

PEMODELAN KOMPUTASI 3D SEL TUNAM MEMBRANE PERTUKARAN PROTON (PEMFC) MELALUI TEKNIK BEDA HINGGA

Hariyotejo Pujowidodo

Balai Termodinamika Motor Propulsi (BTMP) BPP Teknologi
Kawasan Puspiptek Serpong Tangerang Selatan Banten 15314
*Email: h_pujowidodo@yahoo.co.id

Abstrak

PEM Fuel Cell merupakan salah satu jenis peralatan konversi elektrokimia yang terdiri dari lapisan aktif elektrolit, berupa membran, sebagai tempat terjadinya reaksi kimia yang mengubah sumber energi potensial kimia hidrogen menjadi energi potensial listrik. Dalam studi ini akan dikaji kinerja pola kanal serpentine terhadap densitas arus yang dihasilkan melalui simulasi komputasi numerik 3 dimensi metode beda hingga (finite element) tools komersial COMSOL 3.2™ pada sebuah bagian sistem kanal saluran. Model terdiri dari domain kanal elektrode berikut lapisan difusi gas dan sub domain lapisan aktif katalis menggunakan prinsip kesetimbangan massa dan muatan (charge and mass balance). Diharapkan melalui studi pemodelan ini dapat dilakukan kajian karakteristik dinamika fluida melalui perpindahan momentum dan massa yang melalui kanal distribusi, lapisan difusi dan lapisan aktif tempat terjadinya reaksi elektrokimia. Pada kanal serpentine dengan belokan yang tajam, pressure drop terbesar diakibatkan oleh adanya hambatan akibat perubahan geometri (U-Turn) yang tajam (perpendicular 90°). Densitas arus yang terjadi bergantung pada distribusi spesies oksidan O₂ dan produk air yang terjadi. Distribusi massa dan komposisi spesies sangat mempengaruhi kinerja yang dihasilkan.

Kata kunci: densitas massa, momentum, serpentine, spesies

1. PENDAHULUAN

PEM Fuel Cell merupakan salah satu jenis peralatan konversi elektrokimia yang terdiri dari lapisan aktif elektrolit, berupa membran, sebagai tempat terjadinya reaksi kimia yang mengubah sumber energi potensial kimia hidrogen menjadi energi potensial listrik. Energi listrik berasal dari reaksi oksidasi atom hidrogen sehingga terjadi aliran elektron menuju oksidan oksigen melalui beban eksternal (Wikipedia, 2015). Dibandingkan pembangkit daya lainnya yang diperoleh dari hasil konversi energi mekanik, efisiensi konversi energi pada sel tunam tersebut lebih baik. Besarnya energi potensial listrik yang terjadi tergantung dari besarnya energi yang dilepaskan dari hasil elektrokimia (energi bebas Gibbs) yang merupakan fungsi konsentrasi zat yang bereaksi.

Struktur sel tunam membran elektrolit pertukaran proton ini terdiri atas lapisan difusi gas, lapisan katalis dan lapisan elektrolit yang tersusun dari struktur karbon yang dipadukan dengan unsur katalis platina. Gas reaktan yang mengalir melalui kanal dengan pola paralel atau serpentine akan berdifusi melalui lapisan difusi bereaksi pada lapisan elektrolit dan katalis dengan gas oksidan. Reaksi kimia dipengaruhi oleh laju kinetika reaksi yang ditentukan oleh konsentrasi jumlah reaktan.

Terdapat jenis kanal saluran aliran gas pada sel tunam membran elektrolit pertukaran proton yang bertujuan untuk memberikan distribusi arus listrik optimal bagi proses reaksi kimia yaitu jenis paralel dan serpentine (Arvay, A., 2011). Dalam studi ini akan dikaji kinerja pola kanal serpentine terhadap densitas arus yang dihasilkan melalui simulasi komputasi numerik 3 dimensi (3D) metode beda hingga (finite element) tools komersial COMSOL 3.2® pada sebuah bagian sistem kanal saluran. Model terdiri dari domain kanal elektrode berikut lapisan difusi gas dan sub domain lapisan aktif katalis menggunakan prinsip kesetimbangan massa dan muatan (charge and mass balance).

