

دانشگاه آزاد اسلامی واحد اهر فصلنامهی کاربرد شیمی در محیط زیست

سال هفتم، شمارهی ۲۸ پاییز ۱۳۹۵، صفحات۲۲-۵۳

# مروری بر مدلسازی انتقال جرم در پیل سوختی غشاء الکترولیت پلیمر

سمانه قنبرلو گروه مهندسی شیمی، واحد اردبیل، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران samanehghanbarlu87@gmail.com

عزیز باباپور گروه مهندسی شیمی، واحد اردبیل، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

سحر فلاحت پیشه گروه مهندسی شیمی، واحد اردبیل، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

### چکیدہ

در بین فناوریهای نسل بعدی، یک سلول سوختی غشاء الکترولیت پلیمری (PEMFC) تصور می شود که یک روش رایج برای تولید برق با دارا بودن استفاده یگسترده ی آن در تمام برنامههای کاربردی در آیندهای نزدیک باشد. با توجه به بهره وری بالا و سازگاری آن با محیط زیست، این فناوری مورد علاقه ی مهندسین خودرو و دانشمندان می باشد و در نتیجه به عنوان یک گزینه ی امید بخش برای جایگزین موتورهای احتراق داخلی در بخش حمل و نقل محسوب می گردد. با این حال، چالشهای فنی از جمله دوام، عملکرد و روش ساخت مقرون به صرفه وجود دارد که به منظور تجاری سازی آن نیاز به رسیدگی دارند. با در دسترس بودن کامپیوترهای قدر تمند، مدل سازی سلول سوختی در آزمایش های دهه ی گذشته به عنوان روش درک فیزیک داخل سلول سوختی غشاء الکترولیت پلیمری مورد علاقه واقع شده است. در این پژوهش به معرفی انواع پیل سوختی و انواع میدان جریان در داخل پیل سوختی غشاء الکترولیت پلیمری پرداخته شده است. سپس به مدل سازی PEMFC با جریان مارپیچ به صورت مروری پرداخته شده است.

كليدواژە: پيل سوختى، غشاء الكتروليت پليمرى، افت فشار، مدلسازى، مش بندى.

#### مقدمه

در بین فناوری های نسل بعدی، یک سلول سوختی غشاء الكتروليت پليمرى تصور مىشود كه يك روش رايج براى تولید برق با دارا بودن استفادهی گستردهی آن در تمام برنامه های کاربردی در آینده ای نزدیک، باشد. با توجه به بهرهوری بالای آن و دوستی با محیطزیست، این فناوری مورد علاقهی مهندسین خودرو و دانشمندان میباشد و در نتيجه بهعنوان يک گزينهی اميدبخش برای جايگزين موتورهای احتراق داخلی در بخش حمل و نقل محسوب می گردد. با این حال، چالش های فنی از جمله دوام، عملکرد و روش ساخت مقرون به صرفه [۲-۱] وجود دارد که به منظور تجاری سازی آن نیاز به رسیدگی دارند. با در دسترس بودن كامپيوترهاى قدرتمند، مدلسازى سلول سوختی PEM در آزمایشهای دههی گذشته به عنوان روش درک فیزیک داخل سلول سوختی PEM مورد علاقه واقع شده است. طبقهبندی رایج پیلهای سوختی بر اساس نوع الكتروليت آنها به صورت زير ميباشد: • پيل سوختي پليمري ( PEMFC) • پيل سوختي قليايي ( AFC) • پیل سوختی اسید فسفریک (PAFC) • پیل سوختی کربنات مذاب (MCFC) • پیل سوختی اکسید جامد (SOFC) • پیل سوختی متانولی (DMFC)

## مواد و روشها -پیل سوختی غشاء پروتن ( PEMFC)

پیل های سوختی غشاء پروتون دارای غشاء پلیمری جامد هستند که در حال حاضر عمدتاً غشاء Nafion دراین پیل سوختی به کار برده می شود و به شکل یک ورقه باریک منعطف است. این غشاء کوچک و سبک بوده و در دمای پایین کار می کند. (دمای کارکرد بهینه در حدود ۸۵ درجه سلسیوس است). سایر الکترولیتهای جامد در دمای بالا

کار میکنند. شکل (۱) یک الکترولیت غشاء پروتون را به ما نشان میدهد.



