

مدل سازی سه بعدی نیم پیل کاتدی پیل سوختی غشای الکترولیتی پلیمری

پژوهش نفت

سال بیست و چهارم

شماره ۷۸

صفحه، ۱۱۶-۱۰۶ ۱۳۹۳

تاریخ دریافت مقاله: ۹۱/۳/۱۶

تاریخ پذیرش مقاله: ۹۱/۱۲/۲۰

محمد زردشتی زاده یزدی*، رامین کرمی و محمد ایازی

پردیس انرژی و محیط زیست، پژوهشکده انرژی، گروه بهینه سازی انرژی، پژوهشگاه صنعت نفت

چکیده

در این مقاله، مدل سه بعدی پیل سوختی غشای تبادل یونی بررسی شده است. این مدل برای نیم پیل کاتدی صورت گرفته که شامل کانال گازی کاتدی از نوع موازی، لایه نفوذ گازی کاتدی و غشای پلیمری می باشد. پدیده های مورد بررسی در این مقاله، انتقال جرم در لایه های نفوذ گازی، واکنش الکتروشیمیایی در لایه های کاتالیستی و انتقال بار در پیل سوختی می باشد. ضمناً در هندسه این مدل، شانه نیز لحاظ گردیده که سبب می شود پروفایل غلظت و در نتیجه توزیع بار با دقت بیشتری بررسی شود. معادلات حاکم جهت مدل سازی پیل سوختی با استفاده از نرم افزار فملمبر بر پایه روش المان محدود حل شده اند. این مدل سازی قادر به پیش گویی رفتار پیل سوختی تحت شرایط عملیاتی مختلف می باشد که به واسطه تحلیل نتایج آن، عملکرد پیل سوختی در شرایط مختلف عملیاتی و با مقادیر متفاوت جریان- ولتاژ بررسی گردید و در نهایت بهترین شرایط عملیاتی و نقطه کاری مناسب، حاصل شده است. وجه تمایز این مدل سازی، بررسی عملکرد پیل سوختی غشای تبادل یونی از طریق حل عددی سه بعدی نیم پیل کاتدی با در نظر گرفتن شانه می باشد، در حالی که کاتالیست به صورت تجمعات کروی فرض شده است.

واژه های کلیدی: پیل سوختی غشای تبادل یونی، تجمعات کروی، لایه نفوذ گازی، شانه، روش المان محدود

مقدمه

با پیشرفت علم ریاضیات که همگام با نوآوری های سریع در تکنولوژی رایانه می باشد، مدل سازی به عنوان ابزاری توانمند جهت پیش بینی فرآیندهای مختلف شناخته می شود. به دلیل پیچیدگی زیاد و معادلات پاره ای غیر خطی، تاکنون مدل های تحلیلی معدودی برای پیل سوختی به کار گرفته شده است. اسپرینگر و همکاران [۱] مدل سازی شامل دانسیته جریان، پتانسیل و غلظت اکسیژن در لایه کاتالیستی کاتد انجام دادند. در سال های بعد مدل سازی های متعددی با در نظر گرفتن لایه کاتالیستی به صورت گلوله هایی از کاتالیست کروی [۲]، مدل سازی شامل لایه کاتالیستی، غشای کانال گازی و لایه نفوذ گازی [۳] و مدل هموزن برای الکترو د متخلخل شامل کوپل گرادیان غلظت و پتانسیل با سرعت واکنش خطی [۴] انجام گرفت. علاوه بر موارد فوق، مدل سازی های عددی متنوعی نیز انجام شده است به عنوان نمونه منگ و ونگ [۵] مدل سه بعدی تک فاز و همدمما برای پیل سوختی با میدان جریان مارپیچ ارائه کردند.

*مسئول مکاتبات
آدرس الکترونیکی

mohamad.zardoshti@gmail.com

در برخی از مدل‌سازی‌ها از روش حجم محدود و در برخی موارد از روش المان محدود استفاده شده است [۵، ۶ و ۱۴].

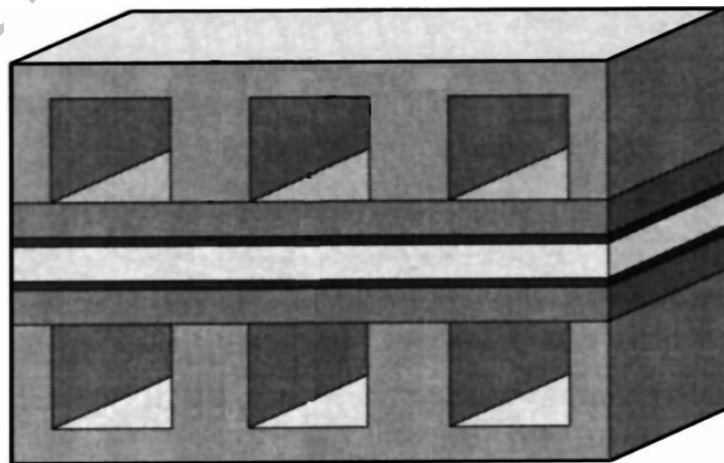
در این پژوهش، حل عددی مدل سه بعدی نیم پیل کاتدی انجام گرفته است. شرایط فیزیکی پیل سوختی به صورت هم‌دما و تک‌فازی می‌باشد و لایه کاتالیستی به صورت تجمعات کروی فرض شده است. کانال جریان به صورت موازی است که شانه آن نیز در مدل‌سازی لحاظ شده است. ضمناً حل عددی توسط نرم‌افزار فم‌لب^۱ و به روش المان محدود می‌باشد.

