



اثر تخلخل لایه پخش گاز و فشار بر عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری با میدان جریان لانه زنبوری

سید علی اطمیابی^۱ و ابراهیم افشاری^{۲*}

^۱ کارشناسی ارشد مکانیک-تبدیل انرژی، مجتمع مکانیک و هوافضا، دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین‌شهر

^۲ استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان

تاریخ دریافت: ۱۳۹۲/۴/۱۹؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۲/۵/۱۷؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۲/۷/۲۸

چکیده

در این مقاله، یک مدل عددی که درک کاملی از اصول اساسی پدیده‌های انتقال در پیل سوختی غشاء پلیمری با میدان جریان لانه‌زنبوری فراهم می‌کند، معرفی شده است. مسئله به‌صورت مدل سه بعدی و حالت پایا در سیستم مختصات کارتزین با استفاده از روش تک دامنه‌ای و روش حجم محدود حل شده است. مدل شامل معادلات دیفرانسیل پاره‌ای همبسته شده غیرخطی بقاء جرم، بقاء ممنتوم، بقاء اجزا، بار الکتریکی و انرژی همراه با واکنش‌های الکتروشیمیایی است که برای الکترودهای پخش گاز در دو سمت آند و کاتد، لایه‌های کاتالیست آند و کاتد و ناحیه غشاء معتبر می‌باشد. این مدل دو منظوره مسئله پیل سوختی غشاء پلیمری با میدان جریان لانه‌زنبوری و پایا، نتایجی هم چون توزیع کسر گونه‌های جرمی، پتانسیل در نواحی مختلف و منحنی عملکرد پیل سوختی را در بر دارد.

کلمات کلیدی: پیل سوختی غشاء پلیمری؛ تخلخل؛ فشار؛ میدان جریان لانه‌زنبوری، دینامیک سیالات محاسباتی.

Effect of GDL porosity and pressure on the PEM fuel cell performance with honeycomb flow-field

S.A. Atyabi¹ and E. Afshari^{2,*}

¹ Ph.D. Student, Mech. Eng., Dept of Mech. & Aerospace Eng, Malek - Ashtar University of Tech, Sahinshar, Isfahan, Iran

² Assist. Prof., Mech. Eng., University of Isfahan, Isfahan, Iran

Abstract

This paper presents a numerical modeling, provides an improved understanding of the fundamental transport phenomena inside the proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) with honeycomb flow-field. The problem is stated in a steady-state, three-dimensional model and Cartesian coordinates system by using a single domain and a control volume method. The model consists of non-linear, coupled partial differential equations representing the conservation of mass, momentum, species, charges and energy with electrochemical reactions that are valid for gas diffusion electrodes, catalyst layers and membrane region. The modeling of bidirectional, isothermal and steady problem of PEMFC with honeycomb flow-field provides results concerning the species fraction and potential distribution in different domain.

Keywords: PEM fuel cell; Porosity; Pressure; Honeycomb flow-field; CFD.

۱- مقدمه

پیل‌های سوختی غشا پلیمری دستگاه‌هایی الکتروشیمیایی هستند که مستقیماً انرژی شیمیایی حاصل از واکنش سوخت و اکسیدکننده (معمولاً هیدروژن و اکسیژن) را به الکتریسیته و گرما تبدیل می‌کنند. پیل سوختی غشا پلیمری یک منبع انرژی امیدوارکننده، به‌ویژه برای استفاده در وسایل قابل‌حمل به دلیل بهره‌وری انرژی بالا، دمای عملیاتی کم (معمولاً ۸۰ درجه سلسیوس)، بازده بالا و سر و صدای کم، می‌باشد.

شکل و هندسه میدان جریان در پیل سوختی غشا پلیمری یک پارامترهای مهم طراحی پیل جهت توزیع واکنشگرها و خروج آب تولیدی از داخل پیل است. طراحی میدان جریان یک موازنه‌ی پیچیده بین قیده‌های وابسته به هم بسیاری است که اغلب آنها نقش معکوسی روی عملکرد پیل سوختی خواهند داشت. طراحی میدان جریان لانه‌زنبوری شامل کانال‌های قطری می‌باشد. کانال‌های قطری مسیریابی دارای روزه برای بهینه‌سازی افت فشار در کانال‌های جریان سوخت برای توزیع سوخت و واکنش‌دهنده‌ها در تمام جهات یک میدان جریان بین راهگاه ورودی و خروجی را فراهم می‌کنند و باعث بهبود توزیع جریان و محصولات تولیدی می‌شود. در طرح میدان جریان کانال‌های قطری، گذرگاهی برای توزیع واکنش‌دهنده‌ها و اکسیدکننده‌ها و محصولات جانبی در تمام جهات همراه با روزه‌هایی برای بهینه‌سازی افت فشار در کانال‌های جریان سیال و بین راهگاه‌های ورودی و خروجی را فراهم می‌کنند. به‌منظور درک پدیده‌های مختلف و پیچیده‌ای که در پیل سوختی غشا پلیمری اتفاق می‌افتد، دینامیک سیالات محاسباتی ابزاری مهم بوده که کمک کننده توسعه تکنولوژی‌های جدید و پیشرفته پیل سوختی است؛ زیرا طراحی و بهینه‌سازی پیل که روش رسیدن به این تکنولوژی برتر است به خوبی به کمک این تکنیک قابل دست‌یابی است. حل عددی می‌تواند توزیع مکانی پارامترهای اصلی پیل از قبیل میدان سرعت، دما، فشار، غلظت اجزا، جریان الکتریکی، تشکیل و انتقال آب، دانسیته جریان و غیره را با میدان‌های مختلف جریان و از جمله میدان لانه‌زنبوری ارائه دهد.

در سال‌های اخیر با ارائه مدل‌های زیادی از پیل سوختی غشا پلیمری، روش‌های مختلفی برای پیش‌بینی رفتار الکتروشیمیایی پیل سوختی غشا پلیمری با میدان‌های

جریان مختلف پیشنهاد داده‌اند و در هر کدام به بررسی پدیده‌ای خاص در پیل پرداخته‌اند. برناردی و وبرنگ^۱ [۱] مطالعاتی پایه‌ای برای درک رفتار پیل سوختی غشا پلیمری انجام داده‌اند. فالین^۲ و همکاران [۲] یک مدل دو فاز در لایه پخش گاز کاتد یک پیل سوختی غشا پلیمری با تخلخل متغیر در لایه پخش گاز را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان می‌دهد که تخلخل متغیر باعث بهبود نرخ برداشت آب و انتقال اکسیژن از لایه پخش گاز کاتد می‌شود. وانگ^۳ و همکاران [۳] مشاهده کردند که تخلخل لایه پخش گاز کاتد تأثیر زیادی بر عملکرد پیل دارد؛ اما تخلخل لایه پخش گاز آند تأثیری ناچیز و قابل چشم‌پوشی دارد. بهینه‌سازی پارامترهای لایه پخش گاز کاتد و آند نقش بیشتری در بهبود عملکرد پیل نسبت به خود لایه پخش گاز کاتد و آند دارد.

