مدل­سازی سه­ بعدی پیل سوختی غشاء پلیمری و بررسی اثرات پارامترهای کاری بر روی عملکرد پیل سوختی

سمانه زمانی علویجه1، رضا صادقی باغنی2، امید محمدی1، محمدبهشاد شفیعی1\*

 1- مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

2- مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران

\* تهران، کد پستی 11365-11155، پست الکترونیک behshad@sharif.edu

چکیده

امروزه آلودگی محیط زیست یکی از مشکلات اصلی جهان به شمار می­رود از این رو تکنولوژی پیل سوختی بدلیل انرژی پاک و راندمان بالا مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری به شدت به پارامترهای کاری مانند دما بستگی دارد. پارامترهای کاری مناسب برای عملکرد پایدار پیل سوختی بسیار اهمیت دارند. در این تحقیق یک شبیه­سازی سه بعدی برای پیش­بینی رفتار پیل سوختی در پارامترهای کاری مختلف انجام شده است به طوری که اثر تغییر هر پارامتر بر عملکرد سوختی نشان داده شده است. مدل استفاده شده در این تحقیق یک مدل نه لایه شامل لایه جمع کننده جریان الکتریکی، لایه دیفیوژن گاز و لایه کاتالیست برای سمت کاتد و سمت آند می­باشد که توسط لایه غشاء از هم جدا شده­اند. نرم­افزار استفاده شده در این تحقیق انسیس فلوئنت[[1]](#footnote-1) می­باشد که در آن از توانایی ماژول پیل سوختی غشاء پلیمری[[2]](#footnote-2) برای حل مسئله استفاده شده است. بعد از حل معادلات نتایج بدست آمده با نتایج آزمایشگاهی صحت­سنجی شده که این صحت­سنجی در منحنی ولتاژ بر حسب جریان انجام شده است. بر طبق این نتایج پیشنهادهای مناسبی برای طراحی پیل سوختی غشاء پلیمری می­تواند ارائه شود.

**کلی**د‌واژگ**ان**

پیل سوختی غشاء پلیمری، مدل­سازی سه بعدی، پارامترهای کاری

Three-dimensional modeling of polymer membrane fuel cell and investigation of the effects of operating parameters on fuel cell performance

Samaneh Zamani Alavijeh1, Reza Sadeghi Baghenei2, Omid Mohammadi1, Mohammad Behshad Shafii1\*

1- Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

\* P.O.B. 11155-11365 Tehran, Iran, behshad@sharif.edu

Abstract

Environmental pollution is one of the major problems in the world today, so fuel cell technology has received much attention due to its clean energy and high efficiency. The performance of the polymer membrane fuel cell depends heavily on operating parameters such as temperature. The proper operating parameters are essential for the sustainable performance of the fuel cell. In this study, a three-dimensional simulation is presented to predict the fuel cell behavior at different operating parameters, so that the effect of changing each parameter on fuel performance is shown. The model used in this study is a nine-layer model consisting of electric current collector layer, a gas diffusion layer and catalyst layer for the cathode and anode sides separated by the membrane layer. The software used in this study is ANSYS Fluent, which utilizes the ability of the polymer membrane fuel cell modules to solve the problem. After solving the equations, the results are verified with the experimental results, which are performed in voltage curves in terms of current. According to these results, suitable suggestions can be made for the design of the fuel cell of the polymer membrane.

Keywords

Polymer membrane fuel cell, three-dimensional modeling, operating parameters

1- مقدمه

پیل سوختی غشاء پلیمری یکی از جذاب­ترین تکنولوژی­های تبدیل انرژی به دلیل راندمان بالا، آلودگی صفر و شروع به کار سریع بوده است. این مزیت ها باعث می­شود که پیل سوختی انتخاب خوبی برای منابع انرژی قابل حمل و وسایل نقلیه باشد.

ایکرلینگ و همکاران [1] مدلی برای محاسبه­ی درگ الکتروزماتیک[[3]](#footnote-3) در یک گرادیان فشار هیدرودینامیکی پیشنهاد دادند. اوکادا و همکاران [2] نشان دادند که ضخامت غشاء و رطوبت هر دو بر محتوای آب پیل سوختی اثر می­گذارند. یان و همکاران [3] توزیع آب را در غشاء تحت شرایط کاری مختلف بدست آوردند. بنابراین مدیریت آب، گرما و گاز برای عملکرد مناسب یک پیل سوختی بسیار مهم و حیاتی است.

2- هندسه

هندسه­ی استفاده شده برای این مدل یک هندسه­ی سه بعدی با 30 میلی متر طول در جهت عمود بر صفحه­ی کاغذ و 18 میلی متر عرض در جهت افقی صفحه­ی کاغذ است. در شکل 1 لایه­های مختلف پیل سوختی در هندسه سه بعدی و کانال­های گاز و همچنین ورودی و خروجی­ها در پیل نشان داده شده است.



