



بررسی تاثیرات محیطی و هندسی بر عملکرد پیل سوختی پروتونی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی

محمود محبعلی زاده^۱، کمال عباسپور ثانی^۲

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد ۲- استادیار دانشگاه آزاد تاکستان

(abbaspoursani@yahoo.com)

چکیده

در مقاله حاضر مدل دو بعدی از پیل سوختی غشاء یونی با کانال جریان مستقیم در قسمت آند و کاتد ارائه شده است. این مدل بصورت همزمان انتقال گازها و یونها و پروتئهای هیدروژن و مدیریت آب را در پیل سوختی غشا یونی در نظر می گیرد. معادلات حاکم اعم از بقا جرم و بقا گونه ها و انرژی برای اجزای پیل سوختی شامل غشاء، لایه های نفوذ گاز، لایه های کاتالیستی، کانال جریان گاز و جمع کننده های جریان مدلسازی شده است. برای حل این مقاله از روشهای عددی بر پایه حجم محدود (دینامیک سیالات محاسباتی) استفاده شده که مطابقت خوبی با نتایج آزمایشگاهی مخصوصا در تراکم جریانهای پایین دارد. علت اختلاف نسبتا ناچیز نتایج آزمایشگاهی با نتایج عددی وجود آب در غشا و احتمال بوجود آمدن پدیده غرقایی می باشد. تاثیر شرایط محیطی از قبیل رطوبت ورودی و استوکیومتری و نیز شرایط هندسی از قبیل ضخامت غشا پیل مورد بررسی قرار گرفته است.

کلمات کلیدی: پیل سوختی پروتونی، مدل، غشاء، کسر مولی

۱- مقدمه

پیل سوختی یک وسیله الکتروشیمیایی است که انرژی شیمیایی سوخت را مستقیما به انرژی الکتریکی تبدیل می کند. الکترولیت، الکتروند آند و الکتروکاتد اجزای اصلی پیل سوختی می باشد. در پیل سوختی سوخت و اکسیژن به طور پیوسته به ترتیب به الکتروند آند و کاتد تزریق می شود. در مجاورت الکترودها با انجام واکنش های الکتروشیمیایی و ایجاد پتانسیل الکتریکی جریان الکتریکی برقرار می گردد. اگر چه اجزاء و ویژگی های پیل سوختی مشابه باتری است اما تفاوت های بسیاری نیز وجود دارد. باتری وسیله ذخیره انرژی است و بیشینه ی انرژی قابل استحصال از آن متناسب با میزان ماده شیمیایی واکنش دهنده ی است که در خود باتری (عموما در الکترودها) ذخیره می شود. چنانچه ماده واکنش دهنده در باتری به طور کامل مصرف شود، تولید انرژی الکتریکی متوقف خواهد شد (باتری تخلیه می شود) ماده واکنش دهنده در باتری های نسل دوم با شارژ مجدد دوباره احیا می شود.

این عمل مستلزم تامین انرژی از یک منبع خارجی است. در این حالت نیز میزان انرژی الکتریکی ذخیره شده در باتری محدود و متناسب با میزان ماده واکنش دهنده در باتری است. پیل سوختی یک دستگاه تبدیل انرژی است و از جنبه نظری تا زمانی که ماده اکسید کننده و سوخت به الکترودها تزریق شود، قابلیت تولید انرژی الکتریکی را دارد. البته در عمل مواردی از قبیل استهلاک، خوردگی و کارکرد نامناسب اجزاء موجب کاهش طول عمر مفید پیل سوختی خواهند بود.