شكل ۱:عملكرد پيل سوختي پليمري

برای سرعت بخشیدن به واکنش، یک کاتالیست پلوتونیومی در دو سطح غشاء الکترولیت استفاده میشود که این کاتالیست موجب افزایش قیمت پیل سوختی می-شود؛ اما به دلیل جامد بودن الکترولیت پیل سوختی و هم-چنین انعطاف پذیر بودن این الکترولیت، امکان شکستن یا ترک خوردن در آن کم است و این مشخصه، پیل سوختی PEM را برای کاربردهای خانگی و کاربردهای حمل و نقلی مناسب میکند. در پیل سوختی نوع PEM اتمهای هیدروژن در آند یونیزه میشوند و الکترونهای آنها جدا می شود. یون های هیدروژن که شامل بار مثبت هستند، به سطح غشاء خلل دار نفوذ مي كند و به سمت كاتد مي روند، الکترون های جدا شده نمی توانند از این غشاء عبور کنند و از یک مدار خارجی عبور میکنند و موجب تولید برق میشوند. در کاتد الکترونها، پروتونهای هیدروژن و اکسیژن موجود در هوا با هم ترکیب میشوند و آب را تشكيل مىدهند. پيل سوختى PEM نيازمند هيدروژن خالص است، بنابراین باید از یک رفورمر در خارج از پیل سوختی استفاده کنیم تا احتمال بهوجود آمدن CO و در نتيجه مسموميت كاتاليست را كاهش دهيم. آنها باید انتقال جرم واکنش دهنده کارآمد به سطح الکترودها در افت فشار نسبتا کم ارائه دهند. توزیع یکنواخت گازهای واکنش دهنده، در سطح فعال الکترود منجر به کاهش غلظت اضافه ولتاژ می گردد [۷-۶]. علاوه بر این، توزیع مناسب میدانهای جریان گاز، می تواند چگالی توان خروجی را تا ۵۰٪ افزایش دهد. از این رو، بهینه سازی میدانهای جریان، یکی از مهم ترین مسائل برای بهبود عملکرد سلولهای سوختی MEM است [۸]. انواع میدان جریان مارپیچ، میدان جریان موازی، میدان جریان میدان جریان مارپیچ، میدان جریان نوع پین [۹] وجود دارد. شکل (۲) انواع مختلف میدان جریان را نشان میدهد.



شكل ۲: انواع ميدان جريان( A. ميدان جريان مارپيچ – B. ميدان جريان موازى – C. ميدان جريان D -Interdigitated. ميدان جريان نوع پين [۵]

Polegri و spaziant [۸]، یک طراحی میدان جریان مستقیم (شکل ۲B) انجام دادند. در این طراحی، عملکرد سلول : واکنش های انجام شده در آند و کاتد به شرح ذیل است  $Anode: H_2 \to \Upsilon H^+ + 2e^-$  (۱)

Cathode:  $\frac{1}{2}O_2 + \Upsilon H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$  ( $\Upsilon$ )

مزایای یک پیل، راندمان بالا (در حدود ٪۵۸–۴۳)، دمای پایین [۴–۳]، شروع به کار سریع، عدم حساسیت به دی اکسیدکربن و امکان استفاده از گازهای مشتق شده از هیدروکربن به عنوان سوخت میباشد و از معایب آن می-توان به حساسیت به مونواکسید کربن، به کارگیری فلزات کمیاب در ساختمان پیل و پیچیده بودن سیستم مدیریت آب در مجموعهی غشاء و الکترود اشاره کرد.

- تحقیقات عددی کانال جریان مارپیچ با اندازههای خم مختلف در PEMFC صفحات دو قطبی یکی از بخش های کلیدی یک PEMFC (سلول سوختي غشاء الكتروليت يليمري) هستند. میدان های جریان صفحات دوقطبی، گازهای واکنش دهنده را روى سطح الكترود توزيع ميكنند. كانالهاي جريان بايد یک طراحی مناسب برای کاهش اتلاف انتقال جرم در یک افت فشار حداقل داشته باشند. درمیان کانالهای جریان مختلف، كانال جريان مارپيچ، توجه قابل توجهي براي عملیات در داخل سلولهای الکتروشیمیایی را به خود دریافت کرده است. در یک مطالعه، یک مدل عددی سه بعدی پیشنهاد شده است و برای مطالعه اثر اندازهی خم روی سلول سوختی PEM (غشاء الکترولیت پلیمری) به کار گرفته شد [۵]. طراحی کانال.های جریان در صفحات دوقطبی یک نقش حیاتی در عملکرد اتلاف انتقال جرم، ولتاژ خروجي از سلول سوختي، ايفا مي كند.

مربوط به سلول سوختی، به علت زه کشی آب ناکافی و توزیع جریان گاز غیر یکنواخت در سمت کاتد، کاهش مییابد.

Kazim و همکاران [۱۰] یک مدل سادهی دو بعدی از سلولهای سوختی PEM با میدانهای جریان موازی و interdigitated (شکل ۲D) را توسعه دادند. میدان جریان interdigitated یک چگالی توان بالاتر از میدان جریان موازی دارد.