**شكل 1** هندسه سه بعدی پیل سوختی

در جدول 1 جزئیات مقدار ابعاد نشان داده شده است. با مقایسه اعداد مشخص است که طول پیل سوختی در مقایسه با دیگر ابعاد آن بسیار بزرگ­تر است و دلیل آن این است که سوخت تزریقی در ورودی­ها به طور کامل مصرف شود.

**جدول 1** ابعاد پیل سوختی در واحد میلی متر

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| طول | عرض | ضخامت | ناحیه |
| 30 | 2 | 0.05 | غشاءلایه کاتالیستلایه دیفیوژن گازکانال جریانلایه جمع کننده |
| 30 | 2 | 0.02 |
| 30 | 2 | 0.2 |
| 30 | 1 | 1 |
| 30 | 2 | 0.02 |
|  |  |  |  |

3- معادلات حاکم

معادله اول که باید حل شود معادله بقا جرم در پیل سوختی است که رابطه­ی آن به صورت زیر است [4]:

|  |  |
| --- | --- |
| (1) | $$\frac{∂(ερ)}{∂t}+∇.\left(ερ\vec{u}\right)=S\_{m}$$ |

که در آن $\vec{u}$ بردار سرعت، $S\_{m}$ ترم چشمه ی جرم، 𝜀 ضریب تخلخل، $t$ زمان و $ρ$ چگالی می­باشد. برای تمام نواحی پیل سوختی داریم:

|  |  |
| --- | --- |
| (2) | $$S\_{m}=0$$ |

معادله بعد بقاء مومنتوم است که از رابطه­ی زیر قابل محاسبه است:

|  |  |
| --- | --- |
| (3) | $$∇.\left(\frac{ρ\_{g}\vec{u}\_{g}\vec{u}\_{g}}{ε^{2}}\right)=-∇p+∇.\vec{τ}+S\_{p}$$ |

که در آن $\vec{u}\_{g}$ بردار سرعت مخلوط گازی، $p$ فشار، $S\_{p}$ ترم چشمه و $\vec{τ}$ تنسور تنش می­باشد. برای کانال گاز داریم:

|  |  |
| --- | --- |
| (4) | $$S\_{p}=0$$ |

*برای محیط­های متخلخل معادله مومنتوم به معادله دارسی کاهش پیدا می­کند*:

|  |  |
| --- | --- |
| (5) | $$ε\vec{u}=-\frac{k\_{p}}{μ}∇p$$ |

که در آن $k\_{p}$ ضریب نفوذ پذیری و $μ$ ویسکوزیته­ی سیال هستند. معادله بعدی معادله بقا انرژی است که به صورت زیر نوشته می­شود:

|  |  |
| --- | --- |
| (6) | $$∇.\left(ερc\_{p}uT\right)=∇.\left(k^{eff}∇T\right)+S\_{Q}$$ |

که در آن $c\_{p}$ ظرفیت ویژه­ی گرمایی، $T$ دما، $k^{eff}$ ضریب هدایت گرمایی موثر و $S\_{Q}$ *ترم چشمه­ی حرارتی می­باشند. معادله­ی بقاء گونه معادله­ی دیگری است که باید در این پژوهش حل شود و رابطه­ی آن به صورت زیر است:*

|  |  |
| --- | --- |
| (7) | $$∇.\left(εuc\_{k}\right)=∇.\left(D\_{k}^{eff}∇c\_{k}\right)+S\_{k} $$ |

که در آن $c\_{k}$ *غلظت مولی هر جزء،* $D\_{k}^{eff}$ضریب دیفیوژن موثر هر جزء و $S\_{k}$ ترم چشمه­ی تولید یا مصرف هر جزء می­باشد. برای کانال، لایه دیفیوژن گاز و غشاء داریم:

|  |  |
| --- | --- |
| (8) | $$S\_{k}=0 $$ |

برای لایه کاتالیست، ترم چشمه­ی هیدروژن، اکسیژن و آب به صورت زیر است:

|  |  |
| --- | --- |
| (9) | $$S\_{H\_{2}}=-\frac{1}{2FC\_{total,a}}j\_{a}$$ |
| (10) | $$S\_{O\_{2}}=-\frac{1}{4FC\_{total,c}}j\_{c}$$ |
| (11) | $$S\_{H\_{2}O}=-\frac{1}{2FC\_{total,c}}j\_{c}$$ |