ایمدات^۴ و همکاران [۴] یک تک کانال تغییر شکل یافته را در یک مدل سه بعدی دینامیک سیالات محاسباتی به کار برده و آن را برای شبیه‌سازی پیل سوختی غشا پلیمری توسعه دادند. در کار آنها، تخلخل و ضخامت لایه پخش گاز با فشردگی ناشی از فشار مونتاژ کاهش یافته است. ضرایب پخش و نفوذپذیری بستگی به تخلخل لایه پخش گاز دارد که در اثر فشار مونتاژ کاهش می‌یابد. ژانگ^۵ و همکاران [۵] اثرات دمای عملکرد، فشار، رطوبت و نرخ استوکیومتری گاز ورودی را بر روی عملکرد پیل سوختی در شرایط پایا و گذرا مطالعه کردند. آنها نتیجه گرفتند که با افزایش فشار عملکرد، به وضوح عملکرد پیل بهبود می‌یابد. مدل نظری دیگری که شامل انتقال گرما، بار الکتریکی، آب مایع و برخی پدیده‌های گذرا در یک تک سل می‌باشد، توسط بولوین^۶ و همکاران [۶] توسعه داده شد. یک مدل دو بعدی دینامیک سیالات محاسباتی نیز توسط شاهرودی و همکاران [۷] توسعه داده شد، که نشان‌دهنده دو اثر اضافه و لتاز غلظتی یعنی اثر ضعیف پخش در سطح و اثر تخلخل کمتر در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست است. این مدل نشان می‌دهد که مقدار بهینه برای ضخامت لایه کاتالیست ۰/۱ میلی‌متر می‌باشد.

¹ Bernardi & Vebrunge

² Falin

³ Wang

⁴ Imdat

⁵ Zhuqian

⁶ Bolwin

که به طور همزمان انتقال گونه‌های جرمی، سینتیک الکتروشیمیایی و توزیع جریان الکتریکی به خوبی در دینامیک سیال به کار گرفته شده است. مدل ارائه شده توسط سوزوکی^۶ و همکاران [۱۴] اثرات تخلخل، اندازه منافذ و محتوای پلاتین کاتالیست بر خصوصیات منحنی قطبش پیل سوختی غشاء پلیمری را بررسی کرده است.

برای درک صحیح دینامیک سیال، فرایندهای الکتروشیمیایی پیل سوختی، یک حل عددی کامل از معادلات ناویر - استوکس، گونه‌های جرمی، انرژی و بقا بار الکتریکی بدون محاسبه اثر جریان دو فاز ارائه شده است. میدان جریان در صفحات قطبی به صورت لانه‌زنبوری بوده و این معادلات کامل با استفاده از روش حجم محدود در این میدان و در ناحیه اسمبل الکتروود - غشا حل شده است. در این تحلیل ترکیب دو پارامتر: فشار ورودی و تخلخل لایه پخش گاز مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- اصول تئوری

۲-۱- توصیف پیل سوختی غشاء پلیمری

شکل ۱ شماتیکی از یک تک سل پیل غشا پلیمری با میدان جریان لانه‌زنبوری و اجزای مرتبط به آن را نشان می‌دهد. پیل شامل کانال جریان آند، لایه پخش گاز آند، لایه کاتالیست آند، غشا، لایه کاتالیست کاتد، لایه پخش گاز کاتد و کانال جریان کاتد می‌باشد. برای توصیف پدیده‌های فیزیکی در تک سل با کانال مستقیم یک آنالیز دو بعدی کافی به نظر می‌رسد [۱۵]؛ ولی برای بررسی میدان جریان لانه‌زنبوری آنالیز سه بعدی بر روی میدان جریان صورت گرفته است.

مدل‌های سه بعدی برای بررسی اثر هندسه، خصوصاً با میدان‌های جریان پینی کاربرد ویژه‌ای دارند. در این مطالعه از آرایش لانه‌زنبوری و پین‌های شش گوش استفاده شده است. تمامی معادلات حاکم به طور همزمان در کل ۷ ناحیه با در نظر گرفتن یک مدل تک ناحیه‌ای و به روش حجم کنترل محدود حل شده است. مزیت مدل تک ناحیه‌ای عدم نیاز به مشخص کردن شرایط مرزی در فصل مشترک بین نواحی مختلف پیل می‌باشد و شرایط مرزی فقط در مرزهای

اوبایوو و همکاران^۱ [۸] به بررسی عددی میدان جریان و توزیع گازهای واکنش‌گر در یک کانال پیل سوختی غشاء پلیمری با قرار دادن یک سری پین به صورت متقاطع در کانال جریان که در جهت بهبود توزیع گازهای واکنش‌دهنده به کار می‌رود، پرداختند. اصطکاک کانال و افت فشار به وضوح با افزایش تخلخل لایه پخش گاز کاهش یافته است. یک مدل سه بعدی الکتروشیمیایی ریاضی توسط ژاکیان^۲ و همکاران [۹] توسعه داده شد و جرم سیال و پروسه‌های انتقال حرارت به خوبی در واکنش شیمیایی در نظر گرفته شد. در این کار، تاثیر پارامترهای تخلخل، نفوذپذیری و ضخامت لایه پخش گاز و همچنین استوکیومتری جریان گاز روی عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری شناخته شده و مقادیر نفوذپذیری، تخلخل و ضخامت لایه کاتالیست آند و کاتد و همچنین نرخ استوکیومتری بهینه به دست آمده است. تخلخل بیشتر لایه پخش گاز منجر به ایجاد فضای بیشتر برای پخش و همچنین مقاومت تماسی بیشتر برای لایه پخش گاز خواهد شد. راموس و دیسر^۳ [۱۰] با تشریح ترکیب انتقال گرما و جرم و همبسته شدن انتقال بار الکتریکی و جرم در الکتروودها و با در نظر گرفتن الکتروودها به عنوان ناحیه متخلخل، مدلی سه بعدی ارائه دادند. نتایج آنها نشان می‌دهد که گرادیان‌های دما در مجموعه الکتروود - غشاء در چگالی‌های جریان الکتریکی بالا می‌تواند منجر به تنش‌های حرارتی شود. دمای گاز تغذیه‌کننده تحت تاثیر دمای پیل است و اهمیت زیادی دارد. بلخیری^۴ و همکاران [۱۱] یک مدل دو بعدی و دائم پیل سوختی غشا پلیمری را توسعه دادند. شبیه‌سازی این مدل نشان می‌دهد که غلظت واکنشگرها وابسته به چگالی جریان الکتریکی و عملکرد پیل، با افزایش اختلاف فشار می‌تواند بالا رود و بهبود بخشیده شود. فولر و نیومن^۵ [۱۲] نشان دادند که توزیع دما در قسمت‌های مختلف پیل بستگی به موازنه جرم دارد. آنها تاکید کردند که کنترل هیدراتاسیون غشا و دمای عملیاتی پیل سوختی غشاء پلیمری مناسب می‌باشد. علیمی و همکاران [۱۳] یک مدل پایای دو بعدی ارائه کردند

