelan dalam studi ini mengambil daerah pembentukan diskretisasi berdasarkan pada model 2 dimensi dan satu bagian kanal saluran baik untuk model kanal *Serpentine* dan model kanal berbelok (*serpentine*). Hal ini untuk mengurangi beban perhitungan numerik cell yang terlalu banyak.

Yang kedua sistem area domain terbagi atas region kanal aliran gas pelat elektroda dan lapisan difusi gas sebagai integrasi susunan membran elektrolit (*MEA, Membrane Electrolyte Assembly*).

Sebagai tujuan modelisasi adalah untuk mengetahui distribusi gas reaktan di dalam kanal saluran fuel cell sehingga dapat diperoleh karakteristik aliran di dalam pelat kanal paralel dan serpentine. Persamaan pengatur yang digunakan untuk menyelesaikan fenomena fisik yaitu momentum, spesies dan massa adalah persamaan difusi dan konveksi di mana terdapat parameter propertis material. Untuk pemodelan aliran gas dalam fuel cell sifat fluida seperti densitas dan viskositas serta porositas diperlukan di dalam pendefinisian model. Sifat-sifat tersebut mempengaruhi karakteristik distribusi yang terjadi.

Untuk melakukan analisa pemodelan sel tunam beberapa simplifikasi proses operasi dipilih sebagai berikut :

- a. Model beroperasi pada keadaan tunak dengan humidifikasi 100% pada membran melalui pengelolaan air dan kalor yang ideal. ^[3,7]
- b. Model dibatasi pula oleh transport air fase tunggal di dalam lapisan difusi dan kanal aliran gas. ^[7]
- c. Karakteristik angka **Reynolds** di dalam kanal aliran gas adalah rendah, sehingga aliran diasumsikan aliran laminar. ^[3,7]
- d. Air hanya berada pada fase cair atau diasumsikan sebagai transport air fase tunggal. ^[3,7]
- e. Kondisi temperatur operasi konstan (isotermal) dan tekanan berbanding terbalik terhadap volume spesies reaktan.
- f. Spesies reaktan memenuhi hubungan persamaan gas ideal.

3.3. Implementasi

Dalam membuat modelisasi komputasi dengan teknik volume hingga simulasi distribusi aliran gas reaktan di dalam kanal distribusi fuel cell ini,

digunakan tools paket modelling *Engineering Fluid Dynamics (EFD) Lab.8* yang terintegrasi dalam tools *CAD (Computer Aided Design) Solid Works*. Model geometri yang dibuat tersimpan sebagai file komponen (*part*) dan model simulasi tersusun sebagai file rakitan (*assembly*) yang sudah tergabung dengan geometri kondisi batas (*lids*).

Langkah pertama dalam pemodelan geometri part dimulai dari pembuatan *sketch* pada bidang gambar (*plane*) 2 dimensi yang dilanjutkan dengan operasi geometri konversi menjadi solid melalui fungsi *Extrude*. Untuk model solid dengan bentuk *non masive*, dilakukan dengan membuat sketch profil bidang *masive* langsung pada satu plane lalu di-*extrude* atau dapat juga dengan membuat sketch bidang masive utama dan di-*extrude* kemudian sketch bidang non masive sebagai pemotong masive utama lalu di-*extrude*.

Selain langkah pemodelan geometri dengan cara di atas dapat pula pemodelan dilakukan dari tools CAD lain yang *compatible*, seperti misalnya *AutoCAD* melalui bentuk file *ACIS (ekstensi .sat)*. Bagi penulis langkah ini lebih memudahkan, yang lebih familiar dengan tools tersebut. Dalam EFD area aliran gas (fluid domain) harus terdefiniskan secara lengkap bersama dengan batas padatnya. Sehingga jika diperhatikan bentuk area komputasi (*computation domain*) domain fluid terletak di tengah-tengah batas padat dengan ujung-ujung yang terbuka sebagai tempat meletakkan sisi masuk dan keluar aliran gas.

Setelah model geometri selesai dibuat, selanjutnya mendefinisikan batas untuk memasukkan parameter kondisi batas (*boundary condition*) yaitu sisi masuk dan sisi keluar aliran gas reaktan. Dalam pendefinisian tersebut digunakan parameter aliran massa (*massflow*) di inlet dan tekanan statik (*static pressure*) di outlet. Pemodelan geometri untuk kondisi batas dengan memasukkan perintah *make assembly* dan digunakan fitur *Create Lids* di dalam EFD dengan memilih profil batas sisi masuk dan keluar dan memilih mode *extrude middle* sehingga geometri akan terbentuk tepat secara simetri di bidang batas sisi. Sampai dengan langkah ini pendefinisian solid modelling sudah selesai, dan file tersimpan dalam format *assembly* dan siap untuk diberikan parameter batas melalui fitur *Wizard*.

