

مدل سازی عددی لایه پخش گاز پیل سوختی غشا پلیمری بر اساس شرایط مختلف کارکرد

ناصر بهارلو هوره^۱، ابراهیم افشاری^{۲*}

گروه مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان، اصفهان، ایران

* e.afshari@eng.ui.ac.ir و em_afshari@yahoo.com

چکیده

در این مقاله کاتد پیل سوختی غشا پلیمری به صورت دو بعدی شامل کانال گاز، لایه پخش گاز و لایه کاتالیست، مدلسازی شده است. معادلات حاکم با روش حجم محدود گسسته شده و با استفاده از نرم افزار فلونت با یک روند تکرار، حل شده‌اند و میدان جریان، فشار و توزیع اکسیژن و آب به دست آمده است. تاثیر شرایط کاری و ساختار لایه پخش گاز، بر انتقال اکسیژن و نیز بر تغییرات فشار در لایه پخش گاز بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دبی ورودی، نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش می‌یابد. دبی ورودی بیشتر به خارج شدن آب از پیل کمک می‌کند. هر چند که با افزایش دبی، افت فشار افزایش می‌یابد. با افزایش نفوذپذیری نیز غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه کاتالیست/لایه پخش گاز افزایش می‌یابد. ضمن این که افت فشار ایجاد شده در طول کانال کاهش می‌یابد. کم شدن نفوذپذیری تا حدی باید باشد که بر پخش یکنواخت گازها اطمینان حاصل شده باشد.

واژه‌های کلیدی: پیل سوختی غشا پلیمری - لایه پخش گاز - مدل سازی عددی - شرایط ورودی

۱- مقدمه

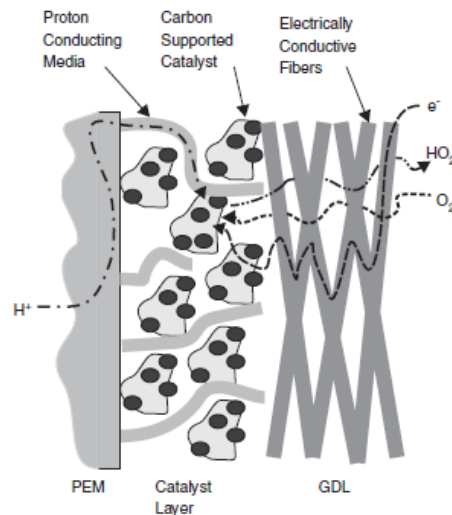
پیل سوختی غشا پلیمری نوعی پیل الکتروشیمیایی است که با هیدروژن و اکسیژن تغذیه می‌گردد و هیدروژن در آند اکسید و اکسیژن در کاتد احیا می‌گردد. پروتون‌هایی که در طول اکسیداسیون هیدروژن آزاد شده‌اند از طریق غشای تبادل پروتون (PEM) به کاتد انتقال می‌یابند. از آنجائی که این غشاء هدایت کننده الکترونیکی نیست، الکترون‌های آزاد شده از گاز هیدروژن، از طریق مدار خارجی حرکت کرده و جریان الکتریکی برقرار می‌گردد. شماتیکی از الکتروکاتد در شکل (۱) نشان داده شده است.

لایه‌های پخش گاز (GDL) به کار برده می‌شود تا گازهای واکنشگر از میان نواحی متخلخل آنها به سمت لایه کاتالیست، عبور کنند. به علاوه GDLها یک فصل مشترک، موقعی که یونیزاسیون اتفاق می‌افتد و الکترون‌ها از میان ماتریس جامد عبور می‌کند، تهیه می‌کنند. GDLها عمدتاً ضخامتی بین ۱۰۰ تا ۳۰۰ میکرو متر دارند. به طور کلی، لایه پخش گاز وظیفه توزیع گازهای واکنشگر بر روی سطح فعال کاتالیست، هدایت آب تولید شده در واکنش به شیارهای عبور جریان گاز در صفحات دو قطبی، ایجاد اتصال الکتریکی بین لایه کاتالیست و صفحات دو قطبی جهت کامل شدن چرخه الکترون، انتقال حرارت از لایه کاتالیست به صفحات دو قطبی جهت خروج حرارت تولیدی در پیل سوختی و ایجاد یک بستر مکانیکی مناسب برای مجموعه

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه اصفهان

۲- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه اصفهان

غشا - الکتروود، جهت جلوگیری از تا شدن آن به داخل شیارهای عبور جریان گاز را بر عهده دارد. لایه‌های پخش گاز معمولاً ساختاری متخلخل بر مبنای کربن دو لایه دارند. لایه اول لایه نفوذ گازی، یک ساختار کربنی ماکرو متخلخل با کاغذهای کربنی یا پارچه‌های کربنی است. ساختار ماکرو متخلخل به عنوان جمع‌کننده جریان عمل می‌کند [۲].