¹ Obayopo

² Zhuqian

³ Ramousse & Deseure

⁴ Belkhiri

⁵ Fuller & Newman

⁶ Suzuki

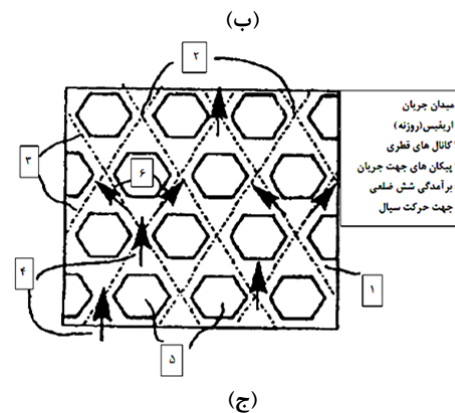
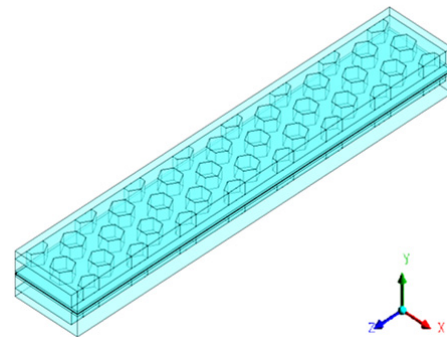
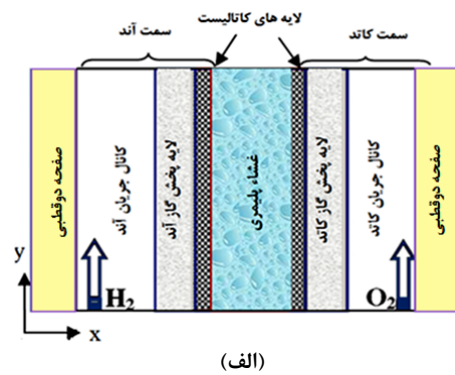
۲-۲- فرضیات مدل

- در توسعه مدل فرضیات پیش رو در نظر گرفته می‌شود.
- مخلوط گاز، گاز کامل در نظر گرفته می‌شود.
- جریان در همه جا آرام در نظر گرفته می‌شود.
- مخلوط جریان‌های گاز، تراکم پذیر در نظر گرفته می‌شود.
- مدل پایا در نظر گرفته می‌شود.
- الکترودها، لایه‌های کاتالیست و غشا ایزوتروپ و همگن در نظر گرفته می‌شود.
- پیل آدیباتیک در نظر گرفته می‌شود.

۳- پیش‌زمینه تئوری

برای مدل‌سازی عددی پیل سوختی می‌توان از روش تک ناحیه‌ای و یا روش چند ناحیه‌ای استفاده کرد. در مدل چند ناحیه‌ای، دامنه محاسباتی به چند زیر دامنه تقسیم می‌شود و در هر زیر دامنه مجموعه‌ای از معادلات بقا، شامل معادلات پیوستگی، ممنتم، بقا اجزاء، پتانسیل و انرژی حل می‌شود. برای حل این معادلات و ارتباط آنها با یکدیگر، به شرایط مرزی بین نواحی مختلف پیل نیاز می‌باشد. اما بسیاری از این شرایط مرزی به طور واضح مشخص نیستند و از این رو پاسخ‌های به‌دست آمده از حل معادلات نیز دقیق نمی‌باشد. همچنین، چون در هر ناحیه یک سری معادله مربوط به همان ناحیه نوشته می‌شود و این معادلات با شرایط مرزی به یکدیگر مربوط می‌شوند مسئله بسیار پیچیده می‌شود. در روش تک ناحیه‌ای، فقط یک سری معادلات بقا در تمام نواحی پیل سوختی به‌کار می‌رود. در این روش نیازی به مشخص کردن شرایط مرزی در فصل مشترک بین نواحی نمی‌باشد و شرایط مرزی فقط در سطح بیرونی پیل مورد نیاز است. با به‌کار بردن روش تک ناحیه‌ای ممکن است یک معادله در ناحیه‌ای خاص از پیل برقرار نباشد، ولی برای اجتناب از اعمال معادلات متفاوت در هر ناحیه، می‌توان در روش عددی با اعمال ترم چشمه بزرگ و تعیین خواص فیزیکی مربوط به آن ناحیه، تمام معادلات را به طور یکسان در تمام نواحی به‌کار برد. مدل شامل معادلات دیفرانسیل پاره‌ای همبسته شده غیرخطی شامل بقا جرم، ممنتم، بار الکتریکی و انرژی با واکنش‌های الکتروشیمیایی است. با محاسبه ترم‌های چشمه و چاه واکنش‌های الکتروشیمیایی

بیرونی مدل مورد نیاز است. عدم اعمال این شرایط مرزی به‌دقت مسئله افزوده و حل معادلات را آسان می‌کند؛ هر چند که زمان محاسبات کامپیوتری طولانی می‌شود. در این روش توزیع غیر پیوسته از حل عددی در سیستم وجود دارد. به‌عنوان نمونه کسر جرمی هیدروژن تنها در ۳ ناحیه لایه کاتالیست آند، لایه پخش گاز آند و کانال آند وجود دارد.



شکل ۱- الف) شماتیکی از یک پیل سوختی غشاء پلیمری
 ب) میدان جریان لانه‌زنبوری
 ج) جهت حرکت سیال از لایه لای پین‌های شش گوش

ویسکوزیته و آنتالپی است. ترم‌های چشمه مربوط به این معادلات در جدول ۲ ارائه شده است.

