

تحلیل عملکرد سامانه پیل سوختی غشا پلیمری در خودرو

ابراهیم افشاری*

استادیار، گروه مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان
em_afshari@yahoo.com

سیدعلی جزایری

استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی
jazayeri@kntu.ac.ir

* نویسنده مسئول/تاریخ دریافت: ۸۸/۱/۳۰ پذیرش نهایی مقاله: ۸۹/۱/۲۱

چکیده

در این مطالعه، یک نوع پیل سوختی غشا پلیمری برای کاربرد در خودرو تحلیل گردیده و در این راستا متغیرهای اثر گذار بر عملکرد پیل از قبیل درصد رطوبت، نرخ جریان، دما و فشار گازهای ورودی و همچنین مدیریت آب و حرارت که از چالش‌های اصلی این پیل‌ها می‌باشد، بررسی شده است. بدین منظور، معادلات پیوستگی، مقدار حرکت، بقا اجزاء، انرژی و شارژ به همراه روابط سینتیک الکتروشیمیایی در نواحی مختلف پیل به صورت الگوی تک ناحیه‌ای تدوین و به روش عددی حل شده‌اند و نمودارهای ولتاژ و چگالی توان بر حسب چگالی جریان پیل در شرایط عملکردی مختلف به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که افزایش فشار و دما در تمامی ولتاژهای خروجی پیل باعث بهبود عملکرد پیل می‌شود. در ولتاژهای خروجی بالا که تغییر فاز در پیل سوختی اتفاق نمی‌افتد، افزایش درصد رطوبت و کاهش نرخ جریان ورودی بر عملکرد پیل تأثیر مثبت می‌گذارد؛ اما در ولتاژهای خروجی پایین، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت و کاهش نرخ جریان کاهش می‌یابد. همچنین افزایش فشار، درصد رطوبت ورودی و نرخ جریان منجر به اتلاف بخشی از توان تولیدی پیل سوختی می‌گردد.

کلیدواژه‌ها: سامانه پیل سوختی، غشا پلیمری، خودرو، مدیریت آب و حرارت، شرایط عملکرد، شبیه‌سازی عددی

۱- مقدمه

پیل‌های سوختی همانند انباره‌ها و موتورهای احتراق داخلی، انرژی شیمیایی ذخیره شده در سوخت را می‌توانند به کار تبدیل کنند. بر خلاف انباره‌ها که طول عمر محدود دارند و بعد از مدت معینی از کار می‌افتند، تا موقعی که سوخت و اکسید کننده برای پیل‌های سوختی تأمین شود، تولید کار با آنها امکان‌پذیر است. در موتور احتراق داخلی ضمن فرایند آمیختگی هوا و سوخت و احتراق سریع، انرژی حرارتی آزاد می‌گردد. فقط بخشی از این انرژی حرارتی آزاد شده به دلیل محدودیت‌های مکانیکی و ترمودینامیکی در موتور می‌تواند به کار مکانیکی تبدیل و در اختیار خودرو قرار گیرد

که در بهترین شرایط در سیکل دیزل بازده حدوداً ۴۰٪ می‌باشد. با وجود اینکه در پیل‌های سوختی، بازگشت ناپذیری‌های داخلی شامل قطبش غلظتی، اهمی و فعال‌سازی وجود دارد اما در مقایسه با میزان بازگشت‌ناپذیری‌هایی که عمدتاً در فرایند احتراق در موتورهای احتراق داخلی وجود دارد، ناچیز می‌باشد. از این رو پیل سوختی می‌تواند زمینه استفاده بهینه را از سوخت فراهم نماید، ضمن آنکه آلودگی‌های محیط زیستی تولید شده نیز نسبت به موتورهای احتراق داخلی بسیار کمتر می‌باشد. امروزه استفاده از پیل‌های سوختی در خودروها رو به افزایش می‌باشد. پیل‌های سوختی غشا پلیمری با مشخصات بارزی از قبیل: بازده و چگالی توان بالا، دمای عملکرد پایین، کم بودن آلودگی صوتی و محیط زیستی، زمان راه‌اندازی کوتاه و الکترولیت جامد گزینه‌ای مطرح برای استفاده در خودروهای برقی به جای موتورهای احتراق داخلی و در سامانه‌های دورگه همراه با موتور احتراقی کوچک شده و انباره‌ها می‌باشند. بهای گران و چگالی توان نسبتاً پایین پیل سوختی، محدودیت‌های اصلی بهره‌گیری از آن به عنوان مولد قدرت در خودرو می‌باشد

عملکرد پیل از قبیل درصد رطوبت، نرخ جریان، دما و فشار گازهای ورودی و همچنین مدیریت آب و حرارت که از چالش‌های اصلی این پیل می‌باشد، بررسی شده است.

۲- پیل سوختی غشا پلیمری

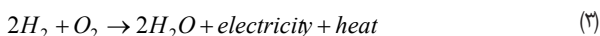
ساختمان و طریقه عملکرد این پیل در شکل (۱) نشان داده شده است. مجاری گاز به طور مداوم سوخت که عمدتاً هیدروژن ذخیره شده در مخازن تحت فشار و اکسید کننده که هوا می‌باشد، در سمت آند و کاتد تأمین می‌کنند. هیدروژن و هوا قبل از ورود به پیل مرطوب می‌شوند. هیدروژن از میان لایه پخش گاز آند که از کربن پارچه‌ای یا کربن کاغذی ساخته شده است به طرف کاتالیست آند پخش می‌شود. در لایه کاتالیست مولکول‌های هیدروژن به دو یون هیدروژن و دو الکترون تبدیل می‌شوند.



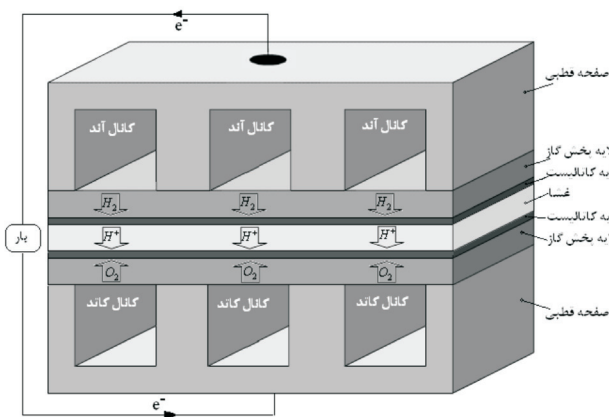
پروتون‌های (H^+) تولیدی از میان غشاء به طرف لایه کاتالیست کاتد حرکت می‌کنند. غشا رسانای الکترون نمی‌باشد و الکترون‌های آزاد شده در آند، از طریق مدار خارجی جریان پیدا می‌کنند و قبل از اینکه واکنش را تکمیل کنند کار مفید انجام می‌گیرند. در طرف کاتد، اکسیژن از میان لایه پخش گاز کاتد حرکت می‌کند و در سطح لایه کاتالیست با پروتون‌ها و الکترون‌ها واکنش انجام داده و آب تشکیل می‌شود.



واکنش کلی پیل که مجموع واکنش‌های (۱) و (۲) می‌باشد، گرمازا است و به صورت رابطه (۳) نوشته می‌شود.



برای تولید ولتاژ کافی برای استفاده در خودرو، چندین حجره به صورت ردیفی به هم متصل می‌شود و توده پیل سوختی را تشکیل می‌دهد.



شکل ۱ ساختمان و طریقه کار پیل سوختی غشا پلیمری [۲۲]

۳- سامانه پیل سوختی

یک توده پیل سوختی به تنهایی برای تولید توان مکانیکی در خودرو کافی نیست و نیاز به تجهیزات جانبی دارد. بنابراین سامانه پیل سوختی که شامل توده پیل سوختی و اجزاء جانبی آن می‌باشد، بایستی ارزیابی شود. در شکل (۲) نمایی از سامانه پیل سوختی هیدروژن/هوا که در مطالعه استفاده شده، ارائه گردیده است. اجزای جانبی شامل: 'تنجار' برای تهیه جریان هوا با فشار مطلوب ورودی به کاتد، منبسط کننده برای تولید توان

و تحقیقات وسیعی برای کاهش محدودیت‌ها همراه با کاهش قیمت انجام شده است. با وجود پیشرفت‌های چشمگیر در سال‌های اخیر برای بهبود عملکرد کلی پیل، چالش عمده در پیل سوختی غشا پلیمری، تغییر فاز و انتقال آب همراه با انتقال حرارت است. یعنی مدیریت آب و حرارت که متغیرهای کلیدی در عملکرد بهینه پیل سوختی می‌باشند. میزان آب در پیل سوختی با تراز کردن آب در حین عملکرد پیل کنترل می‌گردد. برای اطمینان از مناسب بودن هدایت یونی در الکترولیت پیل سوختی غشا پلیمری، نیاز به افزایش میزان آب غشا، بخصوص در چگالی جریان‌های بزرگ می‌باشد. هدایت قوی یونی الکترولیت، موقعی اتفاق می‌افتد که غشا کاملاً هیدراته باشد و این امر باعث افزایش بازده پیل سوختی می‌شود. اما اگر مقدار آب موجود در پیل از حد بهینه بیشتر باشد، آب چگالیده شده و آب مابع تخلخل‌های لایه پخش گاز را می‌تواند مسدود نماید و در نتیجه انتقال گازهای واکنشگر به لایه واکنشگر محدود گردیده و ولتاژ پیل کاهش می‌یابد. پدیده ایجاد شده را اصطلاحاً شناوری می‌نامند. اگر مقدار آب موجود در غشا کم شود منجر به کاهش هدایت یون‌ها و چسبندگی غشا به الکتروود می‌شود. عملکرد پیل با شرایط خشک، شدیداً طول عمر غشا را کم می‌کند. با توجه به محدودیت‌های اشاره شده، بررسی انتقال و تغییر فاز آب در پیل سوختی غشا پلیمری بسیار ضروری می‌باشد، همچنان که مدیریت حرارت نیز لازم می‌باشد [۱]. دمای بالا در پیل سوختی باعث خشک شدن غشا و در نتیجه باعث کاهش رسانایی یونی می‌شود، تنش‌های حرارتی نیز در این حالت زیاد شده و می‌تواند گسیختگی غشا را به همراه داشته باشد. دمای پایین نیز می‌تواند باعث کند شدن واکنش‌ها و در نتیجه افزایش افت‌های داخلی پیل شود. همچنین با کاهش دمای پیل، فشار اشباع نیز کاهش می‌یابد و تقطیر آب تشدید و شناوری پیش می‌آید [۲و۱]. بدین طریق پیل با محدودیت دمایی در دو جهت افزایش و کاهش رو به رو می‌باشد، ضمن اینکه کم بودن تغییرات دمای پیل نیز مطلوب است. همچنین مسائلی از قبیل شروع به کار پیل در خودرو در شرایط محیط (معمولاً دمایی پایین‌تر از دمای عملکرد بهینه پیل)، شرایط کاری مختلف خودرو و در نتیجه تغییرات زیاد دمای عملکرد پیل سوختی، اختلاف کم دمای پیل با محیط نسبت به موتور احتراق داخلی و در نتیجه مشکل بودن خنک‌سازی پیل و ترجیح بر استفاده از گازهای ورودی با درصد رطوبت پایین در خودرو به منظور مصرف پایین‌تر توان برای مرطوب‌سازی گازهای ورودی پیل، از مسائل بسیار مهم است و بررسی شرایط ورودی بر عملکرد پیل در خودرو را ضروری می‌سازد [۳-۵]. متغیرهای ورودی و عملکردی از قبیل: نرخ جریان جرم، درصد رطوبت، دما و فشار گازهای ورودی به منظور مدیریت آب و حرارت برای عملکرد بهینه پیل سوختی در خودروها به کار می‌روند.

