

## مدل سازی جریان دوفازی و غیر همدما در پیل سوختی پلیمری

حسن حسن زاده<sup>۱\*</sup>, سید هادی گلکار<sup>۲</sup> و محبوبه برزگری<sup>۳</sup>

۱- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

۲- داش آموخته کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

\* h.hassanzadeh@birjand.ac.ir, 97175/615

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: ۱۰ آذر ۱۳۹۳

پذیرش: ۰۷ دی ۱۳۹۳

ارائه در سایت: ۲۰ دی ۱۳۹۳

کلید واژگان:

پیل سوختی پلیمری

جریان دوفازی

غیر همدما

اشیاع

در مقاله حاضر، جریان دوفازی و غیر همدما در لایه نفوذی گاز کاتد پیل سوختی پلیمری مدل سازی شده است. جهت استفاده از شرایط مرزی دقیق، علاوه بر مدل سازی لایه نفوذی گاز کاتد، دیگر اجزای پیل سوختی (غشاء و لایه نفوذی گاز آند) نیز مدل سازی شده اند. معادلات حاکم شامل معادلات بقاچار جرم، بقاچار مومنتوم و بقاچار انرژی و دیگر معادلات کمکی است که توسط روش های عددی حل شده است. همچنین اثر فشار و روابط نسبی، اثر ت manus و تبادل جرم بین دوفاز روی عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که جهت مدل سازی دقیق جریان دوفازی، لازم است هر دو اثر manus و تبادل جرم بین دو فاز در نظر گرفته شود. به ازای رطوبت های مختلف کاتال کاتد، منحنی عملکرد و منحنی توزیع دما در طول پیل سوختی در دو حالت دوفازی و تک فاز مقایسه شده اند، مقدار نسبی این دو برای دو جریان وابسته به مقدار رطوبت کاتال کاتد است. با افزایش فشار گاز در کاتال کاتد از ۰/۵ به ۵ اتمسفر، محتوای آب در مرز غشاء و لایه نفوذی گاز کاتد در حدود ۲۰٪ افزایش یافته و به تبع آن افت اهمی کاهش می یابد. با این کاهش افت اهمی درجه حرارت در طول پیل سوختی کاهش می یابد. ولی بر عکس با افزایش فشار گاز در کاتال آند، درجه حرارت در طول پیل سوختی افزایش می یابد.

## Modeling of two phase and non - isothermal flow in polymer electrolyte fuel cell

Hassan Hassanzadeh<sup>۱\*</sup>, Seyed Hadi Golkar<sup>۲</sup> and Mahboobeh Barzgary<sup>۳</sup>

۱- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran

۲, ۳- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran

\*P.O.B. 97175/615Birjand, Iran, h.hassanzadeh@birjand.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 01 December 2014

Accepted 28 December 2014

Available Online 10 January 2015

**Keywords:**  
PEM Fuel cell  
Two-phase flow  
Non-isothermal  
Saturation

### ABSTRACT

In this paper, a non - isothermal and two-phase flow in the cathode gas diffusion layer (GDL) of PEM fuel cell is modeled. To achieve more accurate boundary conditions, other components of fuel cell (membrane and anode GDL) are modeled. Governing equations including energy, mass and momentum conservation and auxiliary equations are solved by numerical method and the effect of gas mixture pressure in channels, relative humidity and effect of contact and mass exchange between two phases are investigated. Results show, it is necessary that both the contact and mass exchange between the gas and liquid phase to be considered. The performance curve and temperature distribution for single and two phase flow are compared for different amount of cathode channel humidity. The relative value of performance and temperature for single and two phase flow depends on the humidity of cathode channel. With increasing the cathode pressure from 0.5 to 5atm the value of water content in membrane and gas diffusion interface will increase about 20%. With increasing the water content in the membrane therefore the ohmic loss is reduced. With the reduction in the ohmic loss the temperature distribution along the fuel cell decreases but if the anode pressure increases the temperature distribution along the fuel cell increases.

با وجود مزایای زیاد پیلهای سوختی پلیمری، مدیریت دقیق آب در

آنها دشوار است؛ زیرا قابلیت هدایت یونی غشاء پلیمری به شدت به مقدار آب موجود در آن وابسته است؛ لذا لازم است سوخت و اکسید کننده قبل از ورود به پیل سوختی رطوبت‌زنی شوند. انتقال آب توسط واکنش‌گران و تولید آب در کاتالیست کاتد شرایط را برای وجود جریان دوفازی در الکترودها فراهم می‌کند؛ لذا با افزایش چگالی جریان و تولید بیشتر آب در کاتالیست کاتد، جریان در لایه نفوذی گاز کاتد دوفازی می‌شود. در جریان دوفازی،

پیلهای سوختی وسایلی الکتروشیمیایی هستند که انرژی شیمیایی حاصل از یک واکنش شیمیایی را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل کرده و محدودیت سیکل کارنو را ندارند [1]. در میان پیلهای سوختی مختلف، پیلهای سوختی پلیمری به دلیل داشتن مزایایی چون دمای کاری پایین، بازده بالا، چگالی قدرت بالا، الکتروولیت پلیمری جامد و شروع به کار سریع گزینه مناسبی جهت استفاده در حمل و نقل و وسایل قابل حمل می‌باشند [2].

### -۱ مقدمه

Please cite this article using:

H. Hassanzadeh, S. H. Golkar, M. Barzgary, Modeling of two phase and non - isothermal flow in polymer electrolyte fuel cell, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 2, pp. 313-322, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

www.mme.ac.ir

همچنین هم‌دما و غیر هم‌دما بودن مدل، هم‌فشار بودن و غیر هم‌فشار بودن و نهایتاً تخمین مقدار  $\alpha$  (به صورت نسبت مقدار آب ورودی به کاتالیست کاتند) از طریق غشاء به مقدار آب تولیدی در آن در اثر واکنش تعريف می‌شود) در فصل مشترک غشاء و کاتالیست کاتند است که در این مقاله مورد توجه است. پاساگولاری و ونگ [9] در مدلی دوفازی، هم‌دما و یکبعدی و تحلیلی به بررسی غرقاب شدگی و تاثیر میزان اشباع بر عملکرد پیل سوختی پرداخته‌اند. نتایج تحقیق مذکور از جنبه نشان دادن تاثیر مدل‌سازی دوفازی بر عملکرد پیل سوختی با اهمیت است؛ اما استفاده از مفروضاتی مانند یکنواخت بودن میزان اشباع در لایه کاتالیست و نادیده گرفتن اثر تبادل جرم بین دوفاز، از دقت مدل‌سازی آن‌ها می‌کاهد. ژان و همکاران [10] در مدلی دوفازی، هم‌دما و یک بعدی به بررسی اهمیت توزیع غیر یکنواخت ضربی تخلخل در لایه فنوذی گاز پرداخته‌اند. در این تحقیق، اثر تماس دوفاز در نظر گرفته شده است؛ اما به  $\alpha$  مقداری فرضی نسبت داده شده و اثر تبادل جرم بین دو فاز حین عبور از لایه فنوذی گاز در نظر گرفته نشده است. ژان و همکاران [11] مدلی دوفازی با ضربی تخلخل خطی ارائه کرده‌اند. در این مدل گاز موجود در لایه فنوذی کاتند اشباع فرض شده است؛ لذا با فاز مایع تبادل جرم ندارد همچنین به  $\alpha$  مقداری فرضی نسبت داده شده است. پاساگولاری و ونگ [12] به مقایسه دو روش مدل‌سازی جریان دوفازی در لایه فنوذی گاز پرداخته‌اند. روش *UTF* مبتنی بر فرض فشار ثابت در فاز گاز و روش *M<sup>2</sup>* از فرمول‌بندی مجدد مدل‌سازی کلاسیک حاصل شده است که در آن به جای حل دو دسته معادلات برای فازهای مایع و گاز، یک دسته معادله حل می‌شود. در این مدل‌سازی از تبادل جرم بین دو فاز صرف نظر شده و به  $\alpha$  عددی فرضی نسبت داده است. داس و همکاران [13] در مدلی دوفازی و یکبعدی، به بررسی جریان آب در لایه کاتالیست کاتند پیل سوختی پلیمری پرداخته‌اند. این مدل‌سازی تحلیلی هر چند مبتنی بر فرض‌های ساده کننده بسیاری است ولی تاثیر زاویه تماس بر جریان آب موجود در لایه کاتالیست مورد بررسی قرار گرفته است که قبل از آن کمتر مورد توجه قرار گرفته است؛ منتها در این مدل‌سازی مقداری فرضی به  $\alpha$  نسبت داده شده است. وینکی [14] در مدلی دوبعدی و دوفازی با در نظر گرفتن هر دو اثر تماس و تبادل جرم، مدل جدیدی ارائه کرده است. وی با فرض وجود تعادل ترمودینامیکی بین فازهای گاز و مایع کمیتی تحت عنوان  $\delta$  را به عنوان مکانی در لایه نفوذ گاز تعريف می‌کند که در آن تبدیل فاز متوقف می‌شود؛ لذا بدین ترتیب با نوشتن معادلات جریان تک‌فاز برای ناحیه تک‌فاز و معادلات جریان دوفازی برای نواحی دوفازی بر دقت مدل‌سازی افزوده است؛ منتها پیچیدگی‌های مش‌بندی از نقاط ضعف تحقیق وی محسوب می‌شود. در همه مدل‌های فوق علاوه بر موارد ذکر شده، فقط لایه فنوذی گاز کاتند مدل‌سازی شده‌اند؛ لذا از شرایط مرزی تقریبی جهت مدل‌سازی استفاده شده است.