Teccani و Zuliani [۱۱] اطلاعات تجربی برای سلول سوختی با میدان جریان موازی و مارپیچ (شکل ۲۸)، به منظور بررسی اثر میدان جریان روی عملکرد سلول سوختی ارائه دادند.

نتایج بهدست آمده نشان داد که هر سه با تعداد بیش تر از گام مارپیچ، بهترین عملکرد را از نظر چگالی توان دارد، با این حال آن باعث افت فشار بالاتری در سرتاسر سلول می گردد. Dutt و همکارانش [۱۲]، یک شبیه سازی عددی از مدل سه بعدی از سلول سوختی PEM با کانال جریان گازی مارپیچ توسعه دادند تا جریان جرمی بین کانال ها را پیش بینی کنند. نتایج نشان دادند که توزیع جریان به طور قابل توجهی تحت تأثیر الگوهای مصرف جرمی روی مجمع غشاء الکترود هستند.

Kumar و Keddy [۱۳]، یک مدل سه بعدی از سلول سوختی PEM متشکل از کانال جریان مارپیچ استفاده کردند. نتایج نشان دادند که کاهش عرض زمین منجر به افزایش مصرف هیدروژن در آند، در نتیجه بهبود عملکرد سلول سوختی میشود. Manso و همکاران [۱۴]، تأثیر نسبت ارتفاع/ عرض کانال جریان مارپیچ روی عملکرد سلول سوختی PEM بررسی کردند. در ولتاژ عملیاتی بالا، این نسبت افزایش مییابد، جریان و درجهی حرارت به طور یکنواخت توزیع و عملکرد سلول بهبود مییابد. gwang و همکاران [۱۵]، هندسه مارپیچ را در سمت کاتد ارائه دادند که از سه کانال مخروطی و یک کانال واگرای نهایی

تشکیل شده است. این طراحی نرخ انتقال اکسیژن و چگالی جریان محلی را افزایش میدهد. Can-Andrade و همکاران [۱۶]، یک طراحی میدان جریان شعاعی برای ضخامت دو قطبی ارائه دادند. در این طرح، مقاطع عرضی مستطیلی کانالها، ثابت نیست و با نزدیک تر شدن جریان گاز به خروجی کانال، افزایش می یابد.

Bodda و همکاران [۱۷]، یک مدل محاسباتی سه بعدی از صفحات دو قطبی با شکلها، اندازه و الگوی کانالهای جريان مارپيچ مختلف توسعه دادند. نتايج نشان مىدهد كه خمهای مربع افت فشار بالای مستمر در مقایسه با خمهای منحنیوار دارد. همچنین، کاهش سطح مقطع منجر به توزیع یکنواخت تر واکنش دهنده ی گازی در سطح الکترود، می-شود. اما آن منجر به افزایش افت فشار می گردد. همانطور که می توان به وضوح دید، دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) میتواند امکان بررسی پدیده الکتروشیمیایی و انتقال در سلول سوختی PEM را فراهم کند. در میان انواع مختلف طراحی های میدان جریان، میدان جریان مارپیچ اغلب برای سلولهای سوختی PEM استفاده میشود. در کانالهای جریان مارپیچ، جریان ثانویه و جدایی جریان در سمتهای درونی خمها تشکیل میشود، از این رو افت فشار در امتداد کانال را افزایش میدهد. کاهش افت فشار در کانالهای جریان منجر به توزیع یکنواختتری از واکنش دهندههای گازی که به نفع انتقال گرما، جرم، كنترل دما و اتلاف انتقال جرم پايين مىشود [۱۹–۱۷]. دامنهی محاسباتی در مطالعه دیگر، به یک دور از کانال مارپیچ، محدود است. مدل سه بعدی کانال مارپیچ در سلول سوختی PEM شامل نه منطقه از جمله آند و کاتد جمع آوری کننده، کانال گازی آند و کاتد، لایهی نفوذ گازی کاتد و آند، لایه کاتالیستی کاتد و آند و غشاء است. کانال-های مارپیچ با اندازههای مختلف خم (اندازه خم mm ۸/۸ – اندازه خم ۱mm- اندازه خم ۱/۲mm) بررسی شده است [۵].

معادله پیوستگی
 به طور کلی، معادله ی بقای جرم به صورت زیر ارائه می شود:
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)
 (٣)

$$S_{H_2} = -\frac{M_2}{2F} i_a \qquad (f)$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{O_2}}{2F} i_c \qquad (\Delta)$$

نرخ جرم تولیدی به ازای هر واحد حجم توسط معادلهی زیر داده شده است:

$$S_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{2F} i_c \tag{9}$$

– معادله مومنتوم در محیط متخلخل، مانند لایهی نفوذ و غشاء معادله مومنتوم به شکل زیر می تواند نوشته شود: (۷) (γ) ετ + S<sub>mom</sub> (۷) = −∇ = φ €τ

که به ترتیب ٤ و ۲ و *S<sub>mom</sub> به ترتیب تخلخل، تانسور* برشی، ترم منبع مومنتوم است.