مدل‌سازی ریاضی پیل سوختی

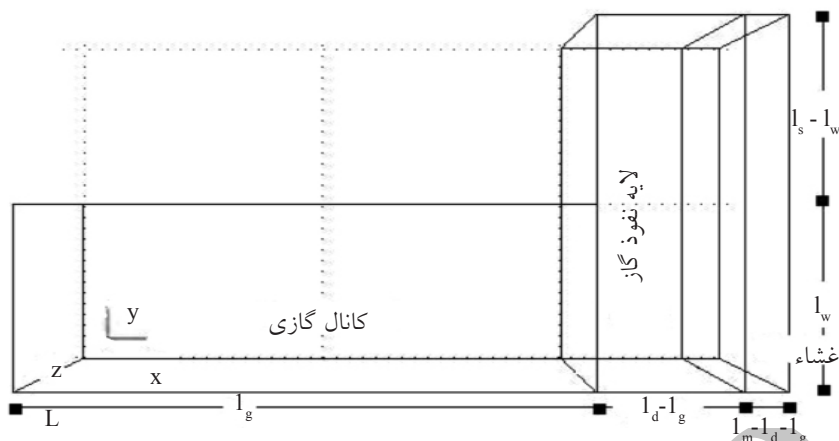
با توجه به پیچیدگی و پدیده‌های فراوانی که در فرآیند پیل سوختی درگیر هستند، ارائه یک شکل هندسی مناسب که بتواند به درستی بیان‌گر مشخصات و فعالیت پیل سوختی باشد، ضروری است. در شکل ۱، نمایی از پیل سوختی رسم شده است.

شکل ۲ المان انتخاب شده را نشان می‌دهد. به علت تقارن و با فرض یکسان بودن شرایط زوج کانال‌ها، می‌توان مطمئن بود که المان به درستی انتخاب شده است. در تحقیقات ثابت شده که عامل کنترل‌کننده در مدل‌سازی پیل سوختی در این شرایط تنها نیم پیل کاتدی می‌باشد و نتایج در این شرایط، انطباق قابل قبولی با داده‌های تجربی دارد [۷ و ۱۳].

جو و همکاران [۶] مدل سه بعدی دیگری ارائه نمودند که این مدل تک‌فازی با روش محاسباتی موازی حل می‌شود. در مدل‌سازی‌ها گاهی لایه کاتالیستی را به صورت ماکروهموژن در نظر می‌گیرند [۷ و ۸]. در این مدل فرض می‌شود که هر حجم کنترلی درون لایه کاتالیست شامل مخلوطی یکنواخت از پلاتین با پایه کربن و یونومر و فضای خالی می‌باشد. غلظت اکسیژن در فاز یونومر ثابت فرض شده و تغییرات غلظت اکسیژن از سطح تا مکان‌های فعال کاتالیستی نادیده گرفته می‌شود. در برخی موارد، لایه کاتالیستی را به صورت تجمعات کروی در نظر می‌گیرند [۷-۹]. در این حالت، اجزای کاتالیست به صورت تجمعاتی کروی در نظر گرفته می‌شود که هر تجمع در میان لایه‌ای یونومر قرار گرفته است. غلظت در یونومر تابع شعاع بوده و تجمعات با فضای خالی از یکدیگر جدا شده‌اند. همچنین پارامترهایی چون جزء حجمی کل حفرات (تخلخل)، توزیع اندازه حفرات، جزء حجمی یونومر، جزء حجمی پلاتین، ضخامت لایه و پیچش لایه مطرح می‌شود. در برخی مدل‌سازی‌ها مسمومیت کاتالیست را نیز در نظر می‌گیرند [۱۰ و ۱۱]. در ادامه دسته‌بندی مقالات و کارهای ارائه شده در این زمینه، می‌توان به مطالعات مربوط به چگونگی چینش و ساختار کانال‌گازی و طریقه مدل‌سازی آنها اشاره کرد [۱۲ و ۱۳]. در سال‌های اخیر با پیشرفت کامپیوترهای شخصی و همچنین بهبود روش حل عددی معادلات ریاضی، گرایش برای به‌کارگیری بسته‌های نرم‌افزاری جهت حل معادلات پیچیده رو به افزایش است.



شکل ۱- نمای ساده‌ای از پیل سوختی هیدروژنی [۱۴]



شکل ۲- موقعیت المان منتخب برای مدل سازی

می باشند.

مخلوط گاز به صورت مخلوط گاز ایده آل در نظر گرفته می شود. لازم به ذکر است که در اجزای پیل سوختی، آب در فاز مایع موجود نمی باشد و همچنین پدیده طغیان نیز صورت نمی گیرد. افت پتانسیل اهمی در لایه نفوذ گازی، به علت خصوصیت هدایت بالای آن، در نظر گرفته نمی شود. چنانچه در شکل ۲ مشاهده می شود، خط میان لایه های نفوذ گازی و غشاء، لایه های کاتالیستی هستند که به علت نازک بودن آن ها نسبت به سایر اجزای پیل سوختی، چنین فرضی صورت گرفته است.

در کانال گازی موازنه جرم و موازنه بار، در ناحیه لایه نفوذ گازی موازنه بار و در ناحیه غشای پلیمری موازنه جرم و موازنه بار حاکم می باشد. موازنه جرم با معادله استفان ماکسول بیان می شود. موازنه انرژی نیز با معادله نفوذ و جابه جایی بیان می گردد. قانون اهم نیز موازنه بار را بیان می کند.

در این مدل سازی، انتقال جرم اجزای کاتد (اکسیژن، آب و نیتروژن) و اجزای آنود (هیدروژن و آب) به وسیله رابطه استفان ماکسول بیان شده است.

$$\frac{\partial \rho \omega_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left[-\rho \omega_i \sum_{j=1}^N D_{ij} \left\{ \frac{M}{M_j} \left(\nabla \omega_j + \omega_j \frac{\nabla M}{M} \right) + (x_j - \omega_j) \frac{\nabla p}{p} \right\} + \omega_i \rho \mathbf{u} + D_i^T \frac{\nabla T}{T} \right] = R_i \quad (2)$$

در رابطه فوق، ترم اول مربوط به تجمع می باشد. ترم درون { } نفوذ غلظتی، ترم سوم انتقال جابه جایی و ترم چهارم

البته در مقالات ذکر شده، به ترتیب، تأثیر ساختار کاتالیست به صورت یک بعدی و مدل سازی دو بعدی با در نظر گرفتن معادله تافل برای محاسبه دانسیته جریان، فرض شده است، در حالی که در این کار، مدل سازی به صورت سه بعدی و با در نظر گرفتن معادله واکنش با فرض دقیق کاتالیست به صورت تجمعات کروی می باشد.

