

بررسی اثر شرایط کارکردی سمت کاتد بر عملکرد پیل سوختی پلیمری

سید مهدی مهنما^۱، حامد جنت امانی^۲

تاریخ دریافت مقاله:

۹۵/۰۶/۲۳

تاریخ پذیرش مقاله:

۹۵/۱۱/۱۰

چکیده:

این مقاله به بررسی تأثیر شرایط کارکردی سمت کاتد یک پیل سوختی پلیمری بر روی عملکرد آن می‌پردازد. برای این منظور، شبیه سازی دوبعدی و دوفازی یک واحد پیل سوختی انجام شده است. معادلات حاکم بر جریان پیل سوختی با استفاده از مدل چند فاز می‌کسچر و با لحاظ نمودن مدل تک ناحیه ای با استفاده از کد نویسی حل شده و غلظت اجزای واکنش گر و در نتیجه، منحنی قطبیت پیل به دست آمده اند. همچنین اثر تغییر ولتاژ، فشار، دما، سرعت و رطوبت نسبی سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن و آب و نیز عملکرد پیل مورد مطالعه و ارزیابی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد با افزایش میزان دمای کارکرد پیل، عملکرد پیل سوختی بهبود می‌یابد. همچنین با افزایش سرعت، فشار و رطوبت نسبی جریان گاز ورودی، راندمان پیل افزایش می‌یابد. به منظور صحت‌گذاری مدل، نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردیده و تطابق خوبی مشاهده شده است.

کلمات کلیدی:

پیل سوختی پلیمری، شبیه سازی دوفازی، منحنی عملکرد پیل

مقدمه

پیل‌های سوختی مبدل‌های انرژی هستند که انرژی ذخیره شده در سوختها و اکسیدکننده‌ها را از طریق واکنش‌های الکتروشیمیایی به الکتریسیته تبدیل می‌کنند و از آنها به عنوان منابع انرژی در آینده یاد می‌شود. در میان انواع مختلف پیل سوختی، پیل‌های سوختی غشاء تبادل یونی (پلیمری)^۱ به دلیل چگالی توان بالا و دمای عملکردی پایین، بسیار مورد توجه بوده و به عنوان یکی از گزینه‌های جایگزینی منبع تولید توان در خودروها و نیز کاربری ذخیره سازی انرژی در آینده به شمار می‌روند. مطالعات آزمایشگاهی زیادی تاکنون به منظور مشاهده پدیده‌های مختلف در پیل‌های سوختی پلیمری انجام شده است، اما به دلیل مشکلات موجود در روش‌های آزمایشگاهی، استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) به منظور تحلیل و بررسی پدیده‌های انتقال حرارت و جرم در قسمت‌های مختلف پیل سوختی، تحلیل غلظت ترکیبات و در نهایت، بررسی راندمان عملکردی پیل به عنوان جایگزین انجام آزمایش‌های متعدد، معمول گشته است. روش‌های معمول مدل‌سازی دوفازی جریان در پیل سوختی که بر پایه حل معادلات بقاء می‌باشند، مدل مولتی فلوید^۲ و روش میکسچر^۳ می‌باشند. در مدل مولتی فلوید که اولین بار توسط کارنز و جیلالی [۲] برای مدل‌سازی پیل سوختی پلیمری استفاده گردید، هر فاز توسط یک دسته از معادلات بقاء معرفی می‌گردند و این دو فاز با حالت اشباع کوپل می‌گردند. این مدل از کمترین فرضیات استفاده نموده است، اما به متغیرهای وابسته زیادی نیاز دارد و کوپل نمودن فازها ممکن است منجر به ناپایداری حل عددی گردد. مدل میکسچر برای اولین بار توسط ونگ و همکارانش [۱۴] در مدل‌سازی پیل‌های سوختی پلیمری استفاده گردید و در فعالیت‌های بعدی ونگ و همکارانش [۷،۸،۱۳] و نیز توسط لیو و یو [۱۱،۱۲] توسعه یافت. مدل چند فازی میکسچر معادلات بقاء را برای مخلوط دو فازی (مخلوط آب مایع و گاز) حل می‌نماید که اصولاً بر پایه ویژگی‌های متوسط جرمی مخلوط دو فازی می‌باشد.

تشریح کامل تأثیر شرایط کارکردی بر روی عملکرد پیل با استفاده از مدل‌های واقعی‌تر همچنان از اهمیت فراوانی برخوردار است. مطالعات گسترده‌ای در رابطه با پیل سوختی و تأثیر پارامترهای مختلف در نحوه عملکرد پیل به صورت آزمایشگاهی و عددی صورت گرفته که به تعدادی از آنها اشاره می‌شود. هی و همکارانش [۳] یک پیل سوختی PEM دوبعدی، هم‌دما و دو فازی را به صورتی که فقط شامل سمت کاتد پیل باشد، شبیه‌سازی کردند، به گونه‌ای که لایه کاتالیستی را به صورت یک لایه بسیار نازک در نظر گرفتند و به این ترتیب، جریان در داخل پیل را مورد بررسی قرار دادند. نتایج بدست آمده نشان داد که اختلاف فشار بین ورود و خروج کانال گاز عملکرد الکتروود را بهبود می‌بخشد. ساکی و همکارانش [۹] تأثیر هندسه را در مدل تک سلولی خود که دارای دو کانال در سمت کاتد و دو کانال آند بود، مورد توجه

1) PEM Fuel Cell
2) Multi-Fluid
3) Mixture

قرار دادند. آنها انتهای کانال را از سمت کاتد مسدود کردند تا تأثیر آن را مطالعه کنند و نشان دادند که جریان اجباری بوجود آمده در داخل پیل به دلیل مسدود بودن انتهای آن، انتقال اکسیژن به طرف لایه کاتالیستی را افزایش داده و در نهایت منجر به افزایش دانسیته جریان در داخل پیل می‌شود. جئون و همکاران [۴] یک مدل CFD به منظور مشخص کردن میزان دانسیته جریان در کانال‌های مارپیچ با طراحی‌های مختلف ارائه نمودند. او تلاش خود را روی مشخص کردن توزیع جریان در کانال و قسمت انحنای بین راه‌های مارپیچ متمرکز کرد و نشان داد که میزان دانسیته جریان در ناحیه انحنای کمتر از پیچ می‌باشد. در این مواقع، حالت بهینه عریض بودن کانال‌ها و باریک بودن انحنای می‌باشد. افشاری و جزایری [۱] از یک مدل دو فاز غیر همدم که بر پایه مدل‌سازی چند فاز میکسچر می‌باشد، برای بررسی تأثیر وجود آب و انتقال حرارت بر روی عملکرد پیل استفاده کرده‌اند. منگ [۶] یک مدل دو فاز برای پیل سوختی را توسعه داده است که قادر به مدل‌سازی انتقال آب مایع در جنس‌های مختلف ناحیه متخلخل می‌باشد و توزیع و انتقال آب مایع در سمت کاتد پیل به صورت پارامتری مطالعه گردیده است. برای این منظور، یک پیل سوختی پلیمری تحت شرایط عملکردی مختلف آزمایش شده و نتایج آن گزارش شده است.