که k<sup>eff</sup> رسانش گرمایی موثر در محیط متخلخل، به صورت زير محاسبه مي شود:  $k^{eff} = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon) k_s$ (٩) که  $k_{\rm f}$  و  $k_{\rm s}$  به ترتیب رسانایی مایع و جامد در محیط متخلخل هستند. در معادلهی انرژی، $S_h$  منبع گرما است که می تواند توسط معادله ی زیر تخمین زده شود:  $S_h = h_{phase} + h_{reaction} + R_{ohm}I^2$  $(\mathbf{1},\mathbf{1})$ hphase تغییر آنتالیی به دلیل تراکم / تبخیر بخار است که hphase در این مدل در نظر گرفته نشده است. واکنش های الکتروشیمیایی در لایه های کاتالیست اتفاق میافتد. فعالسازی سطح اضافه پتانسیل، نیروی محرکهی واکنش شیمیایی است. هدایت غشاء، تابعی از محتوای آبی غشاء، است، و توسط مرجع [۲۱] بر آورده شده است. در نهایت پتانسیل مدار باز به معادله ی زیر کاهش یافت [77].

$$V_{oc} = 0.2329 + 0.0025 * T \tag{11}$$

در چگالی جریان کم، نتایج حاصل از روش عددی با توجه به دادههای تجربی، رضایت بخش است. نتایج حاصل از کانال مارپیچ با اندازه خم مربعی ۱/۲mm حداقل تفاوت را با نتایج تجربی نشان داد. در چگالیهای جریان بالا، منحنی تقریباً به صورت خطی است و نتایج حاصل از شبیهسازی، مقدار بالاتری در مقایسه با دادههای تجربی دارد. تفاوت از در نظر گرفتن مدل تک فاز و انتقال کل آب تولیدی به صورت بخار ناشی می شود. تجمع آب مایع منجر به اشغال کاتالیزور، منافذ لایه نفوذ گاز (GDL) می شود که باعث مقاومت در مقابل انتقال جرم از واکنش دهندهها و پس از آن کاهش در عملکرد سلول سوختی می شود. این اثر در



شكل ٣: شماتيك محيط متخلخل [٢٩]

فرض شده است که کاتد در قالب یک محیط متخلخل است و این که مواد الکترود جامد توسط یک مایع احاطه شده است و یا مایع مانند، فیلم Water/Nafion، از طریق آن اکسیژن منتقل می شود. برای انتقال جرم در محیط متخلخل، رایج است که روش های حجم متوسط به کار گرفته شوند، و شکل (۴) شماتیک متوسط مقادیر توده، دیوار و مقادیر سطحی کسر جرمی را که به عنوان محلی D –۱ برای اهداف تجزیه و تحلیل در نظر گرفته شده است، نشان می-دهد.



شکل ۴: حجم متوسط مقادیر توده، دیوار و مقادیر سطحی کسر جرمی

چگالی های جریان بالا قابل توجه است که حضور آب و جاری شدن در سمت کاتدی، انتقال اکسیژن را کاهش می-دهد. این اثر در مدل تک فاز در نظر گرفته نشده است، در نتیجه منجر به چگالی جریان در امتداد کانال گاز می شود. علاوه بر این، خشک کردن آند یک عامل عمدهای است که ولتاژ در چگالی جریان بالا را کاهش می دهد [۲۴–۲۲–۴].

يافتهها و بحث

– افت فشار

افت فشار یکی از مهم ترین پارامترهای مورد بررسی طراحی در کانالهای جریان سلول سوختی است. همراه با جهت جریان (از ورودی و خروجی) افت فشار باید کاهش یابد، در غیر این صورت، افت فشار معکوس، در کانالها جای می گیرد، باعث می شود که جریانهای ثانویه در نزدیک دیوارهای داخلی ایجاد شود. در کانالهای مارپیچ، جریان-های ثانویه در نزدیکی دیوارهای داخلی تشکیل می شود. این باعث تلفات اضافی در کانالها می شود. یک افزایش در شود [۲۵]. جدول (۱) فشارهای دینامیکی و کلی در کانال های جریان مارپیچ با اندازه خم متفاوت را نشان می دهد. در یک کانال مارپیچ با اندازه ی خم مربعی ۱۸۳۳، افت فشار تا ٪۲/۲ و ٪۹۰۶ به ترتیب در مقایسه با ۱۸۳۳ و ۸۰۶۰

– فرمولاسیون انتقال جرم برای کاتد PEMFC محاسبات عملکرد کاتد یک سلول سوختی غشاء الکترولیت پلیمر معمولی برای مورد ایدهآل که در شکل (۳) نشان داده شده است انجام گرفت.