با استفاده از رابطه اصلاحی بریگمن [۱۵] ضریب موثر پخش جز k و ضریب هدایت یونی غشا به دست می‌آید.

$$D_k^{eff} = \varepsilon^{1.5} D_k \quad (7)$$

$$\sigma_k^{eff} = \varepsilon^{1.5} \sigma_k \quad (8)$$

ε_m تخلخل غشا است. ضریب هدایت حرارتی موثر و ترکیب چند فاز از ایزوتروپ توسط حاشین و شیتکمن مشخص شده است [۱۶].

$$k_{eff} = \frac{I}{\frac{1-\varepsilon}{3k_s} + \frac{\varepsilon}{2k_s + k_f}} - 2k_s \quad (9)$$

k_f ضریب هدایت حرارتی در فاز سیال، k_s ضریب هدایت حرارتی در فاز جامد بوده که در مواقعی خاص تخلخل به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$k_{eff}(\varepsilon = 1) = k_f, k_{eff}(\varepsilon = 0) = k_s \quad (10)$$

ضریب پخش وابسته به دما و فشار است.

$$D(T) = D_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (11)$$

ضریب هدایت پروتونی در فاز غشا نیز تابع دما و رطوبت نسبی غشا است.

ابتدا معادلات گونه‌های جرمی برای مرحله اول مصرف هیدروژن و اکسیژن و تولید آب و در مرحله بعد معادله بار الکتریکی و انرژی به کار می‌رود. معادلات حاکم در جدول ۱ خلاصه شده‌اند.

جدول ۱- معادلات حاکم بر مدل پیل سوختی

شماره	معادله	فرم ریاضی معادله حاکم
(۱)	پیوستگی	$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0$
(۲)	ممنتم	$\frac{\partial \rho \varepsilon \bar{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\varepsilon \nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon (D_k^{eff} \nabla \bar{u}) + \bar{S}_u \sqrt{a^2 + b^2})$
(۳)	بقاء اجزا	$\frac{\partial (\varepsilon k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \bar{u} X_k) = \nabla \cdot (D_k^{eff} \nabla X_k) + S_k$
(۴)	پتانسیل الکتروود	$\nabla \cdot (\sigma_e^{eff} \nabla \Phi_e) + S_{\Phi_e} = 0$
(۵)	پتانسیل فاز جامد	$\nabla \cdot (\sigma_s^{eff} \nabla \Phi_s) + S_{\Phi_s} = 0$
(۶)	انرژی	$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \rho H + \nabla \cdot (\rho \bar{u})) = \frac{\partial}{\partial t} (-k_{eff} \nabla T) + S_e$

در معادلات ۱ تا ۶، ρ ، ε ، P ، X_k ، Φ_e ، Φ_s ، μ و H به ترتیب بردار سرعت، چگالی سیال، ضریب تخلخل، فشار، کسر مولی جز k ام، پتانسیل الکتریکی در غشا، پتانسیل فاز جامد، ضریب هدایت حرارتی موثر،

جدول ۲- ترم‌های چشمه و چاه

معادله	کانال جریان	صفحه دو قطبی	لایه کاتالیست	غشاء پلیمری
ممنتم	0	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon^2 \bar{u}$	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_m \varepsilon_{mc} \bar{u}$	$-\frac{\mu}{K_p} \varepsilon_m \varepsilon_{mc} \bar{u}$
گونه‌های جرمی	0	0	$+\frac{K_\phi}{K_p} Z_f C_f F \nabla \Phi_e$	$+\frac{K_\phi}{K_p} Z_f C_f F \nabla \Phi_e$
پتانسیل جامد	0	0	$-\frac{j_a}{2FC_{tot,a}} (H_2)$ $-\frac{j_c}{4FC_{tot,c}} (O_2)$ $-\frac{j_c}{2FC_{tot,c}} (H_2O)$	0
پتانسیل غشاء	0	0	$-\frac{j_a}{j_c}$	0
انرژی	0	0	$\frac{j_a \eta_a }{j_c \eta_c }$	$\frac{i^2}{\sigma_m}$

$$j_c = -aj_{0,c}^{ref} \left(\frac{X_{O_2}}{X_{O_2,ref}} \right)^{1/2} \cdot \exp\left(\frac{-\alpha_c}{RT} \cdot F \cdot \eta F \right) \quad (23)$$

$$\eta(x,y) = \varphi_s - \varphi_e - \varphi_{oc} \quad (24)$$

در چهار رابطه اخیر، j ، α ، η ، φ و V_{oc} به ترتیب چگالی جریان الکتریکی انتقالی، ضریب انتقال، اضافه ولتاژ، پتانسیل و پتانسیل مدار باز می‌باشد. جدول ۳ پارامترهای فیزیکی و خصوصیات پیل سوختی را نشان می‌دهد. پتانسیل الکتریکی Φ_e در وجه مشترک لایه کاتالیست آند/لایه پخش گاز آند صفر و در وجه مشترک لایه کاتالیست کاتد/لایه پخش گاز کاتد، $\Phi_e = -V_{cell}$ در نظر گرفته می‌شود و در $y=0$ و $y=H$ ، $\frac{\partial \varphi_e}{\partial y} = 0$ می‌باشد.

۴- نتایج و بحث

با در نظر گرفتن یک مدل متقارن از مسئله، پس از چند سری اجرای حل با نرم‌افزار دینامیک سیالات محاسباتی فلوئنت، تعداد گره‌های شبکه‌بندی برای عدم وابستگی جواب‌ها به تعداد شبکه، ۳۶۴۰۰۰ انتخاب شده است. در نواحی ورودی و خروجی لایه پخش گاز و ابتدا و انتهای کانال، شبکه ریزتر شده است. این شبکه‌بندی در شکل ۲ نشان داده شده است. یک روند تکراری برای حل دستگاه معادلات همبسته در کل دامنه با استفاده از الگوریتم سیمپل، همان طور که در فلوچارت شکل ۳ برای آشنایی با گام‌های حل مسئله نمایش داده شده است، انتخاب شده است.

