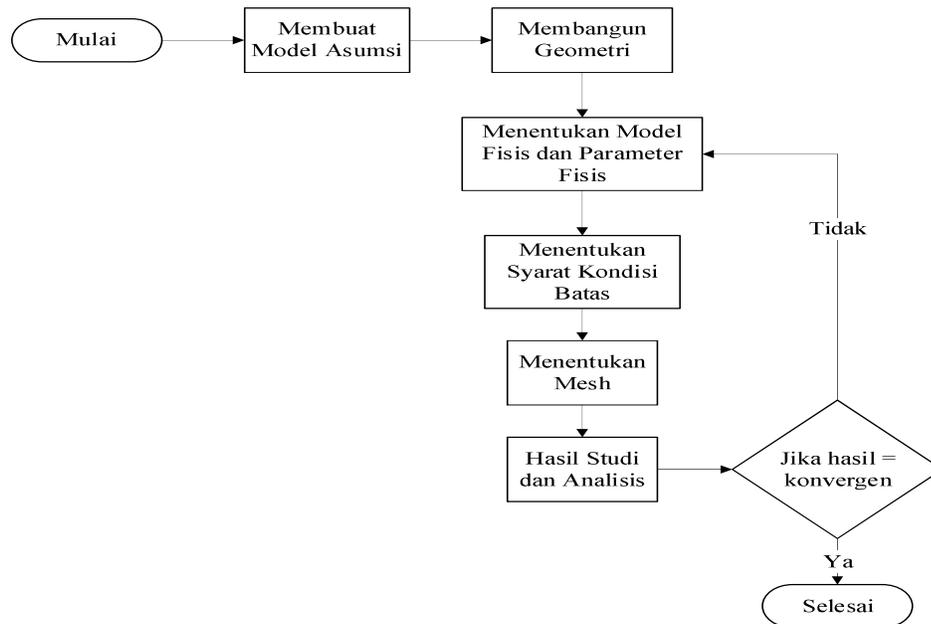


BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Gambaran Umum Penelitian

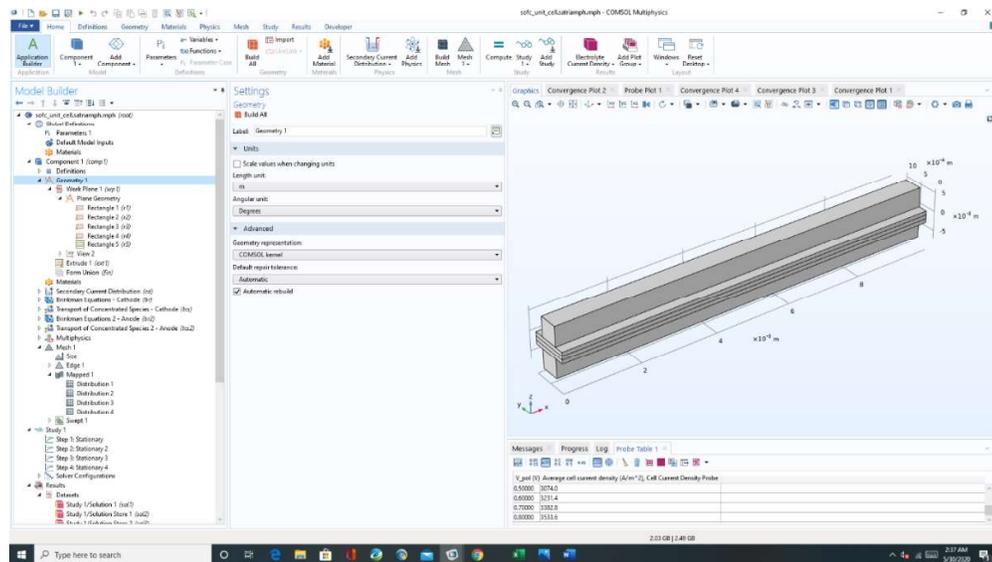
Penelitian ini merupakan pengembangan dari penelitian sebelumnya, yang telah membuktikan penemuan struktur lapisan baru pada AS-SOFC (*Anode Supported Solid Oxide Fuel Cell*). Struktur lapisan pendukung anoda dapat meningkatkan sifat elektrokimia, terutama zona aktif TPB pada anoda Ni-YSZ, sehingga kinerja AS-SOFC dapat beroperasi secara efisien. Namun, perlu adanya pengujian lebih lanjut untuk mengembangkan struktur lapisan baru yang dapat beroperasi pada skala industri. Sementara itu, penelitian pada suhu menengah menghabiskan biaya dan waktu yang lama, sehingga solusi alternatif dapat dilakukan dengan pendekatan numerik, melalui simulasi pemodelan *multiphysics*. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode elemen hingga (*Finite Element Method*) berdasarkan persamaan diferensial parsial (PDP). Pada bab ini akan dijelaskan metodologi penelitian, parameter fisika, dan model yang digunakan. Langkah-langkah studi ini digambarkan pada diagram alir yang ditunjukkan pada Gambar 3.1.



