

مدلسازی سه بعدی پیل سوختی PEM با کانال جریان مارپیچی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی

امیر حسین ریگی فیروزآبادی^۱، میثم محمودی^۲

^۱ گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه ولایت، ایرانشهر

^۲ گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه ولایت، ایرانشهر، m.mahmoudi@velayat.ac.ir

چکیده

در این مطالعه عملکرد پیل سوختی PEM با کانال مارپیچی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی و تاثیر پارامترهای مختلف روی آن بررسی شده است. کلیه اجزای این پیل سوختی تشریح و مدلسازی شده است و برای پیل سوختی به کار گرفته شده یک تحلیل الکتروشیمیایی مجزا انجام شده است. در ادامه مطالعه پارامترهای مختلف بر راندمان پیل، مورد مطالعه قرار گرفته است. در ادامه مطالعه تاثیر پارامترهای سیستم اشاره شده، تاثیر دما، فشار کاری پیل و همچنین نسبت نرخ هوا به سوخت ورودی پیل سوختی بر روی بازده و توان صورت گرفته است. نتایج نشانگر افزایش بازده پیل سوختی و توان خروجی آن با افزایش بهره وری سوخت، چگالی جریان و ولتاژ واقعی پیل سوختی است.

واژه های کلیدی

پیل سوختی، مدلسازی، دینامیک سیالات محاسباتی، جریان مارپیچی

مقدمه

مشاهده و اندازه گیری پدیده های انتقال گونه های شیمیایی در پیل های سوختی PEM توسط آزمایش ها دشوار است. مدلسازی محاسباتی یک رویکرد جایگزین خوب در مطالعه عملکرد پیل سوختی مربوط به فرآیندهای انتقال و واکنش های الکتروشیمیایی است. در اوایل دهه ۱۹۹۰، اکثر مدل ها یک بعدی، همدم و متمرکز بر الکتروود، لایه کاتالیزور و غشاء بودند. در اواخر دهه ۱۹۹۰، مدل ها پیشرفته تر بودند و شامل جریان چند بعدی (D=۲ یا D=۳) و چند فاز بودند. با این حال، یک مدل کامل که تمام جنبه های انتقال گونه ها و واکنش های الکتروشیمیایی را در نظر می گیرد هنوز به دست نیامده است. در زیر نشان داده شده است مروری کوتاه بر استراتژی های مدل سازی به کار گرفته شده توسط برخی از مدل های گزارش شده در ادبیات. برخی از این رویکردهای مدلسازی در این کار استفاده شده است.

یکی از مدل های پیل سوختی پیشگام که به مدیریت آب و انتقال گونه ها در لایه انتشار گاز می پردازد توسط برناردی و همکاران توسعه داده شد. [۱] در سال ۱۹۹۱. این حوزه محاسباتی یک بعدی (D=۱)

از یک کانال گاز کاتدی و لایه انتشار گاز متصل به غشاء تشکیل شده است. برخی از مفروضات مهم مورد استفاده در این مدل گازهای همدم، حالت پایدار و ایده آل هستند. انتقال جرم در کانال گاز توسط معادلات استفان-مکسول مدلسازی می شود که کسر جرمی اکسیژن را حل می کند.

بخار آب و نیتروژن حمل و نقل در لایه انتشار گاز به عنوان حمل و نقل در محیط متخلخل مدل می شود که در آن نفوذ با معادله اصلاح برژومن تصحیح می شود. از معادله نرنست پلانک برای مدل سازی انتقال پروتون ها از غشاء استفاده می شود. پروتون ها توسط گرا دیان پتانسیل، گرا دیان غلظت و اثر همرفتی منتقل می شوند. غشا الکتروخونی فرض می شود که در آن بار کل از

پروتون برابر با بار کل گروه های سولفونات منفی است. معادله باتلر-ولمر برای مدلسازی سینتیک الکتروود در لایه کاتالیست فعال استفاده می شود. تجزیه و تحلیل این مدل بر ویژگی های قطبش، حمل و نقل آب و استفاده از کاتالیزور متمرکز بود. به عنوان بسط مدل قبلی، در سال ۱۹۹۲، برناردی و همکاران. [۲] یک مدل کامل با دو طرف آند و کاتد منتشر کرد. معادلات حاکم در این مدل همانند مدل قبلی است. در این مدل، نویسندگان بر روی محاسبات مازاد پتانسیل فعال سازی، از دست دادن مقاومت غشایی، و از دست دادن اهمی در لایه های انتشار گاز به دلیل انتقال الکترون. فعال سازی آند نیز در این مدل به حساب می آید. به طور کلی، تیمارهای الکتروشیمیایی در این مدل بسیار جامع هستند. با این حال، اشکالات این مدل محدودیت تک بعدی بودن و فرض همدم بودن آن است. اسپرینگر یکی دیگر از پیشگامان مدلسازی پیل سوختی است. در سال ۱۹۹۱، اسپرینگر و همکاران. [۳] یک مدل همدم، تک بعدی و حالت پایدار برای یک پیل سوختی PEM با غشای هیدراته Nafion-117 ارائه کرد. ویژگی منحصر به فرد این مدل، رابطه تجربی برای محاسبه رسانایی غشا بر اساس محتوای آب در غشاء است. همچنین، محتوای آب غشا در سطح مشترک با فعالیت بخار آب در سطح مشترک الکتروود/غشاء تعیین می شود. ضریب درگ الکترواسموتیک، یعنی نسبت تعداد مولکول های آب منتقل شده از غشا در هر پروتون، نیز بر اساس محتوای آب غشا محاسبه می شود. پتانسیل سلول بر اساس جریان بار معین محاسبه می شود.