یو و لیو [15] در مدلی دوفازی، هم‌دما و دوبعدی معادلات انتقال آب را در اجزای مختلف پیل سوختی در نظر گرفته و به بررسی اثر افزایش چگالی جریان بر روی پارامترهایی چون غلظت اکسیژن، محتوای آب غشاء و ولتاژ خروجی از پیل سوختی پرداخته‌اند. در این تحقیق، عدد  $\alpha$  به ازای چگالی جریان‌های معین در مرز غشاء و لایه کاتالیست محاسبه شده است. در این مقاله اثر تماس بین دو فاز در نظر گرفته شده؛ اما اثر تبادل جرم صرف نظر شده است. حسن زاده و همکاران [16] مدلی دوفازی ارائه کردنده که در آن هر دو اثر تماس و تبادل جرم در نظر گرفته شده است. همچنین با توجه به

وجود آب در منفذهای الکتروودها باعث کاهش سطح موثر انتقال جرم شده و مقاومت در مقابل آن افزایش می‌یابد. افزایش مقاومت در مقابل انتقال جرم باعث کاهش غلظت واکنش‌گرها در محل‌های واکنش شده و افت فعال‌سازی در پیل سوختی افزایش می‌یابد. با افزایش بیشتر چگالی جریان ( $I$ )  $1 A/cm^2$  آب تولید شده در کاتالیست کاتند زیادتر می‌شود؛ به طوری که منفذهای الکتروودها به خصوص الکتروود کاتند توسط آب مسدود می‌شود که به این حالت غرقاب شدگی می‌گویند. غرقاب شدگی پدیده مضري است که می‌تواند در چگالی جریان بالا در کاتند و در چگالی جریان کم در آند واقع شود [3]. وقوع غرقاب شدگی با کاهش شدید غلظت گونه‌ها در محل‌های واکنش و افت شدید ولتاژ پیل سوختی همراه است؛ لذا با توجه به بحث انجام شده مدیریت آب در پیل سوختی جهت تامین دو هدف متضاد آبدار بودن غشاء و عدم وقوع غرقاب شدگی دشوار است.

وقوع واکنش‌های الکتروشیمیایی در لایه‌های کاتالیست، وجود افت فعال‌سازی در کاتالیست‌ها و افت اهمی در الکتروودها و غشاء، همچنین تبدیل بخار آب به آب مایع و برعکس در طول الکتروودها و کاتالیست‌ها باعث تولید حرارت در پیل سوختی می‌شود؛ لذا توزیع دما در پیل سوختی غیر یکنواخت است. وجود جریان دوفازی و توزیع غیر یکنواخت دما در پیل سوختی سردرمتر می‌شود؛ لذا تبخری بیشتر آب در نواحی گرم‌تر و نقطه‌گذاری آن در نواحی سردتر می‌شود؛ لذا بررسی تاثیر دما بر پارامترهای جریان دوفازی ضروری است. همچنین افزایش فشار گازهای ورودی به پیل سوختی از یک طرف باعث کاهش اندازه پیل سوختی به ازای یک قدرت معین شده و از طرف دیگر باعث افزایش حلالیت اکسیژن در آب به خصوص در کاتالیست کاتند می‌شود. لذا افزایش فشار باعث افزایش غلظت اکسیژن در محل‌های واکنش و افزایش کارایی پیل سوختی می‌شود. از طرف دیگر وجود افزایش فشار کاتند نسبت به آند باعث برگشت آب تولیدی از کاتند به آند شده و محتوای آب غشاء افزایش می‌یابد که این با کاهش افت اهمی و افزایش کارایی پیل سوختی همراه است؛ لذا بررسی وجود اختلاف فشار در کاتالیست‌ها بر عملکرد پیل سوختی ضرورت دارد؛ لذا مدل ارائه شده دوفازی، غیر هم‌دما و غیر هم‌فشار است.

با توجه به چالش‌های پیش روی توسعه پیل‌های سوختی پلیمری، مدل‌سازی آن‌ها جهت افزایش کارایی و کاهش هزینه‌های تولید ضروری است. مدل‌های اولیه مدل‌هایی تک‌فازند که در آن‌ها آب مایع از منفذهای ریز آب گریز نشده الکتروودها عبور می‌کنند و گاز مرتبط از منفذهای بزرگ‌تر آب گریز شده آن انتقال می‌یابند بدون اینکه با یکدیگر تماس داشته و جرمی مبادله کنند. مدل‌های برناردی و وربگ [5] یکبعدی و هم‌دما، مدل رو و لی [6]، مدل جلیلی و لو [7] یکبعدی و غیر هم‌دما و مدل افساری و جزایری [8] دوبعدی و غیر هم‌دما هستند. این مدل‌ها هرچند اطلاعات ارزشمندی در مورد عملکرد پیل‌های سوختی پلیمری ارائه می‌کنند ولی تک‌فازند، لذا نمی‌توانند عملکرد پیل‌های سوختی پلیمری را به خصوص در چگالی جریان‌های بالا که جریان دوفازی است دقیق پیش‌بینی کنند. در چگالی جریان‌های بالا، وجود آب مایع در منفذهای الکتروودها باعث افزایش افت انتقال جرم و افت فعال‌سازی می‌شود؛ لذا کارایی پیل سوختی به شدت متأثر از دوفازی بودن جریان است.

در دهه اخیر، مدل‌های دوفازی مختلفی ارائه شده است که هر کدام جنبه‌های مختلفی از پیل‌های سوختی را مدل‌سازی کرده‌اند. مدل‌های مورد بحث اطلاعات ارزشمندی در مورد مدل‌سازی دوفازی ارائه کرده‌اند ولی ملاک قضاآت در این مقاله در نظر گرفتن اثر تماس و تبادل جرم بین دوفاز

که در رابطه ۱،  $\rho_g$  چگالی مخلوط گاز،  $U_g$  سرعت ظاهری مخلوط گاز و  $Y_{O_2}$  کسر جرمی اکسیژن است. همچنین  $D_{eff}^{O_2}$  مقدار اشباع است که بیانگر کسری از حجم حفره‌های لایه نفوذی گاز است که توسط آب اشغال شده است. ضریب تخلخل الکتروود است که به صورت نسبت حجم حفره‌ها به حجم الکتروود تعریف می‌شود. ضریب نفوذ موثر گاز اکسیژن در مخلوط گاز است که برای محیط‌های متخلخل توسط رابطه بریگمن اصلاح شده است [16]:

$$D_{eff}^{O_2} = D_{mix}^{O_2}(\varepsilon)^{1.5} \quad (2)$$

جریان در لایه نفوذی گاز کاتند دوفازی است؛ لذا بین آب مایع و مخلوط گاز تماس و تبادل جرم وجود دارد. بنابراین بر خلاف اکسیژن، شار جرمی آب مایع و بخار آب در طول لایه نفوذی گاز کاتند ثابت نیست. تغییرات شار بخار آب و آب مایع به ترتیب از روابط ۳ و ۴ محاسبه می‌شوند:

$$\frac{d}{dz} \left( \rho_g U_g Y_{H_2O} - \varepsilon \rho_g (1-s) D_{eff}^{H_2O} \frac{dY_{H_2O}}{dz} \right) = -\dot{m}_{H_2O} \quad (3)$$

$$\frac{d}{dz} (\rho_l U_l) = \dot{m}_{H_2O} \quad (4)$$

که در روابط فوق،  $\dot{m}_{H_2O}$  نشان دهنده نرخ تبدیل بخار آب به آب مایع بر واحد حجم است. در رابطه ۴،  $\rho_l$  چگالی آب و  $U_l$  سرعت ظاهری آب مایع در محیط متخلخل است.

اگر کسر مولی بخار آب از کسر مولی آن در حالت اشباع بیشتر شود میان واقع می‌شود که شار آن می‌تواند از رابطه ۵ محاسبه شود [16]:

$$\dot{m}_{H_2O} = k_{cond} \varepsilon (1-s) \frac{M_{H_2O} P_g}{RT} (X_{H_2O} - X_{H_2O}^{sat}) \quad (5)$$

همچنین وقتی که کسر مولی بخار آب از کسر مولی آن در حالت اشباع کمتر شود، تبخیر واقع می‌شود که شار آن می‌تواند از رابطه ۶ محاسبه شود [16]:

$$\dot{m}_{H_2O} = k_{vap} \varepsilon s \rho_L P_g (X_{H_2O} - X_{H_2O}^{sat}) \quad (6)$$

در روابط ۵ و ۶  $X_{H_2O}^{sat}$  کسر مولی بخار آب،  $X_{H_2O}$  کسر مولی بخار آب در حالت اشباع،  $k_{cond}$  ثابت میان بخار آب،  $k_{vap}$  ثابت تبخیر آب،  $P_g$  فشار مخلوط گاز و  $R$  ثابت جهانی گازها است.