با توجه به شکل ۲، وجه تمایز المان فوق علاوه بر بررسی نیم پیل کاتدی، در نظر گرفتن شانه می باشد. شانه در حقیقت دیواره کانال گازی است و وظیفه انتقال بار الکتریکی به صفحات جمع آوری کننده جریان الکتریکی را برعهده دارد. یکی از مهم ترین مراحل در مدل سازی ریاضی، فرضیات مناسب و منطقی برای حل مدل می باشد. در این مدل سازی سیستم به صورت پایدار مدل شده است که این فرض با توجه به زمان کوتاه پایدار شدن در پیل سوختی هیدروژنی (در حد چند ثانیه)، فرض درستی به نظر می رسد. همچنین، غشای پلیمری در شرایط کاملاً آبدار در نظر گرفته شده است. این فرض با توجه به اینکه خوراک در شرایط ورودی کاملاً اشباع است دور از انتظار نیست. نظر به اینکه در کانال گازی عدد پکلت در شرایط عملیاتی، بیش از مقدار واحد می باشد، تنها جریان جابه جایی محوری در نظر گرفته می شود. سرعت جریان گازی نیز از رابطه زیر محاسبه می شود [۱۵]:

$$U = \frac{\Delta p h^2}{28.46 \mu L} \quad (1)$$

که Δp افت غشاء در طول کانال و h قطر هیدرولیکی کانال

شرایط مرزی برای موازنه بار در ادامه ارائه شده است.

$$\phi_m = 0, x = l_m, 0 \leq y \leq l_s, 0 \leq z \leq L \quad (13)$$

$$-\sigma_m \frac{\partial \phi_m}{\partial x} = j, x = l_d, 0 \leq y \leq l_s, 0 \leq z \leq L \quad (14)$$

$$\frac{\partial \phi_m}{\partial y} = 0, l_d \leq x \leq l_m, y = 0, y = l_s, 0 \leq z \leq L \quad (15)$$

ضریب نفوذ در این مدل سازی با توجه به فرمولاسیون زیر می باشد [۱۵]:

$$D_{ij} = D_{ij}^0 (T_0, P_0) \frac{P_0}{P} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (16)$$

اندیس ۰، بیان گر حالت مرجع است. ثوابت معادله بالا در ضمیمه ذکر شده اند. البته تصحیح براگمن [۱۵] برای محیط متخلخل نیز به کار گرفته شده است:

$$D_{ij}^{eff} = \varepsilon D_{ij} \quad (17)$$

نتایج و بحث

اولین گام در تحلیل نتایج یک مدل سازی، کسب اعتبار یک مدل از طریق تطابق نتایج مدل سازی با نتایج آزمایشی می باشد. متداول ترین راه برای اعتبار مدل پیل سوختی مقایسه منحنی پلاریزاسیون پیل سوختی (نمودار ولتاژ بر حسب دانسیته شدت جریان الکتریکی) می باشد. پارامترهای عملیاتی و ابعادی برای مدل سازی در جدول ۱ ارائه گردیده است که این داده ها از کار ریسمانچی و اکبری [۱۶] اقتباس شده است.

جهت ترسیم نمودار پلاریزاسیون با اختصاص دادن مقادیر ولتاژ پیل، دانسیته جریان محاسبه می شود. شکل ۳ منحنی پلاریزاسیون حاصل از مدل سازی عددی را نشان می دهد که با داده های اندازه گیری شده مطابقت خوبی داشته و خطایی در حدود ۸/۱۳٪ را نشان می دهد. ولتاژ خروجی از پیل سوختی با کسر اتلافات ولتاژ از ولتاژ تئوری حاصل می شود. عوامل افت ولتاژ عبارتند از: افت ولتاژ حاصل از انرژی فعال سازی واکنش، افت حاصل از انتقال جرم (به عبارت دیگر پلاریزاسیون غلظتی) و همچنین افت اهمی. ولتاژ پیل سوختی توسط معادله زیر محاسبه می شود:

$$V_{cell} = 1.14 - \eta_{act} - \eta_{conc} - \eta_{ohm} \quad (18)$$

نفوذ دمایی را نشان می دهد. طرف راست معادله نیز بیان گر تولید و مصرف می باشد. موازنه بار با قانون اهم بیان می شود که در شرایط پایدار می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$J = \sigma E + J^e \quad (3)$$

با توجه به رابطه بالا، دانسیته جریان به شدت میدان الکتریکی و دانسیته جریان خارجی بستگی دارد. به این ترتیب، فرم پیوستگی جریان الکتریکی به صورت زیر خواهد بود:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\nabla \cdot (\sigma \nabla V - \mathbf{J}^e) = 0 \quad (4)$$

گام بعدی در مدل سازی، تعیین و اعمال شرایط مرزی می باشد. در ورودی کانال گازی ($z=0$) خواهیم داشت:

$$Y_g = Y_{in}, 0 \leq x \leq l_g, 0 \leq y \leq l_w \quad (5)$$

در معادله ۵، Y بیان گر کسر جرمی است و زیر نویس g و in به ترتیب مربوط به کانال گازی و شرایط ورودی می باشد. شرط مرزی بعدی دیواره کانال گازی ($x=0$) می باشد، که می توان نوشت:

$$\frac{\partial Y_g}{\partial x} = 0, 0 \leq y \leq l_w, 0 \leq z \leq L \quad (6)$$

سایر شروط مرزی نیز به قرار زیر می باشد:

$$\frac{\partial Y_g}{\partial y} = 0, 0 \leq x \leq l_g, y = 0, y = l_w, 0 \leq z \leq L \quad (7)$$

$$Y_g = Y_d, 0 \leq y \leq l_w, 0 \leq z \leq L \quad (8)$$

$$\frac{\partial Y_d}{\partial x} = 0, l_w \leq y \leq l_s, 0 \leq z \leq L \quad (9)$$

$$\rho D_{O_2} \frac{\partial Y_g}{\partial x} = \varepsilon_d^{\tau d} \rho D_{O_2} \frac{\partial Y_d}{\partial x}, 0 \leq y \leq l_w, 0 \leq z \leq L \quad (10)$$

$$\varepsilon_d^{\tau d} \rho D_{O_2} \frac{\partial Y_d}{\partial x} = \frac{j}{4F} M_{O_2}, 0 \leq y \leq l_s, 0 \leq z \leq L \quad (11)$$