است. اکثر مدل‌های مبتنی بر CFD که تا به امروز ارائه شده‌اند، ماهیت سه‌بعدی لایه کاتالیست را حل نمی‌کنند و از سینتیک الکتروشیمیایی ساده‌شده استفاده می‌کنند که در آن فعال‌سازی ثابت است. مزاد پتانسیل فرض شده است. علاوه بر این، تنها یک مدل توسط دوتا و همکاران گزارش شده است. [۸]، که اثرات طراحی میدان جریان سرپانتین را بررسی می‌کند. با این حال، بسیاری از طرح‌های میدان جریان پیل سوختی فعلی از کانال‌های جریان سرپانتین استفاده می‌کنند. بنابراین، گنجاندن کانال سرپانتین در مدل‌سازی پدیده‌ها و عملکرد انتقال پیل سوختی بسیار مهم است. هدف کار حاضر توسعه یک مدل سه بعدی جامع است که تمام پدیده‌های مهم انتقال و سینتیک‌های الکتروشیمیایی در پیل‌های سوختی با کانال‌های جریان گاز سرپانتین را به حساب می‌آورد. یک الگوریتم جدید برای پیش‌بینی جریان سلول بر اساس ولتاژ سلول معین نیز در این مدل توسعه داده شده است. نتایج به‌دست‌آمده از این مدل با نتایج تجربی تأیید می‌شود و مدل کاملاً تأیید شده در یک سری مطالعات پارامتری برای بررسی حساسیت پارامترهای مختلف عملیاتی و طراحی بر عملکرد پیل سوختی استفاده می‌شود.

معرفی مساله

پیل‌های سوختی دستگاه‌های تبدیل انرژی الکتروشیمیایی هستند که مستقیماً انرژی شیمیایی سوختها را از طریق واکنش‌های الکتروشیمیایی به الکتریسیته تبدیل می‌کنند. برخلاف باتریهایی که وسایل ذخیره‌سازی انرژی هستند، سلول‌های سوختی تا زمانی که سوخت تامین می‌شود، می‌توانند به طور مداوم کار کنند. ترکیبی از راندمان بالا، مزایای زیستمحیطی و تطبیق پذیری پیل‌های سوختی، آنها را به دستگاه‌های تبدیل توان جایگزین جذاب تبدیل می‌کند. کاربردهای بالقوه پیل‌های سوختی بسیار متنوع است، از چند وات برای تلفن‌های همراه، لپ‌تاپ، تا چند کیلووات برای ژنراتورهای برق قابل حمل، صد کیلووات برای خودروها، و مگاوات برای یک ژنراتور بزرگ برق. علیرغم بسیاری از مزایای بالقوه، استقرار تجاری پیل‌های سوختی همچنان با چالش‌های زیادی مانند هزینه بالا و نبود زیرساخت‌های هیدروژنی مواجه است

طبقه بندی پیل‌های سوختی بر اساس مواد الکترولیت است. برخی از انواع رایج مواد الکترولیت عبارتند از: غشای تبادل پروتون (PEM)، اکسید جامد، مذاب

کربنات، هیدروکسید پتاسیم) سلول‌های سوختی قلیایی (و اسید فسفریک. در این دسته، پیل‌های سوختی PEM و اکسید جامد به عنوان امیدوارکننده‌ترین نامزدها برای کاربردهای تجاری ظاهر شده‌اند. سلول‌های سوختی PEM تمرکز این پایان‌نامه است. مزایای

در سال ۱۹۹۳، نگوین و همکاران. [۴] یک مدل انتقال جرم و گرما با حالت پایدار، دو بعدی ارائه کرد. دامنه محاسباتی مدل از مناطق معمولی مانند کانال‌های جریان گاز، لایه‌های انتشار گاز، لایه‌های کاتالیزور و غشاها. این مدل برای انتقال جرم آب در سراسر غشاء توسط الکترواسمز و انتشار، انتقال حرارت از فاز جامد به گاز در امتداد کانال‌های جریان به حساب می‌آید. ضریب درگ الکترواسموتیک آب در سراسر غشاء بر اساس روابط تجربی فعالیت‌های فشار بخار آب ارائه شده توسط Springer و همکاران محاسبه می‌شود. [۳]. شار خالص آب از سراسر غشا به عنوان تفاوت بین درگ الکترواسموتیک و انتشار پس از کاتد به آند محاسبه می‌شود. پتانسیل سلول به عنوان تفاوت بین پتانسیل مدار باز و تلفات اضافه پتانسیل فعال سازی و تلفات اهمی در غشا محاسبه می‌شود. این مدل پتانسیل فعال سازی متفاوت را به عنوان تابعی از چگالی جریان محلی و فشار جزئی اکسیژن به حساب می‌آورد. الگوریتم حل در این مدل با مشخص کردن یک جریان بار شروع می‌شود، سپس از یک ولتاژ حدس زده برای محاسبه چگالی جریان محلی استفاده می‌شود، این روش تا زمانی تکرار می‌شود که ولتاژ حدس زده جریانی مطابق با جریان ورودی تولید کند.

