



تحلیل سه بعدی اثر افزودن یک لایه متخلخل آب گریز بر اشباع آب در سمت کاتد یک پیل سوختی پلیمری

سید مهدی مهنما¹، مرتضی خیاط^{2*}

1- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات، تهران

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی - واحد علوم و تحقیقات، تهران

* صندوق پستی 775/14515، mkhayat@srbiau.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 31 تیر 1395
پذیرش: 14 مهر 1395
ارائه در سایت: 24 آبان 1395

کلید واژگان:

پیل سوختی پلیمری
شبیه سازی دوفازی
لایه متخلخل آب گریز
منحنی عملکرد پیل سوختی
اشباع آب مایع

چکیده

در این مقاله، به بررسی تاثیر اضافه نمودن یک لایه متخلخل آب گریز (MPL) در سمت کاتد یک پیل سوختی پلیمری بر عملکرد آن پرداخته می شود. برای این منظور، شبیه سازی سه بعدی و دوفازی غیر هم دما برای لایه های مختلف سمت کاتد یک پیل سوختی پلیمری شامل کانال گاز، لایه نفوذ گاز (GDL)، لایه متخلخل نفوذ گازی آب گریز (MPL) و لایه کاتالیست انجام شده است. معادلات حاکم بر جریان سیال درون پیل سوختی با استفاده از مدل چند فازی میکسچر از طریق کد نویسی حل شده و توزیع سرعت، فشار، دما، غلظت اجزاء واکنش گر و میزان اشباع آب مایع در لایه های مختلف سمت کاتد پیل بدست آمده اند. همچنین اثر تغییر خواص فیزیکی و رطوبتی MPL شامل ضخامت، تخلخل، زاویه تماس و نفوذپذیری آن بر میزان اشباع آب و نیز عملکرد پیل مورد مطالعه و ارزیابی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که با افزودن لایه اضافی MPL بین لایه های نفوذ گاز و کاتالیست به دلیل تفاوت در خواص رطوبتی این لایه ها یک ناپوستگی در اشباع آب و غلظت اجزاء واکنش گر در سطح تماس آنها به وجود می آید. همچنین بر اساس نتایج بدست آمده، افزایش تخلخل MPL باعث کاهش اشباع آب مایع و در نتیجه بهبود عملکرد پیل می شود، در حالی که افزایش ضخامت آن، عملکرد پیل را کاهش می دهد. به منظور صحت گذاری نتایج بدست آمده، منحنی عملکرد حاصل از شبیه سازی تک فازی و دوفازی پیل با نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردیده و تطابق خوبی مشاهده شده است.

Three dimensional analysis of adding a hydrophobic porous layer on water saturation at the cathode of a PEM fuel cell

Seyed Mehdi Mahnama, Morteza Khayat*

Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

* P.O.B. 775/14515, Tehran, Iran, mkhayat@srbiau.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 21 July 2016
Accepted 05 October 2016
Available Online 14 November 2016

Keywords:

Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell
Two-Phase Simulation
Hydrophobic Porous Layer
Fuel Cell Performance Curve
Liquid Water Saturation

ABSTRACT

In this paper, the effect of adding a hydrophobic micro porous layer (MPL) at the cathode side of a PEM fuel cell on the cell performance is investigated. For this purpose, a three dimensional two-phase non-isothermal simulation of cathode side layers of a PEM fuel cell which includes gas channel, gas diffusion layer (GDL), hydrophobic micro porous layer (MPL) and catalyst layer (CL) has been performed. The governing equations of fluid flow in the fuel cell are solved with a multiphase mixture model via developing a code and distribution of velocity, pressure, temperature, species concentration and liquid water saturation at the various layers of the cathode side of fuel cell are obtained. Furthermore, the effect of physical and wetting properties of MPL including thickness, porosity, contact angle and permeability on saturation level and performance of the fuel cell are studied. The results show that by adding an extra micro porous layer between GDL and catalyst layer because of differencing in the wetting properties of the layers, a discontinuity appears in the liquid saturation and species concentration at the contact surface of them. In addition, according to the obtained results, increasing the MPL porosity causes liquid water saturation to decrease and improves the cell performance. While increasing the MPL thickness decreases the cell performance. In order to validate the results, the performance curves calculated by single and two-phase simulations were compared with experimental results and good agreement was found between them.

1- مقدمه

انواع مختلف پیل سوختی، پیل های سوختی غشاء پلیمری¹ به دلیل چگالی توان بالا و دمای عملکردی پایین، بسیار مورد توجه بوده و به عنوان یکی از گزینه های جایگزینی منبع تولید توان در خودروها و نیز کاربری ذخیره سازی انرژی در آینده به شمار می روند.

پیل های سوختی مبدل های انرژی هستند که انرژی ذخیره شده در سوخت ها و اکسیدکننده ها را از طریق واکنش های الکتروشیمیایی به الکتریسیته تبدیل می کنند و از آن ها به عنوان منابع انرژی پاک در آینده یاد می شود. در میان

¹ PEM fuel cell

یکی از چالش‌های اساسی در پیل‌های سوختی پلیمری، مدیریت آب در سمت کاتد آن می‌باشد. لایه نفوذ گاز (GDL) نقش کلیدی در خصوص این موضوع ایفاء می‌کند. این لایه از یک طرف باعث هدایت بخار آب موجود در کانال به سمت غشاء می‌شود تا از این طریق رسانایی پروتونی آن را افزایش دهد و از طرف دیگر، به انتقال آب مایع تولید شده در لایه کاتالیست به سمت خارج پیل کمک می‌کند. انتقال واقعی آب در ناحیه متخلخل چند لایه سمت کاتد پیل به دلیل مکانیزم‌های مختلف جریان در لایه نفوذ گاز (اثرات موینگی و تغییر فاز ناشی از جریان) می‌تواند بسیار پیچیده باشد. انتقال آب تولید شده و اجزاء واکنش‌گر به ویژگی‌های ساختمانی آن از جمله ضخامت، تخلخل، سطح آب‌گریزی و نفوذپذیری¹ بستگی دارد [1-3]. تحقیقات پیشین نشان می‌دهد که افزودن یک لایه متخلخل آب‌گریز بین لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست که به MPL^2 معروف است، یکی از راه‌های موثر در هدایت بهتر آب مایع به سمت خارج پیل و در نتیجه جلوگیری از به وجود آمدن پدیده فلودینگ³ می‌باشد. MPL از نوعی ماده با خاصیت آب‌گریزی مانند پلی-تترا-فلوئورو-اتیلن⁴ ساخته می‌شود که در یک سمت لایه نفوذ گازی قرار می‌گیرد. وظیفه اصلی این لایه، مدیریت آب است، به طوری که به انتقال آب تولید شده در لایه کاتالیست به طرف کانال جریان کمک می‌کند. مطالعات آزمایشگاهی زیادی تاکنون به منظور بررسی اثر افزودن این لایه بر عملکرد پیل‌های سوختی پلیمری انجام شده است. پاسالاکوآ و همکارانش [4] با انجام آزمایش‌های مختلف نشان دادند که پیل سوختی با لایه MPL عملکرد بهتری نسبت به شرایط بدون MPL دارد. ولایوتام [5] نیز به صورت آزمایشگاهی اثر اضافه نمودن مقادیر PTFE در یک سمت لایه نفوذ گاز بر عملکرد پیل را بررسی نمود و نشان داد که عملکرد پیل با افزودن این لایه در سمت کاتد بهبود می‌یابد. آزمایش مشابهی توسط چن و همکارانش [6] انجام گرفت و در نهایت یک ترکیب بهینه برای MPL سمت کاتد پیشنهاد گردید. چن و چانگ [7] به صورت آزمایشگاهی نشان دادند که MPL به کاهش اشباع آب در لایه نفوذ گاز کمک نموده و از این طریق، انتقال اکسیژن به سطح لایه کاتالیست را تسهیل می‌کند. همچنین دیوانژی و همکارانش [8] با استفاده از رادیوگرافی، اثر تشکیل آب مایع در ناحیه نفوذ گازی را بر عملکرد پیل سوختی در حالت با MPL و نیز بدون حضور این لایه در سمت کاتد پیل گزارش نمودند. هوانگ و چانگ [9] نیز اثر لایه نفوذ گاز سمت کاتد به همراه لایه متخلخل آب‌گریز بر عملکرد پیل را بررسی نمودند. برای این منظور یک پیل سوختی پلیمری تحت شرایط عملکردی مختلف تست شده و نتایج آن گزارش گردیده است.

به دلیل مشکلات موجود در روش‌های آزمایشگاهی، با گسترش روز افزون امکانات رایانه‌ای و پیشرفت انواع روش‌های عددی، استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای این منظور به عنوان جایگزین انجام آزمایش‌های متعدد معمول گشته است. روش‌های معمول مدل‌سازی دو فازي جریان در پیل سوختی که بر پایه حل معادلات بقاء هستند، مدل چند سیالی⁵ و روش میکسچر⁶ می‌باشند. در مدل چند سیالی که اولین بار توسط کارنز و جیلالی [10] برای مدل‌سازی پیل سوختی پلیمری استفاده گردید و در فعالیت‌های تحقیقاتی دیگر به منظور تحلیل و بررسی پدیده‌های انتقال حرارت و جرم در قسمت‌های مختلف پیل سوختی مورد استفاده قرار گرفت

¹ Permeability² Micro Porous Layer³ Flooding⁴ Poly Tetra Flouro Ethylene (PTFE)⁵ Multi-Fluid⁶ Mixture

