

بررسی عددی مدیریت آب در کاتد و آند پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

حسن خالقی^۵، کاظم محمدزاده

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴ بهمن ۱۳۹۷
بازنگری: ۲۰ اردیبهشت ۱۳۹۶
پذیرش: ۳۱ اردیبهشت ۱۳۹۶
ارائه آنلاین: ۱۷ خرداد ۱۳۹۶

کلمات کلیدی:

بررسی عددی
پیل سوختی غشاء تبادل پروتون
مدیریت آب در آند
میان گذر گاز از غشاء

چکیده: یکی از مسائل کلیدی پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، مدیریت آب است. این موضوع بدون در نظر گرفتن انتقال آب مایع درون پیل میسر نیست. در این مقاله مدل سازی عددی مدیریت آب در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون به صورت دویبعدی و پایا انجام شده است. معادلات بقای جرم، مومنتم، انرژی، یون ها، گونه های اکسیژن و بخار آب و معادله انتقال آب مایع در تمام لایه های پیل شامل الکترودهای کاتد و آند حل شده اند. مطالعه ای عمومی بر فرآیندهای جاری در پیل با ارائه کانتورهای سرعت، دما، غلظت گونه های مختلف و اشباع آب مایع انجام شده است و تأثیر آب مایع بر کارایی پیل مورد توجه قرار گرفته است. همچنین تأثیر میان گذر گازهای واکنش دهنده از غشاء بر راندمان پیل بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که با در نظر گرفتن اثر آب مایع در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، منحنی قطبش و منحنی راندمان مربوطه پایین تر قرار می گیرد. اثرات چند متغیر کلیدی مانند ضریب نفوذ آب مایع، چگالی جریان، ضخامت غشاء و نسبت اکسیژن به نیتروژن روی شرایط و عملکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون نظیر میزان اشباع آب مایع، غلظت مولی اکسیژن، چگالی توان، دمای پیل، بازده میان گذر، بازده کلی، پتانسیل و افت پتانسیل اهمی بررسی شده است. مشاهده شد که اشباع آب مایع در آند نیز قابل توجه است که ضرورت بررسی بیشتر رفتار آب مایع در این الکترودها را می رساند. مقدار اشباع آب مایع در هر دو الکترودها کاتد و آند با افزایش چگالی جریان، افزایش می یابد.

۱- مقدمه

توسط سه مکانیزم کشش الکترواستاتیک، نفوذ معکوس و اختلاف فشار از بین کاتد و آند جریان می یابد. در طی سه دهه گذشته، کارهای عددی زیادی به بررسی مدیریت آب پیل سوختی غشاء تبادل پروتون پرداخته اند. با توجه به اهمیت تحقیقات اولیه به چند تحقیق مهم در این زمینه اشاره می شود. اسپرینگر و همکاران^۵ [۲] در سال ۱۹۹۱ چگونگی انتقال آب در غشاء پلیمری را بررسی کردند. مدل آن ها یک بعدی، پایا و دما ثابت بود و از اثرات آب مایع صرف نظر شده بود. برناردی و وربروگ^۶ [۳] در سال ۱۹۹۲، مدلی یک بعدی برای پدیده های انتقال در لایه نفوذ گاز، لایه کاتالیست و غشاء ارائه کردند. مدل آن ها یک بعدی، پایا و هم دما بود و در آن آب مایع در نظر گرفته نشده بود. گوراو و همکاران^۷ [۴] در سال ۱۹۹۸ یک مدل دو بعدی شامل همه اجزای پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، به جز جمع کننده جریان الکتریکی، در راستای کانال جریان گاز ارائه کردند. محدودیت اصلی مدل، در نظر نگرفتن انتقال آب مایع بود. این مدل در راستای کانال جریان گاز، پایا و تراکم ناپذیر بود، گازها کامل در نظر گرفته شدند و از حجم آب مایع در کانال

پیل سوختی غشاء تبادل پروتون^۱ به عنوان جایگزین منبع تولید قدرت در خودروها، امروزه توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱]. در یک پیل سوختی غشاء تبادل پروتون اگر مقدار رطوبت غشاء کم باشد، رسانندگی یونی غشاء کاهش می یابد و در نتیجه انرژی خروجی افت پیدا می کند (خشکی غشاء). از طرفی وجود آب اضافی با انسداد حفره های لایه نفوذ گاز^۲ مانع رسیدن گاز به کاتالیست شده (طغیان) و موجب افزایش افت پتانسیل نفوذی می شود. بنابراین عملکرد مطلوب پیل سوختی غشاء تبادل پروتون در گرو موازنه صحیح آب در آن (مدیریت آب) است. آب می تواند در کانال های جریان گاز^۳ از گاز ورودی به دلیل کاهش دمای عملکردی، افزایش فشار یا افزایش رطوبت زنی گاز، چگالیده شود. آب مایع از طریق عمل موئینگی درون تخلخل های لایه کاتالیست^۴ و کانال جریان گاز منتقل می شود. آب

¹Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC)

²Gas Diffusion Layer (GDL)

³Gas Flow Channel (GFC)

⁴Catalyst Layer (CL)

⁵Springer et al.

⁶Bernardi and Verbrugge

⁷Gurau et al.

نویسنده عهده دار مکاتبات: khaleghi@modares.ac.ir

عملکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون توسعه یافته است. مقالات مروری خوبی در زمینه مدل سازی پیل سوختی غشاء تبادل پروتون توسط جلالی^۵ [۱۱]، سیگل^۶ [۱۲]، اندرسون و همکاران^۷ [۱۳]، سانگ و منگ^۸ [۱۴]، وبر و همکاران^۹ [۱۵] و فریرا و همکاران^{۱۰} [۱۶] فراهم شده است که تمرکز اکثر این مقالات بر روی الکتروکاتد بوده است که موضوع معقوله است؛ چون کاتد، الکتروکاتد تولیدکننده آب می باشد و جایی است که احتمال وقوع طغیان بیشتر است. با این وجود، آزمایش های آشکارسازی نشان می دهد که برای شرایط عملکردی معین، طغیان می تواند در کانال های گاز آند نیز رخ دهد و حتی قابل توجه تر از طغیان در سمت کاتد باشد [۱۷-۱۹]. فرایند ظهور آب مایع و نیز دبی، چگالی و لزجت هیدروژن در کانال گاز آند با هوا در کاتد متفاوت است. در نتیجه رفتار آب مایع ممکن است برای دو الکتروکاتد متفاوت باشد. بررسی عددی مدیریت آب در آند کاملاً جدید است و مقالات معدودی به تازگی در زمینه مدیریت آب در آند منتشر شده اند [۲۰-۲۲].

فریرا و همکاران [۲۰] در سال ۲۰۱۵، برای اولین بار حرکت قطره آب مایع در کانال آند پیل سوختی غشاء تبادل پروتون را بدون در نظر گرفتن واکنش های الکتروشیمیایی به صورت سه بعدی در نرم افزار فلوئنت^{۱۱} بررسی کردند. اثر سرعت ورودی هیدروژن، دمای عملکردی و ترشوندگی دیواره ها بر تخلیه آب مایع توسط روش حجم سیال مطالعه شد. از اثر جاذبه صرف نظر شد و جریان آرام، هم دما و بدون تغییر فاز در نظر گرفته شد. اکسینگ و همکاران^{۱۲} [۲۱] در سال ۲۰۱۶ یک مدل دوبعدی، پایا و غیرهم دما در طول کانال جریان گاز که با یک مدل جریان دوفازی آب مایع و گاز کوپل شده بود، برای پیل سوختی غشاء تبادل پروتون ارائه کردند. انتقال فاز بین بخار، آب مایع و فاز حل شده با سازوکار انتقالی ترکیبی درون غشاء مدل شد. اشباع آب مایع درون الکترودها و کانال ها در هر دو طرف آند و کاتد شبیه سازی شد. سه نوع مدل برای لایه های کاتالیست آند و کاتد مقایسه شد. از حل معادله انتقال آب مایع جهت بررسی مدیریت آب در آند و بررسی طغیان آند استفاده شد و جریان قطرات در کانال مدل نشد. نتایج آن ها نشان داد که طغیان آب در هر دو کانال آند و کاتد در نزدیک پایین دست رخ می دهد. تیم تحقیقاتی اکسینگ و همکاران [۲۲] با توسعه مدل قبلی خود، اثرات رطوبت نسبی، نسبت جریان استوکیومتری و طول کانال، همچنین اثر متقابل آن ها را روی عملکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون بررسی کردند. تشکیل آب مایع و انتقال آن در آند ناشی از تقطیر گاز فوق اشباع شده در اثر مصرف هیدروژن، لحاظ شد. در این مدل، چشمه/چاه حرارتی را بر حسب واکنش الکتروشیمیایی، گرمایش ژول و گرمای نهان ناشی از انتقال فاز آب در نظر

جریان گاز صرف نظر شد. مار و لی^۱ [۵] در سال ۱۹۹۹، مدلی یک بعدی و پایا برای لایه کاتالیست بر پایه ساختار شبه همگن ارائه دادند. لایه های کاتالیست به صورت طغیان زده (پر از آب) فرض شدند و فاز گاز موجود در آن، در نظر گرفته نشد که کارایی پیل را کمتر از واقعیت نشان می داد. اوم و همکاران^۲ [۶] در سال ۲۰۰۰ یک مدل دوبعدی در راستای کانال جریان گاز ارائه کردند. این مدل کل پیل را به صورت یک ناحیه در نظر گرفته و معادلات انتقال گونه گازی، مومنتوم و پروتون ها در آن حل می شد. جملات تولید این معادلات در هر لایه تغییر می کند و به شرایط مرزی بین لایه ها نیاز نیست. این مدل، ناپایا، غیرتراکم پذیر و همدماست و پدیده انتقال آب مایع را در نظر نگرفته است. ناتاراجان و ان گوین^۳ [۷] در سال ۲۰۰۱ مدلی دوبعدی در راستای عمود بر کانال جریان گاز، ناپایا، دوفازی و چند جزئی برای انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز ارائه کردند. حرکت آب مایع فقط بر اثر فشار موئینگی در نظر گرفته شد و انتقال جرم بین فازهای بخار و مایع هم ممکن بود. رابطه تجربی بین فشار موئینگی و اشباع آب مایع ارائه شد که تا حدی با تابع مرسوم لورت متفاوت بود. محدودیت مدل آن بود که لایه های کاتالیست را در میدان حل در نظر نگرفته و مصرف مواد واکنش دهنده و تجمع آب مایع در طول کانال جریان گاز را مدل نمی کرد. سیگل و همکاران^۴ [۸] در سال ۲۰۰۳ مدلی دو بعدی بر اساس ساختار توده ای لایه کاتالیست ارائه کردند. مدل در راستای کانال جریان گاز بود و همه اجزای پیل سوختی غشاء تبادل پروتون به جز جمع کننده جریان الکتریکی در نظر گرفته شد. معادلات انتقال شامل بقای جرم، مومنتوم، گونه های گازی، پروتون، انرژی و آب در بخش پلیمری لایه کاتالیست و غشاء حل شد. در این کار، برخلاف اکثر مقاله ها، لایه های کاتالیست به جای یک سطح ناچیز لایه هایی دارای حجم فرض شدند. نویسندگان، با عکس برداری از لایه کاتالیست، داده های تجربی را برای مشخص کردن خواص فیزیکی ساختار توده ای این لایه ارائه کردند. این مدل پایا و تراکم ناپذیر است و آب مایع را در نظر نگرفته است. صدیق و همکاران [۹] در سال ۲۰۰۶ مدلی یکپارچه از پیل سوختی غشاء تبادل پروتون ارائه دادند. آن ها فرض کردند که گازهای واکنش گر در آب غشاء حل شده و سپس به سمت مقابل انتقال می یابد و در لایه کاتالیست سمت مقابل واکنشی مستقیم انجام می دهد و آب تشکیل می شود. در این کار تأثیر پدیده میان گذر گازها از غشاء، به عنوان یک جریان اتلافی بر راندمان پیل بررسی شد. مدل دو بعدی، در راستای عمود بر کانال جریان گاز و پایا بود و از اثرات آب مایع هم صرف نظر شد. آن ها [۱۰] با این مدل در سال ۲۰۰۸، اثر دما و فشار سیال در کانال های جریان گاز، ضخامت غشاء و غلظت اکسیژن ورودی به لایه نفوذ گاز به ازای چگالی جریان های مختلف را بر عملکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون بررسی کردند.

در دهه اخیر، مدل های متعددی برای بررسی انتقال آب و اثر آن روی

⁵Djilali

⁶Siegel

⁷Anderson *et al.*

⁸Song and Meng

⁹Weber *et al.*

¹⁰Ferreira *et al.*

¹¹Fluent

¹²Xing *et al.*

¹Marr and Li

²Um *et al.*

³Natarajan and Nguyen

⁴Siegel *et al.*

از قانون گاز ایده‌آل به دست می‌آید (معادله (۱)). کسر جرمی هیدروژن و نیتروژن از برابر یک بودن مجموع کل کسرهای جرمی محاسبه می‌شود. فرض می‌شود که در کانال جریان گاز آب مایع به صورت قطراتی با حجم ناچیز، با سرعتی برابر با سرعت جریان گاز، انتقال می‌یابد. پارامتر k اشباع آب مایع است که در محیط متخلخل به صورت نسبت حجم کل مایع به حجم غیر جامد در حجم کنترل، تعریف می‌شود. جمله تولید S_{LV} (تغییرات شار جرم مربوط به تبخیر و تقطیر آب مایع) در معادلات پیوستگی فاز گاز و بقای گونه‌ها برای آب توسط رابطه (۲) تعریف می‌شود.

$$\rho^g = C_{tot} \sum_k X_k M_k \quad (1)$$

$$C_{tot} = \frac{P}{RT}$$

$$S_{LV} = \psi s \gamma_{LV} - \psi(1-s)(1-\gamma_{LV}) \quad (2)$$

$$\gamma_{LV} = 1 - 0.5[1 + \tanh(C_1(\rho_{VV}^g / \rho_{sat}^g) - C_2)] \quad (3)$$

پارامتر تخمینی ψ باید آن قدر بزرگ انتخاب شود که تعادل محلی بین فاز بخار و مایع برقرار شود. اگر $\gamma_{LV}=1$ شود، پدیده تبخیر و اگر $\gamma_{LV}=0$ شود، پدیده تقطیر رخ خواهد داد. از تابع کلید γ_{LV} در مدل‌سازی تغییر فاز بخار آب-آب مایع در [۲۳-۲۴ و ۷] استفاده شده است. با تعیین مقادیر C_1 و C_2 می‌توان سرعت تغییر γ_{LV} را بین صفر و یک کنترل کرد. در اینجا مقادیر $C_1=61$ و $C_2=59$ انتخاب شده است [۲۳]. با توجه به این مقادیر، وقتی رطوبت نسبی محلی کمتر از ۹۸٪ باشد، تبخیر و بیشتر از آن، تقطیر اتفاق می‌افتد. جمله تولید در آخر معادله انرژی، انتقال انرژی مربوط به تبخیر و تقطیر آب را نشان می‌دهد.