در سال ۱۹۹۸، گوراو و همکاران. [۵] دینامیک سیالات محاسباتی را برای مدل‌سازی پیل سوختی به کار بردند، جایی که آنها با یک مدل دو بعدی متشکل از هر دو طرف آند و کاتد شروع کردند. این مدل به طور کامل برای حمل و نقل انبوه گونه‌های واکنش‌دهنده که در مدل‌های قبلی ساده‌سازی شده‌اند، توضیح می‌دهد. کاربرد CFD در پیل سوختی مدل سازی منجر به چندین مدل پیشرفته شده است که سه بعدی و دو فاز هستند [۶]، [۷]. مدل قبلی در IESVIC بر جریان‌های تک فاز و چند فاز در کانال‌های مستقیم توسط برنینگ توسعه داده شد [۶]. به طور خاص، مدل تک فاز بسیاری از پدیده‌های مهم حمل و نقل را در یک مونتاز کامل گاز به حساب می‌آورد. کانال‌ها، الکترودهای انتشار گاز متخلخل و لایه‌های نازک کاتالیزور. انتقال حرارت نیز در این مدل در نظر گرفته شده است. ساختار فیزیکی پیل سوختی در این مدل به چهار حوزه محاسباتی تقسیم می‌شود. حوزه محاسباتی اصلی گاز را به حساب می‌آورد جریان، انتقال گرما و جرم در داخل کانال‌های جریان و الکترودهای انتشار گاز. زیر دامنه I از MEA تشکیل شده است، زیر دامنه II نیز از MEA تشکیل شده است و برای حل شار آب مایع از طریق غشا استفاده می‌شود. زیر دامنه III فقط از غشاء تشکیل شده است و برای محاسبه افت پتانسیل الکتریکی استفاده می‌شود. در این مدل‌سازی، سینتیک الکتروود توسط یک نسخه ساده شده از معادله باتلر-ولمر مدل‌سازی می‌شود که فقط وابستگی چگالی جریان به غلظت اکسیژن را توضیح می‌دهد. این یکی از محدودیت‌های اصلی این رویکرد مدل سازی

$$\rho_i = \frac{PM_i}{RT} \quad (3.5)$$

چگالی م ت خلوط گاز، ρ ، به صورت زیر محاسبه می شود

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{Y_i}{\rho_i} \quad (3.6)$$

دومی معادله سازنده مربوط به آنتالپی ایستا به دما و فشار است

$$h = \int_{T_{ref}}^T C_p dT \quad (3.7)$$

انتقال جرم هر جزء به عنوان کسر جرمی یک مخلوط گازی چند جزئی محاسبه می شود که شکلی مشابه معادله همرفت -انتشار عمومی دارد.

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_i) = 0 \quad (3.8)$$

کسر مولی، X_i ، هر گونه، از کسر جرمی بر اساس رابطه ای که توسط Bird و همکارانش ارائه شده است، محاسبه می شود. [9].

$$x_i = \frac{Y_i}{M_i} / \sum_{j=1}^n \frac{Y_j}{M_j} \quad (3.9)$$

۱.۲ لایه های انتشار گاز

حمل و نقل در لایه های انتشار گاز (GDL) به عنوان انتقال در محیط متخلخل مدل سازی می شود. تخلخل حجمی ε به عنوان نسبت حجم V' موجود برای جریان و حجم فیزیکی V سلول تعریف می شود. از این رو،

$$V' = \varepsilon V \quad (3.10)$$

معادله پیوستگی در لایه های انتشار گاز تبدیل می شود به:

$$\nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{u}) = 0 \quad (3.11)$$

معادله مومنتوم به قانون دارسی کاهش می یابد

$$\mathbf{u} = -\frac{k_p}{\mu} \nabla P \quad (3.12)$$

معادله انتقال جرم در GDL می شود

$$\nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{u} Y_i) - \nabla \cdot (\rho \varepsilon D \nabla Y_i) = 0 \quad (3.13)$$

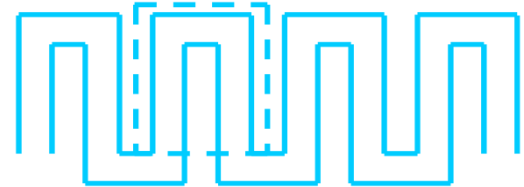
انتشار برای جریان در محیط متخلخل با استفاده از فرمول تصحیح بروژمن اصلاح می شود.

$$D_{ij}^{eff} = D_{ij} * \varepsilon^{1.5} \quad (3.14)$$

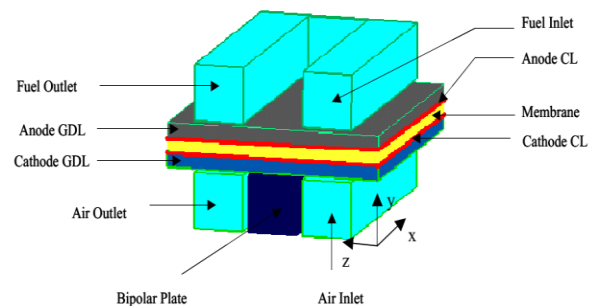
مدل سازی انتقال حرارت در لایه های انتشار گاز را می توان با این رابطه انجام داد

$$\nabla \cdot (\rho \varepsilon \mathbf{u} H) - \nabla \cdot (\lambda_{eff} \varepsilon \nabla T) = \varepsilon Q \quad (3.15)$$

پیل های سوختی PEM دمای کار پایین، سادگی و تطبیق پذیری است.