شکل ۱- انتقال گازها، پروتون‌ها و الکترون‌ها در کاند پیل سوختی غشا پلیمری [۱]

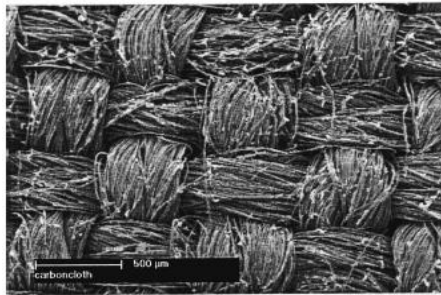
لایه دوم یک لایه ریز تخلخل (میکرو لایه تخلخل) است که بین بستر کربنی آبگریز شده و لایه کاتالیست قرار می‌گیرد. این لایه متشکل از ذرات کربن و یک پیوند دهنده پلیمری آبگریز همچون تفلون می‌باشد. ابعاد ذرات لایه ریز تخلخل در حدود ۱۰۰ تا ۵۰۰ نانو متر است که بسیار کوچک‌تر از اندازه حفره‌های کاغذ کربن (۱۰ تا ۳۰ میکرو متر) می‌باشد. مدیریت آب، هدف اولیه این لایه می‌باشد، چرا که آب را به خوبی از لایه کاتالیست دفع می‌کند. این لایه همچنین مقاومت الکتریکی بین لایه نفوذ و لایه کاتالیست را کاهش می‌دهد [۳]. شمایکی از لایه پخش گاز دو لایه در شکل (۲) قابل مشاهده است.

| |
|--|
| لایه کاتالیست متخلخل، ۱۰ تا ۵۰ میکرومتر |
| میکرو لایه متخلخل، ۱۰ تا ۱۰۰ میکرومتر (پودر کربنی و عامل آب‌گریز) |
| زیر لایه ماکرو متخلخل کربنی، ۲۹۰ تا ۴۰۰ میکرومتر (ورقه یا پارچه کربنی) |

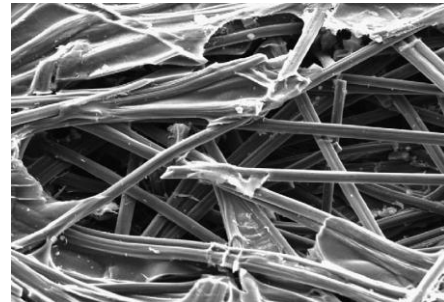
شکل ۲- شمایکی از لایه پخش گاز دو لایه

به طور کلی دو نوع کلی لایه پخش گاز از نظر ماده مورد استفاده وجود دارد که استفاده از آنها در پیل‌های سوختی غشا پلیمری متداول‌تر است. کاغذ کربن و پارچه کربن که در ادامه به مقایسه این دو پرداخته می‌شود. شکل (۳) تصاویر SEM^۱ هر کدام از انواع لایه پخش گاز را نشان می‌دهد. در جدول (۱) خواص دو نمونه متداول انواع لایه پخش گاز آورده شده است.

^۱-scanning electron microscopy



(ب)



(الف)

شکل ۳- تصاویر SEM لایه‌های نفوذ گاز (الف) کاغذ کربن (ب) پارچه کربن [۳]

جدول ۱- مقایسه خواص یک نمونه کاغذ کربن و پارچه کربن [۳]

| خواص | کاغذ کربن | کربن پارچه‌ای |
|--------------------------------|---------------------|----------------------|
| ضخامت (mm) | ۰,۱۹ | ۰,۳۸ |
| چگالی (g cm^{-3}) | ۰,۴۵ | ۰,۳۱ |
| نفوذپذیری گاز (m^2) | ۸×۱۰^{-۱۲} | ۵۵×۱۰^{-۱۲} |
| یکنواختی فضایی | همگن | نا همگن |
| تخلخل | % ۴۰-۹۰ | % ۴۰-۶۰ |

تحقیقات آزمایشگاهی و مدل‌سازی متعددی راجع به لایه پخش گاز صورت گرفته است. پاسائوگولاری و وانگ [۴]، انتقال آب مایع در درون لایه پخش گاز را با این فرض که فاز گاز در لایه پخش با بخار آب کاملاً اشباع شده است شبیه‌سازی کردند و به طور خاص تأثیر آب‌گریزی لایه پخش گاز را در مدیریت آب بررسی کردند. دارلینگ و همکارانش [۵] یک تحلیل و شبیه‌سازی از مدیریت آب در پیل سوختی غشاء پلیمری انجام دادند. تحلیل آنها نشان داد که بیشترین قدرت در پیل سوختی در لایه پخش گاز حاصل می‌شود که سبب کاهش مقاومت الکترولیتی و غیر الکترولیتی و کاهش انتقال جرم می‌شود. لیم وانگ و همکارانش [۶] لایه‌های پخش گاز با حجم‌ها و مقدارهای گوناگونی از فلئورین اتیلن پروپیلن به عنوان یک عنصر آب‌گریز آزمایش کردند. آنیکینکو و همکاران [۷] لایه پخش گاز را با ساختارهای مختلف شبیه‌سازی کردند. مطالعه عددی تأثیر نفوذ پذیری لایه پخش گاز بر عملکرد پیل سوختی توسط بانگ و همکاران [۸] صورت گرفته است.

در این مقاله سعی شده به تأثیر پارامترهایی که کمتر در مقالات به آن توجه شده، از جمله تأثیر دبی ورودی، نفوذپذیری لایه پخش گاز و ...، در عوض پارامترهایی که مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند، مانند ضریب تخلخل لایه پخش گاز بررسی شود تا حساسیت سیستم پیل سوختی به این پارامترها نیز تعیین گردد. بدین منظور کاتد پیل سوختی غشاء پلیمری (مطابق شکل ۴) به صورت دو بعدی و تک‌فاز شامل سه ناحیه کانال گاز، لایه پخش گاز و لایه کاتالیست مدل‌سازی شده است و میدان جریان، توزیع فشار و انتقال اکسیژن و آب در سمت کاتد پیل به دست آمده است.



شکل ۴- ساختمان و دامنه محاسباتی پیل سوختی غشاء پلیمری

۲- فرضیات

به دلیل پیچیدگی جریان دو فازی، در این پروژه جریان تک فاز در پیل سوختی بررسی می‌شود. با بررسی جریان تک فاز پدیده‌های انتقال در پیل بهتر تحلیل می‌گردد، زیرا درگیر پیچیدگی‌های جریان دو فازی نمی‌شویم. یک مدل دو بعدی برای تحلیل لایه پخش گاز در نظر گرفته شده است و با دیگر فرضیات مناسب زیر، مسأله ساده‌سازی شده است.