Gambar 3.1. Langkah pengerjaan.

3.2 COMSOL *Multiphysics*

COMSOL *Multiphysics* merupakan paket perangkat lunak yang digunakan untuk mempelajari fenomena fisis dari berbagai fenomena fisika, termasuk yang terjadi di dalam SOFC. COMSOL *Multiphysics* menggunakan metode elemen hingga (*Finite Element Method*) untuk menyelesaikan pemodelan yang dihasilkan dari persamaan diferensial parsial (PDP) yang memuat ekspresi matematika dari fenomena fisis. Perangkat lunak ini dapat memecahkan masalah terkait pemodelan CFD, pemanfaatan metode numerik invers, investigasi mikrostruktural, dan pemodelan termo-mekanis [48]. COMSOL *Multiphysics* mampu menyelesaikan model fisis yang terdapat pada SOFC yaitu, massa, momentum, energi, dan persamaan elektrokimia secara bersamaan secara efektif untuk pemodelan sel bahan bakar. Menganalisis perpindahan panas di dalam sel adalah tugas penting yang harus dilakukan ketika mempelajari SOFC bersuhu menengah karena menghasilkan distribusi temperatur yang juga menghitung tekanan termal [47]. Gambar 3.2 menunjukkan jendela kerja COMSOL.



Gambar 3.2. Jendela kerja perangkat lunak COMSOL *Multiphysics*.

Pada penelitian Jeon [53] yaitu mempelajari kinerja dari satu sel SOFC dengan lapisan pendukung anoda dalam 2D (dua dimensi), ia menyatakan suhu sel terbukti menjadi faktor yang paling penting ketika pemodelan SOFC. Pertimbangan lainnya juga harus di analisis dengan cermat ketika memecahkan persamaan energi

digunakan untuk mencapai kemajuan lebih lanjut dalam pemodelan SOFC [53]. Lee dkk.[54] melakukan simulasi konduktivitas dan konvektif perpindahan panas di dalam komponen pada SOFC *planar* suhu tinggi dengan menggunakan model 3D yang dikembangkan di COMSOL *Multiphysics*. Lee dkk.[54] menemukan bahwa sifat termal dan geometri interkoneksi memainkan peran utama dalam mentransfer panas yang dihasilkan dari dalam sel ke sel tetangga dan termasuk gas yang masuk. Sehingga melalui perangkat lunak ini dilakukan langkah-langkah sebelumnya untuk mendapatkan simulasi numerik yang merepresentasikan kinerja SOFC *planar* dengan lapisan pendukung anoda [54].