Di dalam fitur wizard akan ditentukan antara lain pemodelan *internal flow*, *steady flow* dan jenis fluida.

Secara lengkap untuk pemodelan distribusi aliran gas reaktan di dalam kanal distribusi diberikan dalam tabel keterangan berikut ini :

Tabel 3.1. Data Simulasi

Parameter Batas	Nilai/Kondisi Batasan
Kanal Distribusi	Paralel dan Serpentine
Mode Aliran	Internal flow
Mode Simulasi	Steady flow
Mode Fluida	Gas Hidrogen dan Oksigen
Mode Dimensional Momentum	2 D
Mode Dimensional Spesies	1 D
Laju aliran masuk H ₂ (@ 1 ampere)	0,04 kg/j
Laju aliran masuk O ₂ (@ 1 ampere)	0,02 kg/j
Tekanan statik keluar	108.218 Pa (1 Psi.abs)
Porositas elektroda dan tebal difusi layer	0,4 dan 23 μm
Ukuran area membran elektrolit	50 cm ² (73 mm x 73 mm)
Kedalaman kanal elektroda	1 mm
Fraksi massa Hidrogen masuk dan keluar	1 dan 0
Fraksi massa Oksigen masuk dan keluar	1 dan 0

Untuk mengetahui ketelitian hasil perhitungan iterasi digunakan batas toleransi sisa perhitungan (residu) sesuai default yaitu sebesar $1e-4$, dengan mengatur kerapatan jumlah cell (*grid*) yang dapat dilakukan pada menu *level mesh setting*, mulai dari level 3 hingga batas optimalnya. Dalam simulasi kanal

model paralel pendefinisian mesh dilakukan secara *non-automatic meshing* sedangkan pada model serpentine menggunakan *automatic meshing*. Hal ini didasari pertimbangan kepada bentuk domain fluid yaitu model paralel relatif lebih proporsional antara bagian fluid dan solid sedangkan pada model serpentine perbandingan domain fluid dan solid relatif terlalu besar.

Sebagai parameter yang ingin diperoleh dari hasil simulasi adalah tekanan statik dan fraksi spesies, yang dapat didefinisikan melalui penentuan fitur *Goals* dari menu analisis EFD. Tujuannya adalah untuk mengetahui nilai akhir hasil perhitungan sesuai akurasi yang diinginkan yang dapat dilihat atau dimonitor selama perhitungan numerik. Hasil distribusi dinamik dan massa dapat diperoleh melalui fitur *cut plots* dengan menentukan variabel tekanan dan fraksi massa.

3.4. Evaluasi

Dalam simulasi distribusi aliran gas reaktan di dalam kanal akan dikaji distribusi momentum dan massa spesies, sehingga untuk mengetahui distribusi transport tersebut dilakukan tahap analisa melalui 3 langkah berikut yaitu :

3.3.1. Analisa Pemodelan Komputasi

Yaitu untuk mengetahui tingkat pendekatan pendefinisian model mulai dari pembuatan *solid modelling*, kriteria operasi dan perhitungan solusi. Untuk solid modelling, geometri import dengan format acis file *download* melalui fitur *open file*. Kemudian melalui perintah *make assembly*, pada bidang sisi masuk dan keluar aliran dibuat geometri boundary condition dengan menu *create lids*. Domain batas fluid dapat diperiksa dengan fitur *fluid domain* dalam menu *EFD-tree*.

Kriteria operasional fluid ditentukan berdasarkan idealisasi yang dipilih sebagai berikut : aliran merupakan aliran dalam saluran (*internal flow*) dengan

kondisi tidak tergantung waktu (*steady*) dan jenis fluida adalah gas hidrogen dan oksigen, yang semuanya didefinisikan melalui menu *wizard*. Propertis fluida menggunakan data yang ada dalam database di dalam paket simulasi (*data default*). Sedangkan propertis porositas lapisan difusi gas dimasukkan ke dalam menu *engineering database*, dengan menentukan porositas yang diketahui dan permeabilitas, tebal dan luas permukaan serta tipe hubungan laju massa dengan pressure drop sebesar 2000 Pa pada laju massa maksimum.