- مخلوط گازهای واکنشگر گاز کامل هستند.
- جریان داخل کانال‌ها دائم، آرام و تراکم‌ناپذیر می‌باشد.
- لایه‌های پخش گاز و لایه‌های کاتالیست یکنواخت و همگن هستند.
- از تاثیر گرانش صرف نظر می‌شود.
- از مقاومت تماسی بین لایه‌ها صرف نظر می‌شود.
- از نفوذ گازها به داخل لایه غشا صرف نظر شده است.
- دمای کارکرد پیل سوختی ۸۰ درجه سلسیوس در نظر گرفته شده است.

۳- معادلات حاکم

بر اساس فرضیات بیان شده، معادلات حاکم بر پیل سوختی غشا پلیمری شامل معادلات بقا جرم، ممنتوم، اجزا شیمیایی، به صورت زیر بیان می‌شوند [۹ و ۱۰].

۳-۱ معادله پیوستگی

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

در معادله بالا، u بردار سرعت، ρ دانسیته مخلوط گاز و ε ضریب تخلخل می‌باشد. ضریب تخلخل در کانال‌های جریان برابر ۱ است.

۳-۲ معادله بقا ممنتوم

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

در معادله بالا، p و μ به ترتیب فشار و ویسکوزیته مخلوط گاز می‌باشد. در نواحی متخلخل برای برقراری پیوستگی شار جرم در فصل مشترک بین نواحی متخلخل و نواحی بدون تخلخل از سرعت‌های ظاهری استفاده می‌شود و خواص انتقالی اصلی در نواحی متخلخل با خواص انتقالی موثر اصلاح می‌شود. از این رو در معادلات ممنتوم در نواحی متخلخل ترم چشمه قرار می‌گیرد تا قانون دارسی را در جایی که سرعت بسیار کم است، اعمال کند. ترم چشمه در کانال‌ها صفر است.

$$S_u = -\frac{\mu}{K} \vec{u} \quad (3)$$

در این رابطه، K نفوذپذیری محیط متخلخل می‌باشد.

۳-۳ معادله بقا اجزا

$$\nabla \cdot (\vec{u} C^i) = \nabla \cdot (D^{i,eff} \nabla C^i) + S_k = 0 \quad (4)$$

در این معادله C^i غلظت جزء i و $D^{i,eff}$ ضریب پخش موثر جزء i در مخلوط گاز می‌باشد.



ضریب پخش جرم جزء k_m در کانال کاتد تابعی از دما و فشار است. در نواحی متخلخل پیل سوختی غشا پلیمری از قبیل لایه‌های پخش گاز و لایه‌های کاتالیست، ضریب پخش باید با استفاده از ضریب تخلخل اصلاح شود. به کمک ضریب تصحیح براگمن، ضریب پخش در محیط متخلخل با تابعی از ضریب تخلخل اصلاح می‌شود، هر چند که در بسیاری از مطالعات، تابعی از ضریب تخلخل و انحنا به جای این تابع استفاده شده است [۱۱ و ۱۲]. ضریب پخش در کانال‌های جریان و در نواحی متخلخل به ترتیب از معادلات (۵) و (۶) به دست می‌آیند.

$$D_k = D_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \left(\frac{P_0}{P} \right) \quad (5)$$

$$D_g^{i,eff} = \varepsilon^{eff} D_g^i \quad (6)$$

ترم چشمه در معادلات بقا اجزا ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی در کاتالیست است. چون واکنش‌های الکتروشیمیایی فقط در لایه کاتالیست اتفاق می‌افتند این ترم برای اکسیژن و آب به ترتیب از معادلات (۷) و (۸) به دست می‌آید.

$$S_k = -\frac{I}{4F} \quad (7)$$

$$S_k = \frac{I}{2F} \quad (8)$$

در معادلات بالا، I دانسیته جریان بر حسب آمپر و F ثابت فارادی است. در این صورت ترم چشمه نشان دهنده شار مولی تولیدی برای آب و شار مولی مصرفی برای اکسیژن است. ترم چشمه فقط در لایه کاتالیست اعمال می‌شود. چگالی جریان پیل بر اساس آزمایش یا تحلیل کامل پیل سوختی انجام می‌شود که در این مدل از نمودار $V-I$ پیل سوختی آزمایش شده توسط پرنگ و همکارانش [۱۳] برای استخراج دانسیته جریان استفاده شده است. به دلیل محدودیت‌های نرم افزار فلوئنت، برای اعمال آهنگ جرمی تولید بخار آب و مصرف اکسیژن در لایه کاتالیست، این لایه به پنج ناحیه تقسیم می‌شود و در هر ناحیه با جایگذاری میانگین دانسیته جریان در روابط (۷) و (۸) شارهای مولی و با ضرب در جرم مولی، آهنگ‌های تولید آب و مصرف اکسیژن جرمی مطابق جدول (۲) به دست می‌آید.