مطالعات بسیاری [۲-۱۰] بر روی انواع مختلف پیل سوختی ارائه شده تا عملکرد پیل شامل مشخصات غشا و قطب‌ها، الکتروشیمی پیل و تأثیر دما، فشار و رطوبت ورودی بر عملکرد پیل سوختی را بررسی کنند. تحلیل‌های سامانه پیل سوختی در خودرو شامل بررسی استفاده از سوخت‌های مختلف به جای هیدروژن [۱۱]، بررسی سامانه‌های دورگه با کمک پیل سوختی به‌جای یا همراه با انباره [۱۲-۱۴]، تأثیر متغیرهای عملکردی مانند دما و فشار بر عملکرد سامانه [۱۵و۱۶]، بهینه‌سازی سامانه‌ها به منظور کاهش قیمت و وزن [۱۷] بوده است. در تحقیقات دیگر، نمودارهای جریان ولتاژ توده پیل سوختی برای کاربری در خودرو بررسی شده است [۱۸-۲۱]. در این مطالعات توده پیل سوختی بررسی شده است و هر تک حجره^۱ در پیل سوختی به دلیل پیچیدگی سامانه، زمان طولانی محاسبات و تأثیر حجره‌های مختلف بر یکدیگر با جزئیات بررسی نشده است و نویسندگان مجبور به اعمال فرضیات محدود کننده‌ای مانند تک فاز یا دما ثابت بودن پیل، بوده‌اند.

در این مقاله، یک الگوی دو بعدی پیل سوختی غشا پلیمری برای کاربرد در خودرو که شامل مجاری گاز، لایه‌های پخش گاز، لایه‌های واکنشگر و غشا می‌باشد با در نظر گرفتن رفتار دو فاز آب و تغییرات دما داخل پیل توسعه داده شده و متغیرهای مؤثر بر

معادلات بقا جرم، مقدار حرکت، اجزای شیمیایی، انرژی و شارژ الکتریکی می‌باشد، توسعه داده می‌شود.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (4)$$

در معادله (۴)، چگالی مخلوط گاز و مایع می‌باشد و از معادله (۵) به دست می‌آید [۲۳].

$$\rho = \rho_l s + \rho_g (1-s) \quad (5)$$

(1-s) نسبت حجم اشغالی گاز به حجم کل و s نسبت حجم اشغالی مایع به حجم کل است. این متغیر که به اشباع مایع معروف است به صورت (۶) تعریف می‌شود.

$$s = \frac{V_l}{V} \quad (6)$$

معادله بقا مقدار حرکت

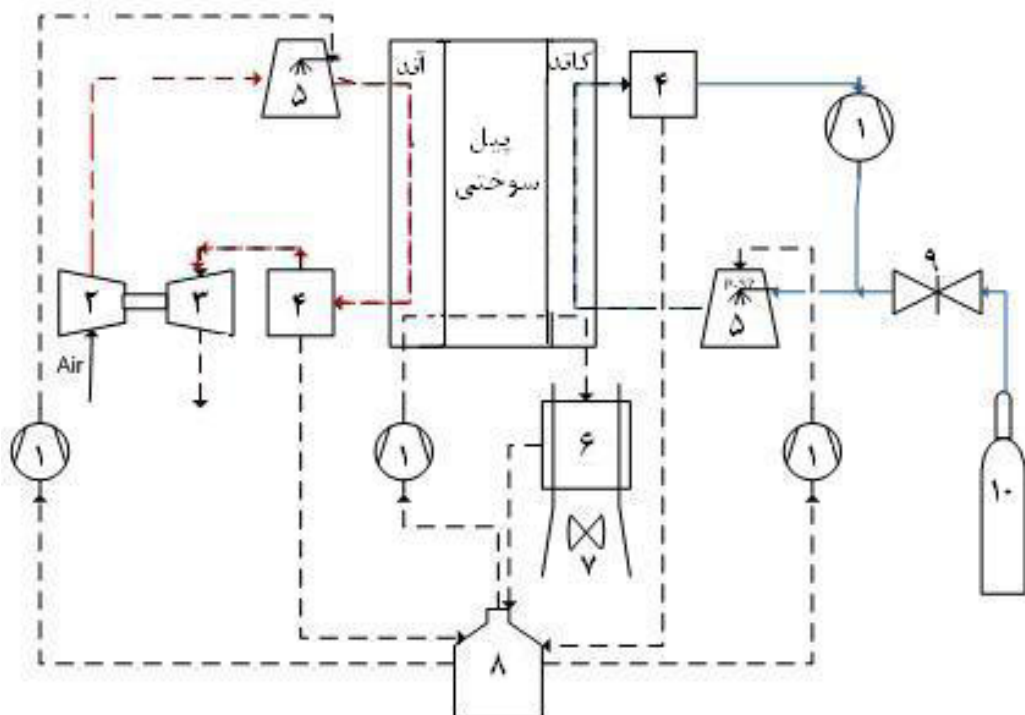
$$\frac{1}{\varepsilon} \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_{Darcy} \quad (7)$$

با فشار هوای بالای خارج شده از کاتد، مخزن فشار بالا برای ذخیره هیدروژن، تنظیم کننده^۲ برای شکستن فشار هیدروژن به فشار مورد نیاز پیل سوختی، مرطوب کننده گازهای هیدروژن و هوا، تلمبه برای به گردش در آوردن هیدروژن مصرف نشده در آند، تلمبه برای چرخش آب خنک کننده پیل سوختی، تلمبه‌هایی برای تأمین آب به منظور مرطوب‌سازی هوا و هیدروژن ورودی، مبدل حرارتی و یک پنکه برای به گردش در آوردن هوا در مبدل می‌باشد. توان مورد نیاز اجزای جانبی نیز باید در توده پیل سوختی تأمین شود.

۴- معادلات ریاضی

۴-۱- معادلات حاکم

به دلیل پیچیده بودن معادلات حاکم، در این مقاله یک الگوی دو بعدی برای تحلیل پیل سوختی در نظر گرفته شده است. همچنین فرض می‌شود مخلوط گازهای واکنشگر گاز کامل؛ جریان داخل مجراها دائم، آرام و تراکم ناپذیر؛ لایه‌های واکنشگر و غشا یکنواخت و همگن و گرانیوی مخلوط گاز ثابت و با استفاده از شرایط ورودی به دست می‌آید. به کمک معادلات مخلوط دو فاز (الگوی M^۲) [۲] الگوی پیل سوختی که شامل



- ۷- دمنده
- ۸- مخزن آب
- ۹- شیرفشار شکن
- ۱۰- مخزن هیدروژن

- ۱- پمپ
- ۲- کمپرسور
- ۳- منبسط کننده
- ۴- جدا کننده
- ۵- مرطوب کننده
- ۶- مبدل گرمایی

- خط هیدروژن
- خط هوا
- خط آب

شکل ۲ نمای سامانه پیل سوختی [۱۶]

1 - Compressor
2 - Regulator

عبارت چشمه در معادله بقا اجزاء ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی و زهکشی^۱ الکترو اسمزیک آب از آند به کاتد است، این عبارت برای اجزا واکنشگر (به غیر از آب) در لایه واکنشگر به صورت زیر است [۲].

$$S_k = -\frac{sto^i j}{nF} \quad (۱۸)$$

عبارت چشمه برای آب در لایه واکنشگر

$$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F} I \right) - \frac{sto^i j}{nF} \quad (۱۹)$$

عبارت چشمه برای آب در لایه غشا ناشی از زهکشی الکترو اسمزیک

$$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F} I \right) \quad (۲۰)$$

در این معادلات sto^i ضریب استوکیومتری واکنش‌های سمت آند و کاتد بوده و بر اساس نیم واکنش‌های پیل برای هیدروژن، اکسیژن و آب به ترتیب دارای مقادیر ۱، ۲ و ۱ می‌باشد.

معادله بقا شارژ:

$$\nabla \cdot (\kappa^{eff} \nabla \varphi_e) + S_e = 0 \quad (۲۱)$$

در این معادله عبارت چشمه برای انتقال جریان بین ماتریس جامد و فاز الکترولیت داخل هر کدام از لایه‌های واکنشگر کاتد و آند استفاده می‌شود.

$$S_e = j \quad (۲۲)$$

چگالی جریان انتقال در آند و کاتد به ترتیب با معادلات (۲۳) و (۲۴) بدست می‌آید [۲].

$$j_a = a i_0^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{RT} \cdot F \cdot \eta \right) \quad (۲۳)$$

$$\eta = \varphi_s - \varphi_e - U_o \quad (\varphi_s = 0, U_o = 0) \quad (۲۴)$$

این معادلات متعلق به واکنش اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن به ترتیب در لایه واکنشگر آند و کاتد می‌باشد. معادله سینتیکی اکسایش هیدروژن با خطی‌سازی معادله باتلر-ولمر با فرض سریع بودن واکنش و معادله کاهش اکسیژن با نادیده گرفتن واکنش آندی بدست می‌آید. مجموع ضرایب انتقال آند و کاتد، $a_a + a_c$ ، در واکنش آندی مساوی ۲ و ضریب انتقال کاتدی، a_c ، برابر ۱ می‌باشد. با فرض اینکه پتانسیل مدار باز مرجع در آند تابعی از دما و در کاتد صفر باشد، اضافه پتانسیل آند و کاتد به ترتیب به صورت رابطه (۲۵) است [۹].

