

## بررسی عددی عملکرد پیل سوختی پلیمری دو کاناله با جریان گاز ناهمسو

نیما احمدی<sup>۱\*</sup>، عبدالرحمن دادوند<sup>۲</sup>، ایرج میرزایی<sup>۳</sup>، سجاد رضا زاده<sup>۴</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۰۲/۱۲	مدل سازی به طور وسیع در تحقیقات و کاربردهای صنعتی برای انتقال جرم و گرما درون کانال با ابعاد کوچک، به منظور به دست آوردن درک بهتری از فرآیندهای اساسی قبل از ساخت نمونه اولیه برای بهینه سازی پیل سوختی استفاده می شود. در این مطالعه عددی مدل سه بعدی، دینامیک سیالات محاسباتی تک فازی برای کانال های جریان گاز و مجموعه الکترود و غشاء پلیمری ارائه شده است. مجموعه معادلات بقا، با استفاده از یک برنامه کامپیوتری (که با زبان فرترن گسترش داده شده است) و بر اساس روشهای دینامیک سیالات محاسباتی و روش حجم محدود و الگوریتم سیمپل، حل عددی شده است. مدل حاضر، پدیده های انتقال و عملکرد پیل را محاسبه می کند. علاوه بر این، در این مطالعه تاثیر معکوس کردن جهت جریان در سمت کاتدی بر عملکرد پیل های سوختی و توزیع گونه ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاکی از آن است چگالی جریان خروجی در پیل سوختی غشاء پلیمری با جریان گاز ناهمسو، کاهش یافته است و همچنین معکوس کردن جهت جریان توزیع گونه ها در پیل را نیز تحت تاثیر قرار داده است. نظر به این که شار برگشتی آب از کاتد به آند و شار جرمی الکترو اسمزی به شدت به یکدیگر مرتبط بوده و همچنین برای تعیین هدایت یونی غشا موثر می باشند، محاسبه این دو شار بسیار مهم می باشد. دست آخر، نتایج عددی با داده های آزمایشگاهی موجود اعتبار سنجی شده است.
پذیرش مقاله: ۱۳۹۶/۰۳/۰۷	
واژگان کلیدی:	
پیل سوختی پلیمری، ولتاژ، چگالی جریان، دینامیک سیالات محاسباتی.	

### ۱-مقدمه

پیل سوختی غشاء پروتونی از یک غشاء پلیمری بسیار نازکی به عنوان الکترولیت بهره گرفته شده که به عنوان افق جدیدی برای منبع انرژی آینده، به ویژه برای وسایل حمل نقل و مصارف مسکونی مورد توجه قرار گرفته است. این نوع پیل سوختی دارای بسیاری مزیت های مهم منجمله بهره وری بالا، بی صدا بودن و مطابقت با استانداردهای محیط زیست، کارکرد در دمای پایین، راه اندازی سریع، بدون الکترولیت مایع و طراحی ساده می باشد. با این حال، قبل از این که این سیستم توانایی رقابت با نیروگاه های احتراقی

قدیمی را داشته باشد باید کارایی و هزینه های آن بهینه سازی بیشتری شود [۴-۱]. در سال های اخیر، تحقیق و توسعه در پیل های سوختی و سیستم های پیل سوختی سرعت یافته، اما هنوز هم، هزینه های سیستم پیل سوختی آنقدر بالاست که نمیتوان آن را به یک محصول تجاری ماندگار تبدیل نمود. در یک پیل سوختی، سوخت (مثلا گاز هیدروژن) و اکسید کننده (به عنوان مثال، گاز اکسیژنی که از هوا گرفته می شود) برای تولید الکتریسیته استفاده می شود، در حالی که از عملکرد پیل سوختی، محصولات نوعی همچون آب و گرما تولید می شود. یک پیل سوختی معمولا بر اساس اصول زیر کار

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: nima.ahmadi.eng@gmail.com

۱. دانشجوی دکتری، دانشگاه صنعتی ارومیه، گروه مکانیک

۲. استادیار، دانشگاه صنعتی ارومیه، گروه مکانیک

۳. استاد، دانشگاه ارومیه، گروه مکانیک

۴. استادیار، دانشگاه صنعتی ارومیه، گروه مکانیک

پلیمری با تأثیر گرفتن از پارامترهای بسیاری، مانند درجه حرارت، فشار، رطوبت سازی از جریان گاز و پارامترهای هندسی شناخته شده است.

پارامترهای هندسی نقش عمده‌ای در تأثیرگذاری بر عملکرد پیل‌های سوختی پلیمری بازی می‌کنند. به عنوان مثال، عملکرد پیل سوختی با عرض شانه (نسبت عرض صفحه دو قطبی) کوچکتر بهتر از مدلهایی با عرض شانه بزرگتر است [۱۵-۱۸]. تأثیر هندسه کانال گاز بر عملکرد پیل‌های سوختی پلیمری یکی از فاکتورهای تعیین کننده است و تحقیقات زیادی در این باره انجام گرفته است. به عنوان نمونه، تأثیر هندسه دو کانال به شکل مستطیل و دوزنقه به صورت عددی شبیه‌سازی شد و نتایج به دست آمده با هم مقایسه گردید. نتایج حاکی از آن است که هندسه مستطیلی در ولتاژ یکسان جریان بیشتری تولید می‌کند [۱۹].

پیل‌های سوختی پلیمری معمولاً "به صورت تک کاناله (یک کانال گاز در هر سمت آند و کاتد) می‌باشند. جریان گازهای واکنش دهنده نیز معمولاً "بصورت هم جهت در آند و کاتد می‌باشد. در این مقاله سعی شده است که پیل سوختی دو کاناله (دو کانال گاز در هر سمت آند و کاتد) بصورت عددی مدل‌سازی شده و نتایج بدست آمده یا داده‌های تجربی اعتبارسنجی شده‌اند. سپس در ادامه تأثیر معکوس کردن جریان در سمت کاتد بر عملکرد پیل و همچنین شار آب انتقال یافته مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که با معکوس کردن جریان گاز در کاتد عملکرد پیل سوختی افت زیادی خواهد داشت.

## ۲- مدل ریاضی

در این مطالعه دامنه محاسباتی به همراه شبکه در شکل (۱) نشان داده شده است. این پیل شامل کانال‌های هیدروژن و اکسیژن و صفحات دو قطبی در سمت آند و کاتد از پیل می‌باشد و الکترودها و غشاء بین کانال‌های گاز واقع شده است.

## ۳- فرضیات مدل

در مدل غیر همدمای حاضر برخی ساده‌سازی‌ها انجام گرفته است که عبارتند از: مخلوط گاز ایده‌آل تصور می‌شود، لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیستی متخلخل بصورت همگن هستند، جریان تراکم ناپذیر و آرام است، به دلیل این که گرادیان فشار و سرعت کوچک هستند مدل آرام و تراکم ناپذیر است. مدل بصورت دو فازی (شامل آب و بخار آب)

می‌کند: به طوری که گاز هیدروژن درون پیل سوختی در سمت آند جاری می‌شود، یک لایه کاتالیستی از جنس پلاتین اکسیداسیون گاز هیدروژن را تسهیل می‌کند، که منجر به تولید پروتون (یون هیدروژن) و الکترون می‌شود، یونهای هیدروژن مستقیماً به یک غشاء (قسمتی که در مرکز پیل سوختی آند و کاتد را از هم جدا کرده) انتقال داده می‌شوند، و دوباره به کمک لایه کاتالیستی، در سمت کاتد با اکسیژن و الکترون‌ها به منظور تولید آب ترکیب می‌شوند. الکترون‌ها، که نمی‌توانند مستقیماً از غشاء عبور کنند، به واسطه یک مدار الکتریکی خارجی که شامل موتور یا یک سیستم الکتریکی دیگری می‌شود، از آند به کاتد جریان پیدا می‌کنند.