شکل ۱: انتخاب دامنه محاسباتی



شکل ۲: دامنه محاسباتی

معادلات حاکم، شرایط مرزی و روش حل عددی معادلات مدل سازی

۱.۱ جریان در کانال های گاز

جریان در کانال های گاز به عنوان جریان گاز ایده آل در کانال های بسته مدل می شود. معادلات حاکم عبارتند از:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (3.1)$$

معادله مومنتوم:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial(\rho v u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial(\rho w u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho w v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w w)}{\partial z} &= -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

معادله انرژی

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} H) - \nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (3.3)$$

H آنتالپی کل است که بر حسب آنتالپی ایستا (ترمودینامیکی h) توسط:

$$H = h + \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 \quad (3.4)$$

سیستم معادله با اضافه کردن دو معادله دیگر از ترمودینامیک بسته می شود. اول معادله حالت مربوط به چگالی به دما و فشار است

صفحه دوقطبی گرما و الکترون ها را هدایت می کند. رسانش الکترون در صفحه دوقطبی گرافیت بسیار سریع است و از دست دادن پتانسیل ناشی از انتقال الکترون در صفحه دو قطبی ناچیز فرض می شود. بنابراین، صفحه دوقطبی به عنوان یک جامد رسانای گرما مدل سازی می شود

$$\nabla \cdot (\lambda_{gr} \nabla T) = 0 \quad (3.22)$$

۲.۱ افت احتمالی در سراسر سلول

هدف در این بخش مدل سازی تلفات بالقوه در لایه های انتشار گاز و غشاء است تا بتوان مازاد پتانسیل فعال سازی را به دقت پیش بینی کرد

۲.۲ اتلاف اهمی در لایه های انتشار گاز

از دست دادن پتانسیل ناشی از هدایت جریان از طریق لایه انتشار گاز را می توان با معادله ای شبیه به معادله لاپلاس مدل کرد. مرزهای بالقوه برای هدایت جریان از طریق این مناطق تنظیم شده اند

$$\nabla \cdot (\lambda_e \nabla V) = S_e \quad (3.23)$$

که Se عبارت منبع الکترون است به ترتیب برابر با جریان آند و کاتد برای هر طرف است. سپس تلفات اهمی به صورت زیر محاسبه می شود

$$\eta_{ohmic} = V_{CL} - V_{ref} \quad (3.24)$$

3.3.2 افت اهمی در غشاء

از دست دادن بالقوه در غشا به دلیل مقاومت در برابر انتقال پروتون از طریق غشا است. این توزیع تلفات پتانسیل نیز با معادله لاپلاس شبیه به تلفات پتانسیل در مناطق لایه انتشار گاز مدل شده است.

$$\nabla \cdot (\lambda_m \nabla V) = S_m \quad (3.25)$$

جایی که Sm به ترتیب منبع و سینک پروتون در لایه کاتالیست آندی و لایه کاتالیست کاتدی است. سپس تلفات پروتونیک به صورت زیر محاسبه می شود

$$\eta_{protonic} = V_{CL,c} - V_{CL,a} \quad (3.26)$$

جایی که VCL,c پتانسیل لایه کاتالیست کاتدی و VCL,a پتانسیل لایه کاتالیست آند است.

۳.۲ فعال سازی بیش از حد پتانسیل

پس از محاسبه تلفات اهمی در غشاء و الکترودهای انتشار گاز، پتانسیل بیش از حد فعال سازی را می توان از روی پتانسیل برگشت پذیر و پتانسیل سلول محاسبه کرد

$$\eta_{act,c} = E_{rev} - E_{cell} - \eta_{ohmic,gdl} - \eta_{protonic,mem} \quad (3.27)$$

۴.۲ سینتیک الکتروشیمیایی

هدایت حرارتی موثر λ_{eff} را می توان از روی رسانایی حرارتی گاز و گرافیت با بیانی که توسط Gurau و همکارانش ارائه شده است، محاسبه کرد. (۱۰)

$$\lambda_{eff} = -2\lambda_{gr} + \frac{1}{\frac{\varepsilon}{2\lambda_{gr} + \lambda_g} + \frac{1-\varepsilon}{3\lambda_{gr}}} \quad (3.16)$$

۳.۱ لایه های کاتالیست

لایه های کاتالیست مهم ترین مناطق حوزه محاسباتی هستند. اینجاست که واکنش های الکتروشیمیایی در حال انجام است که گونه های موجود در پیل سوختی را مصرف یا تولید می کند. به طور خاص تر، اصطلاحات سینک و منبع برای مدل سازی مصرف یا تولید این گونه ها به شرح زیر استفاده می شود (سینتیک الکتروشیمیایی در بخش بعدی بررسی می شود)

در لایه کاتالیست کاتدی، مصرف اکسیژن به عنوان یک اصطلاح سینک بر اساس چگالی جریان محلی کاتد مدل سازی می شود

$$S_{O_2} = -\frac{M_{O_2}}{4F} i_c \quad (3.17)$$

تولید آب به عنوان یک اصطلاح منبع بر اساس چگالی جریان محلی مدل سازی می شود.

$$S_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{2F} i_c \quad (3.18)$$

در لایه کاتالیست آند، هیدروژن برای تولید الکترون و پروتون مصرف می شود. مصرف هیدروژن به عنوان یک اصطلاح سینک مشابه با مصرف اکسیژن مدل سازی می شود

$$S_{H_2} = -\frac{M_{H_2}}{2F} i_a \quad (3.19)$$

از آنجایی که مازاد پتانسیل فعال سازی در سمت آند بسیار کم است، تولید گرما در سمت آند در مقایسه با تولید گرما در سمت کاتد ناچیز است. تولید گرما در اثر واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد توسط Lampinen و همکاران ارائه شده است. (۱۱)

$$q = \left[\frac{T(-\Delta S)}{n_e F} + \eta_{act,c} \right] i_c \quad (3.20)$$

۴.۱ غشاء

غشا کاملاً مرطوب شده فرض می شود. شار خالص آب به صورت کشش الکترو اسمزی آب از آند به کاتد و انتشار برگشتی از کاتد بد مدل سازی می شود

$$N_w = n_d M_w \frac{i}{F} - \nabla \cdot (\rho D_w Y_w) \quad (3.21)$$

۵.۱ صفحات دوقطبی



شرایط مرزی فشار در خروجی های آند و کاتد مشخص می شود . فشارهای عملکرد سلول مورد نظر در خروجی آند و کاتد مشخص می شود . شرایط مرزی نویمان برای متغیرهای دیگر اعمال می شود، یعنی شیب نرمال صفر بر سرعت، دما، کسر جرم گونه ها و معادلات اسکالر اضافی میدان های پتانسیل اعمال می شود. از نظر ریاضی، به این صورت بیان می شود

