



## بررسی پارامتری جریان دوفاز در سمت کاتد پیل سوختی غشا پلیمری

پیمان حوائج، محمدجعفر کرمانی<sup>\*</sup>، هادی حیدری، محمدمهدی عبدالله زاده سنگرودی

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

<b>چکیده:</b> در این پژوهش عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری، با استفاده از شبیه‌سازی دوفازی، گذرا و دو بعدی در سمت کاتد پیل سوختی، بررسی می‌شود. ابتدا یک مدل جامع برای شبیه‌سازی جریان دوفازی ارائه شده، سپس با استفاده از روش حجم محدود، معادلات گسسته و توسط یک کد فرتن داخلی حل می‌گردد. بررسی پارامتری بر روی میزان آب مایع تولید شده در محیط متخلخل و اثر آن بر عملکرد پیل سوختی تحقیق می‌گردد. تأثیر چهار پارامتر ضریب تخلخل و قابلیت نفوذ محیط متخلخل، زاویه تماس و نرخ آب منتقل شده از غشا به کاتد مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش ضریب تخلخل، قابلیت نفوذ و زاویه تماس، مقدار آب در محیط متخلخل افزایش می‌یابد. بیشترین تأثیر را قابلیت نفوذ و زاویه تماس داشته، بطوریکه کاهش ضریب نفوذ از $10^{-9} m^2$ به $2 \times 10^{-14} m^2$ و زاویه تماس از $140^\circ$ به $91^\circ$ ، کسر حجمی آب مایع در کاتالیست را به ترتیب از $0.04$ به $0.16$ (سه برابر) و $0.058$ به $0.15$ ( $59\%$ ) افزایش می‌دهد. برای شرایط عملکردی مطالعه شده، یک رابطه برای پیش بینی میزان آب مایع موجود در محیط متخلخل بر حسب یک پارامتر که تنها تابعی از جنس محیط متخلخل می‌باشد، ارائه شده است.	<b>تاریخچه داوری:</b> دریافت: بازنگری: پذیرش: ارائه آنلاین:
<b>کلمات کلیدی:</b> پیل سوختی غشا پلیمری جریان دوفاز تولید آب مایع روش حجم محدود شبیه‌سازی عددی	

### ۱- مقدمه

که واکنشگرها کاملاً مرطوب باشند، نسبت به سایر حالات، باعث تولید چگالی جریان بیشتری می‌شود. همچنین نتایج خود را با نتایج تجربی مرجع [۳] مقایسه نمودند. کارکدیا<sup>۴</sup> و لزار<sup>۵</sup> [۴] به بررسی اثر هندسی کانال پیل سوختی (کانال مستقیم و یک انتها بسته) بر عملکرد پیل سوختی در شرایط پایا، هم‌دما و به صورت سه بعدی پرداختند. این پژوهش فاقد اعتبارسنجی بوده و خواص مورد استفاده برای لایه پخش گاز نیز با خواص واقعی، تطبیق ندارد. ریسمانچی<sup>۶</sup> و همکاران [۵]، یک مدل پایا و تک فاز به صورت سه بعدی را گسترش دادند و مشاهده نمودند که خواص لایه پخش گاز و لایه کاتالیست، بر عملکرد پیل سوختی بسیار مؤثر است. این مدل به دلیل در نظر نگرفتن آب مایع، تنها در چگالی جریان‌های کم مناسب بوده است. لوم<sup>۷</sup> و مک‌گوریک<sup>۸</sup> [۶]، یک مدل هم‌دما، پایا، تک فاز سه بعدی را برای کل پیل سوختی، ارائه دادند. این مدل از چندین نظر اعتبارسنجی شد، اما این مدل هم در چگالی جریان‌های زیاد و رطوبت بالای واکنشگرها، نسبت به داده‌های تجربی، انحراف داشته است. داووز<sup>۹</sup> و همکاران [۷]، مدل پیشین را

در سال‌های اخیر مدل‌های یک بعدی و دوبعدی ارائه شده‌اند که عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری را، با در نظر گرفتن جریان تک فاز، بررسی می‌کنند. در این مدل‌ها فرض می‌شود، آب تولید شده در پیل سوختی، به صورت بخار است. این موضوع در حالی است که آب تولیدی می‌تواند در حالت مایع نیز باشد. به همین دلیل در چگالی جریان‌های زیاد که میزان تولید آب مایع تولید شده زیاد است، این مدل‌ها کارآمد نیستند. بنابراین مدل‌های دوفاز مورد نیاز است تا بتوان تولید و انتقال آب مایع را در نظر گرفت و عملکرد پیل سوختی را به درستی پیش‌بینی نمود. در ادامه مروری بر مدل‌های تک فاز و سپس مدل‌های دوفاز انجام خواهد شد.

مینگ<sup>۱</sup> و ونگ<sup>۲</sup> [۱] مدل تک فاز غیر هم‌دما ارائه نمودند. این محققین اظهار داشتند که ولتاژ کاری پیل سوختی، ضریب هدایت حرارتی و رطوبت نسبی گازهای ورودی، مهم‌ترین پارامترهای مؤثر در عملکرد پیل سوختی هستند. جو<sup>۳</sup> و همکاران [۲] بر اساس مدل پیشین، اثر رطوبت واکنشگرها را بررسی نمودند. این محققین مشاهده نمودند که در قسمت آند، در صورتی

- 4 Carcadea
- 5 Lazar
- 6 Rismanchi
- 7 Lum
- 8 McGuirk
- 9 Dawes

- 1 Meng
- 2 Wang
- 3 Ju

آند و الکتروود کاتد را یکدیگر مرتبط نموده‌اند. کین<sup>۴</sup> و همکاران [۱۷]، مدل مشابه لیو و همکاران را گسترش دادند و معادلات برای آب مایع را در کانال انتقال گاز نیز حل نمودند و با در نظر گرفتن این موضوع، عملکرد پیل را بهتر پیش‌بینی کردند. این پژوهشگران معادلات را فقط برای الکتروود کاتد پیل سوختی حل کردند و اثر غشا و آب منتقل شده از الکتروود آند به سمت الکتروود کاتد را در نظر نگرفتند. نکته قابل توجه در این پژوهش این است که آب تولید شده از واکنش شیمیایی را در فاز مایع در نظر گرفتند. خواجه حسینی و همکاران [۱۸] مدل ارائه شده توسط خاکباز و کرمانی را برای حالت سه بعدی گسترش دادند. این شبیه سازی فقط برای قسمت کاتد پیل سوختی بوده و این پژوهشگران، در الکتروود کاتد، اکسیژن خالص را در نظر گرفته بودند و به بررسی میزان آب مایع تولیدی و نرخ چگالی جریان تولیدی در زمان‌های مختلف، پرداختند.

در این پژوهش به بررسی پارامتری، تأثیر خواص لایه پخش گاز شامل قابلیت نفوذ، ضریب تخلخل و زاویه تماس و نرخ آب منتقل شده از غشا، بر عملکرد پیل سوختی و مقدار آب مایع تولید شده در لایه کاتالیست، با استفاده از مدل سازی جریان دوفازی در الکتروود کاتد پیل سوختی، پرداخته می‌شود. برای اولین بار، پارامترهای مؤثر در جریان دوفازی در پیل سوختی، به صورت یک پارامتر واحد که فقط تابع جنس ماده لایه پخش گاز است، معرفی خواهد شد. با بررسی این پارامتر، اثر جنس لایه پخش گاز بر میزان آب مایع در پیل سوختی و عملکرد پیل سوختی را می‌توان بررسی نمود. در انتها نیز اثر پارامتر معرفی شده، بر مقدار آب مایع تولید شده در جریان دوفاز و در ولتاژهای کاری مختلف، بررسی می‌شود.

## ۲- مفروضات و معادلات حاکم

در این بخش برای جریان دوفاز در الکتروود کاتد پیل سوختی غشاء پلیمری، مدل جامعی ارائه می‌شود که با استفاده از آن می‌توان عملکرد پیل سوختی را تحت شرایط مختلف، بررسی نمود.

فرضیات حاکم بر این مدل به شرح زیر است:

- واکنشگرها و محصولات، مخلوط گاز ایده‌آل هستند و مقدار گاز حل شده در مایع، ناچیز است.
- در ابتدا آب مایع در پیل سوختی وجود نداشته و آب مایع در پی فرآیند افزایش فشار بخار آب نسبت به فشار اشباع در دمای موضعی (فرآیند چگالش)، تولید می‌شود.
- الکتروودها، محیط متخلخل همسانگرد و همگن هستند.
- افت اهمی در صفحات دوقطبی ناچیز بوده و فقط در غشا در نظر گرفته شده است.
- جریان درون کانال‌ها دارای رژیم آرام است.
- نرخ آب تبادل شده از سمت آند به سمت کاتد، متناسب با چگالی جریان پیل سوختی در نظر گرفته شده است.

گسترش دادند اما در نهایت این محققین به این نتیجه رسیدند که مدلسازی دوفاز باید انجام شود و آب مایع در قسمت متخلخل در نظر گرفته شود.