[11-13]، هر فاز توسط یک دسته از معادلات بقاء معرفی می‌گردند و این دو فاز با حالت اشباع کوپل می‌شوند. این مدل از کمترین فرضیات استفاده نموده است، ولی به متغیرهای وابسته زیادی نیاز دارد و کوپل نمودن فازها ممکن است منجر به ناپایداری حل عددی گردد. مدل میکسچر برای اولین بار توسط وانگ و همکارانش [14] در مدل‌سازی پیل‌های سوختی استفاده گردید و در فعالیت‌های تحقیقاتی بعدی دیگر توسعه یافت [15-17]. مدل چند فازي میکسچر، معادلات بقاء را برای مخلوط دو فازي (مخلوط آب مایع و گاز) حل می‌نماید که اصولاً بر پایه ویژگی‌های متوسط جرمی مخلوط دو فازي می‌باشد. مزیت اصلی این روش آن است که از معادلات دیفرانسیل غیر خطی کمتری در حل آن استفاده می‌شود و نیازی به تعیین رفتار بین دو فاز در سطح مشترک دو فاز مایع و گاز نیست. نام و کاویانی [18] با استفاده از یک روش یک بعدی، توزیع اشباع آب در پیل را پیش‌بینی نموده و به‌وجود آمدن ناپیوستگی اشباع را در عرض لایه نفوذ گاز و در سطح تماس لایه نفوذ گاز و MPL نشان دادند. وبر و نیومن [19] یک مدل جریان دوفازي برای بیان اثر MPL بر روی مدیریت آب سمت کاتد را توسعه دادند. نتایج شبیه‌سازی، نقش MPL را در دور نگه داشتن لایه نفوذ گاز از آب مایع نشان داده و باعث به حداقل رساندن فلودینگ و مرطوب شدن بهتر غشاء شده است. پاسالاکوآ و همکارانش [20,21] با استفاده از یک مدل یک بعدی میکسچر دوفازي، انتقال دوفازي واکنش‌گرها و آب را در لایه نفوذ گاز و MPL مطالعه نمودند. اثرات خواص رطوبتی، ضخامت و تخلخل این لایه‌ها بر انتقال آب مایع نیز بررسی گردیده است. منگ [11] یک مدل دوفازي بر پایه مدل دو سیالی که قابلیت مدل‌سازی انتقال آب مایع در عرض لایه نفوذ گاز با لحاظ نمودن MPL را داراست، توسعه داد. برنینگ و همکارانش [13] یک مدل سه بعدی چند فازي با رویکرد مدل چند سیالی را که شار آب از ناحیه متخلخل سمت کاتد پیل به سمت کانال جریان را نشان می‌دهد، توسعه دادند. اثر پارامترهای فیزیکی لایه‌های مختلف پیل بر اشباع آب مایع مورد بررسی قرار گرفت. یک مدل عددی دیگر بر پایه مدل میکسچر برای تبیین نقش MPL بر عملکرد پیل توسط کانگ و همکارانش [22] توسعه داده شد. اثر فشار ورودی آب مایع بین لایه نفوذ گاز و MPL با استفاده از مدل سه بعدی مورد مطالعه قرار گرفت. وانگ و همکارانش [23,24] از یک مدل دوفازي یک‌بعدی برای ارزیابی نقش ویژگی‌های MPL در میزان اشباع آب و عملکرد پیل استفاده کردند. نتایج، بهبود عملکرد پیل را با اضافه نمودن این لایه تأیید نمودند. احمدی و روشندل [25] اثر ضخامت MPL بر اشباع آب و عملکرد پیل را با استفاده از مدل چند فازي میکسچر و به‌صورت دوبعدی در راستای کانال مطالعه نمودند. دامنه محاسباتی مدل، تنها شامل کانال گاز و لایه‌های نفوذ گاز بوده است. علی‌رغم اینکه تاکنون فعالیت‌های تحقیقاتی متعددی در این زمینه انجام شده است، تشریح کامل تأثیر این ویژگی‌ها بر روی عملکرد پیل با استفاده از مدل‌های واقعی‌تر همچنان از اهمیت فراوانی برخوردار است.

در تحقیق حاضر، به شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی جریان دوفازي غیر هم‌دما در حالت پایا در سمت کاتد یک پیل سوختی غشاء پلیمری پرداخته می‌شود. معادلات بقای جرم، ممنتوم، انرژی، بقای اجزاء، پتانسیل یونی و الکترونی به همراه معادلات کمکی دیگر به صورت هم‌زمان حل می‌شوند و میدان‌های سرعت، فشار، دما، غلظت هر یک از اجزاء واکنش شیمیایی و پتانسیل یونی و الکترونی به دست می‌آیند. تمرکز اصلی در این شبیه‌سازی، بررسی اثر خواص رطوبتی و فیزیکی MPL شامل ضخامت، تخلخل، زاویه تماس و نفوذپذیری آن بر روی اشباع آب مایع و راندمان کلی

پیل سوختی می‌باشد. لذا با استفاده از یک آنالیز حساسیت، میزان اثرگذاری هر یک از این پارامترها بر روی اشباع آب و در نتیجه تاثیر آن بر راندمان پیل سوختی بررسی گردیده است. برای این منظور الگوریتم سیمپل برای حل معادلات بقای جرم و مومنوم به کار گرفته شد و برای شبیه‌سازی جریان دوفازی از مدل چند فازی میکسچر استفاده شد. کد محاسباتی مربوط در محیط فرترن توسعه داده شد.

2- مدل سازی پیل سوختی غشاء پلیمری

2-1- معرفی دامنه حل

در این تحقیق، یک مدل سه بعدی برای انجام شبیه‌سازی پیل سوختی پلیمری به کار گرفته شده است. در این مدل سازی، لایه‌های مختلف سمت کاتد پیل شامل صفحه دوقطبی، کانال انتقال دهنده گونه‌ها، لایه نفوذ گاز (GDL)، لایه متخلخل آب‌گریز (MPL) و لایه کاتالیستی متخلخل (CL) لحاظ شده اند. شکل 1 فضای محاسباتی پیل را جهت انجام شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

2-2- فرضیات و معادلات حاکم

برای انجام این مدل سازی، فرضیات زیر لحاظ گردیده است:

- پیل سوختی در شرایط پایا عمل می‌کند.
- با توجه به سرعت پایین جریان سیال درون پیل سوختی، جریان آرام در نظر گرفته شده است. (در این مقاله عدد رینولدز در حدود 90 می‌باشد).
- قانون گاز ایده آل برای مخلوط گازی استفاده شده است.
- خواص فیزیکی لایه‌های مختلف پیل، به صورت یکنواخت و همگن در نظر گرفته می‌شود.

معادلات حاکم بر جریان سیال در لایه‌های مختلف پیل، معادلات بقای جرم، مومنوم و انرژی، معادلات انتقال اجزاء، پتانسیل یونی و الکترونی و سایر معادلات کمکی می‌باشند که در ادامه به آن‌ها پرداخته شده است. معادلات بقاء برای کل ناحیه‌های پیل سوختی تعریف می‌شوند و در هر ناحیه اختلافات تنها در خصوصیات مواد و عبارت‌های چشمه و چاه می‌باشد.

معادلات پیوستگی و مومنوم خطی بر اساس معادلات ناویر-استوکس، در معادلات (1) و (2) آورده شده است [16,15]:

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (1)$$

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

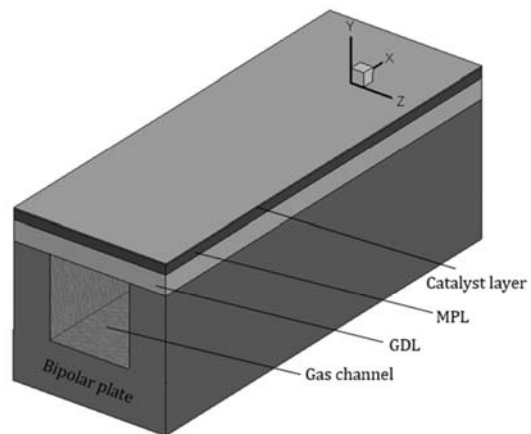


Fig. 1 3D schematic of the cathode of PEM fuel cell

شکل 1 شماتیک سه بعدی سمت کاتد پیل سوختی PEM

در معادله (2)، S_u ترم چشمه معادله مومنوم می‌باشد.

برای اجزاء مخلوط که برای لایه‌های مختلف حل می‌شود، از معادله (3) استفاده می‌گردد [26]:

$$\nabla \cdot (\beta \rho u x_i) = \nabla \cdot (D_{i-g}^{eff} \nabla x_{i-g}) + S_i \quad (3)$$

در معادله (3)، S_i ترم چشمه بوده و i معرف اکسیژن یا آب (آب بخار و مایع با همدیگر لحاظ می‌گردند) می‌باشد.

پتانسیل الکترونی برای حل در صفحه دوقطبی، لایه کاتالیست، لایه نفوذ گاز و MPL با استفاده از معادله (4) بدست می‌آید [26]:

$$0 = \nabla \cdot (\sigma_{ele}^{eff} \nabla \phi_{ele}) + S_{ele} \quad (4)$$

پتانسیل یونی برای حل در لایه کاتالیست از طریق معادله (5) حاصل می‌گردد [26]:

$$0 = \nabla \cdot (\sigma_{ion}^{eff} \nabla \phi_{ion}) + S_{ion} \quad (5)$$

در معادلات (4) و (5) S_{ele} و S_{ion} عبارت‌های چشمه معادلات پتانسیل می‌باشند.

معادله بقای انرژی برای حل در کل فضای دامنه محاسباتی، با استفاده از معادله (6) بیان می‌گردد [26]:

$$\nabla \cdot (\gamma_h \rho c_p u T) = \nabla \cdot (k^{eff} \nabla T) + S_T \quad (6)$$

عبارت‌های چشمه معادلات (1) تا (6) در جدول 1 به طور خلاصه آورده شده‌اند.

برای مخلوط دوفازی، چگالی مخلوط آب مایع و گاز بر اساس خصوصیات و نسبت حجمی آب مایع و مخلوط گازها توسط معادله (7) بدست می‌آید:

$$\rho = \rho_{lq} s_{lq} + \rho_g (1 - s_{lq}) \quad (7)$$

کسر حجمی آب مایع نیز از رابطه (8) محاسبه می‌گردد [26,16]:

$$s_{lq} = \frac{c_{H_2O} - c_{sat}}{\left(\frac{\rho_{lq}}{\rho_{H_2O}}\right) - c_{sat}} \quad (8)$$

ضریب پخش و ضریب پخش موثر گازی هر یک از اجزاء واکنش از روابط (9) و (10) حاصل می‌شود [16]:

$$D_g^i = D_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1.5} \left(\frac{P}{P_0}\right) \quad (9)$$

$$D_g^{i,eff} = [\varepsilon(1 - s_{lq})]^{1.5} D_g^i \quad (10)$$

با نادیده گرفتن اثرات جاذبه زمین، شار آب مایع حاصل از موینگی از رابطه (11) محاسبه می‌گردد [26]:

$$J_{cap,lq} = \frac{\gamma_g \gamma_{lq}}{\mu} \rho K_0 \nabla p_c \quad (11)$$

سایر خواص فیزیکی و انتقالی سیال در جدول 2 آورده شده است.

