

تحلیل مشخصه‌های الکتروشیمیایی یک پیل سوختی غشای تبادل پروتون در کاتالیست کاتد به روش بولتزمن شبکه‌ای

مهدی صدیق^۱، مهدی معرفت^{۲*}، مسعود میرزایی^۳

۱- دانشجوی دکترای مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

۲- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران

۳- دانشیار مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

* تهران، صندوق پستی ۱۴۳-۱۴۱۱۵، maerefat@modares.ac.ir

چکیده- مطالعه کمیت‌های الکتروشیمیایی پیل سوختی ارتباط تنگاتنگی با تغییرات دما و غلظت مواد اولیه در ناحیه کاتالیست دارد. این کمیت‌ها خود وابسته به پدیده‌های انتقال جرم و انتقال حرارت در ناحیه‌های دیگر پیل است. در این مقاله از روش بولتزمن شبکه‌ای به عنوان مدلی میکرومقیاس، که در مسائلی همچون پیل سوختی از قابلیت‌های محاسباتی مطلوبی برخوردار می‌باشد، استفاده شده است تا جریان سیالات و انتقال حرارت در مقطعی دوبعدی از کانال، صفحه دو قطبی، لایه انتشار گاز و کاتالیست سمت کاتد یک پیل سوختی از نوع غشای تبادل پروتون شبیه‌سازی شده و مشخصه‌های الکتروشیمیایی در کاتالیست کاتد تجزیه و تحلیل گردد. با ارائه روشی برای تخمین تغییرات غلظت‌ها در طول کانال، آرایش کانال از نوع مارشکل در نظر گرفته شده است. نتایج نشان‌دهنده نقش اساسی صفحه دو قطبی در توزیع کمیت‌ها در ناحیه کاتالیست است.

کلیدواژگان: پیل سوختی غشای تبادل پروتون، جریان سیالات، انتقال حرارت، مشخصه‌های الکتروشیمیایی، روش بولتزمن شبکه‌ای

Analysis of electrochemical characteristics of a proton exchange membrane fuel cell at the cathode catalyst by lattice-Boltzmann method

M. Seddiq¹, M. Maerefat^{2*}, M. Mirzaei³

1- PhD student of Mech. Eng., Tarbiat Modares Univ., Tehran, Iran

2- Assoc. Prof. of Mech. Eng., Tarbiat Modares Univ., Tehran, Iran

3- Assoc. Prof. of Mech. Eng., K. N. Toosi Univ. of Tech., Tehran, Iran

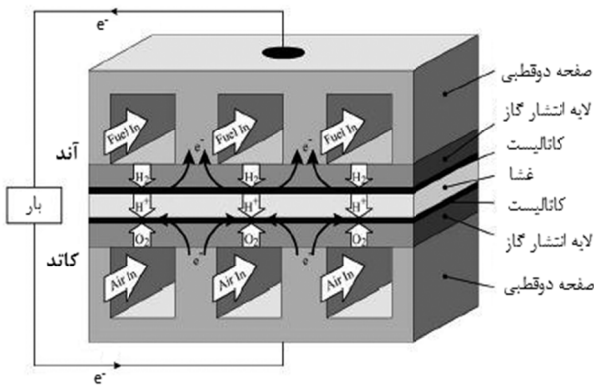
* P. O. B. 143-14115 Tehran, Iran, maerefat@modares.ac.ir

Abstract- There is a full connection between the electrochemical quantities of a fuel cell and the curves of the temperature and primary materials at the catalyst region. These quantities are strongly linked to the mass and heat transfer phenomena in the other regions. In the present paper, the lattice-Boltzmann method, as a microscale model with good computational capabilities in the problems such as the fuel cell, has been utilized to simulate the fluids flow and heat transfer in a two-dimensional cross section of a proton exchange membrane fuel cell including the channel, bipolar plate, gas diffusion layer and catalyst of the cathode and the electrochemical characteristics in the catalyst layer have been analyzed. By representing a method for estimation of the changes in the concentration along the channel, the serpentine arrangement has been modeled. The results reveal the essential role of the bipolar plate on the quantities at the catalyst layer.

Keywords: Proton Exchange Membrane Fuel Cell, Fluids Flow, Heat Transfer, Electrochemical Characteristics, Lattice-Boltzmann Method

۱- مقدمه

الکتریکی ایجاد می‌شود که پروتون را به سمت خود می‌کشد. این نیروی محرکه پروتون‌ها کشش الکترواستاتیکی نام دارد.



شکل ۱ طرحواره‌ای از پیل سوختی (اقتباس از [۱])

از طرفی الکترون‌هایی که در اثر شکسته شدن هیدروژن آزاد شده‌اند با عبور از مداری که مانند یک پل کاتالیست‌ها را به هم ارتباط می‌دهد به سمت کاتالیست کاتد می‌روند. دو سر این مدار همان صفحه‌های دوقطبی هستند. در کاتالیست کاتد پروتون‌ها با برخورد به مولکول‌های اکسیژن مولکول آب پدید می‌آورند. آبی که به این ترتیب تولید شده است به سمت کانال منتشر و خارج می‌گردد. صفحه‌های دوقطبی علاوه بر هدایت جریان برق، نقش دیواره کانال و جذب و هدایت حرارت ناشی از واکنش را نیز بر عهده دارند.

جریان الکتریکی تولیدشده بر واحد سطح کاتالیست که از واکنش غیرمستقیم اکسیژن و هیدروژن حاصل می‌شود چگالی جریان نامیده می‌شود. اختلاف پتانسیل دو سر سلول پارامتر کلیدی دیگری است که در کنار چگالی جریان یکی از مشخصه‌های اصلی پیل را بیان می‌کند.

۲- تاریخچه تحقیقات مدل‌سازی پیل سوختی

از دهه ۹۰ به بعد کارهای عددی متعددی بر روی پیل سوختی غشای تبادل پروتون صورت گرفته است. مدل یک‌بعدی (در راستای عمود بر غشا) و دما ثابت برناردی و وریوگ [۲] که تنها کاتد را در بر می‌گیرد یک چارچوب ابتدایی برای شبیه‌سازی ارائه کرده است. چندین مدل یک‌بعدی دیگر نیز در این مدت و حتی اخیراً ارائه شده است. بیشتر این مدل‌ها تحلیلی بوده‌اند [۳ و ۴].

پیل سوختی نوعی پیل (یا همان باتری) است که در آن به طور پیوسته مواد اولیه واکنش شیمیایی وارد و محصول آن خارج می‌شود. بنابراین یک سیستم با جریانی از سیالات داریم. واکنش شیمیایی به نحوی کنترل می‌گردد که انرژی حاصل از آن به صورت جریان الکتریسیته در دسترس باشد. بدین منظور مواد اولیه مستقیماً با هم در تماس نیستند.

در بین تمام انواع پیل‌های سوختی، پیل‌های غشای تبادل پروتون معروف به PEM^۱ بیشترین توجه را به خود معطوف کرده‌اند. این پیل‌ها برای کار به هیدروژن و اکسیژن یا هوا نیاز دارند و محصول واکنش آن‌ها آب است؛ در دمای کاری نسبتاً پایینی کار می‌کنند، زمان راه‌اندازی آن‌ها اندک است، کارکرد دینامیکی مناسبی دارند و به تغییرات ورودی به خوبی پاسخ می‌دهند. در پیل سوختی قطعه متحرک وجود ندارد. سروصدای سیستم حتی در صورت مجهز بودن به دستگاه‌های تولید هیدروژن بسیار کم است.

همان‌طور که شکل ۱ نشان می‌دهد، هر پیل سوختی غشای تبادل پروتون متشکل از یک کانال برای عبور گاز هیدروژن و یک کانال دیگر برای عبور اکسیژن در سمت مقابل است [۱]. کانال‌ها میان صفحات هادی الکتریکی به نام صفحات دو قطبی قرار می‌گیرند. هریک از کانال‌های هیدروژن و اکسیژن در مجاورت لایه‌ای متخلخل قرار دارد که گاز را به خوبی از خود عبور می‌دهد. هیدروژن و اکسیژن عمدتاً بر اثر پدیده انتقال جرم که ناشی از گرادیان غلظت است به داخل این لایه کشیده می‌شوند. این ناحیه، لایه انتشار گاز^۲ نام دارد. در کنار این بخش، ناحیه بسیار باریک کاتالیست قرار دارد که حاوی ماده تسریع‌کننده واکنش، کاتالیزور، است.