یو<sup>۱</sup> و لیو<sup>۲</sup> [۸] به بررسی محدودیت مدل تک فاز پرداختند و مدل دوفازی را برای مدل سازی پیل سوختی ارائه دادند. لیو و همکاران [۹] مدل پایا، هم‌دما، چند جزئی و سه بعدی را گسترش دادند و محدودیت‌های انتقال جرم و عملکرد پیل سوختی را بررسی نمودند. همچنین این پژوهشگران، نرخ آب منتقل شده از غشا را ثابت در نظر گرفتند. منگ و همکاران [۱۰] روش دامنه ترکیبی را ارائه دادند که انتقال آب بین الکتروودها و غشا را اصلاح می‌کرد. نتیجه این پژوهشگران، محدودیت‌های مدل یک دامنه را آشکار کرد و نشان داد که روش دامنه ترکیبی دقت بالاتر نسبت به روش تک دامنه دارد.

دو روش کلی برای مدلسازی جریان دوفاز در پیل سوختی وجود دارد، در روش اول که به مدل مخلوط مشهور است، معادلات برای مخلوط آب و مخلوط گاز حل شده، سپس سرعت هر فاز مشخص می‌شود. در روش دوم که به مدل دوسیال مشهور است، معادلات برای مخلوط گازی و آب مایع به صورت مجزا حل شده و سپس میان معادلات مخلوط گاز و آب مایع ارتباط برقرار می‌شود.

ونگ و همکاران [۱۱] به تشریح مدل دوفازی مخلوط برای الکتروود کاتد پیل سوختی غشا پلیمری پرداختند. در این مدل فرض شده است که پیل سوختی در شرایط دما ثابت عمل می‌کند. یو و همکاران [۸]، مدل وونگ و همکاران را گسترش دادند. این محققین، اثر دمای کاری و رطوبت واکنش‌گرها در ورودی را بررسی نموده‌اند. نکته قابل توجه در این پژوهش این است که مقادیری که برای کسر حجمی آب مایع گزارش شده است، میزان آب مایع تولید شده را بسیار کمتر از سایر پژوهش‌ها و نتایج تجربی، پیش‌بینی کرده است [۸]. وو<sup>۳</sup> و همکاران [۱۲]، با ارائه یک مدل ریاضی با فرضیات ساده شونده، مانند صرف نظر نمودن از تمامی جملات جابه‌جایی، اثر جنس غشا پلیمری مورد استفاده را بررسی نموده‌اند. همچنین این اشخاص [۱۳] سپس نرخ تولید آب مایع در پیل سوختی را با در نظر گرفتن تبخیر و چگالش غیرتعادلی آب در غشا پلیمری (تغییر فاز میان فاز گاز، مایع و فاز حل شده)، بررسی نمودند. منگ [۱۴]، با ارائه مدل دوفاز با دامنه ترکیبی، معادلات را برای قسمت‌های متخلخل و غشا ارائه داد و با استفاده از نرم‌افزار تجاری فلونتت، معادلات را حل کرد. با استفاده از این مدل اثر آب مایع و انتقال گرما را بر عملکرد پیل در شرایط گذرا بررسی نمودند. خاکباز بابلی و کرمانی [۱۵]، مدل دوفاز برای الکتروود کاتد پیل سوختی غشا پلیمری ارائه دادند که بر مبنای مدل وونگ و همکاران بود، ولی جریان سیال را قابل تراکم در نظر گرفته بودند. این پژوهشگران با حل معادلات مدل پیشنهادی، عملکرد پیل سوختی را در حالت دو بعدی و گذرا، بررسی نمودند. لیو و همکاران [۱۶]، مدل پایا سه بعدی دوفاز و غیر هم‌دما ارائه دادند. آن‌ها آب مایع در الکتروودها و غشا را در نظر گرفته و آب منتقل شده میان الکتروود

1 You  
2 Liu  
3 Wu

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon(1-s)x_{H_2O})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{u}_g x_{H_2O}) = \nabla \cdot (\rho_g D_{H_2O,eff} \nabla x_{H_2O}) + S_{H_2O} \quad (5)$$

کسر جرمی نیتروژن، از رابطه (۶) به دست می‌آید.

$$x_{n_2} = 1 - x_{O_2} - x_{H_2O} \quad (6)$$

در روابط فوق، چگالی حجمی مخلوط گازی، طبق رابطه (۷) محاسبه می‌شود:

$$\rho_g = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\rho_i}} \quad (7)$$

همچنین ضریب نفوذ مؤثر از رابطه (۸) محاسبه می‌شود. این رابطه به مدل بروگمن<sup>۱</sup> معروف است [۲۱].

$$D_{i,eff} = D_i (\varepsilon(1-s))^{1.5} \quad (8)$$

برای این که اثر، تغییر دما و فشار بر ضریب نفوذ، در نظر گرفته شود، از رابطه (۹) استفاده می‌شود [۲۱].

$$D_i = D_{i,ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{1.5} \left(\frac{P_{ref}}{P}\right) \quad (9)$$

لازم به ذکر است که در رابطه (۴) تبدیل فاز بخار آب در جملات چشمه برای معادله کسر جرمی بخار آب در نظر گرفته می‌شود. جمله چشمه تبدیل فاز، در معادله بقاء جرم مخلوط گازی (رابطه (۱)) نیز حضور دارد. سایر جملات چشمه در معادلات کسر جرمی اجزا، به دلیل انجام واکنش شیمیایی بوده که در ادامه تشریح می‌شوند.

جمله چشمه مربوط به تبدیل فاز از روابط (۱۰) و (۱۱) محاسبه می‌شود [۲۰].

$$S_{g-l} = h_{pc} (p^v - p^{sat}) \quad (10)$$

$$h_{pc} = \frac{k_c \varepsilon(1-s)x_{H_2O} M_{mix}}{2RT} \left[ 1 + \frac{|p^v - p^{sat}|}{p^v - p^{sat}} \right] + \frac{k_c \varepsilon s \rho_l}{2} \left[ 1 - \frac{|p^v - p^{sat}|}{p^v - p^{sat}} \right] \quad (11)$$

جمله اول در سمت راست رابطه (۱۱)، بیان‌کننده چگالش و جمله دوم بیان‌کننده تبخیر است.

فشار اشباع آب، از رابطه تجربی زیر که تطبیق مناسبی با داده‌های ترمودینامیکی و تجربی دارد، محاسبه می‌گردد [۲۰].

$$\log_{10} p^{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.15) - 9.1837 \times 10^{-5} (T - 273.15)^2 + 1.4454 \times 10^{-7} (T - 273.15)^3 \quad (12)$$

فشار محاسبه شده از این رابطه بر حسب اتمسفر می‌باشد [۱۴ و ۲۲].

در این روابط، جرم مولی مخلوط و فشار جزئی بخار آب، به ترتیب از روابط (۱۳) و (۱۴) محاسبه می‌شوند.

• پیل سوختی به صورت هم‌دما عمل می‌کند.

• عملکرد پیل سوختی در شرایط گذرا بررسی می‌شود.

مدلی که ارائه می‌شود از جمله مدل‌های جریان دوفاز دوسیال، محسوب می‌شود. که طی این مدل، یک معادله مجزا برای محاسبه مقدار کسر حجمی آب مایع (صرفاً در محیط متخلخل) حل می‌گردد. فرض اساسی در مدل ارائه شده، این است که مایع در محیط متخلخل، بر اثر نیروهای موینگی به حرکت درمی‌آید. در واقع مکانیسم حرکت بر اساس فشار موینگی است. به همین دلیل ابتدا معادلات حاکم بر مخلوط گازی به صورت کامل حل شده و سپس معادلات جریان آب مایع در محیط متخلخل، حل می‌شود (فرض می‌شود آب مایع در صورت ورود به کانال انتقال گاز، به بخار تبدیل می‌شود). معادلات جریان مخلوط گازی و آب مایع از طریق جملات چشمه مانند نرخ تبدیل فازها و همچنین حجم هر سلول که در اختیار هر فاز است، به یکدیگر مرتبط می‌شوند.

## ۲-۱- معادلات حاکم بر جریان دوفاز در پیل سوختی

در این مدل، اکسیژن، نیتروژن و بخار آب به عنوان مخلوط گازی در نظر گرفته شده و معادلات حاکم بر مخلوط گازی شامل بقاء جرم، مومنتوم و کسر جرمی اجزاء، حل می‌شوند. این معادلات به صورت زیر هستند. معادله بقاء جرم:

$$\frac{\partial(\varepsilon(1-s)\rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{u}_g) = S_m \quad (1)$$

در رابطه (۱) بردار سرعت ظاهری مخلوط گازی بوده و از طریق رابطه زیر به سرعت ذاتی مرتبط می‌شود [۱۶].

$$\bar{u}_g = \varepsilon(1-s)\bar{U} \quad (2)$$

در روابط (۱) و (۲)، s نسبت حجم آب مایع به کل حجم فضای خالی، در محیط متخلخل است. در کانال پیل سوختی، ضریب تخلخل برابر یک بوده (ε = ۱) و کسر حجمی آب مایع برابر صفر (s = ۰) است؛ بنابراین در این قسمت، سرعت ظاهری برابر سرعت واقعی است. با استفاده از این نکته می‌توان کانال‌های انتقال گاز، لایه پخش گاز و لایه کاتالیست را برای فاز گاز به صورت یکپارچه (تک دامنه) بررسی نمود.