جدول ۲ معادلات حاکم در لایه نفوذ گاز را ارائه می‌دهد. معادلات بقای جرم و بقای گونه‌های گازی در لایه نفوذ گاز مشابه کانال جریان گاز است. معادله بقای مومنتوم خطی در محیط متخلخل به شکل معادله دارسی درمی‌آید. فشار موئینگی (P_c) که آب مایع را در تخلخل‌ها به سمت ناحیه خشک گازی سوق می‌دهد، به وسیله معادله $P_c = P_g - P_l = 2\Gamma/r_m$ بیان می‌شود [۲۵]. ضریب نفوذ آب مایع در معادلات (۴) و (۵) آمده است [۹]. عبارت $(\rho_{WL} g / \mu_{WL}) K_L(s) (\partial P_c / \partial s)$ از [۹] در [۲۵] به صورت ضریب نفوذ موئینگی آب مایع D_{WL}^{cp} تعریف شده است. جمله تولید S_{LV} برای محاسبه نرخ تبادل جرم بین فازهای مایع و بخار در معادله (۲) آمده است.

$$D_{WL}^{cp} = (\rho_{WL} g / \mu_{WL}) K_L(s) (\partial P_c / \partial s) \quad (4)$$

$$K_L(s) \partial P_c / \partial s = 0.0155s^3 - 0.0213s^2 + 0.0088s + 0.0002 \quad (5)$$

تراوایی ماده لایه نفوذ گاز، $K_L(s)$ به عنوان پارامتری تخمینی در نظر گرفته می‌شود که با تخمین درست آن، نتایج مدل با نتایج تجربی منطبق می‌شود. جمله تولید S_{pc} در معادله بقای انرژی برای محاسبه انرژی مربوط به تغییر فاز است.

جدول ۳ معادلات حاکم در لایه کاتالیست را ارائه می‌دهد. ضرایب

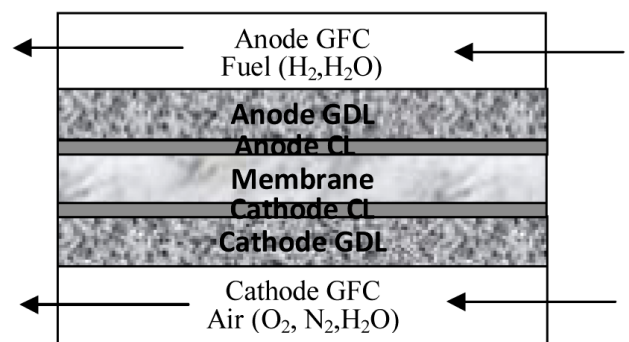
گرفته شد. نتایج نشان داد که رطوبت نسبی بیشتر در آند برای بهبود عملکرد پیل مورد نیاز است. با کاهش رطوبت نسبی آند و افزایش طول کانال، رطوبت نسبی بهینه کاتد افزایش می‌یابد.

با توجه به این توضیحات، در پژوهش حاضر شبیه‌سازی جریان و انتقال آب در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، اولاً انتقال آب مایع در الکتروود آند را نیز شامل می‌شود. به علاوه در این پژوهش، اثر بازده میان‌گذر گازهای واکنش‌گر بر عملکرد پیل با در نظر گرفتن انتقال آب برای نخستین بار بررسی می‌شود. در این مقاله، یک مدل دوبعدی و پایا همراه با انتقال آب در راستای کانال جریان گاز ارائه شده است که تمام لایه‌های پیل سوختی غشاء تبادل پروتون از جمله کانال‌های جریان گاز کاتد و آند در آن مدل شده‌اند. آب موجود در پیل به سه شکل بخار، مایع و فاز حل شده در پلیمر لحاظ شده است. از آنجا که رویکرد اصلی در این مدل دیدگاه تک‌ناحیه‌ای یا یک پارچه است، همه معادلات انتقال در همه اجزای پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، حل می‌شوند. البته شکل معادلات می‌تواند از لایه‌ای به لایه دیگر تغییر کند. در این مقاله اثرات چند متغیر کلیدی روی شرایط و عملکرد پیل مورد بررسی قرار گرفته است و نتایج در قالب نمودارها و کانتورهای لازم ارائه شده است.

۲- معادلات حاکم

در سرتاسر پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، جریان پایا، آرام و تراکم‌ناپذیر فرض می‌شود. معادلات اصلی عبارتند از: بقای جرم، دو معادله بقای مومنتوم، بقای گونه‌ها برای اکسیژن و بخار آب، بقای آب مایع، بقای پروتون‌ها و بقای انرژی که در جدول‌های ۱ تا ۴ برای هر لایه ارائه شده است. معادلات کمی برای خواص فیزیکی و الکتروشیمیایی نیز در جدول‌های ۵ و ۶ آمده است. میدان حل، دوبعدی و در راستای کانال جریان گاز است (شکل ۱). به غیر از کانال‌های جریان گاز در سایر نواحی محیط متخلخل، ایزوتروپ و همگن در نظر گرفته می‌شود. مدل‌سازی تخلخل در معادلات با تعریف ضریب تخلخل ϵ انجام می‌شود که نسبت حجم آزاد به کل حجم در یک حجم کنترل را نشان می‌دهد.

جدول ۱ معادلات حاکم در کانال گاز را ارائه می‌دهد. چگالی مخلوط



شکل ۱: میدان حل دوبعدی در راستای کانال جریان گاز

Fig. 1. Two-dimensional domain in the gas flow channel direction

جدول ۱: معادلات حاکم در کانال جریان گاز

Table 1. Governing equation in gas flow channel

رابطه حاکم	نام معادله بقا
$\nabla \cdot [\varepsilon(\rho^g \vec{u} + G^{*D})] = S_{LV}$ $G^{*D} = \sum_k -D_k \nabla X_k \rho_k$	بقای جرم
$\nabla \cdot (\varepsilon \rho \vec{u} \vec{u}) = -\varepsilon \nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon \mu_{eff} \nabla \vec{u})$	بقای مومنتم
$\varepsilon \rho^g \vec{u} \cdot \nabla w_{WV} + w_{WV} \nabla \cdot (\varepsilon \rho^g \vec{u}) = \nabla \cdot (D_{WV}^g \rho^g \nabla w_{WV}) + S_{LV}$	بقای گونه بخار آب در سمت آند
$\varepsilon \rho^g \vec{u} \cdot \nabla w_{O2} + w_{O2} \nabla \cdot (\varepsilon \rho^g \vec{u}) = \nabla \cdot (D_{O2}^g \rho^g \nabla w_{O2})$	بقای گونه اکسیژن در سمت کاتد
$\vec{e}u \cdot \nabla s = \nabla \cdot (D_{WL}^{cp} \nabla s) - (S_{LV} / \rho_{WL})$	انتقال آب مایع
$(\varepsilon \rho^g C_{eff}) \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) - S_{LV} h_{fg}$	انرژی

$$S_{H2} = \frac{-M_{H2}}{2F} |R_{eff, a}|,$$

$$S_{O2} = \frac{-M_{O2}}{4F} |R_{eff, c}|,$$

$$S_{WP} = \frac{M_W}{2F} |R_{eff, c}|,$$

$$S_{WD} = h_m (\rho_{WV}^g - \rho_{WV}^p),$$

$$S_{eod} = -\frac{\nabla \cdot \vec{i}n^{eod}}{FC_{tot}},$$

$$\rho_{WD} = M_w C_{tot}$$

نرخ واکنش مؤثر، R_d بر پایه معادله باتلر-فولمر است که اصلاحاتی روی آن انجام شده است (معادله (۷)). R_d به وسیله غلظت واکنش دهنده‌ها در کنار پلیمر، پتانسیل فعال‌سازی محلی $(\phi_{e,d} - \phi_i)$ ، چگالی جریان تبدیلی واکنش و مساحت کاتالیستی کنترل می‌شود. وقتی آب مایع تخلخل‌ها را پر می‌کند، مسیر دسترسی گازهای واکنش‌گر به ناحیه لایه کاتالیست را مسدود می‌کند و منجر به کاهش سطح قابل دسترس واکنش و در نتیجه کاهش R_d می‌شود. نرخ واکنش مؤثر R_d در واقع همان j چگالی جریان انتقالی است.

انتقال جرم ψ و h_m در معادلات (۶) باید به اندازه کافی بزرگ انتخاب شوند تا تعادل بین فاز مایع، فاز حل شده و فاز بخار برقرار باشد S_{eod} جمله تولید مربوط به کشش الکترواسمزی است. جملات تولید S_{u^S} و $S_{u^{DR}}$ مربوط به حل شدن گونه‌های گازی در آب مایع و واکنش مستقیم هستند [۹].

جدول ۲: معادلات حاکم در لایه نفوذ گاز (معادلات بقای جرم و بقای گونه مشابه جدول ۱ است)

Table 2. Governing equation in gas diffusion layer (mass and species conservation equations are similar to Table 1)

رابطه حاکم	نام معادله بقا
$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{-\varepsilon \mu}{\kappa} u_y$ $\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{-\varepsilon \mu}{\kappa} u_x$	بقای مومنتم
$\nabla \cdot (D_{WL}^{cp} \nabla s) - S_{LV} / \rho_{WL} = 0$	انتقال آب مایع
$(\varepsilon \rho^g C_{eff}) \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) + S_{pc}$ $S_{pc} = -S_{LV} h_{fg}$	انرژی

جدول ۳: معادلات حاکم در لایه کاتالیست
Table 3. Governing equation in catalyst layer

رابطه حاکم	نام معادله بقا
$\nabla \cdot [\varepsilon(\rho^g \vec{u} + G \cdot D)] = S_{H_2} + S_{O_2} + S_{LV} + S_{WVP} \gamma_{LV} - S_{WD} \gamma_{WD} + S_{eod} \rho_{WD} - Su^s - Su^{DR}$	بقای جرم
$\frac{\partial P}{\partial y} = \frac{-\varepsilon \mu}{\kappa} u_y, \quad \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{-\varepsilon \mu}{\kappa} u_x, \quad \kappa_{CL} = \kappa_{GDL}$	بقای مومتم
$\varepsilon \rho^g \vec{u} \nabla w_{WV} + w_{WV} \nabla \cdot (\varepsilon \rho^g \vec{u}) = \nabla \cdot (D_{WV}^g \rho^g \nabla w_{WV}) + S_{LV} + S_{WVP} \gamma_{LV} - S_{WD} \gamma_{WD} + Su^{DR}$	بقای گونه بخار آب در سمت آند
$\varepsilon \rho^g \vec{u} \nabla w_{O_2} + w_{O_2} \nabla \cdot (\varepsilon \rho^g \vec{u}) = \nabla \cdot (D_{O_2}^g \rho^g \nabla w_{O_2}) + S_{O_2} - Su^s - Su^{DR}$	بقای گونه اکسیژن در سمت کاتد
$\nabla \cdot (D_{WL}^{cp} \nabla s) - S_{LV} / \rho_{WL} + S_{WVP} (1 - \gamma_{LV}) / \rho_{WL} - S_{WD} (1 - \gamma_{WD}) / \rho_{WL} = 0$	انتقال آب مایع
$\nabla \cdot (\sigma_{i,eff} \nabla \phi_i) + S_i = 0, \quad S_i = R_{eff}$	انتقال یون‌ها (پروتون‌ها)
$(\varepsilon \rho^g C_{eff}) \vec{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (K_{eff} \nabla T) + S_{ohm} + S_{rev} + S_{act} + S_{pc} + S_{DR}$	انرژی

$$\gamma_{WD} = 0.5 + \frac{\rho_{WV}^g - \rho_{WV}^p}{2 \times |\rho_{WV}^g - \rho_{WV}^p|} \quad (10)$$

$$\rho_{WV}^p = \rho_{sat}^g \cdot a,$$

$$\rho_{WV}^g = w_{WV} \cdot \rho^g$$

جملات تولید معادله انتقال آب مایع عبارتند از انتقال جرم بین فاز مایع و بخار، مایع و فاز حل شده و تولید آب به وسیله واکنش الکتروشیمیایی. این جملات همانند معادله بقای جرم، فقط اجازه انتقال جرم یک‌طرفه از فاز حل شده به مایع را می‌دهند و پس از آن آب مایع می‌تواند بسته به رطوبت نسبی محلی، مایع بماند یا بخار شود. جمله تولید S_i ، نرخ تولید پروتون‌ها در آند و مصرف آن‌ها در کاتد را نشان می‌دهد. مقدار انتگرال S_i در هر کدام از لایه‌های کاتالیست با هم برابر است؛ یعنی همه پروتون‌هایی که در آند تولید می‌شود در کاتد مصرف می‌شود. مقدار چگالی جریان i_i ، توسط رابطه (۱۱) به دست می‌آید.