جدول ۲- آهنگ مصرف اکسیژن و تولید بخار آب در نواحی پنجگانه کاتالیست

| آهنگ مصرف اکسیژن ($\text{kg/m}^3\text{s}$) | آهنگ تولید بخار آب ($\text{kg/m}^3\text{s}$) | |
|--|--|---------|
| ۰,۱۲۷۱۰۴ | ۰,۱۴۲۹۹۲ | ناحیه ۱ |
| ۰,۰۹۳۸۵۶ | ۰,۱۰۵۵۸۸ | ناحیه ۲ |
| ۰,۰۷۴۶۲۱ | ۰,۰۸۳۹۴۸ | ناحیه ۳ |
| ۰,۰۶۱۳۵۵ | ۰,۰۶۹۰۲۴ | ناحیه ۴ |
| ۰,۰۵۰۱۶۲ | ۰,۰۵۶۴۳۲ | ناحیه ۵ |

۴- شرایط مرزی

روابط (۱)، (۲)، (۴)، یک دستگاه معادلات حاکم را برای حل ۴ مجهول u ، v ، p ، C^i تشکیل می‌دهند (C^i غلظت اکسیژن، آب و نیتروژن می‌باشد). برای حل این معادلات نیاز به مشخص کردن شرایط مرزی مناسب می‌باشد.

۴-۱ شرایط ورودی

سرعت ورودی کاتد می‌تواند با استفاده از نسبت استوکیومتریک تعیین شود. نسبت استوکیومتریک به صورت نسبت مقدار واکنشگرهای تامین شده برای پیل به واکنشگرهای مورد نیاز برای واکنش الکتروشیمیایی که دانسیته جریان مبناء را تولید کند، تعریف می‌شود. سرعت ورودی برابر یک متر بر ثانیه در نظر گرفته شده است. فشار جزئی بخار آب در ورودی مساوی با

فشار اشباع در دمای مرطوب‌سازی و اکنشرهای ورودی می‌باشد. بنابراین در ورودی کانال کاتد داریم:

$$x_{in}^{H_2O} = \frac{P_{sat}}{P_{in}} \quad (9)$$

در رابطه بالا $x_{in}^{H_2O}$ نسبت مولی آب ورودی می‌باشد. چون نسبت نیتروژن به اکسیژن هوا ۷۹ به ۲۱ است، نسبت مولی اکسیژن نیز به دست می‌آید.

$$x_{in}^{O_2} = \frac{1 - x_{in}^{H_2O}}{1 + \frac{79}{21}} \quad (10)$$

و بالاخره، نسبت مولی نیتروژن ورودی بر اساس رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$x_{in}^{N_2} + x_{in}^{H_2O} + x_{in}^{O_2} = 1 \quad (11)$$

۲-۴ شرایط خروجی

جریان در مرزهای خروجی به صورت توسعه یافته یا شار صفر با فشار برگشتی در نظر گرفته شده است.

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial C^i}{\partial n} = 0 \quad (12)$$

۳-۴ دیوارها

بر روی دیوارها شرط عدم لغزش برای سرعت و شرط شار صفر برای دیگر متغیرها به کار می‌رود.

$$\bar{u} = 0; \quad \frac{\partial P}{\partial n} = 0; \quad \frac{\partial C^i}{\partial n} = 0 \quad (13)$$

۵- روش حل عددی

معادلات حاکم بر نواحی کاتد پیل سوختی همراه با شرایط مرزی مشخص شده با روش حجم محدود گسسته شده و با استفاده از نرم افزار فلونت، حل شده‌اند. در این مدل، میدان‌های سرعت و فشار با استفاده از الگوریتم سیمپل به دست آمده‌اند. برای حل مجموعه معادلات از یک روند تکراری استفاده شده است و حل تا رسیدن به همگرایی با دقت 10^{-6} ادامه پیدا کرده است. مهمترین علت انتخاب روند تکرار برای حل معادلات، کوپل بودن آنها می‌باشد. برای شبکه‌بندی مدل، از یک شبکه مستطیلی با ۲۰۰ گره در راستای x و تعداد ۵۰، ۴۰ و ۱۰ گره در هر کدام از نواحی کانال، لایه پخش گاز، لایه کاتالیست استفاده شده است. تعداد گره‌ها طوری تنظیم شده که نتایج مدل عددی مستقل از تعداد شبکه شود. شبکه مذکور در راستای طولی یکنواخت ولی در راستای ضخامت به دلیل ضخامت بسیار کاتالیست و لایه پخش گاز، غیر یکنواخت است.

۶- پارامترهای مدل سازی

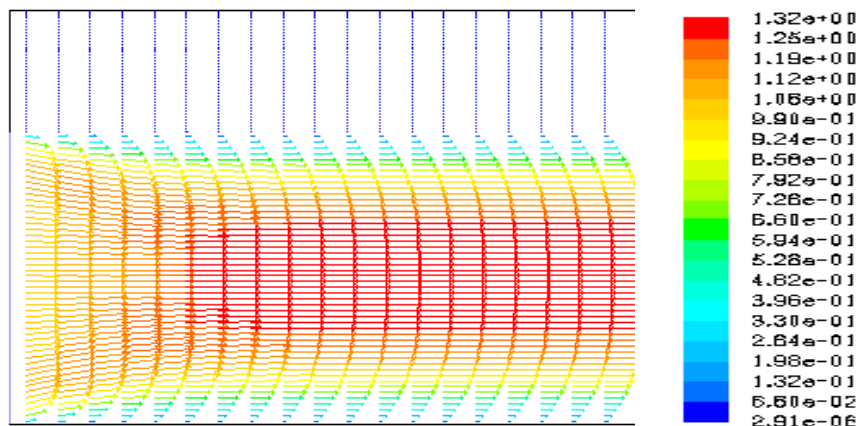
برای مقایسه نتایج مدل حاضر با نتایج آزمایشگاهی و نتایج عددی مقالات، پارامترهای ابعادی، عملکردی و انتقالی از مدل‌هایی بهره‌گیری شده است که بعضی از نتایج آزمایشگاهی و یا عددی آن‌ها در مقالات موجود است.