فشار دینامیکی (Pa)	فشار کلی (Pa)	انداز ہی خم (mm)
11.0	YYXY	•/٨
۷۰۳	٥٣٦٠	1
٤٧٠	٤٠٨٩	1/1

جدول ۱- مقایسه ی فشار در سه نوع کانال مارپیچ [۵]

$$m' = (m'_{H_2} + m'_{H_2o})_{anode}$$
  
=  $(m'_{o_2} + m'_{H_2o})_{cathode}$  (177)  
=  $(4 + 4\alpha * 18)kg$   
=  $-32kg + 2(1 + 2\alpha)18kg$ 

مقدار حالت-T (مفهوم انتقال-مصرف) برای فاز اکسیژن به صورت زیر تعریف شده است:  $y_t = m_{o_2}'/m^*$  (۱۴) به طوری که  $y_t = -8(1+18\alpha)$  در شکل (۵) نشان داده شده است.



شکل ۵: مقادیر انتقال پایدار اکسیژن و آب به عوان تابعی از ضریب دراگ **۵** [۲۶]

واکنش کلی در مجمع الکترود به صورت زیر است 2H<sub>2</sub> + O<sub>2</sub> + 4\alpha H<sub>2</sub>O = 2(1 + 2\alpha)H<sub>2</sub>O

که ۵ ضریب دراگ، تعداد خالص مولکول های آب در هر پروتن در کاتد: در یک PEMFC، نیروهای مولکول های آب و دراگ از طریق غشاء با هر یروتن می باشد.

دراگ الکترواسموتیک توسط نفوذ بازگشتی از کاتد به آند، و همچنین توسط شار جابجایی در صورت وجود یک گرادیان فشار بین دو الکترود، برای دادن یک مقدار اصلاح شده است [۲۶]. Dai [۲۷] و همکارانش مقادیر تجربی تعیین شده و نتایج محاسبات از مدلهای ریاضی برای تعادل آب در مجامع الکترود غشاء و محدودههای فعلی مقدار هردو **qn و م** را بررسی کردند. موازنهی جرم توسط رابطهی ۱۳ نوشته می-شود:

حالت-T مربوط به آب، فقط ۲۰٫۴ است. انتقال جرم اکسیژن بهطور کلی به عنوان یک عامل مهم و بالقوهی محدود کنندهی سرعت عملیات PEMFC در نظر گرفته شده است [۲۶].

– تاثیر بستر آندی و افت فشار برای اعداد رینولدز
 مختلف با مبدان جریان مختلف

سلول های سوخت حاوی ده ها یا حتی صدها کانال توزیع جریان سوخت بر روی سطح سلول هستند. اندازه و الگوی کانال های جریان به طور قابل توجهی می تواند عملکرد سلول را تحت تاثیر قرار دهد. اگر چه طیف گسترده ای از الگوهای جریان به کار برده می شوند، گروه های تحقیقاتی و توسعه دهندگان، برخی از آن ها را بررسی کرده اند. طی بررسی های انجام گرفته، سلول سوختی با مساحت بزرگ تر، طراحی مارپیچ افت فشار بیش تری را ایجاد خواهد کرد [۲۸]. در شکل (۶) نتایج بررسی افت فشار در مقابل رینولدز برای انواع میدان جریان نشان داده شده اند.



-یک راهبرد مؤثر مش بندی برای مدلسازی CFD یک PEMFC

در مطالعهای، اثر مش محاسباتی در هر جهت بر روی دقت راه حل در یک روش نظام مند بررسی شده است. مشخص شده است که مش در جهات مختلف دارای درجههای مختلف تأثیر روی راه حل است که یک جهت می تواند درشت تر از دیگری باشد. روش مش مذکور قادر است که تا حد زیادی، تعداد عناصر مش را کاهش دهد، از این رو زمان محاسبه در عین حفظ ویژگی های متغیرهای مهم میدان بریان کاهش دهد. علاوه بر این، قابل اجرا برای طیف وسیعی از اندازههای سلول و تنظیمات میدان جریان می باشد و باید به عنوان یک راهنما برای نسل مورد استفاده قرار گیرد [۲۹]. اولین مدل سه بعدی در کار Dutta و همکارانش توسعه یافت [۳۰].