$$i_i = \sigma_{i,eff} \nabla \phi_i$$

$$\sigma_{i,eff} = \sigma_i \varepsilon_p$$

$$\sigma_i = f(\lambda, T) = (0.5139\lambda - 0.326) \exp\left[1268.0 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right] \quad (11)$$

جملات تولید معادله بقای انرژی در لایه‌های کاتالیست با لایه نفوذ گاز متفاوت است. آنتالپی آب حل شده برابر با آنتالپی آب مایع در نظر گرفته شده است. G^{Cr} شار مولی تولید آب در واکنش مستقیم می‌باشد. جملات چشمه معادله انرژی در رابطه (۱۲) داده شده‌اند.

$$R_d = (1-s) A i_{0,k} \left(\frac{C_k^p}{C_{k,ref}^p}\right)^\gamma \times [\exp((\phi_{e,d} - \phi_i) \alpha_d \frac{n_d F}{RT}) - \exp(-(\phi_{e,d} - \phi_i) \alpha_d \frac{n_d F}{RT})] \quad (7)$$

غلظت واکنش‌دهنده‌ها در پلیمر، در ناحیه واکنش، به وسیله قانون هانری که غلظت گازهای واکنش‌دهنده به صورت حل شده، در سطح مشترک گاز و پلیمر را مشخص می‌کند، بدست می‌آید (معادله (۸)).

$$C_k^p = h_k^p C_k^{pT} \quad (8)$$

فرض شده است که پتانسیل الکتریکی در هر الکتروود لایه کاتالیست و لایه نفوذ گاز ثابت است. همانطور که در معادله (۹) نشان داده شده‌است، پتانسیل الکتریکی در آند برابر صفر، و در کاتد برابر منفی اضافه ولتاژ کل قرار داده شده‌است.

$$\begin{aligned} \phi_{e,c} &= -(E_{th} - V_{cell}) \\ \phi_{e,a} &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

انتقال جرم بین فاز بخار و فاز حل شده، S_{WD} (معادله (۷))، با تابع کلید γ_{WD} (معادله (۱۰)) عمل می‌کند. وقتی چگالی بخار آب در تعادل با پلیمر کمتر از چگالی بخار آب محلی باشد ($\rho_{WV}^p < \rho_{WV}^g$)، $\gamma_{WD} = 1$ می‌شود که نشان می‌دهد بخار آب به فاز پلیمری یا حل شده تغییر فاز می‌دهد. چگالی آب در تعادل با پلیمر، تابعی از فعالیت بخار آب محلی a است. با توجه به فرض اولیه، آب در فاز حل شده، فقط می‌تواند به فاز مایع تبدیل شود و در آن حالت می‌تواند در فاز مایع بماند یا بخار شود.

هم به وسیله رابطه (۱۳) محاسبه می‌شود.

$$i_j = \sigma_j \nabla \phi_j \quad (13)$$

۳- محاسبه کمیت‌های الکتروشیمیایی

روابط مورد استفاده برای محاسبه کمیت‌های الکتروشیمیایی در جدول ۵ آمده است. در این پژوهش از یک رابطه تجربی برای پتانسیل مدار باز سلول با دما استفاده می‌شود [۲۶]. اختلاف پتانسیل دو سر پیل با کم کردن افت‌های پتانسیل (فعال‌سازی و اهمی) از پتانسیل مدار باز به دست می‌آید $(V_{Cell} = E^0 - (V_{ohm} + V_a^{act} + V_c^{act}))$. افت پتانسیل فعال‌سازی از دو بخش سمت آند و کاتد تشکیل می‌شود. افت پتانسیل ناشی از تلفات اهمی با انتگرال‌گیری از جزء دیفرانسیلی طولی در بازه مکانی از لایه کاتالیست آند تا CL کاتد به دست می‌آید که i_x جریان بر واحد سطح غشاء یا چگالی جریان است [۹]. چگالی جریان انتقالی میزان تولید بار الکتریکی بر واحد زمان بر واحد حجم را نشان می‌دهد. این کمیت در واقع همان R_{eff} در معادله (۷) است که نرخ واکنش یا نرخ تولید آب و مصرف مواد اولیه با این کمیت بیان می‌شود. ضریب کشش الکترو آسمزی به عنوان تابعی از λ بیان می‌شود [۹]. رابطه موجود در جدول ۵ تقریبی مرتبه دوم از این وابستگی است.

۴- محاسبه خواص فیزیکی مواد

روابط مربوط به خواص فیزیکی مواد در جدول ۶ آمده است. μ_K برای

جدول ۴: معادلات حاکم در غشاء پلیمری

Table 4. Governing equation in polymer membrane

رابطه حاکم	نام معادله بقا
$\nabla \cdot (\sigma_j \nabla \phi_j) = 0$	انتقال پروتون‌ها
$\nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) = 0$ $k_{eff} = k_p$	انرژی

$$S_{rev} = \frac{R_{eff} k T}{n_k F} \sum_{p-r} S_f^0$$

$$S_{ohm} = \sigma_{i,eff} (\nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_i) = \frac{i^2}{\sigma_{i,eff}} \quad (12)$$

$$S_{pc} = (-S_{LV} + S_{DW} \gamma_{DW}) h_{fg}$$

$$S_{DR} = G^{*cr} h_{react}$$

$$S_{act} = (\phi_e - \phi_i) R_{eff}$$

جدول ۴ معادلات حاکم در غشاء پلیمری را ارائه می‌دهد. انتقال پروتون‌ها و انتقال انرژی در غشاء فقط به وسیله پدیده نفوذ انجام می‌شود. رسانایی پروتونی نافون، σ_i بر پایه [۲] است (معادله (۱۱)). چگالی جریان

جدول ۵: روابط لازم برای کمیت‌های الکتروشیمیایی در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

Table 5. Electrochemical quantities relations at proton exchange membrane fuel cell

رابطه حاکم	نام کمیت
$E^0 = 1.229 - 0.83e^{-3}(T - 298.15) + 4.31e^{-5} T \ln\left(\left(\frac{P_{H_2}}{P_{atm}}\right)\left(\frac{P_{O_2}}{P_{atm}}\right)^{0.5}\right)$	پتانسیل مدار باز سلول
$V_a^{act} = \frac{RT}{F} \ln\left(\frac{i}{i_a^{ref} X_{H_2} (1-s)}\right)$ $V_c^{act} = \frac{2RT}{F} \ln\left(\frac{i}{i_c^{ref} X_{O_2} (1-s)}\right)$	افت پتانسیل فعال‌سازی بخش کاتد و آند
$V_{ohm} = \int_a^c \frac{i_x}{\sigma} dx$	افت پتانسیل اهمی
$j = \nabla \vec{i} = \begin{cases} j_a : CL, Anode \\ j_c : CL, Cathode \\ 0 : Others \end{cases}$	چگالی جریان انتقالی
$n_{eod} = 0.0029\lambda^2 + 0.05\lambda - 3.4 \times 10^{-19}$	ضریب کشش الکترو آسمزی

جدول ۶: روابط لازم برای خواص فیزیکی مواد در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

Table 6. Physical properties relations of materials at proton exchange membrane fuel cell

رابطه حاکم	نام خاصیت
$\mu = \frac{\rho_k \mu_k}{\rho} = \frac{\sum_k X_k M_k \mu_k}{\sum_k X_k M_k}, \quad \mu_{eff} = \left[\frac{1.5(1-\varepsilon)}{\varepsilon} \right]^2 \mu, \quad 0 < \varepsilon < 1$	لزجت متوسط دینامیکی
$K_{eff} = \sum_k X_k K_k = \begin{cases} X_{O_2} K_{O_2} + X_{N_2} K_{N_2} + X_{H_2O} K_{H_2O}^g : GFC, Cathode \\ X_{H_2} K_{H_2} + X_{H_2O}^g K_{H_2O} : GFC, Anode \end{cases}$	ضریب هدایت حرارتی در کانال جریان گاز
$K_{eff} = \varepsilon_{gdl} (1-s) K_g + \varepsilon_{gdl} s K_{WL} + (1-\varepsilon_{gdl}) K_c, \quad K_g = \sum_k X_k K_k^g$	ضریب هدایت حرارتی در لایه نفوذ گاز
$K_{eff} = \varepsilon_{cat} (1-s) K_g + \varepsilon_{cat} s K_{wl} + \varepsilon_{cat}^c K_c + \varepsilon_{cat}^p K_p$	ضریب هدایت حرارتی در لایه کاتالیست
$K_{eff} = \varepsilon_{mem} K_g + (1-\varepsilon_{mem}) K_p$	ضریب هدایت حرارتی در غشاء
$C_{eff} = \sum_k w_k^g C_k^g = \begin{cases} w_{O_2} C_{O_2} + w_{N_2} C_{N_2} + w_{H_2O}^g C_{H_2O}^g : GFC, Cathode \\ w_{H_2} C_{H_2} + w_{H_2O}^g C_{H_2O}^g : GFC, Anode \end{cases}$	ظرفیت حرارتی مؤثر در کانال جریان گاز
$C_{eff} = C_g \varepsilon_{gdl} (1-s) + C_{wl} \varepsilon_{gdl} s + (1-\varepsilon) C_s, \quad C_g = \sum_k C_k C_k^g$	ظرفیت حرارتی مؤثر در لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست
$GFC : D_k^g = D_k^{ref} \left(\frac{T}{T^{ref}} \right)^{1.5} \left(\frac{P^{ref}}{P} \right)$ $GDL : D_{k,eff}^g = D_k^g \frac{\varepsilon_{void}^{gdl} (1-s)}{\tau_{gdl}}$ $CL : D_{k,eff}^g = D_k^g [\varepsilon_{void}^{gdl} (1-s)]^{1.5}$	ضریب نفوذ جرم
$D_{WD} = D_i e^{2416 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)}, \quad D_i = \begin{cases} 10^{-10} & \lambda < 2 \\ 10^{-10} (-3 + 2\lambda) & 2 < \lambda \leq 3 \\ 10^{-10} (6.5 - 1.167\lambda) & 3 < \lambda \leq 4.5 \\ 1.25 \times 10^{-10} & 4.5 \leq \lambda \end{cases}$	ضریب نفوذ جرم در غشاء [۹]
$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81 a_w - 39.85 a_w^2 + 36.0 a_w^3 & 0 < a \leq 1 \\ 14.0 + 1.4(a_w - 1) & 1 \leq a \leq 3 \\ 16.8 & 3 < a \end{cases}$	محتوای آب غشاء

دادن نقش این پدیده در اتلاف انرژی است. این متغیر میزان اتلاف جریان الکتریکی در اثر واکنش مستقیم هیدروژن و اکسیژن در آند و کاتد را نشان می‌دهد [۹]. در این حالت، بازده ناتراوایی که نشان‌دهنده تأثیر میان‌گذر گازهای واکنش دهنده است توسط معادله (۱۷) قابل تعریف است. بازده ناتراوایی به صورت ضریبی در بازده کلی پیل ضرب می‌شود [۹].

$$i_a^{loss} = i_a^{loss} + i_c^{loss} = i^{ideal} - i^{ave} \quad (16)$$

$$i_a^{loss} = 4FG_{O_2}^{cr}$$

$$i_c^{loss} = 2FG_{H_2}^{cr}$$

$$\xi_{imp} = 1 - \frac{i_a^{loss}}{i_a^{loss} + i^{ave}} - \frac{i_c^{loss}}{i_c^{loss} + i^{ave}} \quad (17)$$

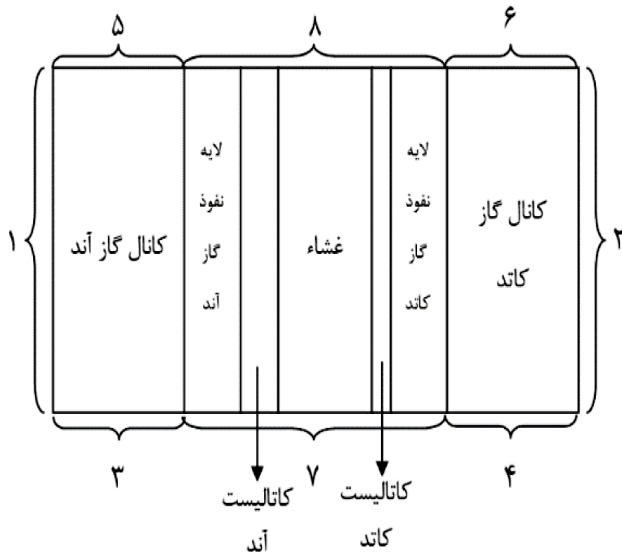
۶- شرایط مرزی

میدان حل نشان داده شده در شکل ۱ به صورت شکل ۲ مدل و شبکه‌بندی می‌شود. برای نشان دادن شرایط مرزی اعمال شده در مدل، هشت ناحیه در این شکل نشان داده شده است. شرایط مرزی اعمال شده در جدول ۷ آمده است.

۷- شبیه‌سازی عددی

۷-۱- مقدار متغیرهای مورد استفاده در شبیه‌سازی

خواص فیزیکی مورد نیاز در جدول ۸ آمده است. در جدول ۹ نیز مشخصات هندسی و شرایط عملکردی سلول مبنا آمده است. در این تحقیق، چگالی جریان $1/18 \text{ Acm}^{-2}$ به عنوان مرجع قرار گرفته است، مگر اینکه در جایی ذکر شده باشد.



شکل ۲: میدان حل معادلات به همراه مرزهای ناحیه حل

Fig. 2. Computational domain along with domain boundaries

هر سیال تابع دماست. برای اصلاح لزجت متوسط در محیط متخلخل از رابطه μ_{eff} استفاده می‌شود [۹].

ضریب هدایت حرارتی در کانال جریان گاز به دلیل حضور گازها به صورت متوسط مولی به دست می‌آید. K_{eff} در لایه نفوذ گاز به صورت ترکیبی از متوسط ضرایب هدایت حرارتی گازها، بستر متخلخل و آب مایع به دست می‌آید [۹] و در لایه کاتالیست ترکیبی از مقادیر گازها، بخش کربنی، بخش پلیمری و بخش مایع است. K_{eff} در غشاء پلیمری برابر مقدار آن برای پلیمر در نظر گرفته می‌شود ($K_{eff} = K_p$).