$$\eta = \varphi_s - \varphi_e - U_o \quad (\varphi_s = 0, U_o = 0) \quad (۲۵)$$

$$\begin{cases} \eta = \varphi_s - \varphi_e - U_o \quad (\varphi_s = V_{cell}, U_o = 0) \\ = 1.23 - 0.9 \times 10^{-3} (T - 298.15) \end{cases} \quad (۲۶)$$

معادله انرژی

$$\nabla \cdot (\gamma_h \rho_c \mu T) = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + S_T \quad (۲۷)$$

برای برقراری پیوستگی جرم در فصل مشترک نواحی متخلخل و مجاری جریان، از سرعت‌های ظاهری در نواحی متخلخل استفاده می‌شود و خواص انتقالی اصلی با خواص انتقالی مؤثر اصلاح می‌شود. از این رو در معادلات مقدار حرکت یک عبارت چشمه در نواحی متخلخل برای اعمال قانون دارسی قرار می‌گیرد. عبارت چشمه در مجاری برابر صفر و ضریب تخلخل برابر ۱ می‌باشد.

$$S_{Darcy} = -\frac{\mu}{K} \bar{u} \quad (۸)$$

در این رابطه، μ گرانیوی مخلوط دو فاز می‌باشد و بر اساس الگوی M^2 محاسبه می‌شود [۲۳].

$$\mu = \rho \left[\frac{k_{rl}}{v_l} + \frac{k_{rg}}{v_g} \right]^{-1} \quad (۹)$$

k_{rg} و k_{rl} نفوذپذیری نسبی فاز مایع و گاز بوده و تابع S می‌باشند [۲۴].

$$k_{rl} = S^3 \quad \text{و} \quad k_{rg} = (1-S)^3 \quad (۱۰)$$

$$\nabla(\gamma^i \bar{u} C^i) = \nabla \left[\varepsilon D_g^{i,eff} (1-s) \nabla C_g^i \right] - \nabla \left[\left(\frac{mf_l^i}{M^i} - \frac{C_g^i}{\rho_g} \right) \bar{j}_l \right] + S_k \quad (۱۱)$$

در این معادله، C^i غلظت کل جزء i می‌باشد. چون فاز گاز و فاز مایع، میدان‌های جریان متفاوتی دارند انتقال اجزا در هر فاز با فاکتور جابجایی γ_c تصحیح می‌شود [۲].

$$\gamma_c = \begin{cases} \frac{\rho}{C^{H_2O}} \left(\frac{\lambda_l}{M^{H_2O}} + \lambda_g \frac{C^{H_2O}}{\rho_g} \right) & \text{for water} \\ \frac{\rho \lambda_g}{\rho_g (1-s)} & \text{for other species} \end{cases} \quad (۱۲)$$

λ_l و λ_g قابلیت تحرک نسبی فاز مایع و گاز می‌باشد [۲۳].

$$\lambda_k = \frac{k_{rk} / v_k}{\sum_k k_{rk} / v_k} \quad (۱۳)$$

زیر نویس k متعلق به مایع، l ، و گاز، g ، می‌باشد.

نسبت جرمی مخلوط به صورت (۱۴) تعریف می‌شود [۹].

$$\rho m f^i = \rho_g m f_g^i (1-s) + \rho_l m f_l^i s \quad (۱۴)$$

همچنین شار موین، J_l ، در معادله (۱۱) تابعی از فشار گاز و فشار مایع بوده که توسط معادله (۱۵) به دست می‌آید [۲].

$$J_l = \frac{\lambda_l \lambda_g}{v} K [\nabla p_c + (\rho_l + \rho_g) g] \quad (۱۵)$$

در رابطه بالا، P_c فشار موین است [۲۳].

$$p_c = \sigma \cos(\theta_c) \left(\frac{\varepsilon}{K} \right)^{1/2} J(s) \quad (۱۶)$$

همچنین $J(s)$ تابع Leverett نامیده می‌شود و بر اساس معادله تجربی (۱۷) بدست می‌آید [۲].

$$J(s) = \begin{cases} 1.417(1-s) - 2.120(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3, & \text{if } \theta_c < 90^\circ \\ 1.417s - 2.120s^2 + 1.263s^3 & \text{if } \theta_c > 90^\circ \end{cases} \quad (۱۷)$$

پخش آب در غشا نیز از معادله (۴۰) به دست می‌آید [۴].

$$D_m^{H_2O} = \begin{cases} 3.1 \times 10^{-7} \lambda (e^{0.28\lambda} - 1) e^{(-2346/T)} & 0 < \lambda \leq 3 \\ 4.17 \times 10^{-8} \lambda (1 + 161e^{-\lambda}) e^{(-2346/T)} & \lambda > 3 \end{cases} \quad (40)$$

غلظت آب تعادل در غشا با معادله (۴۱) محاسبه می‌شود.

$$C_m^{H_2O} = \frac{\rho_{dry,m} \lambda}{EW} \quad (41)$$

چون پتانسیل فاز الکترولیت و هدایت پروتونی غشا با استفاده از چگالی جریان موضعی به دست می‌آید، چگالی جریان متوسط با انتگرال‌گیری از چگالی جریان موضعی روی غشا حاصل می‌شود.

$$I = -\kappa^{eff} \nabla \varphi_e \quad (42)$$

$$I_{ave} = \frac{1}{A_m} \int IdA \quad (43)$$

با مشخص شدن نمودار عملکرد، توان پیل سوختی (\dot{W}_{fc}) را می‌توان بر حسب ولتاژ و جریان پیل بیان کرد.

$$\dot{W}_{fc} = V \times i \quad (44)$$

اگر دو الگوی پیل سوختی با شرایط یکسان ولی با مساحت سطح فعال متفاوت با هم مقایسه شوند، در هر دو الگو، بازده پیل سوختی برای یک جریان جرم بر مساحت فعال مشخص، برابر و یکسان است. یعنی مساحت سطح فعال یک متغیر ارزیابی پیل سوختی می‌باشد.

$$i = I \times A \quad (45)$$

I چگالی جریان و A مساحت سطح فعال پیل می‌باشد. توان را می‌توان بر حسب چگالی جریان نیز بیان نمود.

۴-۲- شرایط مرزی

معادلات ۴، ۷، ۱۱، ۲۱ و ۲۷ یک دستگاه از معادلات حاکم برای حل ۶ مجهول u ، $e\varphi$ ، C^k ، v ، p ، T را تشکیل می‌دهند (C^k ، غلظت اکسیژن، هیدروژن، آب و نیتروژن می‌باشد). به منظور سادگی، یک الگوی دو بعدی پیل سوختی در نظر گرفته شده که دامنه شبیه‌سازی و شبکه‌بندی این دامنه برای حل عددی در شکل (۳) نشان داده شده است. برای حل معادلات نیاز به مشخص شدن شرایط مرزی مناسب می‌باشد. در این مقاله از روش تک ناحیه‌ای استفاده شده است، بنابراین فقط شرایط مرزی بیرونی (خط چین‌ها در شکل (۳)) باید مشخص شود و نیاز به شرایط مرزی بین لایه‌های مختلف پیل نمی‌باشد.

الف) مرزهای ورودی گازها: سرعت ورودی آند و کاتد با استفاده از نسبت استوکیومتری تعیین می‌شود [۲۵].

$$S_a = C_{H_2,in} u_{a,in} \frac{2F}{I_{ref}} \frac{A_{a,in}}{A_{react}} \quad (46)$$

$$S_c = C_{O_2,in} u_{c,in} \frac{4F}{I_{ref}} \frac{A_{c,in}}{A_{react}} \quad (47)$$

عبارت چشمه در معادله انرژی شامل حرارت‌های ایجاد شده در اثر واکنش، افت‌های اهمی و تغییر فاز آب است [۲۱].

$$S_T = j(\eta + T \frac{dU_0}{dT}) + \frac{I^2}{\kappa^{eff}} + h_{fg} \dot{m}_{fg} \quad (28)$$

در لایه واکنشگر

در غشا:

$$S_T = \frac{I^2}{\kappa^{eff}} + h_{fg} \dot{m}_{fg} \quad (29)$$

در لایه پخش گاز و مجرا:

$$S_T = h_{fg} \dot{m}_{fg} \quad (30)$$

h_{fg} گرمای نهان چگالش یا تبخیر و \dot{m}_{fg} نرخ جریان جرم به دلیل تغییر فاز است [۲۵].

$$\dot{m}_{fg} = \nabla \cdot (\rho_l \bar{u}_l) = \nabla \cdot (J_l + \lambda_l \rho u) \quad (31)$$

عامل جابجایی در معادله انرژی به دلیل اختلاف میدان‌های فاز گاز و مایع است و به صورت معادله (۳۲) می‌باشد [۲۵].

$$\gamma_h = \frac{\rho(\lambda_l c_{p,l} + \lambda_g c_{p,g})}{s \rho_l c_{p,l} + (1-s) \rho_g c_{p,g}} \quad (32)$$

خواص فیزیکی

هدایت پروتون (k) و ضریب زهکشی الکترو اسمزیک آب (n_d) با استفاده از ظرفیت غشا (x) که خود تابعی از فعالیت آب (a) است، به دست می‌آید [۴].

$$\begin{cases} \kappa_m = (0.0005139\lambda - 0.000326) \\ \exp(1268.0(\frac{1}{303} - \frac{1}{T})) \end{cases} \quad (33)$$

$$n_d = \begin{cases} 1.0 & \text{for } \lambda \leq 14 \\ 1.5/8(\lambda - 14) + 1.0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (34)$$

ظرفیت غشا و فعالیت آب نیز از معادلات (۳۵) و (۳۶) به دست می‌آید [۲].

$$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 & \text{for } 0 < a \leq 1 \\ 14 + 1.4(a - 1) & \text{for } 1 < a \leq 3 \end{cases} \quad (35)$$

$$a = \frac{C_g^{H_2O} RT}{P_{sat}} \quad (36)$$

هدایت پروتونی مؤثر لایه‌های واکنشگر آند و کاتد نیز با معادله (۳۷) به دست می‌آید [۲].

$$\kappa_{cat}^{eff} = \varepsilon_{mc}^{1.5} \kappa_m \quad (37)$$

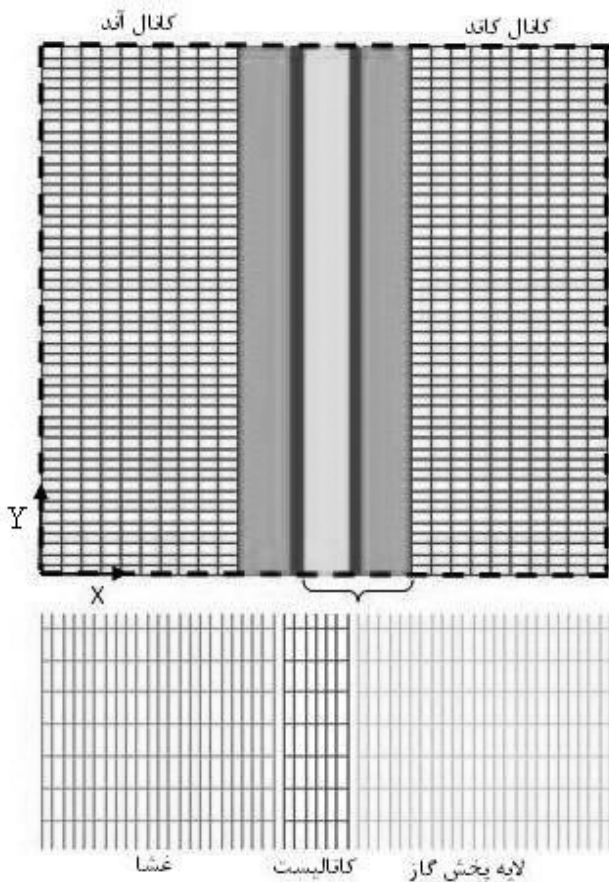
ضریب پخش جرم جزء k ام در مجاری آند و کاتد تابعی از دما و فشار است. در نواحی متخلخل، ضریب پخش با استفاده از ضریب تخلخل اصلاح می‌شود [۴].