در کاتالیست سمت هیدروژن، که به زبان شیمی آند خوانده می‌شود، مولکول هیدروژن به یون H^+ یا همان پروتون و الکترون تبدیل می‌شود. مشابه همین بخش‌ها در سمت اکسیژن یا کاتد نیز وجود دارد. بین کاتد و آند لایه‌ای از جنس پلیمر وجود دارد که غشا یا الکترولیت نامیده می‌شود. این لایه به شدت آب‌دوست است و آب در آن به صورت مایع درمی‌آید. در سمت کاتد، با تضعیف پیوند مولکول‌های اکسیژن یک میدان

1. Proton Exchange Membrane
2. Gas Diffusion Layer (GDL)

در سطحی بالاتر، کارهای دوبعدی متفاوتی ارائه شده است که تقریباً همه تحلیل عددی بوده‌اند. از آنجا که بیشترین تغییرات کمیت‌ها در راستای عمود بر غشا صورت می‌گیرد، در مدل‌سازی دوبعدی، یکی از ابعاد میدان حل همین راستا در نظر گرفته می‌شود. بعد دوم در برخی کارها راستای جریان اصلی (طول کانال) و در برخی دیگر عرض کانال در نظر گرفته شده است. وانگ و همکاران [۵] با یک میدان حل دوبعدی که یک بعد در جهت طول کانال است جریان سیال را در کانال، لایه انتشار گاز و کاتالیست کاتد مورد مطالعه قرار داده‌اند. اهمیت کار آن‌ها در مدل‌سازی فاز مایع است؛ هرچند معادله انرژی را شامل نمی‌شود.

سینگ و همکاران [۶] مدل دوبعدی دماثابتی ارائه کرده‌اند که در آن بعد دوم در راستای عرض کانال قرار دارد. آن‌ها به جای معادله ناویر-استوکس مدل ساده داری را به کار برده و تمرکز اصلی را روی مدل‌سازی دقیق‌تر فرایند انتقال جرم قرار داده‌اند. اوم و همکاران [۷] مدلی دوبعدی (بعد دوم در راستای عرض کانال) شامل معادلات ناویر-استوکس، پیوستگی و غلظت گونه‌ها را ارائه کرده‌اند تا اثر رقیق‌سازی هیدروژن ورودی را بررسی کنند.

صدیق و همکاران [۸] مدل دوبعدی دربرگیرنده معادلات ناویر-استوکس و انرژی، غلظت گونه‌ها و پتانسیل الکتریکی ارائه کرده‌اند که در آن، با مدل‌سازی حل‌شدن و انتشار گازها در داخل غشا، پدیده میان‌گذر^۱ و واکنش مستقیم مواد اولیه را بررسی نموده و نشان داده‌اند که این پدیده در برخی شرایط افت قابل توجهی در بازده پیل ایجاد می‌کند.

برنینگ و جلالی [۱] مدل سه‌بعدی و تک‌فاز نسبتاً کامل‌تری ارائه کرده‌اند که در آن معادله انرژی هم مورد توجه قرار گرفته است. در این مدل، معادله انرژی برای سیال اعمال شده و تبادل حرارت با بستر جامد با استفاده از جمله تولید مدل شده است. جن و همکاران [۹] و منگ و وانگ [۱۰] نیز با ارائه مدل‌های سه‌بعدی، تک‌فاز و دما ثابت، الگوی جریان و مشخصه‌های الکتروشیمیایی خروجی پیل را مورد مطالعه قرار داده‌اند. هو و همکاران [۱۱ و ۱۲] مدل سه‌بعدی دوفازی و دماثابتی را ارائه کرده‌اند و الگوی جریان، توزیع غلظت آب و مشخصه خروجی پیل سوختی را تجزیه و تحلیل کرده‌اند.

مدل‌های اشاره‌شده همگی مبتنی بر پیوستگی بوده‌اند. در سال‌های اخیر گرایش چشمگیری به روش‌های مبتنی بر سیال گسسته به‌خصوص روش بولتزمن شبکه‌ای صورت گرفته است. در [۱۳] مدلی سه‌بعدی با زمان‌های آرامش چندگانه^۲ برای بررسی ناحیه لایه انتشار گاز ارائه شده است. در این مقاله ضریب تراوایی^۳ به عنوان ویژگی حائز اهمیت محیط متخلخل لایه انتشار گاز مورد توجه خاصی قرار گرفته است. نویسندگان ابتدا نشان داده‌اند که، با زمان‌های آرامش چندگانه، تراوایی به درستی مستقل از لزجت به دست می‌آید. در حالی که رهیافت متداول بی‌جی‌کی^۴ این مشکل را دارد که در آن تراوایی با افزایش لزجت افزایش پیدا می‌کند.

دورمال و فروه [۱۴] جریان سه‌بعدی سیال را در یک محیط متخلخل مورد استفاده در پیل‌های سوختی غشای تبادل پروتون متشکل از چند ردیف الیاف عمود بر هم، که با روشی تصادفی روی هم چیده شده‌اند، به روش بولتزمن شبکه‌ای شبیه‌سازی کرده و رابطه تراوایی را با تخلخل و جهت الیاف بررسی نموده‌اند. آن‌ها در نهایت رابطه جدیدی برای تراوایی در جهت عمود بر صفحه الیاف بر حسب تخلخل پیشنهاد کرده‌اند. تیب و همکاران [۱۵] مدلی دوبعدی و بدون انتقال حرارت تهیه نموده‌اند که در آن قابلیت شبیه‌سازی آب مایع و تأثیرات متقابل بر گازها و قابلیت کار با تغییرات زیاد چگالی گنجانده شده است. این مدل همچنین اثر موینگی دینامیکی را در سرعت‌های کوچک آب مایع مورد ملاحظه قرار می‌دهد. نتایج مطالعه آن‌ها نشان می‌دهد که آب‌دوستی کانال تأثیر زیادی بر الگوی جریان دوفازی دارد. در [۱۶]، چن و همکاران مدلی به روش بولتزمن شبکه‌ای برای بررسی هیدرودینامیک مقطعی دوبعدی از ناحیه لایه انتشار گاز یک پیل سوختی غشای تبادل پروتون با آرایش کانال موسوم به اینتردیجیتیتد^۵ ارائه نموده‌اند. در این کار، واکنش شیمیایی در کاتد مدل شده است و با بررسی جریان گازها و آب مایع در محیط متخلخل در مقیاس تخلخل‌ها، پارامترهای ماکروسکوپی تراوایی و ضریب انتشار جرم مؤثر پیش‌بینی و با مقادیر اندازه‌گیری شده مقایسه و تطابق خوبی بین آن‌ها گزارش شده است.

2. Multi-Relaxation Time (MRT)

3. Permeability

4. BGK

5. Interdigitated

1. Cross-over

پارک و همکاران [۲۲] با مدلی سه‌بعدی، تک‌گونه‌ای، تک‌فاز و دماثابت به شبیه‌سازی هیدرودینامیکی لایه انتشار گاز پیل سوختی از نوع غشای تبادل پروتون پرداخته‌اند تا پارامترهای محیط متخلخل و به‌خصوص تراوایی را بررسی نمایند. در مدل آن‌ها محیط متخلخل به صورت غیر ایزوتروپی در نظر گرفته شده است. آن‌ها دریافته‌اند که تراوایی محیط متخلخل به‌شدت به جهت‌گیری کشیدگی الیاف وابستگی دارد و در نهایت روش بولتزمن شبکه‌ای را وسیله‌ای مؤثر در تحلیل هندسه‌های پیچیده‌ای مثل محیط متخلخل لایه انتشار گاز ارزیابی کرده‌اند. در مقاله حاضر، با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای مدلی دوبعدی، چندگونه‌ای، با در نظر گرفتن انتقال حرارت و شامل واکنش شیمیایی برای قسمت کاتد یک پیل سوختی غشای تبادل پروتون ارائه شده است تا مشخصه‌های پیل در کاتالیست مورد بررسی قرار گیرد.