ظرفیت حرارتی مؤثر (C_{eff}) با توجه به خواص سیالات و محیط جامد به دست می‌آید. C_{eff} در لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست به آب مایع هم بستگی پیدا می‌کند. C_s ظرفیت حرارتی فاز جامد است.

ضریب نفوذ جرم در محیط‌هایی که گونه‌ها به صورت گازی و نامحلول وجود دارند مانند کانال جریان گاز از رابطه ارائه شده در جدول ۶ تبعیت می‌کند [۹]. به دلیل اینکه مواد جامد و همچنین آب مایع سدّی در برابر نفوذ گازها می‌باشند، ضریب نفوذ جرم در لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست بر اساس [۲۵] اصلاح می‌شود. تورم لایه نفوذ گاز در اثر فشار ناشی از مونتاژ پیل سوختی غشاء تبادل پروتون که مقداری از سطح کانال جریان گاز را ببندد به شکل یک ضریب انحنا در ضریب نفوذ جرم مدل می‌شود ($\tau = \varepsilon^{1.5}$). ضخامت و تخلخل لایه نفوذ گاز طوری تعیین شده است که تغییر شکل در اثر فشار شانه کانال جریان گاز در نظر گرفته شود. در غشاء گونه‌ها به صورت حل شده وجود دارند. در چنین شرایطی ضریب نفوذ جرم چند مرتبه کوچکتر از حالت آزاد است. ضریب نفوذ جرم برای هیدروژن و اکسیژن از رابطه $D_K^S = CT/\mu$ به دست می‌آید [۹]. μ لزجت محلول و C ثابتی وابسته به ماده حل شونده است.

λ محتوای آب غشاء است و در جدول ۶ بر حسب فعالیت آب $a_w = X_{water} P/P_{sat}$ آمده است. فعالیت آب در فاز گازی با رطوبت نسبی معادل است. فشار اشباع P_{sat} با رابطه (۱۴) محاسبه می‌شود [۹]. مقدار کل مول ماده بر واحد حجم در فاز گازی و مایع در معادلات (۱۵) آمده است.

$$P_{sat} = 9.5782e^{-4}T^4 - 1.07899812T^3 + 4.589572e^2T^2 - 8.7277445e^4T + 6.2552433e^6 \quad (14)$$

$$C_{tot} = \frac{C_{water}}{X_{water}} : \text{Liquid Phase} \quad (15)$$

$$C_{tot} = \frac{P}{RT} : \text{Gas Phase}$$

۵- محاسبه شدت میان‌گذر

به عنوان بخشی از مشارکت پژوهش حاضر در مطالعات انتقال آب در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون، در این بخش به معرفی پدیده میان‌گذر گازهای واکنش‌دهنده در اتلاف بازده پیل پرداخته می‌شود. چگالی جریان معادل اتلافی توسط معادله (۱۶) تعریف می‌شود که معیاری برای نشان

جدول ۷: شرایط مرزی معادلات حاکم

Table 7. Boundary conditions of governing equations

مرز ۸	مرز ۷	مرز ۶	مرز ۵	مرز ۴	مرز ۳	مرز ۲	مرز ۱	
$\partial P / \partial y = 0$	$\partial P / \partial y = 0$	—	—	$P = P_c$	$P = P_a$	$P' = 0$	$P' = 0$	پیوستگی (P)
$\partial u / \partial y = 0$	$\partial u / \partial y = 0$	$\partial u / \partial y = 0$	$\partial u / \partial y = 0$	$u = 0$	$u = 0$	$u = 0$	$u = 0$	u مومنوم
$\partial v / \partial y = 0$	$\partial v / \partial y = 0$	$\partial v / \partial y = 0$	$\partial v / \partial y = 0$	$v = 3.747 \text{ m/s}$	$v = 1.547 \text{ m/s}$	$v = 0$	$v = 0$	v مومنوم
$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial y} = 0$	$X_{O_2} = (1 - X_W) \frac{R_{O-N}}{1 + R_{O-N}}$	$X_{O_2} = 0$	$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial X_{O_2}}{\partial x} = 0$	گونه اکسیژن
$\frac{\partial X_{WV}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{WV}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{WV}}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial X_{WV}}{\partial y} = 0$	$X_{WV} = \frac{RH_c \cdot P_{sat}}{P}$	$X_{WV} = \frac{RH_a \cdot P_{sat}}{P}$	$\frac{\partial X_{WV}}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial X_{WV}}{\partial x} = 0$	گونه بخار آب
$\partial s / \partial y = 0$	$\partial s / \partial y = 0$	$\partial s / \partial y = 0$	$\partial s / \partial y = 0$	$s = 0$	$s = 0$	$\partial s / \partial x = 0$	$\partial s / \partial x = 0$	اشباع آب مایع
$\partial T / \partial y = 0$	$\partial T / \partial y = 0$	—	—	$T = 353 \text{ K}$	$T = 353 \text{ K}$	$T = 353 \text{ K}$	$T = 353 \text{ K}$	انرژی
$\partial \phi / \partial y = 0$	$\partial \phi / \partial y = 0$	برای معادله‌ی پتانسیل، شرایط مرزی در مرز کاتالیست‌ها $\partial \phi / \partial x = 0$ قرار داده شده است.						پتانسیل فاز

۷-۲- میدان حل و شبکه‌بندی

ابعاد میدان حل و تعداد شبکه هر لایه در حالت مبنا در جدول ۱۰ آمده است. اندازه شبکه در جاهایی با گرادین‌های بزرگ‌تر، ریزتر شده است. در شبیه‌سازی انجام شده، برای لایه کاتالیست تنها یک شبکه در نظر گرفته شده است. دو شبکه به طور همزمان به کار رفته است (شبکه اصلی برای کمیت‌های اسکالر مانند T و P و X و شبکه جابه‌جا شده برای کمیت‌های برداری مانند U و V و i_x و i_y).

۷-۳- فرآیند حل عددی

معادلات حاکم، توسط یک کد کامپیوتری که به زبان فورترا بر پایه روش حجم محدود توسط نویسندگان مقاله نوشته شده است، حل می‌شود. برای گسسته‌سازی جملات جابجایی تمام معادلات حاکم از روش قانون توانی استفاده می‌شود و رفع وابستگی بین معادلات با الگوریتم سیمپل صورت می‌گیرد. با محاسبه یک ماتریس یک‌بعدی به نام ماتریس باقی‌مانده، یک باقیمانده بی‌بعد برای تشخیص دقت جواب‌ها و همگرایی حل عددی

بدست می‌آید. شرط همگرایی سه مرتبه کوچک‌تر از مقدار پارامترهای حل، انتخاب شده است. سپس، کمیت‌های معادلات دیفرانسیل هشت‌گانه، به روش تکرار خطی که از الگوریتم ماتریس سه‌قطری با عوض کردن جهت جاروب استفاده می‌کند، حل می‌شود. فلوجارت حل معادلات حاکم در شکل ۳ آمده است.

۸- نتایج و بحث

۸-۱- استقلال نتایج از شبکه محاسباتی و اعتبار سنجی نتایج

برای نشان دادن استقلال نتایج از شبکه محاسباتی، تعداد نقاط شبکه (۵۱ و ۲۱۲) و (۵۱ و ۲۶۰) و (۶۱ و ۴۲۳) انتخاب شده اند و مقدار اشباع آب مایع در مقطع وسط کانال در راستای عمود بر غشاء ($v = L_{cell}/2$) در این سه شبکه با هم مقایسه شده است (شکل ۴ الف)). نتایج، اختلاف بسیار کمی را بین شبکه متوسط و ریز نشان می‌دهد. بنابراین از شبکه متوسط (۵۱ و ۲۶۰) برای حل استفاده شده است. در شکل ۴ ب) مقادیر به دست آمده از این تحقیق برای منحنی قطبش با داده‌های تجربی [۲۳] مقایسه شده است.

جدول ۹: مشخصات هندسی و عملکردی سلول مبنا

Table 9. Geometrical properties and operational conditions of the base cell

مقدار	مشخصه هندسی
۲/۰	L_{cell} (طول سلول، میلی‌متر)
۱/۰	$t_{passage}$ (پهنای کانال گاز، میلی‌متر)
۰/۲۹۰	$t_{a,gdl}$ (ضخامت لایه نفوذ گاز آند، میلی‌متر)
۰/۲۵۴	$t_{c,gdl}$ (ضخامت لایه نفوذ گاز کاتد، میلی‌متر)
۰/۰۱۶۵	t_{cat} (ضخامت CL، میلی‌متر)
۰/۰۵۰۸	t_{mem} (ضخامت غشاء، میلی‌متر)
۰/۳۷۵	ε_{void}^{gdl} (کسر تهی لایه نفوذ گاز)
۰/۲۴	ε_{poly}^{cat} (کسر حجمی پلیمر در لایه کاتالیست)
۰/۴۵	ε_C^{cat} (کسر حجمی Pt و کربن در CL)
۰/۳۱	ε_{void}^{cat} (کسر تهی CL)
۳۱۰	فشار ورودی (kPa)
۹۵	RH_a (%)
۹۵	RH_C (%)
۳/۵	τ_{gdl} (انحناء لایه نفوذ گاز)
۲۰۰۰	ψ (کیلوگرم بر متر مکعب بر ثانیه)
۵۰۰۰	h_m (بر ثانیه)
۳۵۳	T_a (کلوین)
۳۵۳	T_C (کلوین)
۰/۲۶۶	R_{O_2/H_2} (در ورودی GFC کاتد)

جدول ۸: خواص فیزیکی

Table 8. Physical properties

مقدار	خاصیت فیزیکی
۹۷۱/۸۲	ρ_{wl} (کیلوگرم بر متر مکعب در ۸۰ درجه سانتی‌گراد)
۰/۵۰	α_a
۰/۵۵	α_c
۴۲/۵	$S_{f,a}^{\circ}$ (آنتروپی واکنش آند، ژول بر مول بر کلوین)
۱۲۶/۸ (مایع) ۶۴/۸ (بخار)	$S_{f,c}^{\circ}$ (آنتروپی واکنش کاتد، ژول بر مول بر کلوین)
$1/76 \times 10^{-11}$	K_{hy} (در لایه نفوذ گاز، متر مربع)
$1/8 \times 10^{-18}$	K_{hy} (در غشاء، متر مربع)
۱۸۴۰	ρ_m (کیلوگرم بر متر مکعب)
۱/۱	M_m (کیلوگرم بر مول)
۱۰۰	i_{ref} (در آند، آمپر بر متر مربع)
۱۰۰۰	i_{ref} (در کاتد، آمپر بر متر مربع)
۳۵۳	T^{ref} (کلوین)
۱۰۱۳۲۵	P^{ref} (پاسکال)
-۲۸۵۸۳۰	h_{fg} یا h_{react} (ژول بر کیلوگرم)
۸/۳۱۴	R (ژول بر کیلوگرم بر کلوین)
۹۶۴۸۷	F (کولون بر مول)
$1/1 \times 10^{-4}$	$D_{H_2}^{ref}$ (متر مربع بر ثانیه)
$3/2 \times 10^{-5}$	$D_{O_2}^{ref}$ (متر مربع بر ثانیه)
$7/35 \times 10^{-5}$	D_{water}^{ref} (متر مربع بر ثانیه)
$1/0.6 \times 10^{-8}$	$D_{H_2}^s$ (متر مربع بر ثانیه در ۳۵۳ کلوین)
$2/0.16 \times 10^{-3}$	M_{H_2} (کیلوگرم بر مول)
$31/999 \times 10^{-3}$	M_{O_2} (کیلوگرم بر مول)
$18/0.15 \times 10^{-3}$	M_w (کیلوگرم بر مول)
$28/0.13 \times 10^{-3}$	M_{N_2} (کیلوگرم بر مول)
۰/۲۳۱	K_{gdl} (ژول بر مول بر کلوین)
۰/۱۴۷	K_{cat} و K_{mem} (ژول بر مول بر کلوین)

داده‌های تجربی دارای خطای $\pm 0.25\%$ ولت در پتانسیل و $\pm 0.2\%$ آمپر بر سانتی‌متر مربع در جریان می‌باشد. مقادیر به دست آمده از مدل محاسباتی

جدول ۱۰: ابعاد میدان حل و تعداد شبکه (حالت مبنا)

Table 10. Dimensions of computational domain and grid size (the base case)

لایه	اندازه در جهت x (میلی متر)	اندازه در جهت y (میلی متر)	تعداد شبکه در جهت x	تعداد شبکه در جهت y
GFC آند	۱/۰	۲/۰	۱۰۸	۵۱
GFC کاتد	۱/۰	۲/۰	۱۰۸	۵۱
لایه نفوذ گاز آند	۰/۲۹۰	۲/۰	۱۹	۵۱
لایه نفوذ گاز کاتد	۰/۲۵۴	۲/۰	۱۷	۵۱
CL آند	۰/۰۱۶۵	۲/۰	۱	۵۱
CL کاتد	۰/۰۱۶۵	۲/۰	۱	۵۱
غشاء	۰/۰۵۰۸	۲/۰	۴	۵۱

علت شلوغ بودن خطوط در غشاء این است که سیالها در آنجا مصرف می‌شوند. دیگر اینکه به دلیل کوچک بودن مرتبه سرعت در غشاء، خطای گرد کردن در نرم‌افزار رخ می‌دهد.