3.3 Model

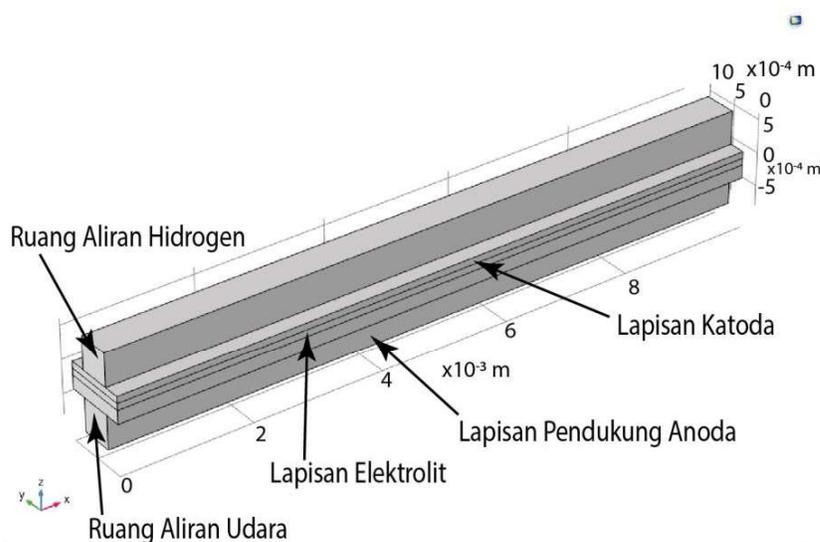
Pendekatan simulasi numerik yang digunakan pada COMSOL adalah pemilihan modul yang dapat menjelaskan fenomena fisis yang terjadi, dalam hal ini melalui modul baterai dan sel bahan bakar dengan model fisisnya yaitu distribusi arus, perpindahan konsentrasi kimia, dan aliran reaksi dalam media berpori. Integrasi pada modul ini adalah proses elektrokimia yang berlangsung terjadi karena aliran fluida yang bergantung pada temperatur, sehingga dapat dijelaskan bahwa distribusi panas pada SOFC bergantung pada proses reaksi elektrokimia. Pemodelan numerik SOFC tentu mengandung proses yang kompleks karena banyak memuat parameter fisis, sehingga diperlukan asumsi yang dapat menggambarkan model numerik SOFC. Asumsi yang dibuat adalah sebagai berikut:

1. Campuran gas yang digunakan di asumsikan dalam keadaan ideal.
2. Reaksi elektrokimia terjadi pada batas lapisan elektroda.
3. Pori dalam elektroda diasumsikan isotropik (seragam) dan makro homogen.
4. Elektrolit diasumsikan kedap terhadap perpindahan massa.
5. Pemanasan Ohmik pada interkoneksi diabaikan, dan diasumsikan konduktor ideal.
6. Tegangan SOFC sama dengan perbedaan tegangan antara anoda dan katoda.
7. Perpindahan panas yang melewati mekanisme radiasi diabaikan pada interkoneksi.
8. Lapisan GDC dan lapisan fungsional digabung dengan satu nilai konduktivitas.

Kemudian dilakukan langkah selanjutnya yaitu menentukan model yang digunakan pada simulasi numerik.

3.3.1 Model Geometri

Desain baru dari SOFC dengan lapisan pendukung anoda, biasanya terdiri dari lima lapisan utama: lapisan pendukung anoda (*Anode Supported Layer, ASL*), lapisan fungsional anoda (*Anode Functional Layer, AFL*), lapisan elektrolit, lapisan fungsional katoda (*Cathode Functional Layer, CFL*) dan lapisan kolektor arus katoda (*Current Collector Cathode Layer, CCCL*). Lapisan fungsional tipis, CFL dan AFL, dirancang untuk meningkatkan panjang TPB dengan porositas rendah dan ukuran partikel kecil. Lapisan tebal, CCCL dan ASL, memiliki porositas tinggi dan ukuran partikel besar untuk memungkinkan transportasi gas mudah ke lapisan fungsional. Sebagian besar penelitian saat ini dan pemodelan yang berkaitan dengan SOFC tradisional didesain tanpa lapisan fungsional [8]. Pada SOFC dengan lapisan fungsional, area aktif elektrokimia diperpanjang dari antarmuka elektroda/elektrolit ke lapisan fungsional dan kemudian reaksi perpindahan spesies gas hidrogen berlangsung di dalam lapisan fungsional, bukan hanya pada antarmuka antar lapisan. Pada penelitian ini model geometri yang dibangun terdiri dari 5 lapisan yang tersusun dari, ruang aliran gas hidrogen, lapisan pendukung anoda dengan lapisan GDC dan AFL, lapisan elektrolit, lapisan katoda, dan ruang aliran udara.