در تحقیق حاضر، به شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی دو بعدی جریان دوفازی در حالت پایا در سرتاسر یک واحد پیل سوختی پرداخته می‌شود. معادلات حاکم بر پیل سوختی حل می‌شوند و میدان‌های سرعت، فشار و غلظت هر یک از اجزای واکنش شیمیایی در سرتاسر پیل به دست می‌آیند. تمرکز اصلی در این شبیه‌سازی، بررسی اثر تغییر ولتاژ، فشار، دما، سرعت و رطوبت نسبی در سمت کاتد بر روی اشباع آب مایع و راندمان کلی پیل سوختی می‌باشد. لذا با استفاده از یک تحلیل حساسیت، میزان اثرگذاری هر یک از این پارامترها بر روی غلظت اکسیژن و ایجاد آب مایع در پیل و در نتیجه، تأثیر آن بر راندمان پیل سوختی پلیمری بررسی گردیده است. برای این منظور، با استفاده از برنامه نویسی به زبان فرترن و با بکارگیری الگوریتم سیمپل برای حل معادلات بقای جرم و ممنتوم، مدل چند فاز میکسچر برای شبیه‌سازی جریان دوفاز در پیل سوختی پلیمری به کار گرفته شده است.

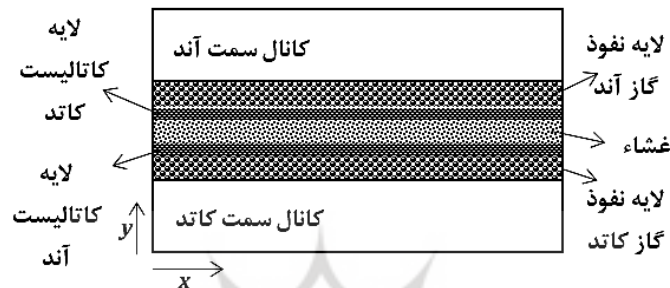
مدل‌سازی ریاضی

در این تحقیق، یک مدل دو بعدی در راستای کانال برای انجام شبیه‌سازی پیل سوختی به کار گرفته شده است. در این مدل‌سازی، تمام لایه‌های مختلف پیل سوختی شامل کانال‌های انتقال دهنده گونه‌ها، لایه‌های نفوذ گاز، لایه‌های کاتالیزوری متخلخل در سمت آند و کاتد و غشاء پلیمری لحاظ شده است. شکل (۱) فضای محاسباتی پیل را جهت انجام شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

برای انجام این مدل‌سازی، فرضیات زیر لحاظ گردیده است:

- پیل سوختی در شرایط پایا عمل می‌کند.

• با توجه به سرعت پایین جریان سیال درون پیل سوختی، جریان آرام در نظر گرفته شده است.



شکل (۱) ناحیه های مختلف پیل سوختی پلیمری جهت مدل سازی

• شرایط همدمما فرض گردیده است.

• قانون گاز ایده آل برای مخلوط گازی استفاده شده است.

• خواص فیزیکی لایه های مختلف پیل، به صورت یکنواخت و همگن در نظر گرفته می شود.

معادلات حاکم بر جریان سیال در لایه های مختلف پیل، معادلات بقای جرم، ممنتوم و انرژی، معادلات انتقال اجزا و سایر معادلات کمکی می باشند که در ادامه به آنها پرداخته شده است. از آنجایی که در این مدل سازی از رویکرد یکپارچه استفاده شده است، شرایط مرزی فقط در ورودی ها، خروجی ها و روی دیواره ها اعمال شده است و در بین لایه های مختلف نیازی به اعمال شرایط مرزی نیست. معادلات بقا برای کل ناحیه های پیل سوختی تعریف می شوند و در هر ناحیه، اختلافات تنها در خصوصیات مواد و عبارت های چشمه و چاه می باشد.

معادلات پیوستگی و ممنتوم خطی بر اساس معادلات ناویر-استوکس، در معادلات (۱) و (۲) آورده شده است [۱۳]:

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla \cdot (\rho u u) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla u) + S_u \quad (2)$$

در معادله (۲)، S_u ترم چشمه معادله ممنتوم می باشد. برای بقای اجزای مخلوط نیز معادله (۳) استفاده می گردد [۱۳]:

$$\nabla \cdot (\beta \rho u x_i) = \nabla \cdot (D_{i-g}^{eff} \nabla x_{i-g}) + S_i \quad (3)$$

در معادله (۳)، S_i ترم چشمه بوده و i معرف هیدروژن، اکسیژن یا آب (آب بخار و مایع با همدیگر لحاظ می گردند) می باشد.

پتانسیل الکترونی و الکترونی با استفاده از معادلات (۴) و (۵) به دست می آیند [۵]:

$$\nabla \cdot (\sigma_{ele}^{eff} \nabla \varphi_{ele}) + S_{ele} = 0 \quad (4)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{ion}^{eff} \nabla \varphi_{ion}) + S_{ion} = 0 \quad (5)$$

در معادلات بالا، S_{ele} و S_{ion} ترم‌های چشمه معادلات پتانسیل می‌باشند. ترم‌های چشمه معادلات (۱) تا (۵) در جدول (۱) به طور خلاصه آورده شده است. برای مخلوط دوفازی، چگالی مخلوط آب مایع و گاز بر اساس خصوصیات و نسبت حجمی آب مایع و مخلوط گازها توسط معادله (۶) به دست می‌آید [۸،۱۱]:

$$\rho = \rho_{lq} s_{lq} + \rho_g (1 - s_{lq}) \quad (6)$$

کسر حجمی آب مایع نیز از رابطه (۷) به دست می‌آید [۵]:

$$s_{lq} = \frac{c_{H_2O} - c_{sat}}{\left(\frac{\rho_{lq}}{M_{H_2O}} \right) - c_{sat}} \quad (7)$$