الکترودهای آند و کاتد هر دو متخلخل می‌باشند و از مواد رسانای الکتریکی، به طور معمول کربن، ساخته می‌شوند. قسمت بیرونی الکترودها با غشا که شامل کربن، الکترولیت پلیمری و کاتالیست مبتنی بر پلاتین می‌باشد در تماس است. نیم واکنش‌های اکسیداسیون و کاهش پیل سوختی به ترتیب در لایه‌های فعال آند و کاتد صورت می‌پذیرد. الکترودهای پیل سوختی از نوع قابل نفوذ برای جریان گاز می‌باشند و به طور کلی برای حداکثر سطح در حجم واحد ماده (سطح خاص) طراحی شده است. در این روش لایه انتشار گاز می‌تواند به منظور به حداقل رساندن مقاومت در انتقال هیدروژن و اکسیژن به لایه‌های فعال برای واکنش در دسترس باشد.

در دهه گذشته تلاش‌های پژوهشی گسترده‌ای برای توسعه مدل‌های شبیه‌سازی که به واقعیت نزدیک‌تر باشد انجام شده است. پژوهشگران سراسر جهان تمرکز خود را بر بهینه‌سازی سیستم پیل سوختی گذاشته‌اند تا از لحاظ هزینه با تجهیزات تبدیل انرژی رایج موجود قابل رقابت باشد [۴].

بسیاری از مطالعات ابعاد مختلف عملکرد پیل سوختی پلیمری را به عنوان تابعی از شرایط کارکرد پیل در نظر گرفته‌اند (به عنوان مثال [۵-۱۳]). یکی از ابزارهای مهم در این بررسی بهینه‌سازی عملکرد پیل سوختی، مدل‌سازی عددی است، که می‌تواند برای بررسی پدیده‌های اساسی در حال وقوع در سیستم پیل سوختی مورد استفاده قرار گیرد [۱۴].

تحقیقات بسیاری برای بهبود عملکرد پیل سوختی پلیمری انجام شده است. عملکرد پیل‌های سوختی نوع پیل سوختی

$$D_K^{eff} = (\mathcal{E}^{eff})^{1.5} D_K \quad (6)$$

می‌باشد.

علاوه بر این، ضریب انتشار تابعی از دما و فشار می‌باشد [۲۶]:

$$D_K = D_K^* \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left( \frac{P_0}{P} \right) \quad (7)$$

خواص انتقال گونه‌ها در جدول ۱ داده شده است. معادله ۴، معادله بقا بار می‌باشد. در این معادله،  $\kappa_e$  هدایت یونی در فاز متریک یون است و توسط اسپرینگر، زاودزینسکی، و گاتسفیلد به ثبت رسید [۲۷]:

$$\kappa_e = \exp \left[ 1268 \left( \frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \times (0.005139\lambda - 0.00326) \quad (8)$$

به علاوه در معادله اخیر،  $\lambda$  به عنوان تعداد مولکول‌های آب در هر گروه سولفونات در داخل غشاء تعریف شده است. مقدار آب را می‌توان تابعی از فعالیت آب در نظر گرفت،  $a$  با توجه به داده‌های تجربی معین می‌شود [۲۸]:

$$\lambda = 0.3 + 6a [1 - \tanh(a - 0.5)] + 3.9\sqrt{a} \left[ 1 + \tanh \left( \frac{a - 0.89}{0.23} \right) \right] \quad (9)$$

فعالیت آب، توسط معادله زیر مشخص می‌شود:

$$a = \frac{C_w RT}{P_w^{sat}} \quad (10)$$

هدایت پروتونی در لایه‌های کاتالیستی توسط رابطه براگمن [۲۹] معرفی شده است:

$$\kappa_e^{eff} = \mathcal{E}_m^{1.5} \kappa_e \quad (11)$$

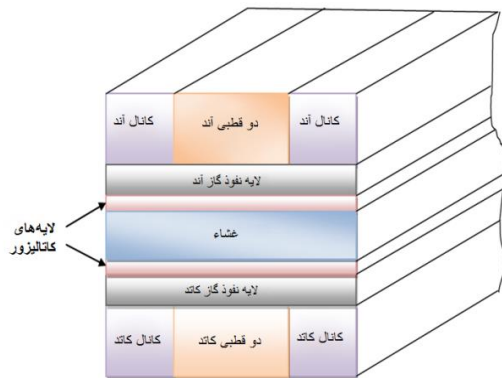
در معادله اخیر  $\mathcal{E}_m$  کسر حجمی، از فاز غشاء در لایه کاتالیستی است. ترم‌های منبع و چاه معادلات (۳) و (۴)، در جدول ۲ ارائه شده است. چگالی جریان موضعی در غشاء توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$I = -\kappa_e \nabla \Phi_e \quad (12)$$

سپس چگالی جریان متوسط به شرح زیر محاسبه می‌شود:

$$I_{ave} = \frac{1}{A} \int_{A_{mem}} I dA \quad (13)$$

در رابطه اخیر  $A$ ، مساحت مؤثر واکنش مجموعه الکترود می‌باشد.



شکل ۱- شمای کلی پیل سوختی (دامنه محاسباتی)

#### ۴- معادلات حاکم

در این شبیه‌سازی عددی، معادلات زیر به عنوان معادلات حاکم، مورد استفاده قرار گرفته است. این معادلات حاکم عبارتند از:

بقای جرم مومنتوم و معادلات گونه‌ها، که می‌تواند به این فرم نوشته شود:

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

$$\frac{1}{(\mathcal{E}^{eff})^2} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + S_u \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{u} C_K) = \nabla \cdot (D_K^{eff} \nabla C_K) + S_K \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (\kappa_e^{eff} \nabla \Phi_e) + S_\Phi = 0 \quad (4)$$

در معادله ۱، چگالی مخلوط گازی است با توجه به فرضیات مدل، منبع چاه و چشمه جرم نادیده گرفته شده است. که - $\mathcal{E}$ ، تخلخل موثر در داخل لایه‌های متخلخل است. و  $\mu$  لزجت مخلوط گاز در معادله مومنتوم است که در معادله ۲ نشان داده شده است. ترم منبع مومنتوم،  $S_u$  برای توصیف درگ دارسی برای جریان از طریق لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیستی استفاده می‌شود [۲۴]:

$$S_u = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u} \quad (5)$$

در معادله بالا  $K$  نفوذپذیری گاز در داخل محیط متخلخل است. در معادله گونه که در معادله ۳ نشان داده شده است، ضریب نفوذ موثر گونه  $k$  ام (مانند هیدروژن، اکسیژن، نیتروژن و بخار آب) است و برای توصیف اثرات تخلخل در لایه نفوذ گاز متخلخل و لایه کاتالیستی است که توسط براگمن پیشنهاد شد [۲۵]:

جدول ۱- خواص انتقالی گونه‌ها

مقدار	کمیت
$1/1 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$	نفوذ پذیری مرجع هیدروژن در کانال گاز، $D_{\text{H}_2}^0$
$3/2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	نفوذپذیری مرجع اکسیژن در کانال گاز، $D_{\text{O}_2}^0$
$7/35 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	نفوذپذیری مرجع آب در کانال گاز، $D_{\text{H}_2\text{O}}^0$
$2/59 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	نفوذ پذیری مرجع هیدروژن در غشاء، $D_{\text{H}_2}^{\text{mem}}$
$1/22 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	نفوذ پذیری مرجع اکسیژن در غشاء، $D_{\text{O}_2}^{\text{mem}}$

جدول ۲- ترم‌های منبع برای معادلات بقا بار، مومنتوم و گونه‌ها

بقاء بار	گونه‌ها	مومنتوم
$S_\phi = 0$	$S_k = 0$	کانال‌های جریان $S_u = 0$
$S_\phi = 0$	$S_k = 0$	صفحات دو قطبی $S_u = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u}$
$S_\phi = 0$	$S_k = 0$	لایه‌های نفوذ گاز $S_u = -\frac{\mu}{K} \mathbf{u}$
$S_\phi = j$	$S_k = -\nabla \cdot \left( \frac{n_d}{F} \mathbf{i} \right) - \frac{S_k j}{nF}$	لایه‌های کاتالیستی $S_u = 0$
$S_\phi = 0$	$S_k = -\nabla \cdot \left( \frac{n_d}{F} \mathbf{i} \right)$	غشاء $S_u = 0$

## ۵- انتقال آب

مولکول‌های آب در پیل سوختی پلیمری با توجه به خواص غشاء الکترولیت پلیمری علاوه بر انتشار مولکولی، از طریق پسای الکترواسمزی نیز انتقال می‌یابند. پروتون‌های  $\text{H}^+$  مولکول‌های آب را از میان غشای الکترولیت پلیمری انتقال می‌دهند و این پدیده انتقال پسای الکترواسمزی نامیده می‌شود. علاوه بر انتشار مولکولی و پسای الکترواسمزی، بخار آب نیز با توجه به واکنش کاهش اکسیژن در لایه‌های کاتالیستی تولید می‌شود. انتقال آب از میان غشای الکترولیت پلیمری به طریق زیر تعیین می‌شود:

$$\nabla \cdot \left( D_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} \nabla C_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}} \right) - \nabla \cdot \left( \frac{n_d}{F} \mathbf{i} \right) = 0 \quad (14)$$

که در آن  $n_d$  و  $D_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{mem}}$  به ترتیب، به عنوان ضریب پسای آب از آند به کاتد و ضریب انتشار آب در فاز غشاء تعیین شده است. تعداد مولکول‌های آب منتقل شده توسط هر پروتون هیدروژن  $\text{H}^+$  است که ضریب پسای آب نامیده می‌شود. که می‌توان از رابطه زیر مشخص نمود [۲۸]:

$$n_d = \begin{cases} 1 & \lambda < 9 \\ 0.117\lambda - 0.0544 & \lambda \geq 9 \end{cases} \quad (15)$$

ضریب انتشار آب در غشاء پلیمری وابسته به مقدار آب محتوی غشا است و توسط الگوی واحدی از رابطه تجربی زیر به دست می‌آید [۳۰]:

$$D_w^{\text{mem}} = \begin{cases} 3.1 \times 10^{-7} \lambda (e^{0.28\lambda} - 1) e^{\left(\frac{-2346}{T}\right)} & 0 < \lambda \leq 3 \\ 4.17 \times 10^{-8} (1 + 161e^{-\lambda}) e^{\left(\frac{-2346}{T}\right)} & \text{Otherwise} \end{cases} \quad (16)$$

جریان انتقالی و یا ترم‌های منبع فقط در داخل لایه کاتالیستی غیر صفر هستند. این انتقال جریان در آند و کاتد را می‌توان با معادلات تافل به صورت زیر شرح داد:

$$R_{\text{an}} = j_{\text{an}}^{\text{ref}} \left( \frac{[\text{H}_2]}{[\text{H}_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{an}}} \left( e^{\alpha_{\text{an}} F n_{\text{an}} / RT} - e^{-\alpha_{\text{cat}} F \eta_{\text{an}} / RT} \right) \quad (17)$$

$$R_{\text{cat}} = j_{\text{cat}}^{\text{ref}} \left( \frac{[\text{O}_2]}{[\text{O}_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{cat}}} \left( -e^{\alpha_{\text{an}} F \eta_{\text{cat}} / RT} + e^{-\alpha_{\text{cat}} F \eta_{\text{cat}} / RT} \right) \quad (18)$$

با توجه به معادله تافل، چگالی جریان در لایه کاتالیستی آند و کاتد را می‌توان با چگالی تبادل جریان، غلظت واکنش دهنده، دما و پتانسیل‌های اضافی که با توجه به معادله تافل

ترتیب فشار نسبی هیدروژن و اکسیژن،  $j_0$  چگالی جریان تبادل مرجع است. نرخ سوخت ورودی در سمت آند و کاتد ( $u$ ) بوده که میزان آن را با استفاده از معادلات زیر به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} u_{in,a} &= \frac{\xi_a I_{ref} A_{mem}}{2C_{H_2,in} FA_{ch}} \\ u_{in,c} &= \frac{\xi_c I_{ref} A_{mem}}{4C_{O_2,in} FA_{ch}} \end{aligned} \quad (28)$$

در معادلات اخیر،  $I_{ref}$  و  $\xi$  چگالی جریان مرجع و نسبت استوکیومتری (محاسبه میزان عناصر) می باشند،  $\xi$  به عنوان نسبت بین مقدار عرضه شده و مقدار مورد نیاز از سوخت بر اساس چگالی جریان مرجع معین شده است.

### ۶- شرایط مرزی و روش حل

معادلات (۱) تا (۴) مجموعه کاملی از معادلات حاکمه برای مدل ریاضی می باشند. شرایط مرزی در مرزهای خارجی به صورت، شار جرمی ثابت در ورودی کانالها و شرایط فشار ثابت در خروجی کانالها فرض شده است. در بقیه مرزها (به جز کانالها) شار برای معادلات بقاء جرم، مومنتوم، گونه در آند و کاتد به کار برده نمی شود به عبارت دیگر شار برابر صفر است. مجموعه معادلات بقاء، با استفاده از یک برنامه کامپیوتری (که با زبان فرترن گسترش داده شده است) و بر اساس روشهای دینامیک سیالات محاسباتی و روش حجم محدود و الگوریتم سیمپل، حل عددی شده است.