گاز هیدروژن به دلیل تمایل واکنش دهنده گی بالا و نیز چگالی انرژی زیاد به عنوان سوخت آرمانی پیل سوختی مطرح است. اکسژن مورد نیاز پیل سوختی به طور مستقیم از هوا تهیه می شود. واکنش اکسیداسیون و احیاء بر روی سطح الکترودهای آند و کاتد پیل سوختی در



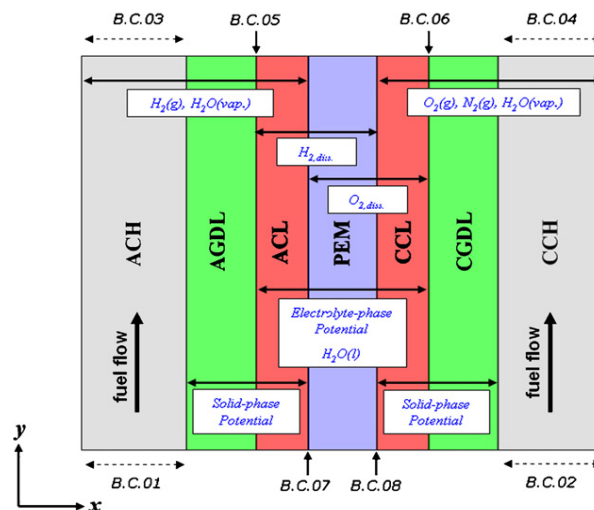
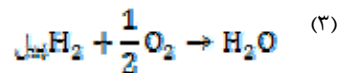
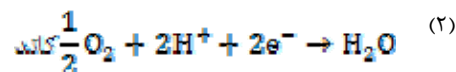
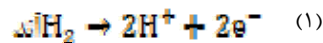
ناحیه سه فازی (و در صورت جامد بودن الکترولیت در ناحیه دو فازی) در مجاورت سطح مشترک واکنش دهنده ها ، کاتالیست و الکترولیت صورت می گیرد. گاز واکنش دهنده در این پیل ها پس از تبدیل شدن به یون از میان لایه نازکی از الکترولیت که سطح الکترودهای متخلخل را پوشانده عبور کرده و در واکنش الکتروشیمیایی روی سطح الکتروده شرکت می کنند. چنانچه الکتروده متخلخل حاوی مقادیر اضافی الکترولیت باشد، الکتروده به اصطلاح غرق شده و به این ترتیب انتقال واکنش دهنده های گازی محلول در الکترولیت به مکانهای واکنش محدود می شود. کاتالیست مورد استفاده در این پیل سوختی اغلب از جنس پلاتین است [۱].

مگیو و همکاران [۲] از طریق روابط نیمه تجربی مسئله انتقال آب را در پیل سوختی مطالعه کردند. آنها افت های غلظتی را با در نظر گیری ارتباط تجربی بین ضریب تخلخل و تراکم جریان پیل بررسی کردند.

مدل وهر و همکاران [۳] نشان می دهد که برای استک پیل سوختی مدیریت آب را بسیار پیچیده می شود و به مدیریت حرارتی وابسته است. به منظور اعتبار سازی مدل حاضر از نتایج آزمایشگاهی منچ و همکاران [۴] استفاده شده است.

2- تعریف مدل

شکل ۱ شماتیکی پیل سوختی دو بعدی و اجزاء تشکیل دهنده آن را نشان می دهد. واکنش کلی پیل سوختی پروتونی:



شکل ۱: شماتیکی از این پیل سوختی دو بعدی و اجزاء تشکیل

دهنده



مشخصات هندسی پیل سوختی مدل شده در جدول ۱ و مشخصات عملکردی در جدول ۲ تنظیم شده است.

