بررسی عددی عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری با میدان جریان لانه‌زنبوری

ابراهیم افشاری[۱*]، سید علی اطیابی[۱]، محمدحسین خیام[۲] و محمود عدمی[۲]

۱. گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان

۲. مجتمع مکانیک و هوافضا،دانشگاه صنعتی مالک اشتر، شاهین‌شهر اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۷/۱۰– دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۲/۱۱/۳۰)

چکیده – عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری به شدت وابسته به طراحی صفحات قطبی و میدان جریان ایجاد شده در این صفحات است و طراحی مناسب آنها منجر به توزیع مناسب گازهای واکنش‌گر و دانسیته جریان، مدیریت مناسب آب و حرارت و بهبود عملکرد پیل سوختی می‌شود. بدین منظور در این مقاله، استفاده از یک میدان جریان جدید به‌صورت میدان جریان لانه‌زنبوری با پین‌های شش وجهی به‌جای کانال‌های متداول، پیشنهاد شده است. با ارائه یک مدل سه بعدی، معادلات پیوستگی، مومنتم، بقا اجزا انرژی و بار الکتریکی به همراه روابط سینتیک الکتروشیمیایی در نواحی مختلف پیل سوختی به‌صورت هم‌بسته، با یک مدل تک ناحیه‌ای و به روش عددی حل شده‌اند و تأثیر میدان جریان لانه‌زنبوری بر انتقال و توزیع اکسیژن، انتقال آب، توزیع دانسیته جریان، افت فشار و عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. ملاک طرح ارائه‌شده، توزیع یکنواخت گازهای واکنش‌گر و دانسیته جریان در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست کاتد و همچنین ولتاژ و دانسیته توان بالاتر همراه با یک افت فشار نه چندان زیاد (۲۵ کیلو پاسکال) است. نتایج نشان می‌دهند که در پیل با میدان جریان لانه‌زنبوری، سرعت در ناحیه پین‌ها تا ده برابر افزایش یافته است که باعث انتقال بیشتر اکسیژن به لایه کاتالیست شده و به‌دلیل توزیع و شکل مناسب پین‌ها، توزیع یکنواخت اکسیژن و دانسیته توان را در پی دارد.

واژگان کلیدی: پیل سوختی غشاء پلیمری، میدان جریان لانه‌زنبوری، پین‌های شش گوش، انتقال اکسیژن، توزیع یکنواخت اکسیژن.

Numerical Investigation on the Performance of a PEM Fuel Fell with Honeycomb Flow Field

E. Afshari[1*], S. A. Atyabi[1], M. H. Khayyam[2] and M. Adami[2]

1. Department of Mechanical & Aerospace, Malek Ashtar University, Shahin Shahr - Isfahan
2. Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Isfahan University

Abstract: ***Proton exchange membrane (PEM) fuel cell performance is directly related to the bipolar plates design and their flow field. The bipolar plate design plays a significant role in the reactant and current density distributions, and water and heat, management in a PEM fuel cell, thereby improving the cell performance. In this study, a novel configuration of flow field in the bipolar plate, a honeycomb flow field, is proposed, where the flow-field network is formed by many hexagonal pins arranged in a***

*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی:e.afshari@eng.ui.ac.ir

regular pattern. A set of governing equations, conservation of mass, momentum, species, energy and charge, as well as electrochemical kinetic for all regions of fuel cell are considered and developed numerically while the model is treated as a single-domain by presenting a three-dimensional model. Through this model, the effects of honeycomb flow field on the oxygen transport, oxygen and current density distributions, water transport, pressure drop across the channel and PEM fuel cell performance are investigated. The main design criteria in this research are based on more oxygen and current density distribution uniformity, higher voltage, power density output, and low pressure drop. The results reveal that in the PEM fuel cell with honeycomb flow field, an enhancement in the oxygen transport, uniform oxygen and current density distribution, higher voltage and power density output at the catalyst surface, especially at the positions right beneath the locations of pins occurrs although the pressure drop across the channel increases.

Keywords: ***PEM fuel cell, honeycombflow field, hexagonal pins, oxygen transport, uniform oxygen distribution.***

فهرست علائم

C^i	غلظت جزء i (mol/m^3)	U	سرعت (m/s)
D_k	ضریب پخش جزء k (m^2/s)		علائم یونانی
F	ثابت فارادی (C/mol)	ε	ضریب تخلخل
I	چگالی جریان الکتریکی (A/m^2)	μ	لزجت سیال $(kg/m.s)$
K	نفوذپذیری (m^2)	η	اضافه ولتاژ (V)
P	فشار (Pa)	ρ	چگالی (kg/m^3)
R	ثابت عمومی گازها $(8.314J/kg\ mol\ K)$	φ	پتانسیل الکتریکی (V)
S	جمله چشمه در معادلات انتقال	λ	ثابت فعالیت در غشاء
T	دما (K)	κ	هدایت یونی (S/m)
		ς	ضریب استوکیومتری جریان

۱- مقدمه

پیل‌های سوختی غشاء پلیمری دستگاه‌هایی الکتروشیمیایی هستند که مستقیماً انرژی شیمیایی حاصل از واکنش یک سوخت و اکسید کننده (معمولاً هیدروژن و اکسیژن) را به الکتریسیته و گرما تبدیل می‌کنند. پیل سوختی غشاء پلیمری به‌دلیل بهره‌وری انرژی بالا، درجه حرارت عملیاتی پایین (معمولاً ۸۰ درجه سلسیوس) و سر و صدای اندک منبع انرژی امیدوار کننده‌ای به‌ویژه برای استفاده در وسایل قابل‌حمل الکترونیکی است. این نوع پیل‌ها، جذاب‌ترین مولدهای تبدیل انرژی هستند و می‌توانند با راندمان بالا و برای مدت طولانی کار کنند؛ زیرا بازده آنها محدود به چرخه کارنو[1] نیست. این مزایا، پیل سوختی غشاء پلیمری را به یک گزینه مناسب برای مولدهای انرژی قابل‌حمل، وسایل حمل و نقل و برای ایجاد ایستگاه‌های توزیع انرژی الکتریکی، تبدیل می‌کند [۱ و ۲].

در پیل‌های سوختی غشاء پلیمری، شکل و هندسه میدان جریان تأثیر مستقیمی بر توزیع یکنواخت گازهای واکنش‌گر و مدیریت مناسب آب و حرارت تولیدی و خارج ساختن آنها از کانال میدان جریان دارد. طرح‌های مختلفی برای میدان جریان پیل سوختی غشاء پلیمری توسعه داده شده و استفاده شده است که هر کدام از طرح‌ها، مشخصات و نتایجی دارند. میزان و توزیع غلظت واکنشگرها و به تبع آن نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی در سطح کاتالیست و همچنین توزیع دما داخل الکترودها وابسته به نوع کانال‌ها است. طراحی میدان جریان یک موازنه‌ی پیچیده بین قیدهای وابسته به هم بسیاری است که اغلب آنها نقش معکوسی روی عملکرد پیل سوختی خواهند داشت و این مطلب ارزیابی این متغیرها را با اهمیت می‌کند. قیدهای طراحی شامل: افت فشار، انتقال الکترون‌ها، انتقال حرارت و مدیریت

آب است. یک میدان جریان ایـده‌آل در پیـل سـوختی، دارای ویژگی‌های اساسی زیر است:

۱) انتقال جرم مناسب واکنشگرها به لایه کاتالیست طوری که اولاً واکنشگرها به میزان مورد نیاز در لایه کاتالیست فراهم شوند و ثانیاً گازها به‌طـور یکنواخـت در لایـه کاتالیسـت در دسـترس باشند.

۲) خروج محصولات واکنش و بخشی از حـرارت تولیـدی در پیل از کانال و هدایت آنها به خارج از پیل سوختی.

۳) مبادله‌ی الکترونی مناسب با لایه‌های کاتالیست.

۴) افت فشار حداقلی که بین ورودی و خروجی پیل وجود دارد، آب جمع شده در کانال کاتد را به بیرون هدایت می‌کند.

طراحی کانال‌ها در پیل سـوختی غشـاء پلیمـری از اهمیـت زیادی برخوردار است و طرحی که ویژگـی‌هـای آن بـه چهـار ویژگی فوق نزدیک باشد مـا را بـه پیلـی بـا عملکـرد مناسـب رهنمون می‌سازد.

استفاده از برنامه‌های کـامپیوتری تجـاری دینامیـک سـیالات محاسباتی نیز اجازه تحقیقات روی تأثیر کانال‌هـای جریـان بـه شکل غیرمرسوم بدون نیاز به سـاخت آزمایشـگاهی یـک مـدل فیزیکی و با حذف هزینه‌های تولید و ماشین‌کاری را می‌دهد. در واقع مدل‌های ریاضی، مجموعـه‌ای از اطلاعـات دقیـق دربـاره سازوکارهای مختلف انتقال در داخل پیل با طرح‌هـای مختلـف کانال جریان را توسعه داده‌اند [۳ و ۴].

در سال‌های گذشته در زمینه طراحـی و انتخـاب کانـال‌هـای جریان پیل سوختی غشاء پلیمری کوشش‌های زیادی انجام شـده است. برخی نمونه طرح‌های ارائه‌شده، شامل کانال‌هـای مـوازی، مش، مارپیچی تک، مارپیچی چندتایی، جفت شـده، کانـال‌هـای مسدود شده، کانال‌های پینی و کانال‌های بـا شـکل‌هـای خـاص است [۵ و ۶]. طرح‌های مارپیچی به‌دلیـل عملکـرد بـالای خـود به‌عنوان استاندارد صنعتی به‌کار می‌روند و اکثـراً بـه‌عنـوان طـرح مرجع در ارزیابی طرح‌های جدید به‌کار می‌روند [۷].

طرح‌های مارپیچی از یک یا چندمسیر طولانی و پیچ در پیچ از سمت ورودی به سمت خروجی و طرح‌های موازی چنـدین مسیر مستقیم از ورودی به خروجی را تشکیل می‌دهند. مشـکل اصلی این نوع طراحی، اصطکاک ایجادشـده توسـط تنهـا یـک کانال باریک طولانی و فشار زیاد مورد نیاز برای رانـدن گـاز از ورودی به خروجی است. این مشـکل بـا اسـتفاده از پیـل‌هـای اندازه کوچک‌تر و یا اضافه کـردن کانـال‌هـای اضـافی و ایجـاد هیبریدهای موازی مارپیچ تا حدودی کاهش می‌یابد.