۳- مدل ریاضی

۳-۱- کمیت‌های الکتروشیمیایی

اختلاف پتانسیل بازگشت‌پذیر مدار باز پیل، حداکثر ولتاژ تئوری پیل است که با دما تغییر می‌کند [۲۳]:

$$E^0 = 0.0025 T + 0.2329 \quad (1)$$

از نتایج بازگشت‌ناپذیری واکنش، اتلاف انرژی فعال‌سازی است و می‌توان آن را با یک افت ولتاژ فعال‌سازی بیان کرد:

$$V_{act}^c = 2RT / F \ln(i / (i^{c,ref} X_{O_2})) \quad (2)$$

افت ولتاژ فعال‌سازی برای سمت آند هم با رابطه‌ای مشابه فوق بیان می‌شود.

با در نظر گرفتن تلفات اهمی ناشی از جریان پروتون‌ها اختلاف پتانسیل تئوری پیل عبارت است از:

$$V_{cell} = E^0 - (V_{ohm} + V_{act}^a + V_{act}^c) \quad (3)$$

چگالی جریان انتقالی، میزان تولید بار الکتریکی بر واحد زمان بر واحد حجم را نشان می‌دهد. میزان تولید آب و مصرف مواد اولیه نیز با این کمیت بیان می‌شود:

$$j^a = \frac{i^a}{t_{ct}} = j^{a,ref} \left(X_{H_2} / X_{H_2}^{ref} \right)^{1/2} \left[\exp(V_{act}^a \alpha^a F / RT) - \exp(-V_{act}^c \alpha^c FRT) \right] \quad (4)$$

استادی و همکاران [۱۷] با ارائه مدلی سه‌بعدی و بدون انتقال حرارت به روش بولتزمن شبکه‌ای به بررسی تراوایی محیط متخلخل لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای تبادل پروتون پرداخته‌اند و به کمک آن تصاویر به‌دست آمده از اشعه ایکس از لایه انتشار کربنی پیل سوختی را تجزیه و تحلیل کرده‌اند.

هائو و چنگ [۱۸] از روش بولتزمن شبکه‌ای سه‌بعدی وابسته به زمان استفاده کرده‌اند تا با پارامترهایی مثل آب‌گریزی لایه انتشار گاز، جریان سیال و تأثیر فاز آب مایع را مطالعه نمایند. نتایج کار آن‌ها مؤید این حقیقت است که با انتخاب صحیح آب‌گریزی لایه انتشار گاز، حذف آب مایع بهتر صورت گرفته و پدیده سرریز^۱ در لایه انتشار گاز و کاتالیست تضعیف می‌شود.

بن‌صلاح و همکاران [۱۹] مدلی سه‌بعدی با روش بولتزمن شبکه‌ای جهت مطالعه در مورد ارتفاع بهینه کانال و بررسی تأثیر محل اولیه و حجم توده آب، سرعت جریان هوای کانال و آب‌دوستی یا آب‌گریزی کانال‌ها در پیل سوختی از نوع غشای تبادل پروتون ارائه کرده‌اند. این مدل نیز تولید و انتقال حرارت را لحاظ ننموده است. نویسندگان مقاله ارتفاع بهینه کانال را با اعمال دو عامل بازدهی پمپاژ (برای تغذیه مواد اولیه) و سرعت تخلیه (برای خارج کردن بخار آب) مورد مطالعه قرار داده و گزارش نموده‌اند که کانال هر چه عمیق‌تر باشد تخلیه بهتر و با بازدهی بیشتری صورت می‌پذیرد. اما اگر توده آب مایع به گوشه یا بالای لایه انتشار گاز برسد، بازده تخلیه به‌تدریج افت می‌کند. موخرچی و همکاران [۲۰] مدلی سه بعدی، چندگونه‌ای و دوفازی و دماثابت برای پیل سوختی غشای تبادل پروتون ارائه نموده‌اند و تأثیر ساختار تخلخل و آب‌دوستی لایه انتشار گاز را بر انتقال آب مایع و دینامیک سطح قطره در ناحیه کاتالیست و لایه انتشار گاز مطالعه کرده‌اند.

هان و همکاران [۲۱] مدل دوبعدی، دوفازی و دماثابتی ارائه کرده‌اند که در آن سیال، تک‌گونه‌ای در نظر گرفته شده و میدان حل، ناحیه کاتد پیل سوختی از نوع غشای تبادل پروتون را شامل می‌شود. آن‌ها به کمک این مدل توسعه و تعامل سطحی دو توده مایع واقع در کانال را بررسی نموده‌اند و در آن پارامترهایی شامل سرعت جریان گاز، فاصله اولیه توده‌ها، آرایش‌های مختلف میکروساختار پرزها و خاصیت آب‌دوستی لایه انتشار گاز را مورد توجه قرار داده‌اند.

1. Flooding

بردار نیرو در رابطه توزیع ماکسول- بولتزمن قرار داده می‌شود تا مقدار توزیع شده برای هر یک از جهت‌ها به دست آید:

$$F_i = \omega_i \rho \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) \left[\frac{e_i \bar{F}}{C_s^2} + \frac{u \bar{F} : (e_i e_i - C_s^2 I)}{\varepsilon C_s^2} \right] \quad (12)$$

سرانجام تأثیر نیرو در معادله برخورد ظاهر می‌شود:

$$f_i(X + e_i \delta t, t + \delta t) - f_i(X, t) = -\frac{f_i(x, t) - f_i^{(eq)}(x, t)}{\tau} + \delta t F_i \quad (13)$$

برای مدل‌سازی سطح تماس کانال آزاد با ناحیه متخلخل بایستی به نحوی سرعت سیال در سطح تماس محاسبه شود [۳۱].

۳-۲-۲-۳ مدل ارتقایافته برای شبیه‌سازی پیل سوختی

مدل‌سازی گونه‌های مواد با اصلاحات چشمگیری نسبت به مدل استاندارد همراه است. در مدلی که اینجا مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳۲]، هر گونه‌ای، بسته به جرم مولکولی‌اش، سرعت شبکه‌ای مخصوص به خود را دارد.

$$\bar{e}_i^3 = \bar{e}_i^1 \sqrt{\frac{MW_1}{MW_3}} \quad (14)$$

$$\bar{e}_i^2 = \bar{e}_i^1 \sqrt{\frac{MW_1}{MW_2}} \quad (15)$$

معادلات فوق نشان می‌دهد که ماده با جرم مولکولی بیشتر سرعت شبکه‌ای کمتری خواهد داشت. از آنجا که در مرحله اشاعه، سیال واقع در هر گره باید دقیقاً به گره‌های همسایه منتقل شود، شبکه‌بندی متناسب با سرعت شبکه‌ای مولکول سبک‌تر در نظر گرفته می‌شود و با توجه به مسافت طی شده و انجام یک درون‌یابی، قسمتی از جرم متناسب با مسافت طی شده به گره همسایه منتقل و باقی‌مانده آن در محل قبلی در نظر گرفته می‌شود.

در مرحله برخورد، معادله استاندارد به صورت زیر درمی‌آید:

$$f_i(x, t + \delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i^\alpha \quad (16)$$

که در آن اندیس α ناظر به گونه α ام و i ناظر بر جهت شبکه‌ای است. Ω_i^α عملگر برخورد است که شرح آن در ادامه خواهد آمد. غلظت مولی (مول بر واحد حجم) هر یک از گونه‌ها عبارت است از:

$$j^c = \frac{i^c}{t_{ct}} = j^{c, ref} \left(X_{O_2} / X_{O_2}^{ref} \right) \left[\exp(V_{act}^c \alpha^c F / RT) - \exp(-V_{act}^a \alpha^a F / RT) \right] \quad (5)$$

۳-۲-۳ شبیه‌سازی به روش بولتزمن شبکه‌ای

مبانی روش بولتزمن شبکه‌ای شامل مرحله اشاعه^۱، مرحله برخورد^۲ و اعمال شرایط مرزی می‌گردد. خواننده برای اطلاع از مبانی این روش به مراجع [۱۸]، [۲۴] و [۲۵] برای مدل‌سازی جریان سیال تک‌گونه‌ای و به مراجع [۲۶] تا [۲۹] برای مدل‌سازی انتقال حرارت ارجاع داده می‌شود.