جدول ۱: مشخصات هندسی پیل سوختی

7.112cm	طول کانال پیل
0.0762cm	عرض کانال گاز
0.03cm	عرض لایه نفوذ گاز
0.0001cm	عرض لایه کاتالیست
0.01275cm	عرض غشاء

جدول ۲: مشخصات عملکردی پیل سوختی

۰.۴	تخلخل لایه کاتالیست
2	استوکیومتریک اکسیژن+گاز
2.5	استوکیومتریک هیدروژن+گاز
%۱۰۰	رطوبت نسبی کاتد و آنود
۸۰ ^o C	دما

۱-۲- فرضیات مساله

- ۱- این مدل فرض های زیر را در بر می گیرد:
- ۱- گاز های ورودی و خروجی ایده آل فرض شده اند.
- ۲- جریان به دلیل پایین بودن گرادیان فشار و سرعت و به تبع آن عدد رینولدز، بصورت آرام می باشد.
- ۳- شرایط حاکم بر پیل پایدار می باشد.
- ۴- گازهای ورودی و دیواره های پیل دما ثابت است.
- ۵- غشاء کاملا به صورت هیدراته در نظر گرفته شده است، بنابراین هدایت الکتریکی ثابت می باشد.

۲-۲- معادلات مدل

معادلاتی بر پیل سوختی (لایه کاتالیست) حاکم هستند عبارتند از:

$$\nabla \cdot (\epsilon \rho v) = S_m \quad (4)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \rho v v) = -\epsilon \nabla p + (\epsilon \mu \nabla v) + S_v \quad (5)$$

$$\nabla \cdot (\epsilon \rho v Y_i) = -\nabla \cdot J_i + S_i \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \phi_{sol}) = S_{sol} \quad (7)$$



$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \cdot \nabla \phi_{mem}) = S_{mem} \quad (8)$$

معادلات فوق به ترتیب، معادله جرم، مومنتوم، گونه و دو معادله آخر معادلات پتانسیل می باشند.

در معادلات پنج ترم منبع $S_m, S_v, S_i, S_{sol}, S_{mem}$ موجود می باشد. در سمت کاند بدلیل مصرف اکسیژن و هیدروژن ترم های منبع بصورت منفی در معادلات گونه و بقا جرم وارد می شوند و همچنین بخاطر تولید آب در اثر واکنش شیمیایی ترم منبع مربوط به تولید آب بصورت مثبت به معادلات اضافه می شوند همچنین بخاطر انتقال آب بوسیله پدیده الکترواسمتیک، ترم منبع مربوط به آب به معادلات اضافه می شود.

$$S_m = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} \quad (9)$$

$$S_m = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} - \frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} \quad (10)$$

$$S_v = -\frac{\mu}{\kappa} v \quad (11)$$

$$S_{H_2} = -\frac{M_{w,H_2}}{2F} R_{an} \quad (12)$$

$$S_{O_2} = -\frac{M_{w,O_2}}{4F} R_{cat} \quad (13)$$

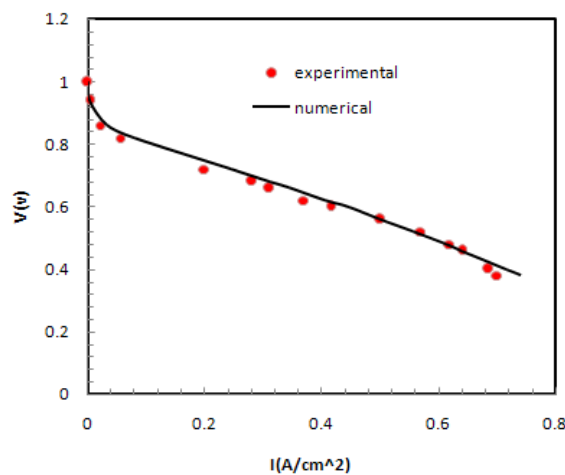
$$S_{H_2O} = \frac{M_{w,H_2O}}{2F} R_{cat} \quad (14)$$