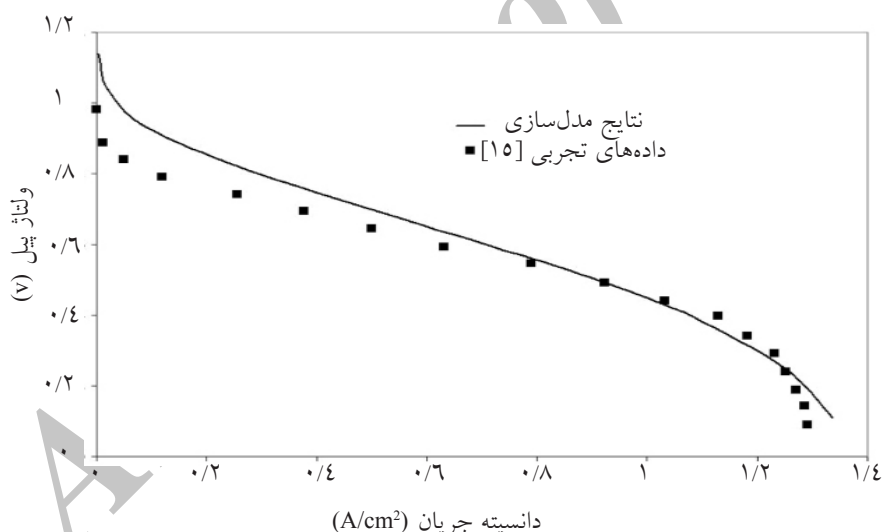
زیر نویس d معرف لایه نفوذ گازی می باشد. همان طور که پیشتر راجع به واکنش در پیل سوختی گفته شد، یکی از برتری ها و نکات برجسته این مدل سازی، به کارگیری معادله واکنش به صورت تجمعات کروی می باشد [۹].

$$j = -6n_c F \left(\frac{D_{agg}}{r_{agg}^2} \right) (1 - \lambda_c \coth \lambda_c) C_{O_2,ref} \quad (12)$$

$$\lambda_c = \sqrt{\frac{i_{0c} S r_{agg}^2}{4FC_{O_2,ref} D_{agg}}} \exp\left(-\frac{F}{2RT} \eta_c\right)$$

جدول ۱- پارامترهای عملیاتی و ابعادی

نام	مقدار	واحد	نام	مقدار	واحد
k	1×10^{13}	Sec ⁻¹	Y _{O₂}	۰/۲	---
F	۹۶۴۸۷	C/mol	Y _{N₂}	۰/۶۷	---
R	۸/۳۱۴	J/kmol.K	Y _{H₂O}	۰/۱۳	---
T	۳۴۳	K	D _{O₂}	$1/8 \times 10^{-5}$	m ² /sec
σ _m	۹	l/Ω.m	μ	1×10^{-5}	Pa.sec
ε _d	۰/۶	---	L	۰/۰۳	m
r _{agg}	1×10^{-7}	m	lg	۰/۰۰۱	m
D _{O₂ agg}	$1/7 \times 10^{-5}$	m ² /sec	ld- lg	$2/54 \times 10^{-4}$	m
pc _{out}	1×10^5	Pa	lm- ld- lg	$7/7 \times 10^{-5}$	m
CO _{2ref}	۰/۹۴۹۶۸۸	mol/m ³	lw	5×10^{-4}	m
pc _{in}	$1/5 \times 10^5$	Pa	ls	1×10^{-3}	m
τ	۴	---	α	۰/۵	---
i _{0c}	۱	A/m ²	S	1×10^{-7}	m ⁻¹



شکل ۳- منحنی پلاریزاسیون حاصل از مدل سازی عددی

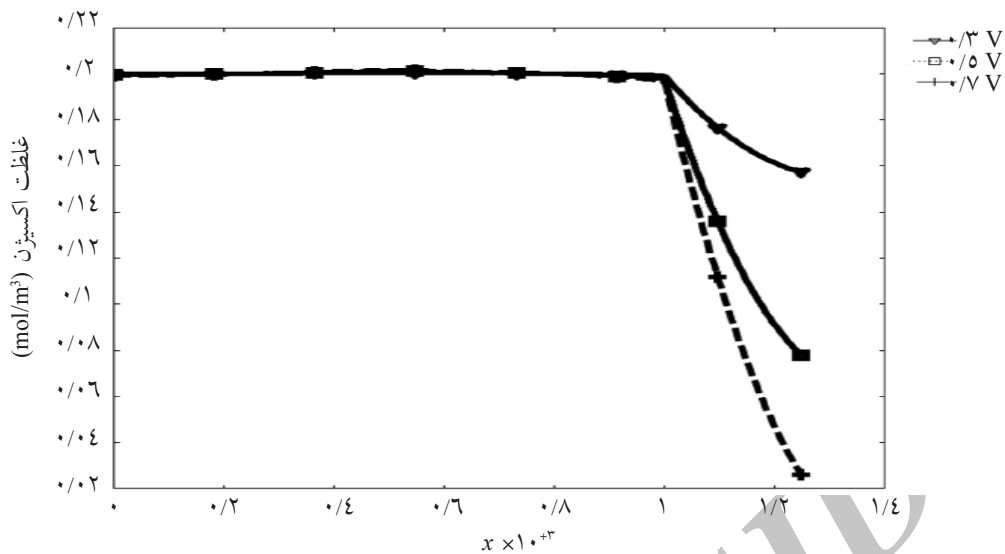
غلظت اکسیژن در کانال گازی و لایه نفوذ گازی برای مقادیر افت انرژی فعال سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ در شکل ۴ رسم شده است.

چنانچه مشاهده می شود، غلظت اکسیژن در کانال گازی ثابت است. این نتیجه منطقی به دلیل سرعت زیاد در کانال گازی و پلاگ بودن پروفایل غلظت می باشد. اما در قسمت لایه نفوذ گازی، افت غیر خطی کسر جرمی اکسیژن مشاهده می شود که نتیجه مصرف اکسیژن در لایه کاتالیست می باشد.