در رابطه (11)، p_c فشار موینگی می‌باشد که از رابطه لورت (معادلات (12) و (13)) بدست می‌آید [15]:

$$p_c = \sigma_{lq} \cos \theta \left(\frac{\varepsilon}{K_0}\right)^{0.5} \times f(s_{lq}) \quad (12)$$

$$f(s_{lq}) = \begin{cases} 1.42(1 - s_{lq}) - 2.12(1 - s_{lq})^2 + 1.26(1 - s_{lq})^3 & \text{اگر } \theta < 90^\circ \\ 1.42s_{lq} - 2.12s_{lq}^2 + 1.26s_{lq}^3 & \text{اگر } \theta > 90^\circ \end{cases} \quad (13)$$

همچنین در معادله (11)، جابجایی نسبی آب مایع و مخلوط گاز از رابطه‌های (14) و (15) بدست می‌آیند [26]:

$$\gamma_{lq} = \frac{\frac{K_{lq}}{v_{lq}}}{\left(\frac{K_{lq}}{v_{lq}}\right) + \left(\frac{K_g}{v_g}\right)}, \quad \gamma_g = 1 - \gamma_{lq} \quad (14)$$

$$K_{lq} = K_0(1 - s_{lq})^4, \quad K_{lq} = K_0 s_{lq}^4 \quad (15)$$

جدول 1 ترم‌های چشمه در معادلات حاکم [26]

Table 1 Source terms in the governing equations [26]					
S_{ion}	S_{ele}	S_T	S_i	S_u	محدوده
0	0	$\ \nabla\varphi_{ele}\ ^2 k_{ele}^{eff} + h_{fg}\dot{m}_{fg}$	0	0	کانال گاز
0	0	$\ \nabla\varphi_{ele}\ ^2 k_{ele}^{eff} + h_{fg}\dot{m}_{fg}$	$S_{O_2} = \nabla \cdot (X_{O_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	لایه نفوذ گاز و MPL
$-j_c$	j_c	$\ \nabla\varphi_{ele}\ ^2 k_{ele}^{eff} + \ \nabla\varphi_{ion}\ ^2 k_{ion}^{eff} + j_c \frac{T\Delta s}{2F} + \eta_c + h_{fg}\dot{m}_{fg}$	$S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} M_{O_2} + \nabla \cdot (X_{O_2} J_{cap,lq})$ $S_{H_2O} = \frac{j_c}{2F} M_{H_2O} + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_d}{F} \sigma_{ion}^{eff} \nabla \varphi_{ion} \right) M_{H_2O} + \nabla \cdot ((X_{vp} - X_{lq}) J_{cap,lq})$	$-\frac{\mu}{K_0} \vec{u}$	لایه کاتالیست
0	0	$\ \nabla\varphi_{ele}\ ^2 k_{ele}^{eff}$	0	0	صفحه دوقطبی

جدول 2 معادلات کمکی جهت بدست آوردن پارامترهای فیزیکی و انتقالی

Table 2 Auxiliary equations to obtain physical and transport parameters	
معادله	نام پارامتر
$\rho_g = \frac{pM_g}{RT}$	چگالی مخلوط گاز
$\mu = \frac{\rho_{lq}s_{lq} + \rho_g(1 - s_{lq})}{\left[\left(\frac{K_{lq}}{\nu_{lq}}\right) + \left(\frac{K_g}{\nu_g}\right)\right]}$	لزجت مخلوط
$p_{sat} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.2) - 9.1837 \times 10^{-5}(T - 273.2)^2 + 1.4454 \times 10^{-7}(T - 273.2)^3$	فشار اشباع آب
$\beta = \begin{cases} \frac{\rho}{c_{H_2O}} \left(\frac{\gamma_{lq}}{M_{H_2O}} + \gamma_g \frac{c_{sat}}{\rho_g} \right) & \text{برای آب} \\ \frac{\rho \gamma_g}{\rho_g(1 - s_{lq})} & \text{برای سایر اجزاء} \end{cases}$	ضریب تصحیح معادله ممننوم
$c_i = \frac{py_i}{RT}$	غلظت مولی هر گونه گازی
$c_{sat} = \frac{p_{sat}}{RT}$	غلظت مولی اشباع

اثر آن بر لایه مجاور به صورت شرط مرزی اعمال گردد. در مقابل، اگر از روش تک دامنه‌ای برای حل معادلات حاکم در لایه‌های مختلف استفاده شود، فضای محاسباتی به صورت یکپارچه در نظر گرفته شده و معادلات حاکم به طور همزمان در سرتاسر فضای محاسباتی حل خواهند شد، لذا برای مرزهای میانی لایه‌ها نیازی به اعمال هیچ گونه شرط مرزی نمی‌باشد و فقط شرایط مرزی در ورودی‌ها و خروجی‌ها و نیز بر روی دیواره‌ها مشخص می‌شوند. در نتیجه، سطح تماس لایه‌ها به صورت خود به خود مدل می‌گردد. عدم اعمال شرایط مرزی در فصل مشترک نواحی به دقت حل مساله می‌افزاید و حل معادلات را آسان تر می‌نماید، اما زمان محاسبات کامپیوتری طولانی تر می‌شود [27]. در این مقاله با افزودن لایه متخلخل آب گریز (MPL) بین لایه‌های نفوذ گاز و کاتالیست که دارای خصوصیات فیزیکی و رطوبتی متفاوت با لایه‌های متخلخل مجاور خود است، یک ناپیوستگی در میزان اشباع آب و غلظت گازهای واکنش گر در مرز بین این لایه‌های متخلخل ایجاد می‌شود [20]. روش تک دامنه‌ای این ناپیوستگی را نمی‌تواند مدل کند. به منظور مدل سازی این ناپیوستگی، برای حل معادلات بقای اجزاء، از روش چند دامنه‌ای استفاده می‌گردد. روش حل بدین گونه خواهد بود که حل معادلات پیوستگی و ممننوم، انرژی، پتانسیل یونی و الکترونی به روش تک دامنه‌ای انجام خواهند شد و مرزهای داخلی بدون اعمال شرط خاصی خود به خود مدل خواهند گردید. ولی برای معادله بقاء اجزاء، فضای محاسباتی به دو ناحیه تقسیم می‌شود؛ ناحیه اول شامل صفحه دوقطبی، کانال گاز و لایه نفوذ گاز بوده و ناحیه دوم شامل MPL و لایه کاتالیست می‌باشد. برای مدل کردن ناپیوستگی به وجود آمده در مرز ناحیه MPL با لایه نفوذ گاز به این گونه عمل می‌شود که فشار موینگی در مرز مشترک این لایه‌ها یکسان در نظر گرفته شده و بر اساس آن اشباع آب در لایه مجاور از طریق حل روابط (19) و (20) بدست خواهند آمد. لذا با استفاده از مقدار

معادله باتلر-ولمر جهت بدست آوردن چگالی جریان در پیل به صورت معادله (16) می‌باشد [26]:

$$j_c = (1 - s_{lq}) A j_{0,c}^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right) \left(-e^{-\alpha_c F \eta_{act}^{ref} / RT} - e^{-\alpha_a F \eta_{act}^{ref} / RT} \right) \quad (16)$$

چگالی جریان متوسط پیل با انتگرال گیری از چگالی موضعی بر روی سطح کاتالیست، از طریق معادله (17) بدست می‌آید:

$$j_{cell} = \frac{1}{A} \int j dA \quad (17)$$

چگالی توان پیل نیز از حاصل ضرب چگالی جریان در مقدار ولتاژ پیل حاصل می‌گردد (معادله (18)):

$$P_{cell} = V_{cell} \times j_{cell} \quad (18)$$

3-2- شرایط مرزی و روش حل عددی

برای حل عددی معادلات حاکم بر پیل سوختی از روش حجم محدود استفاده گردیده و الگوریتم سیمپل برای بدست آوردن میدان‌های سرعت و فشار بکار گرفته شده است. با حل همزمان معادلات (1) تا (6) که با معادله باتلر-ولمر (16) کوپل می‌شوند، میدان‌های سرعت، فشار، غلظت گونه‌ها، دما، پتانسیل یونی و الکترونی در سمت کاتد پیل بدست آمده و در نتیجه منحنی قطبیت¹ پیل حاصل می‌گردد. الگوریتم حل عددی در شکل 2 آورده شده است.

برای اعمال شرایط مرزی به دو روش چند دامنه‌ای و تک دامنه‌ای می‌توان عمل نمود. در صورتی که از روش چند دامنه‌ای برای مدل سازی استفاده گردد، شرایط مرزی میانی بین لایه‌ها می‌بایست به طور جداگانه مشخص گردیده و معادلات مربوطه در هر ناحیه به صورت مستقل حل شده و

¹ Polarization curve

برای حل معادلات ناویر استوکس، سرعت جریان ورودی در سمت کاتد از رابطه (21) بدست می‌آید:

$$\xi_c = c_{in}^{O_2} u_{c,in} \frac{4F}{j_{ref}} \frac{A_{c,in}}{A} \quad (21)$$

سایر پارامترهای ورودی شامل دما و فشار ورودی سیال و نیز غلظت‌های اکسیژن و آب ثابت می‌باشند. برای محاسبه غلظت ورودی جریان از روابط (22) و (23) استفاده می‌شود:

$$y_{c,in}^{H_2O} = RH_c \frac{p_{sat}}{p_c} \quad (22)$$

$$y_{in}^{O_2} = (1 - y_{c,in}^{H_2O}) \quad (23)$$

در مرزهای خروجی جریان، برای سرعت، شرط توسعه یافتگی اعمال می‌شود و برای سایر پارامترها، گرادیان آن در جهت جریان برابر صفر در نظر گرفته می‌شود. برای دیواره‌های صلب نیز شرط عدم لغزش برای سرعت و شرط گرادیان صفر در جهت عمود بر دیوار برای سایر پارامترها اعمال می‌گردد.

2-4- بررسی عدم وابستگی به شبکه

در این مدل‌سازی برای شبکه‌بندی فضای محاسباتی از شبکه‌های مستطیلی که در جهت X و Z بصورت یکنواخت تقسیم‌بندی شده‌اند، استفاده شده است. همچنین به دلیل تفاوت در ضخامت لایه‌های مختلف پیل در جهت Y ، تقسیم‌بندی در جهت محور Y با اندازه‌های غیر یکنواخت می‌باشد، به گونه‌ای که برای کانال و صفحه دوقطبی، از شبکه درشت استفاده شده است، در حالی که برای لایه‌های پخش گاز از شبکه ریز و برای لایه کاتالیست از شبکه بسیار ریز استفاده گردیده است. نحوه شبکه‌بندی فضای محاسباتی در شکل 3 آورده شده است. به منظور بررسی عدم وابستگی نتایج به اندازه شبکه، ابتدا مدل‌سازی با شبکه‌بندی‌های مختلف درشت، متوسط و ریز انجام شده و منحنی عملکرد پیل برای این شبکه‌بندی‌ها بدست آمده است. نتایج بدست آمده که در شکل 4 گزارش شده است، نشان می‌دهد که انتخاب 231088 حجم کنترل که شامل 202 سلول در جهت X ، 52 سلول در جهت Y و 22 سلول در جهت Z می‌باشد، انتخاب بهینه‌ای بوده و ریزتر کردن اندازه شبکه تاثیر چندانی بر روی نتایج نداشته و تنها حجم محاسبات را افزایش می‌دهد.