در مجرای جریان:

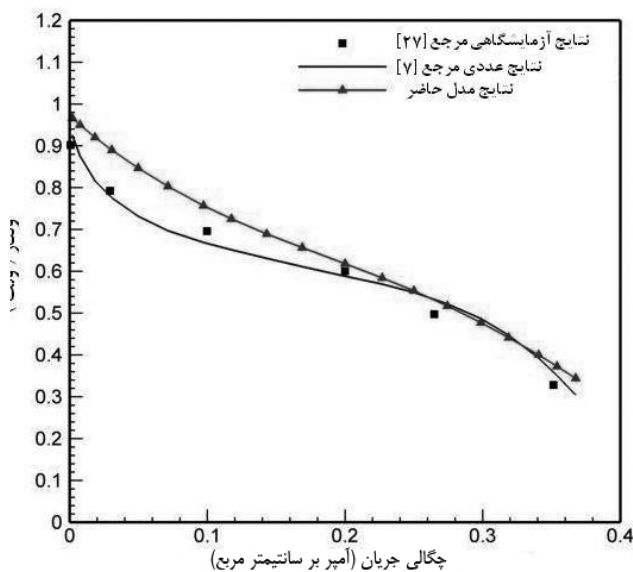
$$D_k = D_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \left(\frac{P_0}{P}\right) \quad (38)$$

در ناحیه متخلخل:

$$D_k^{eff} = \varepsilon^{1.5} D_k \quad (39)$$



شکل ۳ دامنه محاسباتی، شبکه بندی و مرزهای بیرونی (خط چین‌ها) به منظور اعمال شرایط مرزی بر روی آنها



شکل ۴ مقایسه نمودار قطبش با نتایج آزمایشگاهی و مرجع [۷]

غلظت مولی اجزاء به وسیله فشار و رطوبت نسبی گازهای ورودی و کمک قانون

$$C_{a,in}^{H_2O} = RH_{a,in} \frac{P_{sat}}{P_{a,in}} \frac{P_{a,in}}{RT_{a,in}} \quad (48)$$

$$C_{c,in}^{H_2O} = RH_{c,in} \frac{P_{sat}}{P_{c,in}} \frac{P_{c,in}}{RT_{c,in}} \quad (49)$$

دمای گازهای ورودی نیز برابر دمای عملکرد پیل می‌باشد.

ب) مرزهای خروجی گازها: شرایط مرزی سرعت، اجزاء و دما در خروجی به صورت کاملاً توسعه یافته در نظر گرفته می‌شود.

ج) دیوارها: بر روی دیوارها شرط عدم لغزش برای سرعت، شرط دما ثابت برای دیوارهای مجاری و شرط شار صفر برای دیگر معادلات به کار می‌رود.

۴-۳- روش حل

به منظور شبیه‌سازی عددی پیل سوختی می‌توان از روش تک ناحیه‌ای و یا روش چند ناحیه‌ای استفاده کرد. در الگوی چند ناحیه‌ای، دامنه محاسباتی به چند زیر دامنه تقسیم می‌شود و در هر زیر دامنه، مجموعه‌ای از معادلات بقا حل می‌شود. برای حل این معادلات و ارتباط آنها با یکدیگر، به شرایط مرزی بین نواحی مختلف پیل نیاز می‌باشد. اما بسیاری از این شرایط مرزی به طور واضح مشخص نیستند و از این رو جواب‌های بدست آمده از حل معادلات نیز دقیق نمی‌باشد. علاوه بر این چون در هر ناحیه تعدادی معادله متعلق به همان ناحیه نوشته می‌شود و این معادلات با شرایط مرزی به یکدیگر مربوط می‌شوند مساله بسیار پیچیده می‌شود. در روش تک ناحیه‌ای، فقط تعدادی معادله بقا در تمام نواحی پیل سوختی به کار می‌رود. در این روش، نیازی به مشخص کردن شرایط مرزی در فصل مشترک بین نواحی نمی‌باشد و شرایط مرزی فقط در سطح بیرونی پیل مورد نیاز است. با به کار بردن روش تک ناحیه‌ای ممکن است یک معادله در ناحیه‌ای خاص از پیل برقرار نباشد، ولی برای اجتناب از اعمال معادلات متفاوت در هر ناحیه، می‌توان در روش عددی با اعمال عبارت چشمه بزرگ و تعیین خواص فیزیکی آن ناحیه، تمام معادلات را به‌طور یکسان در تمام نواحی به کار برد. به عنوان مثال به دلیل عدم نفوذ اکسیژن به داخل غشا، معادله بقا اکسیژن فقط باید در سمت کاتد حل شود و در سمت آند نیازی به حل کردن این معادله نمی‌باشد. اما برای اینکه در هر ناحیه معادله‌ای جداگانه حل نشود این معادله در ناحیه آند نیز حل می‌شود [۲۶]. با انتخاب روش تک ناحیه‌ای، معادلات حاکم بر پیل سوختی همراه با شرایط مرزی مشخص شده به روش حجم محدود گسسته شده و با استفاده از نرم‌افزاری به زبان فرترن، حل شده‌اند. در این نرم‌افزار، میدان‌های سرعت و فشار با استفاده از قاعده سیمپل به دست آمده‌اند [۲۶]. 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، به هم متصل بودن آنها می‌باشد.

برای شبکه بندی الگوی مورد نظر، از یک شبکه مستطیلی با ۲۵۰ گره در راستای Y و تعداد ۵۰، ۳۰، ۱۰ و ۶۰ گره در هر کدام از نواحی مجرا، لایه پخش گاز، لایه کاتالیست و لایه غشا استفاده شده است. تعداد گره‌ها طوری تنظیم شده که نتایج الگوی عددی مستقل از تعداد شبکه شود. شبکه مذکور در راستای طولی یکنواخت ولی در راستای ضخامت به دلیل ضخامت بسیار کم لایه‌های الکترولیت، کاتالیست و لایه پخش گاز، غیر یکنواخت می‌باشد.

۵- نتایج

۵-۱- صحت‌گذاری الگوی عددی

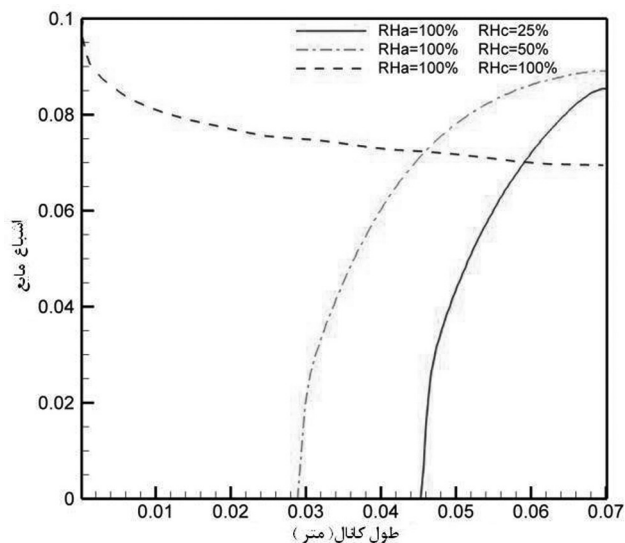
برای اطمینان از صحت شبیه‌سازی، نمودار عملکرد پیل سوختی با نتایج آزمایشگاهی [۲۷] و نتایج عددی مرجع [۷] مقایسه شده است. شرایط شبیه‌سازی مشابه شرایط آزمایشگاهی است که سوخت و هوای خشک با دمای ۵۰ درجه سلسیوس وارد پیل سوختی می‌شود. شکل (۴) بیان‌کننده توافق خوبی بین نتایج به‌دست آمده از الگوی حاضر و نتایج آزمایشگاهی است، در صورتی که حداکثر اختلاف ۱۷٪ می‌باشد. علت این اختلاف، دو بعدی بودن الگوی حاضر است که انتقال جرم در زیر صفحات جمع‌کننده را نشان نمی‌دهد. اما در چگالی جریان‌های قوی، نتایج حاضر نسبت به مرجع [۷] با نتایج آزمایشگاهی نزدیک‌تر است، زیرا الگوی حاضر دو فاز است و تأثیر شناوری بر عملکرد پیل نیز در نظر گرفته شده است.