معادله مومنتوم [۱۶ و ۱۹ و ۲۰]:

$$\frac{1}{\varepsilon(1-s)} \frac{\partial(\rho_g \bar{u}_g)}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon^2(1-s)^2} \nabla \cdot (\rho_g \bar{u}_g \bar{u}_g) = -\nabla p_g + \frac{1}{\varepsilon(1-s)} \nabla \cdot (\mu_g \nabla \bar{u}_g) - \frac{\mu_g}{K_g} \bar{u}_g \quad (3)$$

معادله کسر جرمی برای اجزاء اکسیژن و بخار آب، به ترتیب از روابط (۴) و (۵) محاسبه می‌شود:

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon(1-s)x_{O_2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \bar{u}_g x_{O_2}) = \nabla \cdot (\rho_g D_{O_2,eff} \nabla x_{O_2}) + S_{O_2} \quad (4)$$

مویبگی ( $P_c$ )، می‌تواند تعیین شود. فشار مویبگی، اختلاف فشار میان دوفاز در تماس با یکدیگر در بین دو سطح جامد بوده که در شرایطی که سطح مشترک دو سیال در تعادل (از نظر حرکت) باشد، به نیروهای کششی میان سیال و سطح جامد نیز بستگی دارد [۲۳]. فشار مویبگی در محیط متخلخل تابعی از کسر حجمی آب مایع می‌باشد ( $P_c = f(s)$ ) که طبق رابطه (۲۴) قابل محاسبه است [۱۴ و ۱۶ و ۱۸ و ۲۱].

$$P_c = \sigma \cos \theta_c \sqrt{\frac{\varepsilon}{K}} J(s) \quad (24)$$

در رابطه (۲۴)،  $J(s)$  تابع لورت بوده و به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۴].

$$J(s) = \begin{cases} 1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3, & \theta_c > 90 \\ 1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3, & \theta_c < 90 \end{cases} \quad (25)$$

پارامتر  $K_l$  در رابطه (۲۲) بر اساس رابطه (۲۶) تعریف می‌شود [۱۶].

$$K_l = K_{rl} K, \quad K_{rl} = s^3 \quad (26)$$

به صورت مشابه، پارامتر  $K_g$  که در رابطه (۳) بکار رفته است، طبق رابطه (۲۷) تعریف می‌شود [۱۶].

$$K_l = K_{rg} K, \quad K_{rg} = (1-s)^3 \quad (27)$$

شایان ذکر است که در برخی از مراجع برای قابلیت نفوذ نسبی از توان‌های دو و چهار استفاده می‌شود؛ اما توان سه بیشتر مورد استفاده قرار گرفته است. معادلات (۲۱) تا (۲۷) را می‌توان به طریقی ترکیب و منظم نمود تا کسر حجمی مایع ( $s$ ) را تعیین نمود [۱۴، ۱۶].

$$\frac{\partial(\rho_l \varepsilon s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \frac{\eta_g}{\eta_l} \frac{K_{rl}}{K_{rg}} \bar{u}_g) = \nabla \cdot (\rho_l D_c \nabla s) + S_{g-l} \quad (28)$$

شایان ذکر است که  $\bar{u}_g$  در حالت کلی از معادله (۳) به دست می‌آید، لیکن در استخراج معادله (۲۸)، از معادله دارسی ( $\bar{u}_g \approx -\frac{K_g}{\mu_g} \nabla p_g$ ) تقریب زده شده است.

در معادله (۲۸)، ضریب نفوذ مویبگی بوده و مطابق رابطه (۲۹) است [۱۴ و ۱۶].

$$D_c = -\frac{KK_{rl}}{\mu_l} \frac{dp_c}{ds} \quad (29)$$

جریان تولیدی از رابطه تافل<sup>۱</sup>، به صورت زیر تعیین می‌گردد [۱۵].

$$i^* = (1-s) i_o \frac{C_{o_2}^m}{C_{o_2,ref}^m} \exp\left(\frac{\alpha F \eta}{RT}\right) \quad (30)$$

که در رابطه (۳۰) چگالی جریان مرجع تبدالی  $i_o$  افت فعال‌سازی و  $C_{o_2}^m$  غلظت اکسیژن حل شده در غشا است.

در بعضی مراجع، برای اصلاح و در نظر گرفتن اثر تخلخل موجود در الکترودها، پیشنهاد شده است که جریان محاسبه شده از رابطه تافل را، در ضریبی به نام ضریب اصلاح اگلومرت<sup>۲</sup> ضرب شود [۲۵].

$$M_{mix} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{x_i}{M_i}} \quad (13)$$

$$p^v = x_{H_2O} \rho_g \frac{\bar{R}}{M_{H_2O}} T \quad (14)$$

دقت شود که این معادلات بر اساس کسر جرمی ارائه شده‌اند.

رابطه (۱۰) برای تبدیل فاز گاز به فاز مایع (فرایند چگالش) است؛ لذا برای معادله اجزاء که در فاز گازی قرار دارند، جمله چشمه باید به صورت  $-S_{g-l}$  در نظر گرفته شود. با توجه به توضیحات فوق، جملات چشمه ناشی از واکنش شیمیایی و تبدیل فاز، در مجموع به صورت زیر می‌باشند.

$$S_{O_2} = -\frac{i}{4F} M_{O_2} \frac{area_{CL}}{vol_{CL}} \quad (15)$$

$$S_{H_2O,1} = \frac{i}{2F} M_{H_2O} \frac{area_{CL}}{vol_{CL}} \quad (16)$$

$$S_{H_2O,2} = \beta \frac{i}{F} M_{H_2O} \frac{area_{CL}}{vol_{CL}} \quad (17)$$

$$S_{H_2O,3} = -S_{g-l} \quad (18)$$

$$S_{H_2O} = S_{H_2O,1} + S_{H_2O,2} + S_{H_2O,3} \quad (19)$$

مصرف جرم کلی برای مخلوط گازی، از رابطه (۲۰) محاسبه می‌شود.

$$S_m = S_{O_2} + S_{H_2O} \quad (20)$$

تا به اینجا معادلات ارائه شده همه برای مخلوط گازی، در کانال انتقال گاز و محیط متخلخل شامل لایه پخش گاز و لایه کاتالیست بوده است، حال معادلات حاکم بر مقدار آب مایع، ارائه می‌شود.

در این مطالعه فرض شده است که آب تولید شده توسط چشمه‌های  $S_{H_2O,1}$ ،  $S_{H_2O,2}$  به صورت بخار بوده و طی مکانیسم قید شده در روابط (۱۰) و (۱۱) (در صورتی که فشار جزء بخار از مقدار فشار اشباع بیشتر شود)، بخار آب چگالش یافته و در محیط متخلخل آب مایع تولید می‌گردد. معادله بقاء جرم برای آب مایع طبق رابطه (۲۱) می‌باشد [۱۴]:

$$\frac{\partial(\varepsilon s \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \bar{u}_l) = S_{g-l} \quad (21)$$

که  $\bar{u}_l$  سرعت آب مایع در محیط متخلخل می‌باشد، که از رابطه دارسی در محیط متخلخل، محاسبه می‌گردد [۱۶]:

$$\bar{u}_l = -\frac{K_l}{\mu_l} \nabla p_l \quad (22)$$

این رابطه سرعت فاز مایع را بر اساس گرادیان فشار موضعی آب مایع ( $p_l$ )، محاسبه می‌نماید.

فشار فاز مایع را می‌توان از رابطه (۲۳) محاسبه نمود.

$$p_l = p_g - p_c = f(s) \quad (23)$$

در این رابطه فشار گاز از حل معادلات مخلوط گاز (روابط (۱) و (۳))، محاسبه می‌شود؛ همچنین در صورتی که کسر حجمی آب مایع مشخص باشد، فشار

1 Tafel  
2 agglomerate

گرفته شده و معادلات ارائه شده برای آب مایع، فقط در محیط متخلخل حل گردیده است.

برای پیاده‌سازی واکنش شیمیایی، دو روش پیشنهاد می‌شود. در روش اول میزان شار جرمی واکنش‌دهنده‌ها به صورت شرط مرزی برای اجزا واکنش‌دهنده و محصولات، به مسئله اعمال شود؛ همچنین لایه کاتالیست بسیار نازک فرض می‌شود. در جریان دوفاز به روش مخلوط، از این روش بیشتر استفاده شده است. در روش دوم، مقادیر مصرف و تولید واکنش‌دهنده و محصولات به صورت جملات چشمه در معادلات اجزا، اعمال می‌شود. در این روش لایه کاتالیست دارای حجم بوده و به صورت مرز در نظر گرفته نمی‌شود. در اکثر پژوهش‌ها در لایه کاتالیست که در حدود چند میکرومتر بوده، فقط یک سلول محاسباتی در نظر گرفته می‌شود.

روش دوم لایه کاتالیست را جامع‌تر بررسی نموده و از نظر پیاده‌سازی عددی نیز آسان‌تر است. در این پژوهش نیز با توجه به معادلات ارائه شده در بخش قبل، از روش دوم استفاده شده است.

### ۳- روش عددی

معادلات ارائه شده در قسمت پیشین به همراه شرایط مرزی تشریح شده، با استفاده از روش حجم محدود گسسته شده‌اند و توسط یک برنامه نوشته شده به زبان برنامه‌نویسی فرترن ۹۰ حل گردیده است. برای ارتباط فشار و سرعت الگوریتم سیمپل که توسط پاتانکار، ارائه شده، به کار گرفته شده است.