در شکل ۷ کانتور توزیع اشباع آب مایع (S) در میدان حل و در شرایط مبنا، نشان داده شده است. به دلیل بزرگ بودن سرعت‌های جابه‌جایی در کانال‌ها سیال اجازه تقطیر نمی‌یابد و هر مقدار آب مایع در لایه نفوذ گاز تشکیل شده باشد در فاصله باریکی در مرز لایه نفوذ گاز و کانال انتقال می‌یابد و لذا اشباع در کانال‌ها بسیار ناچیز است. مقدار آب مایع در غشاء برابر صفر و آب موجود در آن به صورت حل شده در نظر گرفته شده است. با توجه شکل ۷ مقدار آب مایع در کاتد بیشتر از آند است. همچنین در ابتدای کانال به دلیل بالاتر بودن میزان واکنش و در نتیجه تولید آب، مقدار آب مایع هم بیشتر است که مقدار آن در راستای کانال کاهش می‌یابد. معمولاً در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون آب مایع بیشتر در سمت کاتد تشکیل می‌شود و بیشتر مطالعات در سمت کاتد انجام گرفته است.

شکل ۸ توزیع دما در میدان حل را نشان می‌دهد. با توجه به شرایط مرزی، حداقل دما در پیل برابر 353 K و حداکثر آن با توجه به شکل $353/521\text{ K}$ است. یعنی مقدار افزایش دما در اثر واکنش‌ها حدود $0/5\text{ K}$ است. مشاهده می‌شود که دما در محدوده غشاء بیشینه است و در سمت کاتد بیشتر از آند می‌باشد. در کاتالیست آند و کاتد افزایش دما عمدتاً به خاطر انرژی فعال‌سازی واکنش و در غشاء به خاطر تلفات اهمی ناشی از جریان بار مثبت است. حرارت تولید شده از واکنش تولید آب در کاتد، بیشتر از واکنش تجزیه هیدروژن در آند است. بنابراین دمای سمت کاتد بالاتر از دمای سمت آند است. واکنش اکسیداسیون هیدروژن در آند گرماگیر، اما واکنش کاهش

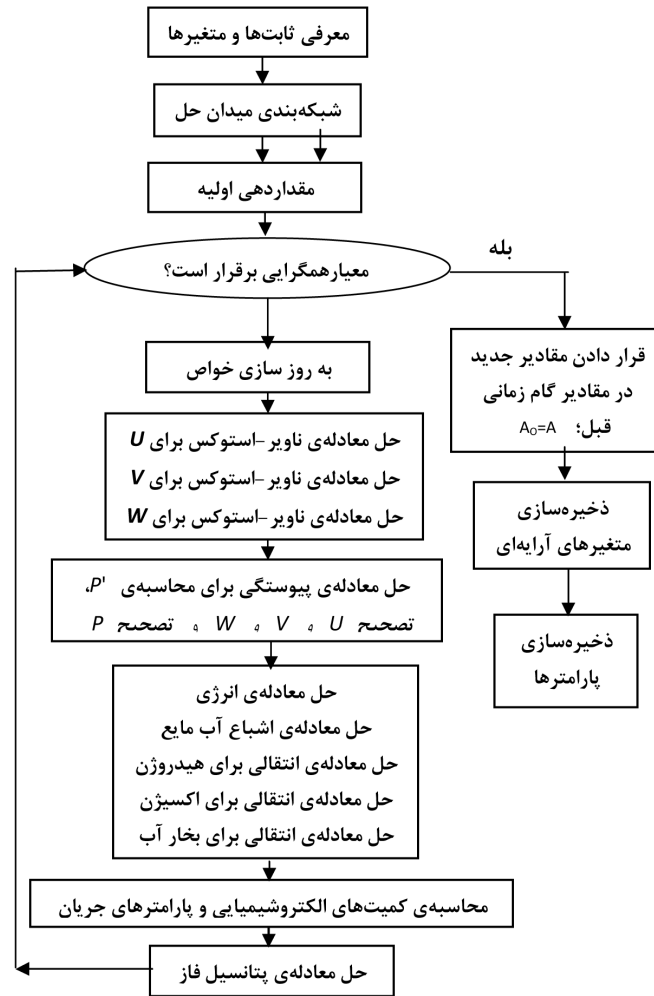
باید در محدوده خطای داده‌های تجربی باشد. همخوانی قابل قبولی بین نتایج عددی و تجربی قابل مشاهده است.

۸-۲- مطالعه عمومی متغیرها در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

شکل ۵ (الف) کانتور سرعت جابه‌جایی متوسط گونه‌های گازی در میدان حل را نشان می‌دهد. مرتبه سرعت سیال در غشاء چند مرتبه ابعادی کوچکتر از سرعت در کانال است. لایه نفوذ گاز متخلخل مانند یک دیواره عمل می‌کند و گازها بیشتر به وسیله پدیده نفوذ به درون آن انتقال می‌یابند. به دلیل بزرگتر بودن سرعت ورودی در کانال کاتد، در ادامه کانال هم سرعت کاتد بیشتر است. با تشکیل لایه‌ی مرزی در دیواره‌ها، سرعت در وسط کانال‌ها و در راستای کانال بیشتر می‌شود. به طور معمول $0/80$ هوا نیتروژن است که بی‌اثر بوده و در سمت کاتد کمک می‌کند که هوا مومنتم کافی برای تخلیه پلاگ آب را حفظ کند اما به خاطر نبود این گاز حامل (نیتروژن) در سمت آند، احتمال طغیان در آند می‌باشد [۱۹]. در شکل ۵ (ب) بردارهای سرعت جابه‌جایی در میدان حل نشان داده شده است. در این شکل لایه‌ها به تفکیک نشان داده شده‌اند. مجموعه لایه‌های کاتالیست و غشاء به نام مجموعه غشا و الکتروُد^۱ آمده است. مایل بودن بردارهای سرعت به دلیل تشکیل لایه مرزی در دیواره‌های کانال کاملاً واضح است.

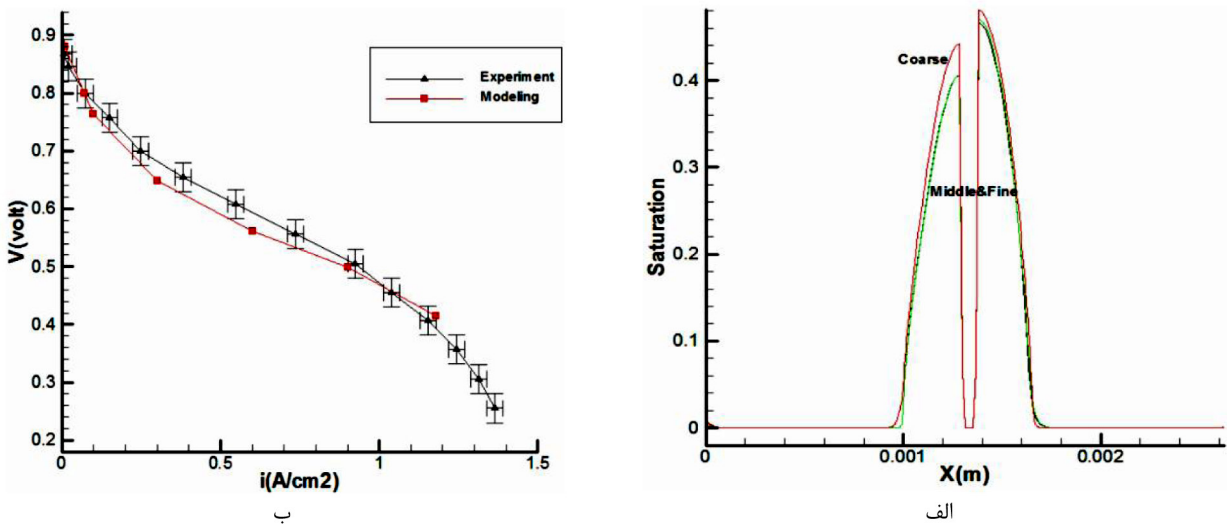
در شکل ۶ خطوط جریان میدان حل نشان داده شده است. با توجه به خطوط جریان در لایه نفوذ گاز مشاهده می‌شود که در آند و کاتد، سرعت جابه‌جایی متوسط از کانال گاز به لایه نفوذ گاز و در نتیجه به سمت غشاء است. البته مرتبه سرعت در لایه نفوذ گاز بسیار پایین‌تر از کانال می‌باشد.

¹Membrane Electrode Assembly (MEA)



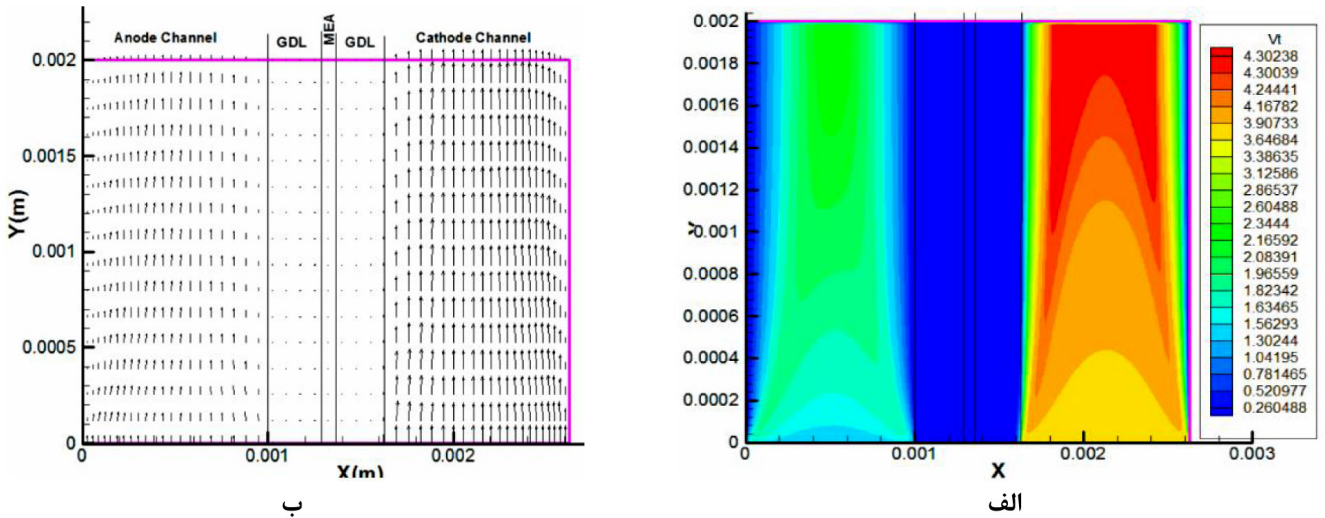
شکل ۳: فلوچارت حل معادلات حاکم بر پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

Fig. 3. Solution flowchart of governing equations on proton exchange membrane fuel cell



شکل ۴ الف) پروفیل اشباع آب در مقطع وسط کانال؛ ب) مقایسه‌ی منحنی قطبش با داده‌های تجربی [۲۳]

Fig. 4. a) Distribution of water saturation (s) at the middle of channel; b) Comparison of polarization curve with experimental data



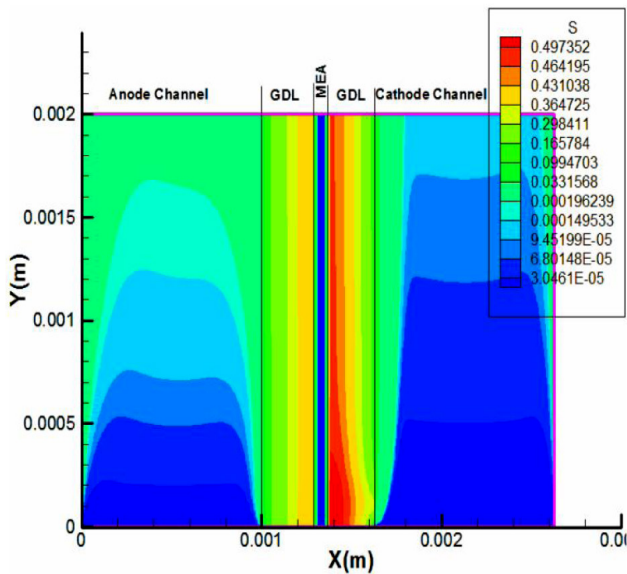
شکل ۵ الف) کانتور سرعت جابه جایی؛ ب) نمایش بردارهای سرعت جابه جایی

Fig. 5. a) Convection velocity contour; b) Convection velocity vectors

غلظت مولی هیدروژن در غشاء بسیار کمتر از غلظت آن در کانال است. تنها مقدار اندکی هیدروژن شانس عبور از ضخامت غشاء و رسیدن به کاتالیست کاتد را دارد که در آنجا بر اثر واکنش مستقیم با اکسیژن مصرف می‌شود. همچنین در راستای کانال آند، غلظت هیدروژن با مصرف آن کمتر می‌شود. همچنین هر چه از سمت کانال آند به سمت کاتالیست آند حرکت شود، باز هم غلظت هیدروژن کاهش می‌یابد. براساس شکل ۹ (ب) در سمت کاتد غشاء، جایی که اکسیژن از حالت آزاد به شکل محلول در می‌آید، ناپیوستگی آشکاری قابل تشخیص است. مشابه هیدروژن مقدار کمی اکسیژن از داخل غشاء عبور می‌کند و در کاتالیست آند با هیدروژن واکنش می‌دهد [۹]. در راستای کانال

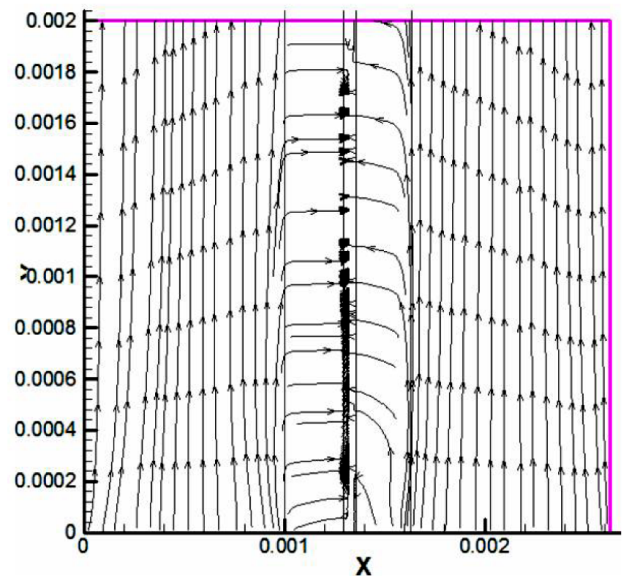
اکسیژن در کاتد گرم‌تر می‌باشد. بنابراین، دمای آند از دمای کاتد پایین‌تر است، و در نتیجه، طغیان آند در اثر تقطیر آب مایع از طغیان کاتد شدیدتر است. بالا بردن دمای صفحه آند به میزان متوسط، یک روش مؤثر برای کاهش طغیان آن می‌باشد.