استفاده از آرایش مارپیچ منفرد که باعث افزایش طول کانال همراه است، علاوه بر افت فشـار زیـاد، باعـث ایجـاد گرادیـان غلظت بالای گازهای واکنش‌گـر از مقطـع ورودی تـا خروجـی می‌شود. به‌علاوه، استفاده از یـک کانـال بـرای جمـع‌آوری آب حاصل از واکنش (بـه‌خصـوص در چگـالی جریـان‌هـای بـالا) احتمال شناوری لایه‌هـای متخلخـل پیـل را افـزایش مـی‌دهـد؛ بنابراین برای چگالی جریان‌های بالا و به‌خصوص هنگامی که از هوا به‌عنوان اکسـیدکننده اسـتفاده مـی‌شـود و یـا هنگـامی کـه صفحات دوقطبی سطح بزرگـی دارنـد، بایـد از چنـدین کانـال موازی مارپیچ استفاده شود. این طرح باعـث مـی‌شـود تـا افـت فشار محدود شده و در نتیجه توان تلف شده برای پمپ هوا بـه داخل پیل کاهش یابد. علاوه بر این، کانال‌های موازی مـارپیچی دفع مؤثر آب را تسهیل نموده و از وقوع نواحی سکون ناشی از تجمع آب در سطح کاتد جلوگیری می‌کنند.

در طرح‌های مـوازی نیـز مسـیرهای مـوازی متعـدد از سـمت ورودی به سمت خروجی باعث کـاهش فشـار مـورد نیـاز گـاز از طریق سیستم می‌شوند. به‌طور کلی طرح‌هـای مـوازی افـت فشـار بسیار کمی دارند و نیازی به استفاده بـالا از تـوان پمـپ بیـرون از سیستم ندارند [۸ و ۹]. تغییرات فشار ورودی و خروجی کـم ایـن سیستم باعث تجمع قطرات آب تشکیل شده در کانال‌هـای جریـان می‌شود. این قطرات رشد مـی‌کننـد و درنهایـت بـا مسـدود کـردن راه‌های نفوذ گاز به لایه پخش گاز، منجر بـه توزیـع غیریکنواخـت گاز می‌شوند.

طرح‌های مش، حالت خاصی از طرح‌های موازی هستند که در آنها، مسیرهایی بین مسیرهای موازی ایجـاد و تشـکیل یـک طـرح شبکه مانند می‌دهند. در واقع، طرح‌های مش طرحی بـا پـین تعبیـه شده در کانال جریان برای تسهیل توزیع چگـالی جریـان هسـتند و این طرح دارای افت فشار بسـیار کمـی اسـت. همچنـین، در ایـن سیستم‌ها از برخی شبکه‌های فلزی یا فوم استفاده کـرده‌انـد [۱۰ و ۱۱]. این شـبکه‌هـا هـدایت الکتریکـی بسـیار بـالایی دارنـد؛ ولـی

متأسفانه، فوم فلزی و شبکه‌های زیاد مستعد خوردگی هستند و می‌تواند منجر به از کار افتادن سریع پیل سوختی شوند.

طرح جفت شده یک مسیر پیوسته از سمت ورودی به سمت خروجی ندارد؛ اما در این طرح گازهای واکنش‌گر مجبور به عبور از زیر شانه کانال و از طریق الکترودها هستند. در این طرح، جریان گاز از طریق روزنه‌های نفوذ به اجبار عبور می‌کند. مطالعات عملکردی نشان داده‌اند که طراحی جفت شده به‌طور کلی بهتر از طرح‌های موازی بوده؛ اما عملکرد ضعیف‌تری نسبت به طرح‌های مارپیچی دارند. به‌نظر می‌رسد در این طرح مدیریت آب بهتری نسبت به طرح‌های موازی و بدون فشار بیش‌ازحد بالا که در طرح‌های مارپیچ است، صورت می‌گیرد [۱۲].

در مورد طرح‌های کانال با شکل‌های خاص، آثار پژوهشی متعددی وجود دارد که به‌منظور بررسی اثرات الگوهای مختلف صفحه دو قطبی بر عملکرد پیل‌های سوختی، انجام شده است. کومار و ردی [۱۳] مقاطع کانال به‌صورت نیم‌دایره، مثلث و مستطیلی را از نظر تئوری بررسی کرده و به این نتیجه رسیدند که مقطع نیم‌دایره بیشترین افت فشار را دارد و پس از آن به ترتیب مقاطع مثلثی و مستطیلی بیشترین افت فشار را دارند. همچنین درصد مصرف هیدروژن در سه سطح مقطع مقایسه شده است که درصد مصرف هیدروژن در سطح مقطع نیم دایره‌ای بیشینه و پس از آن مقاطع مثلثی و مستطیلی بیشترین مصرف هیدروژن را دارند. کو و چن [۱۴] یک مطالعه مقایسه‌ای بین یک کانال جریان گاز مستقیم معمولی و یک میدان با کانال جریان گازموجی شکل انجام داده‌اند. نتایج آنها نشان می‌دهد که اثرات جابه‌جایی در کانال موجی شکل در مقایسه با یک کانال جریان معمولی مستقیم بیشتر است و کانال موجی شکل عملکرد بهتری در انتقال جرم و جابه‌جایی اجباری واکنش‌دهنده‌ها، سرعت جریان گاز بالاتر و توزیع یکنواخت‌تر دما را فراهم می‌کند. روشندل و همکاران [۱۵] مطالعه مقایسه‌ای روی طرح یک صفحه دو قطبی با الهام از الگوهای زیستی موجود با جریان سیال موازی - مارپیچی انجام داده‌اند. نتایج آنها نشان داده که در این طرح جدید، توزیع فشار در سطح لایه کاتالیست یکنواخت‌تر است و چگالی توان به‌دست آمده از کانال‌های مارپیچی و موازی جریان بالاتر بوده است. خزاعی و همکارانش [۱۶]، عملکرد پیل سوختی با سطح مقطع حلقوی را بررسی کرده‌اند. نتایج آنها نشان می‌داد که افزایش سطح تماس بین لایه پخش گاز و صفحات دو قطبی باعث افزایش عملکرد پیل سوختی می‌شود. یانگ و همکارانش [۱۷] اثر نیروهای شناوری در یک کانال جریان موجی شکل روی سرعت، دما و توزیع غلظت گاز در داخل کانال و برروی بازده واکنش الکتروشیمیایی و عملکرد الکتریکی پیل سوختی غشاء پلیمری را بررسی کرده‌اند. به‌طور کلی، نتایج آنها نشان می‌دهد که کانال جریان موجی شکل، چگالی توان حداکثر را در حدود ۴۰ درصد بیش از یک کانال جریان گاز معمولی بهبود می‌بخشد. در طرح آنها، افت فشار بالا یک متغیر محدود کننده به شمار می‌رود و به‌همین دلیل، به‌منظور بهینه‌سازی عملکرد پیل یک نقطه تعادلی باید معین شود.

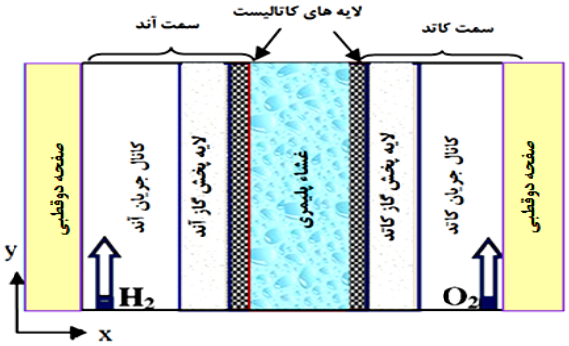
در این مطالعه، با ارائه یک مدل جدید برای میدان جریان گاز در پیل سوختی غشاء پلیمری، شبیه‌سازی عددی به‌منظور بررسی این طراحی خاص و به‌وسیله یک مدل سه بعدی شامل همه نواحی پیل (از جمله لایه کاتالیست) انجام شده و بسیاری از اثرات سه بعدی که در مدل یک یا دو بعدی لحاظ نمی‌شود، ارزیابی شده‌اند. هدف اصلی این مطالعه، بررسی میدان جریان لانه زنبوری در سمت کاتد پیل که در دسته میدان‌های جریان پینی طبقه‌بندی می‌شود، است. انتظار می‌رود که نتایج، اطلاعات دقیقی در مورد پدیده‌های انتقال در داخل پیل سوختی غشاء پلیمری با این میدان جریان ارائه کند و درکی بهتر از انتقال و توزیع واکنش‌دهنده‌ها در داخل پیل سوختی ارائه نماید.

۲- مدل ریاضی

۲-۱- توصیف مدل پیل سوختی غشاء پلیمری

در شکل (۱) شماتیکی دو بعدی از پیل سوختی غشاء پلیمری با اجزای مختلف آن نشان داده شده است.

پین‌های شش وجهی داخل کانال کاتد، هندسه میدان جریان



شکل ۱- شماتیکی از یک پیل سوختی غشاء پلیمری

لانه‌زنبوری را تشکیل می‌دهند. پیل شامل کانال گاز آند، لایه پخش گاز آند، لایه کاتالیست آند، لایه غشاء، لایه کاتالیست کاتد، لایه پخش گاز کاتد، کانال گاز کاتد همراه با پین‌های شش وجهی و صفحات قطبی است. در واقع کانال‌های جریان، در داخل صفحات قطبی ایجاد می‌شوند و میدان جریان لانه‌زنبوری در داخل این کانال‌ها قرار دارد. هوای خشک وارد کانال کاتد و گاز هیدروژن با رطوبت نسبی ۱۰۰ درصد وارد کانال آند می‌شود. هیدروژن از میان لایه پخش آند به‌طرف کاتالیست انتقال می‌یابد و به دو یون هیدروژن (پروتون) و دو الکترون تبدیل می‌شود. پروتون‌ها از میان غشاء به طرف لایه کاتالیست کاتد حرکت می‌کنند؛ اما غشاء رسانای الکترون نیست و با عبور الکترون از یک مدار خارجی، یک جریان الکتریکی خارجی به وجود می‌آید که باعث تولید کار الکتریکی می‌شود. در کاتد، اکسیژن از میان لایه پخش گاز حرکت می‌کند و در سطح لایه کاتالیست با پروتون‌ها و الکترون‌ها واکنش داده و تشکیل آب می‌دهد. واکنش آندی کمی گرماگیر و واکنش کاتدی به شدت گرمازا است؛ بنابراین در مجموع علاوه بر تولید آب، در پیل گرما تولید می‌شود.