Dalam studi ini akan dianalisa kinerja sebuah sel tunam membrane pertukaran proton melalui beberapa hal yang akan dicapai yaitu untuk memperoleh densitas arus yang terjadi pada bagian sistem kanal saluran serpentine, untuk mengetahui karakteristik dinamika fluida dalam kanal saluran terhadap distribusi arus yang dihasilkan, untuk memperoleh hasil distribusi massa yang terjadi pada lapisan difusi gas sebagai faktor utama konsentrasi dan untuk memperoleh pemahaman karakteristik model numerik metode beda hingga untuk pemodelan 3 D melalui ketetapan kesetimbangan massa dan muatan.

2. METODOLOGI

Dalam melakukan studi analisa pemodelan ini dilakukan beberapa tahapan kegiatan yang terdiri dari :

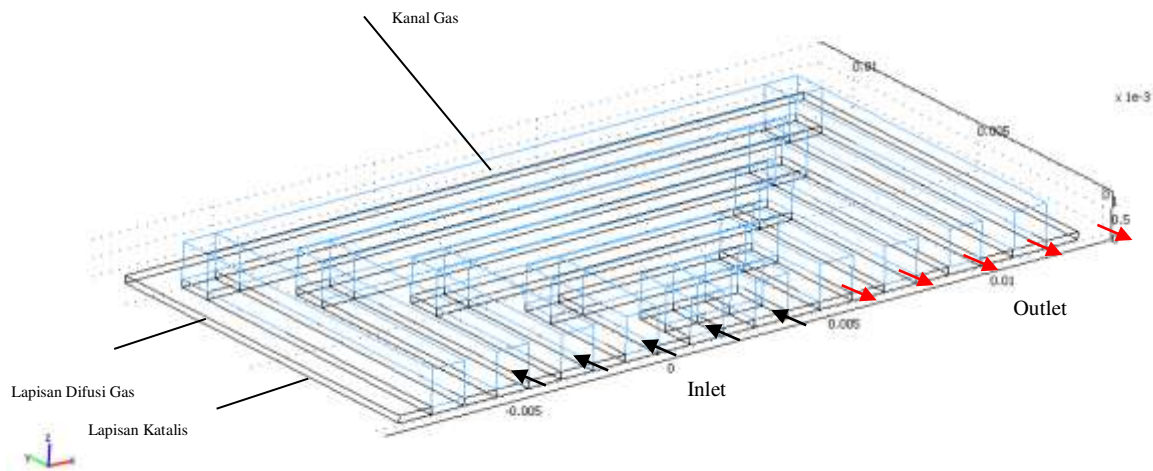
- a. Hipotesa
- b. Modelisasi
- c. Implementasi

2. a. Hipotesa

Beberapa idealisasi ditetapkan (Shi, Z. dkk, 2006) untuk memberikan batasan terhadap model numerik yaitu kondisi tunak (*steady*), temperatur konstan (*isothermal*), membran terhumidifikasi, aliran laminar dan reaktan merupakan gas ideal. Propertis aliran dan material lapisan difusi (*diffusion layer*) maupun lapisan aktif katalis (*catalyst layer*) mempunyai karakteristik isotropic homogen. Rugi dinamika aliran fluida (*pressure drop*) diutamakan akibat adanya hambatan aliran yang ditimbulkan oleh perubahan penampang geometri saluran kanal yaitu adanya belokan (*elbow*).

2. b. Modelisasi

Domain model terbagi atas sebuah unit sel katoda di mana kanal gas serpentine dikonfigurasi dalam sebuah bentuk sistem kanal serpentine seperti pada Gambar 1. Lapisan katalis terletak di bagian bawah domain. Sehingga, pengaruh distribusi arus sepanjang ketebalan lapisan katalis diabaikan.