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad (3.32)$$

که در آن ϕ هر متغیری است جز فشار)

۳.۳ سطوح خارجی

شرایط مرزی تقارن در سطوح حوزه محاسباتی در جهت Z اعمال می شود. همه متغیرها از نظر ریاضی متقارن هستند، بدون شار در سراسر مرز. در سطوح خارجی در جهت (Y) سطوح بالا و پایین سلول، دما مشخص شده و شار حرارتی صفر مشخص شده است

$$\frac{\partial T}{\partial y} = 0 \quad (3.33)$$

شرایط مرزی در واسط های داخل حوزه محاسباتی در مرز بین کانال گاز و صفحه دوقطبی، شرایط مرزی رسانا برای محاسبه انتقال حرارت بین این دو ماده اعمال می شود. شاید سخت ترین شرایط مرزی برای اعمال، شرایط مرزی مورد نیاز برای معادلات کسر جرمی و معادلات پتانسیل در فصل مشترک بین مناطق مختلف سلول است

$$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial y} = 0 \quad (3.34)$$

به طور مشابه، یک شرط مرزی نوع نویمان در سطح مشترک بین لایه کاتالیزور آند و غشاء اعمال شد تا از ورود هیدروژن به غشاء جلوگیری کند.

این مرز را می توان به صورت ریاضی بیان کرد:

$$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial y} = 0 \quad (3.35)$$

یک مرز پتانسیل صفر در این رابط مشخص شده است. شرایط مرزی نویمان در سطح مشترک بین کانال های گاز و لایه های انتشار گاز اعمال می شود تا شار پتانسیل صفر به کانال های گاز بدهد. از نظر ریاضی در این رابط ها، گرادیان پتانسیل صفر است،

$$\frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad (3.36)$$

به طور مشابه، میدان پتانسیل پروتونیک به مجموعه ای از شرایط مرزی بالقوه و شرایط مرزی شار صفر به ترتیب در رابط لایه کاتالیزور آند و رابط لایه کاتالیزور کاتدی نیاز دارد.

چگالی جریان محلی بر اساس معادله شناخته شده باتلر-ولمر محاسبه می شود که غلظت واکنش دهنده را با پتانسیل بیش از حد فعال سازی جفت می کند:

$$i_c = i_{o,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,c} \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,c} \right) \right] \quad (3.28)$$

چگالی جریان تبادل مرجع کاتد، α_c و α_a به ترتیب ضرایب انتقال بار آندی و کاتدی کاتد هستند . جریان آند،

$$i_a = i_{o,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta_{act,a} \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c F}{RT} \eta_{act,a} \right) \right] \quad (3.29)$$

چگالی جریان محلی آند برابر با متوسط کاتد تنظیم می شود.

چگالی جریان با این شرط که بار باید حفظ شود،

$$I_{total} = \sum_{j=1}^{N_c} i_{c,j} \times V_j = \sum_{j=1}^{N_a} i_{a,j} \times V_j \quad (3.30)$$

که در آن N_c و N_a به ترتیب تعداد کل سلول ها در لایه های کاتالیزور کاتد و آند هستند. V_j حجم سلول است.

۳. شرایط مرزی

شرایط مرزی در تمام مرزهای خارجی حوزه محاسباتی و همچنین مرزهایی برای حمل و نقل جرم مختلف و معادلات اسکالر در داخل حوزه محاسباتی مشخص شده است.

۳.۱ ورودی

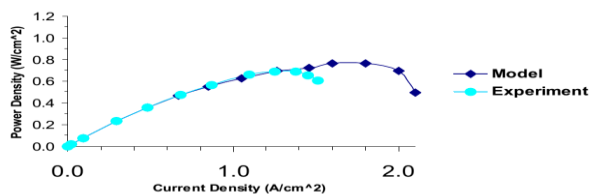
در آند و کاتد، چندین شرایط مرزی سرعت دیریکله، دمای جریان گاز ورودی، کسر جرمی هر جزء گاز به شرح زیر اعمال می شود. سرعت ورودی تابعی از جریان سلول و نسبت جریان استوکیومتری، سطح MEA و تلاقی کانال است. منطقه بخش به عبارت دیگر، جریان جرمی ورودی باید برای تامین مقدار گونه های واکنش دهنده مورد نیاز برای یک چگالی جریان خاص و نسبت جریان استوکیومتری کافی باشد. در این مدل، جریان سلول از روی یک ولتاژ سلول مشخص پیش بینی می شود، بنابراین جریان سلول در هر تکرار تغییر می کند، و از این رو سرعت ورودی باید در هر تکرار به روزرسانی شود تا با جریان متغیر سلول همگام شود.