گاز نیتروژن در لایه کاتالیست کاتند مصرف نمی‌شود؛ لذا شار خالص آن در لایه نفوذی گاز کاتند صفر است:

$$N_{N_2} = 0 \quad (7)$$

در جریان دوفازی، بخشی از منفذ‌های الکتروود کاتند توسط آب اشغال می‌شود و سطح موثر انتقال جرم کاهش می‌یابد؛ لذا لازم است رابطه دارسی برای محاسبه سرعت ظاهری آب و بخار آب در لایه نفوذی گاز کاتند توسط کمیت اشباع ۵ اصلاح شود [16]:

$$U_l = \frac{-k_{abs} s^3}{\mu_l} \frac{dP_l}{dz} \quad (8)$$

$$U_g = \frac{-k_{abs} (1-s)^3}{\mu_g} \frac{dP_g}{dz} \quad (9)$$

برای محاسبه سرعت ظاهری آب مایع، ابتدا لازم است توزیع فشار آب مایع،  $P_l$  در لایه نفوذی گاز محاسبه شود. در لایه‌های نفوذی گاز شعاع حفره‌ها ناچیز است؛ لذا تأثیر فشار موبینگی قابل توجه است. فشار موبینگی به اختلاف فشار بین دو فاز مایع و گاز در مسیرهایی با قطر ناچیز گفته

اهمیت مقدار دقیق  $\alpha$  روی محتوی آب غشاء و افت اهمی با مدل‌سازی دیگر اجزای پیل سوختی مقدار نسبتاً دقیقی برای آن محاسبه کردند ولی عیب این مدل، هم‌دما و همفشار بودن آن است.

همان‌طور که اشاره شد، وجود واکنش الکتروشیمیایی در لایه کاتالیست وجود افتهای فعال‌سازی، اهمی و تغییر فاز باعث تولید حرارت در پیل سوختی می‌شود. مجموعه این عوامل باعث ایجاد گردایان دما در پیل سوختی شده و باعث تغییر پارامترهای جریان دوفازی می‌شود؛ لذا مدل‌سازی دوفازی و غیر هم‌دما ضرورت دارد. بر این اساس، شی و همکاران [17] در مدل دوفازی، غیر هم‌دما و یکبعدی با در نظر گرفتن اثر تماس بین دو فاز و معروفی پارامتر اشباع  $\alpha$ ، منحنی تغییر فشار موبینگی را در طول لایه نفوذی گاز کاتند ترسیم کردند. اما این منحنی بدون در نظر گرفتن تبادل جرم بین دو فاز، نمی‌تواند دقیق باشد. سانگ و همکاران [18] در مدل‌سازی دوفازی و غیر هم‌دما علاوه بر اثر تماس، اثر تبادل جرم بین دو فاز و فشار کاتال‌های گاز بر عملکرد جریان دوفازی بررسی نشده است. صدوqi و همکاران [19] مدلی دو بعدی و غیر هم‌دما از پیل سوختی ارائه کردند. در مدل‌سازی که توسط نرم افزار فلوئنت انجام شده است لایه‌های نفوذی گاز کاتند و آند و غشاء مدل‌سازی شده است. در این مدل‌سازی علاوه بر بررسی تأثیر پارامترهای هندسی بر توان خروجی پیل سوختی، شرایط کاری بهینه را برای پیل سوختی مورد مطالعه ارائه کردند.

در مقاله حاضر، جریان دوفازی غیر هم‌دما در لایه نفوذی گاز کاتند پیل سوختی مدل‌سازی شده است. در این مدل‌سازی هر دو اثر تماس و تبادل جرم در جریان دوفازی لایه نفوذی گاز کاتند در نظر گرفته شده و اثر هر کدام روی عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. همچنین جهت محاسبه نسبتاً دقیق پارامتر  $\alpha$  سایر اجزای پیل سوختی نیز مدل‌سازی شده است. علاوه بر تأثیر دما روی پارامترهای جریان دوفازی، اثر فشار در کاتال‌های آند و کاتند بر عملکرد جریان دوفازی و منحنی عملکرد پیل سوختی مورد بررسی قرار گرفته است.

## 2- مفروضات و معادلات حاکم

مدل کنونی مدلی یکبعدی، پایا، غیر هم‌دما و غیر همفشار است که در آن هر دو اثر تبادل جرم و تماس بین دو فاز در نظر گرفته شده است. گازها ایده‌آل و ساختار لایه نفوذی گاز یکنواخت و همگن است. جریان گاز تراکم ناپذیر است. لایه‌های کاتالیست به صورت سطح مشترک فرض شده است که در این صورت واکنش‌های الکتروشیمیایی در مرز غشاء و لایه‌های کاتالیست واقع می‌شوند. به دلیل عدم تولید آب در کاتالیست آند و جهت جریان آب (از آند به طرف کاتند) در محدوده چگالی جریان عملی، جریان در لایه نفوذی گاز آند تک‌فاز فرض شده است. معادلات حاکم شامل معادلات بقای جرم، ممنتوم و انرژی و معادلات کمکی است که برای جریان در لایه‌های نفوذی گاز کاتند و آند و غشاء پلیمری ارائه می‌شود.

### 2-1- معادلات بقای در لایه نفوذی گاز کاتند

اکسیژن در طول لایه نفوذی گاز کاتند مصرف نمی‌شود؛ لذا شار مولی آن ثابت بوده و تغییرات آن در طول لایه نفوذی گاز صفر است [16]:

$$\frac{d}{dz} \left( \rho_g U_g Y_{O_2} - \varepsilon \rho_g (1-s) D_{eff}^{O_2} \frac{dY_{O_2}}{dz} \right) = 0 \quad (1)$$

اختلاف فشار گازها در کانال‌های کاتد و آند عامل دیگری است که باعث انتقال آب در غشاء می‌شود که شار ناشی از آن توسط رابطه 18 محاسبه می‌شود:[20]

$$N_{H_2O,hyd} = -\lambda \frac{\rho_{dry} K_m}{M_m \mu_l} \frac{dP_l}{dz} \quad (18)$$

بنابراین شار خالص آب در غشاء، ناشی از سه عامل فوق عبارتند از:

$$N_{H_2O,net} = n_{drag}^{sat} \frac{\lambda j}{22F} - \frac{\rho_{dry}}{M_m} D_\lambda(\lambda) \frac{d\lambda}{dz} - \lambda \frac{\rho_{dry} K_m}{M_m \mu_l} \frac{dP_l}{dz} \quad (19)$$

با انتخاب یک حجم کنترل و مشخص کردن فرایندهای انتقال انرژی، معادله بقای انرژی در غشاء به صورت زیر بیان می‌شود:

$$-k \frac{d^2T}{dz^2} + \frac{d}{dz} (N_{H_2O,net} h_{H_2O} M_{H_2O}) = \frac{j^2}{\sigma} \quad (20)$$

که در رابطه 20،  $M_{H_2O}$ ،  $h_{H_2O}$ ،  $k$  و  $\sigma$  به ترتیب ضریب هدایت حرارتی نفیون خشک، انتالپی آب مایع، جرم مولکولی آب و قابلیت هدایت یونی غشاء است. قابلیت هدایت یونی غشاء وابسته به دمای  $T$  و محتوای آب  $\lambda$  است که از رابطه 21 محاسبه می‌شود:[20]

$$\sigma = (0.005193 \lambda - 0.00326) \exp \left[ \frac{1}{303} \left( \frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (21)$$

### 2-3- معادلات بقاء در لایه نفوذی گاز آند

شار هیدروژن و بخار آب در لایه نفوذی گاز آند، ناشی از دو پدیده جابجایی و نفوذ است. این گونه‌ها در طول لایه نفوذی گاز آند مصرف نمی‌شوند؛ لذا شار چرمی آن‌ها ثابت و تعییرات آن در طول لایه نفوذی گاز آند صفر است:[21]

$$\frac{d}{dz} \left( \rho_g U_g Y_{H_2O} - \varepsilon \rho_g D_{eff}^{H_2O} \frac{dY_{H_2O}}{dz} \right) = 0 \quad (22)$$

$$\frac{d}{dz} \left( \rho_g U_g Y_{H_2} - \varepsilon \rho_g D_{eff}^{H_2} \frac{dY_{H_2}}{dz} \right) = 0 \quad (23)$$

برای محاسبه سرعت ظاهری مخلوط گاز در لایه نفوذی گاز آند از رابطه دارسی استفاده می‌شود.