۳-۲-۳-۱ مدل‌سازی محیط متخلخل

در کار حاضر، محیط متخلخل به روش متوسط‌گیری مدل می‌شود. روش متوسط‌گیری دارای نگاه ماکرو و اسکوپ می‌باشد و این از قابلیت‌های روش بولتزمن شبکه‌ای است که از روش‌های ماکرو مقیاس در کنار مدل میکرو مقیاس استفاده می‌کند. نیروی ناشی از محیط متخلخل متشکل از دو جمله است [۳۰]:

$$\bar{F} = -\frac{\varepsilon u}{K} - \frac{\varepsilon F_\xi}{\sqrt{K}} |u| u \quad (6)$$

جمله درجه اول همان معادله دارسی است و در رینولدزهای کم و متوسط و محیط‌های با تراوایی کوچک اهمیت بیشتری دارد. در رابطه فوق، ε تخلخل و K تراوایی بر حسب مجذور واحد طول هستند. برای F_ξ داریم:

$$F_\xi = \frac{1.75}{\sqrt{150\varepsilon^3}} \quad (7)$$

u سرعت موقتی و عبارت است از:

$$u = \frac{v}{c_0 + \sqrt{c_0^2 + c_1 |v|}} \quad (8)$$

که در آن v سرعت ماکروسکوپی سیال است و داریم:

$$c_0 = \frac{1}{2} \left(1 + \varepsilon \frac{\delta t}{K} v \right) \quad (9)$$

$$c_1 = \varepsilon \frac{\delta t}{2} \frac{F_\xi}{\sqrt{K}} \quad (10)$$

u از رابطه زیر نیز به دست می‌آید:

$$\rho u = \sum_i e_i f_i + \frac{\delta t}{2} \rho \bar{F} \quad (11)$$

1. Streaming
2. Collision

فشار از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$P = \rho_1 \cdot c_{s,1}^2 + \rho_2 \cdot c_{s,2}^2 + \rho_3 \cdot c_{s,3}^2 \quad (29)$$

برای مدل‌سازی واکنش شیمیایی و انتقال الکترواسمزی آب، در مرحله برخورد، پس از اینکه غلظت مولی محلی بر اساس مقادیر منتج از مرحله اشاعه محاسبه شد، تولید یا مصرف به صورت عبارات افزایش یا کاهش غلظت مولی به ترتیب بخار آب و اکسیژن در گره‌های واقع در کاتالیست در نظر گرفته می‌شود:

$$\Delta n_{O_2} = \left[\frac{1}{4F} i \right] \frac{\delta t}{\delta y} \quad (30)$$

$$\Delta n_W = \left[\frac{1}{2F} (1 + 2n_d) i \right] \frac{\delta t}{\delta y} \quad (31)$$

n_d ضریب انتقال الکترواسمزی و $F=96487 \text{ Cmol}^{-1}$ ثابت فاراده است.

در روش بولتزمن شبکه‌ای، اساس فرمول‌بندی انتقال حرارت غیرتعادلی، که در آن فاز سیال با محیط متخلخل در تعادل دمایی نیست، شبیه هیدرودینامیک چندگانه‌ای است که در آن به جای توزیع انرژی کلی سیال توزیع دمای هر کدام از گونه‌ها و به جای لغزش بین گونه‌ها اختلاف دمای بین آن‌ها قرار می‌گیرد [۳۳] و خود محیط متخلخل به عنوان گونه‌ای اضافه بر سیالات در نظر گرفته می‌شود. با این حال، مدل بولتزمن شبکه‌ای هنوز در زمینه انتقال حرارت غیرتعادلی توسعه چندانی نیافته است. در مقاله حاضر نیز بین فازها تعادل حرارتی فرض شده است.

۴- نتایج و بحث

میدان حل دوبعدی مطابق شکل ۲ مقطعی عمود بر غشاست که کانال، صفحه دوقطبی، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست سمت هوا (کاتد) را در بر می‌گیرد. درست نصف هر یک از کانال‌های رفت و برگشت در میدان حل قرار گرفته است.

برای شبیه‌سازی جریان سیال، مدل سیال چندگانه‌ای شامل سه گاز بخار آب، اکسیژن و نیتروژن مورد استفاده قرار گرفته است. در ناحیه صفحه دوقطبی محاسبات هیدرودینامیکی انجام نمی‌شود؛ چرا که در آن غلظت تمام گونه‌ها صفر است.

در کلیه سطوح تماس صفحه دوقطبی با کانال و لایه انتشار گاز، شرط عدم لغزش داریم. همین‌طور در مورد سطح تماس کاتالیست با غشا شرط عدم لغزش اعمال می‌شود. برای مرز $X=0$ دمای ثابت در نظر گرفته می‌شود. برای اعمال شرط

$$n_\alpha = \sum_{i=0}^8 f_i^\alpha \quad (17)$$

و تعداد مول کل سیال در واحد حجم برابر است با:

$$n = n_1 + n_2 + n_3 \quad (18)$$

بدین ترتیب چگالی (جرم بر واحد حجم) هر یک از گونه‌ها و کل سیال از روابط زیر به دست می‌آید:

$$\rho_\alpha = MW_\alpha \cdot n_\alpha \quad (19)$$

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 \quad (20)$$

سرعت هر یک از گونه‌ها و سرعت کلی سیال از روابط زیر به دست می‌آید:

$$n_\alpha \cdot \vec{u}_\alpha = \sum_{i=0}^8 f_i^\alpha \cdot \vec{e}_i^\alpha \quad (21)$$

$$\rho \cdot \vec{u} = \rho_1 \cdot \vec{u}_1 + \rho_2 \cdot \vec{u}_2 + \rho_3 \cdot \vec{u}_3 \quad (22)$$

برای سیالی متشکل از سه گونه، عملگرهای برخورد عبارت‌اند از:

$$\begin{aligned} \Omega_\alpha^1 &= \Omega_\alpha^{11} + \Omega_\alpha^{12} + \Omega_\alpha^{13} \\ \Omega_\alpha^2 &= \Omega_\alpha^{21} + \Omega_\alpha^{22} + \Omega_\alpha^{23} \\ \Omega_\alpha^3 &= \Omega_\alpha^{31} + \Omega_\alpha^{32} + \Omega_\alpha^{33} \end{aligned} \quad (23)$$

به ازای $\alpha = \beta$ داریم:

$$\Omega_i^{\alpha\alpha} = - \left(\frac{f_i^\alpha - f_i^{\alpha(0)}}{\tau_\alpha} \right) \quad (24)$$

τ_α زمان آرامش گونه α است که به لزجت سینماتیکی آن گونه مرتبط می‌شود.

برای $f_i^{\alpha(0)}$ داریم:

$$f_i^{\alpha(0)} = f_i^{\alpha,eq} \left[1 + \frac{(\vec{e}_i^\alpha - \vec{u})(\vec{u}_\alpha - \vec{u})}{c_{s,\alpha}^2} \right] \quad (25)$$

$$f_i^{\alpha,eq} = \omega_i n_\alpha \left[1 + \frac{\vec{e}_i^\alpha \cdot \vec{u}}{c_{s,\alpha}^2} + \frac{(\vec{e}_i^\alpha \cdot \vec{u})^2}{2c_{s,\alpha}^4} - \frac{\vec{u} \cdot \vec{u}}{2c_{s,\alpha}^2} \right] \quad (26)$$

$c_{s,\alpha}$ سرعت صوت در محیط گونه α است.