شکل ۹ کانتور توزیع غلظت مولی هیدروژن، اکسیژن و بخار آب و آب حل شده در فاز پلیمر را در میدان حل نشان می‌دهد. براساس شکل ۹ (الف) هیدروژن از مرزهای کانال آند به عمق سلول نفوذ می‌کند و به کاتالیست می‌رسد. در توزیع غلظت هیدروژن در مرز کاتالیست یک ناپیوستگی مشاهده می‌شود؛ چون هیدروژن برای ورود به غشاء باید در آب محلول، حل شود.



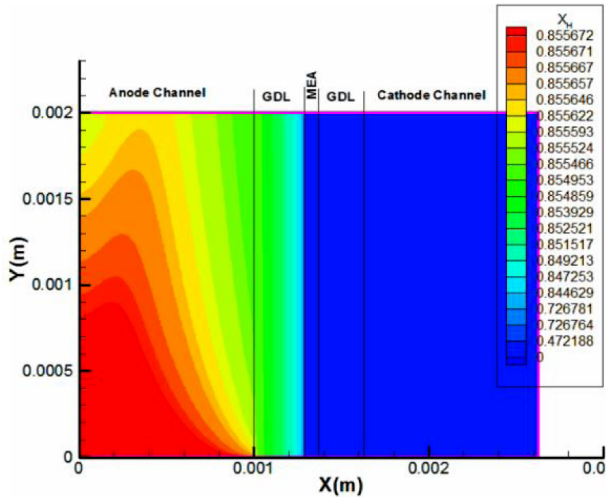
شکل ۷: کانتور توزیع اشباع آب مایع (s)

Fig. 7. Saturated liquid water contour

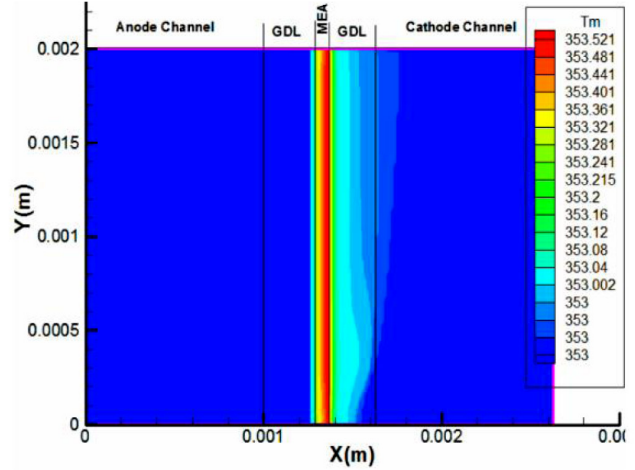


شکل ۶: نمایش خطوط جریان جابه جایی

Fig. 6. Convection streamlines

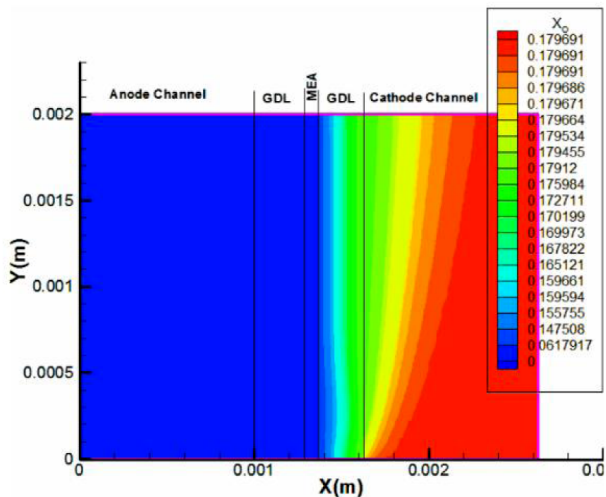


(الف)

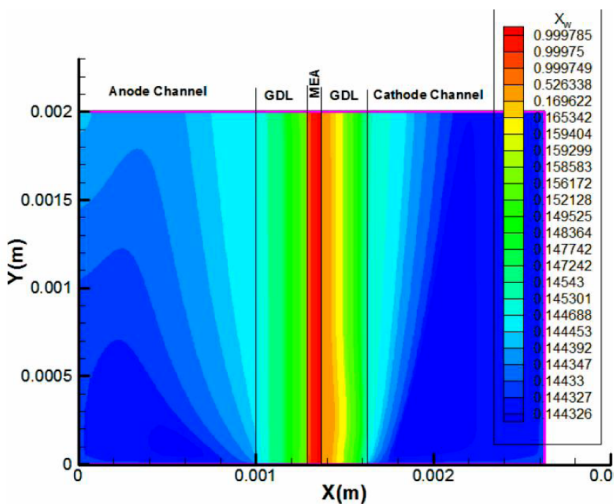


شکل ۸: کانتور توزیع دما در میدان حل

Fig. 8. Temperature contour



(ب)



(ج)

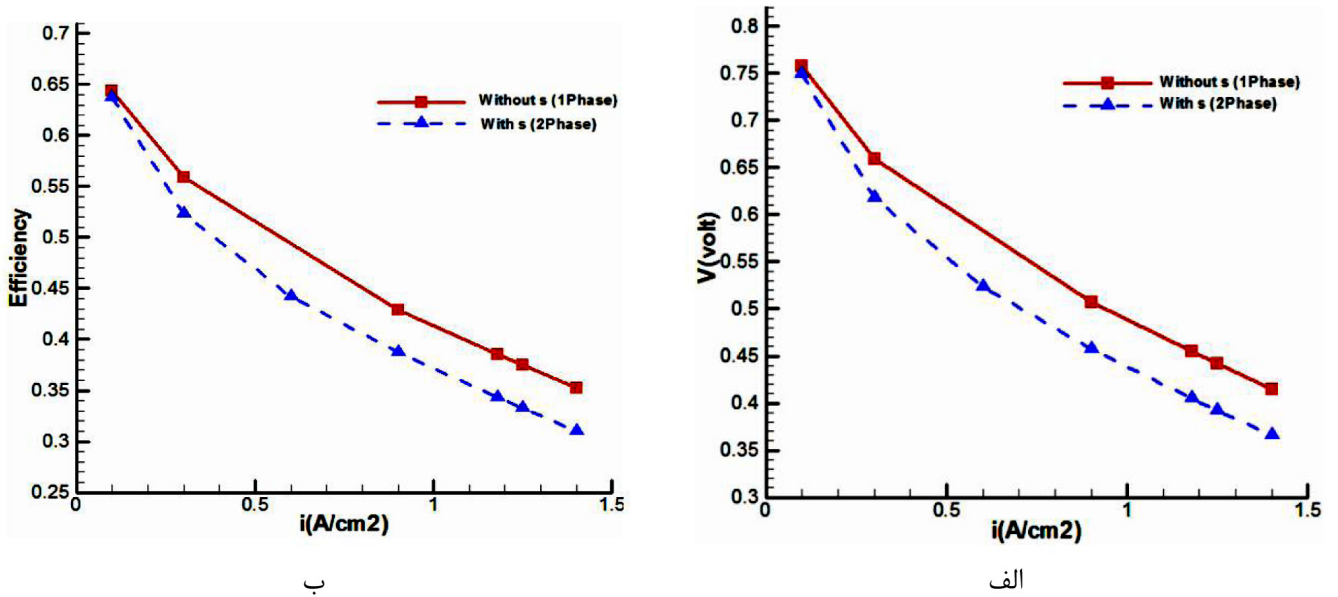
شکل ۹: کانتور توزیع غلظت مولی (الف) هیدروژن؛ (ب) اکسیژن؛ (ج) بخار آب و آب حل شده

Fig. 9. Mole concentration contour: a) Hydrogen; b) Oxygen; c) Water vapor and dissolved water

کاتد غلظت اکسیژن با مصرف آن کمتر می‌شود. همچنین هر چه از سمت کانال به سمت کاتالیست کاتد حرکت شود، باز هم غلظت اکسیژن کمتر می‌شود. براساس شکل ۹ (ج) غلظت مولی آب حل شده در فاز پلیمر تقریباً برابر یک است. البته مقداری هم گازهای حل شده در آن، در غشاء وجود دارد. بخار آب در لایه نفوذ گاز کاتد به دلیل تولید آب در سمت کاتد بیشتر از آند است. به علت بزرگتر بودن سرعت سیال ورودی در کانال کاتد، مقدار نفوذ بخار آب به کانال کاتد کمتر از کانال آند است. در راستای کانال‌ها، غلظت مولی بخار آب با تولید آب افزایش می‌یابد. همچنین هرچه از سمت کانال‌ها به سمت کاتالیست مربوطه حرکت شود، باز هم غلظت مولی بخار آب بیشتر می‌شود. این نکته به دلیل کاهش غلظت مولی مواد واکنش‌دهنده است که باعث افزایش غلظت مولی بخار آب می‌شود. یکی از دلایل بیشتر بودن بخار آب در لایه نفوذ گاز کاتد، انتقال آب در اثر کشش الکترواسمزی است.

۸-۳- در نظر گرفتن انتقال آب مایع در عملکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون

در شکل ۱۰ (الف) و ۱۰ (ب) به ترتیب منحنی قطبش و منحنی راندمان مدل در حالت مینا با در نظر گرفتن آب مایع و بدون آن نشان داده شده است. همانطور که از شکل ۱۰ (الف) پیداست، وقتی اثر آب مایع در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون در نظر گرفته می‌شود، منحنی قطبش مربوطه پایین‌تر قرار می‌گیرد. آب مایع از دو طریق بر راندمان پیل اثر می‌گذارد. یک اثر آب مایع، اثر انتقال جرمی آن با مسدود کردن راه عبور گازها در لایه نفوذ گاز است که بر معادلات ضریب نفوذ اثر می‌گذارد. اثر دیگر آب مایع در سطح لایه کاتالیست است که سطح مؤثر آن را کاهش می‌دهد. هرچه چگالی جریان پایین‌تر باشد، اختلاف منحنی‌های قطبش کمتر است. چون در چگالی جریان‌های پایین‌تر، آب مایع کمتری تولید می‌شود، اثر هر دو نقش ائتلافی آب مایع کاهش می‌یابد. روند تغییر دو منحنی در شکل ۱۰ (ب) کاملاً مانند



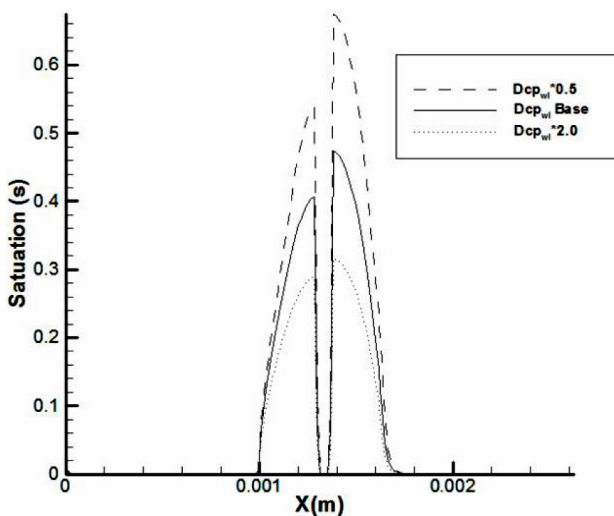
شکل ۱۰: تأثیر در نظر گرفتن آب مایع (الف: منحنی قطبش؛ ب) راندمان

Fig. 10. Effect of including and excluding liquid water saturation: a) on polarization curve; b) on efficiency curve

این لایه نفوذ گاز می‌تواند آب مایع موجود در کانال آند را جذب کند و گرفتگی آب به میزان کمتری تحت شرایط عملکردی مشابه، مشاهده شود. علت دیگر طفیان در آند نفوذ معکوس می‌باشد که با افزایش مقدار آب اشباع در پیل به علت اختلاف غلظت آب مایع در دو الکترود رخ می‌دهد.

۸-۴-۲- تأثیر چگالی جریان

در شکل ۱۲ توزیع اشباع آب مایع و غلظت مولی اکسیژن در راستای عمود بر غشاء (x) در وسط کانال (y=1 mm) در سه چگالی جریان مختلف



شکل ۱۱: اثر ضریب انتشار آب مایع بر توزیع اشباع آب

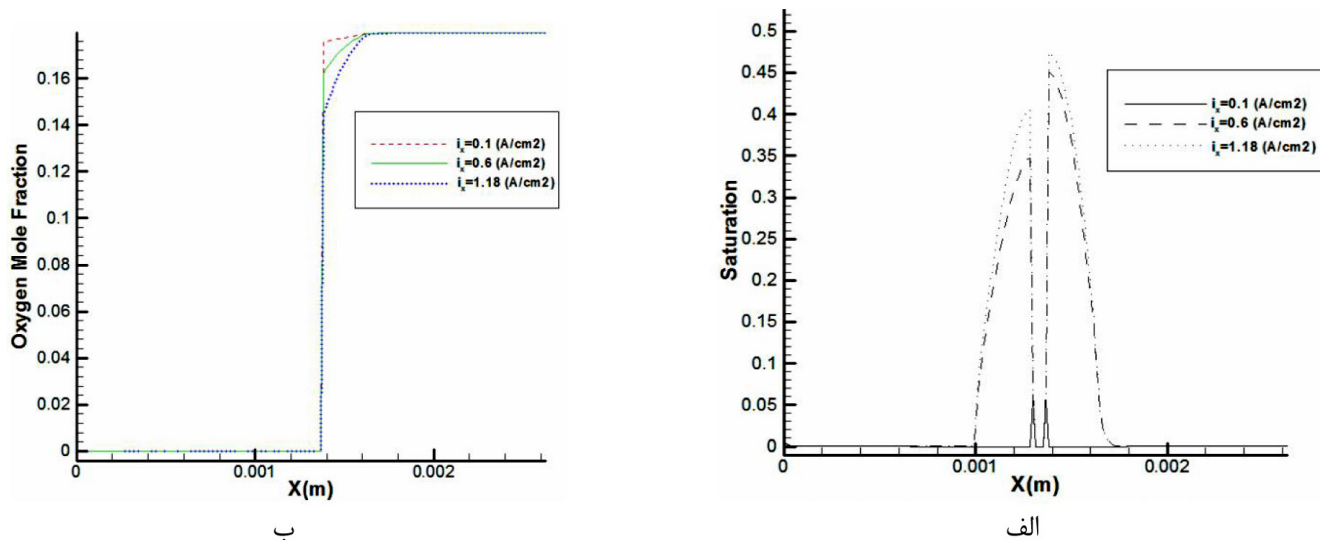
Fig. 11. Effect of liquid water diffusion coefficient on distribution of liquid water saturation

منحنی قطبش است و همان اثرات اینجا هم مشاهده می‌شود.