3- نتایج و ارزیابی

جدول 3 پارامترهای هندسی و عملکردی پیل را جهت مدل‌سازی نشان می‌دهد. به منظور صحت‌گذاری مدل ارائه شده در این تحقیق، منحنی قطبیت حاصل از شبیه‌سازی در دو حالت تک‌فازی و دوفازی، با نتایج آزمایشگاهی ارائه شده در [28] مقایسه گردیده است. بر این اساس، همان‌گونه که در شکل 5 آورده شده است، تطابق خوبی بین نتایج شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی مشاهده می‌گردد. همچنین مقایسه منحنی قطبیت بین دو حالت تک‌فازی و دوفازی به خوبی نشان می‌دهد که در چگالی جریان‌های بالا مدل دوفازی چگالی جریان کمتری را پیش‌بینی می‌کند. این موضوع به دلیل تولید آب مایع در چگالی جریان‌های بالا می‌باشد که باعث گرفتگی بخشی از روزنه‌های محیط متخلخل لایه نفوذ گاز می‌شود و مانع دسترسی کامل گازهای واکنش‌گر به سطح واکنش می‌گردد. در چگالی جریان‌های پایین به دلیل اینکه فشار جزئی آب کمتر از فشار اشباع می‌باشد، آب در سرتاسر پیل به صورت بخار ظاهر می‌گردد و در نتیجه منحنی قطبیت حاصل از مدل تک‌فازی و دوفازی بر هم منطبق شده‌اند.

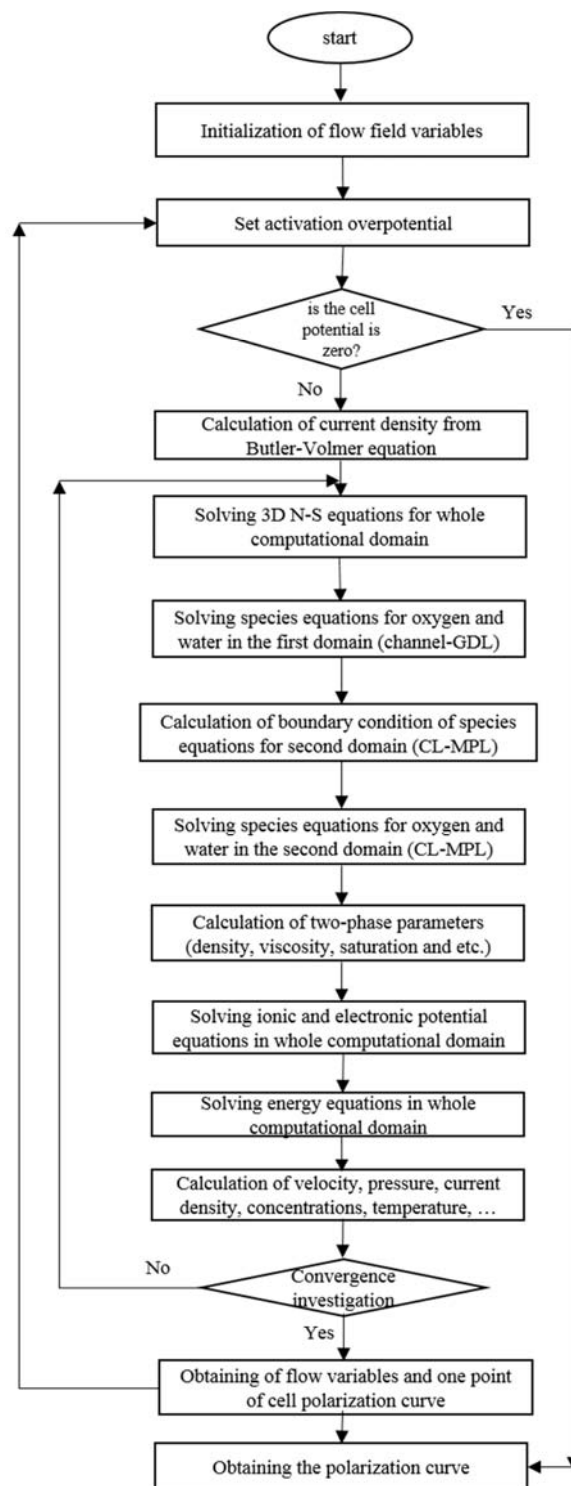


Fig. 2 Numerical solution flowchart

شکل 2 فلوچارت حل عددی

اشباع بدست آمده از این روابط، غلظت‌های آب و اکسیژن در این مرزها بدست آمده و به عنوان شرایط مرزی جدید در معادله بقاء اجزاء استفاده می‌گردد [25,20].

$$P_c^{GDL}|_{GDL-MPL \text{ int}} = P_c^{MPL}|_{GDL-MPL \text{ int}} \quad (19)$$

$$\cos(\theta_c^{GDL}) \left(\frac{\varepsilon_{GDL}}{K_{GDL}} \right)^{\frac{1}{2}} j(s_{int}^{GDL}) = \cos(\theta_c^{MPL}) \left(\frac{\varepsilon_{MPL}}{K_{MPL}} \right)^{\frac{1}{2}} j(s_{int}^{MPL}) \quad (20)$$

جدول 3 پارامترهای عملکردی و هندسی مدل پایه پیل سوختی

Table 3 Geometric and operational parameters for the base model of fuel cell

نام پارامتر	مقدار	واحد
دمای پیل	353	کلوین
فشار کاتد	1	اتمسفر
ضریب استوکیومتری ورودی کاتد	3	-
رطوبت نسبی ورودی کاتد	100%	-
ضریب انتقال بار سمت کاتد	0.5	-
ضریب پخش اکسیژن	0.1806	سانتیمتر مربع بر ثانیه
ضریب پخش آب	0.2236	سانتیمتر مربع بر ثانیه
کشش سطحی آب	0.0625	نیوتن بر متر
طول پیل در جهت X	71.12	میلیمتر
ارتفاع کل کاتد در جهت Y	1.562	میلیمتر
ارتفاع کانال در جهت Y	0.762	میلیمتر
ارتفاع لایه نفوذ گاز در جهت Y	0.24	میلیمتر
ارتفاع MPL در جهت Y	0.06	میلیمتر
ارتفاع لایه کاتالیست در جهت Y	0.05	میلیمتر
عرض کانال در جهت Z	1	میلیمتر
عرض صفحه دوقطبی از اطراف کانال	0.5	میلیمتر
تخلخل لایه نفوذ گاز	0.4	-
تخلخل MPL	0.3	-
تخلخل لایه کاتالیست	0.3	-
زاویه تماس لایه نفوذ گاز	110	درجه
زاویه تماس MPL	120	درجه
زاویه تماس لایه کاتالیست	120	درجه
نفوذپذیری لایه نفوذ گاز	1.76×10^{-11}	متر مربع
نفوذپذیری MPL	1.76×10^{-12}	متر مربع
نفوذپذیری لایه کاتالیست	1.76×10^{-12}	متر مربع

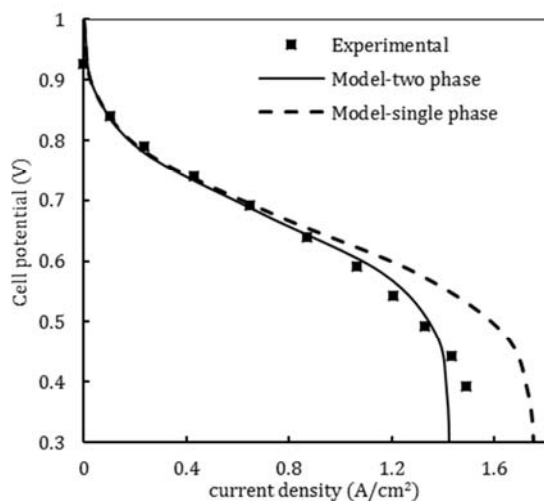


Fig. 5 Comparison of polarization curves from single and two phase simulation with experimental results [28]

شکل 5 مقایسه منحنی عملکردی شبیه سازی تک فازی و دو فازی پیل سوختی با نتایج آزمایشگاهی [28]

طول و عرض کاتد با توجه به مصرف اکسیژن در سطح کاتد، به طور پیوسته کاهش می‌یابد. در شکل 8-ب، لایه MPL به ضخامت 0.06 میلیمتر بین لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست به گونه‌ای قرار داده شده است که مجموع ضخامت‌های GDL و MPL برابر 0.3 میلیمتر حفظ گردد.

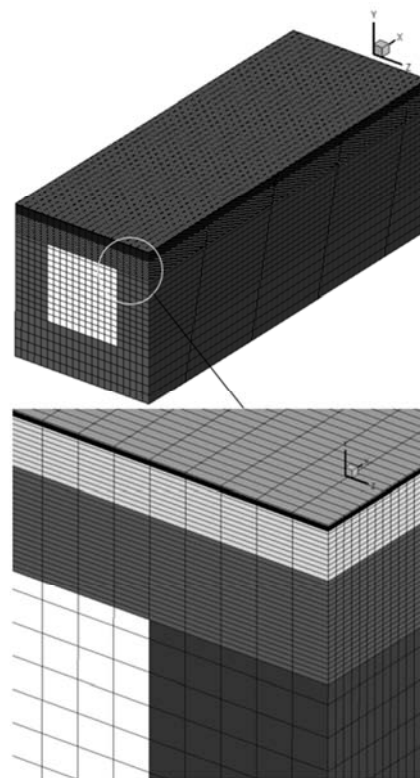


Fig. 3 Mesh generation in computational domain

شکل 3 نحوه شبکه بندی فضای محاسباتی

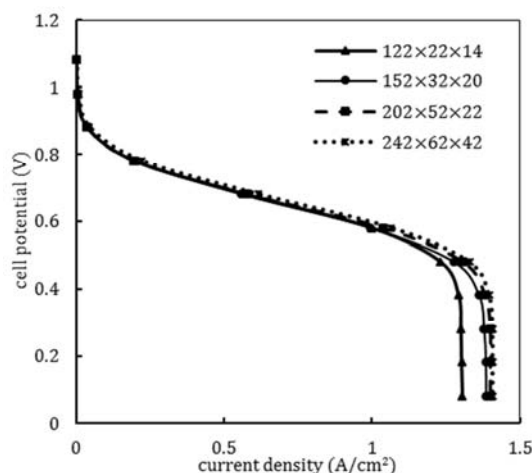


Fig. 4 Single-phase polarization curves for various meshes

شکل 4 منحنی قطبیت پیل در حالت تک‌فازی برای شبکه‌بندی‌های مختلف

شکل‌های 6 و 7 کانتورهای غلظت اکسیژن و اشباع آب را در سمت کاتد پیل به صورت سه بعدی که از وسط صفحه XZ برش خورده است، در پتانسیل 1 ولت نشان می‌دهد. با استفاده از بزرگ‌نمایی که در قسمتی از ناحیه متخلخل کاتد انجام شده است، مطابق انتظار، یک ناپیوستگی در مرز ناحیه GDL و MPL مشاهده می‌گردد که علت آن تفاوت خواص رطوبتی این دو ناحیه با یکدیگر است.