مشابه کاتد، با انتخاب یک حجم کنترل و مشخص کردن فرایندهای انتقال انرژی، معادله بقای انرژی در لایه نفوذی گاز آند به دست می‌آید.

$$\frac{d}{dz} \left[ -(\varepsilon k_g + (1 - \varepsilon) k_s) \frac{dT}{dz} \right] + [\rho_g U_g c_g] \frac{dT}{dz} = \dot{q} \quad (24)$$

### 2-4- محاسبه افت‌های سه گانه

برای محاسبه افت فعال‌سازی از رابطه 25 استفاده شده است. این رابطه با ساده‌سازی معادله بالتر- ولمر به دست می‌آید:[21]

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha n F} \ln \left( \frac{j c_R^{*0}}{(1-s)^8 j_0 c_R^*} \right) \quad (25)$$

در رابطه 25،  $c_R^{*0}$  غلظت واکنش‌گرهای در محل واکنش و در شرایطی است که  $j$  در آن محاسبه شده است.

برای تعیین افت غلظتی از رابطه 26 استفاده شده است:[21]:

$$\eta_{conc} = \frac{RT}{nF} \ln \left( \frac{c_R^0}{c_R^*} \right) \quad (26)$$

برای آن که بتوان افت اهمی در غشاء را محاسبه کرد ابتدا لازم است

می‌شود:

$$P_c = P_g - P_l \quad (10)$$

در جریان دوفازی در محیط‌های متخلخل، از رابطه لورت برای محاسبه فشار مویننگی استفاده می‌شود [9]:

$$P_c = \delta \cos \theta_c \left( \frac{\varepsilon}{K_{abs}} \right)^{0.5} j(s) \quad (11)$$

که در رابطه 11،  $\theta_c$  زاویه تماس و  $\delta$  کشش سطحی است. کشش سطحی تابع دما است که وابستگی آن به صورت رابطه 12 بیان می‌شود [18]:

$$\delta = -1.78 \times 10^{-4} \times T + 0.1214 \quad (12)$$

در رابطه 11،  $j$  وابسته به اشباع است که رابطه آن برای سطوح آبدوست و آب‌گریز متفاوت است. برای سطوح آبدوست ( $\theta_c < 90^\circ$ )،  $j$  از رابطه 13 محاسبه می‌شود [17]:

$$j(s) = 1.417(1-s) - 2.210(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3 \quad (13)$$

در حالی که برای سطوح آب‌گریز ( $\theta_c > 90^\circ$ ) که مورد بحث مقاله حاضر است،  $j$  از رابطه 14 محاسبه می‌شود [17].

$$j(s) = 1.417s - 2.210s^2 + 1.263s^3 \quad (14)$$

با انتخاب یک حجم کنترل و تعیین فرایندهای انتقال انرژی، معادله بقای انرژی برای لایه نفوذی گاز کاند به صورت رابطه 15 بیان می‌شود:

$$\frac{d}{dz} \left[ -(s \varepsilon k_l + (1-s) \varepsilon k_g + (1-\varepsilon) (k_s) \frac{dT}{dz} \right] + [\rho_l U_l c_l + \rho_g U_g c_g] \frac{dT}{dz} = h_{vap} \dot{m}_{H_2O} + \dot{q} \quad (15)$$

در رابطه 15،  $k_l$ ،  $k_g$  و  $k_s$  به ترتیب ضرایب هدایت حرارتی فازهای گاز، مایع و جامد،  $c_l$  و  $c_g$  به ترتیب ظرفیت گرمای ویژه فازهای گاز و آب مایع،  $h_{vap}$  انتالپی تبخیر و  $\dot{q}$  چشممه حرارت ناشی از مقاومت‌های اهمی هستند.

### 2-2- معادلات بقاء در غشاء پلیمری

جهت استفاده از شرط مرزی دقیق در مرز لایه نفوذی گاز کاتد و غشاء، لازم است معادلات حاکم بر غشاء و لایه نفوذی گاز آند نیز حل شوند. یون‌های پروتون حین عبور از غشاء، تعدادی مولکول آب را از آند به کاتد انتقال می‌دهند (پدیده الکترواسموتیک) که شار آن برابر است با [20]:

$$N_{H_2O,E} = n_{drag}^{sat} \frac{\lambda j}{22F} \quad (16)$$

که در رابطه 16،  $\lambda$  محتوای آب غشاء است که در طول آن متغیر است،  $j$  چگالی جریان و  $F$  عدد فارادی است.

انتقال آب توسط پروتون‌ها و موقع واقنش الکتروشیمیایی در کاتالیست کاتد، باعث افزایش غلظت آب در غشاء سمت کاتد می‌شود. اختلاف غلظت آب موجود در دو سمت غشاء، باعث برگشت آب از کاتد به آند می‌شود که به آن نفوذ معکوس می‌گویند. شار مولی آب، ناشی از نفوذ معکوس از رابطه 17 محاسبه می‌شود [20]:

$$N_{H_2O,backdiff} = \frac{-\rho_{dry}}{M_m} D_\lambda(\lambda) \frac{d\lambda}{dz} \quad (17)$$

در رابطه 17،  $\rho_{dry}$  چگالی نفیون خشک،  $M_m$  جرم مولکولی غشاء و  $D_\lambda(\lambda)$  ضریب نفوذ آب در غشاء است که تابعی از محتوای آب در غشاء است.

علاوه بر دو عامل عبور پروتون‌ها و نفوذ معکوس روی انتقال آب غشاء،

جدول 1 محاسبه تغییرات عدد  $\alpha$  با تغییر درجه حرارت

خطا (%)	$\alpha$	دما (کلوین)
0	1/278	333
0/9	1/290	338
1/8	1/301	343
2/4	1/309	348
2/8	1/314	353

تعیین شود؛ لذا با نسبت دادن حدس اولیه به آن، شرایط مرزی در سمت کاتند تکمیل می‌شود، صحت این حدس با محاسبه درجه حرارت در فصل مشترک کانال آند و لایه نفوذی گاز آند مشخص می‌شود.  
در شکل 1 فلوچارت حل عددی جریان در پیل سوختی ترسیم شده است. برای محاسبه دقیق  $\alpha$  فلوچارت دیگر وجود دارد که در مرجع [21] آورده شده است. برای حل معادلات حاکم بر اجزای پیل سوختی از روش تفاضل محدود استفاده شده است. مشتقات موجود در معادلات به روش تیلور پیش روی مرتبه اول و انتگرال‌ها با روش مجموع حاصل ضرب عبارت داخل انتگرال در گام مکانی به یک کد عددی در زبان فرترن تبدیل شده است.

### 3- اعتبار سنجی

در جدول 2 مقادیر کمیت‌های مورد استفاده در این مدل‌سازی، در حالت پایه آورده شده است. این مقادیر از مرجع [18] گرفته شده است.  
جهت اعتبارسنجی حل عددی، مطابق شکل 2 منحنی عملکرد پیل سوختی در تحقیق حاضر با داده‌های تجربی موجود در مرجع [22] مقایسه شده است که نتایج از دقت قابل قبولی برخوردار است. در این حالت، حداقل خطای ۳/۱٪ است. با کم کردن مجموع افت‌های سه گانه از ولتاژ ترمودینامیکی پیل سوختی، ولتاژ خروجی آن بدست می‌آید.  
علاوه بر این، در شکل 3 توزیع درجه حرارت در لایه نفوذی گاز کاتند با داده‌های موجود در مرجع [18] مقایسه شده است که از دقت خوبی برخودار است.

### 3-3- استقلال حل از تعداد گره شبکه

در شکل 4، تاثیر تعداد گره‌های شبکه بر منحنی توزیع اشباع در طول لایه نفوذی گاز کاتند نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش تعداد گره‌ها، وابستگی حل به تعداد گره‌های شبکه کمتر و کمتر

جدول 2 مقادیر پایه

مقدار	عنوان
333	دمای گازهای ورودی (K)
1	(atm)
300	ضخامت الکتروودها ( $\mu\text{m}$ )
175	ضخامت غشاء ( $\mu\text{m}$ )
0/4	ضریب تخلخل
75	رطوبت نسبی ورودی به آند (%)

مقاومت اهمی در برابر عبور پروتون‌ها در غشاء محاسبه شود. مقاومت اهمی در غشاء از رابطه 27 محاسبه می‌شود [21]:

$$R_{ohmic} = \int_0^{t_m} \frac{dz}{\sigma(\lambda(z))} \quad (27)$$

که با ضرب کردن چگالی جریان در مقاومت اهمی در غشاء، افت اهمی نیز محاسبه می‌شود.