Gambar 1. Domain Kanal Katode dan Sub Domain Lapisan Aktif Katalis

Beberapa persamaan konservasi dan kondisi batas serta konstanta perhitungan yang ditentukan dalam pemodelan, seperti ditunjukkan dalam Persamaan (1) sampai (11), terdiri dari persamaan momentum Navier Stokes dan massa, kondisi batas sisi masuk dan keluar, persamaan difusi dan konveksi *Maxwell-Stefan* untuk fluks massa fase gas, Difusivitas Maxwell-Stefan, fluks konvektif massa sisi keluar, densitas arus dan kecepatan gas di media porous.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nabla p = 0 \quad ; \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$p = p_o + \Delta p \text{ (inlet)} ; \quad \mathbf{u} = 0 \text{ (dinding batas)} ; \quad \mathbf{u} \cdot \mathbf{t} = 0 \text{ (outlet)} \text{ dan } p = p_o \text{ (outlet)} \quad (2)$$

$$\nabla \cdot \left[-\rho \omega_i \sum_{j=1}^N D_{ij} \frac{M}{M_j} \left(\nabla \omega_j + \omega_j \frac{\nabla M}{M} \right) + \rho \omega_i \mathbf{u} \right] = 0 \quad (3)$$

$$D_{ij} = \frac{\frac{(\omega_2 + \omega_3)^2}{x_1 D_{23}} + \frac{\omega_2^2}{x_2 D_{13}} + \frac{\omega_3^2}{x_3 D_{12}}}{\frac{x_1}{D_{12} D_{13}} + \frac{x_2}{D_{12} D_{23}} + \frac{x_3}{D_{13} D_{23}}} \quad (4)$$

$$D_{ij} = \frac{\frac{\omega_1(\omega_2 + \omega_3)}{x_1 D_{23}} + \frac{\omega_2(\omega_1 + \omega_3)}{x_2 D_{13}} - \frac{\omega_3^2}{x_3 D_{12}}}{\frac{x_1}{D_{12} D_{13}} + \frac{x_2}{D_{12} D_{23}} + \frac{x_3}{D_{13} D_{23}}} \quad (5)$$

$$D_{ij} = k \frac{T^{1,75}}{p(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})^2} \left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{1/2} \quad (6)$$

$$D_{ij}^{eff} = D_{ij} \varepsilon^{1,5} \quad (7)$$

$$\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n} = (\rho \omega_i \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \quad (8)$$

$$n_{O_2} \cdot \mathbf{n} = M_{O_2} \frac{i_c}{4F} \quad \text{dan} \quad n_{H_2O} \cdot \mathbf{n} = -M_{H_2O} \frac{i_c}{F} (1/2 + t_{H_2O}) \quad (9)$$

$$i_c = (-S_a \delta i_0) \frac{\omega_{O_2}}{\omega_{O_2,0}} \exp\left(\frac{F\eta}{2RT}\right) \quad (10)$$

$$\mathbf{u} = \frac{-n_{N_2,d}}{\rho \omega_{N_2}} \quad (11)$$

di mana ρ densitas campuran (kg/m³), M total massa molar campuran (kg), M_j massa molar spesies (kg), ω_j fraksi massa spesies-j dan \mathbf{u} vektor kecepatan (m/s). M dan ρ dapat juga diekspresikan dalam suku fraksi massa ω_j . Difusivitas simetris, D_{ij} , Dengan keterangan x_j adalah faksi molar spesies-j dan D_{ij} adalah difusivitas Maxwell-Stefan (m²/s). Difusivitas simetris untuk kombinasi spesies berbeda didapat dengan permutasi indeks, yaitu $D_{12} = D_{21}$. k adalah bilangan kostanta kesebandingan 3,16e-8, T adalah temperatur (K), p tekanan (Pa), v_i volume difusi molar spesies-i (m³/mol) dan M_i massa molar spesies-I, n_i menyatakan fluks massa spesies-i. Besarnya difusi molar masing-masing spesies terdapat dalam Tabel 1.