به منظور مقایسه کیفی بهتر نحوه تغییرات غلظت‌ها در لایه‌های مختلف پیل با اضافه کردن MPL، کانتور غلظت اکسیژن در صفحه XY در شکل 8 به تصویر کشیده شده است. شکل 8-الف، کانتور کسر جرمی اکسیژن در صفحه XY را بدون لحاظ کردن MPL و در شرایطی که ضخامت لایه نفوذ گاز برابر 0.3 میلیمتر است، نشان می‌دهد. مطابق انتظار، تغییرات غلظت در راستای

شکل‌های 10-الف و 10-ب تغییرات کسر جرمی اکسیژن را در صفحه YZ در وسط محور طولی به تصویر می‌کشند. در شکل 10-الف مشخص است که کسر جرمی اکسیژن در گوشه‌های دو طرف بالای صفحه دوقطبی نسبت به نواحی مرکزی کمتر است که این موضوع باعث کاهش چگالی جریان در این نواحی می‌شود. این مشکل با اضافه نمودن MPL تا حدودی بهبود یافته و غلظت اکسیژن در اطراف لایه کاتالیست به‌طور یکنواخت‌تر و با درصد بالاتری توزیع شده که باعث بهبود عملکرد پیل می‌گردد (شکل 10-ب).

شکل‌های 11-الف و 11-ب مربوط به کانتورهای کسر جرمی آب (مخلوط بخار و مایع) در صفحه YZ برای دو حالت بدون لایه MPL و با لحاظ نمودن این لایه می‌باشند که مطابق انتظار، نحوه توزیع آن عکس توزیع اکسیژن در لایه‌های مختلف کاتد است.

در شکل‌های 12 و 13 کانتورهای اشباع آب مایع در دو صفحه XY و YZ برای دو حالت با MPL و بدون لحاظ کردن MPL نشان داده شده‌اند. ناپیوستگی در اشباع آب در مرز ناحیه‌های MPL و لایه نفوذ گاز در این شکل‌ها مشهود است. همچنین مشاهده می‌گردد که غلظت اشباع در انتهای خروجی کانال و قسمت‌های بالایی نزدیک لایه کاتالیست، ناحیه‌ای که واکنش‌های شیمیایی در آن سطح صورت می‌گیرد افزایش می‌یابد. همچنین در شکل 13 یک افزایش تولید مقدار آب در ناحیه متخلخل بالای صفحه دوقطبی مشاهده می‌گردد. علت آن است که با افزایش کسر جرمی بخار آب موجود در مخلوط گازی، فشار جزئی بخار آب نیز افزایش می‌یابد، در نتیجه در صورتی که فشار جزئی بخار آب موجود در مخلوط به فشار اشباع آب برسد، آب مایع به وجود می‌آید. میزان آب تولیدی در سمت خروجی کانال افزایش می‌یابد. در چگالی جریان‌های بالا در صورتی که مقدار آب تولیدی زیاد باشد، باعث گرفتگی بخشی از روزنه‌های محیط متخلخل لایه نفوذ گاز شده و باعث ایجاد مانع در ارسال گاز اکسیژن به سطح واکنش می‌شود.

در شکل 14 منحنی تغییرات اشباع آب در عرض لایه‌های مختلف سمت کاتد پیل در قسمت میانی محورهای X و Z ترسیم شده و اثر اضافه نمودن لایه MPL بر اشباع آب در مقایسه با حالت بدون MPL نمایش داده شده است. مشاهده می‌گردد که تغییرات اشباع در عرض کانال بسیار ناچیز می‌باشد، در حالی که این تغییرات در ناحیه متخلخل با شیب تندتری اتفاق می‌افتد. همچنین به علت خاصیت آب‌گریزی ناحیه MPL، اشباع آب در مرز

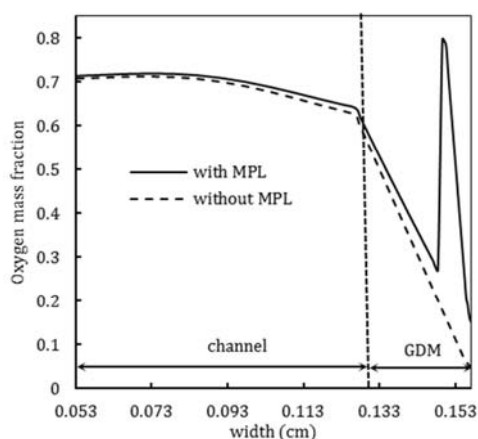


Fig. 9 Comparison of oxygen concentration variation at the cathode width for two cases: without MPL and with MPL

شکل 9 مقایسه تغییرات غلظت اکسیژن در عرض کاتد برای دو حالت بدون MPL و با MPL

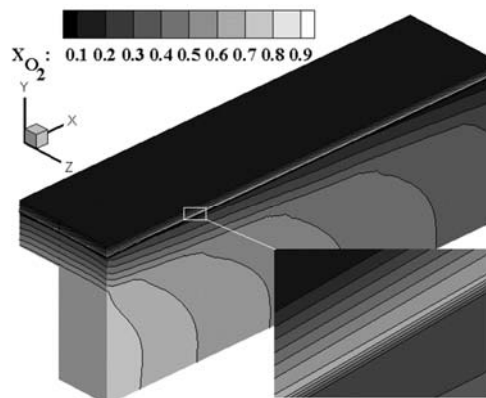


Fig. 6 contours of oxygen mass fraction at the cathode with considering the MPL

شکل 6 کانتورهای کسر جرمی اکسیژن در سمت کاتد با لحاظ کردن MPL

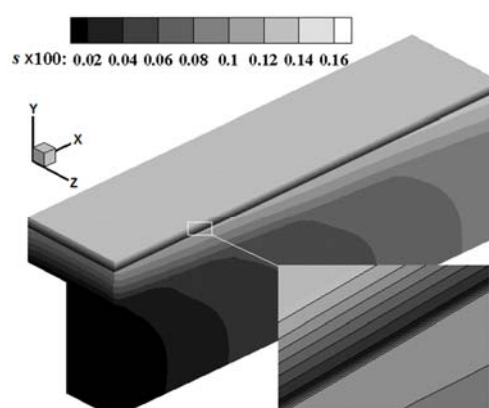


Fig. 7 contours of water saturation at the cathode with considering the MPL

شکل 7 کانتورهای اشباع آب در سمت کاتد با لحاظ کردن MPL

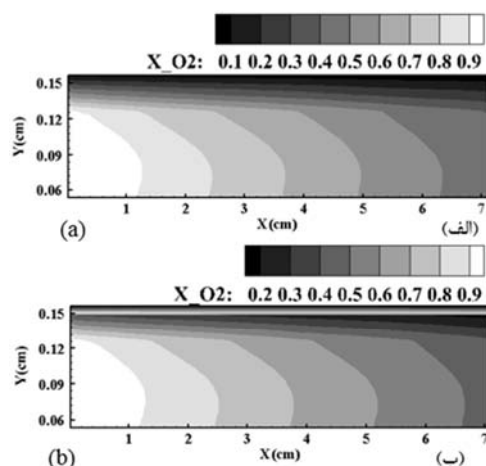


Fig. 8 Contours of oxygen mass fraction in XY plane for two cases a) without MPL and b) MPL with thickness of 0.06 mm

شکل 8 کانتور کسر جرمی اکسیژن در صفحه XY برای دو حالت الف) بدون MPL و ب) با MPL به ضخامت 0.06 میلی‌متر

شکل 9 تغییرات کسر جرمی اکسیژن در راستای Y (عرض پیل) را برای دو حالت بدون MPL و با MPL با هم مقایسه می‌کند. مختصات X و Z برای ترسیم این منحنی‌ها دقیقاً در وسط این محورها انتخاب گردیده است. افزایش ناگهانی غلظت اکسیژن در مرز ناحیه MPL و لایه نفوذ گاز به دلیل شرایط مرزی موجود در مرز این دو ناحیه، در تصویر مشخص است.

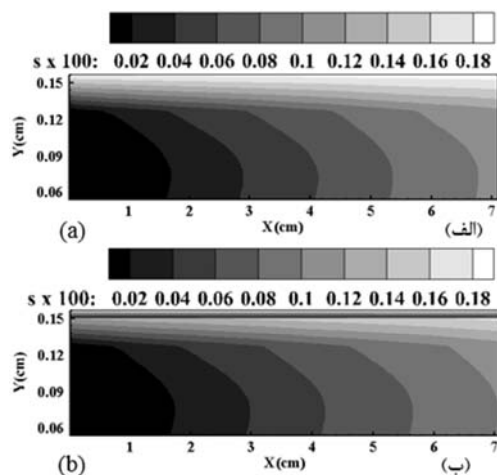


Fig. 12 Contours of water saturation in XY plane for two cases a) without MPL, b) MPL with thickness of 0.06 mm

شکل 12 کانتور اشباع آب در صفحه XY برای دو حالت الف) بدون MPL و ب) با MPL به ضخامت 0.06 میلیمتر

شکل‌های 15 و 16 تاثیر تخلخل MPL را بر اشباع آب و غلظت اکسیژن نمایش می‌دهند. برای این منظور پروفیل تغییرات اشباع آب و غلظت اکسیژن در عرض ناحیه نفوذ گاز (MPL و GDL) برای تخلخل‌های مختلف MPL ترسیم شده‌اند. مشاهده می‌گردد که سطح اشباع آب با افزایش میزان تخلخل کاهش می‌یابد. علت آن است که MPL با تخلخل بیشتر، مقاومت اهمی را کاهش داده و به انتقال آب از روزنه‌های محیط متخلخل کمک می‌کند. در نتیجه اکسیژن بیشتری می‌تواند به سطح واکنش در لایه کاتالیست برسد. این موضوع سبب بهبود عملکرد پیل با افزایش میزان تخلخل MPL می‌گردد. در شکل 17 اثر تخلخل لایه MPL بر عملکرد پیل به تصویر کشیده شده است.