جدول ۳- پارامترهای هندسی، عملکردی، انتقالی و خواص مواد

| پارامتر | واحد | مقدار |
|------------------------------|-----------------------|------------------------|
| پارامترهای ابعادی | | |
| ضخامت کانال | mm | ۰,۵ |
| ضخامت لایه پخش گاز | mm | ۰,۲ |
| ضخامت لایه کاتالیست | μm | ۱۰ |
| طول پیل | mm | ۱۰ |
| پارامترهای عملکردی | | |
| دمای عملکرد پیل | K | ۳۵۳,۱۵ |
| فشار کاتد | atm | ۱,۰ |
| استوکیومتری کاتد | | ۱,۱ |
| پارامترهای انتقال | | |
| ثابت فارادی | C/mol | ۹۶۴۸۷ |
| ویسکوزیته گاز کاتد | pa s | $۱,۸۸۱ \times ۱۰^{-۵}$ |
| ضریب پخش اکسیژن در 353K | m^2/s | $۱,۸۰۶ \times ۱۰^{-۵}$ |
| ضریب پخش آب کاتد در 353K | m^2/s | $۲,۲۳۶ \times ۱۰^{-۵}$ |
| خواص مواد | | |
| تخلخل لایه کاتالیست آند/کاتد | | ۰,۴ |
| نفوذپذیری لایه پخش گاز کاتد | m^2 | $۱۰^{-۱۲}$ |

۷- نتایج

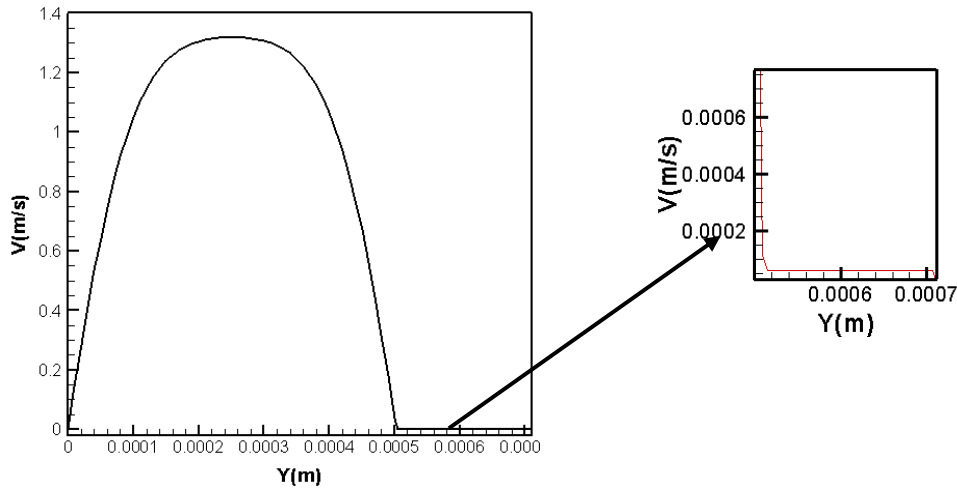
به منظور صحنه گذاری نتایج عددی مدل حاصل، میدان فشار با نتایج تحلیلی مقایسه شده است و بر صحیح بودن نتایج اطمینان حاصل شده است. این صحنه گذاری در بخش‌های آبی ارائه می‌شود. شکل (۵) سرعت جریان در مقطعی از پیل را نشان می‌دهد. در ابتدای کانال‌ها، سرعت در حال توسعه می‌باشد و سپس به حالت توسعه یافتگی می‌رسد. سرعت در لایه‌ی پخش گاز و لایه‌های کاتالیست نسبت به سرعت در کانال‌ها بسیار کمتر می‌باشد. کوچک بودن سرعت در لایه‌های پخش گاز سبب می‌شود که گازهای واکنشگر به طور یکنواخت به لایه‌های کاتالیست برسند و زمان کافی وجود داشته باشد تا نیم‌واکنش‌های الکتروشیمیایی در این لایه‌ها اتفاق بیفتد.



شکل ۵- بردارهای سرعت در مقطعی از کانال

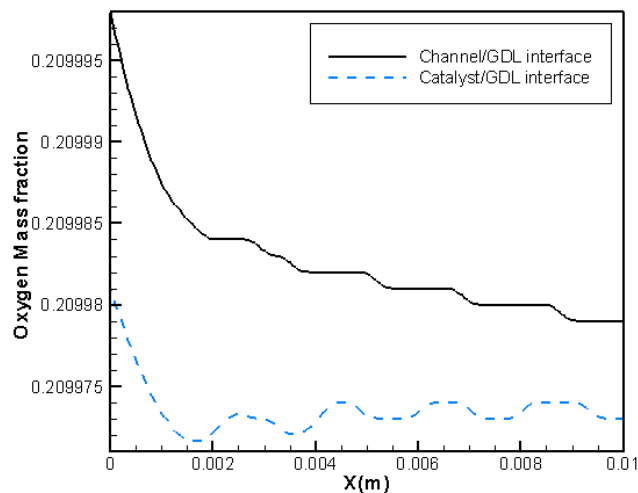


شکل (۶) نیز پروفیل سرعت در مقطع عرضی وسط کانال ($x=0.005$) را نشان می‌دهد. در این مقطع سرعت به صورت توسعه یافته و پروفیل سرعت در کانال سهموی و در لایه‌های پخش گاز و کاتالیست سرعت نسبت به کانال‌ها ناچیز است. ماکزیمم سرعت داخل کانال $1/3$ متر بر ثانیه، اما همان‌طور که در قسمت بزرگ‌نمایی شده شکل نشان داده شده است این مقدار برای لایه پخش گاز و کاتالیست حدود 10^{-4} متر بر ثانیه است. به همین دلیل در این نواحی، انتقال اجزا از طریق پخش بر انتقال اجزا از طریق جابجایی حرکت سیال غالب است.