### ۷- نتایج و بحث

#### ۷-۱- اعتبارسنجی مدل

به منظور بررسی صحت مدل، نتایج شبیه سازی عددی (برای کانال با جریان موازی و یا مدل پایه) با داده های تجربی ارائه شده توسط وانگ و همکاران [۳۲]، که در شکل (۲) نشان داده شده است، مقایسه گردیده اند. همانطور که مشاهده می شود تطابق خوبی بین مدل عددی و داده های تجربی وجود دارد. همچنین منحنی چگالی توان برای مدل عددی نیز ارائه شده است. همانطور که می دانیم، رابطه بین ولتاژ، چگالی جریان و قدرت پیل سوختی با رابطه،  $P = V \times I$  قابل توضیح می باشد. در ادامه، بعد از اعتبار سنجی مدل پایه، تاثیر معکوس کردن جریانها در کانال گاز مورد بررسی قرار گرفته است.

بیان شده است که در آن، پتانسیل اضافی به صورت تفاوت بین پتانسیل پروتون و پتانسیل الکترون تعیین شده است.

$$\eta_{an} = \phi_{sol} - \phi_{mem} \quad (19)$$

$$\eta_{cat} = \phi_{sol} - \phi_{mem} - V_{oc} \quad (20)$$

ولتاژ مدار باز در آند صفر فرض می شود، در حالی که ولتاژ مدار باز در کاتد تابعی از دما بوده و به صورت زیر نمایش داده می شود:

$$V_{oc} = 0.0025T + 0.2329 \quad (21)$$

هدایت پروتونی غشا ( $\sigma_m$ ) وابسته به مقدار آب است، و اسپرینگر و همکاران رابطه ای را برای آن پیشنهاد کرده اند [۳۱]:

$$\begin{aligned} \sigma_m &= (0.005139\lambda - 0.00326) \times \\ &\exp\left[1268\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right] \end{aligned} \quad (22)$$

معادله انرژی در پیل سوختی پلیمری با رابطه (۲۳) معرفی می شود:

$$\nabla \cdot (\rho u T) = \nabla \cdot (\lambda_{eff} \nabla T) + s_T \quad (23)$$

که در آن،  $\lambda_{eff}$  ضریب هدایت مؤثر حرارتی است، و ترم منبع معادله انرژی ( $s_T$ )، از معادله زیر تعیین می شود:

$$S_T = I^2 R_{ohm} + h_{reaction} + \eta_a i_a + \eta_c i_c \quad (24)$$

در این معادله،  $R_{ohm}$  مقاومت اهمی غشاء و  $h_{reaction}$  حرارت کامل تولید شده واکنش های شیمیایی می باشد.  $\eta_a, \eta_c$  به ترتیب پتانسیل های اضافی آند و کاتد هستند، که این گونه محاسبه می شوند:

$$R_{ohm} = \frac{t_m}{\sigma_e} \quad (25)$$

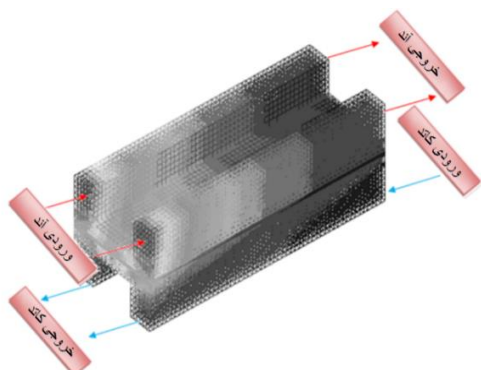
در اینجا،  $t_m$  ضخامت غشاء است.

$$\eta_a = \frac{RT}{\alpha_a F} \ln \left[ \frac{IP}{j_{0_a} P_{O_{H_2}}} \right] \quad (26)$$

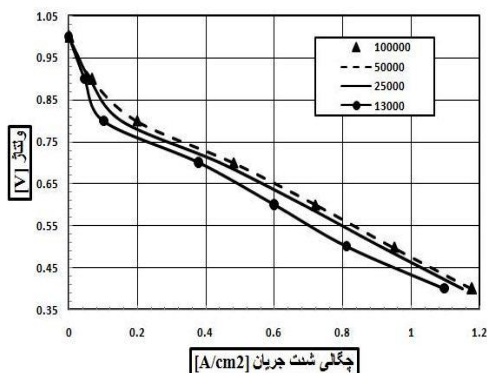
$$\eta_c = \frac{RT}{\alpha_c F} \ln \left[ \frac{IP}{j_{0_c} P_{O_2}} \right] \quad (27)$$

که در آن،  $\alpha_a$  و  $\alpha_c$  ضرایب انتقال آند و کاتد،  $P_{O_2}$ ،  $P_{O_{H_2}}$  به

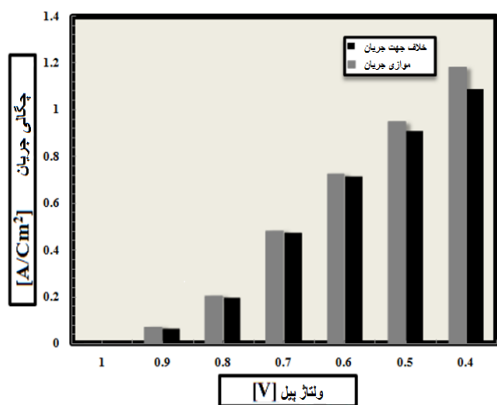
جریان موازی است، چگالی جریان بیشتری از مدل کانال‌های جریان در خلاف جهت هم، که هر دو باپیل ولتاژی یکسان می‌باشند، تولید می‌کند.



شکل ۳-الف- نمای کلی شبکه بندی سه بعدی پیل سوختی پلیمری

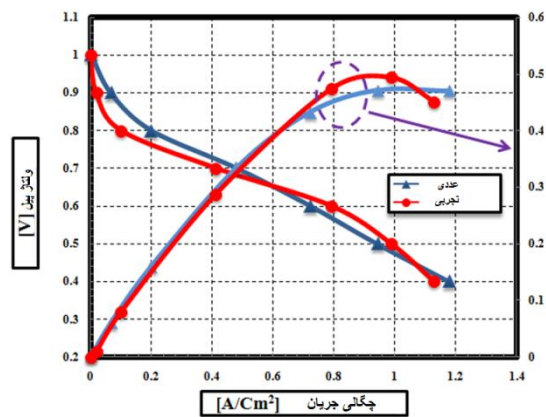


شکل ۳-ب- آزمایش استقلال از شبکه



شکل ۴- مقایسه نمودار پلاریزاسیون دو مدل عددی

شکل‌های (۵) و (۶) توزیع دما پیل سوختی جریان معکوس را برای دو ولتاژ مختلف (۰/۷ ولت و ۰/۵ ولت) نشان می‌دهد. همان‌طور که می‌توان بر روی شکل دید،



شکل ۲- نمودار پلاریزاسیون و چگالی توان.

شرایط عملکردی پیل سوختی مورد بررسی و پارامترهای هندسی آن در جدول ۳ نشان داده شده است. در سمت آند و کاتد گازهای ورودی در شرایط کاملا مرطوب می‌باشند.