۸-۴-۳- بررسی تأثیر متغیرها بر کارکرد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون در تمام نتایج این بخش، شرایط سلول طبق شرایط حالت مینا (جدول ۹) بوده و تنها یکی از متغیرها تغییر یافته است.

۸-۴-۱- تأثیر ضریب نفوذ آب مایع

توزیع اشباع آب مایع در ضریب نفوذهای مختلف آب مایع در راستای عمود بر غشاء (x) در وسط کانال (y=1 mm) در شکل ۱۱ نشان داده شده است. ضریب نفوذ آب مایع به وسیله متغیرهای مختلفی مانند آب‌دوستی یا آب‌گریزی لایه نفوذ گاز تغییر می‌کند. مطابق شکل، هرچه آب‌گریزی لایه نفوذ گاز بیشتر باشد (افزایش ضریب نفوذ آب مایع)، انتقال آب مایع نیز افزایش خواهد یافت و مقدار تجمع آب مایع در لایه نفوذ گاز کمتر می‌شود و بنابراین راندمان پیل افزایش می‌یابد. مقدار حداکثر آب مایع در حالت مینا حدود ۰/۴۷ می‌باشد که این مقدار با دو برابر شدن ضریب نفوذ جرم آب مایع به حدود ۰/۳۱ و با نصف شدن آن به ۰/۶۸ می‌رسد. آب مایع در سمت کاتد بیشتر از آند است و هر چه از سمت کانال به سمت لایه‌های کاتالیست حرکت شود، مقدار آن افزایش می‌یابد. مقدار آب مایع در غشاء برابر صفر است. همانگونه که مشاهده می‌شود، مقدار اشباع آب مایع در الکترود آند نیز قابل توجه است که ضرورت بررسی بیشتر رفتار آب مایع در این الکترود را می‌رساند. این منحنی به وضوح اهمیت شبیه سازی یکپارچه پیل سوختی غشاء تبادل پروتون با در نظر گرفتن الکترود آند در ساختار پیل را می‌رساند. مشاهده می‌شود که در الکترود آند نیز، افزایش ضریب نفوذ جرم به کاهش تجمع آب کمک می‌کند. اگر از لایه نفوذ گاز آب‌دوست در آند استفاده شود،



شکل ۱۲: تأثیر چگالی جریان: الف) بر توزیع اشباع آب مایع؛ ب) بر توزیع غلظت مولی اکسیژن

Fig. 12. Effect of current density: a) on distribution of saturated liquid water; b) on distribution of mole concentration of oxygen

۸-۴-۳- تأثیر ضخامت غشاء

تأثیر ضخامت غشاء بر چند متغیر در چگالی جریان $i = 1/18 \text{ Acm}^{-2}$ در جدول ۱۱ آمده است. ضخامت غشاء تأثیر کمی روی غلظت اکسیژن دارد. مشاهده می‌شود که اختلاف غلظت‌ها حدود 0.07 است که نسبت به مقدار عددی غلظت تغییری حدود 0.5% است. از آنجا که ضخامت مستقیماً بر افت ولتاژ اهمی اثر می‌گذارد، توان سلول با توجه به افزایش ضخامت غشاء کاهش می‌یابد. این کاهش بین 10 تا 20 درصد تغییر می‌کند. با توجه به اینکه افت ولتاژ اهمی رابطه مستقیمی با چگالی جریان دارد، در چگالی جریان‌های بالاتر تأثیر ضخامت غشاء بر کاهش چگالی توان بیشتر خواهد شد. احتمالاً با افزایش کافی چگالی جریان، مقدار چگالی توان بعد از گذر از یک مقدار بیشینه به صفر خواهد رسید. چون افت ولتاژ اهمی همینطور زیاد می‌شود. با افزایش ضخامت غشاء، تلفات اهمی و حرارت تولیدی ناشی از آن افزایش یافته و سیال گرم‌تر می‌شود. بنابراین همانطور که در جدول نشان داده شده است، دمای پیل با افزایش ضخامت غشاء افزایش می‌یابد. به نظر می‌رسد افزایش تلفات اهمی، یعنی همان افزایش سد در برابر عبور پروتون‌ها، باعث کاهش نرخ واکنش می‌شود و این مسأله در مقادیر جدول هم قابل مشاهده است. افزایش ضخامت غشاء، کاهش عبور گازها از غشاء و پدیده میان‌گذر را در پی دارد. زیرا مانع برای عبور گازها بیشتر می‌شود. روند افزایش بازده میان‌گذر با افزایش ضخامت غشاء در جدول دیده می‌شود. بالاتر بودن بازده میان‌گذر به معنی ناتراواتر بودن غشاء است و افت ناشی از عبور گازها کمتر می‌باشد.

۸-۴-۴- تأثیر نسبت اکسیژن به نیتروژن

تأثیر نسبت اکسیژن به نیتروژن بر چند متغیر در چگالی جریان Acm^{-2}

نشان داده شده است. در چگالی جریان 0.1 Acm^{-2} ، آب مایع بسیار کم است و مقدار آن حداکثر حدود 0.05 باشد، ولی در چگالی جریان‌های 0.6 Acm^{-2} و $1/18 \text{ Acm}^{-2}$ مقدار بیشینه اشباع آب به ترتیب حدود 0.44 و 0.47 است. هرچه جریان مصرفی بالاتر باشد، آب مایع بیشتری تولید می‌شود و بنابراین ولتاژ فعال‌سازی بیشتر و در نتیجه ولتاژ سلول کمتر خواهد شد. به عبارتی چگالی جریان یک پارامتر کنترلی برای تشکیل آب در هر دو الکترود است. چگالی جریان بالا منجر به شار آب بیشتر از آند به کاتد توسط کشش الکترواستاتیک شده، محتوای آب در آند را کاهش داده و تمایل به تشکیل آب مایع را کم می‌کند. از طرفی افزایش چگالی جریان موجب دیفیوژن معکوس از کاتد به آند می‌گردد. این دو عامل به همراه اختلاف فشار بین دو الکترود در طغیان آند مؤثر هستند. نتایج شکل ۱۲ الف) نشان می‌دهد که با افزایش چگالی جریان مقدار آب در آند افزایش می‌یابد.

در شکل ۱۲ ب) مشاهده می‌شود، با افزایش چگالی جریان، غلظت مولی اکسیژن در نزدیک لایه کاتالیست کاهش می‌یابد. به دلیل بالا بودن سرعت گاز در کانال کاتد، اثر کاهش غلظت اکسیژن در لایه‌های کاتالیست فرصت نفوذ به سمت دیواره کانال را پیدا نمی‌کند. اگر معادلات در طول بیشتری از سلول حل شوند، پدیده انتشار کاهش غلظت اکسیژن در لایه‌های کاتالیست در دیواره‌های کانال هم دیده می‌شود. بیشترین کاهش غلظت در ناحیه لایه نفوذ گاز دیده می‌شود. بنابراین با کاهش ضخامت، کاهش انحنا و افزایش تخلخل لایه نفوذ گاز یا تسهیل نرخ خروج آب مایع می‌توان افت غلظت اکسیژن در لایه نفوذ گاز را کمتر کرد و راندمان بهتری از پیل گرفت. البته هر کدام از این تغییرات ممکن است متغیرهای دیگری را دستخوش تغییر کنند که تغییر آنها لزوماً باعث افزایش راندمان نشود.

جدول ۱۱: تأثیر ضخامت غشاء بر متغیرها

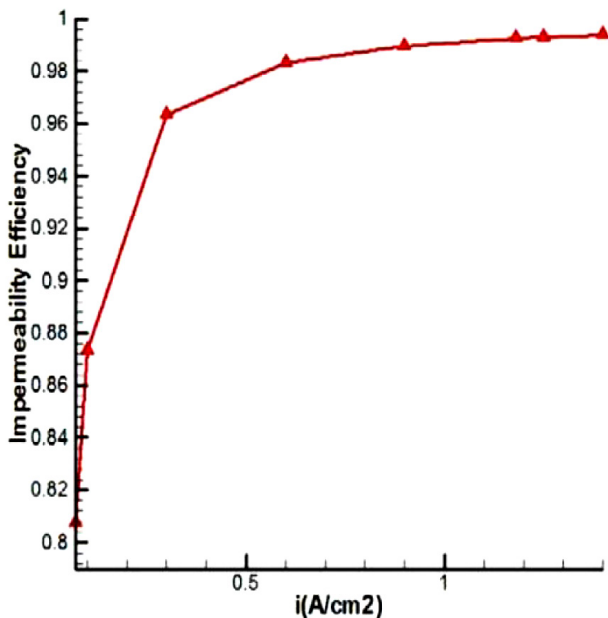
Table 11. Effect of membrane thickness on variables

ضخامت غشاء به میکرون	چگالی توان (W/m)	حداقل غلظت مولی اکسیژن	حداکثر دمای پیل (K)	حداکثر اشباع آب مایع	بازده میان گذر	بازده کلی	پتانسیل (V)	افت پتانسیل اهمی (V)
۵۰/۸	۱۰/۷۳	۱۴/۷۹	۳۵۳/۵۶	۰/۵۳۱	۰/۹۹۲	۰/۳۸۵	۰/۴۵۵	۰/۰۴۹۶
۱۰۸	۹/۷۷	۱۴/۸۵	۳۵۳/۶۳	۰/۵۲۹	۰/۹۹۷	۰/۳۵۱	۰/۴۱۴	۰/۰۹۰۲
۲۳۰	۷/۸۳	۱۴/۹۳	۳۵۳/۷۸	۰/۵۲۷	۰/۹۹۹	۰/۲۸۱	۰/۳۳۲	۰/۱۷۲۰

جدول ۱۲: تأثیر نسبت اکسیژن به نیتروژن بر متغیرها

Table 12. Effects of oxygen to nitrogen ratio on variables

نسبت اکسیژن به نیتروژن	چگالی توان (W/m)	حداقل غلظت مولی اکسیژن	حداکثر دمای پیل (K)	حداکثر اشباع آب مایع	بازده میان گذر	بازده کلی	پتانسیل (V)	افت پتانسیل اهمی (V)
۰/۱۵	۸/۷۵	۷/۶۷	۳۵۳/۶۴	۰/۵۳۰	۰/۹۹۴	۰/۳۱۵	۰/۳۷۱	۰/۰۴۹۵
۰/۲۶۶	۹/۵۵	۱۴/۷۹	۳۵۳/۶۰	۰/۵۳۱	۰/۹۹۲	۰/۳۴۳	۰/۴۰۵	۰/۰۴۹۵
بی نهایت	۱۴/۰۷	۸۵/۸۴۰	۳۵۳/۴۶	۰/۵۳۴	۰/۹۸۱	۰/۴۹۹	۰/۵۹۶	۰/۰۴۹۶



شکل ۱۳: تغییر بازده تراوایی با تغییر چگالی جریان

Fig. 13. Cross-over efficiency versus current density

در $i=1/18$ در جدول ۱۲ آمده است. این جدول برای سه مقدار نسبت اکسیژن به نیتروژن ارائه شده است که مقدار $0/266$ برای مخلوط هوای عادی و مقدار بینهایت برای اکسیژن خالص و مقدار $0/15$ هم برای غلظت اکسیژن کمتر از معمول می‌باشد. به طور واضح، با افزایش غلظت اکسیژن در ورود کانال، حداقل غلظت مولی اکسیژن در کل میدان حل افزایش می‌یابد. افزایش غلظت اکسیژن باعث کاهش افت پتانسیل فعالسازی و در نتیجه افزایش پتانسیل سلول و بازده کل سلول و چگالی توان آن می‌شود. همچنین، با کاهش پتانسیل فعالسازی، حرارت حاصل از این افت پتانسیل هم کاهش می‌یابد. بنابراین با افزایش غلظت اکسیژن دمای سلول کمی کاهش می‌یابد. البته این کاهش ناچیز است. هرچه اختلاف غلظت در دو طرف غشاء بیشتر باشد، سیال بیشتری به وسیله پدیده میان گذر انتقال می‌یابد. بنابراین با افزایش غلظت اکسیژن، بازده میان گذر کاهش می‌یابد و در نتیجه مقدار بیشتری اکسیژن بدون تولید الکتریسیته در سمت آند مصرف می‌شود.

۸-۵- مطالعه پدیده میان گذر

در شکل ۱۳، روند تغییر مقدار بازده میان گذر یا بازده تراوایی، با تغییر چگالی جریان در شرایط مبنا نشان داده شده است. هر چه چگالی جریان بالاتر رود، نسبت گازهای عبور کرده از غشاء به گازهای مصرف شده برای

- افزایش ضخامت غشاء، کاهش عبور گازها از غشاء و افزایش پدیده میان‌گذر را در پی دارد.
- با افزایش غلظت اکسیژن، بازده میان‌گذر کاهش می‌یابد.
- در چگالی جریان‌های پایین برای محاسبه دقیق‌تر بازده انرژی، در نظر گرفتن نقش بازده تراوایی ضروری است.