Tabel 1. Volume Difusi Molar (m³/mol) dan Komposisi Inlet udara, uap jenuh 80 °C

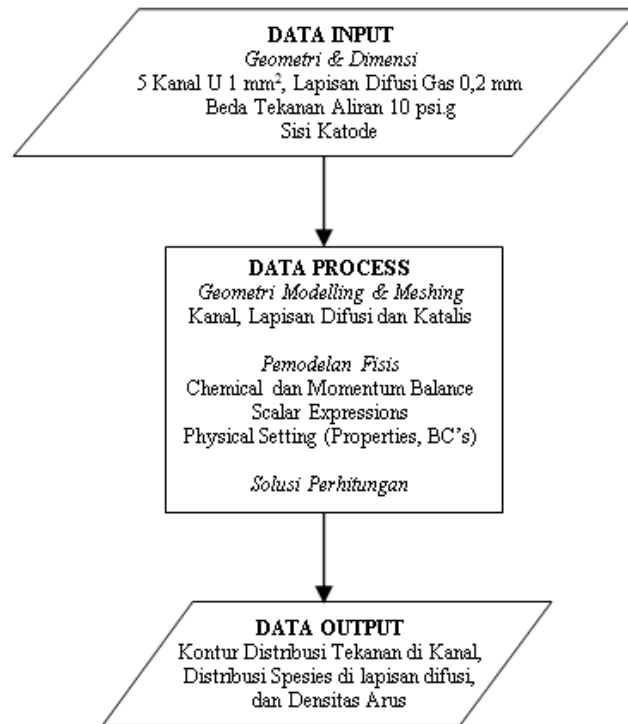
Spesies	Volume Difusi	Spesies	Fraksi Massa
O ₂	16,6e-6	O ₂	0,1447
H ₂ O	12,7e-6	H ₂ O	0,3789
N ₂	17,9e-6	N ₂	0,4764

n_j mewakili fluks massa j , F konstanta Faraday (As/mol), t_{H_2O} bilangan transport air atau bilangan seret (*drag*) yaitu jumlah molekul air yang diseret melintas membran untuk setiap elektron yang berpindah dan i_c adalah densitas arus (A/m²). S_a area permukaan spesifik (m²/m³), δ tebal lapisan aktif (m), R konstanta gas (J/mol.K), T temperatur (K), i_0 densitas arus pertukaran (A/m²) dan η overpotensial (V). Fraksi berat oksigen, ω_{O_2} yang dinormalisasikan dengan fraksi acuan juga dimasukkan. Fluks nitrogen yang melintas batas reaktif adalah nol. Akibatnya, terdapat sebuah fluks konvektif steady yang akan menghitung fluks difusif nitrogen $n_{N_2,d}$. Artinya kecepatan gas akan ada walau di dalam lapisan porous.

Untuk melakukan pemodelan juga didefinisikan konstanta yang digunakan termasuk parameter operasi tekanan maupun komposisi dan propertis gas seperti diberikan dalam tabel berikut :