### 3- روش حل عددی و اعتبار سنجی

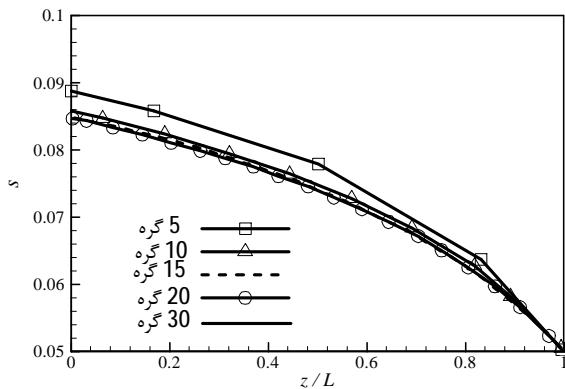
#### 3-1- شرایط مرزی و روش حل

هدف اصلی در این مقاله، مدل‌سازی جریان دوفازی غیر هم‌دما و غیر هم‌فشار در لایه نفوذی گاز کاتند پیل سوختی پلیمری است؛ اما برای تعیین دقیق میزان آب وارد شده به این لایه و استفاده از شرایط مرزی صحیح‌تر، دیگر اجزای پیل سوختی (غشاء و لایه نفوذی گاز آند) نیز مدل‌سازی شده‌اند. به دلیل عدم تولید آب در لایه کاتالیست آند و جهت جریان آب در محدوده چگالی جریان‌های عملی، جریان در لایه نفوذی گاز آند، تک‌فاز فرض شده است. با توجه به دامنه حل، شرایط مرزی فقط در فصل مشترک دو کانال و لایه‌های نفوذی گاز کاتند و آند اعمال شده است تا شرایط مرزی دقیق‌تری در فصل مشترک لایه نفوذی گاز کاتند و غشاء، جهت مدل‌سازی جریان دو فازی لایه نفوذی گاز کاتند، وجود داشته باشد.

دما در مرز کانال و لایه نفوذی گاز کاتند، 333 کلوین در نظر گرفته شده است. به منظور بررسی تاثیر فشار بر عملکرد پیل سوختی، به فشار مخلوط گاز در مرز کانال و لایه نفوذی گاز آند و کاتند چهار مقدار ۰/۵، ۱، ۳ و ۵ اتمسفر نسبت داده شده است. اطلاع از مقدار دقیق اشباع در فصل مشترک کانال و لایه نفوذی گاز کاتند مستلزم مدل‌سازی جریان در کانال کاتند است؛ اما با توجه به این که در تحقیق حاضر، جریان در کانال کاتند گاز مدل نشده است؛ لذا به اشباع در این مرز مقدار فرضی ۰/۰۵ نسبت داده شده است. به رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتند دو مقدار ۸۵٪ و ۱۰۰٪ نسبت داده شده تا رفتار پیل سوختی در دو حالت وقوع میان و تبیخ بررسی شود.

با توجه به این که در حل دائم، شار آب عبوری از غشاء ثابت و وابسته به  $\alpha$  است، لذا با در نظر گرفتن مقداری حدسی برای  $\alpha$ ، می‌توان جریان در غشاء را حل کرده و صحت این حدس را با محتوای آب  $\lambda$  در مرز کاتند و غشاء ارزیابی کرد. اما برای محاسبه محتوای آب در این مرز لازم است که جریان دوفازی در کاتند حل شود. از طرفی حل جریان در کاتند، جز با در نظر گرفتن دو حدس اولیه برای شار بخار آب و گرadiان دما میسر نیست. با در نظر گرفتن مقدار حدسی برای  $\alpha$  تعداد این حدس‌ها به سه افزایش می‌یابد و بدیهی است که یافتن سه حدس اولیه درست به طور همزمان کار بسیار دشواری است.

در جدول 1 مقدار  $\alpha$  از حل هم‌دما در پنج دمای کاری محاسبه و خطای آن نسبت به کمترین مقدار  $\alpha$  محاسبه شده است. مطابق این جدول مقدار خطای ناچیز است؛ لذا می‌توان  $\alpha$  را در یک حل عددی هم‌دما محاسبه کرده و از آن در حل عددی غیر هم‌دما استفاده کرد که در این صورت تعداد حدس اولیه به دو کاهش می‌یابد. شار مولی بخار آب در فصل مشترک کانال و لایه نفوذی کاتند مشخص نیست؛ لذا لازم است که مقداری به عنوان حدس اولیه به آن نسبت داده شود. صحت این حدس با مقدار شار مولی آب در فصل مشترک غشاء و لایه نفوذی گاز کاتند مشخص می‌شود. علاوه بر این، لازم است که گرadiان دما نیز در فصل مشترک کانال و لایه نفوذی گاز کاتند



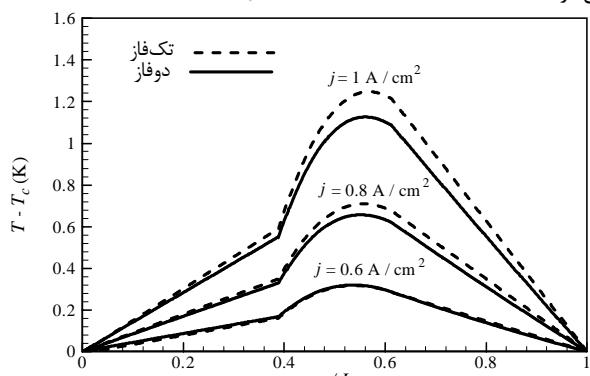
شکل 4 نمودار توزیع اشباع در لایه نفوذی گاز کاتد به ازای تعداد گره مختلف می‌شود به طوری که برای تعداد 20 و 30 گره، جوابها بر هم منطبق هستند؛ لذا از شبکه‌ای با 20 گره در کاتد و 52 گره در کل دامنه حل استفاده شده است.

#### 4- نتایج

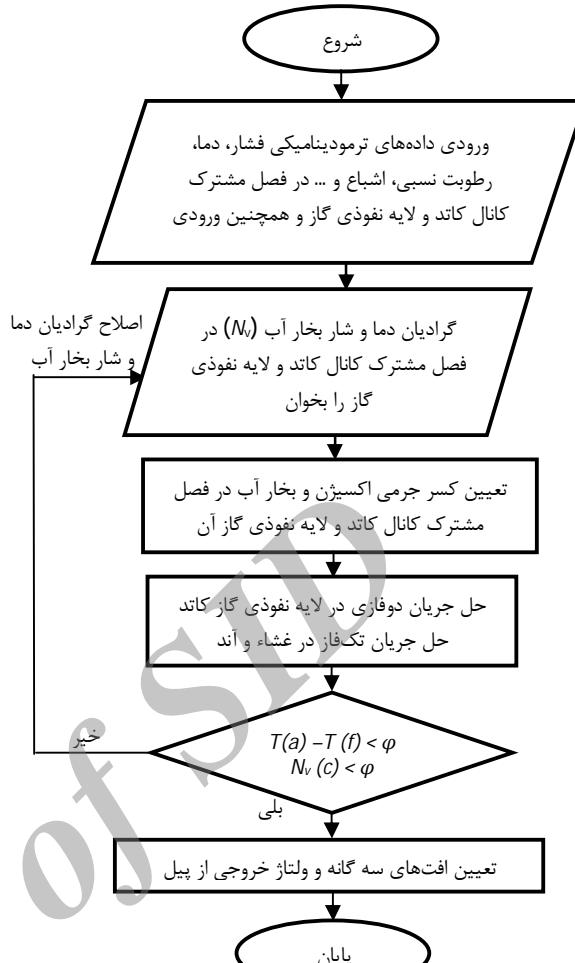
نتایج به چند قسمت تقسیم شده است. ابتدا جریان تک‌فاز و دوفاز مقایسه شده‌اند تا بر ضرورت تحلیل جریان دوفازی تأکید شود سپس تاثیر در نظر گرفتن تماس بین دو فاز و انتقال جرم بین آن دو بررسی شده است تا اهمیت نسبی این دو مشخص شود. در ادامه اثر توزیع درجه حرارت روی مدل جریان دوفازی مورد بررسی قرار گرفته و با جریان دوفازی هم‌دما مقایسه شده است تا بر تاثیر تغییرات دما در طول پیل سوختی بر مدل‌سازی دوفازی تأکید شود و نهایتاً تاثیر اختلاف فشار در کانال‌های آند و کاتد بر عملکرد پیل سوختی بررسی شده است.

#### 4-1- مقایسه جریان تک‌فاز با دوفاز

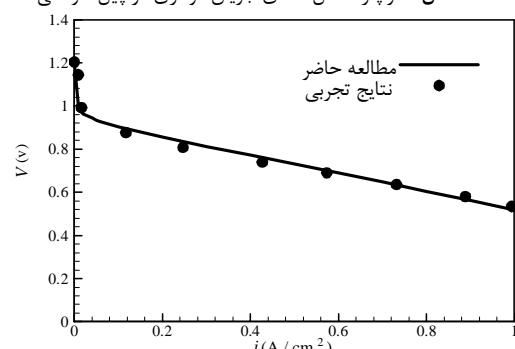
در شکل 5 منحنی تغییرات درجه حرارت در طول پیل سوختی برای دو جریان دوفازی و تک‌فاز نشان داده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود در چگالی جریان‌های کم، توزیع درجه حرارت تک‌فاز و دوفاز سیار به هم نزدیکند ولی با افزایش چگالی جریان، اختلاف آن‌ها بیشتر و بیشتر می‌شود. چنانچه گازهای ورودی به پیل سوختی در حالت اشباع نباشند امکان تبخیر آب در طول کاتد وجود دارد و تبخیر آب مانع از افزایش دما در پیل سوختی نسبت به حالت تک‌فاز می‌شود. مطابق شکل درجه حرارت در جریان تک‌فاز بیشتر از جریان دوفازی است چرا که رطوبت نسبی در کاتال کاتد کمتر از حالت اشباع است و بخشی از گرما صرف تبخیر آب مایع می‌شود.