به منظور صحت‌گذاری نتایج، منحنی قطبش در شکل ۴ برای یک کانال ساده مستقیم (بدون پین) با اطلاعات تجربی تیکنالی [۱۸] مقایسه شده که توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد. عمده اختلاف مدل حاضر با نتایج تجربی مربوط به دانسیته جریان‌های بالا می‌باشد. در دانسیته جریان‌های بالا، میزان آب مایع بسیار اهمیت پیدا می‌کند که باعث شناوری لایه پخش گاز شده و انتقال گازهای واکنشگر به لایه کاتالیست را مختل می‌کند. در اثر پدیده شناوری عملکرد پیل به شدت افت می‌یابد. باید توجه داشت که به علت پیچیدگی زیاد بحث تغییر فاز آب در پیل سوختی، در این مقاله فرض شد که آب تغییر فاز نداده و به صورت بخار باقی می‌ماند.

$$\begin{aligned} \sigma(T) &= \sigma_m(T) \\ &= 100 \times \exp\left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)\right] \times \\ &\quad (0.005139\lambda - 0.00326) \end{aligned} \quad (12)$$

رطوبت نسبی غشا بر اساس رابطه تجربی اشپرینگر و گاتسفیلد [۱۷] به دست می‌آید.

$$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.18a - 39.85a^2 + 36a^3 \\ \text{for } : 0 < a \leq 1 \\ 14 + 1.4(a-1) \\ \text{for } : 1 \leq a \leq 3 \end{cases} \quad (13)$$

فعالیت آب طبق رابطه زیر تعریف می‌شود.

$$a = \frac{X_{H_2O} P}{P^{sat}} \quad (14)$$

ضریب پخش آب در غشا نیز به صورت زیر است.

$$D_w^m = \begin{cases} 3.1 \times 10^{-7} \times \lambda (e^{0.28\lambda} - 1) e^{\left(\frac{-2346}{T}\right)} \\ \text{for } : 0 < \lambda < 3 \\ 4.17 \times 10^{-8} \times \lambda (161e^\lambda + 1) e^{\left(\frac{-2346}{T}\right)} \\ \text{outside} \end{cases} \quad (15)$$

ضرایب پخش هیدروژن، اکسیژن و آب در مخلوط گاز

تابع دما و فشار است.

$$D_{H_2} = 1.1 \times 10^{-4} \left(\frac{T}{353} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{P} \right) \quad (16)$$

$$D_{O_2} = 3.2 \times 10^{-5} \left(\frac{T}{353} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{P} \right) \quad (17)$$

$$D_{H_2O} = 7.35 \times 10^{-5} \left(\frac{T}{353} \right)^{3/2} \left(\frac{1}{P} \right) \quad (18)$$

و آنتالپی H

$$H = C_p \Delta T \quad (19)$$

چگالی جریان الکتریکی در جهت محوری به صورت زیر

محاسبه می‌شود.

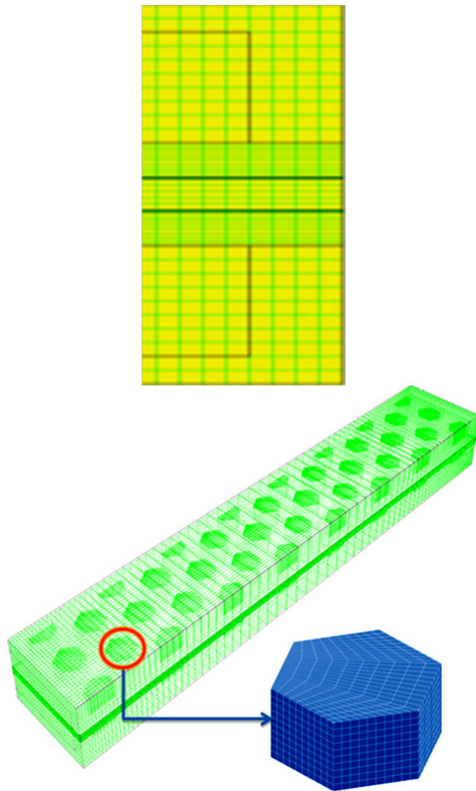
$$I(y) = -\sigma_e^{eff} \frac{\partial \varphi_e}{\partial x} \Big|_{x=IF} \quad (20)$$

IF وجه مشترک بین غشا و لایه کاتالیست کاتد است.

چگالی جریان الکتریکی نیز به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$I_{avg} = \frac{1}{L} \int_0^L I(y) dy \quad (21)$$

$$j_a = aj_{0,a}^{ref} \left(\frac{X_{H_2}}{X_{H_2,ref}} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{RT} \right) \cdot F \cdot \eta F \quad (22)$$



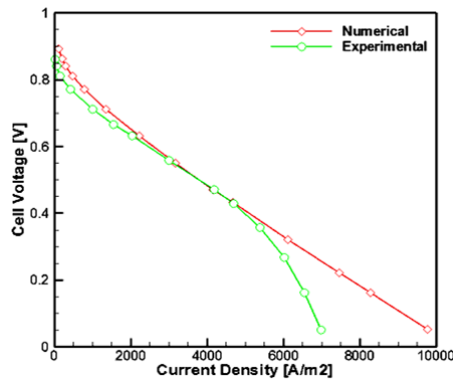
شکل ۲- مش بندی دامنه حل

مطابق شکل ۵، به طور نسبی در انتهای کانال جریان به علت اینکه ورودی سمت اکسیژن می‌باشد، شاهد توزیع چگالی جریان موضعی بالاتری می‌باشیم. در بسیاری مطالعات پارامتری بر روی پیل سوختی غشا پلیمری، اثر فشار بررسی داده شده و فشار آند و کاتد یکسان به کار رفته است. شکل ۶ الف و ب و ج توزیع پتانسیل غشاء را در مجموعه الکترود - غشاء نشان می‌دهد، که به ترتیب برای فشارهای ۱/۵، ۲ و ۳ اتمسفر می‌باشد. در این شکل‌ها و شکل‌های بعد از آن، ACL، CCL، AGL، CGL و MEM به ترتیب مخفف نواحی لایه کاتالیست آند، ناحیه کاتالیست کاتد، ناحیه پخش گاز آند، ناحیه پخش گاز کاتد و غشا می‌باشد. فشار کارکرد تأثیر زیادی بر چندین پارامتر مهم موثر بر پیل سوختی دارد. شکل ۶ نشان می‌دهد که پتانسیل الکترولیت از سمت آند به سمت کاتد کاهش می‌یابد. این کاهش ناشی از پتانسیل ضعیف در لایه کاتالیست آند و اضافه ولتاژ عمده در لایه کاتالیست کاتد می‌باشد. این امر موید آن

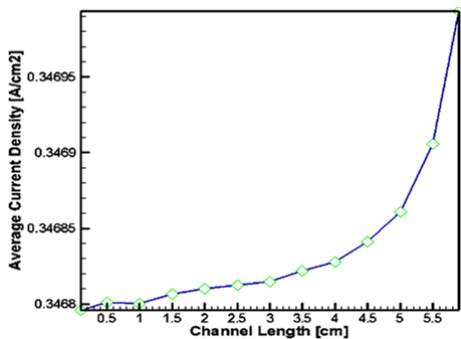
جدول ۳- خصوصیات و پارامترهای فیزیکی پیل سوختی