در طراحی‌های میدان جریان پینی که فقط تعدادی پین در میدان جریان تعبیه شده اشکالاتی وجود دارد. در این طرح‌ها، نرخ واکنش پیل سوختی معمولاً در نواحی سکون داخل میدان جریان کندتر است؛ زمانی که واکنش‌دهنده‌ها به شکل مایع باشند، شکل‌گیری و وجود نواحی سکون منجر به به‌کارگیری نا مؤثر کاتالیست می‌شود؛ مسیرهای طولانی جریان باعث تولید گرادیان‌های غلظتی از ورودی به خروجی پیل سوختی می‌شود و منجر به غیریکنواختی توزیع جریان الکتریکی در سراسر پیل سوختی می‌شود. این مشکلات در طراحی‌های میدان جریان با آرایش لانه‌زنبوری تا حدودی بهبود می‌یابد. طرح تشکیل‌شده خطوط جریان در این میدان جریان شبیه به میدان جریان مارپیچی است. در این طرح جدید، واکنش‌دهنده‌های سمت کاتد از میان شیارهای فاصله‌دار که در صفحه دو قطبی کاتد شکل‌گرفته‌اند، عبور می‌کنند. اگر واکنش‌دهنده‌ها از میدان‌های جریان عبور کنند تلاش می‌کنند تا مسیری با حداقل مقاومت را بپیمایند که ممکن است باعث کانال بندی شدن و شکل‌گیری نواحی سکون شود. آرایش لانه‌زنبوری باعث پیشروی جریان به‌صورت مارپیچ در طول کانال و توزیع یکنواخت گازهای واکنش‌گر در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست می‌شود. میدان جریان لانه‌زنبوری خواسته‌های زیر را تأمین می‌کند [۱۸] :

۱) افت فشار یکنواخت و بهینه در داخل پیل
۲) کم‌ترین نواحی سکون در میدان جریان پیل سوختی
۳) افزایش انتقال واکنش‌گرها به لایه کاتالیست
۴) افزایش برداشت محصولات جانبی
۵) بهبود عملکرد پیل سوختی در مقایسه با میدان‌های معمولی جریان

با توجه به موارد بالا، میدان جریان لانه‌زنبوری در پیل سوختی غشاء پلیمری میدان جریان مناسبی است و نیاز به بررسی کامل دارد. مدل‌های سه بعدی برای بررسی اثر هندسه، خصوصاً با میدان‌های جریان لانه‌زنبوری و پین‌های شش گوش کاربرد ویژه‌ای دارند. باید توجه داشت که به‌علت پخش بالای هیدروژن نیازی به استفاده از میدان جریان لانه‌زنبوری در کانال آند نیست.

۲-۲- معادلات حاکم

در توسعه مدل پیل سوختی، به‌منظور ساده کردن روند حل معادلات حاکم، فرضیاتی در مدل اعمال می‌گردد:

۱) مخلوط‌های گاز ایده‌آل هستند.
۲) الکترودها، لایه‌های پخش گاز، لایه‌های کاتالیست و غشاء همسان گرد و همگن هستند.

جدول ۱- معادلات اساسی جریان سیال و معادلات الکتروشیمیایی به همراه عبارت‌های چشمه و چاه

معادله	معادله	فرم ریاضی معادله	عبارت‌های چشمه و یا چاه*	
(۱)	جرم	$\nabla.(\rho\vec{u})=0$		0
(۲)	مومنتم	$\frac{1}{\varepsilon}\nabla.(\rho\vec{u}\vec{u})=-\nabla P+\nabla.\tau+S_u$	در لایه‌های پخش گاز و کاتالیست:	$S_u=\frac{\mu}{k}\vec{u}$
(۳)	گونه‌های جرمی	$\nabla.(\vec{u}C_k)=\nabla.(D_k^{eff}\nabla C_k)+S_k$	واکنشگرها در لایه‌های کاتالیست:	$S_k=-\frac{s_k j}{nF}$
			آب در لایه‌های کاتالیست:	$S_k=-\nabla.(\frac{n_d}{F}I)-\frac{s_k j}{nF}$
(۴)	پتانسیل الکتریکی	$\nabla.(\kappa^{eff}\nabla\varphi_e)+S_\varphi=0$	در لایه‌های کاتالیست:	$S_\varphi=j$
(۵)	انرژی	$\nabla.(\rho c_p\vec{u}T)=\nabla.(k^{eff}\nabla T)+S_T$	در لایه‌های کاتالیست:	$S_T=j(\eta+T\frac{dU_0}{dT})+\frac{I^2}{\kappa^{eff}}$
			در غشاء:	$S_T=\frac{I^2}{\kappa^{eff}}$

* در ستون چهارم این جدول، در هر ناحیه‌ای که اشاره‌ای به عبارت چشمه و یا چاه نشده است، این عبارت برابر صفر است.

۳) جریان سیال به‌دلیل گرادیان‌های فشار و سرعت کوچک، آرام و غیرقابل تراکم است.

۴) افت‌های ناشی از مقاومت تماسی در الکترودها و لایه‌های کاتالیست به‌علت هدایت پذیری الکتریکی خیلی بالای آنها قابل صرف‌نظرکردن است.

۵) فرض تک فاز برای انتقال آب درنظر گرفته شده است.

۶) وجود آب مایع در کسر حجمی کوچک و به‌صورت قطرات ریز پخش شده است (جریان مرطوب)؛ به‌طوری‌که اثری روی انتقال جریان گاز و فرآیندهای الکتروشیمیایی ندارد.

فرض ۴ منجر به صرف‌نظر کردن از گرمای ایجادشده در جمع کننده جریان الکتریکی، لایه پخش گاز و لایه‌های کاتالیست به‌علت هدایت الکتریکی بالای آنها می‌شود. فرض ۵ باعث می‌شود که آب، فوق اشباع و در فاز گاز درنظر گرفته شود؛ یعنی فعالیت آب بالاتر از یک است [۱۹]. از این‌رو، در این مقاله فعالیت آب ۲ درنظر گرفته شده است. صرف‌نظر از گرمای ایجاد و جذب شده ناشی از تغییر فاز آب نیز شامل فرض ۵ می‌شود.

با به‌کارگیری فرضیات مطرح‌شده، معادلات بقای جرم، مومنتم، گونه‌های شیمیایی، بار الکتریکی و انرژی ساده شده و تمام معادلات حاکم به‌طور هم‌زمان در کل ۹ ناحیه پیل (جمع کننده‌های جریان، کانال‌ها، لایه‌های پخش گاز، لایه‌های کاتالیست و غشاء) با درنظر 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 است و شرایط مرزی فقط در مرزهای بیرونی مدل مورد نیاز است. عدم اعمال این شرایط مرزی به‌دقت مسأله افزوده و حل معادلات را آسان می‌کند. علت آسان شدن حل معادلات این است که در تمام شبکه محاسباتی داخلی، فقط یک سری معادلات حل می‌شود و نیاز نیست که این معادلات در هر ناحیه ودر مرزهای داخلی با تبدیل کردن آنها به شرایط مرزی (شرایط مرزی عموماً نیومن بوده و در واقع یک معادله جدید در مرزهای داخلی هستند) معادلات و نوع حل عددی تغییر کند. هر چند با اعمال روش تک ناحیه‌ای زمان محاسبات کامپیوتری طولانی می‌شود. معادلات حاکم همراه با عبارت‌های چشمه حجمی مشخص برای نواحی مختلف پیل سوختی غشاء پلیمری در جدول ۱ خلاصه شده است.

واکنش‌های الکتروشیمیایی در حالت کلی برای محاسبه

عبارت‌های چشمه ارائه شده در جدول ۱، به‌صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$\sum s_k M_k = ne^- \quad (۶)$$

که M_k فرمول شیمیایی جزء k ام، S_k ضریب استوکیومتری[۲] و n تعداد الکترون‌های منتقل‌شده است. واکنش کلی (۶) برای اکسایش در سمت آند و کاهش اکسیژن در کاتد به‌صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$H_2 - 2H^+ \rightarrow 2e^- \quad (۷)$$

$$2H_2O - O_2 - 4H^+ \rightarrow 4e^- \quad (۸)$$

عبارت‌های چشمه در معادلات مومنتم برای بازیابی معادله دارسی[۳] در شرایط حدی (نفوذپذیری کوچک و سرعت پایین) در نظر گرفته شده است. عبارت چشمه در معادله پتانسیل الکتریکی برای توصیف جریان الکتریکی عبوری بین فاز جامد و فاز الکترولیت در هر یک از لایه‌های کاتالیست آند و کاتد به‌کار می‌رود. برای محاسبه این عبارت‌ها، چگالی جریان الکتریکی عبوری باید محاسبه شود. بدین منظور از معادله باتلر – ولمر[۴] برای واکنش‌های اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن استفاده می‌شود:

$$j_a = a\, j_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2,ref}}\right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{RT} F\, \eta\right) \quad \text{آند} \quad (۹)$$

$$j_c = -a\, j_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2,ref}}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{-\alpha_c}{RT} F\, \eta\right) \quad \text{کاتد} \quad (۱۰)$$

جایی که a سطح فعال، $j_{0,a}^{ref}$، $j_{0,c}^{ref}$، C_{H_2}، C_{O_2}، $C_{H_2,ref}$، $C_{O_2,ref}$، α_c، α_a، F، η به ترتیب چگالی جریان مرجع آند و کاتد، غلظت هیدروژن، غلظت اکسیژن، غلظت هیدروژن مرجع، غلظت اکسیژن مرجع، ضریب انتقال کاتد، ضریب انتقال آند، ثابت فارادی و اضافه ولتاژ است.