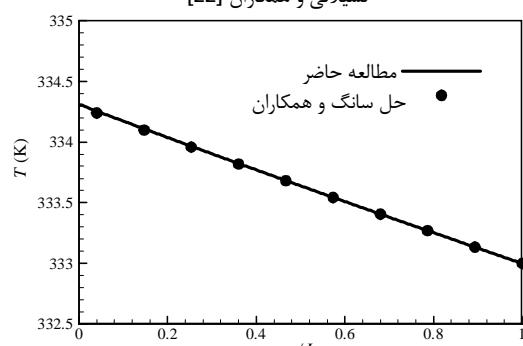
شکل 5 منحنی توزیع درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای چگالی جریان‌های مختلف در دو حالت تک‌فاز و دوفاز در رطوبت نسبی ورودی به کاتد 85٪



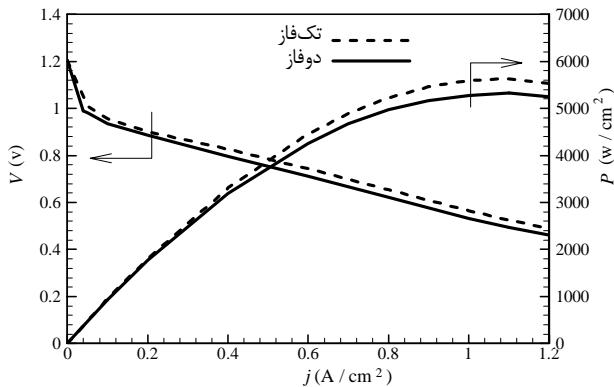
شکل 1 فلوچارت حل عددی جریان دوفازی در پیل سوختی



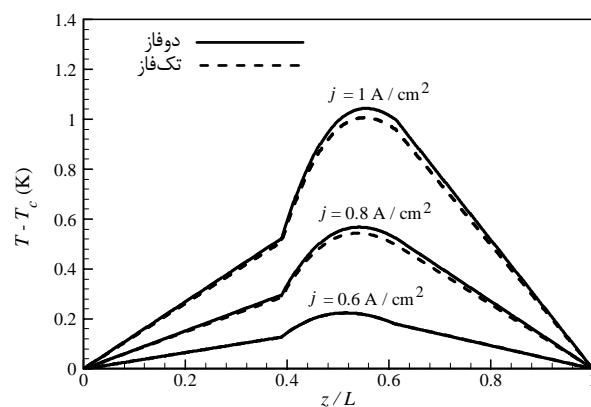
شکل 2 مقایسه منحنی عملکرد پیل سوختی تحقیق حاضر با داده‌های تجربی تسلیانی و همکاران [22]



شکل 3 مقایسه منحنی توزیع درجه حرارت در کاتال پیل سوختی تحقیق حاضر با داده‌های سانگ و همکاران [18]



شکل 8 مقایسه منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در دو حالت تکفاز و دوفاز در رطوبت نسبی 100% گازهای ورودی به کاتد



شکل 6 منحنی توزیع درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای چگالی جریان‌های مختلف در دو حالت تکفاز و دوفاز در رطوبت نسبی ورودی به کاتد 100%

#### 4-2-اثر تماس و انتقال جرم

در این قسمت از نتایج، منحنی‌های غلظت اکسیژن و غلظت بخار آب در طول لایه نفوذی گاز کاتد در دو حالت جریان تکفاز و جریان دوفاز ترسیم شده است. منحنی‌ها در حالت دوفاز با در نظر گرفتن فقط اثر تماس ( $m'' = 0$ )، در نظر گرفتن فقط اثر تبادل جرم بین دو فاز ( $s = 0$ ) و نهایتاً در نظر گرفتن هر دو اثر تماس و تبادل جرم ( $s, m'' \neq 0$ ) ترسیم شده‌اند تا اهمیت نسبی آن‌ها روی عملکرد پیل سوختی بهتر مشخص شود.

در شکل 9 تغییرات غلظت اکسیژن و غلظت بخار آب در طول لایه نفوذی گاز کاتد به ازای رطوبت نسبی 85% گازهای ورودی به کاتد نشان داده شده است. مطابق این شکل غلظت اکسیژن در لایه کاتالیست که محل وقوع واکنش الکتروشیمیایی است کمترین مقدار را دارد و با دور شدن از لایه کاتالیست مقدار آن افزایش می‌یابد. همچنین مشخص می‌شود غلظت بخار آب در لایه کاتالیست بیشترین مقدار را دارد. مطابق این شکل، غلظت اکسیژن در حالت تکفاز از حالت دوفازی است که این امر موجب افزایش افت فعال‌سازی و غلظتی می‌شود. اگردر مدل‌سازی دوفازی، فقط اثر تبخیر لحاظ شود غلظت اکسیژن بر مقدار آن در حالت تکفاز منطبق می‌شود زیرا در این حالت در حقیقت آب در منفذها وجود ندارد و دوفاز از مسیرهای متفاوتی جریان می‌یابند. اما وقتی که فقط اثر تماس لحاظ شود غلظت اکسیژن کمتر از مقدار آن در حالت تکفاز می‌شود. چنانچه هر دو اثر تماس و تبخیر با هم لحاظ شود مقدار غلظت اکسیژن کمتر از حالت‌های دیگر است. بنابراین اثر تماس اهمیت بیشتری نسبت به اثر تبادل جرم در جریان دوفازی دارد.

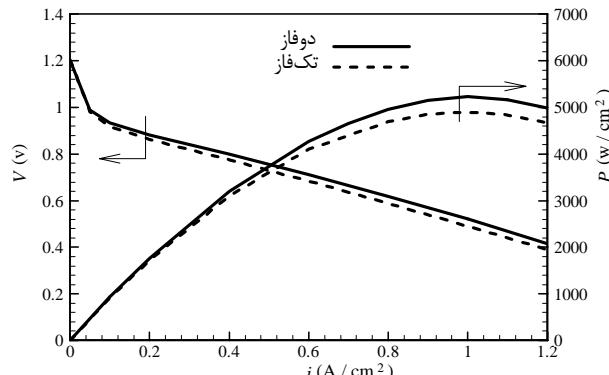
در شکل 10 تغییرات غلظت اکسیژن و غلظت بخار آب در طول لایه نفوذی گاز کاتد در رطوبت نسبی 100% گازهای ورودی به کاتد نشان داده شده است. مطابق شکل 10، غلظت بخار آب در لایه کاتالیست بیشترین مقدار را دارد زیرا محل وقوع واکنش الکتروشیمیایی است. در این حالت (میان)، بر خلاف حالت قبل (تبخیر)، غلظت اکسیژن در حالت تکفاز بر حالتی که فقط انتقال جرم در نظر گرفته شده است بر یکدیگر منطبق نیست؛ اما مانند حالت قبل همچنان اثر تماس اهمیت بیشتری نسبت به اثر تبادل جرم در جریان دوفازی دارد.

#### 4-3-اثر توزیع درجه حرارت

در شکل 11 منحنی تغییرات نرخ تبخیر آب در طول لایه نفوذی گاز در دو حالت هم‌دما و غیره‌م‌دما ترسیم شده است. مطابق این شکل، نرخ تبخیر

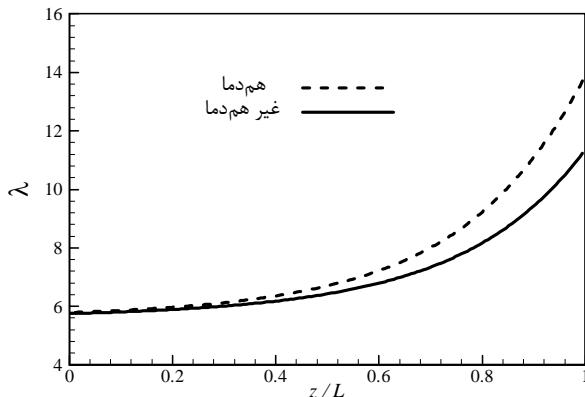
در شکل 6 منحنی تغییرات درجه حرارت در صورت وقوع میان نشان داده شده است. در چگالی جریان‌های کم، توزیع درجه حرارت جریان تکفاز و دوفاز بسیار به هم نزدیک‌نده ولي با افزایش چگالی جریان، اختلاف آن‌ها بیشتر و بیشتر می‌شود. بر خلاف منحنی قبل (تبخیر)، اختلاف این دو به دلیل تبدیل فاز بخار آب به آب مایع است که حرارت تولید می‌شود؛ لذا درجه حرارت در حالت تکفاز کمتر است. در نتیجه مقدار نسبی دما در جریان دوفاز و تکفاز وابسته به رطوبت نسبی کانال کاتد است.