۳- شرایط مرزی

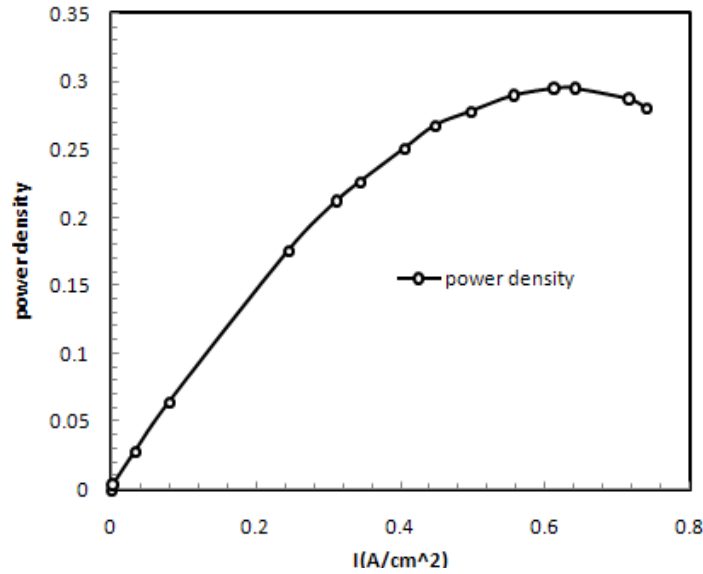
در این مدل برای مدلسازی از مدل تک ناحیه ای در داخل میدان حل بهره گرفته شده است. شرایط مرزی ورودی جرم برای ورودی کانال هوا و سوخت، شرایط مرزی فشار ثابت در خروجی هوا و سوخت، دما در ورودی و خروجی هوا و سوخت و کلیه دیواره ها ثابت است.

۴- بحث و نتیجه گیری

برای اعتبار دهی به این مقاله از نتایج تجربی منچ و همکاران استفاده شده است. شکل ۲ این مطابقت را نشان می دهد.