Tabel 3. Konstanta Pemodelan

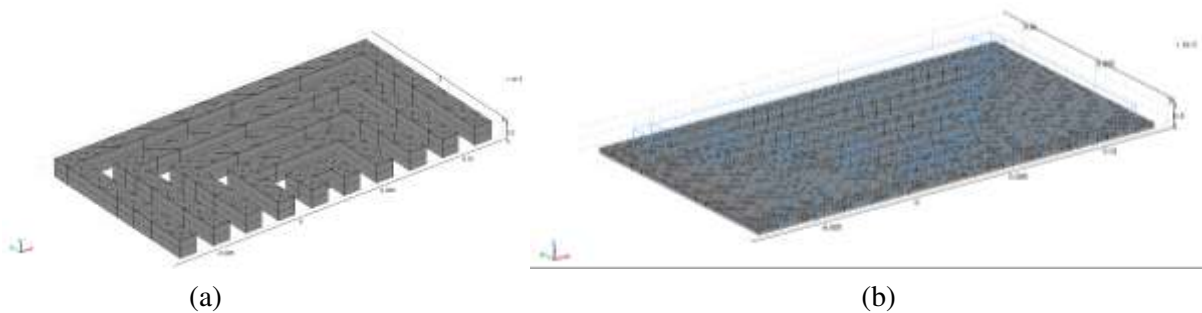
Nama	Ekspresi	Nama	Ekspresi
mu1	2e-5	wO2_0	0,1447
p0	1,013e-5	wH2O_0	1,013e-5
dp	p0*0,194e-4 (10 psig)	k	3,16e-8
R	8,31	DO2_N2	k*T0^1,75/(p0*(vO2^(1/3) + vN2^(1/3))^2)*(1/MO2 + 1/MN2)^0,5
T0	353	DO2_H2O	k*T0^1,75/(p0*(vO2^(1/3) + vH2O^(1/3))^2)*(1/MH2O + 1/MN2)^0,5
F	96487	DH2O_N2	k*T0^1,75/(p0*(vH2O^(1/3) + vN2^(1/3))^2)*(1/MH2O + 1/MN2)^0,5
rho0	P0/R/T0	DO2_N2eff	DO2_N2*por^1,5
eta	0,2	DO2_H2Oeff	DO2_H2O*por^1,5
MO2	32e-3	DH2O_N2eff	DH2O_N2*por^1,5
MH2O	18e-3	Sa	1e7
MN2	28e-3	d	1e-5
vN2	17,9e-6	n	4
vO2	16,6e-6	i0	1
vH2O	12,7e-6	t_H2O	3
por	0,5		



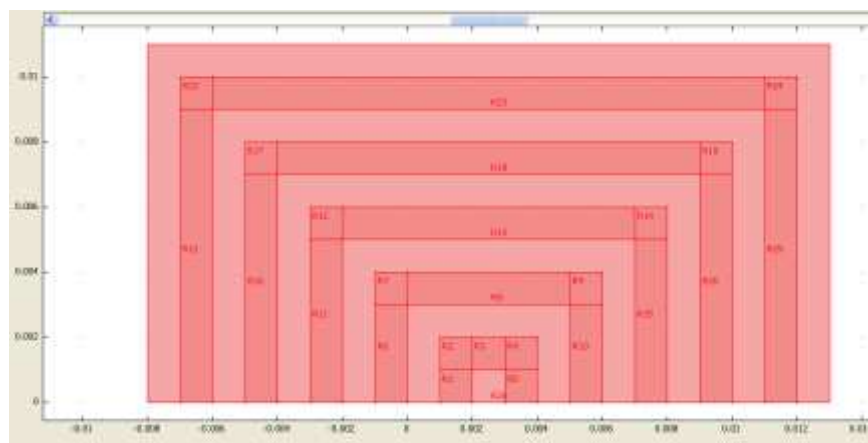
Gambar 2. Langkah Pemodelan PEMFC dengan perangkat COMSOL™

2. c. Implementasi

Model geometri terdiri dari bagian kanal katode dan lapisan difusi gas dengan dimensi penampang aliran 1 mm^2 dan ketebalan lapisan $0,2 \text{ mm}$ seperti Gambar 3. Dimensi lainnya dari kanal dan lapisan difusi gas juga diberikan dalam Gambar 4.



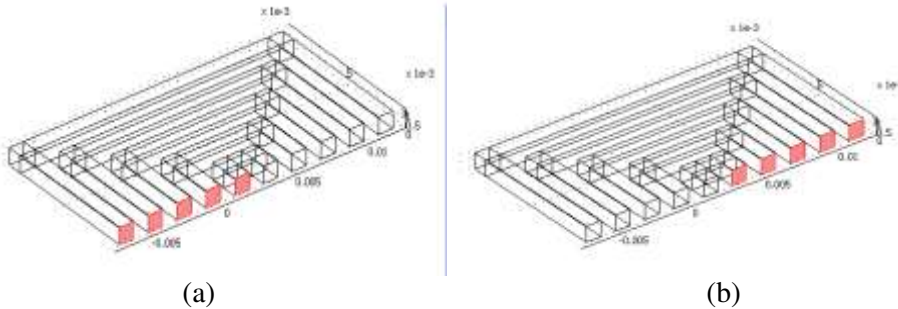
Gambar 3. Diskretisasi Katode (a) Kanal Serpentine dan (b) Lapisan Difusi Gas