صرف نظر از اثر جاذبه زمین، شار آب مایع حاصل از موینگی و فشار موینگی از روابط (۸) تا (۱۰) محاسبه می‌گردند [۵]:

$$J_{cap,lq} = \frac{\gamma_g \gamma_{lq}}{\mu} \rho K_0 \nabla p_c \quad (8)$$

$$p_c = \sigma_{lq} \cos \theta \left(\frac{\varepsilon}{K_0} \right)^{0.5} \times f(s_{lq}) \quad (9)$$

$$f(s_{lq}) = \begin{cases} 1.42(1-s_{lq}) - 2.12(1-s_{lq})^2 + 1.26(1-s_{lq})^3 & \text{if } \theta < 90^\circ \\ 1.42s_{lq} - 2.12s_{lq}^2 + 1.26s_{lq}^3 & \text{if } \theta > 90^\circ \end{cases} \quad (10)$$

سایر خواص فیزیکی و انتقالی سیال در جدول (۲) آورده شده است. معادله باتلر-ولمر جهت به دست آوردن چگالی جریان در پیل به صورت معادلات (۱۱) و (۱۲) می‌باشد [۵]:

$$j_a = (1 - s_{lq}) A J_{0,a}^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{0.5} \left(e^{\alpha_a F \eta_{act}^a / RT} - e^{-\alpha_c F \eta_{act}^a / RT} \right) \quad (11)$$

$$j_c = (1 - s_{lq}) A J_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right) \left(-e^{\alpha_c F \eta_{act}^c / RT} - e^{-\alpha_c F \eta_{act}^c / RT} \right) \quad (12)$$

چگالی جریان متوسط پیل با انتگرال گیری از چگالی موضعی بر روی سطح کاتالیست، از معادله (۱۳) به دست می آید:

جدول (۱) ترم چشمه معادلات حاکم بر جریان سیال درون پیل سوختی [۵]

S_{ion}	S_{ele}	S_i	S_u	محدوده
0	0	0	0	کانال های گاز
0	0	$S_{H_2} = \nabla \cdot (X_{H_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	لایه نفوذ گاز سمت آند
0	0	$S_{O_2} = \nabla \cdot (X_{O_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	لایه نفوذ گاز سمت کاتد
j_a	$-j_a$	$S_{H_2} = -\frac{j_a}{2F} M_{H_2} + \nabla \cdot (X_{H_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \nabla \cdot \left(\frac{\eta_d}{F} \sigma_{ion}^{eff} \nabla \phi_{ion} \right) M_{H_2O} + \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	کاتالیست سمت آند
$-j_c$	j_c	$S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} M_{O_2} + \nabla \cdot (X_{O_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \frac{j_c}{2F} M_{H_2O} + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_d}{F} \sigma_{ion}^{eff} \nabla \phi_{ion} \right) M_{H_2O}$ $+ \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	کاتالیست سمت کاتد
0	0	0	0	غشاء پلیمری

جدول (۲) معادلات کمکی جهت به دست آوردن پارامترهای فیزیکی، انتقالی و عملکردی پیل

معادله	نام پارامتر
$\rho_g = \frac{pM_g}{RT}$	چگالی مخلوط گاز
$\sigma_{ion} = (0.005193\lambda - 0.00326) \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right]$	رسانایی یونی غشاء
$p_{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.2) - 9.1837 \times 10^{-5} (T - 273.2)^2 + 1.4454 \times 10^{-7} (T - 273.2)^3$	فشار اشباع آب
$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 & \text{if } 0 \leq a \leq 1 \\ 14.0 + 1.4(a - 1) & \text{if } 1 \leq a \leq 3 \end{cases}$	مقدار آب در پلیمر
$n_d = 2.5 \frac{\lambda}{22}$	ضریب کشش الکترو اسمزی

$$j_{cell} = \frac{1}{A} \int j dA \quad (13)$$

چگالی توان پیل نیز از حاصل ضرب چگالی جریان در مقدار ولتاژ پیل طبق رابطه (۱۴) حاصل می‌گردد:

$$P_{cell} = V_{cell} \times j_{cell} \quad (14)$$

با حل همزمان معادلات (۱) تا (۵) میدان‌های سرعت، فشار، غلظت گونه‌ها، دما، پتانسیل یونی و الکترونی در سرتاسر پیل به دست می‌آید و با کمک معادلات باتلر-ولمر، منحنی قطبیت پیل به دست خواهد آمد. برای اعمال شرایط مرزی می‌بایست بیان نمود که با توجه به اینکه از روش تک ناحیه ای برای انجام شبیه سازی استفاده شده است و معادلات حاکم بر جریان سیال در سرتاسر پیل به طور هم‌زمان حل می‌شوند، نیاز به اعمال هیچ شرط مرزی میانی نمی‌باشد و فقط شرایط مرزی در ورودی‌ها و خروجی‌ها و نیز بر روی دیواره‌ها مشخص می‌شود. بر این اساس، سرعت جریان ورودی در سمت آند و کاتد از رابطه‌های (۱۵) و (۱۶) به دست می‌آیند:

$$\xi_a = c_{in}^{H_2} u_{a,in} \frac{2F}{j_{ref}} \frac{A_{a,in}}{A} \quad (15)$$

$$\xi_c = c_{in}^{O_2} u_{c,in} \frac{4F}{j_{ref}} \frac{A_{c,in}}{A} \quad (16)$$

سایر پارامترهای ورودی شامل فشار ورودی سیال و غلظت‌های اکسیژن، هیدروژن و آب ثابت می‌باشند. برای محاسبه غلظت ورودی جریان از روابط (۱۷) و (۱۸) استفاده می‌شود:

$$y_{c,in}^{H_2O} = RH_c \frac{P_{sat}}{P_c}, \quad y_{in}^{O_2} = \frac{(1 - y_{c,in}^{H_2O})}{4.76}, \quad y_{in}^{N_2} = 1 - y_{in}^{O_2} - y_{c,in}^{H_2O} \quad (17)$$

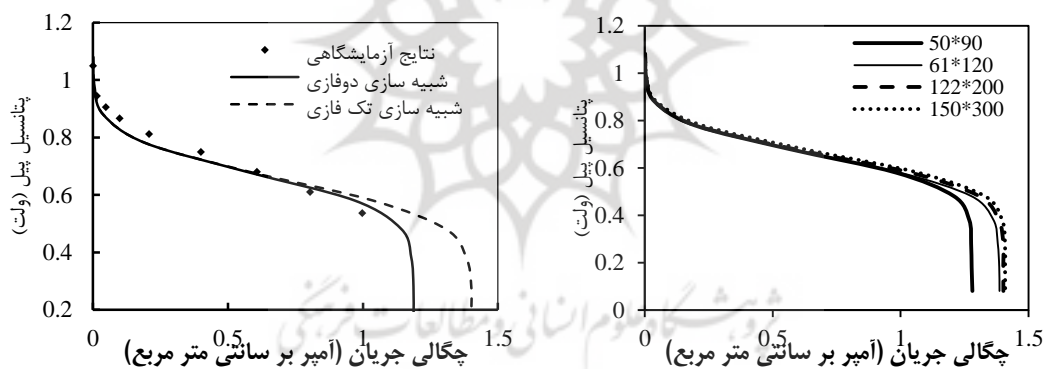
$$y_{a,in}^{H_2O} = RH_a \frac{P_{sat}}{P_a}, \quad y_{in}^{H_2} = 1 - y_{a,in}^{H_2O} \quad (18)$$

در مرزهای خروجی جریان، برای سرعت، شرط توسعه یافتگی اعمال می‌شود و برای سایر پارامترها، گرادیان آن در جهت جریان برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. برای دیواره‌های صلب نیز شرط عدم لغزش برای سرعت و شرط گرادیان صفر در جهت عمود بر دیوار برای سایر پارامترها اعمال می‌گردد.