به ازای $\alpha \neq \beta$ ، پارامتر فیزیکی دخیل، زمان آرامش دوبه‌دوی گونه‌هاست که خود با ضریب انتشار دوبه‌دو $D_{\alpha\beta}$ مرتبط است:

$$\Omega_i^{\alpha\beta} = - \frac{1}{\tau_{\alpha\beta}} \left(\frac{\rho_\beta}{\rho} \right) \frac{f_i^{\alpha,eq}}{c_{s,1}^2} (\vec{e}_i^\alpha - \vec{u})(\vec{u}_\alpha - \vec{u}_\beta) \quad (27)$$

$$\tau_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} + 3D_{\alpha\beta} \frac{MW_\alpha \cdot MW_\beta}{M_1} \left(\frac{n}{\rho} \right) \quad (28)$$

جدول ۱ خواص و پارامترهای فیزیکی

پارامتر	واحد	مقدار
تخلخل لایه انتشار گاز*	-	۰/۴
تخلخل کاتالیست*	-	۰/۲۵
تراوایی لایه انتشار گاز*	m ²	۱/۷۶×۱۰ ^{-۱۱}
تراوایی کاتالیست*	m ²	۱/۸×۱۰ ^{-۱۸}
ضریب هدایت صفحه دوقطبی**	W/K·m	۱۲۸
ضریب هدایت لایه انتشار گاز**	W/K·m	۱/۱۸
ضریب هدایت لایه کاتالیست**	W/K·m	۰/۲۷
ضریب کشش الکترواسمزی***	-	۱/۵

* اقتباس از مرجع [۳۴]، ** اقتباس از مرجع [۳۵]، *** فرض شده

جدول ۲ مشخصات و شرایط عملکردی سلول مینا*

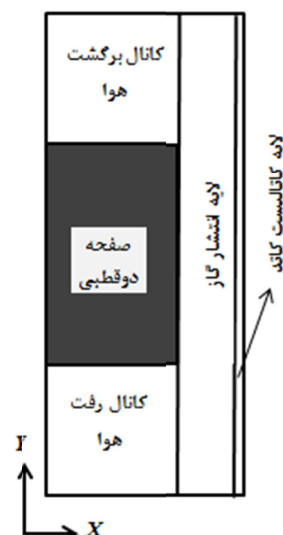
پارامتر	واحد	مقدار
نسبت حجمی O ₂ به N ₂ در کانال رفت	-	۰/۲۶۶
دمای سیال کانال هوا	°C	۸۰
فشار سیال کانال هوا	atm	۳
رطوبت نسبی در کانال رفت	%	۵۰
دبی کانال هوا	sccm	۲۲۰۰
ضخامت لایه انتشار گاز	μm	۲۴۰
ضخامت لایه کاتالیست	μm	۲۰
عمق کانال	μm	۷۰۰
عرض سلول	mm	۲
عرض صفحه دوقطبی	mm	۱
طول یک کانال	mm	۸۰

* به منظور مقایسه پذیر بودن، مشابه مرجع [۳۴] در نظر گرفته شده است.

برای یافتن شبکه‌بندی بهینه، اجراهایی با تعداد گره‌های مختلف صورت گرفت. مشاهده شد با ۸۰ گره در راستای Y نتایجی مستقل از شبکه به دست می‌آید. ولی برای حصول نتایج دقیق‌تر، شبکه‌ای با تعداد ۱۲۰ گره در راستای Y مورد استفاده قرار گرفته است.

برای صحت‌گذاری مدل، افزایش دما در کاتد به ازای چگالی جریان‌های مختلف مورد توجه قرار گرفت. نتایج به دست آمده از مدل حاضر به ازای $P=1 \text{ atm}$ با کار گرمایی و استوکی [۳۶] مقایسه شد و همخوانی قابل قبولی مشاهده گردید.

عدم لغزش، از روش جهش به عقب [۲۴ و ۲۵] و برای شرط دما ثابت از روش دمای پاد-لغزشی^۱ [۲۷] استفاده شده است.



شکل ۲ میدان حل مدل شده

شرایط مرزی جانبی ($Y=0$ و $Y=W$) تعیین کننده‌های اصلی ورودی کاتد پیل سوختی‌اند. غلظت گونه‌ها و دمای سیال در این مرزها مشخص کننده نوع و کیفیت سیال تغذیه خواهد بود. در اینجا شرایط کاملاً توسعه یافته تناوبی برای این مرزها لحاظ می‌گردد.

برای آن که آرایش کانال به صورت مارشکل^۲ مدل شود، با در نظر گرفتن طول کانال و در دست داشتن مصرف و تولید هر یک از گونه‌های اکسیژن و آب در یک مقطع، تغییر غلظت گونه‌ها در طول کانال محاسبه می‌شود. برای مقطعی واقع در وسط طول کانال خواهیم داشت:

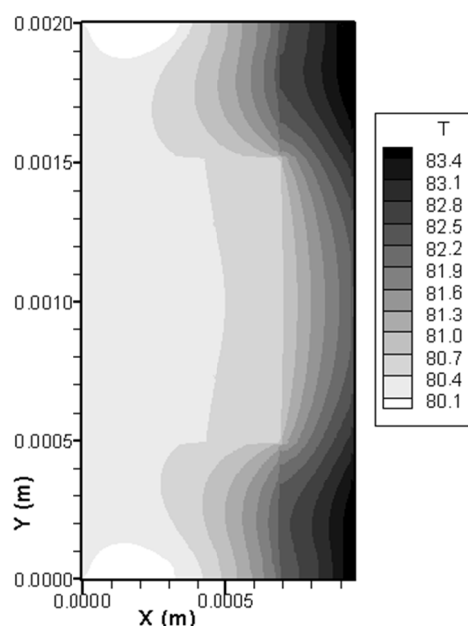
$$\bar{n}_{O_2}(out) - \bar{n}_{O_2}(in) = \Delta n_{O_2} L_{ch} / (2\dot{V}_c) \quad (32)$$

$$\bar{n}_W(out) - \bar{n}_W(in) = \Delta n_W L_{ch} / (2\dot{V}_c) \quad (33)$$

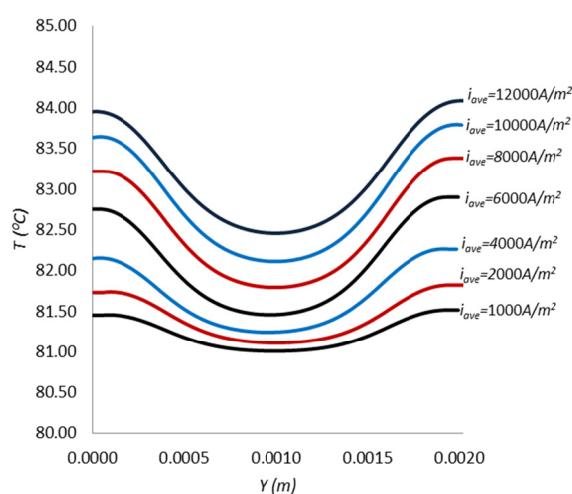
در مورد دما، به دلیل وابستگی افزایش دما در طول کانال به کارکرد سیستم خنک کاری، تأثیر آرایش کانال را اعمال نمی‌کنیم. البته عملاً افزایش دما در طول کانال ناچیز بوده و عملکرد پیل را چندان تحت تأثیر قرار نمی‌دهد.

جدول‌های ۱ و ۲ به ترتیب پارامترهای فیزیکی و شرایط عملکردی پیل سوختی شبیه‌سازی شده را نشان می‌دهند.

1. Counter-slip temperature
2. Serpentine



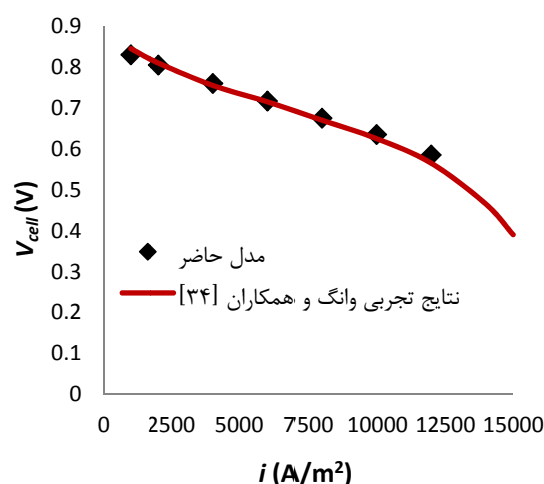
شکل ۴ میدان دما در ناحیه حل



شکل ۵ منحنی دما در بارهای مختلف در کاتالیست کاتد

عامل اول که نقش مهم‌تری دارد سرعت واکنش است که با بار (چگالی جریان) متناسب بوده و همان‌طور که از شکل ۶ مشهود است در نواحی نزدیک به وسط کانال ($Y=W$ و $Y=0$) مقدار بیشتری دارد. این عامل هم‌سو با دوری نسبی از صفحه دوقطبی باعث افزایش دما در نواحی نزدیک به کانال می‌شود. عامل دیگر، انرژی فعال‌سازی واکنش است که در واقع نشان می‌دهد طی انجام واکنش چه مقدار انرژی به صورت حرارت تلف می‌شود. انرژی فعال‌سازی با ولتاژ فعال‌سازی تناسب دارد و