Gambar 4. Dimensi Kanal dan Lapisan Difusi gas

Langkah berikutnya adalah dengan memasukkan *Physical setting* untuk masing-masing Sub Domain yaitu parameter propertis dan Domain untuk parameter kondisi batas yang terbagi atas :

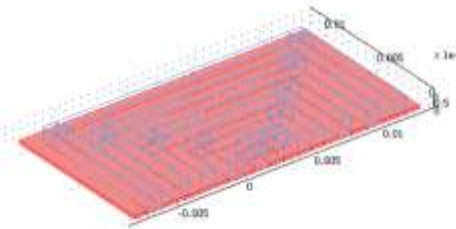
- i) **Model kanal Gas** : Inlet dan Outlet (Normal Flow/Pressure) Momentum
- Inlet (mass Fraction) dan Outlet (Convective Flux) Mass



Gambar 5. Kondisi batas (a) Momentum pada Kanal (inlet) (b) Massa pada kanal (outlet)

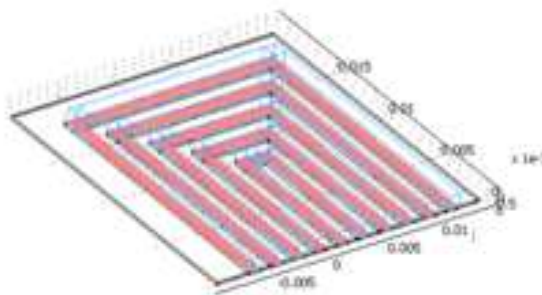
- ii) **Model Difusi katalis** :

Fluks (massa terhadap densitas arus ic)



Gambar 6. Boundary Condition Fluks Mass pada lapisan Katalis

Setelah selesai dilanjutkan dengan membuat definisi untuk identitas kondisi batas antara permukaan bawah kanal dan permukaan atas difusi pada area yang berkorespondensi seperti Gambar 7 berikut :



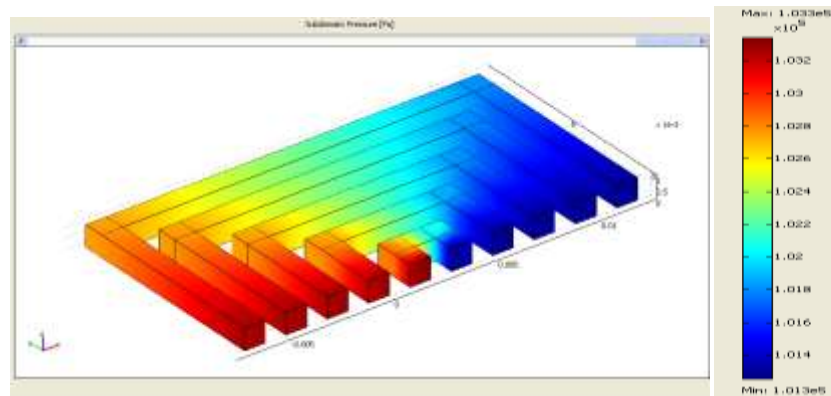
Gambar 7. Identitas Kondisi batas Lapisan Top Difusi dan Bottom Kanal

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Secara singkat hasil simulasi diberikan dalam 3 macam hasil sebagai berikut :