مقدار $\alpha_a + \alpha_c$ در واکنش اکسایش هیدروژن برابر ۲ بوده؛ درحالی‌که $\alpha_c = 1$ است. با فرض اینکه ولتاژ مدار باز مرجع آند، صفر فرض شود و در سمت کاتد تابعی از دما باشد، عبارت اضافه ولتاژ برای طرف آند و کاتد را می‌توان به‌صورت زیر تعریف کرد [۱۷]:

$$\eta = \varphi_S - \varphi_e - U_0 \quad (۱۱)$$

$$U_0 = 0 \quad \text{آند} \quad (۱۲)$$

$$U_0 = 1.23 - 9.0 \times 10^{-4}(T - 298.15) \quad \text{کاتد} \quad (۱۳)$$

حاصل‌ضرب دانسیته جریان تبادل در مساحت فعال پیل، در سمت آند ثابت بوده؛ ولی در سمت کاتد تابع دما است [۱۹]:

$$ai_{0,c}^{ref}(T) = ai_{0,c}^{ref}(353K) \times \exp\left[-16456\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{353.15}\right)\right] \quad (۱۴)$$

عبارت‌های چشمه در معادلات بقا گونه‌های جرمی بیانگر تولید و یا مصرف گونه‌های k ام در واکنش‌های الکتروشیمیایی و درگ الکترو – اسمزیک[۵] آب از آند به کاتد است. ضریب پخش جرمی جز k ام یعنی D_k در کانال‌های گاز آند و کاتد براساس تابعی از دما و فشار محاسبه می‌شود [۲۰]:

$$D_k = D_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \left(\frac{P_0}{P}\right) \quad (۱۵)$$

برای نواحی متخلخل پیل سوختی غشاء پلیمری مانند لایه‌های پخش گاز و لایه کاتالیست، عبارت پخش پذیری مؤثر اجزاء D_k^{eff} اصلاح می‌شود [۱۹ و ۲۰]:

$$D_k^{eff} = \varepsilon_i^{1.5} D_k \quad (۱۶)$$

سه عبارت چشمه حرارتی در معادله انرژی نیز قابل توجه است. آنها نشان‌دهنده گرمای غیر قابل برگشت حاصل از واکنش الکتروشیمیایی، گرمای آنتروپی برگشت‌پذیر و حرارت ناشی از مقاومت اهمی هستند که در جدول ۱ به آن اشاره شده است. علاوه بر این، ظرفیت حرارتی مؤثر در مواد متخلخل متشکل از فاز جامد و مایع با رابطه زیر قابل بیان است [۲۱]:

$$\rho C_P = \varepsilon(\rho C_P)_f + (1-\varepsilon)(\rho C_P)_s \quad (۱۷)$$

در رابطه بالا، ظرفیت‌های گرمایی ρC_P با زیرنویس f و s به‌ترتیب مربوط به سیال و جامد است.

رسانایی پروتونی غشای نافیون، κ_{mem} و ضریب درگ الکترو–اسمزیک آب n_d، تابعی از رطوبت نسبی غشاء بوده که رطوبت نسبی نیز خود تابع فعالیت آب است:

$$\kappa_{mem} = (0.5139\lambda - 0.326)\exp\left[1268\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right] \quad (۱۸)$$

شکل ۲- نمودار حل دستگاه معادلات

$$n_d = \frac{2.5\lambda}{22} \qquad (۱۹)$$

در دو رابطه اخیر، فعالیت آب، a و رطوبت نسبی غشاء λ به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند:

$$a = \frac{C_W^g R T}{P^{sat}} \qquad (۲۰)$$

$$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 & 0 < a \le 1 \\ 14 + 1.4(a-1) & 1 < a \le 3 \end{cases} \qquad (۲۱)$$

نفوذپذیری آب در غشاء براساس رابطه تجربی، توسط موتاپالی و همکاران به‌دست آمده است [۲۲]:

$$D_{w,mem} = \begin{cases} 3.1\times10^{-7}\lambda(e^{0.28\lambda}-1)e^{(-2346/T)} & 0 \le \lambda \le 3 \\ 4.17\times10^{-8}\lambda(1+161e^{-\lambda})e^{(-2346/T)} & 3 < \lambda \end{cases} \qquad (۲۲)$$

در این مطالعه، غشاء از نوع نافیون ۱۱۲ است که هدایت پروتونی و نفوذپذیری آب در غشاء از روابط (۲۳) و (۲۴) به‌دست می‌آیند [۱۹]:

$$\kappa_{mem}^{eff} = \frac{1}{2}\kappa_{mem} \qquad (۲۳)$$

$$D_{w,mwm}^{eff} = \frac{1}{2}D_{w,mem} \qquad (۲۴)$$

هدایت مؤثر پروتونی لایه‌های کاتالیست آند و کاتد از طریق رابطه بریگمن به‌دست می‌آید [۱۹]:

$$\kappa_{cat}^{eff} = \varepsilon_{mc}^{1.5}\,\kappa_{mem} \qquad (۲۵)$$

در رابطه بالا، ε_{mc} کسر حجمی یونی در لایه کاتالیست آند و کاتد است. با مشخص شدن پتانسیل الکترولیت، φ_e و هدایت پروتونی غشاء κ_{mem}^{eff}، چگالی جریان موضعی را می‌توان محاسبه کرد:

$$I = -\kappa_{mem}^{eff}\nabla\varphi_e \qquad (۲۶)$$

چگالی جریان متوسط را می‌توان با درنظر گرفتن سطح متوسط چگالی جریان موضعی روی کل غشاء به‌دست آورد:

$$I_{avg} = \frac{1}{A_{mem}}\int I dA \qquad (۲۷)$$

۲-۳- شرایط مرزی

معادلات (۱) تا (۵) در جدول ۱، یک مجموعه کامل از معادلات حاکم برای مشخص کردن مجهولات، شامل مؤلفه‌های سرعت، فشار، دما، غلظت‌های هیدروژن، اکسیژن، آب و پتانسیل الکترود را تشکیل می‌دهند. با استفاده از روش تک دامنه‌ای، شرایط مرزی فقط در سطوح خارجی دامنه محاسباتی مورد نیاز است. شرط شار صفر برای سطوح خارجی، به‌جز برای ورودی‌ها و خروجی‌های کانال‌های گاز آند و کاتد به‌کار می‌رود. در ورودی آند و کاتد، غلظت گونه‌های ورودی، $C_{k,in}$، به کمک فشار ورودی و شرایط رطوبت تعیین می‌شود. سرعت ورودی آند و کاتد را نیز می‌توان با نسبت جریان

استوکیومتری مربوط به‌سمت آند، ξ_a و سمت کاتد، ξ_c محاسبه نمود. نسبت استوکیومتری به‌صورت نسبت مقدار واکنش‌دهنده ورودی به مقدار واکنش‌دهنده مورد نیاز واکنش الکتروشیمیایی برای تولید مشخص چگالی جریان مرجع، I_{ref} تعریف می‌شود. برای شرط مرزی حرارتی ورودی‌های گاز آند و کاتد، شرط مرزی درجه حرارت ثابت به‌کار برده می‌شود.

برای خروجی کانال‌های آند و کاتد، شرط مرزی فشار خروجی استفاده می‌شود. در شرط مرزی فشار خروجی، فشار استاتیک به‌صورت نسبی در مرز خروجی وارد می‌شود. جریان در مرزهای خروجی به‌صورت توسعه یافته یا شار صفر درنظر گرفته می‌شود:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial n} = 0 \quad , \quad \frac{\partial C^i}{\partial n} = 0 \quad , \quad \frac{\partial \varphi_e}{\partial n} = 0 \quad , \quad \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \qquad (۲۸)$$

برای دیواره‌های کانال و دیواره پین‌های موجود در کانال کاتد، شرط عدم لغزش برای سرعت و شرط شار صفر برای دیگر متغیرها، به استثناء شرط دمایی در مرز کانال‌ها، به‌کار می‌رود. دمای دیواره‌های کانال‌ها برابر دمای عملکرد پیل فرض می‌شود:

$$\frac{\partial P}{\partial n} = 0 \quad , \quad \frac{\partial C^i}{\partial n} = 0 \quad , \quad \frac{\partial \varphi_e}{\partial n} = 0 \qquad (۲۹)$$

در ناحیه مرز جامد، شرایط مرزی آدیاباتیک در تمام مرزهای دامنه به‌کار می‌رود که به معنی این است که انتقال انرژی تنها در فاز گاز رخ می‌دهد. در دیواره ناحیه جمع کننده جریان الکتریکی آند، ولتاژ صفر و برای قسمت کاتد ولتاژی نزدیکی به ولتاژ مدار باز نرنست[۶] اختصاص می‌یابد.

۲-۴- روش حل عددی و شبکه‌بندی مدل

همان‌طور که در نمودار شکل (۲) برای آشنایی با گام‌های حل مسأله نمایش داده شده است، یک روند تکراری برای حل دستگاه معادلات هم‌بسته در کل دامنه با استفاده از الگوریتم SIMPLE، انتخاب شده است. مجموعه‌ی معادلات حاکم که در قسمت قبل اشاره شد به‌صورت عددی با استفاده از نرم‌افزار تجاری FLUENT نسخه ۱۴ حل شده است. برای حل معادله پتانسیل الکتریکی و همچنین محاسبات الکتروشیمیایی داخل پیل، از ماژول[۷] پیل سوختی که به‌صورت یک برنامه الحاقی به این نرم افزار اضافه شده است، استفاده شده است. این نرم‌افزار با استفاده از روش حل عددی حجم محدود، مدل ریاضی را حل می‌نماید. برای سرعت بخشیدن به همگرایی، یک روش جبری چند شبکه استفاده می‌شود. سپس راه حل در بیش از یک سطح شبکه برای از بین بردن خطاهای فرکانسی بالا و پایین محاسبه می‌شود. برای تدوین روش چند شبکه، چرخه F با روش تثبیت گرادیان دو مزدوج[۸] استفاده شده است. طرح چرخه F، تکرار شامل تمام سطوح شبکه است، در این طرح تکرار سطح شبکه به بیش از دو سطح شبکه درشت می‌رساند و در ادامه به سطح شبکه خوب و بالاتر ارتقاء می‌دهد تا اینکه آن را به بهترین شبکه برساند، اساساً یک چرخه چند شبکه F ترکیبی از چرخه V و W است و حداکثر تعداد چرخه‌ها ۶۰ تعیین می‌شود. فاکتورهای مناسب زیر تخفیف نیز برای هر متغیربه‌کار رفته است. متغیرهای بکار رفته در مدل‌سازی نیز در جدول ۲ ارائه شده است.

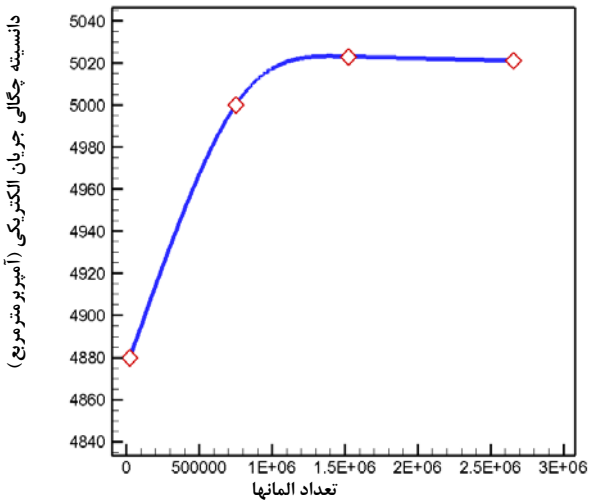
برای بهبود نتیجه حل معادلات، کاهش خطای برشی و کاهش هزینه محاسباتی، با درنظر گرفتن یک مدل سه بعدی از مسأله، در نواحی ورودی و خروجی لایه پخش گاز، لایه کاتالیست ابتدا و انتهای کانال و نواحی نزدیک به پین‌های شش گوش تا جایی که ممکن بوده شبکه ریز تر شده است. مطالعه استقلال از شبکه مدل با افزایش چگالی مش انجام شده است و نتایج به‌دست آمده برای چگالی جریان میانگین مقایسه شده است. استقلال از شبکه برای چگالی جریان میانگین در شکل (۳) نشان داده شده است. در نهایت تعداد شبکه، ۱۵۲۴۶۰۰ برای شبکه‌بندی انتخاب شده است. خصوصیات شبکه‌بندی و تعداد شبکه در جدول ۳ به تفکیک هر ناحیه نشان داده شده است.این شبکه‌بندی در شکل (۴) نمایش داده شده است.