پارامترها	مقادیر
ثابت جهانی گازها، R	8.34 J/mol.K
ثابت فارادی، F	96487 C/mol
نرخ استوکیومتری جریان هیدروژن، ζ_{H_2}	2.8
نرخ استوکیومتری جریان اکسیژن، ζ_{O_2}	3
$a_{0,a}^{ref}$	5×10^8 A/m ³
$a_{0,c}^{ref}$	1×10^2 A/m ³
دمای عملکرد پیل سوختی، T	353 K
غلظت کلی آند، c_a^{tot}	66.817 mol/m ³
غلظت کلی کاتد، c_c^{tot}	17.808 mol/m ³
جریان الکتریکی مرجع	10^4 A/m ²
فشار ورودی آند، P_{H_2}	3×10^5 Pa
فشار ورودی کاتد، P_{O_2}	5×10^5 Pa
کسر مولی هیدروژن ورودی، X_{H_2}	0.8441
کسر مولی اکسیژن ورودی، X_{O_2}	0.19
کسر مولی بخار آب ورودی در آند و کاتد X_{H_2O}	0.1559
تخلخل غشاء ϵ_m	0.28
تخلخل لایه کاتالیست، ϵ_{cat}	0.28
تخلخل لایه پخش گاز، ϵ_{gdl}	0.3/0.4/0.5
تخلخل کانال، ϵ	1
سرعت ورودی کانال آند، u_{H_2}	0.01 m/s
سرعت ورودی کانال کاتد u_{O_2}	0.01 m/s
غلظت ثابت بارهای الکتریکی	1.2104 mol/m ³
ضریب انتقال آند α_a	2
ضریب انتقال کاتد α_c	2
کسر مولی مرجع هیدروژن $X_{H_2,ref}$	0.55
کسر مولی مرجع اکسیژن $X_{O_2,ref}$	0.02
ضریب پخش بخار آب در کانال	1.873×10^{-5} m ² /s
ثابت هنری برای اکسیژن در غشا	2×10^5 atm/cm ³
ضریب هدایت حرارتی موثر غشا	0.34 W/m.k
ضریب هدایت حرارتی موثر کانال جریان	1.6 W/m.k
ضریب هدایت حرارتی موثر جمع کننده جریان	120 W/m.k
ρc_p غشاء در ۸۰ درجه سلسیوس	2.7×10^6 J/m.k
ρc_p کانال در ۸۰ درجه سلسیوس	0.325×10^6 J/m.k
ρc_p لایه جمع کننده در ۸۰ درجه سلسیوس	1.62×10^6 J/m.k
ضریب درگ الکترو- اسمتیک، n_d	1
ضریب پخش هیدروژن در کانال	2.63×10^{-6} m ² /s
ضریب پخش اکسیژن در کانال	5.2197×10^{-6} m ² /s

واقع فشارهای بالاتر به فرآیند انتقال واکنشگرها به لایه کاتالیست و کاهش تلفات انتقال جرم کمک قابل توجهی می‌کند.



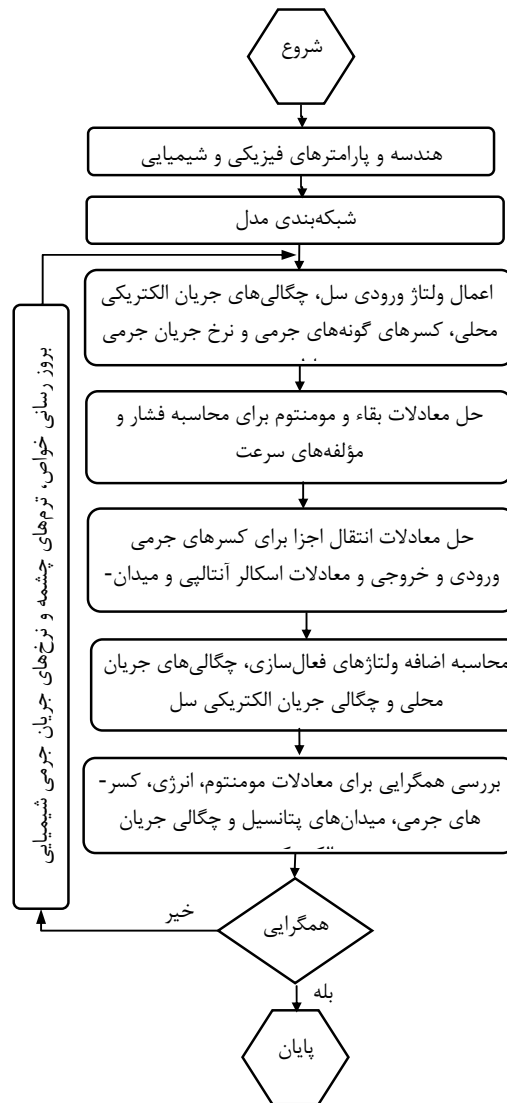
شکل ۴- مقایسه منحنی قطبش تجربی و حل عددی



شکل ۵- توزیع چگالی جریان میانگین در طول کانال

شکل ۷ توزیع پتانسیل جامد را در لایه پخش گاز و همچنین لایه کاتالیست آند و لایه پخش گاز و لایه کاتالیست کاتد ارائه می‌کند. پتانسیل در آند کمتر از پتانسیل در کاتد است؛ زیرا اضافه ولتاژ کاتد خیلی مهم‌تر از اضافه ولتاژ آند است. پتانسیل فاز جامد در کاتد در شکل ۸ نشان داده شده است که متأثر از تخلخل لایه پخش گاز است. پتانسیل موضعی در گوشه‌های لایه کاتالیست خیلی بیشتر است. اختلاف پتانسیل محلی فاز جامد به ضریب هدایت فاز جامد بستگی دارد که تابعی از تخلخل است.