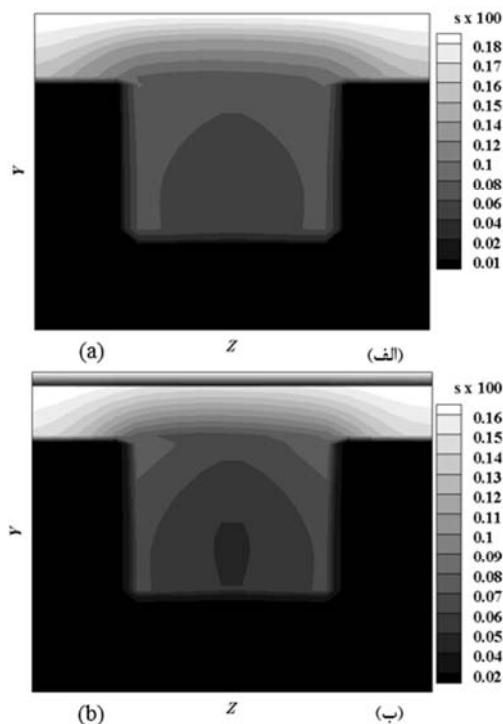


Fig. 13 Contours of water saturation in YZ plane for two cases a) without MPL, b) MPL with thickness of 0.06 mm

شکل 13 کانتور اشباع آب در صفحه YZ برای دو حالت الف) بدون MPL و ب) با MPL به ضخامت 0.06 میلیمتر

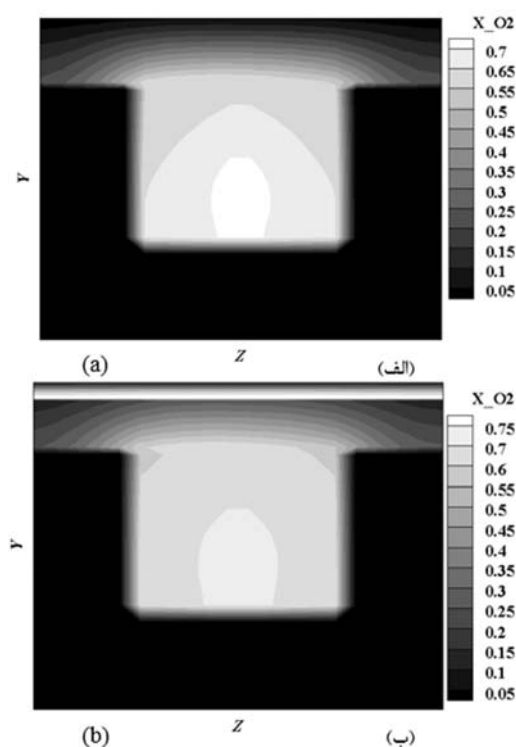


Fig. 10 Contours of oxygen mass fraction in YZ plane for two cases a) without MPL, b) MPL with thickness of 0.06 mm

شکل 10 کانتور غلظت اکسیژن در صفحه YZ برای دو حالت الف) بدون MPL و ب) با MPL به ضخامت 0.06 میلیمتر

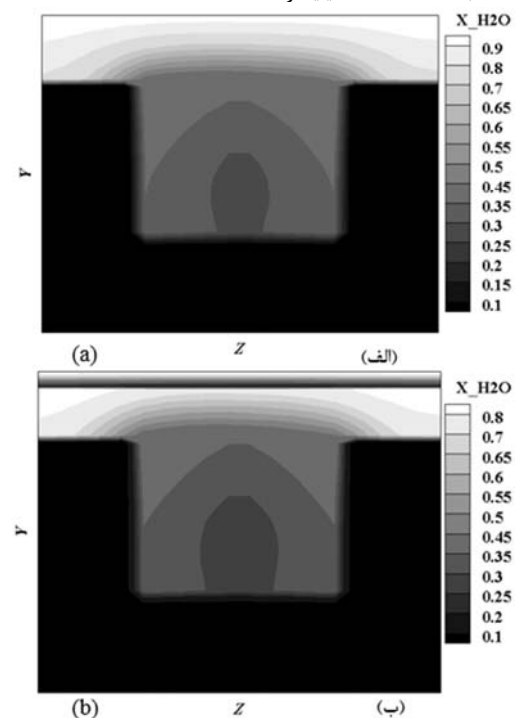


Fig. 11 Contours of water mass fraction in YZ plane for two cases a) without MPL, b) MPL with thickness of 0.06 mm

شکل 11 کانتور کسر جرمی آب در صفحه YZ برای دو حالت الف) بدون MPL و ب) با MPL به ضخامت 0.06 میلیمتر

این ناحیه با لایه نفوذ گاز کاهش چشم‌گیری یافته و درصد آب مایع موجود در ناحیه متخلخل کاهش می‌یابد.

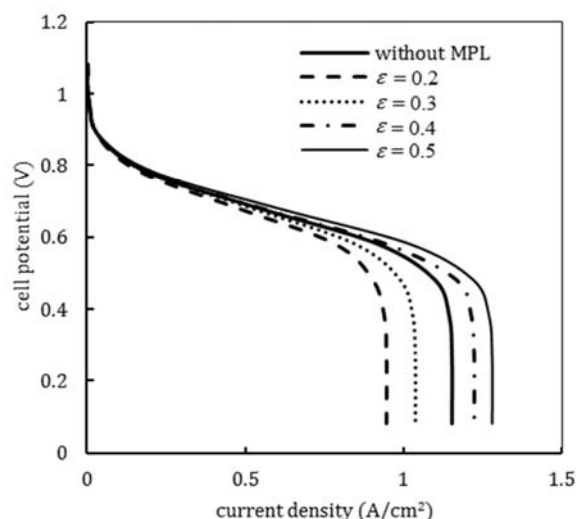


Fig. 17 Effect of MPL porosity on polarization curve of the cell

شکل 17 اثر تخلخل MPL بر منحنی عملکرد پیل

همان‌گونه که در این شکل مشخص است، اثر تخلخل در چگالی جریان‌های پایین (ولتاژ عملکردی بالا) بر عملکرد پیل ناچیز بوده و قابل صرف نظر کردن می‌باشد، ولی در چگالی جریان‌های بالا به علت تولید آب مایع بیشتر، اثر آن قابل توجه بوده و با افزایش میزان تخلخل، چگالی جریان نیز به ازای یک ولتاژ معین افزایش می‌یابد.

ضخامت MPL نقش مهمی در انتقال جریان دوفازی در ناحیه متخلخل سمت کاتد دارد. همان‌گونه که در شکل 18 مشاهده می‌شود، پروفیل اشباع آب در عرض ناحیه نفوذ گاز (GDL و MPL) به شدت تحت تاثیر ضخامت MPL قرار دارد. در اینجا مجموع ضخامت GDL و MPL، به مقدار 300 میکرومتر ثابت در نظر گرفته شده و تغییرات منحنی اشباع آب در عرض این ناحیه برای ضخامت‌های مختلف MPL بررسی گردیده‌اند. اشباع آب مایع در مرز مشترک GDL و MPL به‌طور ناپیوسته کاهش می‌یابد. از طرف دیگر، با افزایش ضخامت MPL، به دلیل کاهش نفوذپذیری آب مایع در MPL فشار مایع در عرض MPL افزایش یافته و در نتیجه، توزیع آب مایع بیشتری در ناحیه MPL وجود خواهد داشت. این موضوع، نحوه انتقال گازهای واکنش‌گر به سطح واکنش و در نتیجه عملکرد پیل را تحت تاثیر قرار می‌دهد. یک MPL با ضخامت کمتر، انتقال گازهای واکنش‌گر به سطح واکنش را بهبود بخشیده و خروج آب تولید شده را تسهیل می‌کند. از طرف دیگر، یک MPL با لایه ضخیم‌تر، به دلیل افزایش مقدار PTFE در ساختار آن و طولانی شدن طول مسیر انتقال جرم در محیط متخلخل، مقاومت الکتریکی بالاتری دارد. در نتیجه، کاهش ضخامت MPL سبب بهبود عملکرد پیل می‌گردد. البته باید توجه داشت که در عمل، کاهش بیش از حد ضخامت MPL نیز باعث می‌شود که سطح تماس آن با لایه کاتالیست ناهموار شده و مقاومت اهمی افزایش یابد. در نتیجه اثر معکوس بر عملکرد پیل خواهد داشت [29]. تاثیر ضخامت MPL بر عملکرد پیل در شکل 19 بررسی گردیده است. بر طبق شکل 19-الف، عملکرد پیل در نواحی چگالی جریان‌های پایین و میانی تقریباً یکسان است، ولی در چگالی جریان‌های بالا اثر ضخامت آشکار است. همچنین در شکل 19-ب مشخص است که چگالی توان بیشینه در حالی که از یک MPL با ضخامت حدود 10 درصد ضخامت کل ناحیه نفوذ گاز استفاده می‌شود، در مقایسه با حالت بدون MPL، حدوداً 18 درصد بیشتر است.

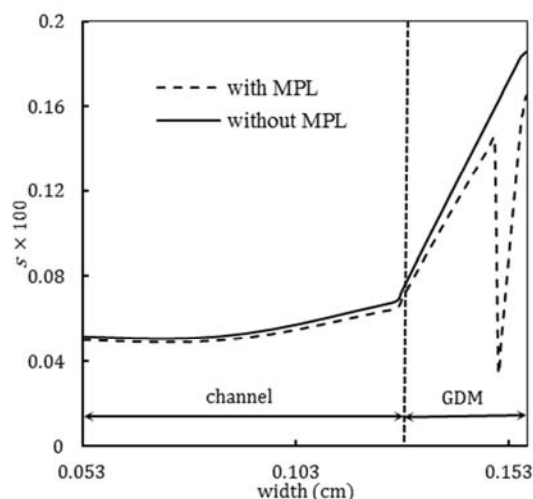


Fig. 14 Comparison of water saturation variation at the cathode width for two cases without MPL and with MPL

شکل 14 مقایسه تغییرات اشباع آب در عرض کاتد برای دو حالت بدون MPL و با MPL

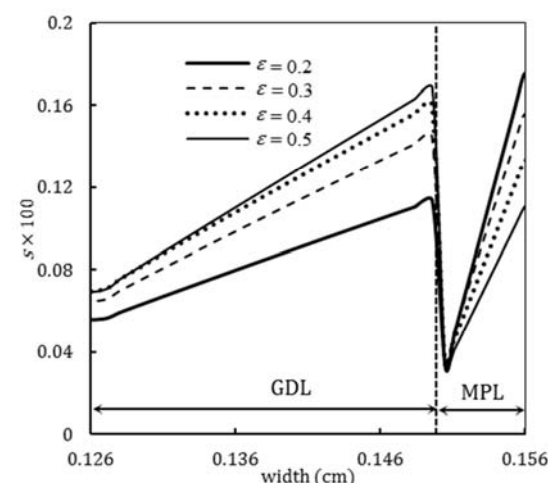


Fig. 15 Effect of MPL porosity on water saturation at the gas diffusion medium width