در مدل آنها، یک کد CFD تجاری برای حل برای میدان جریان در یک سلول تک کانال، مورد استفاده قرار گرفت. سینک تعریف شده و شرایط منبع توسط کاربر به ترتیب برای مصرف گونهها و تولید به دلیل واکنش الکتروشیمیایی استفاده شد. در نتیجه، این استفاده از CFD را به عنوان یک ابزار عمده برای بررسی یک سلول سوختی PEM در بسیاری جنبهها موجب گردید.

از دیدگاه اعتبارسنجی یک مدل، gu و wang [۳] نشان دادند که دو سلول کاملاً متفاوت تحت شرایط عملیاتی یکسان می توانند دقیقاً چگالی متوسط جریان یکسانی با تنظیم دو پارامتر اساسی، چگالی جریان تبادل واکنش کاهش اکسیژن و مقاومت یونی در لایههای کاتالیزور بدهند. آنها سپس نتیجه دارند که یک منحنی قطبی برای اطمینان از دقت نتایج پیش بینی شده کافی نیست و استفاده اطمینان از دقت نتایج پیش بینی شده کافی نیست و استفاده اطمینان از محلی متغیرهای میدان جریان را تأکید کردند. PEM و همکارانش [۳۲] اقدام به ایجاد معیارهای مهگرایی برای یک مدل CFD سلول سوختی متغیرهای نمودند. آنها پیشنهاد کردند که ثبات و یکنواختی متغیرهای مهم باید در کنار طرح باقیمانده، در قضاومت همگرایی - محور x به جهت عرضی (جانبی) اشاره می کند. - محور y به جهت در طول کانال (جهت جریان محوری) اشاره می کند. - محور z به جهت ارتفاع (ضخامت سلول) بر می گردد. معادلات حاکم مورد استفاده در این مطالعه آنهایی هستند که در نشریات قبلی شرح داده شدهاند [۴۱–۳۹]. مسئله در یک کد CFD تجاری به صورت عددی حل شده است، ANSYS Fluent با یک سلول سوختی PEM اضافه کردن ماژول، با استفاده از الگوریتم ساده است.

یک مانیتور نقطه از متغیرهای مهم همراه با حفاظت از جرم برای گونههای واکنش دهنده علاوه بر طرح باقی ماندهها حک می شود تا یک راه حل کامل همگرا بررسی گردد. مدل CFD سه بعدی از یک سلول سوختی PEM استفاده می شود تا به طور سیستماتیک اثر مش در هر جهت را روی دقت راه حل، بررسی کند. چنین اثری در هر جهت به شرح زیر خلاصه شده است.

- مش در جهت Z (ضخامت سلول)، دارای قوی ترین اثر روی دقت راه حل، به ویژه آن متغیرهای انتقال الکترون مرتبط، به رغم حداقل بعد سلول در این جهت، میباشد. - مش جانبی (محور X)، مسئول حل لایهی مرزی در دیوارههای کانال است و اثر amoderate روی محلول دارد و از این رو عناصر نزدیک به دیوار کافی باید همیشه استفاده شود.

- مش محوری دارای کم ترین اثر بر روی حل دارد که یک مزیت بزرگ از نقطه نظر محاسباتی ارائه میدهد. مش در این جهت، می تواند با حداقل دقت حل آرام شود. در نهایت، استفاده از استراتژی می باشد مش پیشنهاد شده تأیید شده است. این ثابت می کند که قادر به کاهش قابل مورد نیاز است. عمومیت معیارهای پیشنهادی، هنوز مورد تردید است.

بررسی مدلسازی سلول سوختی PEM نشان میدهد که مدلهای سه بعدی معمولی برای تک کانال حداقل شامل ۱۰<sup>۴</sup> عناصر سلولی است [۳۴–۳۳] و این میتواند توسط بسیاری از لایهها اگر بیش از یک کانال را شامل شود، افزایش برای یک سلول مقیاس آزمایشگاهی، منطقه فعال بین ۲۵ تا ۱۰۰ است که تعداد عناصر به راحتی میتواند به ۱۰<sup>۶</sup> برسد [۳۸–۳۵–۳۱].

Choopanya و Yang یک بخش نماینده ی یک میدان جریان تک مارپیچ متشکل از دو کانال مستقیم متصل شده توسط یک خم ۱۸۰ درجه را در نظر گرفتند. دامنه ی محاسباتی شامل کانال های جریان کاتد و آند، لایه های نفوذ گاز (GDLS) ، لایه های کاتالیست (CLS) و یک غشاء الکترولیت پلیمری PEM همان طور که در شکل (۷) نشان داده شده است، می باشد.