- i) **Karakteristik Perpindahan Momentum**

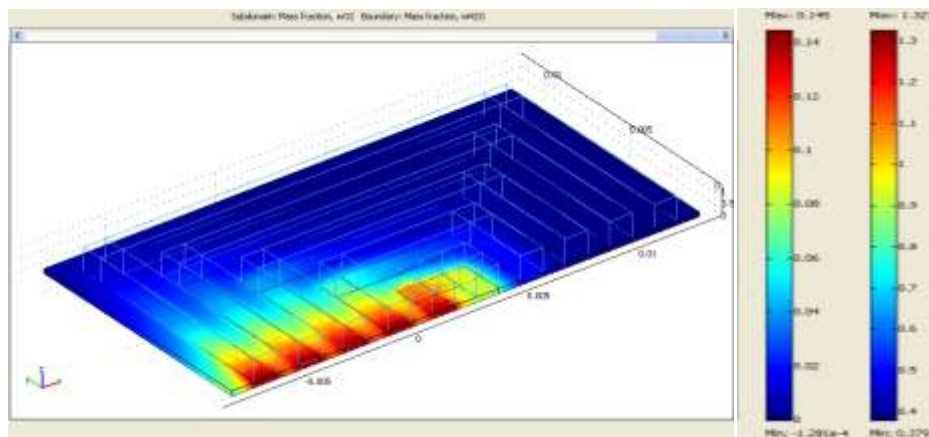
Yang dimaksud adalah karakteristik tekanan aliran pada susunan kanal serpentine pada sisi belokan yang hasilnya terdapat dalam Gambar 8. Pada bagian belokan aliran mengalami pertukaran momentum yang besar, dengan asumsi beda tekanan masuk dan keluar yang sama pada masing-masing kanal (Δp), dengan belokan U yang sempit memiliki rentang pressure drop yang pendek dibandingkan dengan kanal terluar (belokan yang lebih lebar).



Gambar 8. Distribusi tekanan pada deretan kanal Serpentine di bagian belokan (U-Turn)

ii) Karakteristik Perpindahan Massa

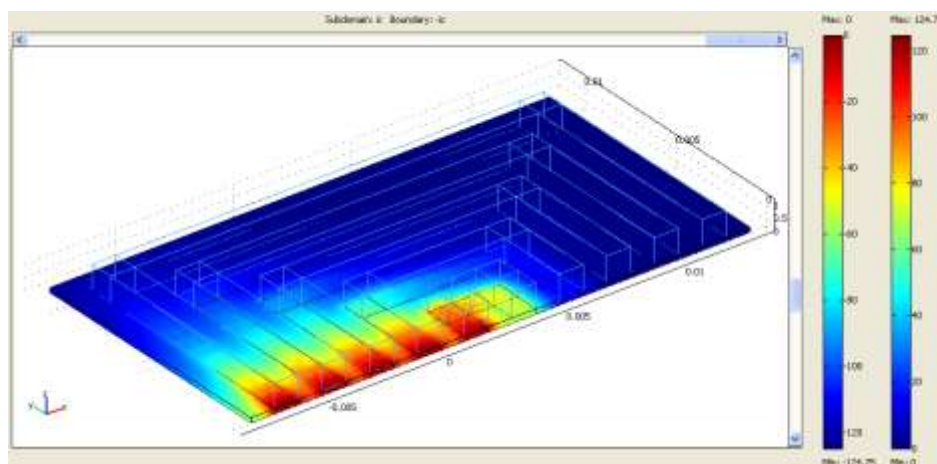
Distribusi massa pada spesies terutama yang melalui lapisan difusi gas menuju lapisan katalis sebagai tempat terjadinya reaksi elektrokimia. Konsentrasi pada segementasi kanal dari sisi masuk lebih besar daripada kanal setelah belokan yang diberikan oleh visualisasi warna di luar biru, seperti diberikan dalam Gambar 9.