ارزیابی نتایج

در این مدل‌سازی، برای شبکه بندی فضای محاسباتی از شبکه‌های مستطیلی با اندازه‌های غیریکنواخت استفاده شده است. به منظور بررسی عدم وابستگی نتایج به اندازه شبکه، ابتدا مدل‌سازی با شبکه بندی‌های مختلف انجام شده است که نتایج آن در شکل (۲-الف) ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد انتخاب شبکه شامل تعداد 200×122 حجم کنترل

می‌تواند انتخاب بهینه ای باشد و ریزتر کردن اندازه شبکه تأثیر چندانی بر روی نتایج ندارد. جدول (۳) پارامترهای هندسی و عملکردی پیل را جهت انجام مدل‌سازی نشان می‌دهد. به منظور صحت‌گذاری مدل ارائه شده در این تحقیق، منحنی قطبیت حاصل از شبیه‌سازی در دو حالت تک‌فازی و دوفازی، با نتایج آزمایشگاهی ارائه شده در [۱۰] مقایسه گردیده است. بر این اساس، همان‌گونه که در شکل (۲-ب) آورده شده است، تطابق خوبی بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی و نتایج آزمایشگاهی مشاهده می‌گردد. همچنین مقایسه منحنی قطبیت بین دو حالت تک‌فازی و دوفازی بخوبی نشان می‌دهد در چگالی جریان‌های بالا مدل دوفازی چگالی جریان کمتری را پیش‌بینی می‌کند. این موضوع به دلیل تولید آب مایع در چگالی جریان‌های بالا می‌باشد که باعث گرفتگی بخشی از روزنه‌های محیط متخلخل لایه نفوذ گاز می‌شود و مانع از دسترسی کامل گازهای واکنش‌گر به سطح واکنش می‌گردد. در چگالی جریان‌های پایین به دلیل اینکه فشار جزئی آب کمتر از فشار اشباع می‌باشد، آب در سرتاسر پیل به صورت بخار ظاهر می‌گردد و در نتیجه، منحنی قطبیت حاصل از مدل تک‌فازی و دوفازی بر هم منطبق شده‌اند.

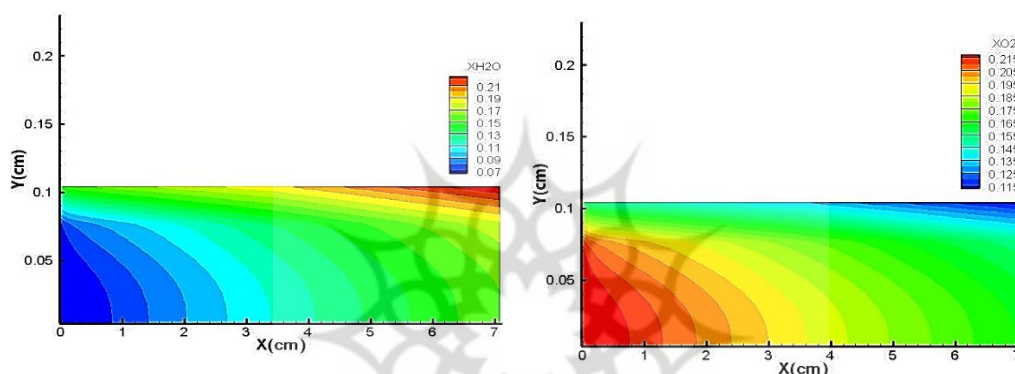


شکل ۲ الف. منحنی قطبیت پیل برای شبکه‌بندی‌های مختلف، ب. مقایسه منحنی عملکردی شبیه‌سازی تک‌فازی و دوفازی پیل سوختی با نتایج آزمایشگاهی

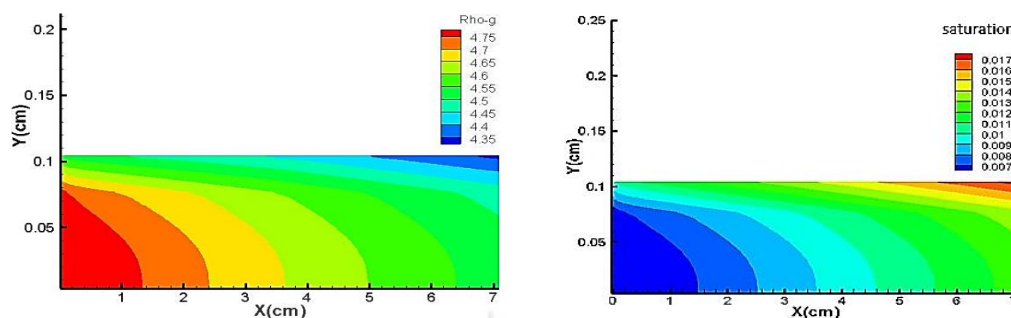
جدول ۳) پارامترهای هندسی و عملکردی پیل سوختی مدل پایه

دمای پیل	۳۵۳	کلوین	فشار آند / کاتد	۳	اتم‌سفر
ضریب استوکیومتری ورودی آند / کاتد	۳/۰ ، ۲/۸	-	تخلخل غشاء پلیمری	۰/۲۸	-
رطوبت نسبی ورودی آند / کاتد	٪۱۰۰	-	طول پیل	۷۱/۱۲	میلیمتر
ضخامت کانال سمت آند و کاتد	۰/۷۶۲	میلیمتر	ضریب پخش آب	۰/۲۲۳۶	سانتیمتر مربع بر ثانیه
ضخامت لایه نفوذ گاز سمت کاتد و آند	۰/۲۵۴	میلیمتر	ضریب پخش هیدروژن	۰/۵۴۵۷	سانتیمتر مربع بر ثانیه
ضخامت لایه کاتالیست سمت کاتد و آند	۰/۰۱	میلیمتر	ضریب پخش اکسیژن	۰/۱۸۰۶	سانتیمتر مربع بر ثانیه
ضخامت غشاء پلیمری	۰/۰۵	میلیمتر	تخلخل GDL کاتد و آند	۰/۴	-
تخلخل لایه کاتالیست سمت کاتد و آند	۰/۴	-	زاویه تماس ناحیه متخلخل	۱۱۰	درجه