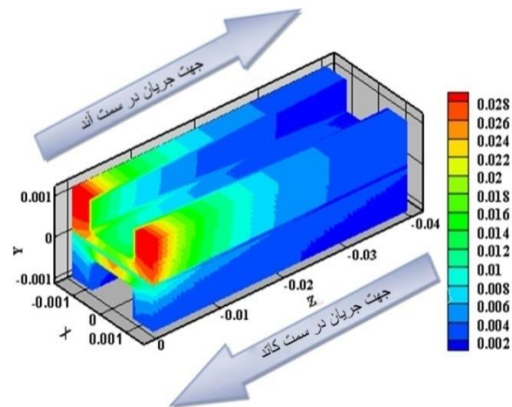
جدول ۳- پارامترهای هندسی و شرایط کارکرد [۳۲]

پارامتر	مقدار
طول کانال گاز	$4 \times 10^{-2} m$
عرض و ارتفاع کانال گاز	$0.762 \times 10^{-3} m$
عرض صفحه دوقطبی	$1/524 \times 10^{-3} m$
ضخامت لایه نفوذ گاز	$2/54 \times 10^{-4} m$
ضخامت لایه کاتالیستی	$2/87 \times 10^{-5} m$
ضخامت غشاء	$4/023 \times 10^{-4} m$
دمای کارکرد پیل	$80^{\circ} C$
فشار آند	۱ atm
فشار کاتد	۱ atm

در این مقاله سعی شده است تا مقایسه‌ای بین پیل سوختی با جریان گاز موازی در کانال‌ها و همچنین پیل سوختی با جریان گاز خلاف جهت انجام شود. تمام پارامترهای هندسی و شرایط عملیاتی در هر دو مدل یکسان است. ساختار مش محاسباتی بعد از انجام آزمایش برای استقلال از شبکه به ۵۰۰۰ سلول تقسیم می‌شوند؛ همچنین کانال‌های گاز در بخش‌های ورودی و خروجی (در سمت آند و کاتد) در شکل (۳-الف) معرفی شده‌اند و شکل (۳-ب) نشان دهنده نتیجه آزمایش استقلال از شبکه می‌باشد.

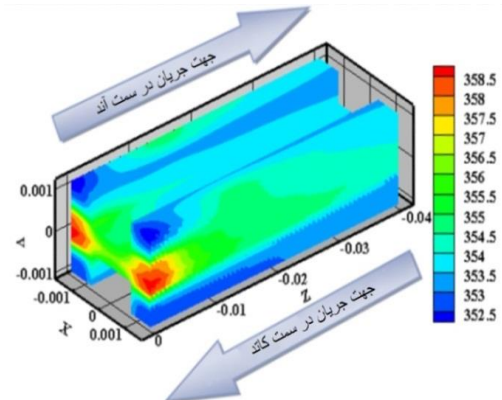
شکل (۴) نیز منحنی پلاریزاسیون برای دو حالت عددی (جریان موازی و جریان در خلاف جهت) را مقایسه می‌کند. نتایج عددی نشان می‌دهد که حالتی که باکانال‌های

آن کاهش یابد. با معکوس کردن جهت جریان گاز در کاتد، حداقل مقدار اکسیژن در بخش پایانی کانال کاتد با حداکثر مقدار پروتون هیدروژن مواجه است.

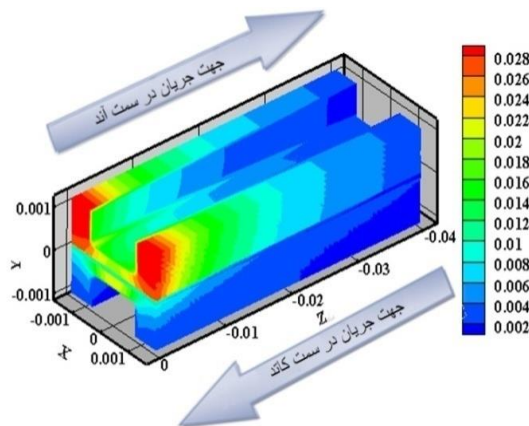


شکل ۷- غلظت آب در ۰/۵ ولت ( $\text{Kmol/m}^3$ )

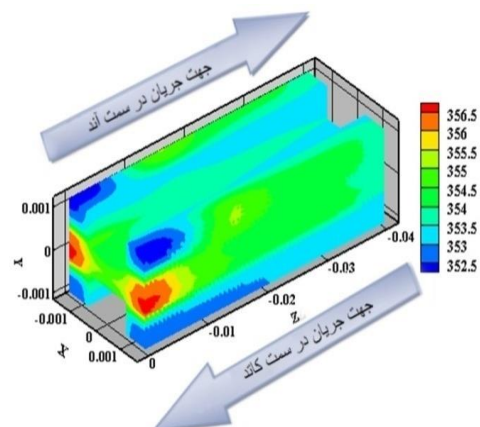
حداکثر مقدار درجه حرارت در ولتاژ ۰/۵ ولت، بیش از حداکثر مقدار درجه حرارت در ۰/۷ ولت است، زیرا در ولتاژهای پایین (معادل یا چگالی جریان پایین) در پیل سوختی پلیمری سرعت و شدت واکنش بالاتر است.



شکل ۵- توزیع دما در ۰/۵ ولت (K)



شکل ۸- غلظت آب در ۰/۷ ولت ( $\text{Kmol/m}^3$ )



شکل ۶- توزیع دما در ۰/۷ ولت (K)

این امر منجر به پراکنده شدن نواحی انجام واکنش شده که در نتیجه آن شدت واکنش افت پیدا می کند. در نتیجه این اتفاقات عملکرد پیل سوختی کاهش چشمگیری خواهد داشت (شکل ۹).

افت فعالسازی و چگالی جریان در سطح لایه کاتالیستی کاتد در شکل (۹) برای پیل با جریان معکوس و برای دو ولتاژ مختلف ارائه شده است.