شبکه مورد استفاده هم‌مکان بوده و برای جلوگیری از فشار نوسانی، از میان‌یابی راتو-چوی استفاده شده است. معادلات به صورت ضمنی و با استفاده از الگوریتم ماتریس سه قطری، حل شده‌اند. همچنین حل گذرا بوده و در هر زمان، خطای نسبی حداقل تا  $10^{-4}$  در زمان‌های ابتدایی و  $10^{-6}$  در سایر زمان‌ها، در نظر گرفته شده و بعد از همگرایی در هر زمان، به زمان بعد رفته تا جایی که جریان سیال پایا شود. برای گسسته‌سازی جملات گذرا، از روش اویلر (مرتب اول) و برای گسسته‌سازی جملات جابه‌جایی از روش هیبرید استفاده شده است.

برای شبکه‌بندی مناسب، استقلال از شبکه محاسباتی بررسی شده و شبکه محاسباتی بهینه  $24 \times 75$  بوده انتخاب شده و نتایج بر اساس آن، ارائه شده است (برای کاهش حجم مقاله، استقلال از شبکه محاسباتی ارائه نشده است). تعداد نقاط در نظر گرفته شده در راستای عمودی برای کانال برابر ۱۲، لایه پخش گاز برابر ۱۰ و لایه کاتالیست برابر ۲ (تعداد المان برابر ۱) است. فلوچارتی از روند حل در شکل ۱ ارائه شده است. زمان اجرا برنامه نوشته شده برای هر بار اجرا، تا رسیدن به شرایط پایا در حدود ۱۰ دقیقه است.

$$i = \theta_i^* \quad (31)$$

در رابطه (۳۱)،  $\theta$  یک ضریب تصحیح کمتر از یک می‌باشد که برای تطبیق بهتر منحنی قطبیت در نواحی افت غلظت بالا (چگالی جریان زیاد)، به کار می‌رود. برای محاسبه  $\theta$  از روابط (۳۲) الی (۳۵) استفاده می‌شود [۲۵].

$$\theta = \frac{\tanh M_T}{M_T} \quad (32)$$

$$M_T = L_{ct} \sqrt{\frac{k}{D_i^m}} \quad (33)$$

$$k(c_{O_2}^m) = \frac{i^*}{4F} \quad (34)$$

$$c_{O_2}^m = Hc_{O_2} \quad (35)$$

در رابطه (۳۲)  $H$  ثابت هنری، در رابطه (۳۴)  $L_{ct}$  طول مرجع (قطر) کره آگوموریت و  $M_T$  مدول تیل<sup>۲</sup> است. به این ترتیب جریان محاسبه شده از رابطه تافل، اصلاح می‌شود [۲۵].

ولتاژ متناظر جریان توایدی  $i$ ، از رابطه (۳۶) بدست می‌آید [۱۵].

$$V_{cell} = V_{oc} - \eta - R_{\Omega} i \quad (36)$$

### ۲-۲- شرایط مرزی

در ورودی کانال انتقال گاز، سیال با سرعت ثابت وارد می‌شود. در واقع بر اساس این که حداکثر چه میزان اکسیژن مصرف می‌شود، دبی هوا محاسبه می‌شود؛ اما برای این که اکسیژن در کانال به صورت کامل مصرف نشود، هوا چند برابر مقدار محاسبه شده بر اساس مقدار مصرف اکسیژن، وارد کانال می‌شود. در ورودی کسر جرمی اجزا، با توجه به رطوبت نسبی هوای ورودی و نسبت مشخص اکسیژن به نیتروژن در مخلوط هوا، محاسبه می‌شود. به عنوان مثال در این پژوهش هوا سه برابر مقدار محاسبه شده بر اساس حداکثر اکسیژن مصرف شده و با رطوبت نسبی ۱۰۰٪ وارد می‌شود.

در دیواره‌ها شرط عدم لغزش برای سرعت سیال، اعمال شده است. برای کسر جرمی اجزا نیز شرط غیرقابل نفوذ بودن، اعمال گردیده است. در خروجی، فشار برابر فشار کاری در نظر گرفته شده و برای سایر متغیرها، شرط توسعه یافتگی در نظر گرفته شده است. همچنین صحت اعمال این شرط مرزی، ارزیابی شده است.

در سطح تماس بین کانال و لایه پخش گاز، شرط مرزی در نظر گرفته نشده است. در معادله مومنتوم برای کانال انتقال گاز، قابلیت نفوذ عددی بسیار بزرگ و ضریب تخلخل برابر یک در نظر گرفته شده و در سایر قسمت‌ها که محیط متخلخل بوده و خواصی مانند قابلیت نفوذ و ضریب تخلخل، با توجه به مواد مورد استفاده، اعمال شده است. با این کار نیاز به شرط مرزی نبوده و به صورت یکسان همه نواحی، مورد بررسی قرار گرفته و حل می‌شود. کسر حجمی آب مایع در کانال انتقال گاز برابر صفر در نظر

1 Henry

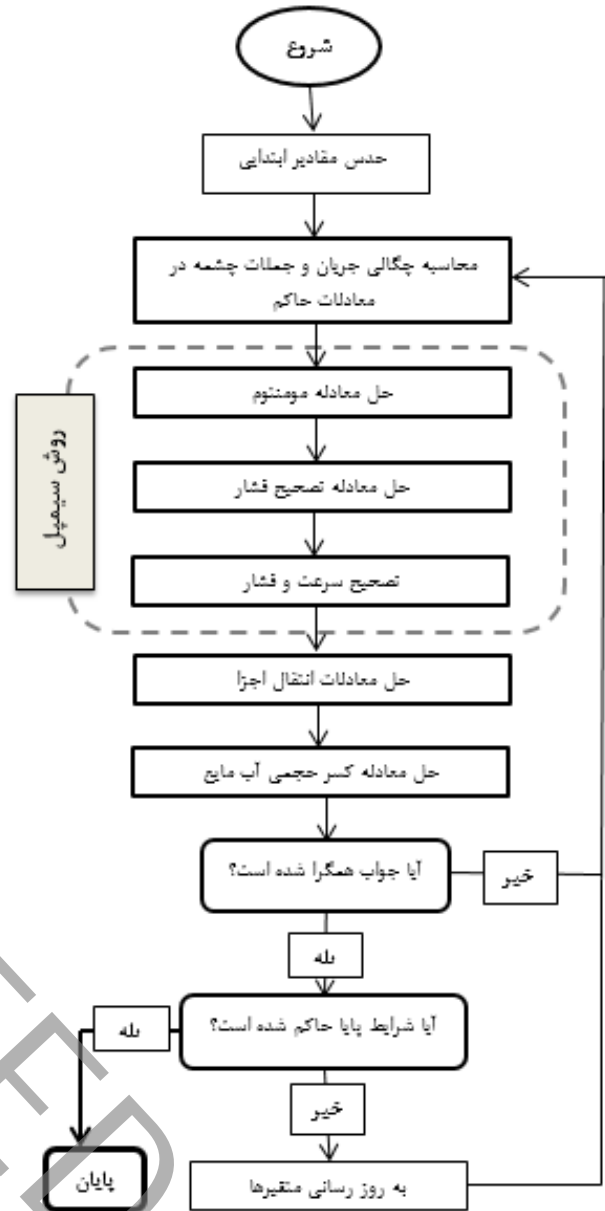
2 Thiele modulus

جدول ۱: پارامترهای طراحی و شرایط کاری پیل

مقدار	پارامتر
$0.07\text{m}$ [۱۵]	طول کانال
$7/62 \times 10^{-4}\text{m}$ [۱۵]	ارتفاع کانال
$2/54 \times 10^{-4}\text{m}$ [۱۵]	ضخامت لایه پخش گاز
$2/87 \times 10^{-5}\text{m}$ [۱۶]	ضخامت کاتالیست
$323\text{K}$ [۱۵]	دمای کاری پیل سوختی
$5\text{atm}$ [۱۵]	فشار کاری کاتد
$100\%$ [۱۵]	رطوبت نسبی هوای ورودی در سمت کاتد
$2$ [۱۶]	ضریب استوکیومتری در ورودی

جدول ۲: پارامترهای فیزیکی مورد استفاده

مقدار	پارامتر
$1/76 \times 10^{-11}\text{m}^2$ [۱۵]	قابلیت نفوذ لایه پخش گاز
$1 \times 10^{-14}\text{m}^2$ [۱۶]	قابلیت نفوذ لایه کاتالیست
$0.28$ [۱۶]	ضریب تخلخل لایه کاتالیست
$0.4$ [۱۵], [۱۶]	ضریب تخلخل لایه پخش گاز
$2/2 \times 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$ [۱۶]	ضریب نفوذ مرجع اکسیژن در گاز $D_{O_2,ref}$
$2/56 \times 10^{-5}\text{m}^2\text{s}^{-1}$ [۱۶]	ضریب نفوذ مرجع بخار آب در گاز $D_{H_2O,ref}$
$0.4$	ضریب انتقال در واکنش الکتروشیمیایی $\alpha$
$0.32$ [۹]	ثابت هنری برای اکسیژن
$45 \times 10^{-4}\text{A/m}^2$ [۱۶]	چگالی جریان تبدلی $i_0$
$55\ \Omega\text{cm}^2$ [۱۵]	مقاومت اهمی مؤثر
$3/39\text{molm}^3$ [۹]	غلظت مرجع اکسیژن حل شده در غشا
$0.2$ [۱۵ و ۹]	نرخ آب منتقل شده از آند به کاتد نسبت به پروتون تولید شده در آند
$110$ [۱۴ و ۲۰]	زاویه تماس در لایه پخش گاز
$95$ [۱۴ و ۲۰]	زاویه تماس در لایه کاتالیست
$0.067\text{N/m}$ [۱۴ و ۱۶ و ۲۰]	کشش سطحی
$0.0001\text{Pa}^{-1}\text{s}^{-1}$ [۱۴ و ۲۰]	نرخ تبخیر $k_e$
$1-5000$ [۱۴ و ۲۰]	نرخ چگالش $k_c$
$1 \times 10^{-6}\text{m}$ [۹]	طول مشخصه لایه کاتالیست $L_{cl}$