Gambar 3.3. Model geometri.

3.3.2 Model Parameter

Model parameter fisis didefinisikan pada jendela *Global Definition* di perangkat lunak COMSOL yang mana parameter dimasukkan secara manual atau menggunakan file (.xls) yang sudah berisi tabel parameter fisis. Masing-masing parameter fisis ditunjukkan pada Tabel 3.1 dan Tabel 3.2 yaitu, parameter umum dan dimensi sel. Area permukaan spesifik (*specific surface area*) yang digunakan pada model ini adalah area permukaan per volume, yaitu $S = \frac{A}{V}$ [37].

Tabel 3.1. Parameter umum SOFC.

Parameter	Nilai
Tekanan ruang	1 atm
Temperatur	600°, 700°, 800° C
<i>Specific surface area</i> , anoda	1×10^{-9} 1/m [21]
<i>Specific surface area</i> , katoda	1×10^{-9} 1/m [21]
Viskositas udara	3×10^{-5} Pa.s [9]
Porositas	0,4 [8]
Permeabilitas elektroda	1×10^{-10} m ² [18]
Pertukaran densitas arus, anoda	0,1 A/m ²
Pertukaran densitas arus, katoda	0,01 A/m ²
Konduktivitas elektrolit	5 S/m [8]
Konduktivitas elektroda	1000 S/m [8]
Referensi difusi	$3,16 \times 10^{-8}$ [21]

Tabel 3.2. Dimensi model geometri.

Komponen	Lebar (m)	Tinggi (m)
Ruang Aliran Hidrogen	5×10^{-4}	5×10^{-4}
Anoda	10×10^{-4}	$0,2 \times 10^{-3}$
Elektrolit	10×10^{-4}	$0,15 \times 10^{-3}$
Katoda	10×10^{-4}	$0,17 \times 10^{-3}$
Ruang Aliran Udara	5×10^{-4}	5×10^{-4}

3.3.3 Model Fisika

1. Reaksi Elektrokimia Atau Distribusi Arus

Proses transfer muatan yang terjadi pada SOFC terdiri dari transfer muatan elektronik dan muatan ionik. Muatan elektron dan ion oksigen yang masuk melalui lapisan anoda merupakan proses konduksi. Sedangkan pada lapisan

pendukung anoda proses konduksi terjadi karena distribusi elektron. Kemudian dengan katoda yang lebih tipis, kedua elektron dan ion oksigen dapat menyebabkan proses konduksi yang lebih baik. Pada lapisan elektrolit distribusi muatan hanya terjadi pada ion oksigen, karena lapisan elektrolit tidak menghantarkan partikel konduksi dengan baik. Konservasi muatan elektronik dan ionik dapat di ekspresikan pada persamaan berikut (3.1) dan (3.2).

$$\nabla \cdot i_{el} = Q_s \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot i_{io} = Q_s \quad (3.2)$$

i_{el} dan i_{io} merupakan densitas lokal elektronik dan ionik. Berdasarkan hukum Ohm densitas arus dapat dirumuskan dalam persamaan (3.3) dan (3.4).