در شکل 7 منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در دو حالت تکفاز و دوفاز در رطوبت نسبی 85% گازهای ورودی به کاتد ترسیم شده است. مطابق این شکل، چگالی قدرت و ولتاژ خروجی از پیل سوختی با فرض دوفازی بیشتر از تکفاز است که این خود لزوم مدل‌سازی دوفازی را آشکار می‌کند. با فرض جریان دوفازی، محتوای آب در غشاء بیشتر است که این کاهش افت اهمی را به همراه دارد، هرچند که غلظت اکسیژن در کاتالیست کاتد در جریان دوفازی نسبت به جریان تکفاز اندکی کمتر است. در صورتی که رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد 100% باشد ولتاژ خروجی پیل در حالت دوفازی کمتر از تکفاز است چرا که در این حالت، وقوع میان در الکتروود کاتد تاثیری روی محتوای آب غشاء ندارد؛ ولی در این حالت مقدار اشباع آب افزایش می‌یابد که این باعث کاهش غلظت اکسیژن در کاتالیست می‌شود که نتیجه آن کاهش ولتاژ خروجی است که در شکل 8 نشان داده شده است.

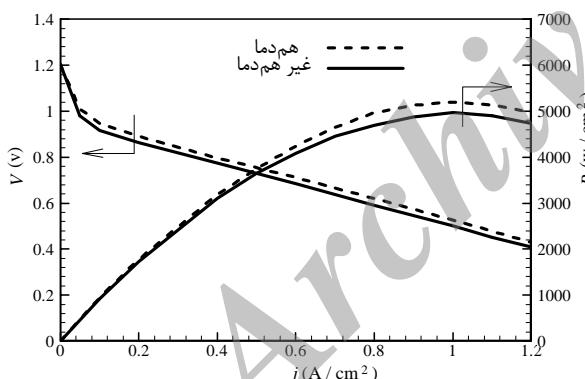


شکل 7 مقایسه منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در دو حالت تکفاز و دوفاز در رطوبت نسبی 85% گازهای ورودی به کاتد

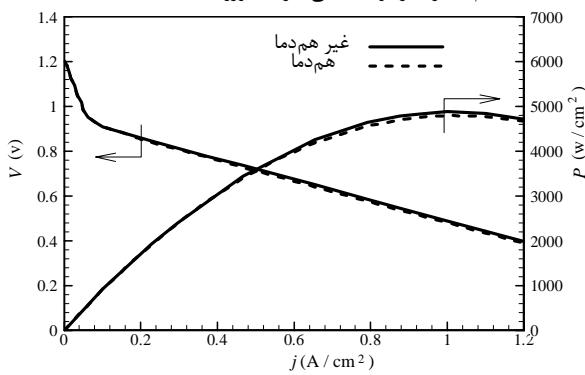
در شکل 13 منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در جریان دوفازی در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۸۵٪ ترسیم شده است. مطابق شکل ۱۳، در این حالت چگالی قدرت و لتأثر خروجی از پیل سوختی در حل هم‌دما بیشتر از غیر هم‌دما است که دلیل آن بالاتر بودن محتوای آب در غشاء پلیمری است. این نتیجه خود لزوم مدل‌سازی غیر هم‌دما را بیشتر آشکار می‌کند. در شکل ۱۴ منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در جریان دوفازی در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۱۰۰٪ ترسیم شده است. برخلاف حالت قبل، در این حالت چگالی قدرت و لتأثر خروجی از پیل سوختی در حل غیر هم‌دما بیشتر از حل هم‌دما است و این اختلاف نسبت به حالت قبل کمتر است.



شکل ۱۲ منحنی تغییرات محتوای آب در غشاء در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما در چگالی جریان  $1 \text{ A/cm}^2$



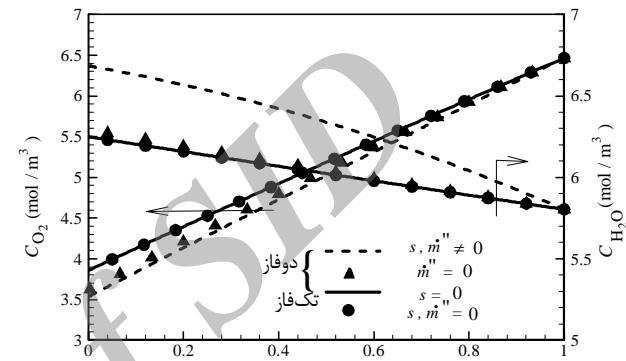
شکل ۱۳ منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۸۵٪



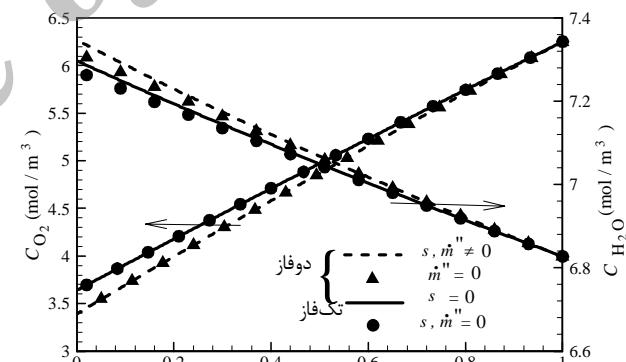
شکل ۱۴ منحنی عملکرد و چگالی قدرت پیل سوختی در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۱۰۰٪

آب در حالت غیر هم‌دما بیشتر از حالت هم‌دما است. در نظر گرفتن گرمای تولیدی در حل غیر هم‌دما، بخش بیشتری از آب موجود در کاتد پیل سوختی را تبخیر می‌کند. این موضوع به خصوص در نزدیک کاتال کاتد که دمای کمتری دارد و در آن میان واقع می‌شود محسوس‌تر است. تفاوت نرخ تبخیر آب در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما باعث تفاوت در کسر مولی بخار آب در طول لایه نفوذی کاتد پیل سوختی می‌شود.

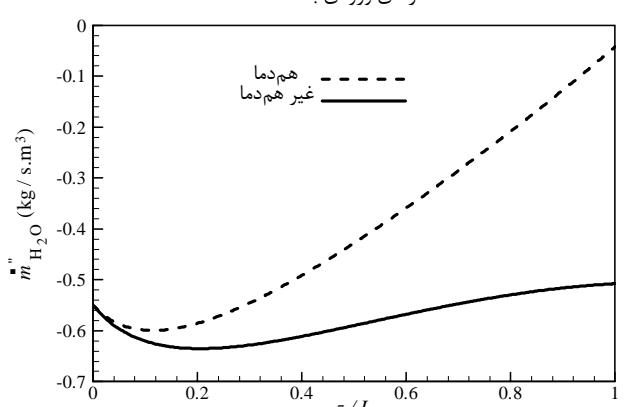
در شکل ۱۲ منحنی تغییرات محتوای آب در غشاء در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما ترسیم شده است. اولاً با دور شدن از آند مقدار محتوی آب غشاء برای دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما افزایش می‌یابد. ثانیاً مطابق این شکل به علت کمتر بودن رطوبت نسبی در مرز کاتد و غشاء، محتوای آب غشاء در حل هم‌دما بیشتر از حل غیر هم‌دما است.



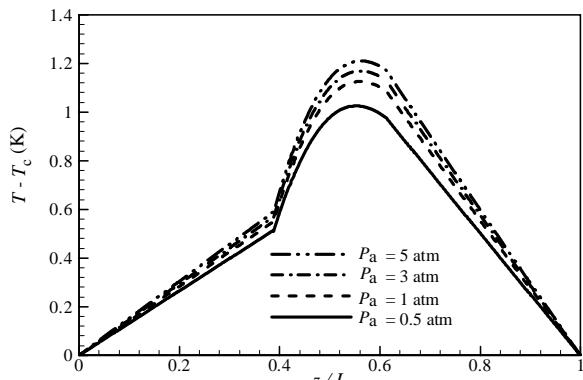
شکل ۹ منحنی تغییرات غلظت اکسیژن و بخار آب در کاتد برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۸۵٪



شکل ۱۰ منحنی تغییرات غلظت اکسیژن و بخار آب در کاتد برای رطوبت نسبی گازهای ورودی به کاتد ۱۰۰٪



شکل ۱۱ منحنی تغییرات نرخ تبخیر آب در طول لایه نفوذی گاز کاتد در دو حالت هم‌دما و غیر هم‌دما در چگالی جریان  $1 \text{ A/cm}^2$



شکل 17 منحنی توزیع درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای فشار گاز ورودی به آند متفاوت و در فشار کاتد ۰/۵ اتمسفر

### 5- نتیجه گیری و جمع بندی

- در مقاله حاضر، مدل‌سازی جریان دوفازی و غیر هم‌دما در پیل سوختی پلیمری انجام شده است. ارزیابی نسبتاً دقیقی از پارامتر «انجام شده و اثر تغییر فشار کانال‌های گاز نیز بر منحنی عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. نتایج نشان داده است که:
- برای مدل‌سازی دقیق جریان دوفازی، لازم است هر دو اثر تماس دوفاز و تبادل حرم بین آن‌ها در نظر گرفته شود.
- ولتاژ خروجی از پیل سوختی در حل هم‌دما بیشتر از مقدار واقعی آن است که این خود لزوم مدل‌سازی غیر هم‌دما را آشکار می‌کند.
- در چگالی جریان‌های کم، توزیع درجه حرارت تک‌فاز و دوفاز بسیار به هم نزدیک‌کنند ولی با افزایش چگالی جریان اختلاف آن‌ها بیشتر و بیشتر شده است. در صورت وقوع تبخیر در کاتد درجه حرارت در حالت تک‌فاز بیشتر از دوفاز است؛ ولی در صورت وقوع میان، درجه حرارت در حالت دوفاز بیشتر از تک‌فاز است.
- با افزایش فشار گاز در کاتد، محتوای آب غشاء بیشتر می‌شود که این باعث افت اهمی کمتر و به تبع آن کاهش درجه حرارت در پیل سوختی می‌شود. برخلاف کاتد، با افزایش فشار گاز در کاتال آند، درجه حرارت در طول پیل سوختی افزایش می‌یابد.