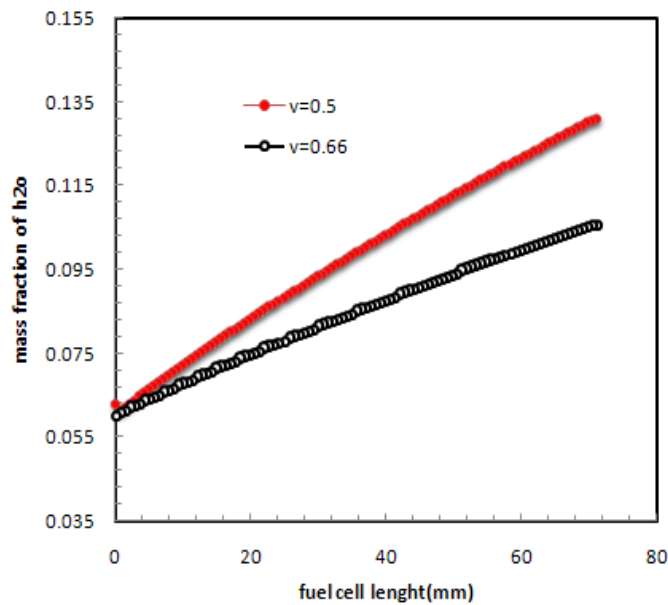


شکل ۲: نمودار اعتباردهی کار عددی با نتایج تجربی

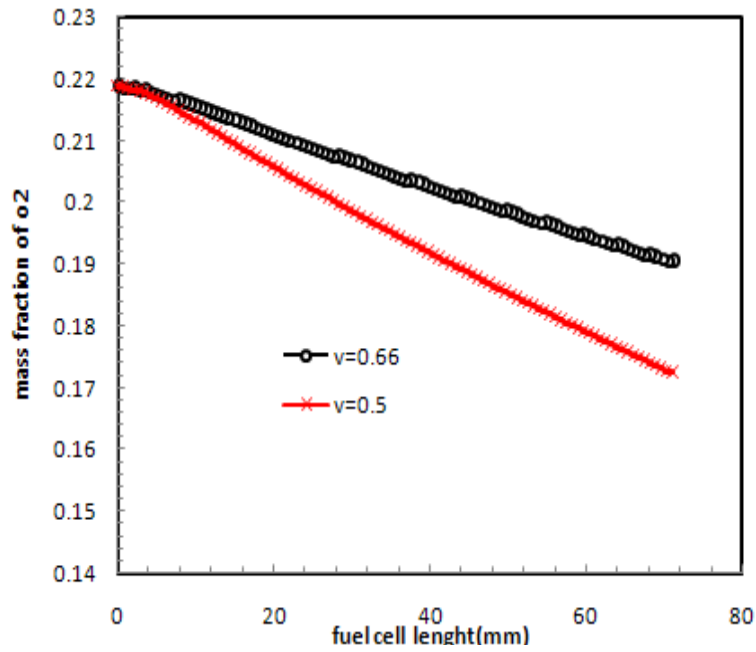


شکل 3: نمودار قدرت پیل سوختی (وات بر سانتیمتر مربع)

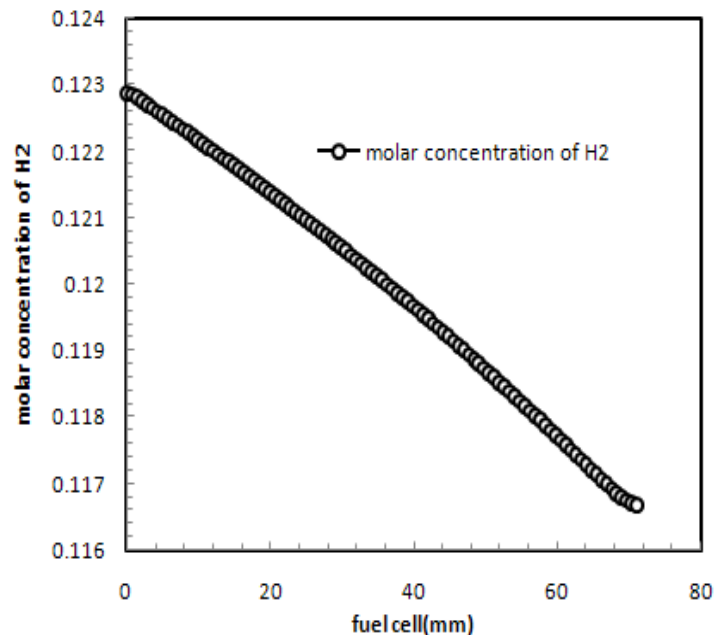
در اثر واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد مقداری آب تولید می شود در ضمن مقداری از آب موجود در سمت آند نیز به سمت کاتد می آید و در مجموع آب بیشتری در سمت کاتد جمع می شود. این مطلب در شکل ۴ کاملاً مشهود است. در ولتاژ پایینتر، به دلیل مصرف زیاد هیدروژن و اکسیژن و تولید آب بیشتر در سمت کاتد، کسر جرمی یا مولی هیدروژن و اکسیژن به ترتیب در سمت آند و کاتد کاهش می یابد. (شکل ۴ و ۵)