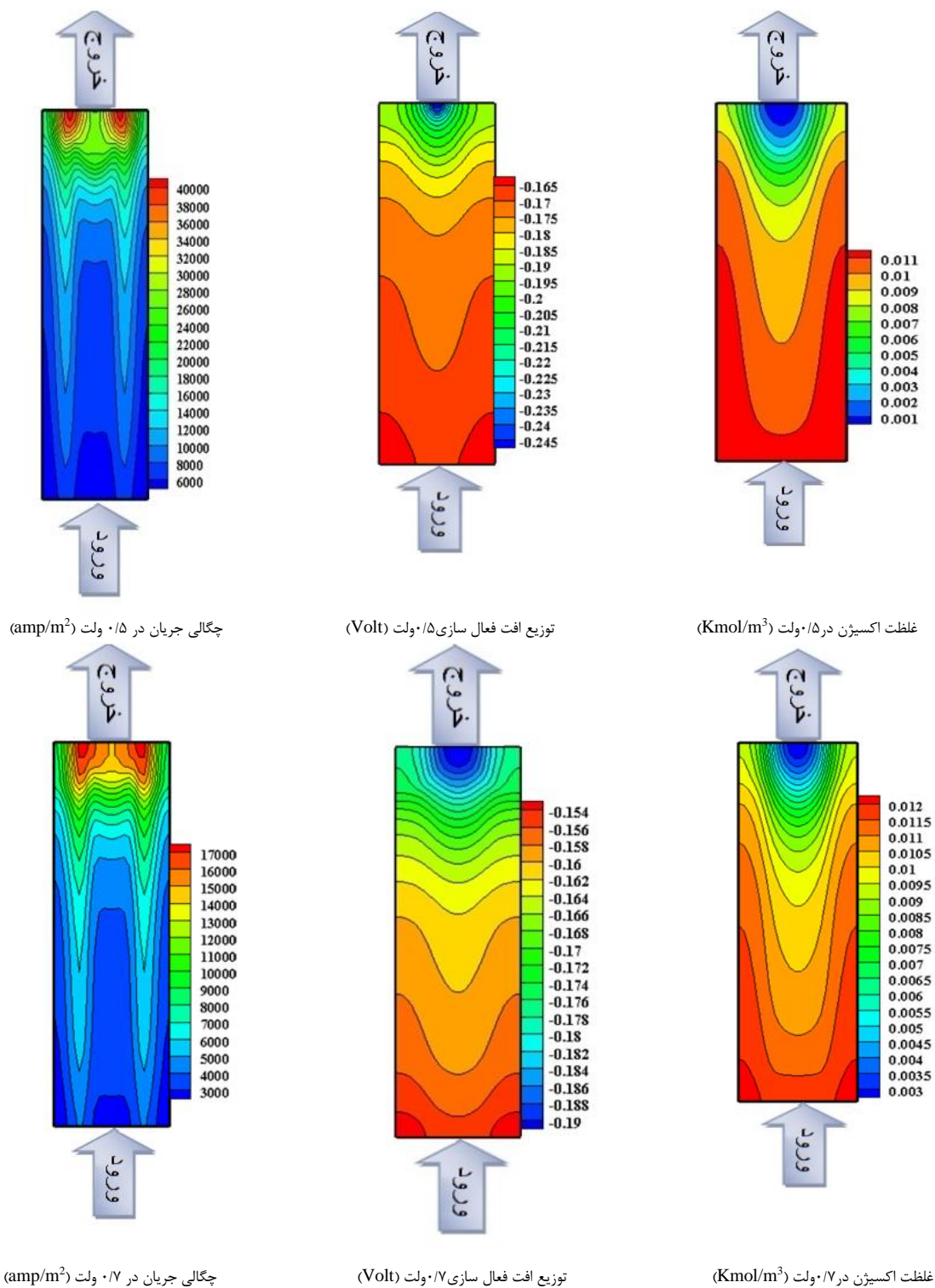
در سمت کاتد، اکسیژن، چگالی جریان و افت فعالسازی در منطقه ورود به کانال جریان گاز کم است و پس از آن در طول کانال همان طور که در شکل نشان داده شده است افزایش می یابد. همان طور که در شکل (۹) نشان داده شده است مقادیر افت فعالسازی منفی می باشند اما در سایر منابع معمولاً با مقادیر مثبت ارائه می شود. بنابراین اگر در این شکل ها افت فعالسازی با مقادیر مثبت ارائه شود، در

واضح است که در مدل پایه توزیع گونه ها و مدیریت انتقال آب از لحاظ فیزیکی کاملاً منطقی است. توزیع آب در دو طرف آند و کاتد باید کنش متعادلی داشته باشد. به این معنی که اگر غلظت آب در امتداد آند به دلیل انتقال پروتون هیدروژن به منطقه واکنش الکتروشیمیایی کاهش یابد، در سمت کاتد، باید به دلیل ترکیب مولکول ها با اکسیژن و الکترون ها و پروتون هیدروژن میزان غلظت آب افزایش یابد. اما در حالت جدید، جهت جریان معکوس باعث تجمع آب در منطقه خروجی کاتد (منطقه ورودی آند) شده است. در شکل های (۷) و (۸) توزیع آب به طور شماتیک نشان داده شده است.

از طرفی در سمت کاتد به دلیل انجام واکنش الکتروشیمیایی اصلی میزان اکسیژن باید به دلیل مصرف

اکسیژن و آب را برای دو ولتاژ مختلف پیل سوختی در طول لایه کاتالیستی را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که اکسیژن در طول کانال و در جهت جریان به علت واکنش شیمیایی مصرف می‌شود.

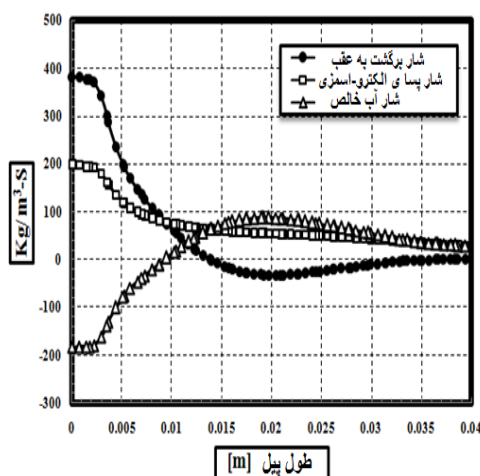
این صورت در منطقه ورودی لایه کاتالیستی کاتد، افت فعالسازی به حداقل مقادیر خود می‌رسد (به عبارت دیگر در مناطق خروجی حداکثر مقادیر را خواهد داشت). چگالی جریان به دست آمده با تمرکز غلظت اکسیژن و افت فعالسازی در ارتباط تنگاتنگ است. شکل (۹) تمرکز غلظت



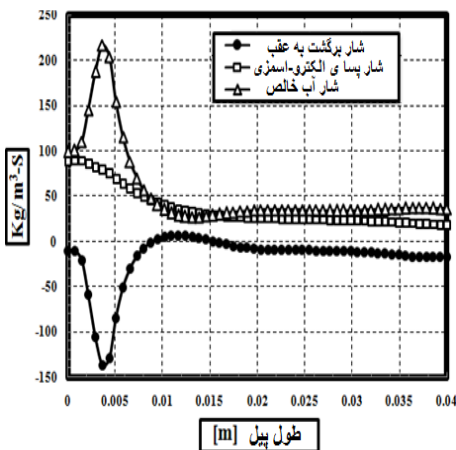
شکل ۹- مقایسه برخی ویژگی های پیل سوختی در دو ولتاژ مختلف ۰/۵ و ۰/۷ ولت مابین لایه کاتالیست کاتد و غشاء



الکترواسمزی و شاربرگشتی می‌باشد. شکل (۱۴) توزیع چگالی جریان در طول لایه کاتالیستی کاتد را برای چهار ولتاژ مختلف نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که به دلیل سرعت کم واکنش الکتروشیمیایی در ولتاژ ۱ ولت، چگالی جریان در این ولتاژ، حداقل مقدار را داراست. در ورودی چگالی جریان کمترین مقدار را دارا می‌باشد و در طول کانال به علت معکوس کردن جهت جریان در سمت کاتد افزایش می‌یابد. کمترین مقدار چگالی جریان در منطقه ورودی کاتد به دلیل غلظت کم پروتون هیدروژن برای واکنش با اکسیژن و شار الکترواسمزی کم در منطقه ورودی است.