که در آن­ها $a$ و $c$ اندیس­های کاتد و آند، $F$ ثابت فارادی و $j$ چگالی جریان می­باشد. فرآیند های الکتروشیمیایی به عنوان واکنش های غیر همگن در نظر گرفته می­شوند که داخل لایه­­ی کاتالیست اتفاق می­افتند. معادلات بقا الکترون در قسمت­های جامد و بقا پروتون در غشاء و لایه­های کاتالیست پیل سوختی حل می­شوند که این معادلات به صورت زیر هستند:

|  |  |
| --- | --- |
| (12) | $$∇.\left(σ\_{s}∇ϕ\_{s}\right)+j\_{s}=0$$ |
| (13) | $$∇.\left(σ\_{m}∇ϕ\_{m}\right)+j\_{m}=0$$ |

که درآن $j\_{s}$ و $j\_{m}$ ترم­های چشمه­ی معادلات بقا و $σ\_{s}$ و $σ\_{m}$ ضرایب هدایت بار الکترونی و پروتونی در فازهای نظیر هستند، اندیس­های $s$ و $m$ مربوط به الکترون و پروتون است و منظور از *ϕ* پتانسیل بار مورد نظر است.

در این تحقیق مدل اشباع برای حل معادله انتقال آب اعمال می­شود که در کانال به صورت زیر ساده شده است [5]:

|  |  |
| --- | --- |
| (14) | $$\frac{∂(ερ\_{l}s)}{∂t}+∇.\left(ρ\_{l}v\_{l}s\right)=r\_{w}$$ |

که در آن $v\_{l}$ سرعت آب مایع در داخل کانال است و $r\_{w}$ نرخ چگالش و همان ترم چشمه­ی معادله­ی انتقال آب مایع است. در داخل ناحیه­های متخلخل با مقاومت بالا خاصیت مویینگی این امکان را فراهم می­کند که معادله انتقال آب مایع به صورت زیر باشد*:*

|  |  |
| --- | --- |
| (15) | $$\frac{∂(ερ\_{l}s)}{∂t}+∇.\left(ρ\_{l}\frac{Ks^{3}}{μ\_{l}}\frac{dp\_{c}}{ds}∇s\right)=r\_{w}$$ |

*که در آن* $K$ *ضریب نفوذ پذیری مطلق و* $p\_{c}$ *فشار کپیلاری و اندیس* $l$ *فاز آب مایع را نشان می­دهند.*

4- روش حل

از آنجا که فاز آب مایع داخل لایه­های مختلف دائماً در حال تغییر حالت به فاز بخار است و همچنین ترم چشمه­ی معادله بقا گونه برای هر جزء در ارتباط با چگالی جریان یعنی معادلات بقاء بار الکترونی و پروتونی می­باشد همچنین معادله بقا جرم به همه­ی این ترم­ها وابسته است تمامی معادلات با هم کوپل شده­اند. در واقع حل کردن این معادلات به تنهایی امکان پذیر نیست. در این تحقیق حل معادلات با استفاده از نرم افزار فلوئنت و ماژول پیل سوختی غشاء پلیمری انجام شده است. ماژول پیل سوختی با استفاده از الگوریتم سیمپل[[4]](#footnote-4) و روش­های دینامیک سیالات محاسباتی معادلات را حل می­کند. ماژول برای حل مسئله به دریافت کردن یک سری پارامتر نیاز دارد که پارامتر­های مواد در جدول 2 آورده شده است [6].

**جدول 2** پارامترهای مواد برای اجزاء مختلف

|  |  |
| --- | --- |
| مقدار | پارامتر |
| 1880 kg m-3 | دانسیته جمع کننده جریان |
| 875 kg-1 K-1 | ظرفیت گرمایی جمع کننده جریان |
| 10.7 Wm-1 K-1 | هدایت گرمایی جمع کننده جریان |
| 490 kg m-3 | دانسیته لایه دیفیوژن گاز |
| 710 J kg-1 K-1 | ظرفیت گرمایی لایه دیفیوژن گاز |
| 1.6 Wm-1 K-1 | هدایت گرمایی لایه دیفیوژن گاز |
| 500 ohm-1 m-1 | هدایت الکتریکی لایه دیفیوژن گاز |
| 2010 kg m-3 | دانسیته لایه کاتالیست |
| 710 J kg-1 K-1 | ظرفیت گرمایی لایه کاتالیست |
| 8 Wm-1 K-1 | هدایت گرمایی لایه کاتالیست |
| 1980 kg m-3 | دانسیته غشاء |
| 2000 J kg-1 K-1 | ظرفیت گرمایی غشاء |
| 0.67 W m-1 K-1 | هدایت گرمایی غشاء |
| 1.23 ohm-1 m-1 | هدایت الکتریکی غشاء |

4- نتایج و بحث

عملکرد پیل سوختی غشاء پلیمری می­تواند توسط منحنی­های قطبیت توصیف شود. به منحنی ولتاژ بر حسب جریان منحنی قطبیت گفته می­شود. در این تحقیق اثرات پارامتر­های کاری مختلف توسط منحنی­های جریان-ولتاژ و جریان-توان بررسی شده است. شکل 2 یک مقایسه بین داده­های آزمایشگاهی [6] و داده­های مدل­سازی نرم افزاری برای یک تک سل را نشان می­دهد. همانطور که در شکل 2 قابل تشخیص است اختلاف بسیار کمی بین داده­های آزمایشگاهی و داده­های مدل­سازی می­باشد که نشان­دهنده­ی صحت مدل­سازی انجام شده است.