شکل ۴: کسر مولی آب در ولتاژهای مختلف پیل در سمت کاتد



شکل ۵: کسر مولی اکسیژن در تراکم جریان های مختلف در کاتد

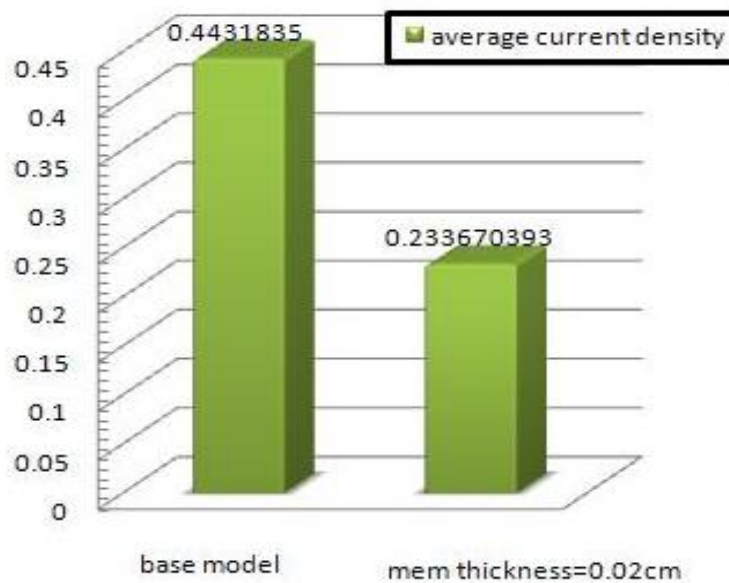


شکل ۶: غلظت مولی هیدروژن سمت‌آند در ولتاژ ۰.۶۶



۴-۱- تاثیر ضخامت غشاء

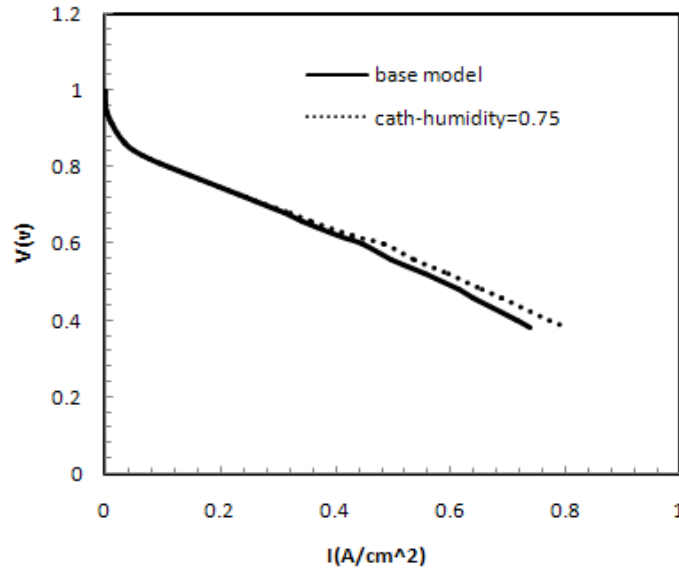
اثر ضخامت غشاء بر روی عملکرد پیل مربوط به مقاومتی است که در برابر عبور پروتن های هیدروژن در طول غشاء موجود می باشد. بنابراین افزایش ضخامت غشاء بمعنای افزایش مسیر عبوری و مقاومت غشا در برابر عبور پروتن است. پس افزایش ضخامت غشاء باعث کاهش عملکرد پیل سوختی می شود و بر عکس.



شکل ۷: تاثیر ضخامت غشاء بر میانگین جریان پیل در ولتاژهای مختلف

۴-۲- تاثیر میزان رطوبت گازهای ورودی از طرف کاتد

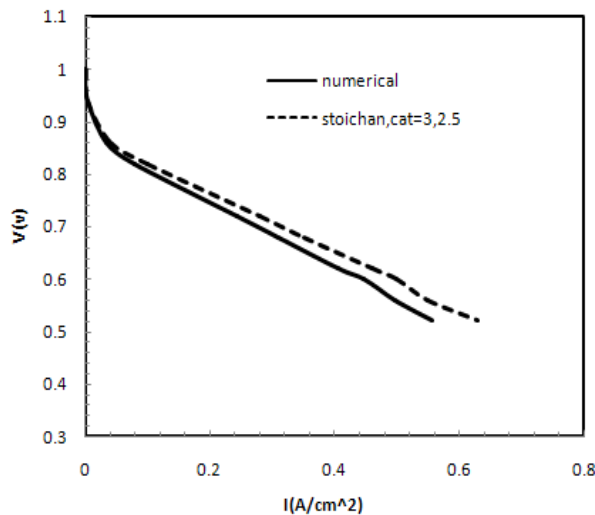
در تراکم جریان های کم مرطوب کردن گاز های ورودی طرف آند نیاز است ولی در تراکم جریان های بالا این الزام وجود ندارد. دلیل این است که در تراکم جریان های بالا آب در کاتالیست کاتد تولید می شود که بتواند غشاء را مرطوب نگه دارد. مرطوب کردن گازهای طرف کاتد بخصوص در تراکم های جریان بالا ضرورتی ندارد. در بسیاری از موارد نیز افزایش رطوبت گازهای ورودی به طرف کاتد باعث کاهش عملکرد پیل می شود و بر عکس. (شکل ۸)