به عنوان معیار دیگری در صحنه‌گذاری، منحنی قطبیدگی که ولتاژ خروجی پیل سوختی را بر حسب چگالی جریان نشان می‌دهد ارزیابی گردید. بدین منظور برای افت اهمی و ولتاژ فعال‌سازی سمت آند از مقادیر نوعی مرجع [۲۳] استفاده شده است. این منحنی، از آن جهت که مستقیماً وابسته به پارامترهای مهمی مثل غلظت اکسیژن و توزیع چگالی جریان در کاتالیست می‌باشد، تأثیر شرایط و عوامل مختلف را در خود گنجانده است. شکل ۳ داده‌های ولتاژ بر حسب چگالی جریان به دست آمده از کار حاضر را با منحنی تجربی گزارش‌شده توسط وانگ و همکاران [۳۴] مقایسه می‌کند. شرایط عملکردی اجرای ارزیابی مدل حاضر با آنچه در این مرجع برای آزمایش به کار رفته است یکسان در نظر گرفته شده است. همخوانی قابل قبولی بین نتایج عددی و تجربی در محدوده چگالی جریان مدل شده قابل مشاهده است.



شکل ۳ منحنی قطبیدگی مدل حاضر و داده‌های تجربی

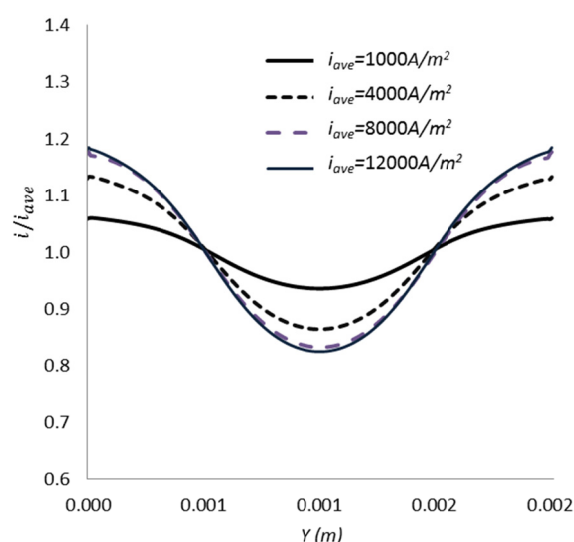
در شکل ۴، میدان دما در ناحیه حل و در شکل ۵ منحنی دما به ازای بارهای مختلف در کاتالیست کاتد نمایش داده شده است. صفحه دوقطبی که دارای خواص هدایت حرارتی مناسبی می‌باشد و خود به وسیله سیستم خنک‌کننده مستقلی خنک می‌شود، نقش اساسی در جذب حرارت تولیدی از واکنش و دفع آن دارد. بنابراین در نواحی نزدیک به صفحه دوقطبی (حول و حوش $Y=W/2$)، دما به طور محسوسی از نواحی اطراف پایین‌تر است. البته دو عامل دیگر نیز در تعیین منحنی تغییرات دما در ناحیه کاتالیست مؤثر است.

می‌دهد بیانگر این است که در نواحی پشت صفحه دوقطبی جریان کمتری تولید می‌شود. با توجه به اینکه غلظت ماده اولیه (اکسیژن) با چگالی جریان انتقالی ارتباط نمایی دارد و در پشت صفحه دوقطبی، به خاطر دور بودن نسبی از محل تغذیه (کانال)، غلظت اکسیژن کمتر است، چگالی جریان کمتر و در نتیجه سرعت واکنش کمتری خواهیم داشت. از طرفی همان‌طور که رابطه (۵) نشان می‌دهد، چگالی جریان با دما هم ارتباط نمایی دارد و با افزایش دما افزایش می‌یابد. بنابراین بالابودن نسبی دما در نقاط نزدیک به کانال (شکل ۵) عامل دیگری در ایجاد منحنی‌های شکل ۶ است. از شکل ۶ همچنین مشاهده می‌شود که هر چه بار بیشتر باشد، افت چگالی جریان در ناحیه پشت صفحه دوقطبی تشدید می‌شود و در بار $i = 1000 A/m^2$ منحنی تقریباً مسطح شده و سرعت واکنش در سراسر کاتالیست تقریباً یکنواخت می‌ماند. دلیل این مشاهده آن است که هر چه بار یا در واقع میزان واکنش بیشتر باشد، جریان اکسیژن مصرف‌شده در پشت صفحه دوقطبی مشکل‌تر می‌شود و غلظت آن کاهش بیشتری پیدا می‌کند. به علاوه از توجه در منحنی‌های شکل ۷ نتیجه می‌شود که با افزایش بار، پتانسیل فعال‌سازی واکنش و اتلاف حرارت شدت بیشتری می‌یابد. این افزایش پتانسیل فعال‌سازی خود معلول کاهش اکسیژن است. همان‌طور که می‌بینیم، کمیت‌های چگالی جریان، دما، غلظت اکسیژن و انرژی فعال‌سازی با هم ارتباط تنگاتنگ و دوطرفه‌ای دارند و اثر یکدیگر را تقویت یا تضعیف می‌کنند.

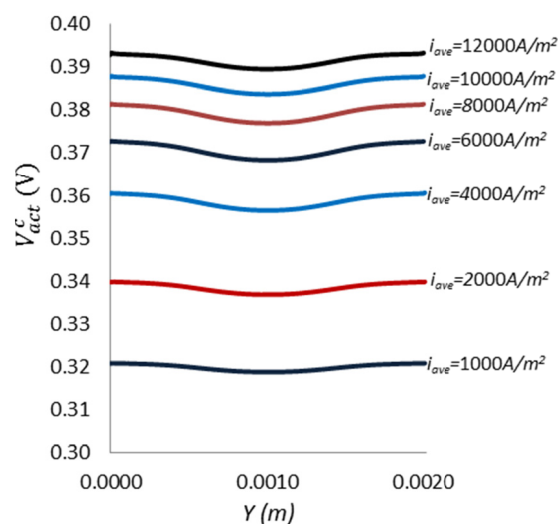
شکل‌های ۸ و ۹ به ترتیب غلظت اکسیژن و آب را در کاتالیست کاتد نشان می‌دهند. اکسیژن برای انجام واکنش غیرمستقیم در کاتالیست مصرف می‌شود و غلظت آن در این ناحیه از سایر نقاط کمتر است. در خود کاتالیست هم، در قسمت‌های پشت صفحه دوقطبی که مسافت بیشتری تا کانال دارد، غلظت اکسیژن از سایر قسمت‌ها کاهش بیشتری می‌یابد. آب نیز در اثر واکنش به میزان حجمی بالغ بر دوبرابر اکسیژن تولید می‌شود و از سمت کانال دفع می‌شود.

آب علاوه بر تولید بر اثر کشش الکترواسمزی نیز به کاتالیست کاتد انتقال می‌یابد. میزان این کشش متناسب با چگالی جریان محلی در سمت آند است. چنانچه آرایش کانال‌ها در سمت آند از لحاظ محل قرارگیری صفحه دوقطبی با سمت

منحنی تغییرات آن در شکل ۷ نشان داده شده است. همان‌طور که این شکل نشان می‌دهد در یک بار معین ولتاژ فعال‌سازی در نواحی نزدیک به کانال به بیشترین مقدار می‌رسد. پس این عامل نیز تمایل به افزایش بیشتر دما در نواحی نزدیک به کانال دارد.