شکل ۱: فلوچارت روند حل مساله

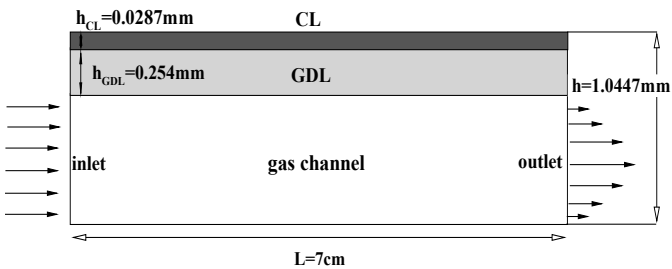
#### ۴- نتایج

در شکل ۲ مسئله مورد بررسی در حالت دو بعدی، نشان داده شده است. در سمت کاتد، جریان هوا در حالت اشباع (رطوبت نسبی ۱۰۰٪) با سرعت ثابت  $0.3\text{m/s}$  وارد پیل سوختی می‌شود. گازهای ورودی در دمای  $50^\circ\text{C}$  و فشار پنج اتمسفر در سمت کاتد وارد کانال می‌شوند.

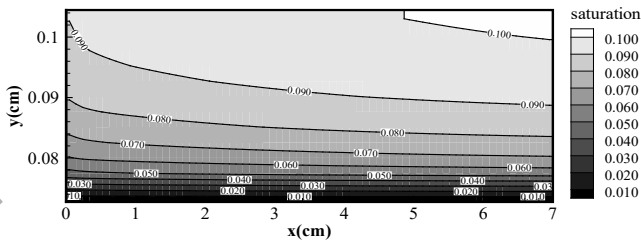
پارامتر و ضرایب مورد استفاده برای این مسئله، در جدول ۱ ذکر شده است. همچنین پارامترهای مورد نیاز برای طراحی پیل سوختی و شرایط کاری آن، در جدول ۲ ارائه شده‌اند.

#### ۴-۱- اعتبارسنجی نتایج عددی

برای اعتبارسنجی نتایج عددی، برای دمای کاری  $50^\circ\text{C}$ ، فشار کاری



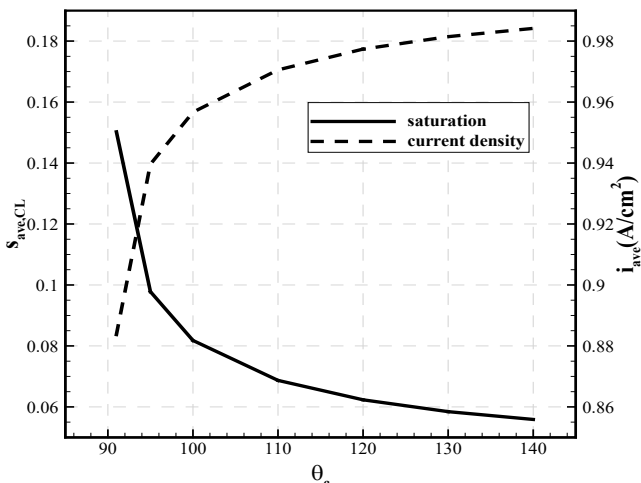
شکل ۲: شماتیکی از میدان محاسباتی



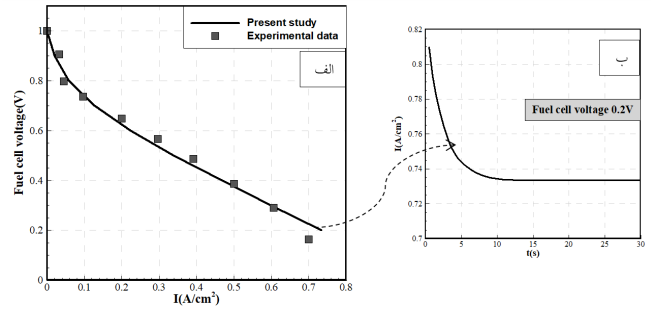
شکل ۴: توزیع کسر حجمی آب مایع در محیط متخلخل، برای زاویه تماس لایه پخش گاز  $\theta_c = 95^\circ$  ( $\nu = 0.167$ )

مایع بیشینه بوده و با حرکت در راستای کانال، مقدار کسر حجمی آب مایع افزایش می‌یابد.

در شکل ۵ اثر زاویه تماس در محیط متخلخل بر میزان آب مایع تولید شده در پیل سوختی مشاهده می‌شود. در شکل ۵ مشاهده می‌شود که اگر سطح آب‌گریز باشد، در زوایای بزرگتر از  $90^\circ$ ، با افزایش زاویه تماس لایه پخش گاز، متوسط کسر حجمی آب مایع در محیط متخلخل، از  $0.15$  در  $91^\circ$  درجه تا  $0.58$  در  $140^\circ$  درجه، کاهش می‌یابد و چگالی جریان متوسط، از  $0.88 \text{ A/cm}^2$  تا  $0.98 \text{ A/cm}^2$  افزایش خواهد یافت. لازم به ذکر است که در مورد زاویه تماس، باید آب‌گریز یا آب‌دوست بودن در نظر گرفته شود؛ اما در حالت کلی می‌توان بیان نمود که، با نزدیک شدن زاویه تماس به  $90^\circ$  درجه، اندازه فشار مویبندی کاهش یافته و ضریب نفوذ مویبندی در محیط متخلخل کاهش خواهد یافت؛ بنابراین آب تولید شده به دلیل تبدیل فاز بخار به مایع، در محیط متخلخل به میزان بیشتری انباشت می‌شود. در ارتباط با دلایل این موضوع در بخش‌های بعد بیشتر بحث خواهد شد.



شکل ۵: اثر زاویه تماس لایه پخش گاز بر روی مقدار آب مایع و چگالی جریان متوسط در لایه کاتالیست ( $\nu = 0.167$ )



شکل ۳ الف: نمودار قطبیت حاصل از حل عددی و اعتبارسنجی نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۶]. ب: تغییرات چگالی جریان در ولتاژ کاری  $0.2$  ولت در زمان‌های مختلف.

پنج اتمسفر و ضریب استوکیومتری دو برای اجزا در ورودی، نتایج عددی حاصل شده، در شکل ۳ با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۶] مقایسه شده است. با توجه به شکل ۳ مشاهده می‌شود تا محدوده ولتاژ کاری  $0.2$  ولت، نتایج جریان دوفاز، تطبیق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی مرجع [۲۶] دارد؛ بنابراین با استفاده از شبیه‌سازی جریان دوفاز، عملکرد پیل سوختی در بازه وسیعی از چگالی جریان‌های، قابل بررسی است. این در حالی است که در جریان تک فاز در چگالی جریان‌های زیاد، نتایج عددی تطبیق مناسبی با نتایج تجربی ندارند. همچنین نتایج چگالی جریان پیل سوختی بر حسب زمان، برای ولتاژ کاری  $0.2$  ولت، نیز نشان داده شده است؛ مشاهده می‌شود که در زمان حدود  $15$  ثانیه شرایط پایا حاکم می‌شود.

در ادامه به بررسی پارامترهای مهم در تولید آب مایع در الکتروکاتد پیل سوختی غشا پلیمری پرداخته می‌شود. در این بررسی‌ها از پارامترهای جدول ۱ و جدول ۲ استفاده شده و ولتاژ کاری  $0.16$  ولت، ضریب انتقال در کاتد  $\alpha = 0.58$  و سرعت ورودی واکنش‌دهنده‌ها برابر  $0.3 \text{ m/s}$  در نظر گرفته شده است.