شکل ۸: تاثیر رطوبت کاتد بر عملکرد پیل سوختی

۳-۴- تاثیر استوکیومتریک

استوکیومتریک در واقع نسبت مقدار سوخت ورودی به مقدار سوخت مورد نیاز در جریان یک آمپر می باشد. یکی از پارامترهای مهم در بررسی عملکرد پیل سوختی تعیین استوکیومتری سوخت و هوای ورودی است. افزایش استوکیومتری در جریان های پایین تاثیر چشمگیری ندارد، دلیل آن وجود اکسیژن کافی برای انجام واکنش می باشد ولی در جریان های بالا تاثیر بسزایی در عملکرد پیل سوختی دارد، دلیل این امر تامین هیدروژن و اکسیژن کافی برای انجام واکنش می باشد. بدین ترتیب با افزایش استوکیومتری ورودی پیل سوختی عملکرد آن در جریان های بالا بهبود می یابد و در صورتی که استوکیومتری کاهش پیدا کند عملکرد (در جریان های بالا) کم می شود. (شکل ۹)



شکل ۹: تاثیر استوکیومتریک آند و کاتد بر عملکرد پیل سوختی



۵- نتیجه گیری

افزایش ضخامت غشاء بمعنای افزایش مسیر عبوری و مقاومت غشا در برابر عبور پروتن است. پس افزایش ضخامت غشاء باعث کاهش عملکرد پیل سوختی می شود و بر عکس. در بسیاری از موارد نیز افزایش رطوبت گازهای ورودی به طرف کاتد باعث کاهش عملکرد پیل می شود و بر عکس. با افزایش استوکیومتری ورودی پیل سوختی عملکرد آن در جریان های بالا بهبود می یابد و در صورتی که استوکیومتری کاهش پیدا کند عملکرد (در جریان های بالا) کم می شود. در اثر واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد مقداری آب تولید می شود در ضمن مقداری از آب موجود در سمت آند نیز به سمت کاتد می آید و در مجموع آب بیشتری در سمت کاتد جمع می شود.

۶- فهرست علائم

P	فشار (Pa)
S	ترم چشمه
T	دما (K)
I	چگالی جریان الکتریکی (A/m^2)
V	پتانسیل تعادلی (Volt)
R	ترم منبع تراکم جریان (A/m^3)

۷- حروف یونانی

ε	ضریب تخلخل (بدون بعد)
μ	ضریب ویسکوزیته دینامیکی
ρ	چگالی مخلوط گازها (Kg/m^3)
ζ	استوکیومتری

مراجع

- [1] H. Grune, 1992 Fuel cell seminar program and abstracts, November 29-December 2, 1992 Tucson, Arizona, p.161, 1992.
- [2] G. Maggio, V. Recupero, L. Pino, "Modeling Polymer electrolyte Fuel Cells: an innovative approach", *J. Power Source* 101 (201) 275-286.
- [3] M. Wöhr, K. Holwin, W. Schurnberger, M. Fischer, W. Neubrand, G. Eigenberger, "Dynamic modeling and 3D simulation of a polymer membrane exchange fuel cell including mass transport limitation:", *Int. J. Hydrogen Energy* 23 (3) (1998) 213-218.
- [4] M.-M. Mench, C.-Y. Wang, M. Ishikawa, In situ current distribution measurements in polymer electrolyte fuel cells, *J. Electrochem. Soc.* 158 (2003) A1052.