$$i_{el} = -\sigma_{el}^{eff} \nabla \phi_{el} \quad (3.3)$$

$$i_{io} = -\sigma_{io}^{eff} \nabla \phi_{io} \quad (3.4)$$

ϕ_{el} dan ϕ_{io} merupakan potensial listrik dari fase elektronik dan ionik. σ_{el}^{eff} dan σ_{io}^{eff} merupakan konduktivitas efektif dari muatan elektronik dan ionik, yang mana bergantung pada karakteristik pori mikro struktur elektroda yaitu:

$$\sigma_{el}^{eff} = \phi_{el} \left(\frac{1 - \varepsilon}{\tau} \right) \sigma_{el} \quad (3.5)$$

$$\sigma_{io}^{eff} = (1 - \phi_{el}) \left(\frac{1 - \varepsilon}{\tau} \right) \sigma_{io} \quad (3.6)$$

ϕ_{el} merupakan fraksi volume dari konduktivitas elektronik σ_{el} dan σ_{io} merupakan konduktivitas elektronik dan ionik. ε adalah porositas dan τ adalah difusi dalam pori (*tortuosity*), terdapat standar korelasi yang berhubungan antara turtuositas dan porositas dinyatakan pada Millington-Quirk : $\tau = \varepsilon^{1/3}$. Pada lapisan fungsional anoda, sumber distribusi arus dapat dinyatakan dengan persamaan (3.7) dan pada katoda ditunjukkan persamaan (3.8).

$$Q_{el} = -Q_{io} = -i_a \quad (3.7)$$

$$Q_{el} = -Q_{io} = -i_c \quad (3.8)$$

Kemudian batas bawah dari anoda yang digunakan adalah *electric ground*. Lalu batas atas dari katoda dinyatakan dalam tegangan keluaran ϕ_{el} . Kondisi batas

pada transfer muatan elektronik dan ionik diatur dalam kondisi isolasi termal dengan V_{cell} merupakan tegangan polarisasi, sehingga $\varphi_{el} = V_{cell}$.

Pada proses reaksi elektrokimia dapat dimodulkan dengan distribusi arus, yang dapat dinyatakan pada persamaan Butler Volmer. Masing-masing i_a dan i_c merupakan densitas volumetrik arus yang terjadi karena reaksi oksidasi H₂ dan reduksi O₂, yaitu

$$i_{0a} = i_{0,h_2} \left(\frac{c_{h_2}}{c_{h_2\,ref}} \exp \frac{0.5F\eta_{act}}{RT} \right) - \left(\frac{c_{h_2o}}{c_{h_2o\,ref}} \exp \frac{-1.5F\eta_{act}}{RT} \right) \quad (3.9)$$

$$i_{0c} = i_{0,o_2} \left(\frac{c_{o_2}}{c_{o_2\,ref}} \exp \frac{3.5F\eta_{act}}{RT} \right) - \left(\frac{c_t}{c_{o_2\,ref}} \exp \frac{0.5F\eta_{act}}{RT} \right) \quad (3.10)$$

i_{0,h_2} dan i_{0,o_2} merupakan kuantitas referensi pertukaran densitas untuk H₂ dan O₂ pada konsentrasi referensi $c_{h_2\,ref}$ dan $c_{o_2\,ref}$. c_{h_2} merupakan konsentrasi molar pada hidrogen, c_{h_2o} adalah konsentrasi molar air, c_t adalah total konsentrasi spesies. Kemudian F adalah konstanta faraday, R adalah konstanta gas ideal, T adalah temperatur dan η merupakan *overvoltage* atau *overpotential* yang dapat ditunjukkan pada persamaan (3.11) pada anoda dan (3.12) pada katoda.

$$\eta_{act,a} = (\varphi_{el} - \varphi_{io}) - E_{eq,a} \quad (3.11)$$

$$\eta_{act,c} = E_{eq,c} - (\varphi_{el} - \varphi_{io}) \quad (3.12)$$

E_{eq} , merupakan perbedaan potensial kesetimbangan anoda dan katoda, kemudian dapat dirumuskan pada persamaan (3.13) dan (3.14).