۵-۲- تأثیر مرطوب‌سازی گازهای ورودی

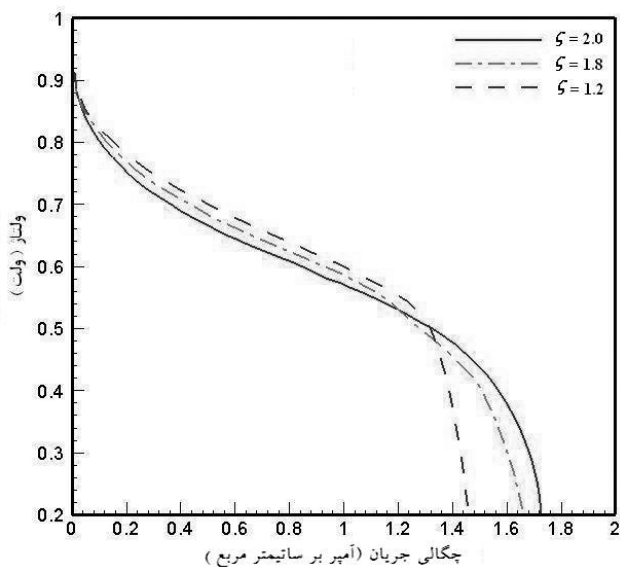
برای اطمینان از هیدراته بودن و کمینه‌شدن افت اهمی غشا، در بعضی الگوهای پیل سوختی، سوخت و هوای کاملاً مرطوب وارد مجاری آند و کاتد می‌شود. در این وضعیت گاز داخل الکتروکود کاتد در حین عملکرد پیل می‌تواند فوق اشباع شود و حتی در چگالی جریان‌های ضعیف نیز ممکن است شناوری اتفاق افتد. همچنین هزینه‌های تجهیزات مرطوب‌سازی گازهای ورودی و توان مصرفی نیز به سامانه تحمیل می‌شود. اخیراً در صنعت، تمایل بر استفاده از رطوبت نسبی کم در ورودی کاتد می‌باشد. در این بخش تأثیر مرطوب‌سازی گازهای ورودی با در نظر گرفتن آند کاملاً مرطوب (RH_a=۱۰۰٪) و رطوبت نسبی کاتد از وضعیت رطوبت کم (RH_c=۲۵٪) تا وضعیت کاملاً مرطوب (RH_c=۱۰۰٪) بر عملکرد پیل بررسی می‌شود. در همه موارد دما، فشار و ضریب استوکیومتری گازهای ورودی پیل به ترتیب برابر ۳۵۳ کلوین، ۱،۵ اتمسفر و ۲ است. متغیرهای هندسی و فیزیکی پیل سوختی شبیه‌سازی شده در جدول (۱) آورده شده است. شکل (۵) اشباع آب مایع در فصل مشترک لایه واکنشگر/لایه پخش گاز کاتد را در سه وضعیت مختلف درصد رطوبت، نشان می‌دهد. موقعی که غلظت آب از غلظت اشباع بیشتر می‌شود، آب چگالیده شده و مایع تشکیل می‌شود. در وضعیتی که گازهای ورودی کاملاً مرطوب هستند، چگالش از ابتدای مجرا شروع و در سرتاسر لایه پخش گاز کاتد، آب مایع تشکیل می‌شود. آب مایع با بستن تخلخل‌های لایه پخش گاز، باعث شناوری این لایه می‌گردد. شناوری مانع رسیدن اکسیژن به لایه واکنشگر می‌شود و در نتیجه نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی کاهش می‌یابد و عملکرد پیل افت پیدا می‌کند. در شرایطی که اکسیژن ورودی به کاتد کاملاً مرطوب نیست، چگالش در نزدیکی خروجی شروع می‌شود، مقدار آب مایع و مکان شروع چگالش به درصد رطوبت ورودی وابسته است. با افزایش درصد رطوبت ورودی کاتد، چگالش از مکانی نزدیک‌تر به ورودی شروع شده و تا انتهای لایه پخش گاز ادامه پیدا می‌کند.

جدول ۱ متغیرهای پیل سوختی [۲۵]

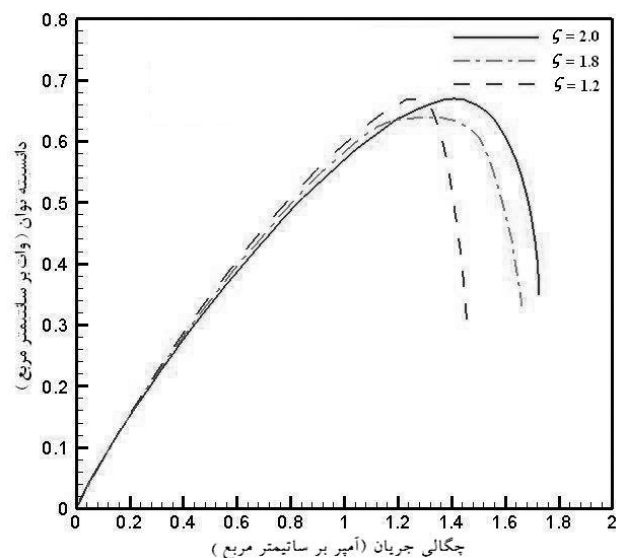
مقدار	متغیر
متغیرهای ابعادی	
۱	ضخامت مجرا، mm
۳۰۰	ضخامت لایه پخش گاز، μm
۱۰	ضخامت لایه واکنشگر، μm
۵۰.۸	ضخامت غشا، μm
۷۰	طول پیل، mm
متغیرهای انتقال	
۴۰	غلظت مولی هیدروژن و اکسیژن مرجع، mol/m ^۳
۱.۰×۱۰ ^{-۹}	چگالی جریان تبادل بر مساحت آند، A/m ^۲
۲.۰×۱۰ ^{-۴}	چگالی جریان تبادل بر مساحت کاتد، A/m ^۲
۰.۰۶۲۵	کشش سطحی، N/m
۱.۱۰۱×۱۰ ^{-۵}	گرانروی گاز آند، pa s
۱.۸۸۱×۱۰ ^{-۵}	گرانروی گاز کاتد، pa s
۵.۴۵۷×۱۰ ^{-۵}	ضریب پخش هیدروژن در ۳۵۳K، ۱.۵ atm [m ^۲ /s]
۱.۸۰۶×۱۰ ^{-۵}	ضریب پخش اکسیژن در ۳۵۳K، ۱.۵ atm [m ^۲ /s]
۵.۴۵۷×۱۰ ^{-۵}	ضریب پخش آب آند در ۳۵۳K، ۱.۵ atm [m ^۲ /s]
۲.۲۳۶×۱۰ ^{-۵}	ضریب پخش آب کاتد در ۳۵۳K، ۱.۵ atm [m ^۲ /s]
خواص مواد	
۰.۶	تخلخل لایه پخش گاز و واکنشگر آند/کاتد
۶.۸۷۵×۱۰ ^{-۱۲}	نفوذپذیری لایه پخش گاز آند/کاتد، m ^۲
۱۱۰	زاویه تماس لایه پخش گاز آند/کاتد
۱.۱	جرم تبادلی غشا، kg/mol
۱.۹۸×۱۰ ^{-۳}	چگالی غشای خشک، kg/m ^۲



شکل ۵ نمودار اشباع آب مایع در فصل مشترک واکنش گر / لایه پخش گاز با درصدهای مختلف رطوبت ورودی



شکل ۸ نمودار ولتاژ - چگالی جریان در نرخ‌های مختلف جریان ورودی



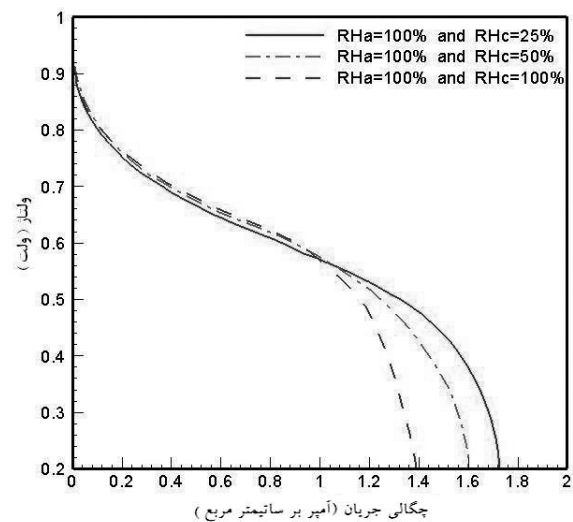
شکل ۹ نمودار چگالی توان - چگالی جریان در نرخ‌های مختلف جریان ورودی

۵-۳- تأثیر شار ورودی و ضرایب استوکیومتریکی

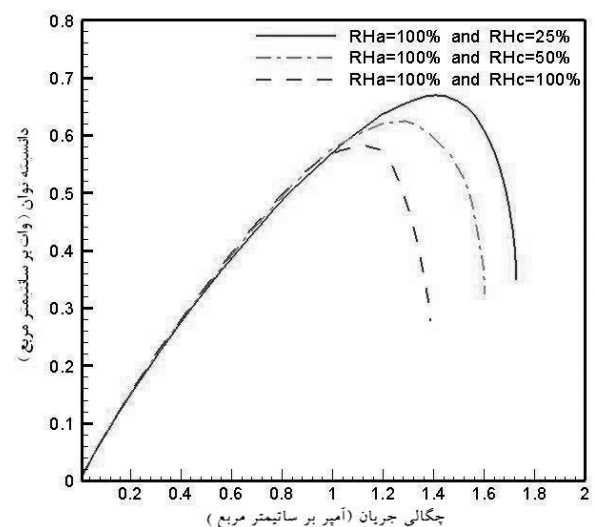
در طراحی پیل سوختی غشا پلیمری متداول است که از ضرایب استوکیومتریکی بالا استفاده شود تا گازهای واکنشگر فراوان برای پیل تأمین شود و عملکرد پیل بهبود یابد. اما ضرایب استوکیومتریکی بالا، افت‌های پارازیتی در تنجار هوا را افزایش می‌دهد و باعث کاهش بازده کلی سامانه پیل سوختی می‌شود [۱۳]. وقتی گازهای ورودی به پیل کاملاً مرطوب نیستند نیز ضرایب استوکیومتریکی بالا بر عملکرد پیل تأثیر منفی می‌گذارد، زیرا باعث انتقال آب بیشتر از پیل به بیرون و خشک شدن غشا می‌شوند. در این بخش تأثیر ضرایب استوکیومتریکی ورودی بر عملکرد پیل سوختی بررسی می‌گردد. برای همه موارد رطوبت نسبی آند ۱۰۰٪ و کاتد ۲۵٪ و دما و فشار ورودی ۸۰ درجه سلسیوس و ۱.۵ اتمسفر می‌باشد.

شکل‌های (۸) و (۹) نمودارهای ولتاژ و چگالی توان پیل بر حسب چگالی جریان

شکل‌های (۶) و (۷) نمودارهای ولتاژ و چگالی توان بر حسب چگالی جریان را با درصد‌های مختلف مرطوب‌سازی کاتد نشان می‌دهند. در چگالی جریان‌های ضعیف، که تغییر فاز در داخل پیل سوختی روی نمی‌دهد، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت در ورودی کاتد بهبود می‌یابد، زیرا در این وضعیت افت‌های مهمی نسبت به دیگر افت‌ها غالب است و این افت با افزایش محتوای آب غشا، کاهش می‌یابد. با افزایش چگالی جریان، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت کاهش می‌یابد. با افزایش رطوبت ورودی، مطابق شکل (۵) شناوری در ناحیه وسیع‌تری از لایه پخش گاز کاتد اتفاق می‌افتد و وقتی گازهای ورودی کاملاً مرطوب هستند شناوری در سرتاسر لایه پخش گاز کاتد اتفاق می‌افتد. این پدیده باعث می‌شود تخلخل‌های لایه پخش گاز بسته شده و اکسیژن کمتری به لایه پخش گاز برسد و در نتیجه عملکرد پیل افت پیدا می‌کند. چون توان پیل حاصل ضرب ولتاژ در چگالی جریان پیل می‌باشد، پدیده‌های بیان شده اثرات مشابه بر نمودار چگالی توان دارند و بیشینه توان وقتی رطوبت نسبی کاتد ضعیف است قابل دستیابی است.