افت اهمی عبارت است از افت حاصل از مقاومت لایه نفوذ گازی و غشای پلیمری که با توجه به اینکه افت ناشی از لایه نفوذ گازی نسبت به غشاء ناچیز است، از میانگین تفاوت پتانسیل قسمت آندی و کاتدی غشاء حاصل می شود. افت غلظتی نیز با معادله زیر محاسبه می شود:

$$\eta_{conc} = \frac{1.5RT}{F} \log \left(\frac{C_{O_2}^{ch}}{C_{O_2}^{cat}} \right) \quad (19)$$

افت حاصل از اکتیواسیون را می توان با استفاده از رابطه ۸ و مقادیر معلوم سایر پارامترهای این معادله محاسبه نمود.

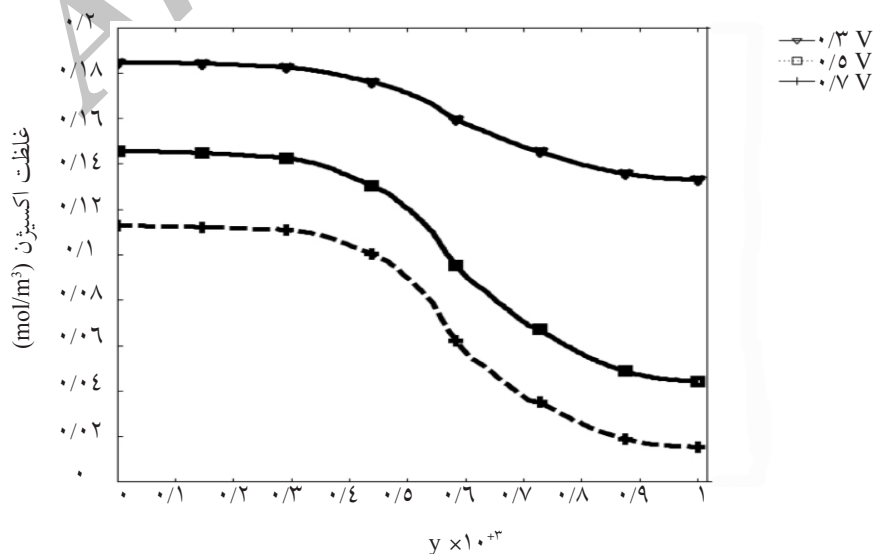


شکل ۴- غلظت اکسیژن در جهت x در کانال گازی و لایه نفوذ گازی کاتدی برای مقادیر افت انرژی فعال‌سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ V

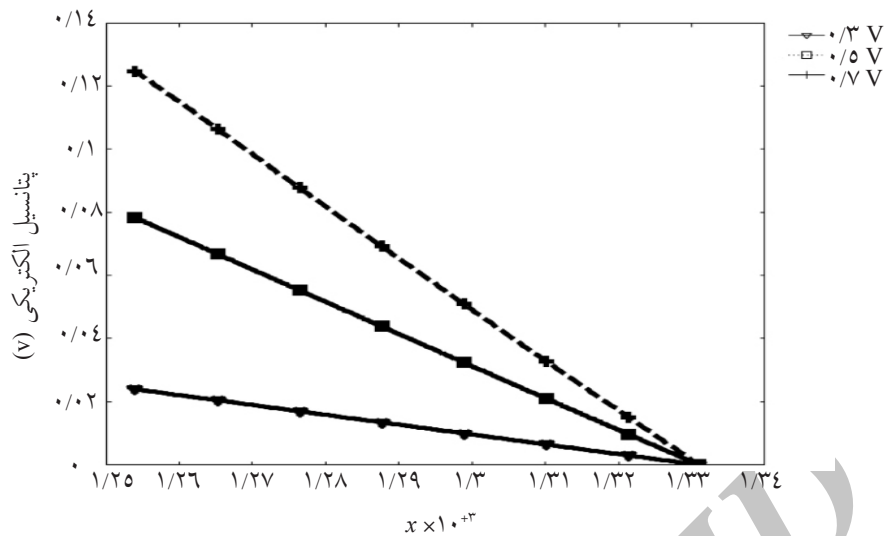
لایه نفوذ گازی می‌شود. اما در قسمتی از لایه نفوذ گازی که زیر شانه قرار دارد، واکنش‌گر به صورت مستقیم وارد نمی‌شود. بلکه به واسطه انتقال جرم از قسمت‌های مجاور وارد می‌شود، لذا غلظت کمتری دارد. این تغییر غلظت در عرض پیل سوختی به خوبی دقت مدل‌سازی موجود را نشان می‌دهد و نسبت به تحقیقاتی که در آنها از افت به واسطه فضای زیر شانه صرف‌نظر شده، متمایز می‌باشد. تغییر پتانسیل در طول غشاء نیز در شکل ۶ نمایش داده شده است.

نتیجه دیگری که از این نمودار به دست می‌آید، کاهش غلظت اکسیژن با افزایش پتانسیل اکتیواسیون می‌باشد. در حقیقت در ولتاژ بالاتر، انرژی بیشتری صرف فعال‌سازی واکنش می‌شود و مقدار بیشتری واکنش‌گر، انرژی لازم برای انجام واکنش را دریافت می‌کند. در نتیجه کاهش غلظت واکنش‌گر، خواهد بود.

با توجه به شکل ۵، غلظت اکسیژن در تماس با کانال گازی بیشتر از غلظت اکسیژن در تماس با شانه می‌باشد. ورود واکنش‌گر از طریق کانال گازی است. بنابراین، واکنش‌گر پس از ورود به پیل سوختی از طریق کانال، وارد محیط



شکل ۵- غلظت اکسیژن در جهت y در لایه نفوذ گازی کاتدی برای مقادیر افت انرژی فعال‌سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ V