جدول۲- متغیرهای شبیه‌سازی پیل سوختی

متغیرها	نماد	واحد	مقدار
ارتفاع کانال ورودی	H	mm	۱/۵
طول کانال ورودی	L	mm	۶۰
عرض کانال ورودی	W	mm	۱۸
ضخامت لایه جمع کننده جریان	t_{cl}	mm	۱
ضخامت لایه پخش گاز	t_{gdl}	µm	۲۶۰
ضخامت لایه کاتالیست	t_{cat}	µm	۱۰
ضخامت غشاء (نافیون ۱۱۲)	t_{mem}	µm	۲۳۰
اندازه پین‌های شش ضلعی منتظم	L	mm	۱/۵
فاصله طولی بین پین‌ها	W	mm	۱/۵
فاصله عرضی بین پین‌ها	H	mm	۱/۳
ثابت جهانی گازها	R	J/mol.K	۸/۳۱۴
ثابت فارادی	F	C/mol	۹۶۴۸۷
نرخ استوکیومتری جریان هیدروژن/اکسیژن	ξ_{H_2} / ξ_{O_2}	-	۲/۸ / ۳/۰
مساحت فعال × چگالی جریان مرجع آند/کاتد	$aj_{0,a}^{ref}$ / $aj_{0,c}^{ref}$	A/m^3	$(۵\times۱۰^{۸})/(۱\times۱۰^{۲})$
دمای عملکرد پیل سوختی	T	K	۳۵۳
غلظت کلی آند/کاتد	c_a^{tot} / c_c^{tot}	mol/m^3	۶۶/۸۱۷ / ۱۷/۰۸
جریان الکتریکی مرجع	I_{ref}	A/m^2	$۱۰^{۴}$
فشار ورودی آند/کاتد	P_{H_2} / P_{O_2}	Pa	$(۳\times۱۰^{۵})/(۵\times۱۰^{۵})$
عدد رینولدز	Re		۱۹۱
کسر مولی هیدروژن /اکسیژن ورودی	X_{H_2} / X_{O_2}	-	۰/۸۴۴۱/۰/۱۹
کسر مولی بخار آب ورودی در آند و کاتد	X_{H_2O}	-	۰/۱۵۵۹
تخلخل غشاء	ε_m	-	۰/۲۸
تخلخل لایه کاتالیست	ε_{cat}	-	۰/۲۸
تخلخل لایه پخش گاز	ε_{gdl}	-	۰/۳/۰/۴/۰/۵
سرعت ورودی کانال آند/کاتد	u_{H_2} / u_{O_2}	m/s	۰/۰۱/۰/۰۱
ضریب انتقال آند/کاتد	α_a / α_c	-	۱/۱
کسر مولی مرجع هیدروژن/اکسیژن	$X_{H_2,ref}$ / $X_{O_2,ref}$	-	۰/۵۵/۰/۰۲
ضریب پخش هیدروژن/اکسیژن در کانال	D_{H_2} / D_{O_2}	m^2/s	$(۹/۱۵\times۱۰^{-۶})/(۲/۲\times۱۰^{-۶})$
ضریب پخش بخار آب در کانال		m^2/s	(۳×۱۰^{-۵})
ثابت هنری برای اکسیژن در غشاء		atm/cm^3	(۲×۱۰^{۵})
ضریب هدایت حرارتی موثر غشاء		W/m.K	۰/۳۴
ضریب هدایت حرارتی هیدروژن/اکسیژن		W/m.K	۰/۲۰۴۰/۰/۰۲۹۶
ضریب هدایت حرارتی مؤثر جمع کننده جریان		W/m.K	۱۲۰

جدول ۳- خصوصیات شبکه‌بندی حل

دامنه محاسباتی	نودها	المانها
لایه کاتالیست آند	۲۴۵۴۱۰	۲۱۷۸۰۰
لایه کاتالیست کاتد	۲۴۵۴۱۰	۲۱۷۸۰۰
کانال آند	۱۳۹۱۹۵	۱۱۶۱۶۰
کانال کاتد	۹۹۸۲۷	۷۷۷۶۰
جمع کننده جریان آند	۱۲۹۰۱۰	۱۰۱۶۴۰
جمع کننده جریان کاتد	۱۷۳۳۶۲	۱۴۰۰۴۰
لایه پخش گاز آند	۲۴۵۴۱۰	۲۱۷۸۰۰
لایه پخش گاز کاتد	۲۴۵۴۱۰	۲۱۷۸۰۰
غشاء پلیمری	۲۴۵۴۱۰	۲۱۷۸۰۰
کل دامنه محاسباتی	۱۷۶۸۴۴۴	۱۵۲۴۶۰۰



شکل ۳- استقلال از شبکه برای چگالی جریان میانگین

۳- نتایج

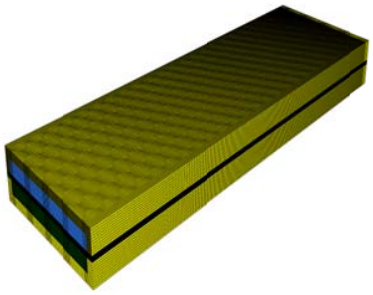
۳-۱- صحه‌گذاری نتایج

به‌منظور صحه‌گذاری بر نتایج (به‌خصوص مدل الکتروشیمیایی پیل و پدیده‌های انتقال در نواحی مختلف پیل)، منحنی قطبش پیل برای کانال ساده با نتایج تجربی تیکنالی [۲۳] که آن هم با کانال ساده است، مقایسه شده است.

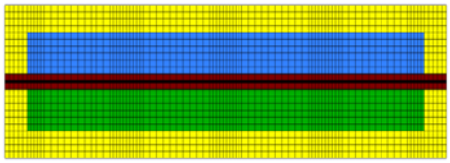
منحنی‌های قطبش به‌دست آمده از شبیه‌سازی عددی و تجربی در شکل (۵- الف) نشان داده شده است. نتایج عددی مدل حاضر با نتایج تجربی برای کانال ساده در دانسیته جریان‌های پایین و متوسط توافق بسیار خوبی دارد؛ ولی در چگالی‌های جریان بالا، مدل تک فاز حاضر با نتایج تجربی اختلاف دارد. عمده اختلاف در دانسیته جریان‌های بالا که افت‌های غلظتی در پیل اهمیت می‌یابند، مربوط به میزان آب مایع بوده که باعث شناوری لایه پخش گاز شده و انتقال گازهای واکنش‌گر به لایه کاتالیست را مختل می‌کند. باید توجه داشت که به‌علت پیچیدگی زیاد بحث تغییر فاز آب در پیل سوختی، در این مقاله فرض شد که آب تغییر فاز نداده و به‌صورت بخار باقی می‌ماند که البته با توجه به شرایط عملکردی پیل فرض معقولی است.

همچنین، به‌منظور صحه‌گذاری نتایج با میدان پینی، منحنی قطبش مدل حاضر با منحنی قطبش مدل لیو و همکاران [۲۴] در شرایط مشابه مقایسه شده است. مدل عددی لیو و همکاران میدان جریانی شامل سه مانع مستطیلی شکل (به مانند سه پین پشت سر هم) در کانال کاتد است. مدل ساخته شده به‌منظور صحه‌گذاری نیز شامل میدان جریان با سه پین شش گوش بوده که پشت سر هم قرار می‌گیرند.

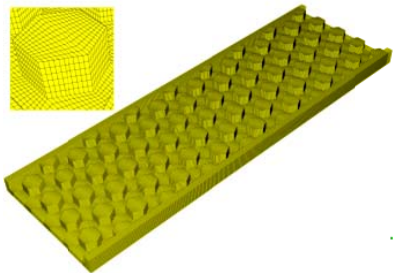
لیو و همکاران به شبیه‌سازی پیل در دو حالت حضور آب مایع و عدم حضور آب مایع در پیل پرداخته‌اند و نتایج را با



(الف)



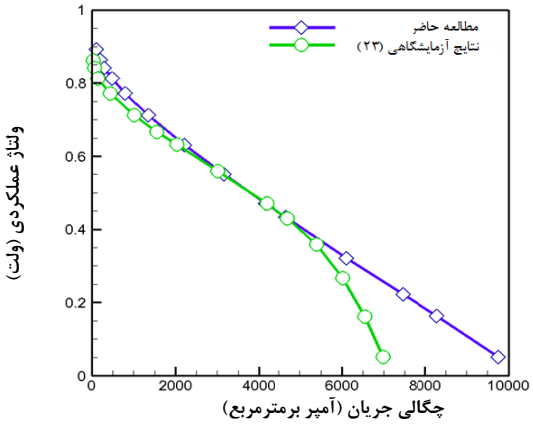
(ب)



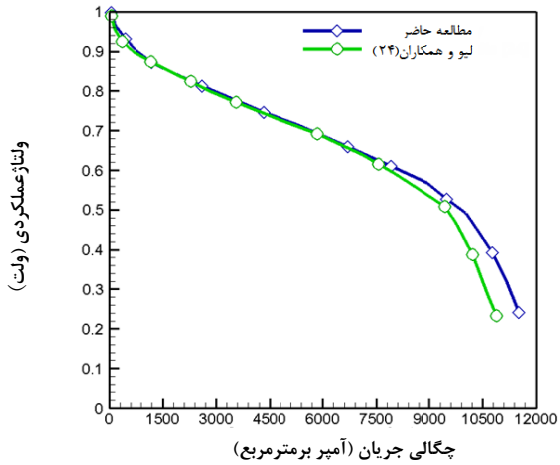
(ج)

شکل ۴- الف) شبکه‌بندی سه بعدی مدل پیل سوختی غشاء پلیمری، ب) شبکه‌بندی نما از جلو (صفحه xy) ج) شبکه‌بندی آرایش لانه‌زنبوری داخل کانال کاتد

یکدیگر مقایسه کرده‌اند. در این مقاله نیز به‌دلیل انجام مدل‌سازی به‌صورت تک فاز، مقایسه نتایج برای وضعیتی که آب مایع در مدل لیو و همکاران درنظر گرفته نشده است، صورت گرفته است. منحنی‌های قطبش در شکل (۵- ب) نشان داده شده است. نتایج، توافق بسیار خوبی با هم دارند. علت اختلاف در دانسیته جریان‌های بالا است؛ زیرا در این ناحیه عمده افت‌ها ناشی از مقاومت انتقال جرم (افت‌های غلظتی) بوده و همچنین باید توجه شود که شکل پین‌ها در دو مدل متفاوت است. نکته قابل‌توجه، بهبود منحنی عملکرد پیل در دانسیته جریان‌های بالا با پین‌های شش گوش نسبت به پین‌های چهارگوش است.