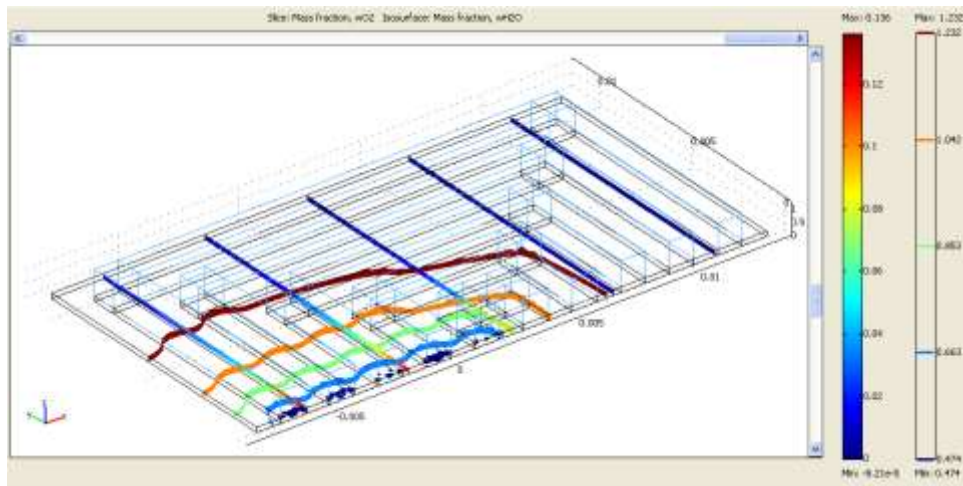
Gambar 9. Distribusi spesies O_2 dan H_2O pada lapisan permukaan difusi

iii) Karakteristik Densitas Arus

Densitas arus yang dihasilkan diberikan oleh parameter i_c yang dipengaruhi oleh kondisi konvektif fluida porous akibat gradien tekanan (Fontes, dkk. 2003) seperti ditunjukkan pada Gambar 10.



Gambar 10. Densitas Arus pada PEMFC kanal Serpentine (A/m^2)



Gambar 12. Distribusi Massa spesies O₂ dan Isosurface, dan spesies H₂O pada GDL

4. KESIMPULAN

- a. Pada kanal serpentine dengan belokan yang tajam, pressure drop terbesar diakibatkan oleh adanya hambatan akibat perubahan geometri (*U-Turn*) yang tajam (*perpendicular 90°*).
- b. Densitas arus yang terjadi bergantung pada distribusi spesies oksidan O₂ dan produk air yang terjadi. Distribusi massa dan komposisi spesies sangat mempengaruhi kinerja yang dihasilkan.
- c. Secara umum metode perhitungan melalui konservasi massa dan muatan pada lapisan antara (*interface*) kanal elektrode dengan permukaan difusi gas, memerlukan meshing yang berbeda. Hal ini disebabkan proses interpolasi perhitungan yang diperlukan untuk sumber (*source*) dan tujuan (*destination*) saat mendefinisikan indentitas kondisi batas.

DAFTAR PUSTAKA

- Anonimus, *Fuel Cell With Serpentine Flow Field*, Solved with COMSOL Multiphysics 5.1, Diunduh : 23 Mei 2015, jam : 09.09
- Anonimus, *Proton Exchange Membrane Fuel Cell*. [http://en.wikipedia.org/wiki/Proton Exchange Membrane Fuel Cell](http://en.wikipedia.org/wiki/Proton_Exchange_Membrane_Fuel_Cell). Diakses : 5 Mei 2015, jam : 14.50.
- Anonimus, *3D Model of Serpentine Proton Exchange Membrane Fuel Cell Cathode*, COMSOL Chemical Engineering Module Model Library, version 3.2.
- Arvay, A., (2011), *Proton Exchange Membrane Fuel Cell Modeling and Simulation using Ansys Fluent*, Master of Science Thesis, Arizona State University.
- Fontes, E., Byrne, P., Parhammar, O., 2003, *Mass and Momentum Transport in PEMFC Cathode*, AICHE 2nd Topical Conference on Fuel Cell Technology : conference proceedings, Spring national meeting, March 30-April 3, New Orleans, Louisiana.
- Shi, Z., Wang, X., Zhang, Z., (2006), *Comparison of Two Dimensional PEM Fuel Cell Modelling using COMSOL Multiphysics*, Proceeding of the COMSOL Users Conference, Boston.

UCAPAN TERIMA KASIH

Kegiatan pengkajian ini berlangsung atas kerjasama dengan Pusat Penelitian dan Pengembangan Energi Baru Terbarukan dan Konservasi Energi (P3EBTKE) Kementerian Energi dan Sumber Daya Mineral pada tahun 2009.