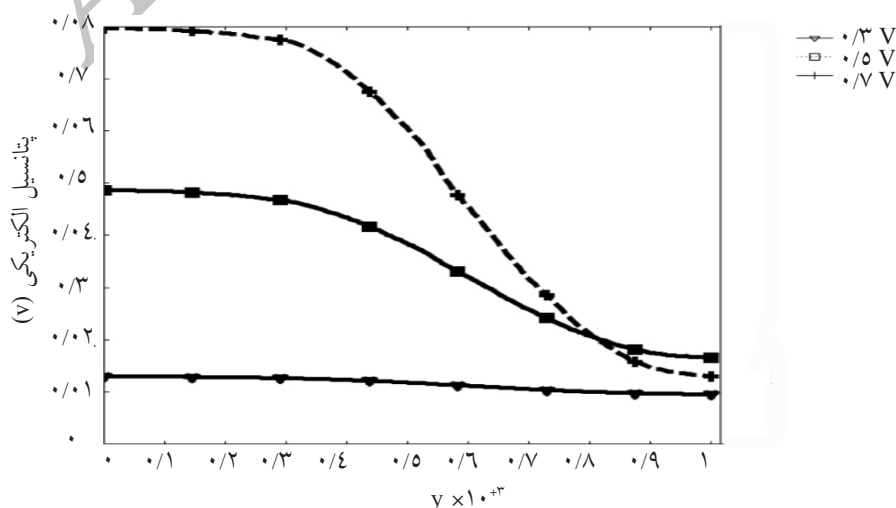


شکل ۶- تغییرات پتانسیل الکتریکی در طول غشاء برای مقادیر افت انرژی فعال سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ V

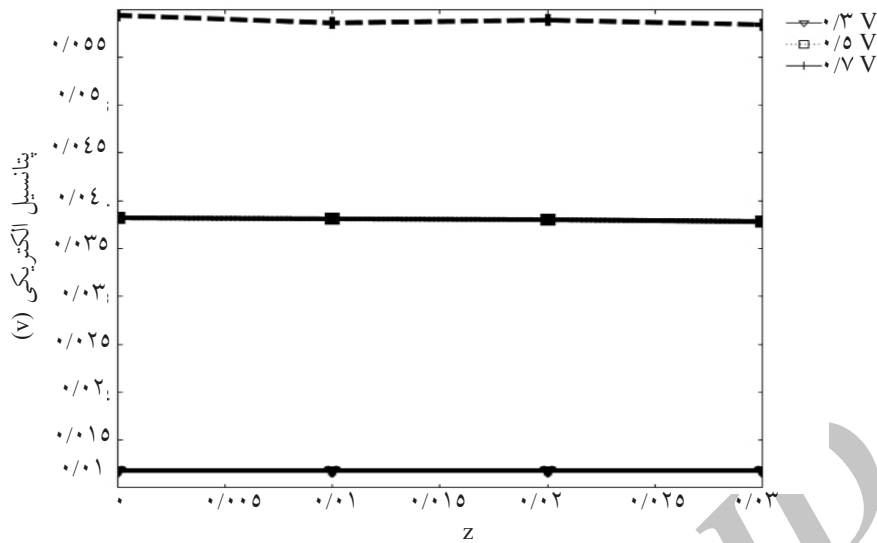
تغییر پتانسیل در جهت Z قابل صرف نظر کردن است و این به علت سرعت زیاد در کانال گازی و پلاگ بودن جریان می باشد. چنانچه ذکر شد، محاسبه دانسیته توان بهینه برای کاربرد پیل سوختی مهم است. دانسیته توان حاصل ضرب ولتاژ پیل سوختی در دانسیته جریان می باشد و در نقطه بهینه، مشتق دانسیته توان برابر صفر می باشد. نقطه ماکزیمم در شکل ۹، نقطه بهینه برای پیل سوختی است. بنابراین، عملیات در این نقطه بهترین جریان خروجی و انرژی را به صورت همزمان دارا می باشد. همان طور که نشان داده شده در این نقطه، دانسیته جریان و توان پیل سوختی به ترتیب برابر با 1 A/cm^2 و 0.45 W/cm^2 است و ولتاژ پیل در این نقطه معادل 0.45 V می باشد.

در شکل ۶ به خوبی مشاهده می گردد که با افزایش ولتاژ الکتریکی در طول غشاء که معادل با افزایش افت حاصل از اکتیواسیون می باشد، افت اهمی بیشتری خواهیم داشت. زیرا با افزایش ولتاژ، چنانچه پیشتر ذکر گردید، واکنش گر بیشتری مصرف می گردد و در نتیجه افت اکتیواسیون بیشتر می شود. از طرفی با افزایش یون های حاصل، مقاومت یونی بیشتر شده و باعث افزایش مقاومت اهمی می گردد. تغییر پتانسیل در جهت Y و Z نیز در شکل های ۷ و ۸ نمایش داده شده است.

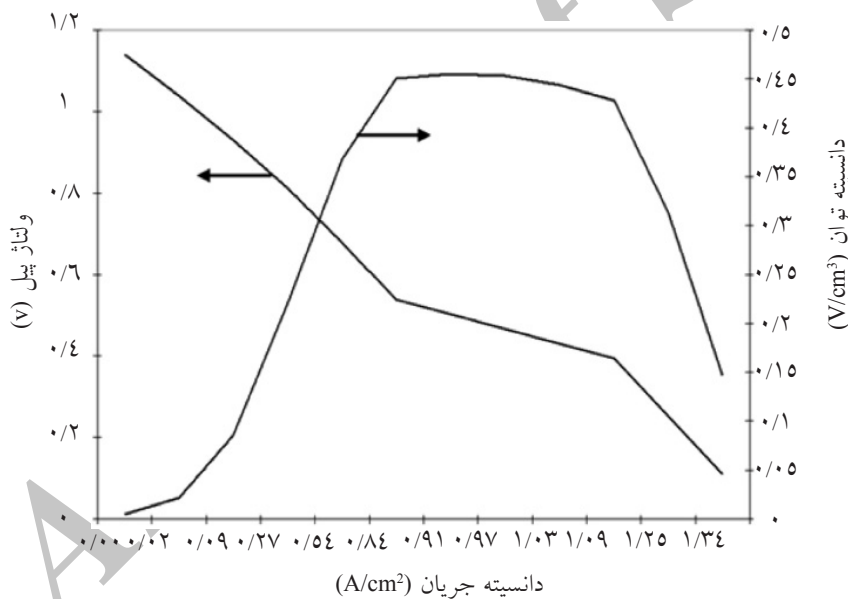
در شکل ۷ می توان به اهمیت در نظر گرفتن شانه در مدل سازی پی برد و تغییرات پتانسیل الکتریکی ناشی از وجود شانه را مشاهده نمود. همان گونه که انتظار می رود،



شکل ۷- تغییرات پتانسیل الکتریکی در جهت Y برای مقادیر افت انرژی فعال سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ V