شکل ۶- پروفیل سرعت در مقطعی از کانال

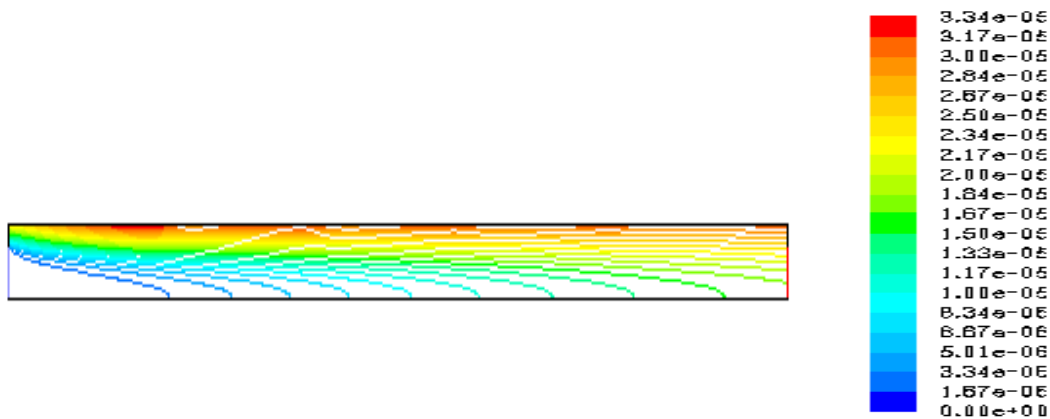
شکل (۷) غلظت اکسیژن در فصل مشترک‌های کانال/لایه پخش گاز و لایه پخش گاز/لایه کاتالیست را نشان می‌دهد. به دلیل اینکه منبع مصرف اکسیژن در لایه کاتالیست است، در فصل مشترک لایه پخش گاز/لایه کاتالیست غلظت اکسیژن پایین‌تر از غلظت آن در فصل مشترک کانال/لایه پخش گاز می‌باشد. در طول کانال، به علت مصرف اکسیژن، غلظت آن کاهش می‌یابد، اما حرکت توده سیال و همچنین ترم پخش، باعث انتقال اکسیژن به سمت پایین دست کانال می‌شود. تاثیر متقابل این دو پدیده سبب می‌شود که در پایین دست کانال، شیب تغییرات غلظت بسیار کمتر شود. تغییرات غلظت آب بر عکس تغییرات غلظت اکسیژن است. هر کجا اکسیژن مصرف شود، آب تولید می‌گردد. علت تغییرات نوسانی در نسبت جرمی اکسیژن، مربوط به محدودیت‌های نرم افزار فلوئنت برای اعمال ترم چشمه متغیر می‌باشد که در بخش ۳-۳ به آن اشاره شد.



شکل ۷- تغییرات غلظت اکسیژن در فصل مشترک‌های کانال/لایه پخش گاز و لایه پخش گاز / لایه کاتالیست



توزیع غلظت آب در کانال و لایه پخش گاز کاتد، در شکل (۸) نشان داده شده است. غلظت آب به دلیل تولید آب در طول کانال افزایش می‌یابد. به دلیل کاهش دانسیته جریان در طول کانال، نرخ تولید آب در طول کانال کاهش می‌یابد؛ اما در اثر انتقال آب ناشی از جریان گاز (ترم جابجایی) غلظت آب در پایین دست جریان بالاتر است. جریان گاز باعث خارج شدن آب از پیل سوختی می‌شود. در نواحی متخلخل به علت پایین بودن سرعت، انتقال آب عمدتاً ناشی از پخش می‌باشد که تغییر شیب خطوط غلظت ثابت در شکل (۸) ناشی از این امر می‌باشد. تغییر شیب خطوط غلظت ثابت، وابسته به ابعاد تخلخل لایه پخش گاز است و هر چه تخلخل لایه پخش گاز کمتر باشد تغییر شیب بیشتر می‌باشد.



شکل ۸- توزیع غلظت بخار آب، آند کاملاً مرطوب و رطوبت نسبی کاتد پایین و برابر ۲۵٪

شکل (۹) تغییرات فشار در طول کانال را نشان می‌دهد. به دلیل کوچک بودن کانال تغییرات فشار کم بوده و حدود ۱۲ پاسکال است. به منظور صحت‌گذاری نتایج و اطمینان از درستی آنها، افت فشار به دست آمده از نتایج عددی با افت فشار تحلیلی برای جریان آرام داخل لوله‌ها (رینولدز حدود ۵۰ است) مقایسه می‌شود.

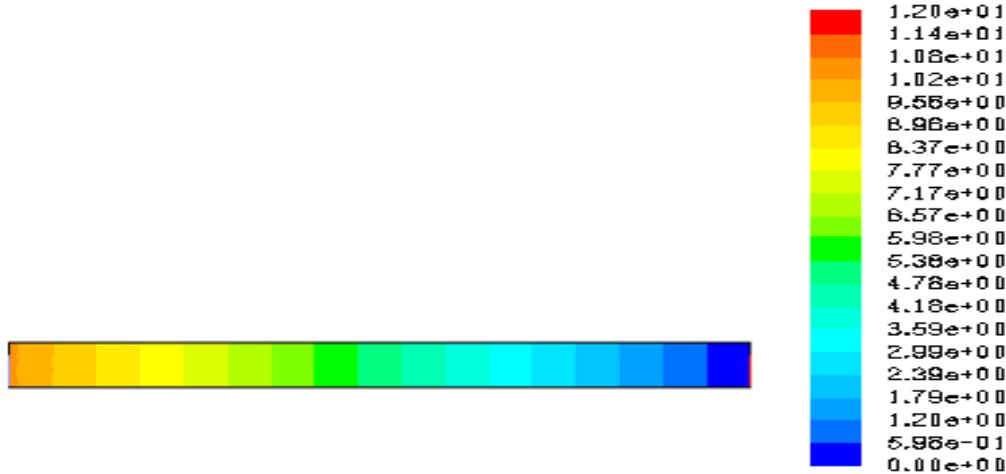
$$\Delta P = f \frac{l}{d} \frac{V^2}{2} \quad (14)$$