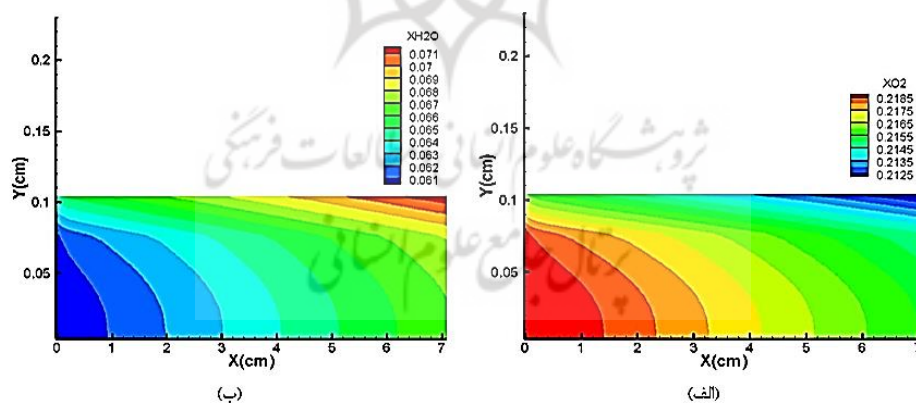
شکل‌های (۳-الف) و (۳-ب) تغییرات غلظت آب و اکسیژن را در سمت کاتد پیل سوختی برای شرایطی که پتانسیل پیل برابر ۰/۶ ولت باشد نشان می‌دهند. واکنش شیمیایی در لایه کاتالیست سمت کاتد انجام شده و با مصرف اکسیژن در این ناحیه، آب تولید می‌شود. لذا غلظت مولکول‌های آب در سطح تماس لایه نفوذ گاز و کاتالیست بیشتر است. آب تولید شده به همراه بخار آب ورودی جریان، از سمت دیگر کانال خارج می‌شود.



شکل (۳) الف. کانتور کسر جرمی اکسیژن سمت کاتد در پتانسیل ۰/۶ ولت ، ب. کانتور کسر جرمی آب سمت کاتد در پتانسیل ۰/۶ ولت در شکل (۴-الف) کانتور تغییرات چگالی فاز گازی سمت کاتد پیل نشان داده شده است. همان گونه که مشخص است، در سمت ورودی جریان که غلظت اکسیژن بیشینه است، چگالی گاز بیشترین مقدار خود را دارد. این موضوع به دلیل آن است که جرم مولکولی اکسیژن بیشتر از آب بوده و با افزایش غلظت آب در خروجی و کاهش غلظت اکسیژن به دلیل مصرف آن، جرم مولکولی مخلوط گازی نیز کاهش می‌یابد. لذا طبق قانون گاز ایده آل، مقدار چگالی گاز نیز در خروجی کانال کمتر است. در (شکل ۴-ب) کانتور اشباع آب مایع نشان داده شده است. مطابق شکل، با افزایش کسر جرمی بخار آب موجود در مخلوط گازی، فشار جزئی بخار آب نیز افزایش می‌یابد. در نتیجه، در صورتی که فشار جزئی بخار آب موجود در مخلوط به فشار اشباع آب برسد، آب مایع به وجود می‌آید. میزان آب تولیدی در سمت خروجی کانال افزایش می‌یابد. در چگالی جریان‌های بالا در صورتی که مقدار آب مایع تولیدی زیاد باشد، باعث گرفتگی بخشی از روزنه‌های محیط متخلخل لایه نفوذ گاز شده و این امر باعث ایجاد مانع در ارسال گاز اکسیژن به سطح واکنش می‌شود.



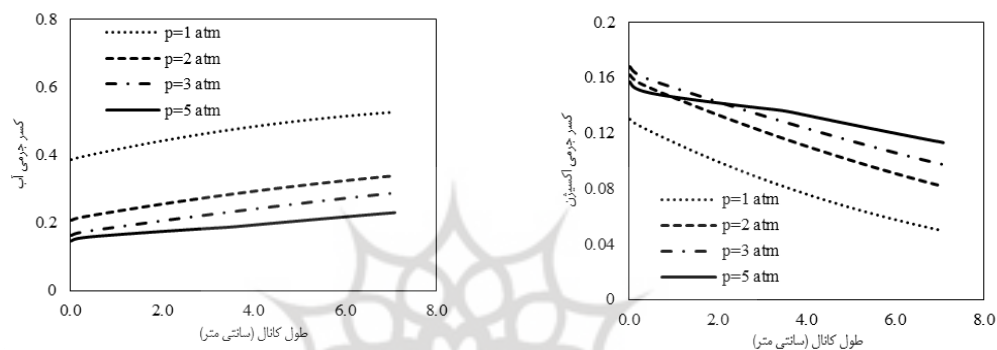
شکل ۴) الف. کانتور تغییرات چگالی گاز سمت کاتد در پتانسیل ۰/۶ ولت ، ب. کانتور تغییرات اشباع آب مایع سمت کاتد در پتانسیل ۰/۶ ولت
 شکل ۵) تغییرات غلظت اکسیژن و آب را در سمت کاتد پیل سوختی برای شرایطی که ولتاژ پیل برابر ۰/۸ ولت باشد، نشان می‌دهد. با افزایش ولتاژ، میزان چگالی جریان کاهش می‌یابد، در نتیجه، نرخ واکنش به صورت کلی کاهش یافته و در سمت کاتد میزان مصرف اکسیژن کمتر شده و به تدریج لایه کاتالیزیت از اکسیژن اشباع می‌شود و میزان تولید آب هم کاهش می‌یابد.