آب مایع به دو روش در راندمان پیل اثر می‌گذارد. اول اینکه باعث مسدود شدن راه عبور گازهای واکنش‌دهنده می‌شود و دوم اینکه باعث کاهش سطح مؤثر کاتالیست می‌شود. با توجه به نتایج حاصل از این تحقیق می‌توان تشکیل و انتقال آب مایع در کاتد و آنُد را با پارامترهای چگالی جریان، دما، آب‌گریزی/آب‌دوستی لایه نفوذ گاز و تغییر دبی مدیریت کرد. این تحقیق اهمیت انجام مطالعات در زمینه جریان دوفازی و مدیریت آب درون آنُد پیل سوختی غشاء تبادل پروتون را با الگوریتم‌هایی که حرکت قطرات را درون کانال‌ها در نظر می‌گیرند، مشخص می‌کند. با در نظر گرفتن دینامیک قطرات در کانال گاز آنُد، قطعاً می‌توان راهکارهای دقیق‌تری برای مدیریت آب پیشنهاد داد. این موضوع توسط نویسندگان این مقاله در حال مطالعه است.

فهرست علائم

متغیرها و ثوابت

RH	رطوبت نسبی ورودی
r_m	شعاع انحنای سطح مشترک مایع جامد (m)
rsu	مانده معادله u مومنتوم
S	جمله‌ی تولید
s	اشباع آب مایع / آنتروپی
Su	جمله تولید غیر همگن
T	دما (K)
t	ضخامت
u	سرعت در جهت x
V	حجم (m^3) و پتانسیل (v)
v	سرعت در جهت y
w	کسر جرمی

واکنش کمتر می‌شود. بنابراین بازده تراوایی افزایش می‌یابد و تلفات ناشی از واکنش مستقیم کمتر می‌شود. هر چه جریان بیشتری از پیل کشیده شود، مصرف مواد اولیه بیشتر شده و در نتیجه غلظت آنها در کاتالیست مربوطه کاهش می‌یابد. به همین دلیل مقدار کمتری از آنها به سمت کاتالیست مقابل منتشر می‌شود تا در آنجا مستقیماً واکنش دهد.

۹- نتیجه‌گیری

مدل محاسباتی یکپارچه ارائه شده برای پیل سوختی غشاء تبادل پروتون در این مقاله شامل فرآیندهای انتقال مومنتوم، انرژی، گونه‌های گازی، آب مایع، آب حل شده و پتانسیل فاز می‌باشد. در این مدل تأثیر آب مایع بر پارامترهای عملکردی پیل بررسی شده است. یکی از مزایای حل یکپارچه این است که لازم نیست در سطح مشترک لایه‌های پیل شرط مرزی اعمال شود. اگر چه فرآیندهایی که در پیل سوختی رخ می‌دهد، ماهیت سه‌بعدی دارند ولی با مدل‌سازی دوبعدی هم بسیاری از جنبه‌های مهم این فرآیندها قابل پیش‌بینی و توضیح خواهد بود. میدان حل دوبعدی این تحقیق در راستای کانال می‌باشد که نسبت به میدان حل عمود بر کانال این مزیت را دارد که مصرف مواد واکنش‌دهنده در راستای کانال هم در نظر گرفته می‌شود. در این مقاله، برخلاف اکثر مراجع که غشاء را نسبت به گازهای اکسیژن، هیدروژن و نیتروژن ناتراوا فرض کرده‌اند، پدیده میان‌گذر گازهای واکنش‌دهنده از غشاء با در نظر گرفتن انتقال آب مایع بررسی شد.

تمام مطالعات عددی مدیریت آب در پیل سوختی غشاء تبادل پروتون تاکنون، تنها روی سمت کاتد تمرکز کرده‌اند چون در کاتد رخ دادن طغیان مستعدتر است. با این وجود، مطالعات تجربی اخیر نشان می‌دهد که برای شرایط عملکردی معین، طغیان می‌تواند در الکتروود آنُد نیز رخ دهد. سازوکار انتقال آب مایع در کانال گاز آنُد و نیز دبی، چگالی و لزجت هیدروژن با هوا در کاتد متفاوت است. در این پژوهش انتقال آب مایع درون آنُد نیز در نظر گرفته شد. نتایج مهم زیر در این پژوهش به دست آمد:

- مقدار اشباع آب مایع در لایه نفوذ گاز آنُد هم مرتبه با کاتد است (مقدار آب مایع در کاتد بیشتر از آنُد است).
- با افزایش چگالی جریان محتوای آب در هر دو الکتروود افزایش می‌یابد.
- بالا بردن دمای صفحه آنُد به میزان متوسط، یک روش مؤثر برای کاهش طغیان آن می‌باشد.
- انتخاب لایه نفوذ گاز آب‌گریزتر برای کاتد و لایه نفوذ گاز آب‌دوست‌تر برای آنُد راندمان پیل را افزایش می‌یابد.
- افزایش دبی در کانال‌های گاز آنُد راهکار دیگری برای کاهش طغیان در این الکتروود است.
- انتقال گونه‌ها به خصوص در لایه نفوذ گاز تأثیر زیادی بر راندمان پیل دارد.
- کاهش ضخامت لایه نفوذ گاز، افزایش تخلخل آن و کاهش انحنای آن، افت غلظت گونه‌ها در کنار کاتالیست را کاهش می‌دهد.

غلظت کسر جرمی	X	ضریب انتقال جرم بخار آب به آب حل شده (s^{-1})	h_m
ضریب انتقال بار	α	آنتالپی تشکیل آب ($J.mol^{-1}$)	h_{react}
کشش سطحی ($N.m^{-1}$)	Γ	چگالی جریان محلی ($A.m^{-2}$)	i
تابع کلید	γ	چگالی جریان انتقالی ($A.m^{-3}$)	j
تخلخل / کسر	ε	ضریب هدایت حرارت ($W.m^{-1}k^{-1}$)	k
بازده ناتراوایی	ζ_{imp}	ضریب تراوایی آب مایع	K_L
تراوایی گاز (m^{-2})	κ	طول	L
لزجت ($kgm^{-1}s^{-1}$)	μ	جرم مولکولی ($kg.mol^{-1}$)	M
چگالی (kgm^{-3})	ρ	ضریب کشش الکترو اسمزی	n_{eod}
ضریب هدایت یونی ($\Omega^{-1}m^{-1}$)	σ	تعداد گره شبکه اصلی در جهت x	N_x
انحنای لایه‌ی نفوذ گاز	τ_{gdl}	تعداد گره شبکه اصلی در جهت y	N_y
پتانسیل (v)	φ	فشار (Pa)	P
ضریب انتقال جرم آب مایع بخار آب (s^{-1})	ψ	ثابت گازها ($J.mol^{-1}K^{-1}$)	P_{atm}
سطح مؤثر کاتالیست (m^2m^{-3})	A		R
فعالیت آب	a	زیرنویس	
غلظت ($mol.m^{-3}$)	C	آند	a
ضریب انتشار (m^2s^{-1})	D	فعال‌سازی	act
پتانسیل	E	کربن	C
اختلاف پتانسیل مدار باز	E^0	کاتد	c
ثابت فاراده ($C.mol^{-1}$)	F	کاتالیست	cat
شار جرمی ($kgm^{-2}s^{-1}$ یا $mol.m^{-2}s^{-1}$)	G'	حجم کنترل	CV
ضریب گرانش زمین	g	اندیس برای الکترودها	d
ثابت قانون هنری ($Pa.m^3mol^{-1}$)	H	افت فشار داری	Dar
آنتالپی تغییر فاز آب	h_{fg}	واکنش مستقیم	DR

WV	بخار آب	e	الکتريکی
	بالانویس	eff	مؤثر
ave	متوسط	eod	کشش الکترو اسمزی
c	بحرانی	f	سیال
cp	فشار موئینگی	gdl	لایه نفوذ گاز
cr	میان گذر	i	یونی
D	انتشار	k	گونه‌ها (هیدروژن، اکسیژن، آب، نیتروژن)
g	فاز گاز	LV	انتقال جرم از مایع به بخار
L	فاز مایع	m	غشاء
$loss$	اتلافی	ohm	اهمی
p	فاز پلیمری	p	پلیمر
		pc	تغییر فاز

منابع و مراجع

- [1] J. Larminie, A. Dicks, Fuel cell systems explained, 2003.
- [2] T.E. Springer, T. Zawodzinski, S. Gottesfeld, Polymer electrolyte fuel cell model, Journal of the electrochemical society, 138(8) (1991) 2334-2342.
- [3] D.M. Bernardi, M.W. Verbrugge, A mathematical model of the solid-polymer-electrolyte fuel cell, Journal of the Electrochemical Society, 139(9) (1992) 2477-2491.
- [4] V. Gurau, H. Liu, S. Kakac, Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells, AIChE Journal, 44(11) (1998) 2410-2422.
- [5] C. Marr, X. Li, Composition and performance modelling of catalyst layer in a proton exchange membrane fuel cell, Journal of Power Sources, 77(1) (1999) 17-27.
- [6] S. Um, C.Y. Wang, K. Chen, Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells, Journal of the Electrochemical society, 147(12) (2000) 4485-4493.
- [7] D. Natarajan, T. Van Nguyen, A two-dimensional, two-phase, multicomponent, transient model for the cathode of a proton exchange membrane fuel cell using conventional gas distributors, Journal of the Electrochemical Society, 148(12) (2001) A1324-A1335.
- [8] N. Siegel, M. Ellis, D. Nelson, M. Von Spakovsky, Single domain PEMFC model based on agglomerate catalyst

- characterization of water coverage in PEMFC gas channels using simultaneous anode and cathode visualization and image processing, *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(19) (2011) 12381-12392.
- [19] D. Lee, J. Bae, Visualization of flooding in a single cell and stacks by using a newly-designed transparent PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(1) (2012) 422-435.
- [20] R.B. Ferreira, D. Falcão, V. Oliveira, A. Pinto, Numerical simulations of two-phase flow in an anode gas channel of a proton exchange membrane fuel cell, *Energy*, 82 (2015) 619-628.
- [21] L. Xing, S. Du, R. Chen, M. Mamlouk, K. Scott, Anode partial flooding modelling of proton exchange membrane fuel cells: model development and validation, *Energy*, 96 (2016) 80-95.
- [22] L. Xing, Q. Cai, C. Xu, C. Liu, K. Scott, Y. Yan, Numerical study of the effect of relative humidity and stoichiometric flow ratio on PEM (proton exchange membrane) fuel cell performance with various channel lengths: An anode partial flooding modelling, *Energy*, 106 (2016) 631-645.
- [23] N. Siegel, M. Ellis, D. Nelson, M. Von Spakovsky, A two-dimensional computational model of a PEMFC with liquid water transport, *Journal of Power Sources*, 128(2) (2004) 173-184.
- [24] H. Meng, A two-phase non-isothermal mixed-domain PEM fuel cell model and its application to two-dimensional simulations, *Journal of Power Sources*, 168(1) (2007) 218-228.
- [25] N.P. Siegel, Development and validation of a computational model for a proton exchange membrane fuel cell, PHD Dissertation in Mechanical Eng., Virginia Polytechnic and State, 2003.
- [26] M. Hu, A. Gu, M. Wang, X. Zhu, L. Yu, Three dimensional, two phase flow mathematical model for PEM fuel cell: Part I. Model development, *Energy Conversion and Management*, 45(11-12) (2004) 1861-1882.
- geometry, *Journal of Power Sources*, 115(1) (2003) 81-89.
- [9] M. Seddiq, H. Khaleghi, M. Mirzaei, Numerical analysis of gas cross-over through the membrane in a proton exchange membrane fuel cell, *Journal of power sources*, 161(1) (2006) 371-379.
- [10] M. Seddiq, H. Khaleghi, M. Mirzaei, Parametric study of operation and performance of a PEM fuel cell using numerical method, *Iran. J. Chem. Chem. Eng*, 27(2) (2008).
- [11] N. Djilali, Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: challenges and opportunities, *Energy*, 32(4) (2007) 269-280.
- [12] C. Siegel, Review of computational heat and mass transfer modeling in polymer-electrolyte-membrane (PEM) fuel cells, *Energy*, 33(9) (2008) 1331-1352.
- [13] R. Anderson, L. Zhang, Y. Ding, M. Blanco, X. Bi, D.P. Wilkinson, A critical review of two-phase flow in gas flow channels of proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, 195(15) (2010) 4531-4553.
- [14] G.-H. Song, H. Meng, Numerical modeling and simulation of PEM fuel cells: Progress and perspective, *Acta Mechanica Sinica*, 29(3) (2013) 318-334.
- [15] A.Z. Weber, R.L. Borup, R.M. Darling, P.K. Das, T.J. Dursch, W. Gu, D. Harvey, A. Kusoglu, S. Litster, M.M. Mench, A critical review of modeling transport phenomena in polymer-electrolyte fuel cells, *Journal of The Electrochemical Society*, 161(12) (2014) F1254-F1299.
- [16] R.B. Ferreira, D. Falcão, V. Oliveira, A. Pinto, Numerical simulations of two-phase flow in proton exchange membrane fuel cells using the volume of fluid method—A review, *Journal of Power Sources*, 277 (2015) 329-342.
- [17] S. Ge, C.-Y. Wang, Liquid water formation and transport in the PEFC anode, *Journal of the Electrochemical Society*, 154(10) (2007) B998-B1005.
- [18] J.M. Sergi, S.G. Kandlikar, Quantification and

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Please cite this article using:

K. Mohammadzadeh, H. Khaleghi, Numerical Investigation of Water Management in the Cathode and Anode Sides of Proton Exchange Membrane Fuel Cell, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 51(2) (2019) 227-247.
DOI: 10.22060/mej.2017.12457.5350