$$E_{eq,a} = \frac{R_g T}{2F} \ln \frac{p_{H_2O}}{p_{H_2}} \quad (3.13)$$

$$E_{eq,c} = E_0 + \frac{R_g T}{2F} \ln \frac{p_{O_2}}{p_{atm}} \quad (3.14)$$

2. Perpindahan Konsentrasi Kimia

Perangkat SOFC dapat beroperasi dengan menggunakan berbagai jenis bahan bakar bioenergi, yang mana pada model ini menjelaskan proses kimia yang

terjadi pada hidrogen dan oksigen. Pada anoda, hidrogen digunakan untuk menyuplai bahan bakar, yang terdiri dari dua molekul, hidrogen dan uap air. Sedangkan pada katoda, udara luar digunakan untuk menyuplai oksigen. Udara yang masuk terdiri dari tiga molekul yaitu, oksigen, uap air, dan nitrogen. Proses perpindahan dan reaksi molekul tersebut dapat dideskripsikan pada persamaan difusi Maxwell-Stefan, pada setiap elektroda. Kondisi batas pada dinding saluran gas dan GDE (*Gass Diffusion Electron*) adalah kondisi yang terisolasi. Pada saluran masuk (*inlet*), komposisi dapat ditentukan, yang kemudian pada saluran keluar (*outlet*) kondisi yang terjadi adalah fluks konvektif. Melalui Asumsi ini menunjukkan bahwa panas yang menyebar secara konvektif atau perpindahan yang tegak lurus terhadap kondisi batas masuk dan keluar. Kesenambungan dalam komposisi dan fluks berlaku untuk semua keseimbangan massa pada antarmuka antara GDE dan saluran. Terdapat dua komponen yang berlangsung di anoda, yaitu H_2 dan H_2O dan pada katoda, yaitu O_2 dan H_2O . Untuk merepresentasikan peristiwa fisis yang terjadi maka pendekatan dilakukan dengan rumus difusi Maxwell-Stefan pada proses transpor konsentrat.

Proses perpindahan massa dari setiap spesimen dalam sebuah proses reaksi yang terdiri dari percampuran gas, yaitu jumlah spesimen $i = 1, \dots, Q$ dan jumlah reaksi $j = 1 \dots N$, maka dapat digunakan persamaan berikut

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w_i) + \nabla \cdot (\rho w_i \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + R_i \quad (3.15)$$

ρ adalah densitas campuran gas, w_i adalah fraksi massa, \mathbf{j} adalah fluks relatif pada massa kecepatan rata-rata, dan R merupakan kecepatan gas. Kemudian dapat digunakan persamaan konservasi massa untuk merepresentasikan proses reaksi

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.16)$$

dengan asumsi

$$\sum_{i=1}^Q w_i = 1 \quad (3.17)$$

$$\sum_{i=1}^Q j_i = 1 \quad (3.18)$$

$$\sum_{i=1}^Q R_i = 1 \quad (3.19)$$

sehingga persamaan (3.16) menjadi

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (w_i) + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u})w_i = -\nabla \cdot \mathbf{j}_i + R_i \quad (3.20)$$

dari persamaan (3.20) didapat fraksi massa masing-masing spesimen yaitu

$$w_Q = 1 - \sum_{i=1}^{Q-1} w_i \quad (3.21)$$

sehingga didapat persamaan umum Maxwell-Stefan yang ditunjukkan pada persamaan (3.22) di bawah ini.

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (w_i) + \rho(\nabla \cdot \mathbf{u})w_i = \nabla \cdot \left(\rho \omega_i \sum_k D_{ik} d_k + D_i^T \frac{\nabla T}{T} \right) + R_i \quad (3.22)$$

D_i^T adalah koefisien difusi termal, d_k adalah difusi pada spesimen k, dan D_{ik} merupakan knudsen difusi. d_k dapat ditunjukkan pada persamaan (3.23) dan x_k merupakan fraksi mol yang ditunjukkan pada persamaan (3.24).

$$d_k = \nabla x_k + \frac{1}{p_A} [x_k - \omega_k] \nabla p_A \quad (3.23)$$

$$x_k = \frac{\omega_k}{M_k} M_n, M_n = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (3.24)$$

Pada elektroda sumber atau kecepatan reaksi masing-masing adalah

$$R_{H_2} = -\frac{i_a M_{H_2}}{2F} \quad (3.25)$$

$$R_{H_2O} = \frac{i_a M_{H_2O}}{2F} \quad (3.26)$$

$$R_{O_2} = \frac{i_c M_{O_2}}{4F} \quad (3.27)$$

i_a dan i_c merupakan densitas arus, sedangkan M adalah massa molar masing-masing unsur H_2 , H_2O dan O_2 .