شکل ۵) الف. کانتور کسر جرمی گاز سمت کاتد در ولتاژ ۰/۸ ولت، ب. کانتور کسر جرمی آب سمت کاتد در ولتاژ ۰/۸ ولت

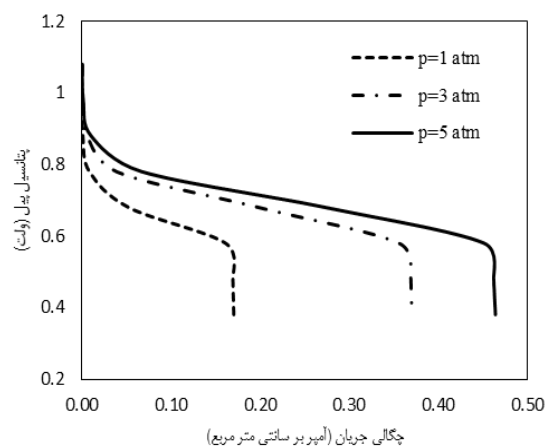
شکل ۶) الف) اثر فشار سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیزیت و غشاء را نشان می‌دهد. با توجه به معادله حالت گازها، افزایش فشار ورودی سمت کاتد، چگالی افزایش یافته و غلظت جرمی و مولی اکسیژن مرز لایه کاتالیزیت و غشاء نیز افزایش می‌یابد. افزایش چگالی اکسیژن، باعث اشباع شدن لایه نفوذ و کاتالیزیت و کاهش غلظت اکسیژن در اوایل مرز لایه کاتالیزیت و غشاء می‌شود. لذا با مصرف اکسیژن در واکنش، در طول این مرز میزان غلظت اکسیژن نسبت به فشارهای پایین‌تر از خود افزایش پیدا می‌کند. همچنین شکل ۶ - ب) اثر فشار سمت کاتد بر میزان

غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می‌دهد. با افزایش فشار، افزایش غلظت و چگالی اکسیژن را خواهیم داشت. این غلظت زیاد اکسیژن در مرز لایه کاتالیست و غشاء باعث کاهش غلظت و چگالی آب تولیدی می‌شود.



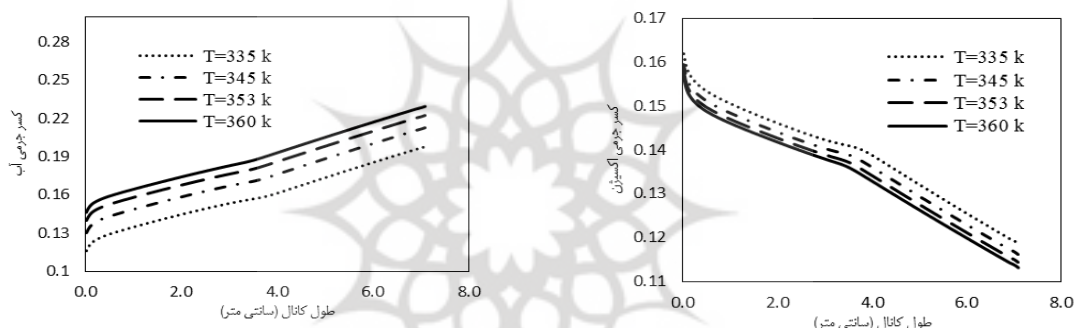
شکل ۶ الف. اثر فشار سمت کاتد بر غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء. ب. اثر فشار سمت کاتد بر غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء

شکل ۷ (الف) اثر فشار سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل را نشان می‌دهد. افزایش فشار باعث افزایش چگالی اکسیژن شده و افزایش چگالی باعث افزایش غلظت اکسیژن در محل واکنش شده و نرخ واکنش را افزایش می‌دهد. از طرف دیگر، ثابت بودن رطوبت (۱۰۰ درصد) افزایش فشار باعث افزایش فشار اشباع شده و گرادیان فشار موئینگی می‌شود. لذا سرعت خروج آب و سرعت توده گاز و نرخ واکنش افزایش می‌یابد. با افزایش فشار، دانسیته جریان افزایش می‌یابد، با افزایش فشار، دانسیته جریان تبدلی بیشتر می‌شود و موجب افزایش نرخ واکنش الکتروشیمیایی می‌گردد و در نتیجه، ولتاژ به ازای یک دانسیته جریان مشخص افزایش خواهد یافت. همچنین با افزایش فشار در گازها، نفوذپذیری آنها کاهش می‌یابد، اما تأثیر آن در برابر اثر فشار در واکنش الکتروشیمیایی کمتر است و در نتیجه، با افزایش فشار دانسیته جریان در یک ولتاژ معین افزایش می‌یابد و لذا، راندمان پیل افزایش می‌یابد.



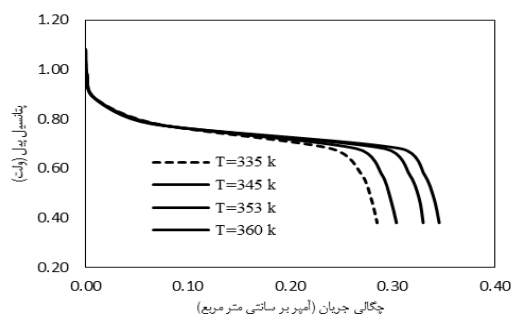
شکل ۷ اثر فشار سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل

شکل (۸الف) اثر دما سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می دهد. با افزایش دما بر اساس معادله حالت گازها، چگالی و غلظت اکسیژن کاهش می یابد. افزایش دما باعث افزایش نرخ واکنش و افزایش میزان مصرف اکسیژن می شود. همچنین شکل (۸ب) اثر دما سمت کاتد بر میزان غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می دهد. با افزایش دما، میزان غلظت و چگالی اکسیژن کاهش می یابد. لذا غلظت و چگالی محصول نهایی (آب) در این مرز افزایش می یابد.



شکل ۸ الف. اثر دما سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء، ب. اثر دما سمت کاتد بر میزان غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء

شکل (۹) اثر دما سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل را نشان می دهد. با افزایش دما، ولتاژ در یک دانسیته جریان مشخص افزایش می یابد و نرخ واکنش الکتروشیمیایی بیشتر می شود و در نتیجه، دانسیته جریان نیز افزایش می یابد. با افزایش دما، ضریب نفوذ گازها نیز افزایش می یابد و قابلیت نفوذ آنها در محیط متخلخل افزایش می یابد. بنابراین، نرخ واکنش الکتروشیمیایی بیشتر می گردد و در نتیجه، میزان تولید محصول نهایی (آب) را افزایش می دهد و با افزایش نرخ تولید آب، میزان آب داخل غشاء نیز افزایش می یابد. هرچه قدر غشاء آب بیشتری جذب کند می تواند بهتر یون مثبت هیدروژن را از خود عبور دهد و ورود الکترون جلوگیری کند، لذا راندمان پیل سوختی را افزایش می دهد.