شکل 15 اثر تخلخل MPL بر اشباع آب در عرض ناحیه نفوذ گاز

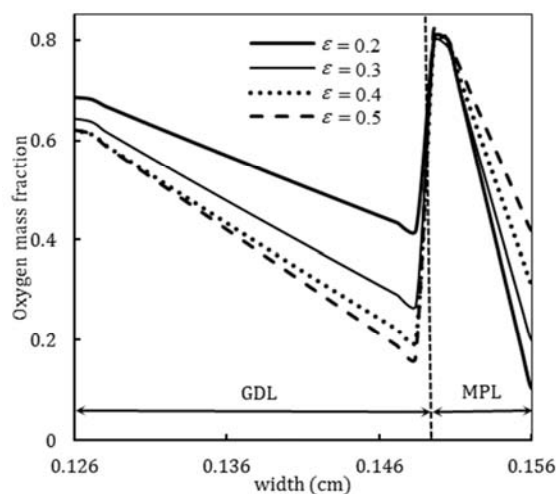


Fig. 16 Effect of MPL porosity on oxygen concentration at the gas diffusion medium width

شکل 16 اثر تخلخل MPL بر غلظت اکسیژن در عرض ناحیه نفوذ گاز

زیرا با افزایش زاویه تماس، خاصیت آب‌گریزی سطح MPL افزایش یافته و در نتیجه، این رفتار آب‌گریزی سطح، خروج آب مایع از ناحیه متخلخل را تسهیل کرده و جریان ورود اکسیژن به سطح واکنش بهتر اتفاق می‌افتد. شکل‌های 22 و 23 اثر خاصیت نفوذپذیری MPL را بر سطح اشباع آب در ناحیه متخلخل و نیز عملکرد پیل نشان می‌دهند. همان‌گونه که در شکل 22 مشخص است، اشباع آب مایع در سطح تماس MPL و GDL، با کاهش میزان نفوذپذیری، به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. از طرف دیگر در نفوذپذیری پایین MPL، انتقال گازهای واکنش‌گر از ناحیه متخلخل به سطح واکنش با دشواری بیشتری صورت می‌پذیرد، در نتیجه عملکرد پیل تحت تاثیر قرار می‌گیرد. در شکل 23 مشاهده می‌گردد که نفوذپذیری MPL در چگالی جریان‌های بالا بر عملکرد پیل تاثیر می‌گذارد. مقدار پتانسیل اضافی انتقال جرم دلیل اصلی تنزل عملکرد پیل در چگالی جریان‌های بالا است. از آنجایی که نفوذپذیری‌های بالاتر قادر است تا پتانسیل اضافی انتقال جرم را کاهش دهد، عملکرد پیل با افزایش نفوذپذیری گاز در MPL، بهبود می‌یابد.

4- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این مقاله، شبیه‌سازی سه‌بعدی و دوفازی غیر هم‌دمای سمت کاتد یک پیل سوختی پلیمری به روش چند فازی میکسچر انجام شده است. معادلات

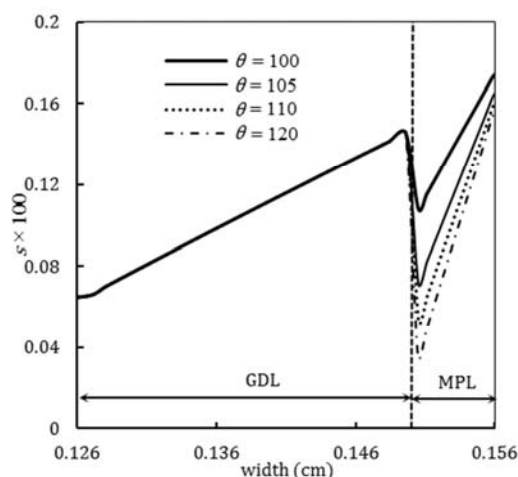


Fig. 20 Effect of MPL contact angle on water saturation at the gas diffusion medium width

شکل 20 اثر زاویه تماس سطح MPL بر اشباع آب در عرض ناحیه نفوذ گاز

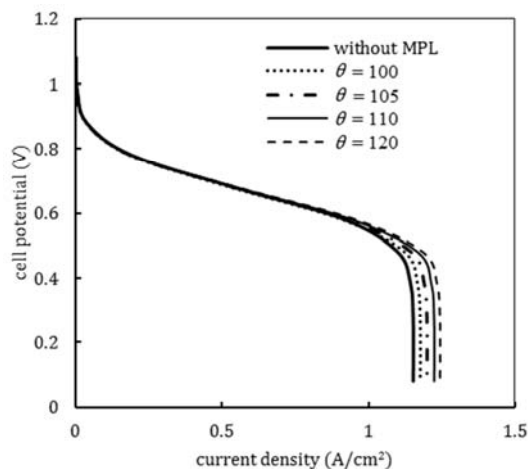


Fig. 21 Effect of MPL contact angle on polarization curve of the fuel cell

شکل 21 اثر زاویه تماس سطح MPL بر منحنی عملکرد پیل سوختی

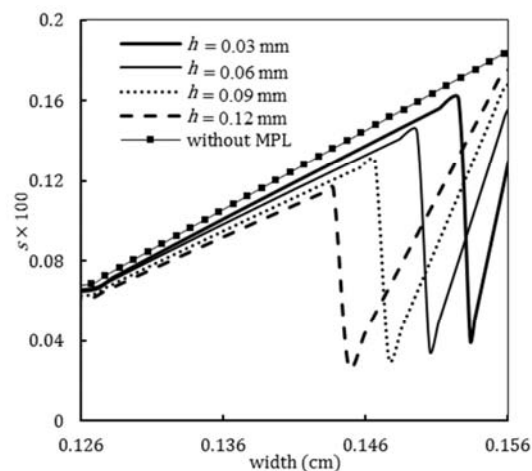


Fig. 18 Effect of MPL thickness on water saturation at the gas diffusion medium width

شکل 18 اثر ضخامت MPL بر اشباع آب در عرض ناحیه نفوذ گاز

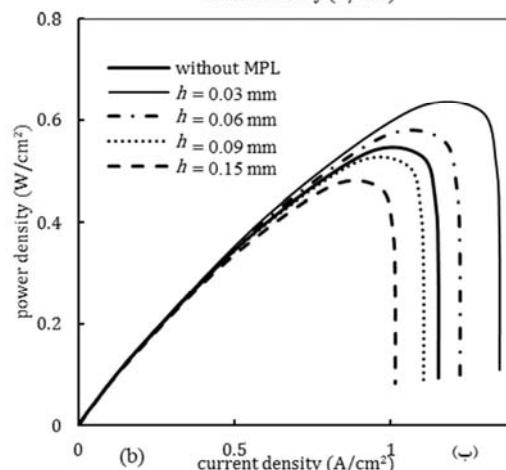
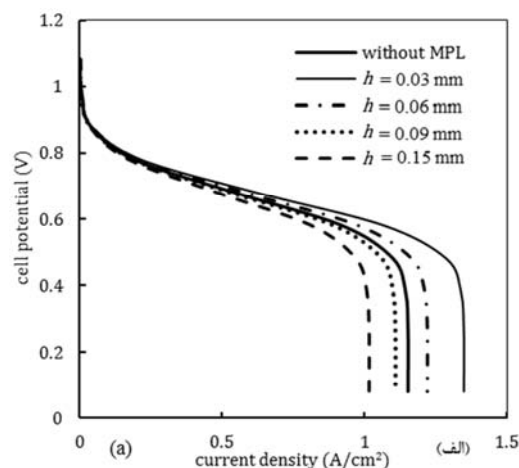


Fig. 19 Effect of MPL thickness on a) polarization curve and b) power curve of fuel cell

شکل 19 اثر ضخامت MPL بر (الف) منحنی عملکرد و (ب) منحنی توان پیل

زاویه تماس MPL نیز بر نحوه انتقال آب مایع و در نتیجه پروفیل اشباع در ناحیه متخلخل نفوذ گاز تاثیر گذار است. در شکل 20 مشاهده می‌شود که با افزایش زاویه تماس، ناپیوستگی اشباع در سطح تماس دو ناحیه GDL و MPL گسترش یافته و اشباع آب در ناحیه MPL کمتر خواهد شد. شکل 21 تاثیر زاویه تماس MPL را بر منحنی عملکرد پیل نمایش می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد که عملکرد پیل در زاویه‌های تماس بالاتر MPL بهبود می‌یابد،

- مشاهده می‌گردد که با افزایش میزان تخلخل MPL، اشباع مایع در ناحیه MPL کاهش یافته و با توجه به ایجاد شرایطی برای هدایت مناسب‌تر آب مایع به خارج از ناحیه متخلخل و انتقال بهتر اکسیژن به سطح واکنش، عملکرد پیل بهبود می‌یابد.
- با ثابت نگه داشتن ضخامت کل ناحیه نفوذ گاز، افزایش ضخامت MPL اثر معکوس بر عملکرد پیل دارد. با توجه به اینکه شیب تغییرات اشباع در عرض ناحیه MPL بیشتر می‌باشد، افزایش ضخامت این لایه سبب افزایش آب مایع تولیدی شده و در نتیجه عملکرد پیل نسبت به شرایط استفاده از یک لایه نازک‌تر MPL کاهش می‌یابد.
- افزایش زاویه تماس MPL باعث افزایش خاصیت آب‌گریزی این لایه و در نتیجه هدایت بهتر آب از ناحیه متخلخل به خارج پیل می‌گردد. لذا عملکرد پیل در زاویه تماس بالاتر تا حدودی بهبود می‌یابد.
- خاصیت نفوذپذیری MPL نیز بر اشباع آب مایع و غلظت اکسیژن در این ناحیه تاثیر گذار بوده و با کاهش میزان نفوذپذیری، اشباع آب نیز کاهش می‌یابد. ولی با توجه به اینکه با کاهش نفوذپذیری، مقاومت اهمی پیل افزایش می‌یابد، عملکرد پیل نیز اندکی دچار کاهش می‌شود.