**شكل 2** صحت سنجی

شکل 3 منحنی قطبیت را برای دماهای کاری مختلف پیل سوختی نشان می­دهد. در شکل 3 واضح است که در چگالی جریان­های پایین، عملکرد پیل سوختی زیاد تغییر نمی­کند. در این ناحیه تولید آب سمت کاتد به قدر کافی نیست که غشاء را به خوبی آب­زدایی کند. با افزایش دمای پیل سوختی، آب مایع بیشتری بخار شده و به بیرون پیل سوختی جریان می­یابد اما رطوبت زده شده به واکنش­دهنده­ها می­تواند کمبود آب را جبران کند و یک بالانس آب در غشاء به وجود آورد. بنابراین اثرات دمای کاری روی پیل سوختی در چگالی جریان­های پایین بسیار کم است. عملکرد پیل سوختی با افزایش دما در چگالی جریان­های بالا بهبود می­یابد. هنگامی که دمای پیل سوختی بالا می­رود آب بیشتری می­تواند به دلیل بخار شدن خارج شود. همچنین افزایش دما می­تواند به طور مستقیم فعالیت کاتالیست را افزایش دهد و نرخ انجام واکنش­های شیمیایی را افزایش بدهد.

**شكل 3** منحنی قطبیت برای دماهای کاری مختلف

با توجه به شکل 4 نتیجه گرفته می­شود که با افزایش فشار چگالی جریان خروجی پیل سوختی افزایش می­یابد. به عبارت دیگر منحنی قطبیت بالاتر می­رود که نشان­دهنده­ی بهبود عملکرد پیل سوختی است. علت این افزایش چگالی جریان این است که با افزایش فشار نرخ مصرف اکسیژن و هیدروژن بیشتر می­شود و درنتیجه چگالی جریان بیشتری تولید خواهد شد.

**شكل 4** منحنی قطبیت برای فشارهای کاری مختلف

شکل 5 منحنی توان خروجی پیل سوختی بر حسب چگالی جریان­ در دماهای مختلف را نشان می­دهد. با توجه به این شکل می­توان نتیجه گرفت که توان خروجی پیل سوختی در چگالی جریان­های پایین خیلی تحت تاثیر دما نیست ولی در چگالی جریان­های بالاتر با دما تغییر می­کند. از آنجا که توان پیل سوختی سطح زیر منحنی قطبیت می­باشد هر چقدر که دما بالاتر رود توان پیل سوختی متناظر با آن افزایش می­یابد.

**شكل 5** منحنی توان خروجی بر حسب چگالی جریان برای دماهای کاری مختلف

مراجع

 [1] Eikerling, M., et al. "Phenomenological theory of electro‐osmotic effect and water management in polymer electrolyte proton‐conducting membranes." *Journal of the Electrochemical Society* 145.8 (1998): 2684.

[2] Okada, Tatsuhiro, Gang Xie, and Morten Meeg. "Simulation for water management in membranes for polymer electrolyte fuel cells." *Electrochimica Acta* 43.14-15 (1998): 2141-2155.

[3] Yan, Wei-Mon, et al. "Analysis of thermal and water management with temperature-dependent diffusion effects in membrane of proton exchange membrane fuel cells." *Journal of Power Sources* 129.2 (2004): 127-137.

[4] Um, Sukkee, C‐Y. Wang, and K. S. Chen. "Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells." *Journal of the Electrochemical society* 147.12 (2000): 4485.

[5] Nam, Jin Hyun, and Massoud Kaviany. "Effective diffusivity and water-saturation distribution in single-and two-layer PEMFC diffusion medium." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46.24 (2003): 4595-4611.

[6] Yuan, Wei, et al. "Model prediction of effects of operating parameters on proton exchange membrane fuel cell performance." *Renewable Energy* 35.3 (2010): 656-666.

1. ANSYS Fluent [↑](#footnote-ref-1)
2. PEM Fuel Cell Modules [↑](#footnote-ref-2)
3. Electro-osmotic drag [↑](#footnote-ref-3)
4. SIMPLE algorithm [↑](#footnote-ref-4)