سرعت ورودی به صورت زیر محاسبه می شود

$$U_{inlet} = \frac{\xi I}{n_e F} \frac{A_{MEA}}{A_{Ch}} \frac{RT}{x_i P_i} \quad (3.31)$$

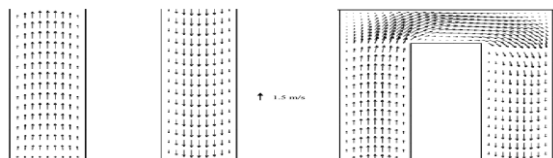
در جایی که n_e تعداد الکترون ها در هر مول از گونه های واکنش دهنده است، $n_e=4$ برای اکسیژن در کاتد و $n_e=2$ برای هیدروژن در آند، ξ نسبت جریان استوکیومتری است P_i فشار کل گاز و x_i به ترتیب کسر مولی هیدروژن یا اکسیژن در آند یا کاتد است

۳.۲ خروجی ها



شکل ۴: مقایسه نتایج مدل و تجربی چگالی توان

علاوه بر منحنی های قطبش و توان، مدل جامع سه بعدی امکان ارزیابی اطلاعات مهم در مورد جزئیات پدیده های حمل و نقل در داخل پیل سوختی را نیز فراهم می کند. این پدیده های انتقال عبارتند از توزیع غلظت های گاز واکنش دهنده محلی، میدان دما، چگالی جریان محلی، میدان های بالقوه و مازاد پتانسیل فعال سازی



شکل ۴: مشخصات سرعت نواحی چرخش، ورودی و خروجی در

کانال گاز کاتدی با بار 1.2 A/cm² و Re = 71.7

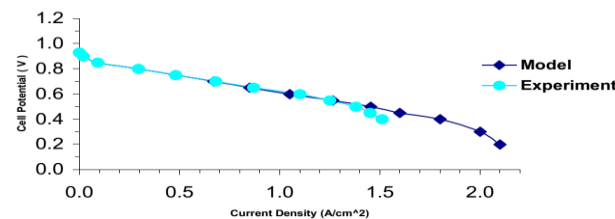
کد دینامیک سیالات محاسباتی تجاری ((ANSYS, CFD), FLUENT، به عنوان ستون فقرات برای اجرای مدل استفاده شد. کدها معادلات استاندارد انتقال حرارتی-سیال را حل می کنند و زیرروال های تعریف شده توسط کاربر برای بخش هایی از مدل خاص فیزیک پیل سوختی ایجاد شده اند. تمام معادلات حمل و نقل گسسته شده است

بر اساس روش حجم محدود به سیستمی از معادلات جبری که با یک الگوریتم تکراری قابل حل است. حوزه های محاسباتی به تعداد محدودی از حجم های کنترل (سلول ها) تقسیم می شوند. همه متغیرها در مرکز هر سلول ذخیره می شوند.

فرآیند تکرار به دو سطح تقسیم می شود: یک تکرار درونی برای حل برای جفت فضایی برای هر متغیر و یک تکرار بیرونی برای حل برای جفت بین متغیرها. بنابراین هر متغیر به ترتیب در نظر گرفته می شود، با توجه به ثابت بودن همه متغیرهای دیگر، یک معادله انتقال گسسته برای آن متغیر برای هر سلول در حوزه جریان تشکیل می شود و مشکل به یک حل کننده معادله خطی منتقل می شود

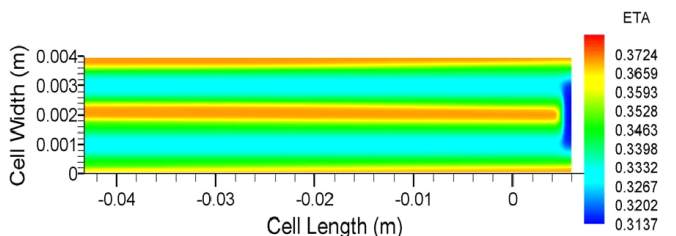
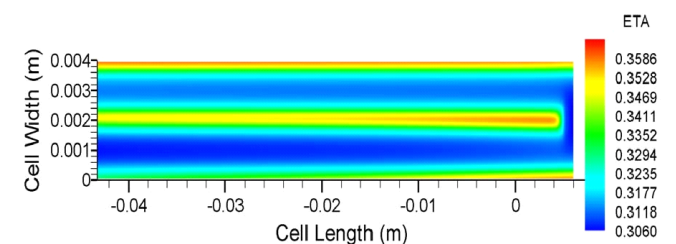
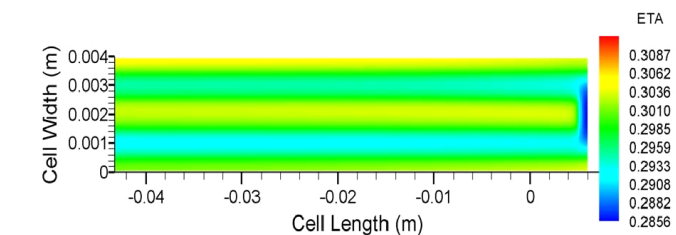
نتایج و بحث

نتایج برای شرایط عملیاتی مورد پایه با نتایج تجربی ارائه شده توسط وانگ و همکاران تأیید شد [۱۲]. منحنی پلاریزاسیون پتانسیل سلول در مقابل چگالی جریان سلولی برای مدل مطابقت خوبی با منحنی قطبش تجربی در مناطق بار کم و متوسط دارد. با این حال، تراکم جریان سلول مدل در منطقه محدودیت حمل و نقل جرم (> 1.25 A/cm²) بالاتر از مقادیر تجربی است.