5- فهرست علائم

A	مساحت (m^2)
c	غلظت مولی (mol/m^3)
D	ضریب پخش (m^2/s)
F	ثابت فارادی (96487 Col/mol)
h	ضخامت لایه نفوذ گاز (mm)
j	چگالی جریان (A/cm^2)
J	شار موینگی آب ($kgm^{-2}s^{-1}$)
K	ضریب نفوذ پذیری (m^2)
M	جرم مولکولی (kg/mol)
n	ضریب کشش الکترواسمزی
p	فشار ($kgm^{-1}s^{-2}$)
P	چگالی توان (W/cm^2)
$\bar{R}$	ثابت جهانی گازها ($8.314 \text{ jmol}^{-1}K^{-1}$)
s	اشباع آب
S	ترم چشمه
T	دما (K)
u	سرعت (ms^{-1})
V	ولتاژ (V)
x	کسر جرمی
y	کسر مولی

علائم یونانی

ρ	چگالی (kgm^{-3})
μ	لزجت دینامیکی ($kgm^{-1}s^{-1}$)
ν	لزجت سینماتیکی (m^2s^{-1})
λ	مقدار آب
η	افت ولتاژ فعال سازی (V)
σ	رسانندگی یونی و الکتریکی (S/m)
ε	تخلخل

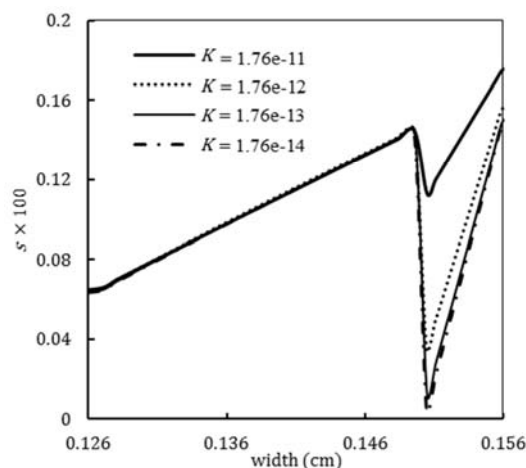


Fig. 22 Effect of MPL permeability on water saturation at the gas diffusion medium width

شکل 22 اثر نفوذپذیری MPL بر اشباع آب در عرض ناحیه نفوذ گاز

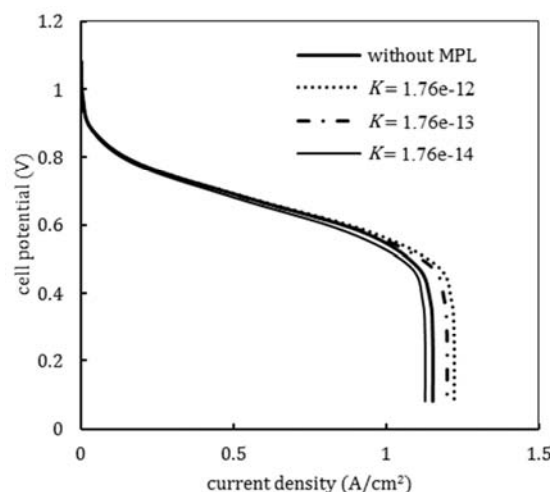


Fig. 23 effect of MPL permeability on polarization curve of cell

شکل 23 اثر نفوذ پذیری MPL بر منحنی عملکرد پیل

حاکم بر جریان مخلوط سیال دوفازی (مایع و بخار) شامل معادلات بقای جرم، ممنتوم، انرژی، بقای اجزاء مخلوط، پتانسیل یونی و الکترونی به همراه معادلات کمکی مربوط به واکنش‌های شیمیایی، به‌طور هم‌زمان برای لایه‌های مختلف سمت کاتد پیل شامل صفحه دوقطبی، کانال گاز، لایه نفوذ گاز (GDL)، لایه متخلخل آب‌گیر (MPL) و لایه کاتالیست با توسعه یک مدل محاسباتی حل شده‌اند. روش حل معادلات بقای اجزاء به صورت چند دامنه‌ای و برای سایر معادلات بقاء به صورت تک دامنه‌ای بوده است. بنابراین تنها شرط مرزی غلظت در مرزهای میانی (در سطح اشتراک MPL و GDL) اعمال شده است. تاثیر پارامترهای فیزیکی و رطوبتی لایه متخلخل آب‌گیر (MPL) که در بین لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست سمت کاتد قرار می‌گیرد، بر اشباع آب مایع و همچنین عملکرد پیل بررسی شده‌اند. پارامترهای مورد بررسی شامل ضخامت، تخلخل، زاویه تماس و نفوذ پذیری MPL می‌باشند. نتایج نشان می‌دهند که اضافه نمودن لایه MPL که دارای خواص فیزیکی و رطوبتی متفاوت با لایه نفوذ گاز است، باعث به‌وجود آمدن یک ناپیوستگی در اشباع آب و غلظت گازها در سطح تماس لایه نفوذ گاز و MPL می‌گردد، به‌طوری که در این ناحیه، اشباع آب به‌طور ناگهانی کاهش یافته و غلظت اکسیژن افزایش می‌یابد. سایر نتایج بدست آمده به شرح زیر می‌باشد:

- membrane fuel cell performance under different air inlet relative humidity, *International Journal of Electrochemical Science*, Vol. 9, No. 12, pp. 7819-7831, 2014.
- [10] B. Carnes, N. Djilali, Systematic parameter estimation for PEM fuel cell models, *Journal of Power Sources*, Vol. 144, No. 1, pp. 83-93, 2005.
- [11] H. Meng, Multi-dimensional liquid water transport in the cathode of a PEM fuel cell with consideration of the micro-porous layer (MPL), *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 34, No. 13, pp. 5488-5497, 2009.
- [12] H. Hassanzadeh, S. H. Golkar, M. Barzgary, Modeling of two phase and non-isothermal flow in polymer electrolyte fuel cell, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 2, pp. 313-322, 2015. (in Persian)
- [13] T. Berning, M. Odgaar, S. K. Kær, A computational analysis of multiphase flow through PEMFC cathode porous media using the multifluid approach, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 156, No. 11, pp. B1301-B1311, 2009.
- [14] Z.H. Wang, C.Y. Wang, K.S. Chen, Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 94, No. 1, pp. 40-50, 2001.
- [15] U. Pasaogullari, C.Y. Wang, Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 2, pp. A380-390, 2005.
- [16] Y. Wang, C.Y. Wang, A non-isothermal, two-phase model for polymer electrolyte fuel cells, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 153, No. 6, pp. A1193-1200, 2006.
- [17] L. You, H. Liu, A two-phase flow and transport model for PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 155, No. 2, pp. 219-230, 2006.
- [18] J.H. Nam, M. Kaviani, Effective diffusivity and water saturation distribution in single- and two-layer PEMFC diffusion medium, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 46, No. 24, pp. 4595-4611, 2003.
- [19] A. Z. Weber, J. Newman, Effects of microporous layers in polymer electrolyte fuel cells, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 4, pp. A677-88, 2005.
- [20] U. Pasaogullari, C. Y. Wang, Two-phase transport and the role of micro-porous layer in polymer electrolyte fuel cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 49, No. 25, pp. 4359-69, 2004.
- [21] U. Pasaogullari, C. Y. Wang, K. S. Chen, Two-phase transport in polymer electrolyte fuel cells with bilayer cathode gas diffusion media, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 8, pp. A1574-82, 2005.
- [22] K. Kang, H. Ju, Numerical modeling and analysis of micro-porous layer effects in polymer electrolyte fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 194, No. 2, pp. 763-773, 2009.
- [23] X. Wang, V. Nguyen, Modeling the effects of capillary property of porous media on the performance of the cathode of a PEMFC, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 155, No. 11, pp. B1085-1092, 2008.
- [24] X. Wang, V. Nguyen, Modeling the effects of the microporous layer on the net water transport rate across the membrane in a PEM Fuel Cell, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 157, No. 4, pp. B496-B503, 2010.
- [25] F. Ahmadi, R. Roshandel, Effects of microhydrophobic porous layer on water distribution in polymer electrolyte membrane fuel cells, *ASME Journal of Fuel Cell Science and Technology*, Vol. 11, No. 1, pp. 11004-11, 2014.
- [26] K. Jiao, X. Li, Water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 37, No. 3, pp. 221-291, 2011.
- [27] S. Heidari, E. Afshari, Comparison between different models of polymer membrane fuel cell using a metal foam as a flow distributor, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 3, pp. 333-343, 2015. (in Persian)
- [28] L. Wang, A. Husar, T. Zhou, H. Liu, A parametric study of PEM fuel cell performances, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 28, No. 11, pp. 1263-1272, 2003.
- [29] V.A. Paganin, E.A. Ticianelli, E.R. Gonzalez, Development and electrochemical studies of gas diffusion electrodes for polymer electrolyte fuel cells, *Journal of Applied Electrochemistry*, Vol. 26, No. 3, pp. 297-304, 1996.

جایابی نسبی	γ
ضریب تصحیح	β
زاویه تماس (°)	θ
کشش سطحی (N/m)	σ_{lq}
ضریب استوکیومتری	ξ
بالانویس ها	
eff	ضریب موثر
زیرنویس ها	
a	آند
act	فعال سازی
c	کاتد
cap	مویبگی
cell	پیل
ele	الکترونی
g	گاز
H ₂ O	آب
i	جزء i ام
in	ورودی
ion	یونی
j	جزء j ام
lq	مایع
O ₂	اکسیژن
ref	شرایط مرجع
sat	شرایط اشباع
0	شرایط مرجع

6- مراجع

- [1] J. H. Jang, W. M. Yan, C. Shih, Effects of the gas diffusion-layer parameters on cell performance of PEM fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 161, No. 1, pp. 323-332, 2006.
- [2] Inamuddin, T. A. Cheema, S. M. J. Zaidi, S. U. Rahman, Three dimensional numerical investigations for the effects of gas diffusion layer on PEM fuel cell performance, *Renewable Energy*, Vol. 36, No. 2, pp. 529-535, 2011.
- [3] J. H. Chun, K. T. Park, D. H. Jo, S. G. Kim, S.H. Kim, Numerical modeling and experimental study of the influence of GDL properties on performance in a PEMFC, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 36, No. 2, pp. 1837-1845, 2011.
- [4] E. Passalacqua, F. Lufrano, G. Squadrito, A. Patti, L. Giorgi, Influence of structure in low-Pt loading electrodes for polymer electrolyte fuel cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 43, No. 24, pp. 3665-3673, 1998.
- [5] G. Velayutham, Effect of micro-layer PTFE on the performance of PEM fuel cell electrodes, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 36, No. 22, pp. 14845-14850, 2011.
- [6] H. H. Chen, M. H. Chang, Effect of cathode micro-porous layer composition on proton exchange membrane fuel cell performance under different air inlet relative humidity, *Journal of Power Sources*, Vol. 232, No. 1, pp. 306-309, 2013.
- [7] C. H. Tseng, S. H. Lo, Effects of microstructure characteristics of gas diffusion layer and microporous layer on the performance of PEMFC, *Energy Conversion and Management*, Vol. 51, No. 4, pp. 677-684, 2010.
- [8] P. Deevanhxay, T. Sasabe, S. Tsushima, S. Hirai, Effect of liquid water distribution in gas diffusion media with and without microporous layer on PEM fuel cell performance, *Electrochemistry Communications*, Vol. 34, No. 1, pp. 239-241, 2013.
- [9] G. M. Huang, M. H. Chang, Effect of gas diffusion layer with double-side microporous layer coating on proton exchange