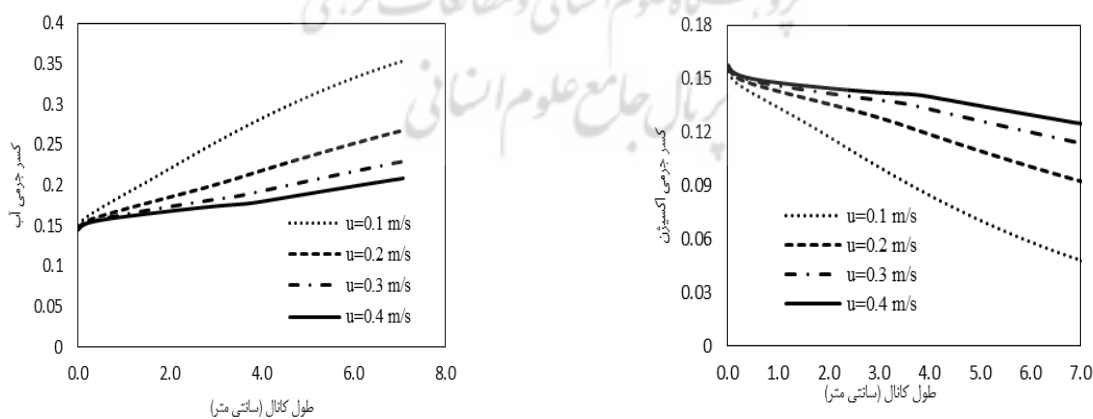


شکل ۹) اثر دما سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل

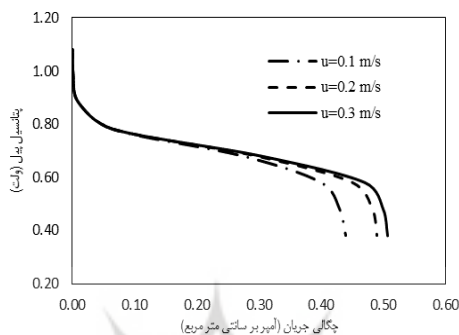
شکل (۱۰الف) اثر سرعت سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می‌دهد. افزایش سرعت باعث افزایش ورود اکسیژن (دبی اکسیژن) به پیل سوختی می‌شود. با افزایش سرعت، اکسیژن بیشتری وارد لایه کاتالیست و غشاء می‌شود. همچنین شکل (۱۰ب) اثر سرعت سمت کاتد بر میزان غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می‌دهد. با افزایش سرعت، حضور اکسیژن افزایش می‌یابد و در نتیجه، میزان حضور آب تولیدی در مرز لایه کاتالیست و غشاء کاهش می‌یابد.

شکل (۱۱) اثر سرعت سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل را نشان می‌دهد. با افزایش سرعت ورودی، دبی اکسیژن بیشتر شده و مقادیر بیشتری از اکسیژن به نواحی واکنش می‌رسند و در نتیجه، نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش می‌یابد. علاوه بر این، دبی بیشتر ورودی اکسیژن به خارج شدن آب از پیل سوختی کمک می‌کند، لذا راندمان پیل را افزایش می‌دهد.

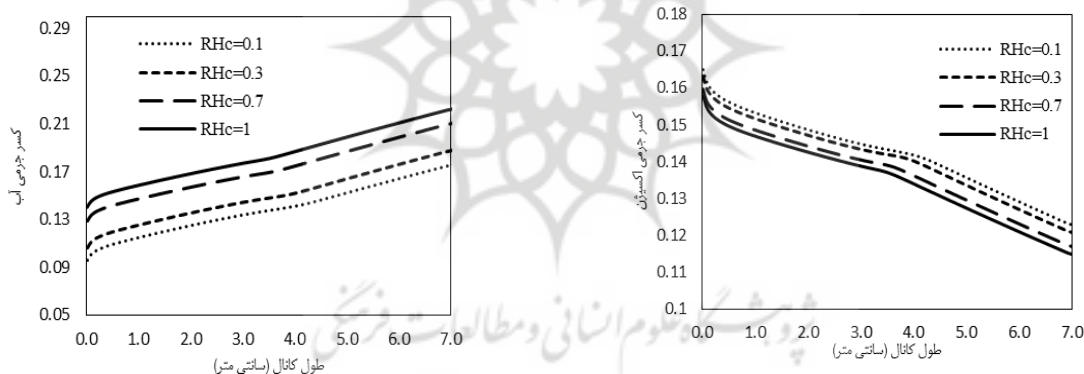
شکل (۱۲الف) اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می‌دهد. با افزایش رطوبت، میزان بخار آب موجود در گاز و جرم و چگالی آن افزایش و از میزان غلظت اکسیژن کاسته می‌شود. همچنین شکل (۱۲ب) اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر میزان غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء را نشان می‌دهد. با افزایش رطوبت نسبی، با افزایش میزان سرعت توده گاز و میزان بخار آب که از نتایج قبل حاصل شد، شاهد افزایش غلظت محصول نهایی (آب) هستیم.



شکل ۱۰ الف. اثر سرعت سمت کاتد بر غلظت اکسیژن مرز لایه کاتالیست و غشاء، ب. اثر سرعت سمت کاتد بر غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء

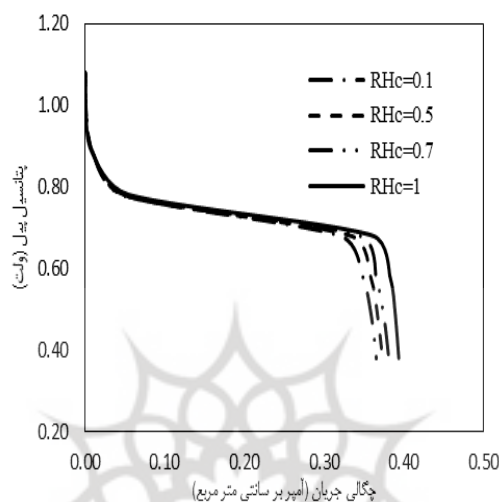


شکل (۱۱) اثر سرعت سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل



شکل (۱۲) الف. اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر میزان غلظت اکسیژن
 ب. اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر میزان غلظت آب تولیدی مرز لایه کاتالیست و غشاء،
 مرز لایه کاتالیست و غشاء،

شکل (۱۳) اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل را نشان می دهد. یکی از پارامترهایی که تأثیر بسزایی بر عملکرد پیل سوختی پلیمری دارد، رطوبت نسبی جریان ورودی است، زیرا جریان با رطوبت نسبی بالا باعث می شود غشاء پلیمری همواره رطوبت کافی برای انتقال یون های هیدروژن داشته باشد و این مسأله به طور مستقیم بر روی رسانش آن اثر می گذارد. هرچه رطوبت جریان ورودی به پیل سوختی بیشتر باشد، رسانش یونی نیز بیشتر می شود. با افزایش رطوبت نسبی، بیشینه دانسیته جریان در ولتاژ کاری افزایش می یابد. با افزایش رطوبت نسبی، نرخ تبخیر و سهم بخار در تخلیه لایه نفوذ گاز کاهش می یابد، لذا هم فشار اشباع و گرادیان فشار مویینگی و سرعت توده گاز اکسیژن و هم سرعت خروج آب بیشتر می شود. لذا با افزایش سرعت ورودی، دبی اکسیژن بیشتر شده و مقادیر بیشتری از اکسیژن به نواحی واکنش می رسند و در نتیجه، نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش می یابد.