شکل ۸- تغییرات پتانسیل الکتریکی در جهت z برای مقادیر افت انرژی فعال سازی برابر با ۰/۳، ۰/۵ و ۰/۷ V

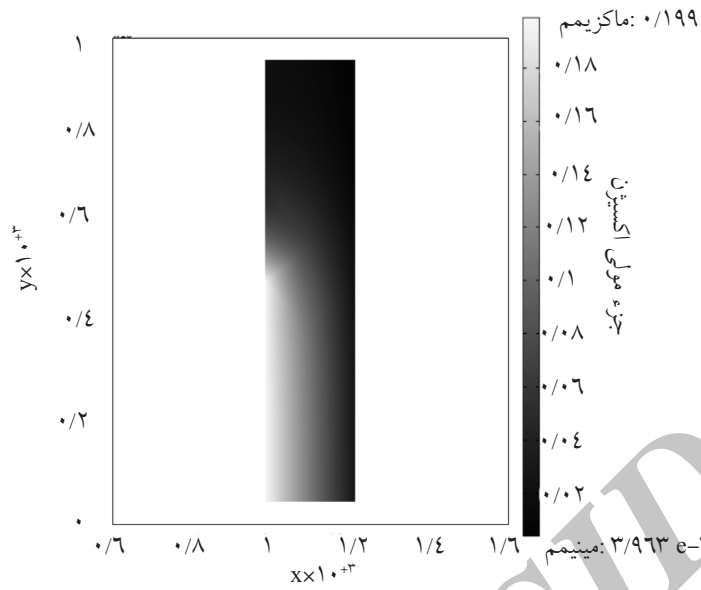


شکل ۹- منحنی پلاریزاسیون و دانشیته توان حاصل از مدل سازی عددی

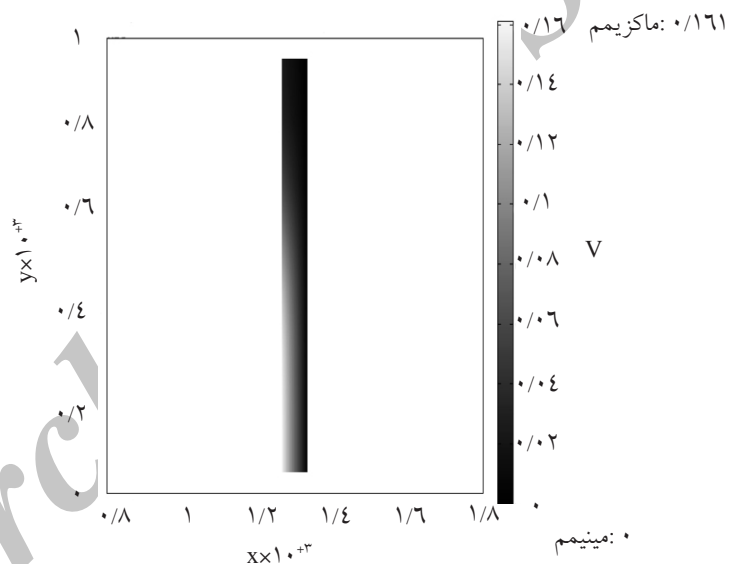
تا شانه اتفاق می افتد.

شکل ۱۱ توزیع ولتاژ جریان در غشاء را نشان می دهد. دانشیته جریان پیل سوختی نیز در شکل ۱۲ نمایش داده شده است و همان گونه که مشاهده می شود در جهت محور z هیچ گونه پروفایل غلظتی و پتانسیل الکتریکی وجود ندارد.

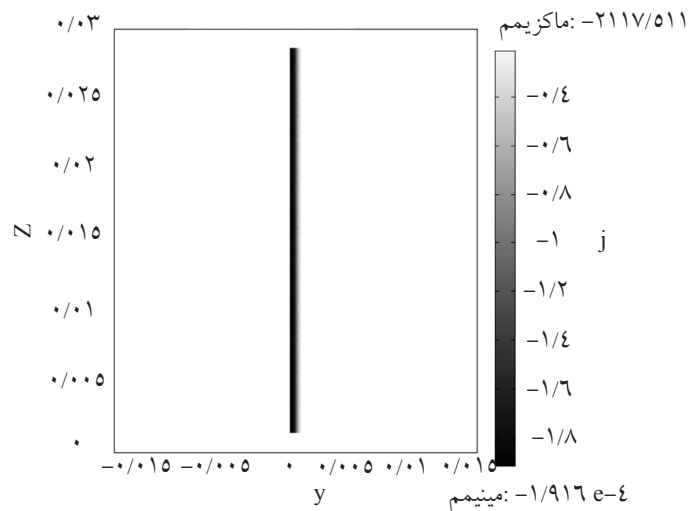
طبق موارد ذکر شده، فعالیت پیل سوختی در نقطه بهینه، مطلوب می باشد. در ادامه به بررسی سایر پارامترهای پیل سوختی می پردازیم. باید توجه داشت که به علت جلوگیری از تعدد نمودارها و ارائه نتایج، تنها نتایج مربوط به ولتاژ ۰/۵ V نشان داده شده است. شکل ۱۰ توزیع اکسیژن در طول لایه نفوذ گازی کاتد را نشان می دهد. همان گونه که مشاهده می شود، کاهش غلظت در جهت y از کانال گازی