(الف)



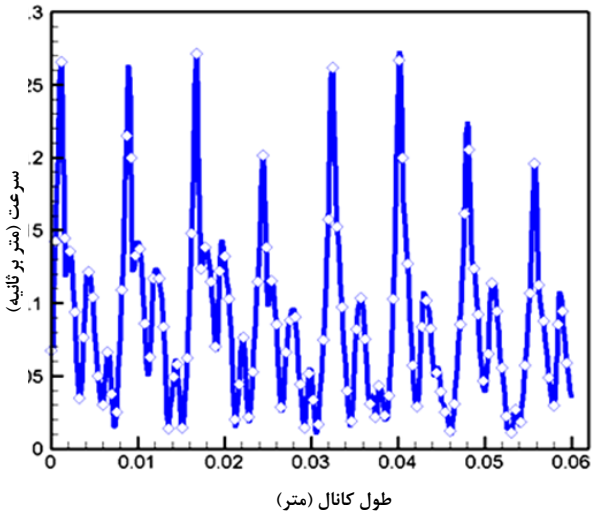
(ب)

شکل ۵- الف) مقایسه منحنی قطبش تجربی [۲۳] و حل عددی مدل حاضر، ب) مقایسه منحنی قطبش میدان جریان مسدود شده و حل عددی مدل حاضر [۲۴]

باید توجه داشت، علت تفاوت در منحنی‌های قطبش حاصل از نتایج مدل حاضر در شکل‌های (۵- الف) و (۵- ب)، شبیه‌سازی مدل حاضر به‌صورت مشابه با هر کدام از مدل‌های تجربی و عددی (به صورت مجزا با هر کدام از مدل‌ها) و در شرایط عملکردی مشابه با هر کدام از آنها است.

۳-۲- توزیع سرعت و افت فشار

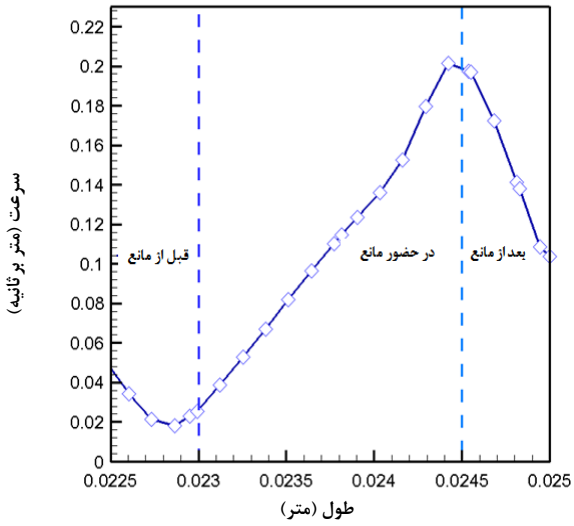
طرح لانه‌زنبوری در کانال کاتد، به منظور افزایش سرعت سیالدر کانال جریان بدون استفاده از منبع انرژی خارجی است. افزایش سرعت کانال منجر به توزیع بهتر واکنش‌دهنده‌ها و



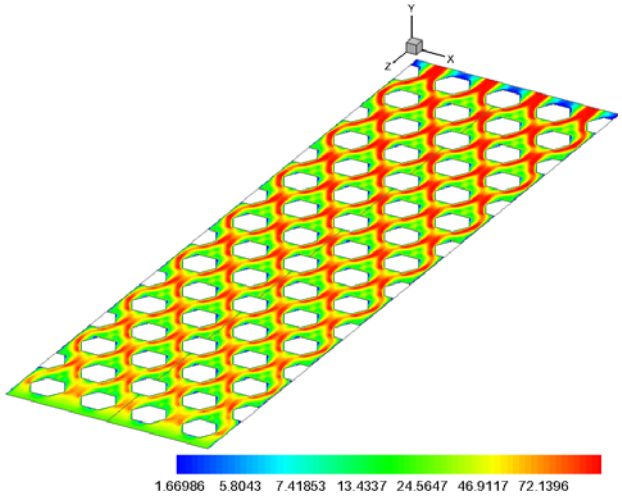
شکل ۶- توزیع سرعت در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد

در نتیجه انتقال بهتر آنها به لایه پخش گاز و افزایش عمده غلظت اکسیژن در لایه کاتالیست کاتد خواهد شد. شکل (۶) توزیع سرعت را در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست نشان می‌دهد. نزدیک به ورودی، جریان توسعه‌یافته نیست، در ادامه در نواحی ورودی نزدیک پین‌ها سرعت افزایش می‌یابد. وجود پین‌ها باعث می‌شود در نواحی با پین، سرعت جریان گاز افزایش یابد. شکل (۷) نمایی دقیق‌تر از قبل، بعد و در حضور یک پین را ارائه می‌دهد. قبل از پین به‌علت وجود گردابه پشت پین، سرعت کمی کاهش می‌یابد و بعد از پین نیز به‌علت وجود گردابه سرعت دوباره شروع به کاهش می‌کند. در شکل (۸) توزیع دوبعدی سرعت در کانال کاتد مشاهده می‌شود. در نواحی گلوگاهی بین دو پین سرعت افزایش می‌یابد. اصولاً در این نوع میدان‌های جریان سرعت نفوذ اهمیت خاصی دارد. در شکل (۹) خطوط جریان به‌صورت دو و سه بعدی در اطراف پین‌ها مشاهده می‌شود. مطلب قابل‌توجه در این توزیع‌ها وجود دو گردابه در پشت پین‌ها است که علت آن به وجود ناحیه کم فشار پشت مربوط است و باید در طراحی‌ها تا حد ممکن این گردابه‌ها با ایجاد پین و افزایش فشار از بین بروند.

درنظر گرفتن متغیر افت فشار در سمت کاتد عاملی کلیدی در رابطه با بازده کلی سیستم پیل سوختی است. این عامل در

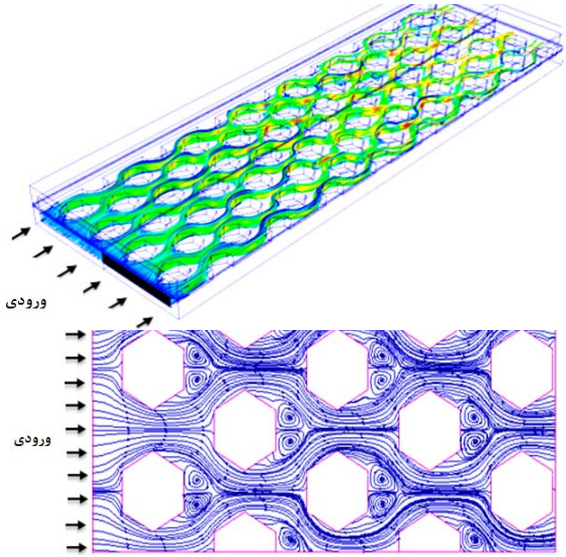


شکل ۷- توزیع سرعت قبل، بعد و در حضور مانع

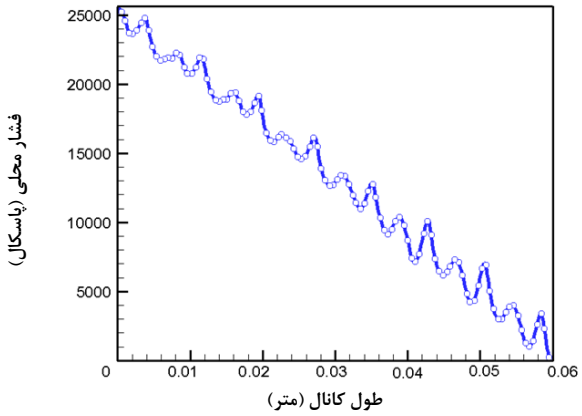


شکل ۸- توزیع دو بعدی سرعت در کانال کاتد

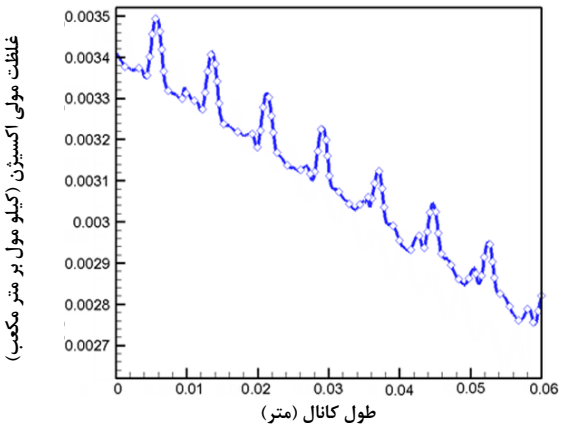
شکل (۱۰) مورد بررسی قرار گرفته است که در آن افت فشار در کانال سمت کاتد گزارش شده است. به‌علت مصرف گاز اکسیژن در طول کانال کاتد و اصطکاک بین اکسیژن و بدنه کانال، فشار گاز کانال کاتد افت می‌کند. همچنین وجود موانع شش گوش در مسیر جریان نیز باعث افت فشار می‌شود و در نهایت افت فشار کل، توان اتلافی یا به عبارتی توان پارازیتی سیستم را بالا می‌برد. شکل نوسانی تغییرات فشار نیز ناشی از وجود همین پین‌ها است. در مجموع بایستی بین متغیر افت فشار و عملکرد پیل سوختی یک تعادل برقرار شود تا بازده کلی سیستم پیل سوختی افزایش یابد.