3. Aliran Fluida

Persamaan Brinkman digunakan untuk mendeskripsikan aliran fluida selama SOFC sedang beroperasi. Kuantitas utama yang terlibat dalam proses ini adalah kecepatan dan tekanan. Kemudian melalui persamaan Navier-Stokes dapat dideskripsikan aliran fluida yang *incompressible*. Kombinasi persamaan tersebut sangat baik dalam menjelaskan aliran fluida pada lapisan berpori, seperti pada elektroda. Persamaan kontinuitas dinyatakan pada persamaan (3.28).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.28)$$

Kemudian persamaan Navier-Stokes ditunjukkan pada persamaan (3.29).

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \rho \cdot \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u} = -\nabla p \mathbf{l} + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{l} \right) + \mathbf{F} \quad (3.29)$$

$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \rho \cdot \mathbf{u} \nabla \cdot \mathbf{u}$ adalah gaya inisial, $\nabla p \mathbf{l}$ merupakan tekanan, $\nabla \cdot \left(\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{l} \right)$ adalah viskositas, dan \mathbf{F} merupakan gaya luar. Sementara itu untuk tekanan bebas, $\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Untuk merepresentasikan aliran fluida dalam pori, dapat dinyatakan oleh persamaan Brinkman berikut

$$\frac{\rho}{\varepsilon} ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \frac{\mathbf{u}}{\varepsilon_p}) = \nabla \cdot \left[-p \mathbf{l} + \frac{\mu}{\varepsilon} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2\mu}{3\varepsilon} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{l} \right] - \left(\mu \kappa^{-1} + \beta_F |\mathbf{u}| + \frac{Q_{br}}{\varepsilon^2} \right) \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (3.30)$$

ε adalah porositas pada material, Q_{br} adalah opsional sumber untuk adanya kemungkinan adanya deposit massa, biasanya $\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = Q_{br}$. Sedangkan κ merupakan permeabilitas yang dinyatakan oleh parameter umum dari persamaan Konzeny – Charman yang ditunjukkan pada persamaan (3.31) [55], di mana d_p merupakan diameter pori.

$$\kappa = \frac{\varepsilon d_p^2}{72\tau(1 - \varepsilon)^2} \quad (3.31)$$

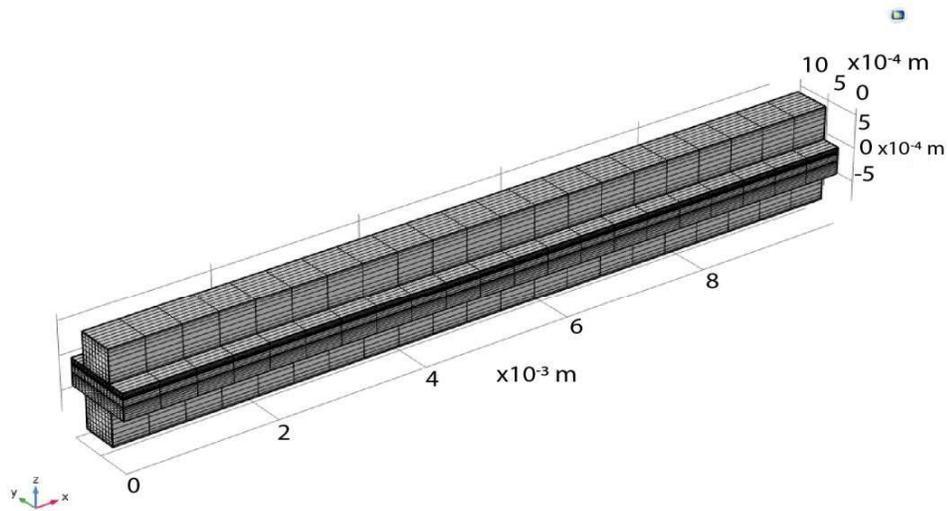
Permeabilitas merupakan sifat atau kemampuan medium berpori untuk meloloskan fluida. Satuannya adalah darcy yang mana $1 \text{ darcy} = 0,987 \mu m^2 = 0,987 \times 10^{-6} m^2$.