شکل ۶ منحنی‌های نرمال‌شده چگالی جریان کاتد



شکل ۷ منحنی‌های ولتاژ فعال‌سازی در کاتالیست کاتد

منحنی توزیع چگالی جریان در کاتد در سایر منحنی مشخصه‌های الکتروشیمیایی نقش تعیین‌کننده دارد. شکل ۶ که منحنی‌های نرمال‌شده بار (نسبت چگالی جریان محلی به چگالی جریان متوسط) را در چگالی جریان‌های مختلف نشان

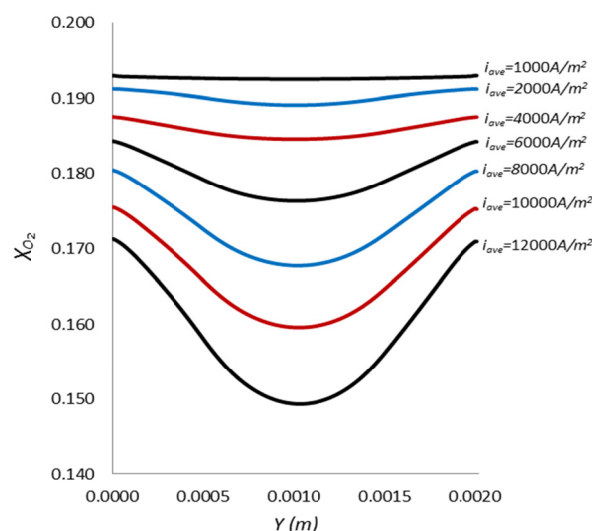
است، با عبور از غشا به آند منتقل می‌شود. این مکانیزم تنها در بارهای کوچک ($i < 1000 \text{ A/m}^2$ در شبیه‌سازی حاضر) قابل توجه است. هر چند اثر مکانیزم‌های تولید و کشش الکترواسمزی بر افزایش مول آب در ناحیه نزدیک به مرکز کانال بیشتر از سایر نقاط کاتالیست است، اما نقش صفحه دوقطبی به عنوان مانعی در برابر عبور و دفع این آب آن قدر بالاست که بر مکانیزم‌های دیگر غلبه کرده و در نهایت غلظت آب در تمام بارها در ناحیه پشت صفحه دوقطبی ($Y = W/2$) بیشینه می‌شود.

از دقت در شکل‌های ۷ تا ۹ اندکی عدم تقارن در منحنی‌ها نسبت به محور $Y = W/2$ مشهود است که علت آن تفاوتی است که در غلظت مواد بین کانال رفت و برگشت وجود دارد. در کانال برگشت نسبت به کانال رفت به طور جزئی افزایش غلظت آب و کاهش غلظت اکسیژن داریم.

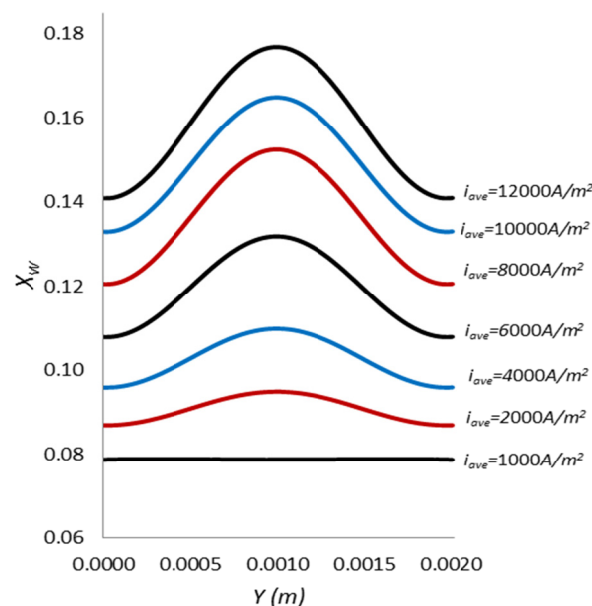
۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، مدلی به روش بولتزمن شبکه‌ای برای مطالعه عملکرد الکتروشیمیایی کاتد یک پیل سوختی غشای تبادل پروتون ارائه گردید. بدین منظور جریان سیالات و تولید و انتقال حرارت در کاتالیست، لایه انتشار گاز، کانال و صفحه دوقطبی در سمت کاتد شبیه‌سازی شد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که تغییرات هر یک از کمیت‌های چگالی جریان، دما، غلظت آب و اکسیژن در کاتالیست بر کمیت‌های دیگر مؤثر است. اما همه این کمیت‌ها به شدت متأثر از وجود صفحه دوقطبی در مجاورت لایه انتشار گاز بوده و مقدارشان در نقاط پشت صفحه دوقطبی نسبت به نقاط دور از آن تفاوت چشمگیری دارد. صفحه دوقطبی به صورت مانعی در برابر رسیدن اکسیژن به کاتالیست و دفع آب از آن عمل می‌کند و در نتیجه غلظت اکسیژن و آب پشت صفحه دوقطبی در مقایسه با سایر نقاط به ترتیب کاهش و افزایش نشان می‌دهد. به همین دلیل سهم ناحیه پشت صفحه دوقطبی در تولید جریان کمتر بوده و افت پتانسیل ناشی از فعال‌سازی واکنش بیشتر می‌شود. در عین حال صفحه دوقطبی نقش مؤثری در جذب و هدایت حرارت ناشی از واکنش به بیرون ایفا می‌کند و دمای ناحیه کاتالیست در نزدیکی صفحه دوقطبی افزایش کمتری دارد.

کاتد تطابق داشته باشد، نقاط بیشینه و کمینه چگالی جریان در سمت آند و کاتد در عرض‌های یکسانی واقع خواهد شد. در شبیه‌سازی حاضر، همان‌طور که در عمل رایج است، آرایش دو سمت یکسان در نظر گرفته شده و بنابراین میزان انتقال الکترواسمزی آب در نقاط نزدیک به کانال بیشتر است.



شکل ۸ منحنی‌های غلظت اکسیژن در کاتالیست کاتد



شکل ۹ منحنی‌های غلظت آب در کاتالیست کاتد

برای انتقال آب مکانیزم دیگری نیز به نام انتشار معکوس وجود دارد که طی آن آب از سمت کاتد، که غلظت بیشتر

۶- نشانه‌ها و حروف اختصاری

Θ	لزجت سینماتیکی ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)	C_s	سرعت صوت در شبکه (واحد طول شبکه بر گام زمانی)
Ω	عملگر برخورد	D	ضریب انتقال جرم ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
زبروندها و زیروندها		E	جهات شبکه
a	آند	E^0	اختلاف پتانسیل مدار باز (V)
c	کاتد	F	ثابت فاراده (C mole^{-1})
ct	کاتالیست	$\vec{F}$	بردار نیروی محیط متخلخل (m s^{-1})
H_2	هیدروژن	F_x, F_y	مؤلفه‌های نیروی محیط متخلخل (m s^{-1})
i	جهات شبکه	F	توزیع چگالی شبکه
O_2	اکسیژن	F_ξ	تابع هندسی محیط متخلخل
ref	مرجع	I	ماتریس یک
W	بخار آب	i	چگالی جریان (A m^{-2})
β, α	گونه‌ها (هیدروژن، اکسیژن، آب)	i_{ave}	چگالی جریان متوسط (A m^{-2})
۷- مراجع		K	تراوایی هیدرولیکی بستر متخلخل (m^2)
		L_{ch}	طول یک کانال (m)
		MW	جرم مولکولی (kg mole^{-1})
		N	غلظت مولی (mole m^{-3})
		n_d	ضریب کشش الکترواسمزی
		P	فشار (Pa)
		R	ثابت گازها ($\text{J mole}^{-1} \text{K}^{-1}$)
		T	دما ($^{\circ}\text{C}$)
		t_{ct}	ضخامت لایه کاتالیست
		$\vec{u}$	بردار سرعت (m s^{-1})
		V_{cell}	اختلاف پتانسیل واقعی پیل (V)
		V_{act}	افت ولتاژ فعالسازی (V)
		$\dot{V}_c$	دبی کانال سمت کاتد ($\text{m}^3 \text{s}^{-1}$)
		W	عرض میدان حل (m)
		ω	تابع وزنی جهات شبکه
		X	غلظت کسر مولی
		X, Y	مختصات (m)
		Δt	گام زمانی (s)
		Δy	فاصله گره‌های محاسباتی (m)
		ε	تخلخل
		ρ	چگالی (kg m^{-3})
		τ	زمان آرامش در معادله برخورد

- [1] Berning T., Djilali N., "Three-Dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a PEM Fuel Cell", *Journal of Power Sources*, Vol. 124, 2003, pp. 440-452.
- [2] Bernardi D. N., Verbrugge M. W., "Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte", *American Institute of Chemical Engineering Journal*, Vol. 37, 1991, pp. 1151-1163.
- [3] Rowe A., Li X., "Mathematical Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 102, 2001, pp. 82-96.
- [4] Chu H. S., Yeh C., Chen F., "Effects of Porosity Change of Gas Diffuser on Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cell", *Journal of Power Sources*, Vol. 123, 2003, pp. 1-9.
- [5] Wang Z. H., Wang C. Y., Chen K. S., "Two-Phase Flow and Transport in the Air Cathode of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 94, 2001, pp. 40-50.
- [6] Singh D., Lu D. M., Djilali N., "A Two-Dimensional Analysis of Mass Transport in Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *International Journal of Engineering Science*, Vol. 37, 1999, pp. 431-452.
- [7] Um S., Wang C. Y., Chen K. S., "Computational Fluid Dynamics Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 147, 2000, pp. 4485-4493.