معمولاً تخلخل لایه پخش گاز اثرات محسوسی بر انتقال جرم گازهای واکنش‌دهنده از لایه پخش گاز به لایه‌های کاتالیست دارد. با افزایش تخلخل لایه پخش گاز، مقاومت در

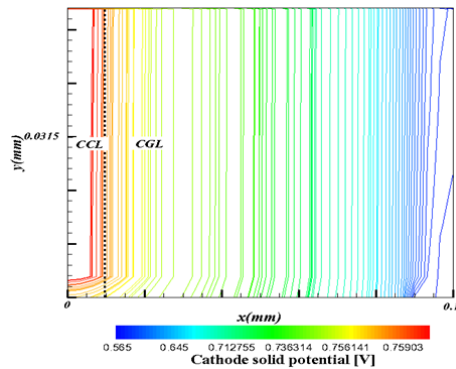


شکل ۳- فلوچارت حل دستگاه معادلات

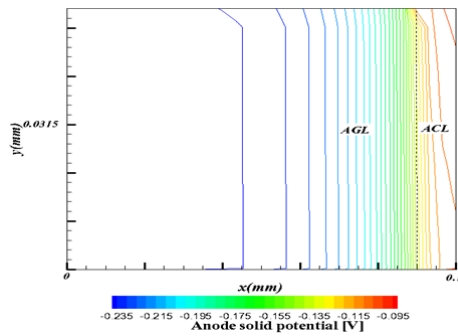
است که سینتیک اکسایش هیدروژن سمت آند خیلی سریع‌تر از واکنش کاهش کاتد بوده و عمده مکانیزم اتلاف اضافه ولتاژ فعال‌سازی در سمت کاتد است. توزیع پتانسیل الکترولیت وابستگی زیادی به فشار دارد. افزایش کسر مولی اکسیژن زمانی که فشار از ۱/۵ اتمسفر به ۳ اتمسفر افزایش می‌یابد، مهم و قابل توجه است. با افزایش فشار عملکرد پیل، اضافه ولتاژ فعال‌سازی کاهش می‌یابد. به‌منظور کاهش تلفات انتقال جرم، معمولاً پیل در فشار بالا راه‌اندازی می‌شود. در

قرار می‌گیرد. این مطلب با فراهم کردن غلظت اکسیژن بیشتر در صفحه کاتالیست به واکنش الکتروشیمیایی در کاند کمک می‌کند.

مقابل انتقال جرم کاهش می‌یابد. شکل ۱۰ توزیع کسر مولی اکسیژن در دامنه کاند را نشان می‌دهد. تخلخل لایه پخش گاز از ۰/۳ تا ۰/۵ تغییر می‌کند. با افزایش تخلخل لایه پخش گاز، اکسیژن راحت‌تر در دسترس لایه کاتالیست پلاتینیوم

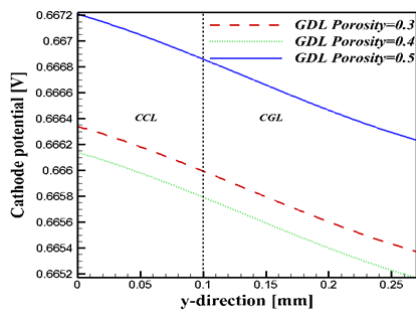


الف

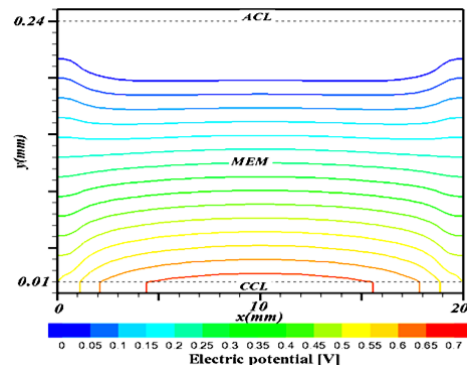


ب

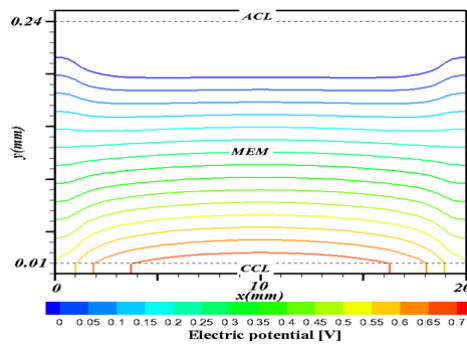
شکل ۷- توزیع پتانسیل در لایه پخش گاز و کاتالیست برای: الف) آند ب) کاند



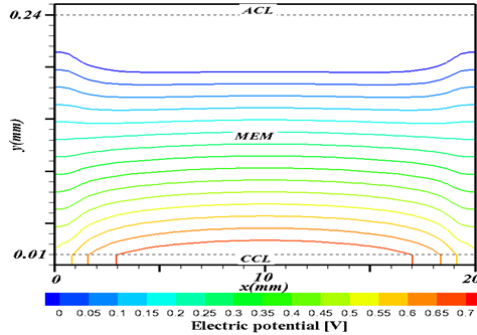
شکل ۸- توزیع پتانسیل در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست کاند برای تخلخل‌های مختلف



الف



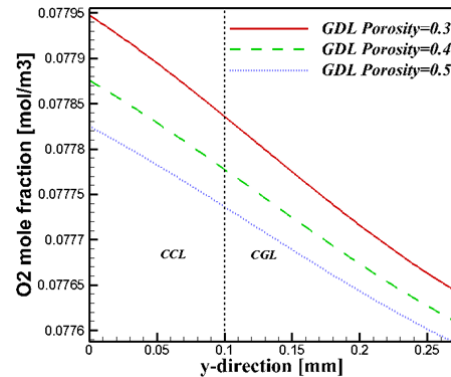
ب



ج

شکل ۹- توزیع پتانسیل در مجموعه الکتروود - غشاء برای سه فشار مختلف: الف) ۱/۵ اتمسفر ب) ۲ اتمسفر ج) ۳ اتمسفر

روش حجم محدود حل شده است. مطالعه عددی توان پیش‌بینی نرخ واکنش اجزا واکنش‌دهنده و توزیع محصولات شامل آب تولیدی را در مجموعه الکتروکاتالیست - غشاء دارد. نتایج نشان می‌دهد، که افزایش چگالی جریان الکتریکی منجر به توزیع بیشتر غلظت‌های مولی اجزا می‌شود و همچنین افزایش نفوذپذیری باعث افزایش یکنواختی توزیع چگالی جریان می‌شود و در نهایت محصول آب تولیدی در مجموعه الکتروکاتالیست - غشاء تجمع نمی‌یابد و موجب اختلال در روند انتقال گازهای واکنش‌دهنده به لایه کاتالیست نخواهد شد.