3.4 Perhitungan Numerik

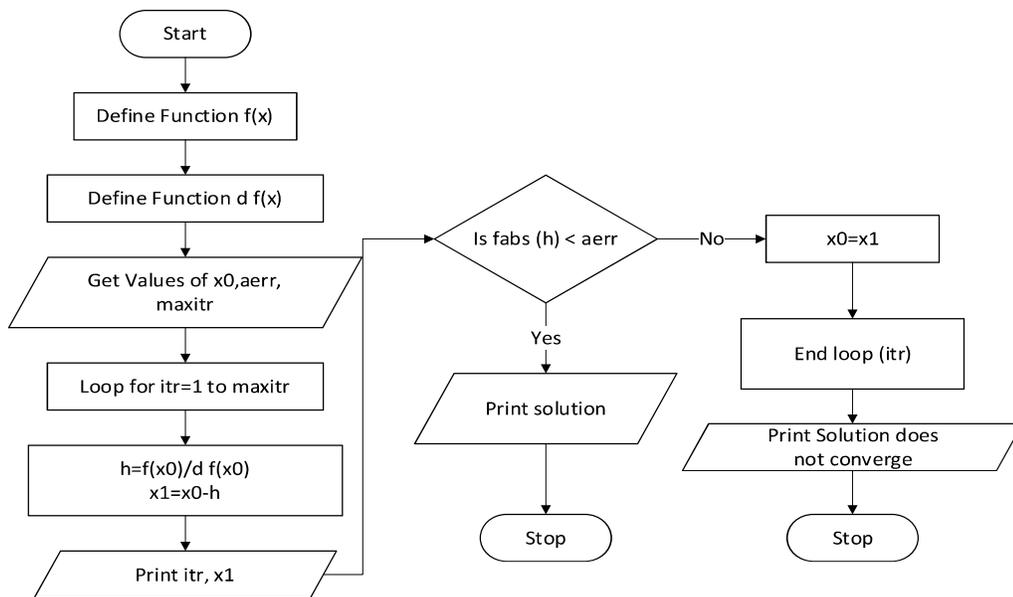
Semua persamaan diferensial parsial (PDP) akan diselesaikan secara numerik, sehingga menghasilkan model simulasi yang berdasarkan masukan model parameter. Distribusi *mesh* pada simulasi ini ditunjukkan pada Gambar 3.4 yang mana geometri dibagi menjadi 21 segmen dan setiap segmen terdiri 8 elemen. Ukuran elemen yang digunakan ditunjukkan pada Tabel 3.3. Kemudian komputasi dilakukan dengan menggunakan iterasi Newton-Raphson melalui *solver stasionary linear* yaitu PARDISO yang ditunjukkan pada Gambar 3.5. Simulasi diimplementasikan dalam perangkat lunak COMSOL *Multiphysics* 5.5.

Tabel 3.3. Ukuran elemen pada modul.

Domain	Ukuran Elemen (mm)
Ruang Aliran	$0,1 \times 10^{-3}$
Elektroda	$0,151 \times 10^{-4}$
Elektrolit	$0,05 \times 10^{-3}$



Gambar 3.4. Mesh geometri.



Gambar 3.5. Diagram alir Newton Raphson.