- Ray Nano-Tomography”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 65, 2010, pp. 2213-2217.
- [18] Hao L., Cheng P., “Lattice Boltzmann Simulations of Water Transport in Gas Diffusion Layer of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell”, *Journal of Power Sources*, Vol. 195, No. 12, 2010, pp. 3870-3881.
- [19] Ben Salah Y., Tabe Y., Chikahisa T., “Two Phase Flow Simulation in a Channel of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell using the Lattice Boltzmann Method”, *Journal of Power Sources*, Vol. 199, 2012, pp. 85-93.
- [20] Mukherjee P. P., Wanga C. Y., Kangb Q., “Mesoscopic Modeling of Two-Phase Behavior and Flooding Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cells”, *Electrochimica Acta*, Vol. 54, 2009, pp. 6861-6875.
- [21] Han B., Yu J., Meng H., “Lattice Boltzmann Simulations of Liquid Droplets Development and Interaction in a Gas Channel of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell”, *Journal of Power Sources*, Vol. 202, No. 15, 2012, pp. 175-183.
- [22] Park J., Matsubara M., Li X., “Application of Lattice Boltzmann Method to a Micro-Scale Flow Simulation in the Porous Electrode of a PEM Fuel Cell”, *Journal of Power Sources*, Vol. 173, 2007, pp. 404-414.
- [23] Larminie J., Dicks A., *Fuel Cell Explained*, 2nd ed., West Sussex, John Wiley & Sons, 2003, pp. 33-51.
- [24] Sukop M. C., Thorne D. T., *Lattice Boltzmann Modelling*, Berlin, Springer, 2006, pp. 31-54.
- [25] Suh Y. K., Kang J., Kang S., “Assessment of Algorithms for the no-Slip Boundary Condition in the Lattice Boltzmann Equation of BGK Model”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 58, 2008, pp. 1353-1378.
- [26] Haghshenas A., Rafati Nasr M., Rahimian M. H., “Numerical Simulation of Natural Convection in an Open Square Cavity Filled with Porous Medium by Lattice Boltzmann Method”, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, Vol. 37, No. 10, 2010, pp. 1513-1519.
- [27] Cai J., Huai X., “Study on Fluid-Solid Coupling Heat Transfer in Fractal Porous Medium by Lattice Boltzmann Method”, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 30, 2010, pp. 715-723.
- [28] Liu C. H., Lin K. H., Mai H. C., Lin C. A., “Thermal Boundary Conditions for Thermal Lattice Boltzmann Simulations”, *Computers and Mathematics with Applications*, Vol. 59, 2010, pp. 2178-2193.
- [8] Seddiq M., Khaleghi H., Mirzaei M., “Numerical Analysis of Gas Cross-Over Through the Membrane in a Proton Exchange Membrane Fuel Cell”, *Journal of Power Sources*, Vol. 161, 2006, pp. 371-379.
- [9] Jen T. C., Yan T., Chan S. H., “Chemical Reacting Transport Phenomena in a PEM Fuel Cell”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, 2003, pp. 4157-4168.
- [10] Meng H., Wang C. Y., “Electron Transport in PEFCs”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 151, No. 3, 2004, pp. A358-A367.
- [11] Hu M., Gu A., Wang M., Zhu X., Yu L., “Three Dimensional, Two Phase Flow Mathematical Model for PEM Fuel Cell: Part I. Model Development”, *Energy Conversion and Management*, Vol. 45, 2004, pp. 1861-1882.
- [12] Hu M., Gu A., Wang M., Zhu X., Yu L., “Three Dimensional, Two Phase Flow Mathematical Model for PEM Fuel Cell: Part II. Analysis and Discussion of the Internal Transport Mechanisms”, *Energy Conversion and Management*, Vol. 45, 2004, pp. 1883-1916.
- [13] Hao L., Cheng P., “Lattice Boltzmann Simulations of Anisotropic Permeabilities in Carbon Paper Gas Diffusion Layers”, *Journal of Power Sources*, Vol. 186, 2009, pp. 104-114.
- [14] Van Doormaal M. A., Pharoah J. G., “Determination of Permeability in Fibrous Porous Media using the Lattice Boltzmann Method with Application to PEM Fuel Cells”, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 59, 2009, pp. 75-89.
- [15] Tabe Y., Lee Y., Chikahisa T., Kozakai M., “Numerical Simulation of Liquid Water and Gas Flow in a Channel and a Simplified Gas Diffusion Layer Model of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells using the Lattice Boltzmann Method”, *Journal of Power Sources*, Vol. 193, 2009, pp. 24-31.
- [16] Chen L., Luan H. B., He Y. L., Tao W. Q., “Pore-Scale Flow and Mass Transport in Gas Diffusion Layer of Proton Exchange Membrane Fuel Cell with Interdigitated Flow Fields”, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 51, 2012, pp. 132-144.
- [17] Ostadi H., Rama P., Liu Y., Chen R., Zhang X. X., Jiang K., “Influence of Threshold Variation on Determining the Properties of a Polymer Electrolyte Fuel Cell Gas Diffusion Layer in X-

- [29] نظری محسن، رضانی سپیده، "انتقال حرارت جابجایی آزاد در یک حفره مربعی با وجود مانع گرم به روش شبکه بولتزمن"، *مجله علمی-پژوهشی مکانیک مدرس*، دوره ۱۱، شماره ۲، ۱۳۹۰، صص ۱۱۹-۱۳۳.
- [30] Guo Zh., Zhao T. S., "Lattice Boltzmann Model for Incompressible Flows through Porous Media", *Physical Review E*, Vol. 66, 2002, p. 036304.
- [31] Bai H., Yu P., Winoto S. H., Low H. T., "Lattice Boltzmann Method for Flows in Porous and Homogenous Fluid Domains Coupled at the Interface by Stress Jump", *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 60, 2009, pp. 691-708.
- [32] Grew K. N., Joshi A. S., Peracchio A. A., Chiu W. K. S., "Pore-Scale Investigation of Mass Transport and Electrochemistry in a Solid Oxide Fuel Cell Anode", *Journal of Power Sources*, Vol. 195, 2010, pp. 2331-2345.
- [33] Zhou L., Xuan Y., Li Q., "Multiscale Simulation of Flow and Heat Transfer of Nanofluid with Lattice Boltzmann Method", *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 36, 2010, pp. 364-374.
- [34] Wang L., Husar A., Zhou T., Liu H., "A Parametric Study of PEM Fuel Cell Performances", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 28, 2003, pp. 1263-1272.
- [35] Nitta I., Himanen O., Mikkola M., "Thermal Conductivity and Contact Resistance of Compressed Gas Diffusion Layer of PEM Fuel Cell", *Technical report*, published by Helsinki University of Technology Publications in Engineering Physics, Feb., 2008.
- [36] Kermani M. J., Stockie J. M., "Heat and Mass Transfer Modeling of Dry Gases in the Cathode of PEM Fuel Cells", *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, Vol. 18, No. 2, 2004, pp. 153-164.