$$f = \frac{64}{\text{Re}} \quad (15)$$

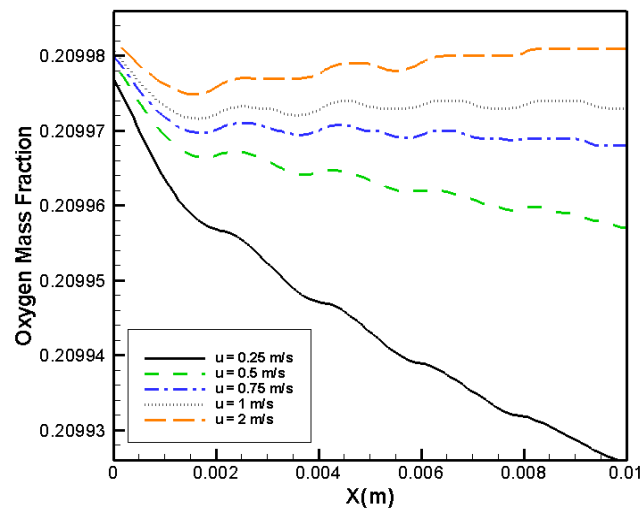
در رابطه‌های بالا، f ضریب اصطکاک، l طول کانال و d قطر هیدرولیکی و V سرعت متوسط در کانال می‌باشد. افت فشار به دست آمده از نتایج، با افت فشار محاسبه شده بر اساس رابطه تحلیلی که برابر با ۷ پاسکال است، تطابق دارد. البته علت اختلاف ناشی از، دو بعدی مدل و فرضیات ساده‌کننده‌ای که در به دست آوردن رابطه (۱۴) قرار داده شده، می‌باشد. دبی ورودی اکسیژن، یا به عبارتی نسبت استوکیومتریک که به صورت نسبت بین اکسیژن ورودی به اکسیژن مصرفی را نشان می‌دهد، تأثیر زیادی بر عملکرد پیل سختی دارد، هر چند که تامین اکسیژن با نسبت استوکیومتری بالا، مستلزم استفاده از کمپرسور با توان مصرفی بالاتر و در نتیجه توان پارازیتی بیشتر از پیل سوختی است. شکل (۱۰) غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد را برای مقادیر مختلف سرعت ورودی (یا دبی جرمی) به داخل کانال کاتد نشان می‌دهد. با افزایش سرعت ورودی، دبی اکسیژن بیشتر شده و مقادیر بیشتری از اکسیژن به نواحی واکنش می‌رسند و در نتیجه نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش می‌یابد. علاوه بر این، دبی بیشتر ورودی به خارج شدن آب از پیل سوختی کمک می‌کند. هر چند که با افزایش دبی، افت فشار نیز افزایش یافته و از این دیدگاه نیز یک توان پارازیتی به سیستم اضافه می‌شود. افت



فشار به وجود آمده در طول کانال برای سرعت‌های ورودی ۰/۲۵، ۰/۵، ۰/۷۵، ۱ و ۲ متر بر ثانیه به ترتیب برابر ۲/۸، ۵/۸۲، ۸/۸۵، ۱۲ و ۲۵/۲ پاسکال می‌باشد. به نظر می‌رسد باید مقدار بهینه‌ای برای نسبت استوکیومتریک ورودی به دست آورد.

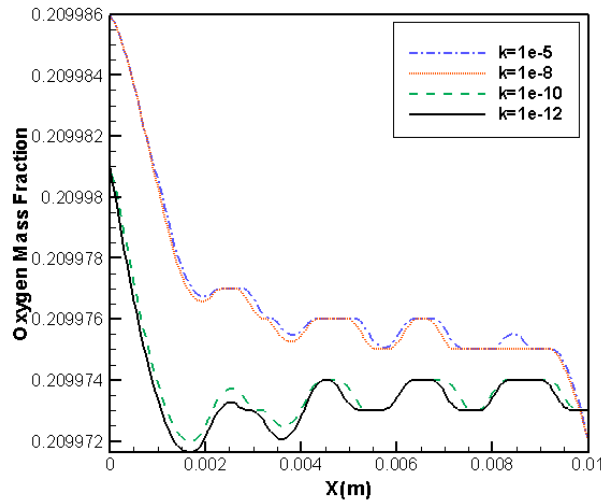


شکل ۹- تغییرات فشار در کاتد پیل سوختی



شکل ۱۰- غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد برای مقادیر مختلف سرعت ورودی

نفوذپذیری لایه پخش گاز بر عملکرد پیل سختی تاثیر زیادی دارد. شکل (۱۱) غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست کاتد را برای مقادیر مختلف نفوذ پذیری لایه پخش گاز کاتد نشان می‌دهد. با افزایش نفوذ پذیری، انتقال اکسیژن بهتر صورت گرفته و غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه کاتالیست / لایه پخش گاز افزایش می‌یابد. ضمن این که با افزایش نفوذ پذیری افت فشار ایجاد شده در طول کانال نیز کاهش می‌یابد. برای نفوذپذیری های 10^{-10} ، 10^{-8} ، 10^{-5} و 10^{-12} ، افت فشار به ترتیب، ۷/۵۹، ۸/۲۶، ۱۱/۴ و ۱۲ پاسکال است.