3.3.2. Analisa Perhitungan *Pressure Drop*

Besarnya kerugian tekanan aliran terjadi ditentukan oleh profil saluran kanal yaitu oleh kekasaran permukaan dan perubahan penampang aliran atau bidang batas. Faktor utama yang mempengaruhi kerugian tekanan adalah dari angka Reynold yang besarnya sebanding dengan kecepatan. *Pressure drop* yang terjadi secara umum dihitung oleh persamaan Darcy-Weisbach berikut :

$$\Delta P \dots = \dots f \frac{l}{d} \frac{v^2}{2} \quad (3-1)$$

Keterangan :

- ΔP = pressure drop (Pa)
- l = panjang kanal (m)
- d = diameter/lebar kanal (m)
- v = kecepatan fluida(m/det)
- f = faktor kerugian aliran

Untuk faktor kerugian aliran akibat kekasaran permukaan dapat ditentukan untuk aliran laminar oleh perhitungan :

$$f = \frac{64}{Re} \quad \text{di mana} \quad Re = \rho \frac{vd}{\mu} \quad (3-2)$$

Sedangkan kerugian tekanan akibat perubahan penampang aliran dihitung oleh bentuk persamaan berikut :

$$\Delta P = \rho \frac{u_2^2}{2g} \left[\frac{1}{C_c} - 1 \right]^2 \quad (3-3)$$

Keterangan :

u_2 = kecepatan aliran pada penampang kedua (*downstream*)

C_c = rasio perbandingan penampang ke-1 (*upstream*) dan ke-2

3.3.3. Analisa Perhitungan Konsumsi Reaktan

Distribusi gas reaktan yang diperoleh dari hasil pemodelan, selanjutnya akan dianalisa melalui sebuah perbandingan perhitungan analitis laju konsumsi reaktan spesies reaksi. Analisa laju konsumsi reaktan dapat ditentukan melalui sebuah ketetapan dari hasil analisis Faraday yang menyatakan hubungan besarnya arus sebagai fungsi laju konsumsi dan muatan total elektron sebagai berikut :

$$i = n F J \quad (3-1)$$

di mana :

i = arus yang dibangkitkan (A, ampere)

n = jumlah elektron yang terlibat dalam reaksi

($n_{\text{oksidasi}} = 2$, $n_{\text{reduksi}} = 4$)

F = angka Faraday (muatan 1 mol elektron)

= 96485 Coulomb/mol

J = laju konsumsi reaktan (mol/det)

Sementara dari hasil simulasi, parameter perhitungan yang diperoleh dievaluasi melalui hubungan gas ideal guna mendapatkan laju mol spesies reaksi seperti berikut ini :

$$P V = N R_{univ} T \quad (3-2)$$

dengan pendefinisian parameter persamaan :

P = tekanan spesies (atm)

V = laju volume spesies (liter/det)

N = laju mol spesies (mol/det) = J

R_{univ} = konstanta gas universal = 0,0821 liter.atm/mol.K

T = temperatur spesies ($^{\circ}$ K)

Tabel 3.2. Sistematika Analisa Pemodelan

METODOLOGI	URAIAN	PARAMETER
INPUT DATA AWAL	DATA PEMODELAN	
	Dimensi dan Geometri Sistem Kanal dan Lapisan Difusi Gas	Panjang, Lebar, Tebal dan Kedalaman
	Material dan Properti Fisik	Spesies Reaktan dan Porositas
	Parameter Operasional	Tekanan, Temperatur dan Konsentrasi
COMPUTATIONAL MODELLING	SOLID MODEL	
	Elektroda Kanal Lapisan difusi	CAD Import ACIS File DXF File Assembly (Integrated Tools)
	DOMAIN	
	Transport Momentum	Dimensi dan Geometri Kanal
	Transport Massa	Porositas, Tebal, Luas Permukaan Difusi Gas
	BOUNDARY CONDITION	
	Inlet	Tekanan Statik dan Konsentrasi
	Outlet	Laju volume aliran reaktan
	Interface Lapisan Difusi dan Katalis	Tekanan Statik dan Konsentrasi
	Porous Medium	Porositas, Tebal, Luas, Massflow vs Pressure
OUTPUT DATA (INPUT DATA LANJUT)	DATA HASIL	
	Kanal	Distribusi Tekanan
	Kanal dan Lapisan Difusi (Lokal)	Distribusi Tekanan dan Jatuh Tekanan Kecepatan Luas dan atau Volume
MATHEMATICAL MODELLING	HUKUM FARADAY	Arus, muatan dan laju mol reaktan
	HUKUM GAS IDEAL	Tekanan, Volume, mol dan temperatur
OUTPUT DATA (VERIFIKASI)	DENSITAS ARUS	