شکل ۱۳) اثر رطوبت نسبی سمت کاتد بر منحنی قطبیت پیل

نتیجه گیری

در این مقاله، شبیه سازی دوبعدی و دوفازی یک پیل سوختی پلیمری به روش چند فازی میکسچر انجام شده است. معادلات حاکم بر جریان سیال برای لایه های مختلف پیل شامل کانال های گاز، لایه های نفوذ گاز و کاتالیست سمت کاتد و آند و نیز ناحیه غشاء با در نظر گرفتن یک مدل تک ناحیه ای و بدون اعمال شرایط مرزی میانی با استفاده از کدنویسی حل شده اند. تأثیر پارامتر ولتاژ، فشار، دما، سرعت و رطوبت نسبی سمت کاتد پیل سوختی بر میزان غلظت اکسیژن و آب و نیز عملکرد پیل مورد مطالعه و ارزیابی قرار گرفته است. مشاهده می گردد با افزایش ولتاژ میزان عملکرد پیل کاهش می یابد در حالی که با افزایش میزان دما، سرعت، فشار و رطوبت نسبی، عملکرد پیل سوختی بهبود می یابد. همچنین اثر این پارامترها بر میزان غلظت اکسیژن و آب مایع در یک ولتاژ معین نیز مورد بررسی قرار گرفته شده است. بر این اساس، با افزایش فشار و سرعت میزان غلظت اکسیژن افزایش و غلظت آب کاهش یافته و با افزایش غلظت اکسیژن نرخ واکنش افزایش می یابد. با افزایش دما و رطوبت نسبی، غلظت اکسیژن کاهش و غلظت آب افزایش پیدا می کند در حالی که این دو پارامتر خود باعث افزایش نرخ واکنش و افزایش دبی اکسیژن می شود.

منابع

- [1] Afshari E., Jazayeri S.A., (2010). "Effects of the cell thermal behaviour and water phase change on a proton exchange membrane fuel cell performance", *J Energy Conversion and Management*, Vol. 51, pp. 655-662.
- [2] A Carnes B., Djilali N., (2005). "Systematic parameter estimation for PEM fuel cell models", *J Power Sources*, Vol. 144, pp. 83-93.
- [3] He, W., Yi, J.S., Nguyen, T.V., (2000). "Two-phase flow model of the cathode of PEM fuel cells using interdigitated flow fields", *J AICHE*. Vol. 46, pp. 2053-2064.
- [4] Jeon, S., Greenway, S., Shimpalee, and Van Zee, J.W., (2008). "The effect of serpentine flow-field designs on PEM fuel cell", *Int J Hydrogen energy*, Vol. 33, pp. 1052-1066.
- [5] Jiao K., Li X., (2011). "Water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells", *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 37, pp. 221-291.
- [6] Meng H., (2010). "Numerical studies of liquid water behaviours in PEM fuel cell cathode considering transport across different porous layers", *J Hydrogen Energy*, Vol. 35, pp. 5569-79.
- [7] Meng H., Wang C.Y., (2005). "Model of two-phase flow and flooding dynamics in polymer electrolyte fuel cells", *J Electrochemical Society*, Vol. 152, pp. A1733-41.
- [8] Pasaogullari U., Wang C.Y., (2005). "Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells", *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 152, pp. A380-90.
- [9] Sukkee, U.m., and Wang, C.Y., (2004). "A three-dimensional analysis and transport and electrochemical reaction in polymer electrolyte fuel cell", *J Power Source*. Vol. 125, pp. 40-51.
- [10] Ticianelli, E.A., Berry J.G. and Srinivasan S., (1991). "Dependence of performance of solid polymer electrolyte fuel cells with low platinum loading on morphologic characteristics of the electrodes". *Journal of Applied Electrochemistry*, Vol. 21, pp. 597-605.

- [11] You L., Liu H., (2002). "A two-phase flow and transport model for the cathode of PEM fuel cells", *J Heat and Mass Transfer*, Vol. 45, pp. 2277–87.
- [12] You L., Liu H., (2006). "A two-phase flow and transport model for PEM fuel cells", *J Power Sources*, Vol. 155, pp. 219–30.
- [13] Wang Y., Wang C.Y., (2006). "A non-isothermal, two-phase model for polymer electrolyte fuel cells", *J Electrochemical Society*, Vol. 153, pp. A1193-11200.
- [14] Wang Z.H., Wang C.Y., Chen K.S., (2001). "Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells", *J Power Sources*, Vol. 94, pp. 40–50.



فهرست علائم

فعالیت آب	A	σ	رسانندگی یونی و الکتریکی (S/m)
مساحت (m^2)	A	ϵ	تخلخل
غلظت مولی (mol/m^3)	C	γ	جابجایی نسبی
ضرب پخش (m^2/s)	D	β	ضریب تصحیح
ثابت فارادی (96487 Col/mol)	F	θ	زاویه تماس ($^\circ$)
ضخامت لایه نفوذ گاز (mm)	H	σ_{iq}	کشش سطحی (N/m)
چگالی جریان (A/cm^2)	J	ξ	ضریب استوکیومتری
شار موینگی آب ($kgm^{-2}s^{-1}$)	J	بالانویس‌ها	
ضریب نفوذ پذیری (m^2)	K	Eff	ضریب موثر
جرم مولکولی (kg/mol)	M	زیرنویس‌ها	
ضریب کشش الکترواسمزی	N	A	آند
فشار ($kgm^{-1}s^{-2}$)	P	act	فعال سازی
چگالی توان (W/cm^2)	P	C	کاتد
ثابت جهانی گازها ($8.314 \text{ jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$)	\bar{R}	cap	موینگی
اشباع آب	S	cell	پیل
ترم چشمه	S	ele	الکترونی
دما (K)	T	G	گاز
سرعت (ms^{-1})	U	H ₂ O	آب
ولتاژ (V)	V	I	جزء i ام
کسر جرمی	X	In	ورودی
کسر مولی	Y	Ion	یونی
علائم یونانی			
چگالی (kgm^{-3})	ρ	Lq	مابع
لزجت دینامیکی ($kgm^{-1}s^{-1}$)	μ	O ₂	اکسیژن
لزجت سینماتیکی (m^2s^{-1})	N	Ref	شرایط مرجع
مقدار آب	Λ	Sat	شرایط اشباع