شکل ۱۱- غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه پخش گاز / لایه کاتالیست، در چهار نفوذپذیری مختلف لایه پخش گاز

۷- نتیجه گیری

در این مطالعه، یک الگوی عددی دو بعدی از الکتروکاتد پیل سوختی غشا پلیمری ارائه شده و تاثیر شرایط کاری و ساختار لایه پخش گاز، بر انتقال اکسیژن و نیز بر تغییرات فشار در لایه پخش گاز بررسی شده است. دستاوردهای مطالعه بدین قرار می باشد.

- سرعت در لایه پخش گاز و لایه های کاتالیست نسبت به سرعت در کانال ها بسیار کمتر می باشد که باعث می شود گازهای واکنشگر به طور یکنواخت به لایه های کاتالیست برسند و زمان کافی برای انجام نیم واکنش های الکتروشیمیایی وجود داشته باشد. در این لایه، انتقال اجزا از طریق پخش بر انتقال اجزا از طریق جابجایی حرکت سیال غالب است.
- در طول کانال، به علت مصرف اکسیژن، غلظت آن کاهش می یابد، اما حرکت توده سیال و همچنین ترم پخش، باعث انتقال اکسیژن به سمت پایین دست کانال می شود. تاثیر متقابل این دو پدیده سبب می شود که در پایین دست کانال، شیب تغییرات غلظت بسیار کمتر شود. تغییرات غلظت آب به دلیل تولید آن معکوس اکسیژن است.
- به دلیل کوچک بودن ابعاد کانال، تغییرات فشار در طول کانال کم بوده و حدود ۱۲ پاسکال است.
- با افزایش دبی ورودی (یا استوکیومتری)، مقادیر بیشتری از اکسیژن به نواحی واکنش می رسد و در نتیجه نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش می یابد. دبی ورودی بیشتر به خارج شدن آب از پیل سوختی کمک می کند. هر چند که با افزایش دبی، افت فشار نیز افزایش یافته و یک توان پارازیتی به سیستم اضافه می شود.
- با افزایش نفوذ پذیری، انتقال اکسیژن بهتر صورت گرفته و غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه کاتالیست / لایه پخش گاز افزایش می یابد. ضمن این که با افزایش نفوذ پذیری افت فشار ایجاد شده در طول کانال نیز کاهش می یابد. اگر چه کم شدن نفوذپذیری تا حدی باید باشد که بر پخش یکنواخت گازها اطمینان حاصل شده باشد.

۸- مراجع

- 1- Djilali, N., *Computational modelling of polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells: Challenges and opportunitie*, J. Energy, 32, 269–280, 2007.
- 2- Escribano, S., Blachot, J. F., Etheve, J., Morin, A., Mosdale, R., *Characterization of PEMFCs gas diffusion layer properties*, J. Power Sources, 156, 8-13, 2006.



انجمن احتراق ایران

FCCI2012-6004

چهارمین کنفرانس سوخت و احتراق ایران

کاشان - دانشگاه کاشان - بهمن ماه ۱۳۹۰



دانشگاه کاشان

- 3- Mathias, M., Roth, J., Fleming, J., Lehnert, W., *Handbook of Fuel Cells (Fundamentals technology and applications)*, 4 Published DOI: 10.1002 /97804709 74001.f303046, 15 DEC 2010.
- 4- Pasaogullari, U., Wang, C.Y., *Liquid water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte fuel cells*, J. Electrochemical Society, 151(3), A399-A406, 2004.
- 5- Darling, R., Newman, J., *Modeling two-phase behavior in PEFCs*. J. Electrochem Soc, 151, A1715-1727, 2004.
- 6- Lim, C., Wang, C., *Effects of hydrophobic polymer content in GDL on power performance of a PEM fuel cell*, Electrochim Acta, 49, 4149-56, 2004.
- 7- Anikeenko, A.V., Medvedev, N.N., Kovalev, M.K., Melgunov, M.S., *simulation of gas diffusion in porous layers of varying structure*, J. Structural Chemistry, 50(3), 403-410, 2009.
- 8- Baek, S.M., Koh, S.G., Kim, K.N., Kang, J.H., Nam, J.H., Kim, C.J., *A numerical study on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells due to the variation in gas diffusion layer permeability*†J. Mechanical Science and Technology 25(2), 457~467, 2011.
- 9- Afshari, E., Jazayeri, S.A., *Analyses of heat and water transport interactions in a proton exchange membrane fuel cell*, J. Power Sources, 194, 423-432, 2009.
- 10- Afshari, E., Jazayeri, S.A., *Effects of the cell thermal behavior and water phase change on a proton exchange membrane fuel cell performance*, Energy Conversion and Management, 51, 655-662, 2010.
- 11- Hwang, J.J., *A complete two-phase model of a porous cathode of a PEM fuel cell*, J. Power Sources, 164, 174-181, 2007.
- 12- Baschuk, J., Rowe, A., Li, X., *Modeling and simulation of PEM fuel cells with CO poisoning*, J. Energy Resources Technology, 125, 94-100, 2003.
- 13- Perng, Sh.W., Wub, H.W., Jue, T.Ch., Cheng, K.Ch., *Numerical predictions of a PEM fuel cell performance enhancement by a rectangular cylinder installed transversely in the flow channel*, Applied Energy, 86, 1541-1554, 2009.