شکل ۴.۱: مقایسه منحنی های قطبش مدل و تجربی

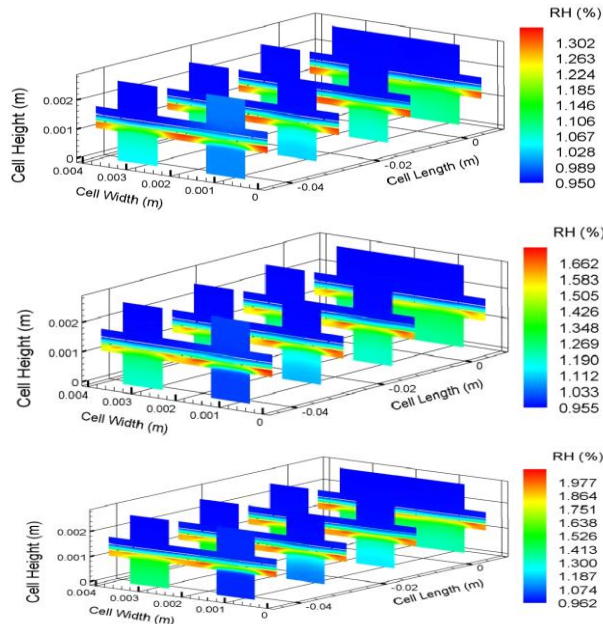
در این مرحله، لازم به ذکر است که در حال حاضر، منحنی پلاریزاسیون تنها داده های تجربی است که در میتراتور موجود است، بنابراین منحنی های پلاریزاسیون معمولاً برای اعتبارسنجی توافق بین مدل و آزمایش ها استفاده می شوند. با این حال، توافق منحنی قطبش را می توان با مدل های ۱ بعدی که منتشر شده است نیز به دست آورد. بنابراین، اعتبارسنجی دقیق مستلزم مقایسه دقیق داده ها از توزیع های محلی تراکم های فعلی، غلظت گونه ها و غیره است. به دست آوردن چنین داده هایی بسیار دشوار است و در حال حاضر در ادبیات موجود نیست



شکل ۵: توزیع بیش از حد پتانسیل فعال سازی در اولین لایه کاتالیزور برای سه شرایط بارگذاری: ۰.۳، ۰.۳ (بالا)، ۰.۶۹، ۱.۲ (وسط)، و ۱.۲ A/cm² (پایین).

توزیع چگالی جریان

الکتروشیمیایی واکنش ها یا گرمایش اهمی در لایه های غشایی و انتشار گاز به گرما تبدیل می شود. با این حال، تنها تولید گرمای واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد در این مدل در نظر گرفته می شود زیرا فعال سازی در سمت آند ناچیز است. بنابراین تولید گرما در منطقه ای که فعالیت الکتروشیمیایی کاتد بالاترین است، بالاتر است.



شکل ۷: وزیع آب در سلول برای سه شرایط مختلف بارگذاری: ۰,۳ A/cm² (بالا)، ۰,۶۹ A/cm² (وسط)، و ۱,۲ A/cm² (پایین))
رطوبت نسبی = RH

توزیع دما برای شرایط بار متوسط و بالا در شکل ۷ نشان داده شده است. در هر دو مورد، بالاترین دما در لایه کاتالیست کاتدی قرار دارد. از آنجایی که رسانایی غشاء بسیار کم است و در طرف آند تولید گرما وجود ندارد، دمای طرف آند کاملاً یکنواخت و برابر با دمای جریان گاز آند است. از طرف دیگر دمای گاز کاتد نزدیک به رابط لایه انتشار گاز کانال از ۱ تا ۷ درجه بالاتر از دمای عملیاتی اسمی است.

نتیجه گیری

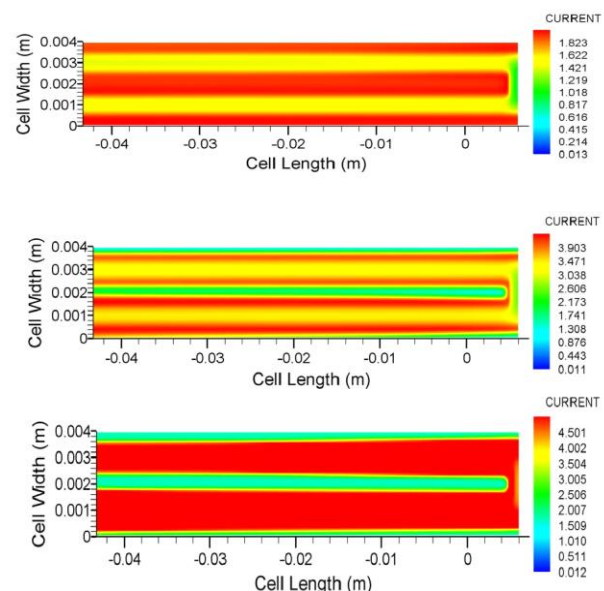
۱- یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی از سلول های سوختی PEM با کانال های جریان ماریچ در این کار توسعه داده شد. این مدل اطلاعات ارزشمندی در مورد پدیده های انتقال درون پیل سوختی مانند توزیع غلظت گاز واکنش دهنده، توزیع دما، توزیع پتانسیل در لایه های غشاء و انتشار گاز، توزیع بیش پتانسیل فعال سازی و توزیع چگالی جریان محلی ارائه می دهد.