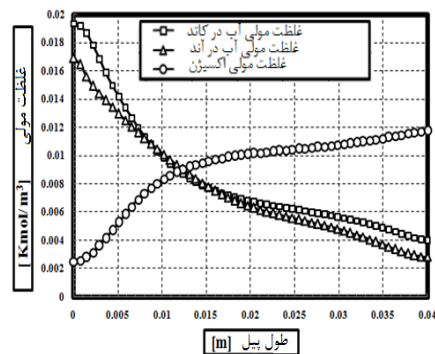


شکل ۱۱- مقایسه شار آب در ۰/۵ ولت در میان لایه کاتالیستی کاتد و غشاء (Kg/m<sup>3</sup>-S)

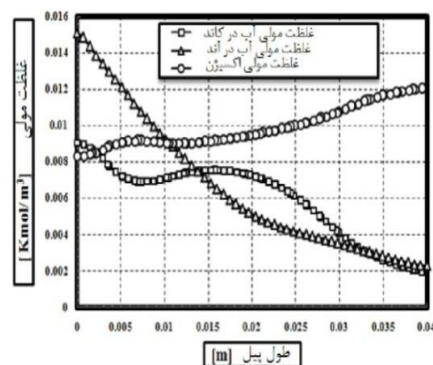


شکل ۱۲- مقایسه شار آب در ۰/۷ ولت در میان لایه کاتالیستی کاتد و غشاء (Kg/m<sup>3</sup>-S)

انتقال آب از میان غشاء یکی از پارامترهای حیاتی در پیل سوختی پلیمری بوده که در تعیین میزان محتوای آب غشاء و عملکرد پیل سوختی نقش به‌سزایی دارد. به علت وجود کشش الکترواسمزی، مولکول‌های آب برای واکنش نشان دادن با اکسیژن و الکترون عبوری از مدار بیرونی، از طریق غشاء از آند به کاتد انتشار می‌یابند، بنابراین آب در کاتد تولید شده و میزان آن در سمت کاتد افزایش می‌یابد (شکل ۱۰ و ۱۱).

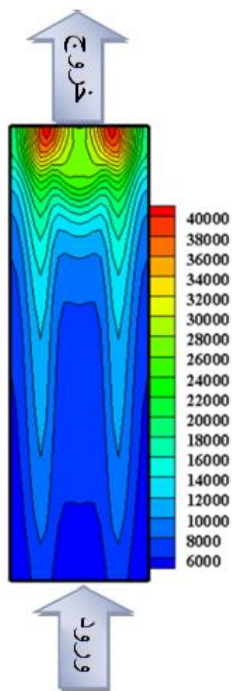


شکل ۱۰- اکسیژن و غلظت آب در ۰/۵ ولت در میان لایه کاتالیستی کاتد و غشاء (Kmol/m<sup>3</sup>)

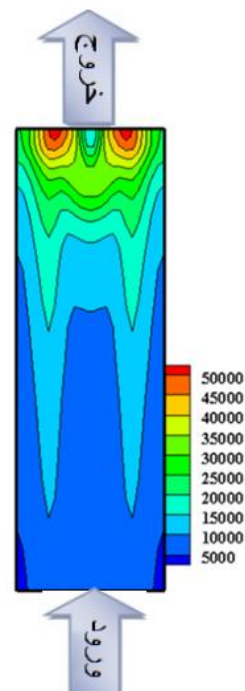


شکل ۱۱- اکسیژن و غلظت آب در ۰/۷ ولت در میان لایه کاتالیستی کاتد و غشاء (Kmol/m<sup>3</sup>)

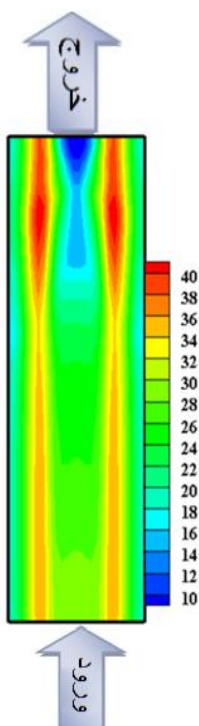
به علت تجمع زیاد آب در اثر انتقال و همچنین تولید زیاد آن در سمت کاتد، به خصوص در ولتاژهای پایین، بخشی از آب موجود از طریق پدیده‌ای موسوم به شار برگشتی و بطرف آند دوباره باز می‌گردد. میزان شار الکترواسمزی و شار برگشتی در سراسر غشاء در شکل‌های (۱۲) و (۱۳) برای دو ولتاژ مختلف مقایسه شده است. شار آب خالص عبوری از لایه غشاء برابر با اختلاف شار



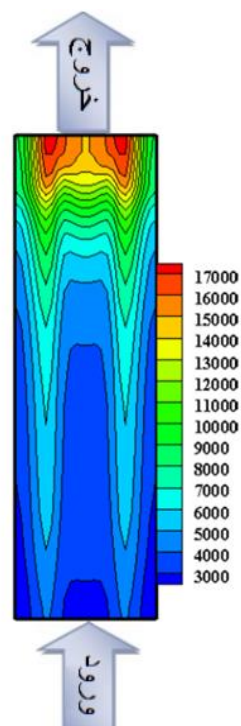
چگالی جریان در ۰/۵ ولت ( $\text{amp}/\text{m}^2$ )



چگالی جریان در ۰/۴ ولت ( $\text{amp}/\text{m}^2$ )



چگالی جریان در ۱ ولت ( $\text{amp}/\text{m}^2$ )



چگالی جریان در ۰/۷ ولت ( $\text{amp}/\text{m}^2$ )

شکل ۱۴- مقایسه چگالی جریان پیل سوختی در ولتاژهای مختلف مابین لایه کاتالیست کاتد و غشاء

$\mathcal{E}^{eff}$	تخلخل موثر
$\rho$	چگالی ( $\text{kg/m}^3$ )
$\phi_e$	پتانسیل فاز الکترولیت (v)
$\mu$	لزجت ( $\text{kg/m-s}$ )
$\sigma_e$	هدایت غشایی ( $1/\text{ohm-m}$ )
$\lambda$	مقدار آب درغشاء
$\zeta$	نسبت استوکیومتری
$\eta$	پتانسیل اضافی (v)
$\lambda_{eff}$	هدایت حرارتی موثر ( $\text{w/m-k}$ )

#### بالانویس‌ها و زیرنویس‌ها

a	آند
c	کاتد
ch	کانال
k	گونه‌های شیمیایی
m	غشا
MEA	مونتاز الکترولیت غشایی
ref	ارزش مرجع
sat	اشباع
w	آ

#### فهرست علائم

$a$	فعالیت آب
C	غلظت مولار ( $\text{mol/m}^3$ )
D	ضریب نفوذ جرم ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
F	ثابت فارادی ( $\text{C/mol}$ )
I	دانشسته جریان موضعی ( $\text{A/m}^2$ )
J	چگالی جریان تبدیلی ( $\text{A/m}^2$ )
K	نفوذپذیری ( $\text{m}^2$ )
M	وزن مولکولی ( $\text{kg/mol}$ )
P	فشار (پاسکال)
R	ثابت گازها جهانی ( $\text{J/mol-K}$ )
T	دما (K)
$V_{cell}$	ولتاژ همراه
$V_{oc}$	ولتاژ مدار باز
W	عرض
X	کسر مولی
$n_d$	ضریب درگ الکترواسمزی
$\vec{u}$	بردار سرعت
<b>علائم یونانی</b>	
$\alpha$	ضریب انتقال آب