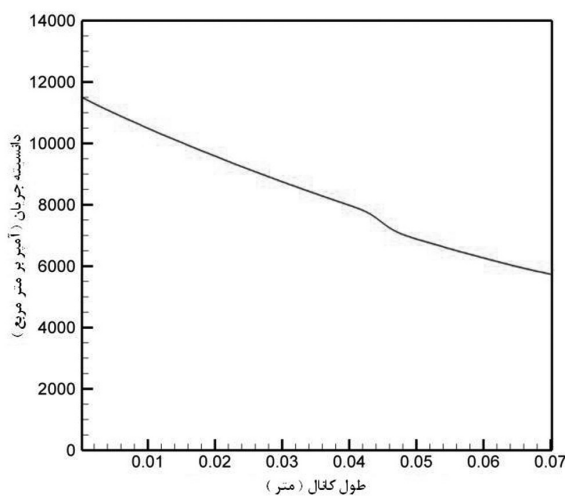


شکل ۶ نمودار ولتاژ - چگالی جریان در سطح‌های مختلف مرطوب‌سازی کاتد

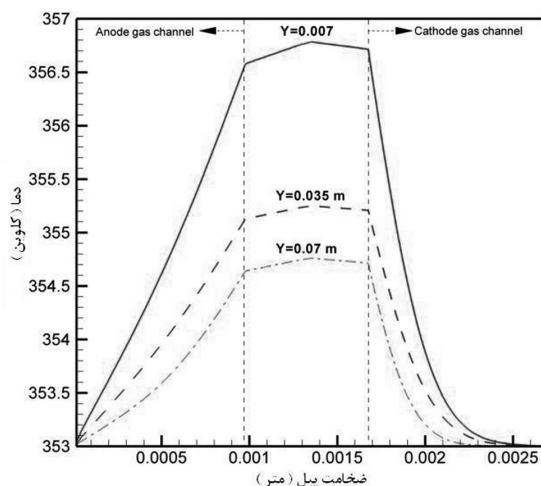


شکل ۷ نمودار چگالی توان - چگالی جریان در سطح‌های مختلف مرطوب‌سازی کاتد

می‌یابد. در چگالی جریان‌های ضعیف، عملکرد پیل در دماهای مختلف اختلاف کمی با هم دارند که این اختلاف ناشی از افزایش چگالی جریان تبادل و نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی می‌باشد. در چگالی جریان‌های متوسط که افت‌های اهمی در پیل سوختی غالب هستند با افزایش دما هدایت یونی غشا افزایش یافته و عملکرد پیل بهبود می‌یابد. در چگالی جریان‌های بالا نیز افزایش دما باعث افزایش فشار بخار می‌شود که این امر مانع تأثیر منفی شناوری بر عملکرد پیل می‌شود. باید توجه داشت که در دماهای خیلی بالا (مانند ۹۰ درجه سانتیگراد) نیز اگر چه افزایش دمای عملکرد پیل می‌تواند افت‌های انتقالی را کاهش دهد و نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی را افزایش دهد؛ اما این افزایش دما می‌تواند پتانسیل پیل را به دلیل افزایش فشار جزئی بخار آب و خشک شدن غشا کاهش دهد. خشک شدن نیز باعث کاهش رسانایی یونی می‌شود و تنش‌های حرارتی نیز در این حالت زیاد می‌شود و می‌تواند گسیختگی غشا را به همراه داشته باشد. به همین دلیل نمودار عملکرد در دماهای ۸۰ درجه سلسیوس و خنک‌تر بررسی می‌شود.



شکل ۱۰ نمودار تغییرات چگالی جریان در طول مجرا



شکل ۱۱ نمودار تغییرات دما در جهت ضخامت لایه‌های پیل سوختی در سه مقطع نزدیک ورودی، وسط و انتهای مجرا

را در استوکیومتریکی‌های مختلف نشان می‌دهند. در چگالی جریان‌های پایین به دلیل اینکه عملکرد پیل غالباً تحت تأثیر افت فعال‌سازی می‌باشد، پیل در همه نرخ‌های جریان، عملکرد تقریباً یکسانی دارد. در چگالی جریان‌های متوسط (بزرگ‌تر از ۰.۱ آمپر بر سانتیمتر مربع) عملکرد پیل در کمترین نرخ جریان بهتر می‌باشد، زیرا در این وضعیت غلظت آب داخل مجرا سریع‌تر افزایش و در نتیجه غشا سریع‌تر مرطوب می‌شود. در چگالی جریان‌های بالا (بزرگ‌تر از ۱ آمپر بر سانتیمتر مربع)، بدترین عملکرد پیل در کمترین نرخ جریان حاصل می‌گردد. زیرا در چگالی جریان‌های بالا که افت غالب در داخل پیل انتقال جرم است، با کاهش استوکیومتریکی ورودی محدودیت‌های انتقال جرم زیاد می‌شود. با کاهش استوکیومتریکی نیز شناوری در فاصله نزدیک‌تری به ورودی کاتد اتفاق می‌افتد و باعث می‌شود اکسیژن کمتری به لایه واکنشگر برسد و عملکرد پیل افت پیدا کند.

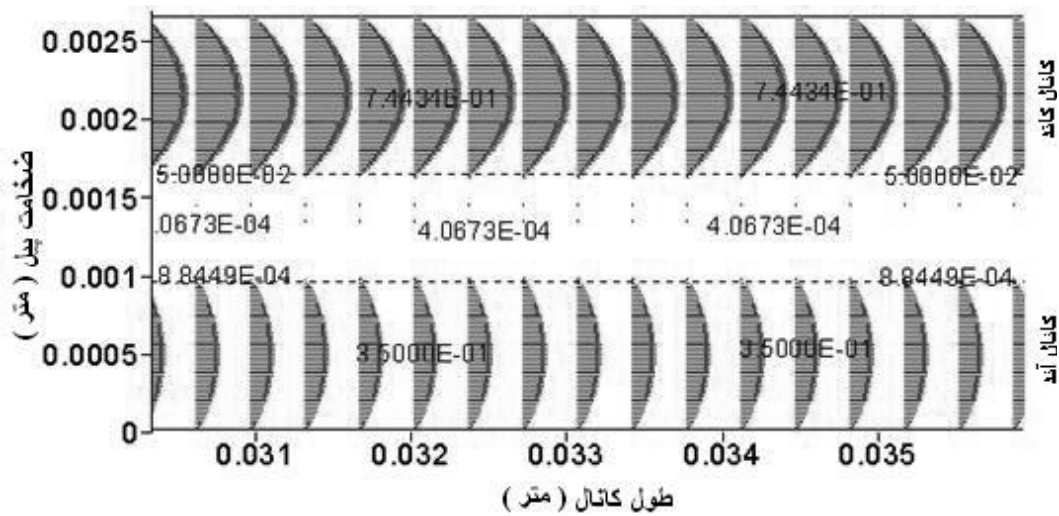
۵-۴- تأثیر دمای ورودی

شناوری بر توزیع چگالی جریان در طول مجرا تأثیر می‌گذارد. شکل (۱۰) توزیع چگالی جریان در ولتاژ عملکرد ۰.۶ ولت در حالتی که آند کاملاً مرطوب و کاتد با رطوبت نسبی ۲۵٪ و دمای عملکرد پیل ۸۰ درجه سلسیوس است را نشان می‌دهد.

به دلیل بالا بودن نرخ جریان ورودی در مجاری آند و کاتد، توزیع چگالی جریان تقریباً یکنواخت است. مقطع چگالی جریان در محلی که تغییر فاز رخ می‌دهد به دلیل تأثیر شناوری دارای تغییر شیب می‌باشد. در الگوی دو فاز و در محلی که تغییر فاز روی می‌دهد ($\gamma=0.045m$) شیب نمودار کم می‌شود و چگالی جریان با نرخ کمتری کاهش می‌یابد. باید توجه داشت که تغییرات چگالی جریان بر توزیع اکسیژن تأثیر می‌گذارد و بالعکس، یعنی شیب تغییرات غلظت اکسیژن در طول مجرا نیز مشابه تغییرات چگالی جریان می‌باشد.

تغییرات چگالی جریان بر توزیع دمای پیل تأثیر می‌گذارد، زیرا مهمترین چشمه حرارتی در پیل غشا پلیمری ناشی از گرمای واکنش‌های الکتروشیمیایی و بازگشت‌ناپذیری این واکنش‌ها می‌باشد که مطابق معادله (۲۸) متناسب با چگالی جریان است. به دلیل اینکه چگالی جریان موضعی در طول مجرا کاهش می‌یابد، نرخ تولید گرما نیز در طول مجرا کاهش یافته و بیشینه آن نزدیک به ورودی مجرا می‌باشد. از این رو بیشینه دما نیز در نزدیک ورودی مجرای کاتد اتفاق می‌افتد. شکل (۱۱) تغییرات دما برای ضخامت لایه‌های مختلف، در سه مقطع نزدیک ورودی، وسط و انتهای مجرا را نشان می‌دهد. دما به سمت انتهای مجرا کاهش می‌یابد و بیشینه دما در همه مقاطع در فصل مشترک لایه کاتالیست و غشا اتفاق می‌افتد. بیشینه تغییرات دما در ولتاژ ۰.۶ ولت برابر ۳.۶ درجه سلسیوس می‌باشد. هر چند تغییرات دما در پیل بالا نمی‌باشد؛ اما به دلیل اینکه بیشینه دمای تحمل پیل ۵ درجه سلسیوس می‌باشد، تغییرات دمای به‌دست آمده بسیار قابل توجه می‌باشد. این موضوع خصوصاً وقتی که پیل‌ها با هم سری می‌شوند و توده پیل را می‌سازند با اهمیت‌تر می‌شود. شکل (۱۲) بردارهای سرعت در مقطعی از پیل را نشان می‌دهد. سرعت در لایه‌های پخش گاز، کاتالیست‌ها و غشا نسبت به مجاری کمتر و از مرتبه 10^{-3} است و در نتیجه انتقال حرارت در این نواحی عمدتاً به صورت هدایت حرارتی می‌باشد. سرعت در لایه غشا به دلیل کوچک‌تر بودن ضریب نفوذپذیری این لایه نسبت به لایه‌های پخش گاز و واکنشگرها عملاً صفر می‌باشد. در ابتدای مجاری، سرعت در حال توسعه است و سپس به صورت توسعه یافته می‌شود. به علت بزرگ‌تر بودن سرعت در مجرای کاتد، در این مجرا سرعت با مجرا بیشتری به حالت توسعه یافته می‌رسد.