شکل ۹- توزیع کسر مولی اکسیژن در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست برای تخلخل‌های مختلف

علائم، نشانه‌ها

علائم انگلیسی

غلظت جزء i (mol/m^3)	C^i
ضریب پخش جزء k (m^2/s)	D_k
ثابت فارادی (C/mol)	F
چگالی جریان الکتریکی (A/m^2)	I
نفوذپذیری (m^2)	K
فشار (Pa)	P
ثابت عمومی گازها ($8.314\text{J}/\text{kg mol K}$)	R
جمله چشمه در معادلات انتقال	S
دما (K)	T
سرعت (m/s)	u

علائم یونانی

ضریب تخلخل	ε
لزجت ($\text{Pa}\cdot\text{s}$)	μ
اضافه پتانسیل (V)	η
چگالی (kg/m^3)	ρ
پتانسیل الکتریکی (V)	ϕ
ثابت فعالیت در غشا	λ

مراجع

- [1] Bernardi DM, Vebrunge MW (1992) A mathematical model of the solid polymer electrolyte fuel cell. *Electrochem Soc* 139(9): 2477–2491.
- [2] Falin C, Min-Hsing C, Ping-Tso H (2008) Two-phase transport in the cathode gas diffusion layer of PEM fuel cell with a gradient in porosity. *Hydrogen Energy* 33: 2525–2529.
- [3] Wang XD, Xu JL, Lee DJ (2012) Parameter sensitivity examination for a complete three-

همچنین افزایش تخلخل به معنی این است که محدودیت‌های انتقال جرم در چگالی‌های جریان بالاتری رخ می‌دهد که ناشی از محدودیت‌های جریان‌های بالاتر است. تخلخل بالاتر باعث نفوذپذیری بیشتر و همچنین جریان بهتر گازهای واکنشگر است. برای مقدار پایین‌تر تخلخل، کسر بالاتر جریان الکتریکی زیر ناحیه کانال تولید شده که این منجر به نقاط داخلی موضعی داغ داخل مجموعه الکتروکاتالیست - غشاء می‌شود. این نقاط موضعی داغ منجر به خشکی بیرون غشاء می‌شود که باعث افزایش مقاومت الکتریکی و کاهش هدایت یونی در غشا می‌شود.

۵- جمع بندی

در این مطالعه، یک مدل سه بعدی دائم پیل سوختی غشاء پلیمری با میدان جریان لانه‌زنبوری به منظور پیش‌بینی رفتار کلی پیل سوختی تحت شرایط کارکردی و برای استفاده در طراحی تک سل به کار رفته است. اثرات تخلخل و فشار روی پتانسیل الکتروولت پتانسیل جامد کسر مولی اکسیژن به صورت عددی به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که تخلخل بالاتر لایه پخش گاز برای پخش اکسیژن و بنابراین بهبود عملکرد پیل سوختی مناسب‌تر می‌باشد؛ اگر چه هدایت‌پذیری الکتریکی با افزایش تخلخل کاهش می‌یابد. پتانسیل جامد به تخلخل لایه کاتالیست و فشار کاتد بستگی دارد. این مطالعه قابل توسعه به حالت گذرا می‌باشد.

مدل سه‌بعدی و پایا برای شبیه‌سازی سینتیک الکتروشیمیایی انتقال جرم در پیل سوختی غشاء پلیمری به

- operating conditions. *Hydrogen Energy* 37: 5444–5451.
- [12] Fuller TF, Newman J (1993) Water and thermal management in solid-polymer electrolyte fuel cells. *Electrochem Soc* 140: 1218–1225.
- [13] Alimi W, Chouikh R, Guizani A (2008) Modeling of concentration and current distributions in a PEMFC single cell. *Progress Computational Fluid Dynamics*. 8: 2525–2529.
- [14] Suzuki A, Hattori T, Miura R, Tsuboi H, Nozomu H, Hatakeyama, Hiromitsu, Takaba, Williams Mark, Miyamoto Akira (2010) Porosity and Pt content in the catalyst layer of PEMFC: effects on diffusion and polarization characteristics. *Electrochem Sci* 5: 1948–1961.
- [15] Um Sukkee, Wang CY, Chen KS (2000) Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells. *Electrochem Soc* 147(12): 4485–4493.
- [16] Dunn Martin L, Minoru T (1993) The effective thermal conductivity of composites with coated reinforcement and the application to imperfect interfaces. *Applied Physics* 73: 1711–1722.
- [17] Springer T, Zawodzinski T, Gottesfeld S (1997) Electrode materials and process for energy conversion and storage. *Electrochem Soc* 13: 1–14.
- [18] Um S, Wang CY (2004) Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells. *Power Sources* 125: 40–51.
- [19] Min CH, He YL, Liu XL, Yin BH, Jiang W, Tao WQ (2006) Parameter sensitivity examination and discussion of PEM fuel cell simulation model validation Part II: Results of sensitivity analysis and validation of the model. *Power Sources* 160: 374–385.
- dimensional, two phase, nonisothermal model of polymer electrolyte membrane fuel cell. *Hydrogen Energy* 37(20): 15766–15777.
- [4] Imdat T, Merthan B (2010) Numerical study of assembly pressure effect on the performance of proton exchange membrane fuel cell. *Energy* 35: 2134–2140.
- [5] Zhuqian Z, Li J, He H, Wang X, Lixin Y (2010) Modeling dynamic behaviors of a single cell proton exchange membrane fuel cell under different operating conditions. *Taiwan Institute Chem Eng* 41: 689–698.
- [6] Bolwin K, Schunrberger W, Fischer M, Neubrand W, Aohr M, Eigenberger G (1998) Dynamic modeling and simulation of a polymer membrane fuel cell including mass transport limitation. *Hydrogen Energy* 23(3): 213–218.
- [7] Melik S, Chafik K, Halouani K (2009) Two dimensional modeling of electrochemical and transport phenomena in the porous structures of a PEMFC. *Hydrogen Energy* 3(4): 3091–3103.
- [8] Obayopo SO, Bello-Ochende T, Meyer JP (2012) Modeling and optimization of reactant gas transport in a PEM fuel cell with a transverse pin fin insert in channel flow. *Hydrogen Energy* 37(13): 10286–10298.
- [9] Zhuqian Z, Wang X, Xinxin Z, Li J (2008) Optimizing the performance of a single PEM Fuel Cell. *Fuel Cell Sci and Tech* 5: 1003–1007.
- [10] Ramousse J, Deseure J, Lottin O, Didierjean S, Maillet D (2005) Modeling of heat, mass and charge transfer in a PEMFC single cell. *Power Sources* 145: 416–427.
- [11] Belkhiri Z, Zeroual M, Moussa HB, Zereg M, Zitouni B (2012) Numerical simulation of exchange membrane fuel cells in different