شکل ۷: کانال با خم منحنیوار ۱۸۰ درجه [۲۹]

کنوانسیون جهت براساس دستگاه مختصات کارتزین به صورت زیر تعریف شده است؛ [10] Kazim, A., Liu, HT., Forges, P.,1999, Modelling of performance of PEM fuel cells with conventional and interdigitated flow fields. J Appl Electrochem;29: 1409-1416.

[11] Taccani, R., Zuliani, Nicola., 2011, Effect of flow field design on performances of high temperature PEM fuel cells: experimental analysis. Int J Hydrogen Energy;36:10282-10287.
[12] Dutta, S., Shimpalee, S., Van Zee, JW., 2001, Numerical prediction of mass exchange between cathode and anode channels in a PEM fuel cell. Int J Heat Mass Transf;44:2029-

2042. [13] Kumar, A., Reddy, RG., 2003, Effect of channel dimensions and shape in the flow-field distributor on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells. J Power Sources;113:11e8.

[14] Manso, AP., Marzo, FF., Garmendia Mujika, M., Barranco, J., 2011, Lorenzo A. Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design. Int J Hydrogen Energy;36:6795-6808.

[15] Wang, X., Huang, Y., Cheng, Ch., Jang, J., Lee, D., Yan, W., 2010, et al. An inverse geometrydesign problem for optimization of single serpentine flow field of PEM fuel cell. Int J Hydrogen Energy;35:4247-4257.

[16] Cano-Andrade, S., Hernandez-Guerrero, A., von Spakovsky, MR., Damian- Ascencio, CE., Rubio-Arana, JC., 2010, Current density and polarization curves for radial flow field patterns applied to PEMFCs (proton exchange membrane fuel cells)Energy;35:920-927.

[17] Boddu, R., Kumar Marupakula, U., Summers, B., Majumdar, P., 2009, Development of bipolar plates with different flow channel configurations for fuel cells. J PowerSources;189:1083-1092.

[18] Liu, H., Li, P., Van Lew, J., 2010, CFD study on flow distribution uniformity in fuel distributors having multiple structural bifurcations of flow channels. Int J Hydrogen Energy;35:9186-9198.

[19] Bernadi, DM., Verbrugge, MW.,1992, A mathematical model of the solid polymerelectrolyte fuel cell. J Electrochem Soc;139:2477-2491.

[20] Gurau, V., Liu, H., Kakac, S., 1998, Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells. AIChE;44:2410-2422.

[21] Xing, L., Liu, X., Alaje, T., Kumar, R., Mamlouk, M., Scott, K., 2014, A two-phase flow and non-isothermal agglomerate model for a proton exchange membrane (PEM) fuel cell. Energy;73:618-634.

[22] Parthasarathy, A., Srinivasan, S., Appleby, AJ., 1992, Temperature dependence of the electrode kinetics of oxygen reduction at the platinum/nafion interface-a microelectrode investigation. J Electrochem Soc;139:2530-2537.

[23] Hashemi, F., Rowshanzamir, S., Rezakazemi, M., 2012, CFD simulation of PEM fuel cell performance: effect of straight and serpentine flow fields. J Math Comput Model;55:1540-1557.

[24] Abdollahzadeh, M., Pascoa, JC., Ranjbar, AA., Esmaili, Q., 2014, Analysis of PEM (polymer electrolyte membrane) fuel cell cathode two-dimensional modeling. Energy;68:478-494.

[25] Rostami, L., Rahimi, R., Gholynejad, P., 2015, Design of bipolar plates with different serpentine flow channel configurations. Fuel cells WILEY-VCH. [under review].

[26] Steven, B.,2015, Beale. Mass transfer formulation for polymer electrolyte membrane fuel cell cathode. i n t e r n a t i o n a l journal o f hydrogen energy 40, 11641-11650.

[27] Dai, W., Wang, H., Yuan, X-Z., Martin, JJ., Yang, D., Qiao, J.,2009, et al. A review on water balance in the membrane electrode assembly of proton exchange membrane fuel cells. Int J Hydrog Energy;34(23): 9461-9478.

[28] Karvelas, E.G., Koubogiannis, D.G., Hatziapostolou, A., I.E. Sarris, I.E., 2016, The effect of anode bed geometry on the hydraulic behaviour of PEM fuel cells. Renewable Energy 93, 269-279.

توجهی در زمان محاسباتی میباشد، در حالی که سطح قابل قبولی از دقت برای طیف گستردهای از اندازههای سلول و تنظیمات میدان جریان تحت شرایط عملیاتی معمولی را می-دهد و میتواند به عنوان یک راهنما در فرآیند مشبندی برای آنهایی که در مدلسازی CFD مربوط به PEM جدید هستند، استفاده شود [۲۹].