شکل (۱۳) نمودار قطبش پیل و شکل (۱۴) نمودار چگالی توان پیل بر حسب چگالی جریان را در دماهای مختلف ورودی نشان می‌دهد. در همه دماهای بررسی شده فشار ورودی ۱.۵ اتمسفر، ضریب استوکیومتریکی برابر ۲، آند کاملاً مرطوب و کاتد با رطوبت نسبی ۲۵٪ است. در تمامی ولتاژهای خروجی با افزایش دما، عملکرد پیل افزایش

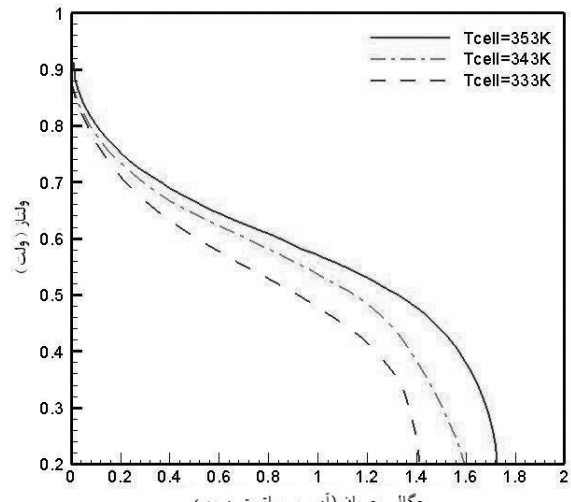


شکل ۱۲ بردارهای سرعت در مقطعی از مجراهای سوخت و اکسیدکننده

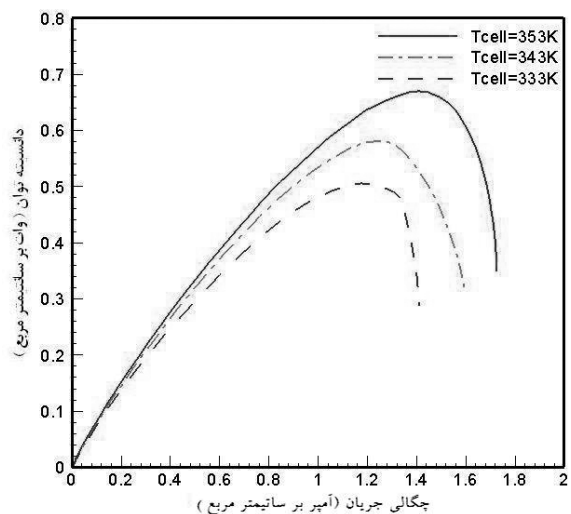
۵-۵- تأثیر فشار ورودی

مشابه رفتار دما، فشار ورودی نیز تأثیر زیادی بر عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری دارد زیرا که تغییر فشار بر ترکیب گازهای ورودی، چگالی جریان تبادل، پتانسیل مدار باز و ضرایب پخش تأثیر می‌گذارد. هر چند در یک تک حجره پیل سوختی افت فشار ضعیف است اما، علاوه بر تأثیر فشار ورودی بر عملکرد پیل، افت فشار نیز در داخل پیل و بخصوص توده پیل سوختی حائز اهمیت می‌باشد. افت فشار سبب می‌شود بخشی از توان تولیدی پیل در تنجار به منظور جبران این افت تلف شود. شکل (۱۵) تغییرات فشار در سمت کاتد پیل و در طول مجرا را نشان می‌دهد.

شکل (۱۶) نمودار قطبش و شکل (۱۷) نمودار چگالی توان پیل سوختی در فشارهای مختلف عملکرد را نشان می‌دهد. در همه فشارهای بررسی شده، دمای ورودی ۸۰ درجه سلسیوس، ضریب استوکیومتریک برابر ۲، آند کاملاً مرطوب و کاتد با رطوبت نسبی ۲۵٪ است. در همه چگالی جریان‌ها با افزایش فشار، عملکرد پیل افزایش می‌یابد. اختلاف عملکرد در چگالی جریان‌های پایین ناشی از افزایش پتانسیل مدار باز با افزایش فشار طبق معادله نرنست و افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی می‌باشد. در چگالی جریان‌های متوسط که افت‌های اهمی در پیل سوختی غالب هستند، با افزایش فشار نرخ تولید آب در واکنشگر افزایش یافته و میزان آب غشا افزایش می‌یابد که باعث افزایش هدایت یونی غشا می‌شود و در نتیجه عملکرد پیل بهبود می‌یابد. تقطیر در پیل موقعی اتفاق می‌افتد که فشار جزئی بخار آب به فشار اشباع برسد. وقتی فشار پیل افزایش می‌یابد غلظت بخار در جریان گازهای داخل پیل کمتر و آب بیشتر به شکل مایع در می‌آید که باعث شناوری پیل می‌شود و عملکرد پیل افت می‌یابد. اما با افزایش فشار ترکیب گازهای ورودی به پیل سوختی نیز کم می‌شود. فشار جزئی بخار آب در ورودی مساوی با فشار اشباع در دمای مرطوب‌سازی واکنشگرهای ورودی می‌باشد که با افزایش فشار ورودی، نسبت جرمی آب ورودی به پیل کاهش می‌یابد. در چگالی جریان‌های قوی، با کم شدن غلظت آب، تمرکز آب در لایه پخش گاز بسیار کم می‌شود و در نتیجه عملکرد پیل بهبود می‌یابد. باید توجه داشت که افزایش فشار کاتد باعث افزایش توان مصرفی تنجار هوا می‌شود و با افزایش فشار، درصد بیشتری از کار تولیدی پیل در تنجار مصرف می‌گردد.



شکل ۱۳ نمودار ولتاژ - چگالی جریان در دماهای ورودی مختلف



شکل ۱۴ نمودار چگالی توان - چگالی جریان در دماهای ورودی مختلف

۶- نتیجه گیری

در این مطالعه، یک الگوی عددی دو بعدی و دو فاز پیل سوختی غشا پلیمری برای کاربری در خودرو ارائه شده و شرایط کاری مختلف از قبیل درصد رطوبت، نرخ جریان، دما و فشار گازهای ورودی بر عملکرد پیل بررسی شده است. دستاوردهای مطالعه بدین قرار می‌باشد.

■ در چگالی جریان‌های ضعیف، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت در ورودی کاند بهبود می‌یابد، اما با افزایش چگالی جریان، عملکرد پیل به دلیل شناوری لایه پخش گاز کاند، توأم با افزایش رطوبت کاهش می‌یابد. شناوری باعث بسته شدن تخلخل‌های لایه پخش گاز و نرخ مصرف کمتر اکسیژن و در نتیجه افت عملکرد پیل می‌شود.

■ در چگالی جریان‌های ضعیف، عملکرد پیل سوختی با تغییر نرخ جریان ورودی تقریباً ثابت است اما در چگالی جریان‌های متوسط، عملکرد پیل در نرخ جریان پایین، بهتر می‌باشد و در چگالی جریان‌های بالا، پیل ضعیف‌ترین عملکرد را در نرخ جریان پایین دارا می‌باشد که این امر ناشی از محدودیت انتقال جرم و شناوری کاند می‌باشد.

■ در تمام ولتاژهای خروجی پیل، با افزایش دمای ورودی، عملکرد پیل افزایش می‌یابد که این امر ناشی از افزایش چگالی جریان تبادل، نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی، هدایت یونی غشا و کم شدن تأثیر شناوری می‌باشد، اما دمای ۸۰ درجه سلسیوس، دمای بهینه عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری می‌باشد.

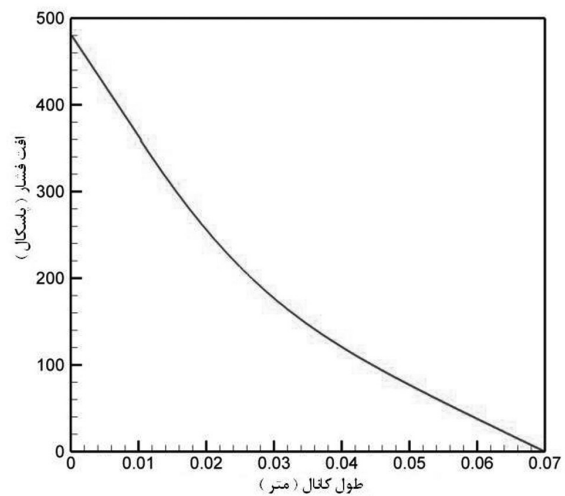
■ در همه ولتاژهای خروجی پیل، با افزایش فشار، عملکرد پیل افزایش می‌یابد که این امر به دلیل افزایش پتانسیل مدار باز، افزایش نرخ واکنش‌های شیمیایی، افزایش میزان آب غشا و کم شدن تأثیر شناوری به دلیل کاهش نسبت جرمی آب ورودی می‌باشد.

■ افزایش درصد رطوبت ورودی، نرخ جریان ورودی و فشار کاند باعث افزایش توان مصرفی تجهیزات جانبی در سامانه پیل سوختی می‌شود که توان تجهیزات جانبی از توان قابل دسترس جهت خودرو می‌کاهد.