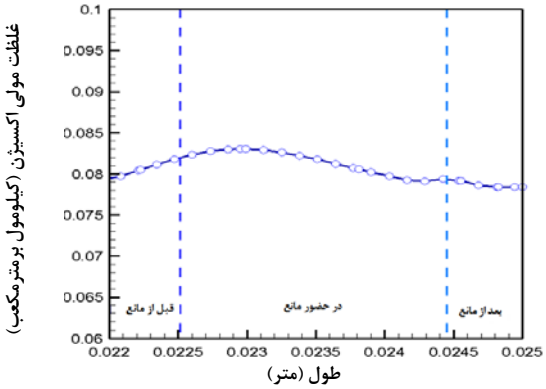
شکل ۹- خطوط جریان سه و دو بعدی جریان در کانال کاتد



شکل ۱۰- فشارمحلی در طول کانال جریان کاتد



شکل ۱۱- غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت

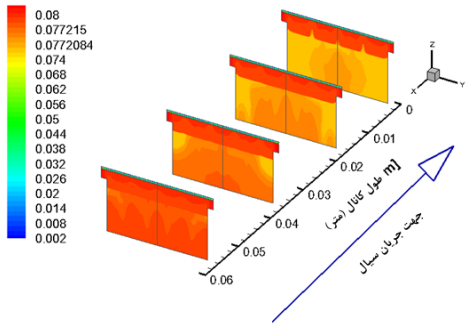


شکل ۱۲- غلظت اکسیژن در داخل کانال، اطراف یکی از پین‌ها برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت

۳-۳- توزیع واکنش‌دهنده‌ها و دما

توزیع اکسیژن در لایه پخش گاز و لایه کاتالیست کاتد به‌منظور درک مناسب طراحی کانال‌های جریان برای حد توزیع واکنشگرها (به‌خصوص اکسیژن) متغیری مهم است. در شکل (۱۱) منحنی غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد برای میدان جریان لانه زنبوری نشان داده شده است. آرایش پین‌ها در کانال کاتد باعث موجی شکل شدن نمودار غلظت اکسیژن در طول کانال می‌شود. هرچه نقاط قله در نمودار غلظت اکسیژن به‌هم نزدیک‌تر شود، به‌علت افزایش غلظت اکسیژن پیل سوختی عملکرد بهتری دارد. غلظت اکسیژن قبل از پین با افزایش سرعت در جهت نفوذ به لایه پخش گاز با افزایش نفوذ بیشتر گاز افزایش و سپس بعد از پین به‌علت تشکیل گردابه و ناحیه کم فشار پشت پین به مقدار اندکی کاهش می‌یابد؛ ولی در طول کانال به‌طور متوسط غلظت اکسیژن به‌دلیل مصرف در لایه کاتالیست دچار کاهش می‌شود.

در شکل (۱۲) منحنی غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد در اطراف یکی از پین‌ها برای ولتاژ پایین نشان داده شده است. غلظت اکسیژن قبل از پین به‌علت نفوذ بیشتر گاز به لایه پخش گاز اندکی افزایش و سپس به‌طور ملایم زیر پین کاهش می‌یابد و ثابت می‌شود. به عبارت دیگر، قبل از پین به‌علت برخورد جریان گاز به یک مانع که در واقع همان پین است، سرعت عمود بر جریان که به‌سمت لایه

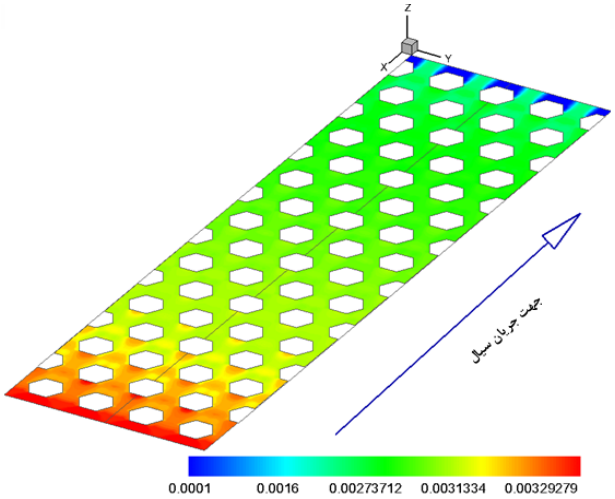


شکل ۱۳- توزیع غلظت اکسیژن در ناحیهMEA در طول کانال کاتد برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت

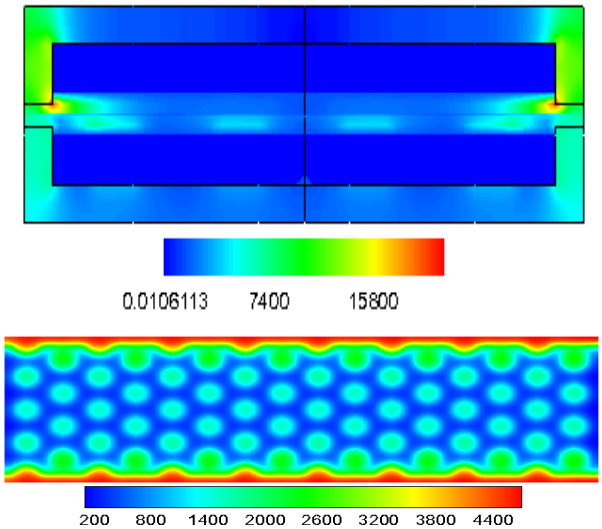
پخش گاز کاتد است، افزایش یافته و بنابراین سرعت نفوذ به لایه پخش گاز افزایش می‌یابد. اما در پشت مانع به‌علت تشکیل یک ناحیه کم فشار، گردابه و جریان برگشتی تشکیل می‌شود و با کاهش سرعت عمودی در ناحیه‌ای کوچک، نفوذ به لایه پخش گاز نیز در این ناحیه کم می‌شود.

اثر طراحی کانال جریان بر توزیع اکسیژن نیز که در شکل (۱۳) در ناحیه مجموعه الکترود – غشاء[9] برای مقاطع مختلف غلظت اکسیژن نشان داده شده است، به‌وضوح قابل بررسی است. برای این طراحی، توزیع یکنواخت‌تر اکسیژن در طول کانال کاتد نسبت به کانال‌های ساده مشاهده می‌شود. توزیع یکنواخت‌تر اکسیژن منجر به توزیع یکنواخت‌تر واکنش‌های الکتروشیمیایی در داخل پیل می‌شود. همچنین در شکل (۱۴) توزیع غلظت اکسیژن در صفحه‌ای از کانال کاتد نشان داده شده است. برای این طراحی، مشاهده می‌شود که توزیع اکسیژن در فضای بین پین‌ها به‌طور یکنواخت صورت گرفته است و اکسیژن به‌طور مناسب به لایه پخش گاز و سپس به لایه کاتالیست می‌رسد.

طبق رابطه (۱۰)، غلظت اکسیژن بر دانسیته جریان تأثیر دارد و توزیع یکنواخت اکسیژن منجر به توزیع یکنواخت دانسیته جریان می‌شود. شکل (۱۵) توزیع چگالی جریان الکتریکی را در دو نمای طول کانال و سطح مقطع عرضی از پیل نشان می‌دهد. به تبع توزیع یکنواخت اکسیژن، می‌توان در این تصویر توزیع نسبتاً یکنواختی را مشاهده نمود. یکنواختی تولید چگالی جریان به شرایط پایداری

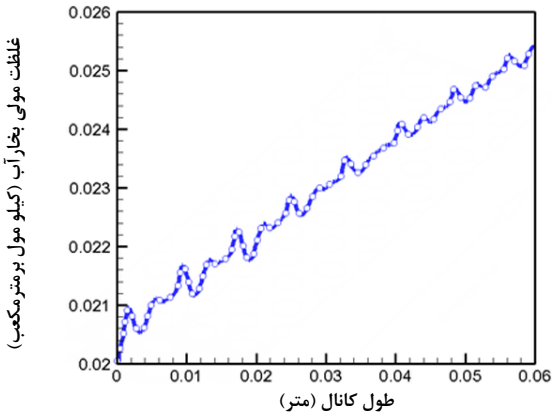


شکل ۱۴- توزیع غلظت اکسیژن در صفحه‌ای در طول کانال کاتد برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت

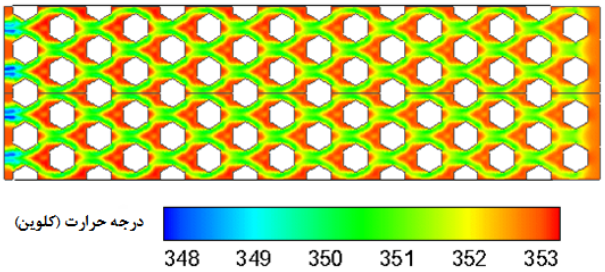


شکل ۱۵- توزیع چگالی جریان (برحسب آمپر بر سانتی‌مترمربع) در جمع‌کننده جریان الکتریکی در دو نما

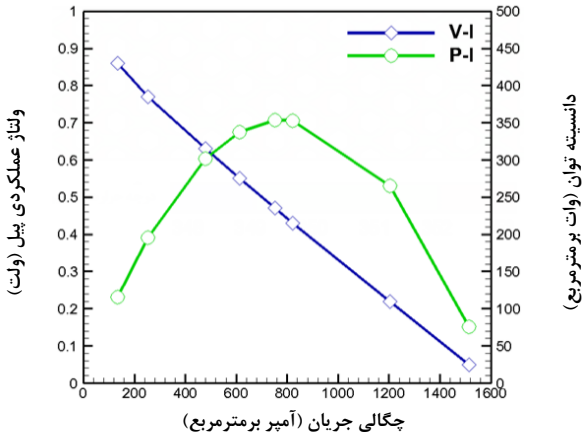
پیل کمک زیادی می‌کند. شکل (۱۶) منحنی غلظت بخار آب تولیدی در سمت کاتد در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست طول کانال برای ولتاژ پایین نشان داده شده است. غلظت بخار آب به‌طور پیوسته در طول کانال افزایش می‌یابد و علت آن به وضوح به دسترسی لایه کاتالیست به غلظت اکسیژن است که باعث افزایش واکنش‌ها و در نهایت افزایش محصول بخار آب تولیدی می‌شود.



شکل ۱۶- غلظت بخار آب در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت



شکل ۱۷- توزیع دمایی در صفحه‌ای در طول کانال کاتد برای ولتاژ ۰/۴۳ ولت



شکل ۱۸- منحنی قطبش و چگالی توان

شکل (۱۷) توزیع دما را در صفحه‌ای از کانال کاتد، برای این طراحی نشان می‌دهد، اختلاف دمای بیشینه و کمینه حدود ۵ درجه کلوین است. مشخص است که در پشت پین‌ها به‌دلیل اصطکاک بیشتر و تولید گرما، دمای بیشتری نمایان می‌شود. نباید فراموش کرد که نقاط داغ موضعی تا حدودی عملکرد پیل را کاهش می‌دهد و باید کنترل شود تا موجب خشکی کامل غشاء و از کار افتادن پیل نشود. هرچه یکنواختی توزیع دمایی بیشتر باشد عملکرد پیل بهتر خواهد شد.