۲- ویژگی منحصر به فرد این مدل پیاده سازی الگوریتم ولتاژ به جریان (VTC) است که امکان محاسبه سینتیک الکتروشیمیایی را بدون ساده سازی فراهم می کند. این محاسبه شامل جفت شدن

از آنجایی که چگالی جریان محلی تابعی از غلظت اکسیژن و مازاد پتانسیل فعال سازی است، انتظار می رود که الگوهای توزیع غلظت اکسیژن و پتانسیل فعال سازی بیش از حد تأثیر عمده ای بر توزیع چگالی جریان تحت شرایط بارگذاری مختلف داشته باشد. شکل ۵ توزیع چگالی جریان را برای سه شرایط بارگذاری نشان می دهد. برای شرایط بار کم، اثر انتقال اکسیژن کم است، یعنی غلظت اکسیژن در زیر زمین همچنان زیاد است، بنابراین چگالی جریان در زیر زمین بیشتر است زیرا پتانسیل فعال سازی در زیر سطح زمین همانطور که قبلاً ذکر شد بیشتر است. با این حال، با افزایش شرایط بارگذاری، محدودیت حمل و نقل اکسیژن در زیر زمین قابل توجه می شود که منجر به تغییر حداکثر جریان به سمت مرکز کانال می شود که در آن غلظت اکسیژن بالاترین است.

تغییرات در طول کانال به اندازه تغییرات بین کانال و مساحت زمین نیست. چگالی جریان به طور کلی از ورودی به خروجی با کاهش غلظت اکسیژن کاهش می یابد. همچنین برای شرایط بار بالا، جریان در خروجی تقریباً به طور کامل در زیر ناحیه کانال قرار دارد.

تغییر چگالی جریان در امتداد ضخامت لایه کاتالیست در شکل ۶ نشان داده شده است. جایی که لایه فرعی بالایی در مجاورت غشا و زیر لایه پایینی مجاور GDL است. این شکل نشان می دهد که بیشتر فعالیت در لایه پایینی انجام می شود. این بدان معنی است که بیشتر اکسیژن در اولین لایه کاتالیزور تخلیه می شود. با این حال، در شرایط بار کوچک، فعالیت کمی نیز در لایه های بالایی وجود دارد.



شکل ۶: توزیع چگالی جریان نسبی برای سه شرایط بارگذاری: ۰,۳ A/cm² (بالا)، ۰,۶۹ A/cm² (وسط)، و ۱,۲ A/cm² (پایین).

توزیع دمای سلول

توزیع دما در داخل پیل سوختی به شدت به شرایط بارگذاری بستگی دارد. فرض بر این است که تمام اتلاف انرژی از طریق فعال سازی



[۷] Z. H. Wang, C. Y. Wang and K. S. Chen, "Two-Phase Flow and Transport in the Air Cathode of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *J. Power Sources*, 94(1): 40-50, 2001.

[۸] S. Dutta, S. Shimpalee, J.W. Van Zee. "Numerical Prediction of Mass-Exchange Between Cathode and Anode Channels in a PEM Fuel Cell". *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44:2029-2042, 2001.

[۹] R.B. Bird, W. Steward, and E. N. Lightfoot. "Transport Phenomena". Wiley, New York, 1960.

[۱۰] V. Gurau, F. Barbir, and H. Liu. "An Analytical Solution of a Half-Cell Model for PEM Fuel Cells". *J. Electrochem. Soc.*, 147(7): 2468-2477, 2000.

[۱۱] M. J. Lampinen and M. Fomino. "Analysis of Free Energy and Entropy Changes for Half-Cell Reactions". *J. Electrochem. Soc.*, 140(12): 3537-3546, 1993.

[۱۲] L Wang, A. Husar, T. Zhou, H. Liu. "A Parametric Study of PEM Fuel Cell Performances". *International Journal of Hydrogen Energy*, 28: 1263-1272, 2003.

میدان پتانسیل با میدان غلظت گونه های واکنش دهنده است که منجر به پیش بینی دقیق توزیع چگالی جریان محلی می شود. علاوه بر این، الگوهای توزیع چگالی جریان با شرایط بارگذاری متفاوت است. در بار کم، چگالی جریان در ناحیه زمین بیشتر است و با افزایش بار، حداکثر چگالی جریان به سمت مرکز کانال تغییر می کند. این الگوهای توزیع چگالی جریان محلی به طور اساسی با مدل هایی که برای غیر یکنواختی مازاد پتانسیل سطح به دست می آیند متفاوت هستند.

۳- علاوه بر این، فعالیت سه بعدی لایه کاتالیست نیز در این مدل لحاظ شده است. نتایج نشان می دهد که در شرایط بار متوسط و زیاد، بیشتر فعالیت در اولین لایه زیرین کاتالیزور مجاور GDL رخ می دهد.

۴- علاوه بر افزایش اطلاعات دقیق در مورد پدیده های حمل و نقل در داخل پیل سوختی، این مدل برای بررسی حساسیت پارامترهای مختلف عملیاتی و مواد بر عملکرد پیل سوختی استفاده شد. نتایج این مطالعات نشان می دهد که سلول های سوختی در دما، فشار و تخلخل الکترود بالاتر عملکرد بهتری دارند.

مراجع و منابع

[۱] D.M. Bernardi and M.W. Verbrugge. "Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte". *AIChE Journal*, 37(8): 1151-1162, 1991

[۲] D. M. Bernadi and M. W. Verbrugge. "A Mathematical Model of the Solid Polymer-Electrolyte Fuel Cell". *J. Electrochem. Soc.*, 139(9): 2477-2491, 1992.

[۳] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld. "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model". *J. Electrochem. Soc.*, 138(8): 2334-2342, 1991.

[۴] T. V. Nguyen and R. E. White. "A Water and Heat Management Model for Proton-Exchange-Membrane Fuel Cells". *J. Electrochem. Soc.*, 140(8): 2178- 2186, 1993.

[۵] V. Gurau, H. Liu, and S. Kakac. "Two-Dimensional Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells". *AIChE Journal*, 44(11): 2410-2421, 1998.

[۶] T. Berning "Three-Dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a PEM Fuel Cell". PhD Thesis, 2002.