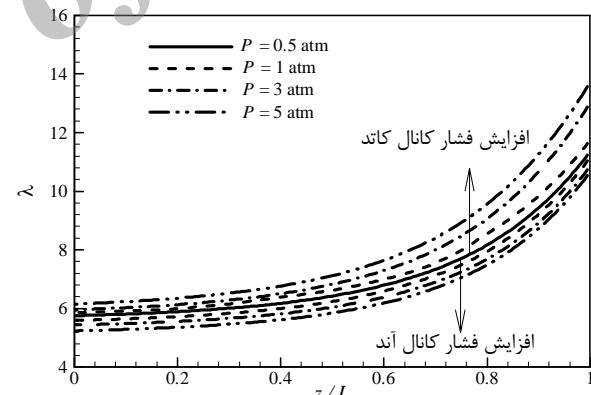
### 6- مراجع

- [1] H. Hassanzadeh, S. H. Mansouri, Efficiency of ideal fuel cell and carnot cycle from a fundamental perspective, *Journal of Power and Energy*, Vol. 219, pp. 245–254, 2005.
- [2] J. J. Baschuk, X. Li, Modelling of polymer electrolyte membrane fuel cells with variable degrees of water flooding, *Journal of Power Sources*, Vol. 86, pp. 181-196, 2000.
- [3] U. Pasaogullari, C. Y. Wang, Two-Phase Modeling and Flooding Prediction of Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 152, pp. 380-390, 2005.
- [4] D. M. Bernardi, M. W. Verbrugge, Mathematical Model Of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte, *Journal of AIChE*, Vol. 37, pp. 1151-1163, 1991.
- [5] D. M. Bernardi, M. W. Verbrugge, A mathematical model of the solid-polymer-electrolyte fuel cell, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 139, pp. 2477-2491, 1992.
- [6] A. Rowe, X. Li, Mathematical Modeling of proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 102, pp. 82–96, 2001.
- [7] N. Djilali, D. Lu, Influence of heat transfer on gas and water transport in fuel cells, *International Journal of Thermal Science*, Vol. 41, pp. 20-49, 2002.
- [8] E. Afshari, S. A. Jazayeri, Heat and Water Management in PEM Fuel Cell, *Journal of WSEAS Transactions on fluid mechanics*, Vol. 3, pp. 137-142, 2008.
- [9] U. Pasaogullari, C. Y. Wang, Liquid Water Transport in Gas Diffusion Layer of Polymer Electrolyte Fuel Cells, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 151, pp. 399-406, 2004.

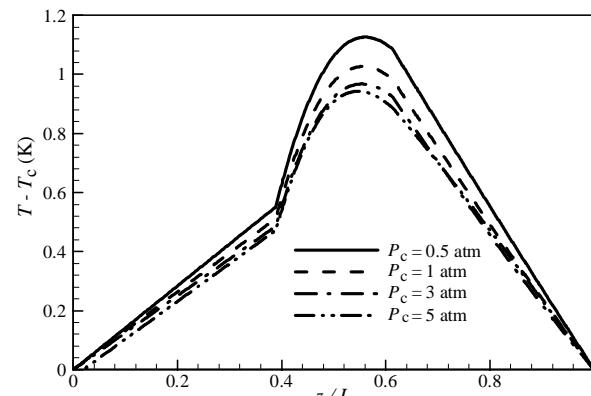
### 4-4- اثر فشار کانال‌ها

در شکل 15 منحنی تغییرات محتوای آب غشاء به ازای فشارهای مختلف کانال‌های آند و کاتال نشان داده است. مطابق این شکل، با افزایش فشار گاز در کاتال کاتند نسبت به آند، برگشت آب به غشاء بیشتر شده و به تبع آن محتوای آب غشاء افزایش می‌یابد. با افزایش محتوای آب، انتقال پروتون‌ها در غشاء پلیمری بهتر شده و به تبع آن افت اهمی کاهش می‌یابد. با کاهش افت اهمی در غشاء انتظار می‌رود که درجه حرارت در پیل سوختی کاهش می‌یابد. بر عکس، با افزایش فشار گاز در کاتال آند غلظت بخار آب همراه هیدروژن کاهش می‌یابد که به تبع آن محتوای آب در غشاء کاهش می‌یابد. در نتیجه افت اهمی افزایش می‌یابد و باعث می‌شود که درجه حرارت در پیل سوختی افزایش می‌یابد.

در شکل 16 منحنی تغییرات درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای فشارهای مختلف مخلوط گاز در کاتال کاتند نشان داده شده است. همان‌طور که در قسمت قبل بحث شد با افزایش فشار کاتال غلظت اکسیژن حل شده در کاتالیست کاتد و محتوای آب غشاء افزایش می‌یابند. افزایش محتوای آب باعث کاهش مقاومت اهی شده در نتیجه درجه حرارت در طول پیل سوختی کاهش می‌یابد. در شکل 17 منحنی تغییرات درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای فشارهای مختلف مخلوط گاز در کاتال آند نشان داده شده است. مطابق شکل 17 با افزایش فشار گاز در کاتال آند، درجه حرارت در طول پیل سوختی افزایش یافته است. با افزایش فشار گاز در کاتال آند، محتوای آب در غشاء کاهش داشته است، لذا با افزایش افت اهمی در غشاء درجه حرارت در پیل سوختی افزایش می‌یابد.



شکل 15 منحنی تغییرات محتوای آب غشاء به ازای فشار گاز ورودی به کاتد و آند متفاوت در چگالی جریان ۱ A/cm²



شکل 16 منحنی توزیع درجه حرارت در سراسر پیل سوختی به ازای فشار گاز ورودی به کاتد متفاوت و در فشار آند ۰/۵ اتمسفر

- [17] W. Shi, E. Kurihara, N. Oshima, Effects of capillary pressure on liquid water removal in the cathode gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 182, pp. 112-118, 2008.
- [18] D. Song, Q. Wang, Z. S. Liu, C. Huang, Transient analysis for the cathode gas diffusion layer of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 159, pp. 928-942, 2006.
- [19] A. H. Sadoughi, A. Ansaghi, M. J. Kermani, Performance Analysis of a Two phase Non-isothermal PEM fuel cell, in *15<sup>th</sup> annual conference of the CFD society of Canada*, Toronto, Ontario, Canada, 2007.
- [20] R. P. O'Hayre, S. W. Cha, W. G. Collela, F. B. Printz, *Fuel Cell Fundamentals*, pp. 111-158, New Jersey: Wiley, 2006.
- [21] S. H. Golkar, *Two Phase and Non-isothermal modeling and optimization of PEM Fuel cell*, M.Sc Thesis, Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, 2014. (In Persian)
- [22] E. A. Ticianelli, C. R. Derouin, A. Redondo, S. Srinivasan, Methods to Advance Technology of Proton Exchange Membrane Fuel Cells, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 135, pp. 2209-2214, 1988.
- [10] Z. Zhan, J. Xiao, D. Li, M. Pan, Y. Runzhang, Effects of porosity distribution variation on the liquid water flux through gas diffusion layers of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 160, pp. 1041-1048, 2006.
- [11] F. Chen, M. H. Chang, P. T. Hsieh, Two-phase transport in the cathode gas diffusion layer of PEM fuel cell with a gradient in porosity, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33, pp. 2525-2529, 2008.
- [12] U. Pasaoogullari, C. Y. Wang, Two-Phase transport and the role of microporous layer in polymer electrolyte fuel cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 49, pp. 4359-4369, 2004.
- [13] P. K. Das, X. Li, Z. S. Liu, Analysis of liquid water transport in cathode catalyst layer of PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35, pp. 2403-2416, 2010.
- [14] M. Vynnycky, On the modeling of two-phase flow in the cathode gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell, *Applied Mathematical and Computation*, Vol. 189, pp. 1560-1575, 2007.
- [15] L. You, H. Liu, A two-phase flow and transport model for the cathode of PEM fuel cells, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 45, pp. 2277-2287, 2002.
- [16] H. Hassanzadeh, A. Ferdowsara, M. Barzagary, Modeling of two phase flow in the cathode of gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cell, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 2, pp. 55-62, 2014. (In Persian)

Archive of SID