### نتيجه گيري

### منابع

[1] Wang, Y., Chen, KS., Mishler, J., Cho, SC., Adroher, XC.,2011, A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: technology, applications, and needs on fundamental research. Appl Energy ,88(4): 981-1007.

[2] Martin, KE., Kopasz, JP., McMurphy, KW., 2010, Status of fuel cells and the challenges facing fuel cell technology today. In: ACS Symp. Ser., vol. 1040; p. 1-13.

[3] Siegel, C., 2008, Review of computational heat and mass transfer modeling in polymer-electrolyte-membrane (PEM) fuel cells. Energy;33:1331-1352.

[4] Thanh Nguyen, Ph., Berning, T., Djilali, N., 2004, Computational model of a PEM fuel cell with serpentine gas flow channels. J Power Sources;130:149-157.

[5] Rostami,L., Mohamad Gholy Nejad,P., Vatani,A., 2016, A numerical investigation of serpentine flow channel with different bend sizes in polymer electrolyte membrane fuel cells. Energy 97, 400-410.

[6] Zi Yuan, X., Wang, H., Zhang, J., 2005, Wilkinson DP. Bipolar plates for PEM fuel cells e from materials to processing. J New Mater Electrochem Syst;8:257-267.

[7] Middelman, E., Kout, W., Vogelaar, B., Lenssen, J.,2003, de Waal E. Bipolar plates for PEM fuel cells. J Power Source;118:44-46.

[8] Li, X., Sabir, I., 2005, Review of bipolar plates in PEM fuel cells: flow-field designs. Int J Hydrogen Energy;30:359-371.

[9] Liu, H., Li, P., Juarez-Robles, D., Wang, K., Hernandez-Guerrero, A., 2014, Experimental study and comparison of various designs of gas flow fields to PEM fuel cells and cell stack performance. J Energy Res:22.

performance of symmetric flow distributors as flow channels for PEM fuel cells. Int J Hydrogen Energy;37(1):436-448.

[37] Jang, S., Shin, G., Hwang, H., Choi, K., Kim, H., 2011, Numerical studies of PEM fuel cell with serpentine flow field for sustainable energy use. In: World Renewable Energy Congress; p. 1205-1210.

[38] Sinha, PK., Wang, C-Y., Beuscher, U., 2007, Transport phenomena in elevated temperature PEM fuel cells. J Electrochem;154(1):B106-116.

[39] Choopanya, P., Yang, Z., 2014, Transient performance investigation of different flow-field designs of automotive polymer electrolyte membrane fuel cell (PEMFC) using computational fluid dynamics (CFD). In: 10th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics 14the16th July; p. 583-592.

[40] Choopanya, P., Peng, Z., 2012, An investigation on steadystate performance of conventional and serpentine flow-fields for automotive polymer electrolyte membrane fuel cell. In: 1<sup>st</sup> SCODECE Internal Conference (2012 International Forum on Vehicle Control); p. 59.

[41] Choopanya, P., Yang, Z., 2015, A CFD investigation of effects of flowfield geometry on transient performance of an automotive polymer electrolyte membrane fuel cell. Comput Therm Sci Int;7(2):93-104.

[29] Choopanya, P., Yang, Z., 2016, An effective mesh strategy for CFD modelling of polymer electrolyte membrane fuel cells. international journal of hydrogen energy 41, 6445-6456.

[30] Dutta, S., Shimpalee, S., Van Zee, JW., 2000, Threedimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells. J Appl Electrochem;30:135-146.

[31] Ju, H., Wang, C-Y., 2004, Experimental validation of a PEM fuel cell model by current distribution data. J Electrochem Soc;151:A1954-1960.

[32] Arvay, A., Ahmed, A., Peng, X-H., Kannan, AM., 2012, Convergence criteria establishment for 3D simulation of proton exchange membrane fuel cell. Int J Hydrogen Energy;37(3):2482-2489.

[33] Wang, Y., Basu, S., Wang, C-Y.,2008, Modeling two-phase flow in PEM fuel cell channels. J Power Sources;179:603-617.

[34] Dawes, JE., Hanspal, NS., Family, OA., Turan, A., 2009, Threedimensional CFD modelling of PEM fuel cells: an

investigation into the effects of water flooding. Chem Eng Sci;64:2781-2794.

[35] Shimpalee, S., Lilavivat, V., Van Zee, JW., McCrabb, H., Lozano- Morales, A., 2011, Understanding the effect of channel tolerances on performance of PEMFCs. Int J Hydrogen Energy;36(19):12512-12523.

[36] Ramos-Alvarado, B., Hernandez-Guerrero, A., Juarez-Robles, D., Li, P., 2012, Numerical investigation of the