#### ۴-۲- بررسی اثر زاویه تماس در لایه پخش گاز

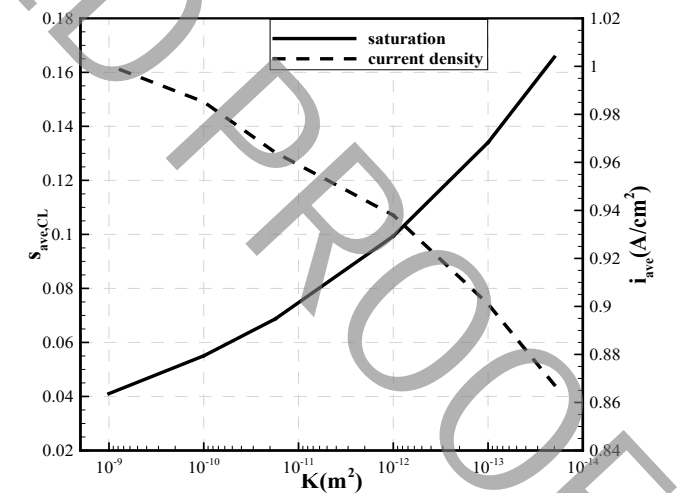
یکی از پارامترهای مهم در جریان دوفاز در محیط متخلخل برای پیل سوختی، زاویه تماس مایع با سطح جامد در محیط متخلخل است. در معادلات حاکم مشاهده شد که زاویه تماس در فشار مویبندی و ضریب نفوذ مویبندی برای آب مایع در محیط متخلخل، مؤثر است؛ بنابراین این پارامتر که از ویژگی‌های سطح ماده متخلخل به کار برده شده در پیل سوختی است، می‌تواند در توزیع آب مایع در محیط متخلخل، تأثیرگذار باشد. در بخش پیشین برای اعتبارسنجی نتایج عددی، زاویه تماس  $110^\circ$  درجه در لایه پخش گاز و  $95^\circ$  درجه در لایه کاتالیست، مورد استفاده قرار گرفت. در این بخش با ثابت در نظر گرفتن همه پارامترهای مورد استفاده، اثر زاویه تماس در لایه پخش گاز بررسی می‌شود. برای زاویه تماس  $95^\circ$  درجه در لایه پخش گاز، توزیع کسر حجمی آب مایع در محیط متخلخل مطابق شکل ۴ است. مشاهده می‌شود که در لایه کاتالیست مقدار کسر حجمی آب

### ۳-۴ بررسی اثر قابلیت نفوذ لایه پخش گاز

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های محیط متخلخل قابلیت نفوذ سیال در آن است. قابلیت نفوذ محیط متخلخل می‌تواند بر روی پروفیل سرعت و به دنبال آن بر روی کسر جرمی اجزا و میزان آب مایع در محیط متخلخل، اثر بگذارد. برای بررسی قابلیت نفوذ در لایه پخش گاز، پارامترهای تشریح شده در بخش پیشین مورد استفاده قرار گرفته و برای مقادیر مختلف قابلیت نفوذ، مقدار متوسط کسر جرمی آب مایع در لایه کاتالیست و چگالی جریان تولیدی، مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۶ این موضوع بررسی شده است. محور طولی لگاریتمی بوده تا بتوان تغییرات را بهتر بررسی نمود. مشاهده می‌شود که هر چقدر قابلیت نفوذ عدد کوچک‌تری باشد، مقدار متوسط کسر جرمی آب مایع تولید شده افزایش می‌یابد و چگالی جریان متوسط، کاهش می‌یابد. با تغییر قابلیت نفوذ از  $10^{-9} \text{ m}^2$  تا  $2 \times 10^{-14} \text{ m}^2$  میانگین کسر جرمی آب مایع در لایه کاتالیست از  $0/04$  تا  $0/16$  و چگالی جریان متوسط، از  $0/86 \text{ A/cm}^2$  تا  $1/005 \text{ A/cm}^2$  تغییر می‌کند. با کمتر شدن قابلیت نفوذ، اگر چه فشار مویبندی افزایش می‌یابد؛ اما قابلیت نفوذ آب مایع در محیط متخلخل کاهش خواهد یافت و آب مایع تولید شده در لایه کاتالیست، امکان نفوذ کمتری به سایر نقاط و کانال انتقال گاز را دارد.

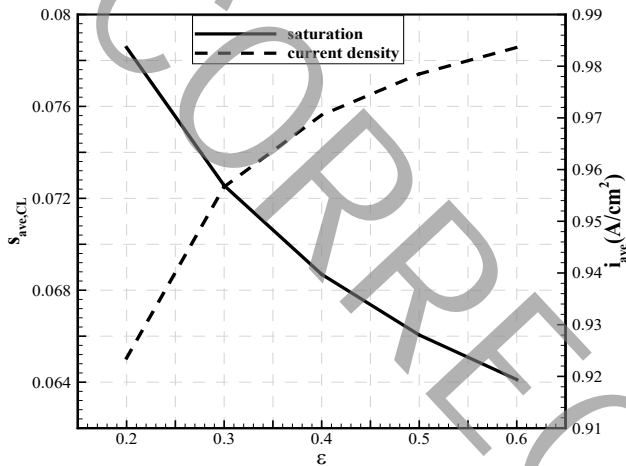
### ۴-۴ بررسی اثر ضریب تخلخل لایه پخش گاز

در محیط متخلخل نسبت حجم خالی به کل حجم، ضریب تخلخل نامیده می‌شود. این ضریب می‌تواند بر جریان سیال بسیار مؤثر باشد. ضریب تخلخل نه تنها بر ضرایب نفوذ اکسیژن و بخار آب، بلکه بر فشار مویبندی و ضریب نفوذ مویبندی آب مایع در محیط متخلخل نیز بسیار مؤثر است. در این بخش اثر ضریب تخلخل بر عملکرد پیل سوختی و مقدار آب مایع تولید شده، بررسی می‌شود. تغییرات چگالی جریان متوسط و مقدار

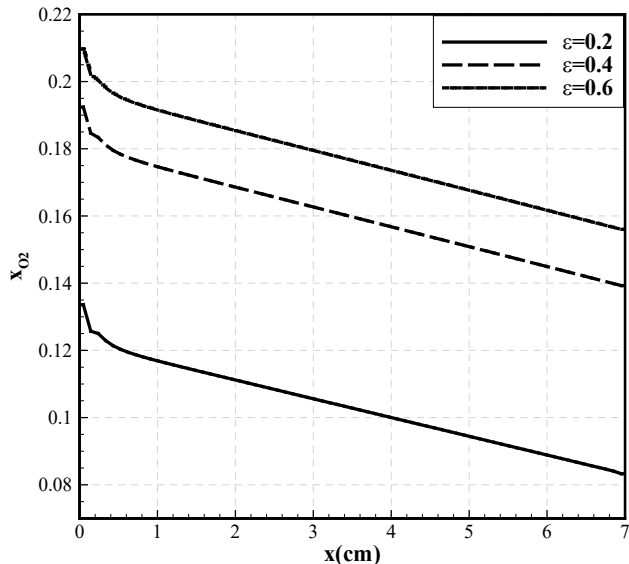


شکل ۶: اثر قابلیت نفوذ لایه پخش گاز بر روی مقدار آب مایع و چگالی جریان متوسط در لایه کاتالیست ( $\nu = 0/16V$ )

متوسط کسر جرمی آب مایع در لایه کاتالیست نسبت به ضریب تخلخل لایه پخش گاز، در شکل ۷ نشان داده شده است. همچنین برای بررسی کامل باید مقدار کسر جرمی اکسیژن در لایه کاتالیست را بررسی نمود. در شکل ۸ تغییرات کسر جرمی اکسیژن در لایه کاتالیست برای ضریب تخلخل  $0/2$ ،  $0/4$  و  $0/6$  نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش ضریب تخلخل، مقدار متوسط آب مایع تولید شده در لایه کاتالیست کاهش، چگالی جریان پیل افزایش و کسر جرمی اکسیژن در لایه کاتالیست کاهش می‌یابد. با افزایش ضریب تخلخل مقدار ضریب نفوذ اکسیژن افزایش می‌یابد و به همین دلیل به لایه کاتالیست مقدار اکسیژن بیشتری خواهد رسید، در

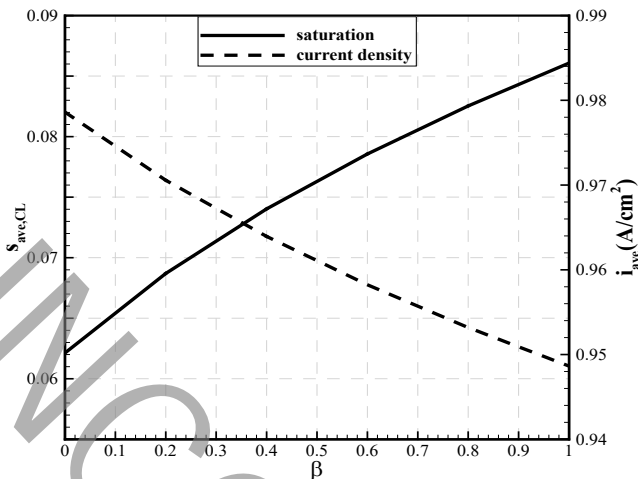


شکل ۷: اثر ضریب تخلخل لایه پخش گاز بر مقدار آب مایع و چگالی جریان متوسط در لایه کاتالیست ( $\nu = 0/16V$ )



شکل ۸: اثر ضریب تخلخل لایه پخش گاز بر کسر جرمی اکسیژن در لایه کاتالیست ( $\nu = 0/16V$ )



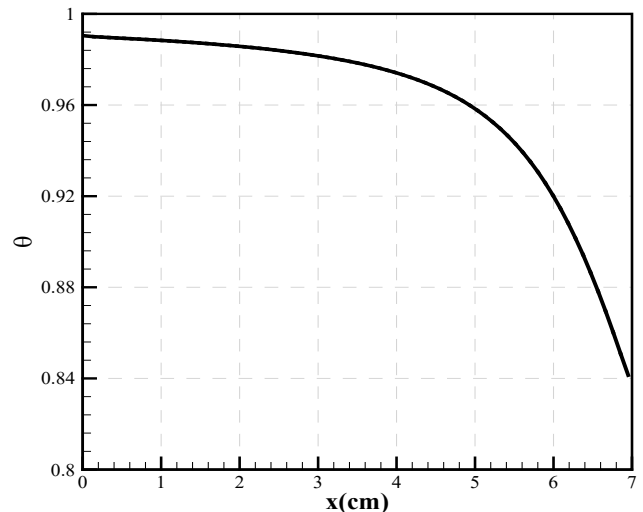


شکل ۱۰: اثر نرخ آب منتقل شده از غشا بر کسر حجمی آب مایع و چگالی جریان متوسط پیل سوختی در لایه کاتالیست ( $\nu = 0.167$ )

منتقل شده، امکان تبدیل فاز بخار به مایع افزایش می‌یابد. از طرف دیگر با افزایش مقدار آب مایع در لایه کاتالیست، چگالی جریان تولیدی نیز کاهش می‌یابد. تغییرات مشاهده شده در شکل ۱۰، برای میانگین کسر حجمی آب مایع و چگالی جریان متوسط پیل سوختی، تقریباً خطی است؛ میانگین کسر حجمی آب مایع در لایه کاتالیست از ۰/۰۶ در حالتی که بخار آب از آند منتقل نمی‌شود تا ۰/۰۸۵ تا زمانی که حداکثر مقدار آب از آند به کاتد منتقل می‌شود، تغییر می‌کند. لازم به ذکر است که با افزایش نرخ آب منتقل شده از غشا، زمان پایا شدن جریان سیال، تحت تأثیر قرار می‌گیرد و دیرتر این اتفاق رخ خواهد داد.