#### مراجع

- [1] N. Ahmadi, S. Rezazadeh, and I. Mirzaee, "Study the Effect of Various Operating Parameters of Proton Exchange Membrane", Periodica Polytechnica Chemical Engineering, Vol. 59, No. 3, 2015, pp. 221–235.
- [2] T.V. Nguyen, "Modeling two-phase flow in the porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated flow fields", Presented at the 195th Meeting of Electrochemical Society, Seattle, 4–7 May 1999.
- [3] M.S. Kilic, S. Korkut, B. Hazer, "Electrical Energy Generation from a Novel Polypropylene Grafted Polyethylene Glycol Based Enzymatic Fuel Cell", Analytical Letters., Vol. 47, No. 6, 2014, pp. 983–995.
- [4] M. Grujicic, K.M. Chittajallu, "Design and optimization of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells", Applied Surface Science, Vol. 227, No. 1–4, 2004, pp. 56–72.
- [5] X.Q. Xing, et al. "Optimization of assembly clamping pressure on performance of proton-exchange membrane fuel cells", Journal of Power Sources, Vol. 195, No. 1, 2010, pp. 62–68.
- [6] W.R. Chang, et al. "Effect of clamping pressure on the performance of a PEM fuel cell", Journal of Power Sources, Vol. 166, No. 1, 2007, pp. 149–154.
- [7] N.G. Moreno, et al., "Approaches to polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs) and their cost", Renewable and Sustainable Energy Reviews, Vol. 52, 2015, pp. 897–906.
- [8] J.C. Amphlett, R.M. Baumert, R.F. Mann, B.A. Peppley, P.R. Roberge, T.J. Harris, "Performance modeling of the Ballard Mark IV solid polymer electrolyte fuel cell. I. Mechanistic model development", J. Electrochem. Soc., Vol. 142, No. 1, 1995, pp. 1–8.

- [9] C. Werner, L. Busemeyer, and J. Kallo, "The impact of operating parameters and system architecture on the water management of a multifunctional PEMFC system", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, No. 35, 2015, pp. 11595–11603.
- [10] O.J. Kwon, et al., "A study of numerical analysis for PEMFC using a multiphysics program and statistical method", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 40, No. 35, 2015, pp. 11577–11586.
- [11] D. Lee, et al., "Gasket-integrated carbon/silicone elastomer composite bipolar plate for high-temperature PEMFC", *Composite Structures*, Vol. 128, 2015, pp. 284–290.
- [12] F.A. Uribe, S. Gottesfeld, T.A. Zawodzinski, "Effect of ammonia as potential fuel impurity on proton exchange membrane fuel cell performance", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 149, No. 3, 2002, pp. A293–A296.
- [13] E.A. Ticianelli, C.R. Derouin, S. Srinivasan, "Localization of platinum in low catalyst loading electrodes to attain high power densities in SPE fuel cells", *J. Electroanal. Chem.*, Vol. 251, No. 2, 1988, pp. 275–295.
- [14] K.Z. Yao, K. Karan, K.B. McAuley, P. Oosthuizen, B. Peppley, T. Xie, "A review of mathematical models for hydrogen and direct methanol polymer electrolyte membrane fuel cells", *Fuel Cells*, Vol. 4, No. 1-2, 2004, pp. 3–29.
- [15] D. Natarajan, T.V. Nguyen, "A two-dimensional, two-phase, multi component, transient model for the cathode of a proton exchange membrane fuel cell using conventional gas distributors", *J. Electrochem.Soc.*, Vol. 148, No. 12, 2001, pp. A1324–A1335.
- [16] G. Lin, T.V. Nguyen, "A two-dimensional two-phase model of a PEM fuel cell", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 153, No. 2, 2006, pp. A372–A382.
- [17] K.W. Lum, J.J. McGuirk, "Three-dimensional model of a complete polymer electrolyte membrane fuel cell – model formulation, validation and parametric studies", *J. Power Source.*, Vol. 143, No. 1-2, 2005, pp. 103–124.
- [18] D.H. Ahmed, H.J. Sung, "Effects of channel geometrical configuration and shoulder width on PEMFC performance at high current density", *J. Power Source.*, Vol. 162, No. 1, 2006, pp. 327–339.
- [19] S. Majidifar, I. Mirzaei, S. Rezazadeh, P. Mohajeri, H. Oryani, "Effect of Gas Channel Geometry on Performance of PEM Fuel Cells", *AJBAS*, Vol. 5, No. 5, 2011, pp. 943–954.
- [20] N. Pourmahmoud, S. Rezazadeh, I. Mirzaee, v. heidarpoor, "Three-dimensional numerical analysis of proton exchange membrane fuel cell", *JMST.*, Vol. 25, No. 10, 2011, pp. 2665–2673.
- [21] N. Ahmadi, N. Pourmahmoud, I. Mirzaee, S. Rezazadeh, "Three-Dimensional Computational Fluid Dynamic Study of Effect of Different Channel and Shoulder Geometries on Cell Performance", *AJBAS*, Vol. 5, No. 12, 2011, pp. 541–556.
- [22] N. Ahmadi, S. Rezazadeh, I. Mirzaee, N. Pourmahmoud, "Three-dimensional computational fluid dynamic analysis of the conventional PEM fuel cell and investigation of prominent gas diffusion layers effect", *JMST*, Vol. 26, No. 8, 2012, pp. 1–11.
- [23] D.H. Ahmed, H.J. Sung, "Design of a deflected membrane electrode assembly for PEMFCs", *Int. J. Heat and Mass Transfer*, Vol. 51, No. 21-22, 2008, pp. 5443–5453.
- [24] V. Garau, H. Liu, and S. Kakac, "Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells", *AIChE J.*, Vol. 44, No. 11, 1998, pp. 2410–2422.
- [25] R.E. Meredith and C.W. Tobias, *Advances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering 2*, Tobias, C.W., ed., Interscience Publishers, New York, 1960.

- [26] R.B. Bird, W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc, 1960.
- [27] T.E. Springer, T.A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 138, No. 8, 1991, pp. 2334–2342.
- [28] A.A. Kuklikovsky, "Quasi-3D Modeling of Water Transport in Polymer Electrolyte Fuel Cells", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 150, No. 11, 2003, pp. A1432–A1439.
- [29] R.E. Meredith and C.W. Tobias, *Advances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering 2*, Tobias, C.W., ed., Interscience Publishers, New York, 1960.
- [30] S.W. Yeo and A. Eisenberg, "Physical properties and supermolecular structure of perfluorinated ion-containing (nafion) polymers", *J. Appl. Polym. Sci.*, Vol. 21, No. 4, 1977, pp. 875–898.
- [31] T. E. Springer, T. A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, "Polymer Electrolyte Fuel Cell Model", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 138, No. 8, 1991, pp. 2334–2342.
- [32] L. Wang, A. Husar, T. Zhou, and H. Liu, "A parametric study of PEM fuel cell performances", *J. Hydrog. Energy*, Vol. 28, No. 11, 2003, pp. 1263–1272.