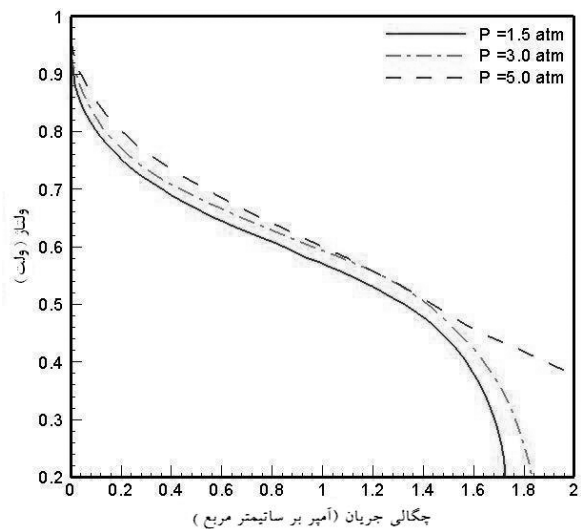
۷- نمادها

حروف لاتین

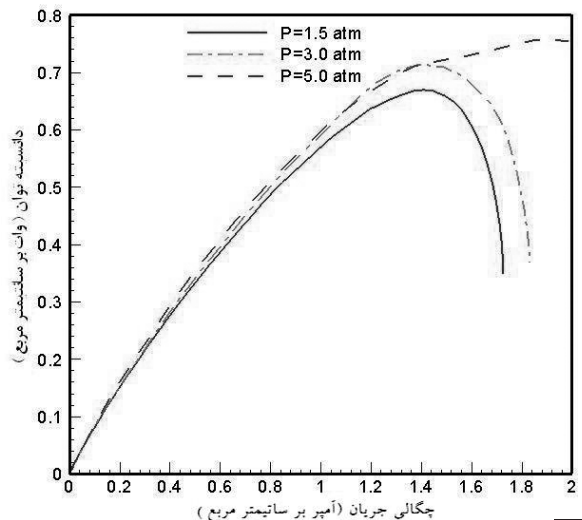
فعالیت آب یا مساحت فعال بر واحد حجم، m^2/m^3	a
غلظت جزء i ، mol/m^3	C_i
ضریب پخش جزء i ، m^2/s	D_i
جرم تعادلی الکترولیت، kg/mol	EW
ثابت فارادی، $96487 C/mol$	F
چگالی جریان تبادل، A/m^2	i_0
چگالی جریان، A/m^2	I
جریان انتقالی، A/m^2	J
تابع Leverett	J
شار جرمی جزء k ، $kg/m^2 s$	\bar{J}_k
نفوذپذیری نسبی فاز k	k_{rk}
نفوذپذیری هیدرولیکی، m^2	K
جرم مولکولی جزء i ، kg/mol	M_i
نسبت جرمی جزء i در فاز k	fm_k^i
تعداد الکترون	n
ضریب زهکشی الکترو اسمزیک	n_d



شکل ۱۵ نمودار افت فشار در طول مجرا، در سمت کاند



شکل ۱۶ نمودار ولتاژ - چگالی جریان در فشارهای مختلف ورودی



شکل ۱۷ نمودار چگالی توان - چگالی جریان در فشارهای مختلف ورودی

اضافه پتانسیل، V	η	فشار، Pa	P
هدایت یونی، S/m	κ	ثابت عمومی گاز، $۸,۳۱۴ \text{ J/mol K}$	R
چگالی، $\text{kg/m}^۳$	ρ	رطوبت نسبی	RH
چگالی غشا خشک، $\text{kg/m}^۳$	$\rho_{dry,m}$	اشباع مایع	s
گرانروی سینماتیکی، $\text{s/m}^۲$	ν	عبارت چشمه	S
کشش سطحی، N/m	σ	دما، K	T
	زیر نویس ها و بالا نویس ها	سرعت، m/s	u
آند	a	پتانسیل مدار باز، V	Uo
کاتد و موین	c	پتانسیل پیل، V	Vcell
الکترولیت	e	حجم، $\text{m}^۳$	V
مؤثر	eff		حروف یونانی
جزء شیمیایی	i	ضریب انتقال ظاهری واکنش	α
ورودی	in	زاویه تماس °	θ_c
گاز	g	پتانسیل، V	φ
فاز	k	ضریب تخلخل	ϵ
مایع	l	ضریب تصحیح انتقال اجزاء	γ_c
واکنش	react	نرخ جریان استوکیومتریک	ζ
مرجع	ref	محتوی آب پلیمر	λ
جامد	s	نفوذپذیری نسبی فاز k	λ_k
اشباع	sat	گرانروی، Pa.s	μ
شرایط استاندارد، ۲۹۸.۱۵K و ۱۰۱.۳kPa	.		

Reference:

- [1]. E. Afshari, S. A. Jazayeri, "Water management in a PEM fuel cell using two phase single-domain model," Proceedings of ASME, European Fuel Cell Technology & Applications December 11-14, Rome, Italy, 2007.
- [2]. U. Pasaogullari, C. Y. Wang, "Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells," *J. Electrochem. Soc.*, 152, pp. A380-A390, 2005.
- [3]. U. Pasaogullari, C. Y. Wang, "Liquid water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte fuel cells," *J. Electrochem. Soc.*, 151, pp. A399-A406, 2004.
- [4]. H. Ju, H. Meng, C. Y. Wang, "A single-phase, non-isothermal model for PEM fuel cells," *In. J. Heat and Mass Transfer*, 48, pp. 1303-1315, 2005.
- [5]. C. Y. Wang, "Fundamental models for fuel cell engineering," *J. Chem. Rev.*, 104, pp. 4727-4766, 2004.
- [6]. H. Ju, C. Y. Wang, S. Cleghorn, U. Beuscherb, "Nonisothermal modeling of polymer electrolyte fuel cells I. experimental validation," *J. Electrochem. Soc.*, 152, pp. A1645-A1653, 2005.
- [7]. S. Um, C. Y. Wang "Computational study of water transport in proton exchange membrane fuel cells," *J. Power Sources*, 156, pp. 211-223, 2006.
- [8]. V. Mishra, F. Yang, R. Pitchumani, "Analysis and design of PEM fuel cells," *J. Power Sources*, 141, pp. 47-64, 2005.
- [9]. H. Ju, C. Y. Wang, S. Cleghorn, U. Beuscher, "Nonisothermal modeling of polymer electrolyte fuel cells, II. Parametric study of low-humidity operation," *J. Electrochem. Soc.*, 153, pp. A249-A254, 2006.
- [10]. J. J. Hwang, "A complete two-phase model of a porous cathode of a PEM fuel cell," *J. Power Sources*, 164, pp. 174-181, 2007.
- [11]. J. M. Ogden, M. M. Steinbugler, T. G. Kreutz, "A comparison of hydrogen, methanol and gasoline as fuels for fuel cell vehicles: implications for vehicle design and infrastructure development," *J. Power Sources*, 79, pp. 143-168, 1999.
- [12]. D. J. Friedman, "Maximizing direct-hydrogen PEM fuel cell vehicle efficiency—is hybridization necessary?, fuel cell power for transportation," SAE Publication Paper 1999-01-0530, pp. 9-17, 1999
- [13]. D. Boettner, G. Paganelli, Y. Guezennec, G. Rizzoni, M. Moran, "Component power sizing and limits of operation for proton exchange membrane fuel cell/battery hybrid automotive applications," ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Session: Advanced Automotive Technologies-II, Session No. DSC-8, November 11-16, 2001.
- [14]. R. K. Ahluwalia, X. Wang, "Direct hydrogen fuel cell systems for hybrid vehicles," *J. Power Sources*, 139, pp. 152-164, 2005.
- [15]. F. Barbir, B. Balasubramanian, J. Neutzler, "Trade-off design analysis of operating pressure and temperature in PEM fuel cell systems," Proc. Advanced Energy Systems Division, ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Nashville, TN, November 14-19, 39, pp. 305-315, 1999.
- [16]. D. B. Boettner, G. Paganelli, Y. G. Guezennec, G. Rizzoni, M. J. Moran, "Proton exchange membrane fuel cell system model for automotive vehicle simulation and control," *J. Energy Resources Technology*, 124, pp. 20-27, 2002.
- [17]. S. Eaves, J. Eaves, "A cost comparison of fuel-cell and battery electric vehicles," *J. Power Sources*, 130, pp. 208-212, 2004.
- [18]. R. M. Moore, K. H. Hauer, D. Friedman, J. Cunningham, P. Badrinarayanan, S. Ramaswamy, A. Eggert, "A dynamic simulation tool for hydrogen fuel cell vehicles," *J. Power Sources*, 141, pp. 272-285, 2005.
- [19]. J. J. Hwang, D. Y. Wang, N. C. Shih, "Development of a lightweight fuel cell vehicle," *J. Power Sources*, 141, pp. 108-115, 2005.
- [20]. H. Yoshikawa, Y. Hishinuma, T. Chikahisa, "Performance of a polymer electrolyte fuel cell for automotive applications," *J. Heat transfer, Asian research*, 31, pp. 421-429, 2002.
- [21]. R. Tirnovan, A. Miraoui, R. Munteanu, I. Vadan, H. Balan, "Polymer electrolyte fuel cell system (PEFC) performance analysis, automation, quality and testing, robotics," IEEE International Conference, 1, pp.457-462, 2006.
- [22]. T. Berning, N. Djilali, "Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell-a parametric study," *J. Power Sources*, 124, pp. 440-452, 2003.
- [23]. C. Y. Wang, P. Cheng, "Multiphase flow and heat transfer in porous media," *Int. J. Heat Mass Transfer*, 39, pp. 3607-3618, 1996.
- [24]. T. Berning, N. Djilali, "A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell," *J. Electrochem. Soc.* 150, pp. A1589-A1598, 2003.
- [25]. Y. Wang, C. Y. Wang, "A non-isothermal, two-phase model for polymer electrolyte fuel cells," *J. Electrochem. Soc.*, 153, pp. A1193-1200, 2006.
- [26]. S. V. Patankar, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere," New York, 1980.
- [27]. F. N. Buchi, S. Srinivasan, "Operating proton exchange membrane fuel cells without external humidification of the reactant gases," *J. Electrochem. Soc.* 144, pp. 2767-2773, 1997.

Performance Analysis of a Polymer Electrolyte Fuel Cell System for Automotive Application

E. Afshari*

Assistant Professor
Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering
University of Isfahan
Em_afshari@yahoo.com

S. A. Jazayeri

Assistant Professor
Department of Mechanical Engineering
K.N. Toosi University of Technology

*Corresponding Author

Received: Apr. 19, 2009

Accepted in Revised Form: Apr. 10, 2010

Abstract

In this study a polymer electrolyte fuel cell (PEFC) model is analyzed for automotive application and the parameters that are affecting its performance such as relative humidity, mass flow rate, temperature and pressure of inlet gases also, heat and water management are major issues in these cells are investigated. Here, the equation of continuity, momentum, conservation of species, energy, charges together with electrochemical kinetic for all regions within the cell is developed as a single-domain and solved numerically. The voltage and power density profiles are derived in terms of current density for different operating conditions. The result indicates that increasing temperature and pressure for all output voltages would improve cell performance. For high voltages where there is no phase changes in the cell, increasing the percentage of humidity and reducing mass flow rate would have a positive effect on cell performance, but at low output voltage by increasing relative humidity and reducing mass flow rate would hamper cell performance. Also increasing inlet pressure, humidity and mass flow rate results in partial power loss of fuel cell.

Keywords: PEFC System, Automotive, Heat and Water Management, Operating Condition, CFD