۴-۶- بررسی ضریب نفوذ موئینگی آب مایع ( $D_c$ ) در محیط متخلخل  
ضریب نفوذ موئینگی آب مایع در محیط متخلخل  $D_c$  تابعی از زاویه تماس آب مایع با سطح جامد در محیط متخلخل  $\theta_c$ ، قابلیت نفوذ  $k$  و ضریب تخلخل  $\varepsilon$  است. در بخش‌های پیشین اثر هر کدام از این پارامترها که مربوط به لایه پخش گاز بوده، بر مقدار آب مایع در محیط متخلخل و چگالی جریان پیل سوختی بررسی شد. در این بخش با توجه به تعریف  $D_c$ ، یک پارامتر ( $C_{diff}$ ) که دربرگیرنده اثرات همزمان کلیه پارامترهای  $k$ ،  $\theta_c$  و  $\varepsilon$  می‌باشد، در این مطالعه تعریف می‌شود:  $C_{diff} = (\varepsilon k)^{-1/5} \cos \theta_c$ . شایان ذکر است که پارامتر  $C_{diff}$  فقط تابع جنس لایه پخش گاز ( $\theta_c$ )،  $k$  و  $\varepsilon$  می‌باشد. به همین دلیل می‌توان گفت با بررسی پارامتر  $C_{diff}$ ، اثر جنس لایه پخش گاز در جریان دوفاز در پیل سوختی غشاء پلیمری، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در محاسبات انجام شده ضریب کشش سطحی همواره ثابت بوده و به همین دلیل در این پارامتر، وارد نشده است.

در شکل ۱۱ مقدار متوسط کسر حجمی آب مایع در لایه کاتالیست ( $s$ ) بر حسب  $C_{diff}$ ، ترسیم شده است. نتایج برای ولتاژهای کاری ۰/۱۶، ۰/۳ و



شکل ۹: ضریب اصلاح اگلومریت ( $\theta$ ) برای ضریب تخلخل لایه پخش گاز برابر ۰/۲ ( $\nu = 0.167$ )

انتهای کانال، مقدار کسر جرمی اکسیژن از ۰/۰۸۲ در ضریب تخلخل ۰/۲ تا ۰/۱۵۸ در ضریب تخلخل ۰/۶، تغییر می‌کند. از طرف دیگر با افزایش ضریب تخلخل، ضریب نفوذ موئینگی آب مایع در محیط متخلخل افزایش یافته و آب تولید شده، آسان‌تر می‌تواند به مکان دیگر (کانال انتقال گاز) منتقل شود؛ بنابراین مقدار متوسط آب مایع در لایه کاتالیست، کاهش می‌یابد. با توجه به توضیحات فوق، با کاهش مقدار متوسط کسر حجمی آب مایع و افزایش کسر جرمی اکسیژن، می‌توان انتظار داشت که چگالی جریان تولید شده، افزایش یابد که این موضوع در شکل ۷ مشاهده می‌شود.

زمانی که تغییرات اکسیژن شدید باشد، ضریب اصلاح اگلومریت اهمیت بیشتری دارد؛ به همین دلیل تغییرات ضریب اصلاح اگلومریت برای ضریب تخلخل ۰/۲ در شکل ۹، ارائه شده است. این ضریب در ابتدای کانال در حدود ۰/۹۸ بوده و در انتهای کانال، با مصرف اکسیژن، این ضریب تا ۰/۸۲ کاهش یافته است. این ضریب اصلاح در چگالی جریان‌های زیاد، مؤثر بوده و باعث کاهش مقدار چگالی جریان پیش‌بینی شده می‌شود.

#### ۴-۵- بررسی اثر نرخ آب منتقل شده از غشا

در پیل سوختی غشاء پلیمری، بر اثر گرادیان فشار در دو سمت غشا، نفوذ برگشتی ناشی از اختلاف غلظت و نیروی درگ الکترواستاتیک، مقداری آب از میان غشا از آند به سمت کاتد منتقل می‌شود. تا به اینجا نرخ آب منتقل شده از غشا به الکتروکاتد، متناسب با چگالی جریان و برابر ۰/۲ از نرخ واکنش تولید پروتون در سمت آند در نظر گرفته شده است. همچنین آب منتقل شده در فاز بخار بوده و در جملات چشمه برای کسر جرمی بخار آب، این موضوع در نظر گرفته شده است.

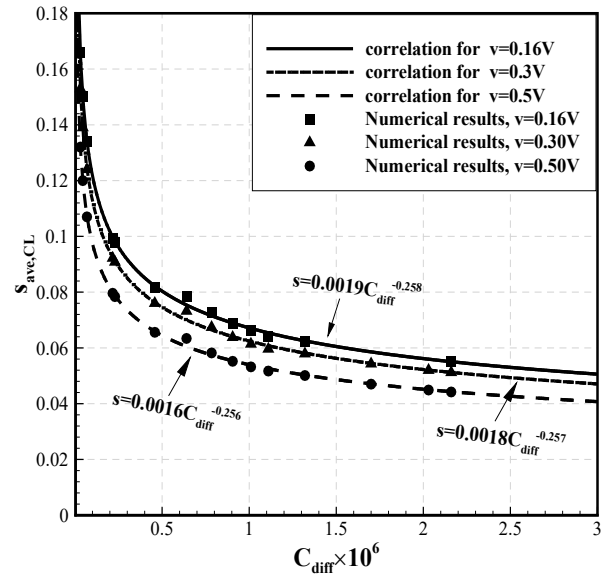
اثر نرخ آب منتقل شده از غشا بر روی عملکرد پیل سوختی و مقدار کسر حجمی آب مایع، در شکل ۱۰ نشان داده شده است. با افزایش نرخ آب

تولید شده بیشتر و چگالی جریان پیل سوختی کم‌تر خواهد شد؛ همچنین با افزایش این دو پارامتر، مقدار آب مایع تولید شده کمتر و چگالی جریان پیل سوختی بیشتر خواهد شد.

۳- در زوایای تماس نزدیک به قائم، مقدار آب مایع تولیدی بیشتر و چگالی جریان کمتر خواهد بود. در زوایای بزرگ‌تر، شدت تغییرات، کمتر خواهد شد.

۴- با افزایش نرخ بخار آب منتقل شده از غشا، مقدار آب مایع در پیل سوختی تقریباً به صورت خطی، افزایش و چگالی جریان کاهش می‌یابد.

۵- مهم‌ترین پارامتر در جریان دوفاز در پیل سوختی، ضریب نفوذ موینگی آب مایع در محیط متخلخل است. با افزایش ضریب نفوذ موینگی، مقدار آب مایع بیشتری به کانال انتقال گاز منتقل شده و مقدار آب مایع در لایه کاتالیست، کاهش می‌یابد. این پارامتر بر افت‌های غلظتی در پیل سوختی مؤثر است.



شکل ۱۱: بررسی اثر  $C_{diff}$  بر مقدار متوسط کسر حجمی آب مایع

۰/۵ ولت، ارائه شده است. در شکل ۱۱ مشاهده می‌شود که با افزایش  $C_{diff}$ ، مقدار متوسط آب مایع در لایه کاتالیست بصورت لگاریتمی کاهش می‌یابد. در مقادیر  $C_{diff}$  نزدیک به صفر، تغییرات بسیار شدید است و در مقادیر نزدیک به  $C_{diff} = 2$  تقریباً شیب ثابت می‌شود. در یک شرایط عملکردی مشخص پیل سوختی، می‌توان مقدار متوسط کسر حجمی آب مایع در لایه کاتالیست ( $s$ ) را بر حسب  $C_{diff}$  بصورت یک تابع توانی به شکل  $C_{diff} = a C_{diff}^{-b}$  تخمین زد. به عنوان مثال برای ولتاژ کاری ۰/۱۶ ولت، این تابع به صورت  $C_{diff} = ۰/۰۰۱۹ C_{diff}^{-۰/۲۵۸}$  که با استفاده از روش برازش منحنی حداقل مربعات، به دست آمده است. لازم به ذکر است که اگر چه این تابع فقط در شرایط کاری مشخصی صادق می‌باشد، اما یک بیش‌نمایی به نحوه تغییرات  $s$  بیان می‌نماید. برای سایر شرایط کاری مشاهده می‌شود که روند تغییرات  $s$  مشابه بوده و تنها تفاوت مربوط به ضرایب  $a$  و  $b$  در تابع  $C_{diff} = a C_{diff}^{-b}$  می‌باشد، بنابراین در سایر شرایط نیز می‌توان با استفاده از یک تابع توانی، مقدار متوسط کسر حجمی آب مایع در لایه کاتالیست را تخمین زد.