۳-۴- عملکرد پیل سوختی

به منظور بررسی عملکرد این طرح، منحنی قطبش و چگالی توان گزارش شده است. منحنی قطبش اطلاعاتی در مورد تلفات ولتاژ به‌عنوان تابعی از چگالی جریان ارائه می‌کند. برای چگالی‌های جریان پایین تلفات عمدتاً ناشی از تلفات فعال‌سازی است؛ درحالی‌که برای مقادیر چگالی جریان بالاتر محدودیت انتقال جرم عامل اصلی اتلاف است. در شکل (۱۸) منحنی قطبش و منحنی چگالی توان نشان داده شده است. در چگالی‌های جریان بالا، محدودیت‌های انتقال جرم به لایه کاتالیست تأثیر زیادی بر تولید چگالی جریان می‌گذارد. پین‌های موجود در کانال سرعت سیال را افزایش می‌دهد و نیروهای فشاری وارد به گاز برای نفوذ به لایه‌های پخش گاز بیشتر می‌شود. آن گونه که از منحنی مشخص است حداکثر تولید توان، برای چگالی جریان بالاتر نیست؛ بلکه منحنی نشان می‌دهد که نقطه حداکثر برای یک مقدار متوسط ولتاژ در حدود ۰/۴۳ ولت است؛ بنابراین لازم نیست ارزیابی‌ها برای ولتاژ پایین‌تر صورت گیرد زیرا تنها عملکرد توانی کل پیل اهمیت دارد.

۴- نتیجه‌گیری

عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری به شدت وابسته به طراحی میدان جریان در صفحات قطبی است و ارائه طرحی مناسب و بررسی آن لازم و ضروری است. در این مطالعه، یک مدل عددی سه بعدی، حالت دائم و تک دامنه‌ای به منظور بررسی میدان جریان لانه‌زنبوری در کانال کاتد مورد استفاده قرار گرفته است. مدل اجازه بررسی جریان، توزیع سرعت، فشار، انتقال و

توزیع اکسیژن، چگالی جریان و عملکرد پیل را می‌دهد. نتایج نشان می‌دهند قبل از پین به‌علت وجود گردابه پشت پین کمی سرعت کاهش می‌یابد؛ اما با حضور پین سرعت شروع به افزایش می‌کند و بعد از پین نیز به‌علت وجود گردابه سرعت دوباره شروع به کاهش می‌کند. وجود گردابه‌های پشت پین‌ها به‌علت وجود ناحیه کم فشار پشت پین‌ها باید در طراحی‌ها مورد توجه قرار گیرد و تا حد ممکن این گردابه‌ها با ایجاد پین و افزایش فشار از بین بروند. همچنین آرایش پین‌ها در کانال کاتد باعث موجی شکل شدن نمودار غلظت اکسیژن در طول کانال می‌شود وبا نزدیک شدن نقاط قله به هم در نمودار غلظت اکسیژن به‌علت افزایش غلظت اکسیژن پیل سوختی عملکرد بهتری دارد. غلظت اکسیژن قبل از پین به‌علت نفوذ بیشتر گاز به لایه پخش گاز افزایش می‌یابد و سپس بعد از پین به‌علت تشکیل گردابه و ناحیه کم فشار پشت پین به مقدار اندکی کاهش می‌یابد. علاوه بر افزایش غلظت اکسیژن، برای این طراحی مشاهده می‌شود که توزیع اکسیژن در فضای بین پین‌ها به‌طور یکنواخت صورت گرفته است و اکسیژن به‌طور مناسب به لایه پخش گاز و سپس به لایه کاتالیست می‌رسد. توزیع یکنواخت‌تر اکسیژن منجر به توزیع یکنواخت‌تر واکنش‌های الکتروشیمیایی و در نتیجه دانسیته جریان در داخل پیل می‌شود. همچنین، وجود پین‌ها باعث افزایش دانسیته جریان پیل شده، اما حداکثر تولید توان برای چگالی جریان بالاتر نیست؛ بلکه نقطه حداکثر برای یک مقدار متوسط ولتاژ در حدود ۰/۴۳ ولت اتفاق می‌افتد؛ بنابراین لازم نیست ارزیابی‌ها برای ولتاژ پایین‌تر صورت گیرد، زیرا تنها عملکرد توانی کل پیل اهمیت دارد.

۵- تشکر و قدردانی

نویسندگان از کمک‌ها و حمایت‌های سازمان انرژی‌های نو ایران تشکر و قدردانی می‌کنند.

واژه‌نامه

1. Carnot cycle
2. Stoichiometry
3. Darcy
4. Butler-Volmer equation
5. Electroosmotic Drag
6. Nernst
7. module
8. BCGSTAB
9. Membarne Electrode Assembly (MEA)

مراجع

1. Corbo, P., Migliardini, G., and Veneri, O., "Experimental Analysis of a 20 k We PEM Fuel Cell System in Dynamic Conditions Representative of Automotive Applications", *Energy Conversion and Management*, Vol. 49, pp. 2477-2491, 2008.
2. Ramirez, D., Beites, L. F., Blazquez, F., and Ballesteros, J. C., "Distributed Generation System with PEM Fuel Cell for Electrical Power Quality Improvement", *Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33, pp. 4433–4444, 2008.
3. Wang, Y., "Fundamental Models for Fuel Cell Engineering", *Chemical Reviews,* Vol. 4, pp. 4727–4766, 2004.
4. Yuan, W., Tang, Y., Pan, M., Li, Z., and Tang, B., "Model Prediction of Effects of Operating Parameters on Proton Exchange Membrane Fuel Cell Performance", *Journal of Renewable Energy,* Vol. 35, pp. 656–666, 2010.
5. Sun, L., Ooshuizen, P. H., and Mc Auley, K. B.,"A Numerical Study of Channel-to-Channel Flow Cross-Over Through the Gas Diffusion Layer in a PEM-Fuel-Cell Flow System using a Serpentine Channel with a Trapezoidal Cross-Sectionalshape", *International Journal of Thermal Science*, Vol. 45, pp. 1021-1026, 2006.
6. Jeon, D. H., Greenway, S., Shimpalee, S., and Van Zee, J. W., "The Effect of Serpentine Flow-Field Designs on PEM Fuel Cell Performance", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33, pp. 1052-1066, 2008.
7. Zhang, G., Guo, L., Ma, B., and Liu, H., "Comparison of Current Distributions in Proton Exchange Membrane Fuel Cells with Interdigitated and Serpentine Flow Fields", *Journal of Power Sources*, Vol. 188, pp. 213-219, 2009.
8. Hontanon, E., Escudero, M. J., Bautista, C., Garcia-Ybarra, P. L., and Daza, L., "Optimisation of Flow-field in polymer electrolyte membrane fuel cellsusing

Computational Fluid Dynamics techniques", *Journal of Power Sources*, Vol. 86, 363-368, 2000.
9. Lobato, J., Canizares, P., Rodrigo, M. A., Pinar, F. J., Mena, E., and Ubeda, D., "Three-Dimensional Model of a 50cm^2 High Temperature PEM Fuel Cell, Study of the Flow Channel Geometry Influence", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35(11), pp. 5510-5520, 2010.
10. Kumar, A., and Reddy, R. G., "Modeling of Polymer Electrolyte membrane Fuel Cell with Metal Foam in the Flow-Field of The bipolar/end Plates", *Journal of Power Sources*, Vol. 114(1), pp. 54-62, 2003.
11. Tang, Y., Yuan, W., Pan, M., and Wan, S., "Feasibility Study of Porous copper Fiber Sintered Felt: A Novel Porous Flow Field in Proton exchange Membrane Fuel Cells", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35(18), 9661-9677, 2010.
12. Spernjak, D., Prasad, A. K., and Advani, S. G., "In Situ Comparison of Water Content and Dynamics in Parallel, Single serpentine and Interdigitated Flow Fields of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 195, pp. 3553-3568, 2010.
13. Kumar, A., and Reddy, G., "Effect of Gas Flow-Field Design in the Bipolar/End Plates on the Steady and Transient State Performance of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 155, pp. 264-271, 2006.
14. Kuo, J. K., and Chen, C. K., "The Effects of Buoyancy on the Performance of a PEM Fuel Cell with a Wave-Like Gas Flow Channel Design by Numerical Investigation", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 50, pp. 4166–4179, 2007.
15. Roshandel, R., Arbabi, F., and Karimi Moghaddam, G., "Simulation of an Innovative Fow-Feld Design Based on a Bio Inspired Pattern for PEM Fuel Cells", *Renewable Energy*, Vol. 41, pp. 86-95, 2012.
16. Khazaee, I., Ghazikhani, M., and Nasr Esfahani, M., "Effect of Gas Diffusion Layer and Membrane Properties in an Annular Proton Exchange Membrane Fuel Fell", *Applied Surface Science*, Vol. 258, pp. 2141-2148, 2012.
17. Yang, Y. T., Tsai, K. T., and Chen, C. K., "The Effects of the PEM Fuel Cell Performance with the Waved Flow Channels", *Journal of Applied Mathematics*, Vol. 2013, pp. 1-14, 2013.
18. Abdou, M., Andrin, P., Mukesh, K., and Bisaria, "Flow Field Designs", Us Patent Application, pp. 429, 2002.
19. Afshari, E., and Jazayeri, S. A., "Analyses of Heat and Water Transport Interactions in a Proton Exchange Membrane Fuel Cell", *Journal of Power Sources*, Vol. 194, pp. 423–432, 2009.
20. Afshari, E., and Jazayeri, S. A., "Effects of the Cell Thermal Behavior and Water Phase Change on a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Performance", *Energy Conversion and Management*, Vol. 51, pp. 655–662, 2010.
21. Meredith, R. E. and Tobias, C. W., "Conduction in Heterogeneous Systems", *Advances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering*, Vol. 2 , pp. 15-47, 1962
22. Motupally, S., Becker, A. J., and Weidner, J. W., "Diffusion of Water in Nafion 115 Membranes", *Journal of the Electrochmical Society*, Vol. 147, pp. 3171–3177, 2000.
23. Ticianelli, E. A., Derouin, C. R., Redondo, A., and Srinivasan, S., "Methods to Advance Technology of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of the Electro Chmical Society*, Vol. 135, pp. 2209–2214, 1988.
24. Liu, H. C, Yan, W. M., Soong, C. Y., and Chen, F., "Effects of Baffle-Blocked Flow Channel on Reactant Transport and Cell Performance of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell", *Journal of Power Sources*, Vol. 142, pp. 125–133, 2005.