شکل ۱۰- توزیع کسر جرمی اکسیژن در طول لایه نفوذ گازی نیم پیل کاتدی



شکل ۱۱- توزیع ولتاژ در غشاء



شکل ۱۲- توزیع دانسیته جریان در طول محور Z

نتیجه گیری

در این تحقیق، مدل سازی همدمای سه بعدی پیل سوختی به روش عددی صورت گرفته است که محدوده مدل شامل کانال گازی کاتد، لایه نفوذ، شبه لایه کاتالیستی و غشای پلیمری می باشد. همچنین تأثیر مقادیر مختلف پتانسیل های فعال سازی بر عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. نتایج نشان می دهد هر چه ولتاژ پیل سوختی بیشتر شود، پتانسیل فعال سازی افزایش و دانسیته جریان خروجی کاهش می یابد. برای رسیدن به حالت بهینه عملیاتی یک پیل سوختی، ولتاژ و شدت جریان باید در نظر گرفته شوند، زیرا افزایش یکی با کاهش دیگری همراه است. با استفاده از منحنی پلاریزاسیون و منحنی دانسیته توان، نقطه بهینه عملکرد پیل سوختی در دانسیته جریان 1 A/cm^2 ، دانسیته توان 0.45 W/cm^2 و ولتاژ پیل 0.45 V حاصل شد. نتایج نشان می دهد که در شرایط عملیاتی، تغییرات در طول کانال (در جهت z) کوچک می باشد. همچنین مشاهده شد که عملکرد پیل سوختی متناسب با سه عامل افت ناشی از انرژی فعال سازی، پلاریزاسیون غلظتی و اهمی کاهش می یابد. مهم ترین نتیجه ای که از تطابق مناسب نتایج حاصل از مدل سازی با داده های تجربی می توان استنتاج نمود، اثبات مؤثر بودن نیم پیل کاتدی در عملکرد پیل سوختی و اهمیت در نظر گرفتن تأثیر شانه در المان مدل سازی می باشد. به عبارت دیگر عامل کنترل کننده عملیات پیل سوختی غشای پلیمری، نیم پیل کاتدی با در نظر گرفتن المان مناسب می باشد.

علائم و نشانه ها

$C_{O_2,ref}$: غلظت اکسیژن بر سطح تجمعات کروی (mol/m^3)
 D_{O_2} : ضریب نفوذ اکسیژن (m^2/sec)
 $D_{O_2,agg}$: ضریب نفوذ اکسیژن در لایه غشای کاتالیست (m^2/sec)
 F : ثابت فارادی (C/mol)
 k : ثابت واکنش درجه اول (Sec^{-1})
 L : طول در جهت (m z)
 ld - lg : طول لایه نفوذ گازی در جهت (m x)
 lg : طول کانال گازی در جهت (m x)
 lm - ld - lg : طول غشا در جهت (m x)

ls : طول کانال گازی در جهت (m y)
 lw : طول نصف کانال گازی در جهت (m y)
 pc_{in} : فشار ورودی کاتد (Pa)
 δ : سطح ویژه (m^{-1})
 pc_{out} : فشار خروجی کاتد (Pa)
 R : ثابت جهانی گازها (J/kmol.K)
 r_{agg} : شعاع تجمعات کروی (m)
 T : دمای پیل سوختی (K)
 Y_{H_2O} : کسر جرمی آب ورودی
 Y_{N_2} : کسر جرمی نیتروژن ورودی
 Y_{O_2} : کسر جرمی اکسیژن ورودی
 α : ضریب انتقال
 ε_d : تخلخل لایه نفوذ گازی
 μ : ویسکوزیته مخلوط گازها در کاتد (Pa.sec)
 σm : ضریب هدایت یونی ($\Omega.m$)
 τ : ضریب پیچش
 i_{oc} : دانسیته جریان تبدلی کاتد (A/m^2)

مراجع

- [1]. Springer T. E., Zawodzinski T. A., and Gottesfeld S., "Polymer electrolyte fuel cell model. *Journal of the Electrochemical Society*", 138(8): pp. 2332-4342, 1991.
- [2]. Eikerling M. and Kornyshev A. A., "Modelling the performance of the cathode catalyst layer of polymer electrolyte fuel cells", *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 453(1-2): pp. 89-106, 1998.
- [3]. Gurau V., Barbir F., and Liu H., "Analytical solution of a half-cell model for PEM fuel cells", *Journal of the Electrochemical Society*, 147(7): pp. 2468-2477, 2000.
- [4]. Devan S., Subramanian V. R., and White R. E., "Analytical solution for the impedance of a porous electrode", *Journal of the Electrochemical Society*, 151(6): pp. 905-913, 2004.
- [5]. Meng H. and Wang C. Y., "An analytical study of the PEM fuel cell with axial convection in the gas channel", *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(17): pp. 4477-4488, 2007.
- [6]. Ju H., Meng H., and Wang C.-Y., "A single-phase, non-isothermal model for PEM fuel cells", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(7): pp. 1303-1315, 2005.
- [7]. Yin K.-M., "A thin-film/agglomerate model of a proton-exchange-membrane fuel cell cathode catalyst layer with consideration of solid-polymer-electrolyte distribution", *Journal of Applied Electrochemistry*, 37(8): pp. 971-982, 2007.
- [8]. Das P. K., Li X., and Liu Z.-S., "A three-dimensional agglomerate model for the cathode catalyst layer of PEM fuel cells", *Journal of Power Sources*, 179(1): pp. 181-699, 2008.
- [9]. Siegel N. P., Ellis M. W., Nelson D. J., Von Spakovsky M. R., "Single domain PEMFC model based on agglomerate catalyst geometry", *Journal of Power Sources*, 115(1): p. 81-89, 2003.
- [10]. Zhou T. and H. Liu, "A 3D model for PEM fuel cells operated on reformat", *Journal of Power Sources*, 138(1-2): pp. 101-110, 2004.
- [11]. Mishra V., F. Yang, and R. Pitchumani, Analysis and design of PEM fuel cells. *Journal of Power Sources*, 2005. 141(1): pp. 47-64, 2004.
- [12]. Serrafiero A., Arato E., and Costa P., "Transport phenomena and performance limits in polymeric electrolyte membrane fuel cells", *Journal of Power Sources*, 145(2): pp. 470-476, 2005.
- [13]. Acosta M., Acosta M., Mertwn C., Eigenberger G., Class H., Helmig R., Thoben B., Muller-steinbergen H., "Modeling non-isothermal two-phase multicomponent flow in the cathode of PEM fuel cells", *Journal of Power Sources*, 159(2): pp. 1123-1141, 2006.
- [14]. Berning T. and Djilali N., "Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell - A parametric study. *Journal of Power Sources*", 124(2): pp. 440-452, 2003.
- [15]. Bird R. B., Stewart W. E., and Lightfoot E.N., *Transport phenomena*, 2nd ed. 2002, New York: J. Wiley. xii, 895 p.
- [16]. Rismanchi B. and Akbari M. H., "Performance prediction of proton exchange membrane fuel cells using a three-dimensional model", *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(1): pp. 439-448, 2008.