## ۵- جمع‌بندی

در این پژوهش به بررسی پارامترهای مؤثر بر عملکرد پیل سوختی با استفاده از شبیه‌سازی جریان دوفاز، پرداخته شد. نتایج به دست آمده را می‌توان در چند مورد، به صورت خلاصه بیان نمود.

۱- خواص محیط متخلخل از جمله قابلیت نفوذ، ضریب تخلخل و زاویه تماس آب مایع با سطح، بر مقدار آب مایع در پیل سوختی و عملکرد آن مؤثر است.

۲- در ضریب تخلخل‌های کوچک و قابلیت نفوذ کم، مقدار آب مایع

## فهرست علائم

$D$	ضریب نفوذ اجزا ( $m^2 s^{-1}$ )
$F$	ثابت فارادی ( $C mol^{-1}$ )
$H$	ثابت هنری
$h$	ارتفاع (ضخامت) ( $m$ )
$i$	چگالی جریان ( $A m^{-2}$ )
$i_0$	چگالی جریان تبدلی ( $A m^{-2}$ )
$J$	تابع لورت
$K$	قابلیت نفوذ ( $m^2$ )
$k$	ثابت واکنش
$k_c$	نرخ چگالش ( $s^{-1}$ )
$k_e$	نرخ تبخیر ( $Pa^{-1} s^{-1}$ )
$L$	طول مشخصه ( $m$ )
$M$	جرم مولکولی ( $kg mol^{-1}$ )
$M_T$	مدول تیل
$P$	فشار ( $kg m^{-1} s^{-2}$ )
$\bar{R}$	ثابت جهانی گازها ( $J(mol K)^{-1}$ )
$R_\Omega$	مقاومت اهمی ( $\Omega$ )
$S$	جملات چشمه ( $kg m^{-3} s^{-1}$ )
$s$	کسر حجمی آب مایع
$T$	دما (K)
$t$	زمان (s)
$U$	سرعت (سرعت واقعی در محیط متخلخل) ( $m s^{-1}$ )
$u$	سرعت (سرعت ذاتی) ( $m s^{-1}$ )
$v$	ولتاژ (V)
$x$	کسر جرمی اجزا

- [5] B. Rismanchi and M. H. Akbari, "Performance prediction of proton exchange membrane fuel cells using a three-dimensional model," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 33, no. 1, pp. 439–448, 2008.
- [6] K. W. Lum and J. J. McGuirk, "Three-dimensional model of a complete polymer electrolyte membrane fuel cell—model formulation, validation and parametric studies," *J. Power Sources*, vol. 143, no. 1, pp. 103–124, 2005.
- [7] J. E. Dawes, N. S. Hanspal, O. A. Family, and A. Turan, "Three-dimensional CFD modelling of PEM fuel cells: an investigation into the effects of water flooding," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 64, no. 12, pp. 2781–2794, 2009.
- [8] L. You and H. Liu, "A two-phase flow and transport model for the cathode of PEM fuel cells," *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 45, no. 11, pp. 2277–2287, 2002.
- [9] X. Liu, W. Tao, Z. Li, and Y. He, "Three-dimensional transport model of PEM fuel cell with straight flow channels," *J. Power Sources*, vol. 158, no. 1, pp. 25–35, 2006.
- [10] H. Meng, "A three-dimensional PEM fuel cell model with consistent treatment of water transport in MEA," *J. Power Sources*, vol. 162, no. 1, pp. 426–435, 2006.
- [11] Z. H. Wang, C. Y. Wang, and K. S. Chen, "Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells," *J. Power Sources*, vol. 94, no. 1, pp. 40–50, 2001.
- [12] H. Wu, P. Berg, and X. Li, "Non-isothermal transient modeling of water transport in PEM fuel cells," *J. Power Sources*, vol. 165, no. 1, pp. 232–243, 2007.
- [13] H. Wu, P. Berg, and X. Li, "Steady and unsteady 3D non-isothermal modeling of PEM fuel cells with the effect of non-equilibrium phase transfer," *Appl. Energy*, vol. 87, no. 9, pp. 2778–2784, 2010.
- [14] H. Meng, "Numerical investigation of transient responses of a PEM fuel cell using a two-phase non-isothermal mixed-domain model," *J. Power Sources*, vol. 171, no. 2, pp. 738–746, 2007.
- [15] M. K. Baboli and M. J. Kermani, "A two-dimensional, transient, compressible isothermal and two-phase model for the air-side electrode of PEM fuel cells," *Electrochim. Acta*, vol. 53, no. 26, pp. 7644–7654, 2008.
- [16] X. Liu, G. Lou, and Z. Wen, "Three-dimensional two-phase flow model of proton exchange membrane fuel cell with parallel gas distributors," *J. Power Sources*, vol. 195, no. 9, pp. 2764–2773, 2010.
- [17] C. Qin, D. Rensink, S. Fell, and S. M. Hassanizadeh, "Two-phase flow modeling for the cathode side of a polymer electrolyte fuel cell," *J. Power Sources*, vol. 197, pp. 136–144, 2012.

علائم یونانی	
$\alpha$	ضریب انتقال در واکنش الکتروشیمیایی
$\beta$	نسبت نرخ آب منتقل شده از غشاء به پروتون تولید شده
$\varepsilon$	ضریب تخلخل
$\eta$	افت فعال سازی (V)
$\theta$	ضریب اصلاح اگلومرت
$\theta_c$	زاویه تماس
$\mu$	لزجت دینامیکی ( $\text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$ )
$\rho$	چگالی ( $\text{kg m}^{-3}$ )
$\sigma$	کشش سطحی ( $\text{N m}^{-1}$ )
بالانویس‌ها	
$m$	غشاء (در جملات چشمه به مخلوط گازی اشاره دارد)
$sat$	حالت اشباع
$v$	بخار آب
زیرنویس‌ها	
$ave$	میانگین
$c$	مویبندی
$cl$	لایه کاتالیست
$eff$	مقدار مؤثر
$g$	گاز
$i$	اجزا
$l$	مایع
$r$	مقدار نسبی
$ref$	مقدار مرجع

## مراجع

- [1] H. Meng and C.-Y. Wang, "Model of two-phase flow and flooding dynamics in polymer electrolyte fuel cells," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 152, no. 9, pp. A1733–A1741, 2005.
- [2] H. Ju, C.-Y. Wang, S. Cleghorn, and U. Beuscher, "Nonisothermal modeling of polymer electrolyte fuel cells I. Experimental validation," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 152, no. 8, pp. A1645–A1653, 2005.
- [3] Q. Dong, M. M. Mench, S. Cleghorn, and U. Beuscher, "Distributed performance of polymer electrolyte fuel cells under low-humidity conditions," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 152, no. 11, pp. A2114–A2122, 2005.
- [4] E. Carcadea and R. Lazar, "A computational fluid dynamics analysis of a PEM fuel cell system for power generation," *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow*, vol. 17, no. 3, pp. 302–312, 2006.

- Soc., vol. 138, no. 8, pp. 2334–2342, 1991.
- [23] S. M. Hassanizadeh and W. G. Gray, “Thermodynamic basis of capillary pressure in porous media,” *Water Resour. Res.*, vol. 29, no. 10, pp. 3389–3405, 1993.
- [24] U. Pasaogullari and C. Y. Wang, “Liquid water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte fuel cells,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 151, no. 3, pp. A399–A406, 2004.
- [25] N. P. Siegel, M. W. Ellis, D. J. Nelson, and M. R. Von Spakovsky, “Single domain PEMFC model based on agglomerate catalyst geometry,” *J. Power Sources*, vol. 115, no. 1, pp. 81–89, 2003.
- [26] E. A. Ticianelli, C. R. Derouin, A. Redondo, and S. Srinivasan, “Methods to advance technology of proton exchange membrane fuel cells,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 135, no. 9, pp. 2209–2214, 1988.
- [18] N. Khajeh-Hosseini-Dalasm, K. Fushinobu, and K. Okazaki, “Three-dimensional transient two-phase study of the cathode side of a PEM fuel cell,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 35, no. 9, pp. 4234–4246, 2010.
- [19] H. Meng, “Multi-dimensional liquid water transport in the cathode of a PEM fuel cell with consideration of the micro-porous layer (MPL),” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 13, pp. 5488–5497, 2009.
- [20] H. Meng, “A two-phase non-isothermal mixed-domain PEM fuel cell model and its application to two-dimensional simulations,” *J. Power Sources*, vol. 168, no. 1, pp. 218–228, 2007.
- [21] T. Berning and N. Djilali, “A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 150, no. 12, pp. A1589–A1598, 2003.
- [22] T. E. Springer, T. A. Zawodzinski, and S. Gottesfeld, “Polymer electrolyte fuel cell model,” *J. Electrochem.*

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:

Please cite this article using:

P. Havaej, M. J. Kermani, H. Heidary, M. Abdollahzadeh, A parametric investigation of two phase flow in the cathode side of polymer electrolyte membrane fuel cell, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 51(4) (2019) 1-12.

DOI:

