

بررسی سه‌بعدی کارکرد پیل سوختی پلیمری لوله‌ای با فرض برهم کنش سیال- جامد- گرما

مهدی کیهان‌پور و مجید قاسمی*

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۲/۱۵ - دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۶/۱۷)

چکیده- با توجه به روند رو به اتمام منابع سوخت فسیلی و ضرورت استفاده از انرژی‌های تجدیدپذیر، می‌بایست مطالعات مناسب در راستای بررسی‌های فنی و عملکردی در خصوص این منابع صورت پذیرد. لذا در این پژوهش پیل سوختی پلیمری لوله‌ای شکل به‌عنوان یک منبع انرژی مناسب با هندسه سه بعدی به‌صورت عددی، شبیه‌سازی و بررسی شده است. برای بررسی جامع، معادلات پیوستگی، ممتوم، انرژی، تنش- کرنش و برهم کنش سیال- جامد- گرما در حالت پایا، به‌وسیله یک کد عددی المان محدود تعریف، با یکدیگر کوپل و سپس حل شده‌اند. با فرض تغییر ولتاژ پیل از ۰/۹۵ تا ۰/۴ ولت، عبور جریان تراکم پذیر سوخت و هوا در داخل کانال‌ها و محیط‌های متخلخل الکتروود و کاتالیست و همچنین حدود ۵ درجه افزایش دمای میانگین پیل، باعث تقریباً ۳۵ نانو متر جابجایی در بخش‌های مختلف می‌شود. این جابجایی‌های ناشی از برهم کنش سیال- جامد- گرما موجب ایجاد تنش‌های گرمایی و مکانیکی می‌شوند. تنش بیشینه در حدود ۳۵۰۰ کیلو نیوتن بر مترمربع در الکتروولت با توجه به محدودیت جابجایی آن (میانگین جابجایی ۱۲/۸ نانو متر) ایجاد می‌شود. سپس، رابطه تغییرات ولتاژ با چگالی جریان، تنش، سرعت جریان سوخت، جابجایی و دمای پیل سوختی نشان داده شد. همچنین نتایج نشان داد که فرض برهم کنش سیال- جامد- گرما توان پیل سوختی را تا حدود ۳ درصد کاهش می‌دهند. در پایان اثر پارامترهای مختلف از جمله شعاع کانال سوخت و هوا و رسانایی الکترونی و یونی بررسی شد. به‌عنوان مثال، در ولتاژ ۰/۴ ولت، کاهش ۲۰ درصدی شعاع کانال سوخت و هوا و همچنین افزایش ۱۰۰ درصدی رسانایی الکترونی و یونی به ترتیب باعث افزایش حدود ۲/۱۷، ۰/۰۵، ۳/۶۹ و ۴۰ درصد چگالی جریان الکتریکی می‌شود.

واژه‌های کلیدی: پیل سوختی پلیمری لوله‌ای شکل، هندسه سه بعدی، انرژی، تنش- کرنش، برهم کنش سیال- جامد- گرما.

3D Investigation of Tubular PEM Fuel Cell Performance Assuming Fluid-Solid- Heat Interaction

M. Keyhanpour and M. Ghasemi*

Department of Mechanical Engineering, Khaje Nasir Toosi University of Technology, Tehran, Iran.

Abstract: According to the declining trend of fossil fuel resources and the need to use renewable energies, appropriate research should be conducted for technical and functional studies in this regard. Therefore, in this research, a tubular PEM fuel

*: مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: Ghasemi@kntu.ac.ir

cell as a suitable energy source with three-dimensional geometry has been numerically simulated and investigated. For a comprehensive study, the equations of continuity, momentum, energy, stress-strain, and fluid-solid-heat interaction at steady state are defined, coupled together, and then solved by a finite element numerical code. Assuming the cell voltage changes from 0.95 to 0.4 volts, the passage of compressible fuel and air through the channels and porous media of the electrode and catalyst, and also about 6 degrees increase in the average cell temperature, causes approximately 35 nm displacement in different parts. These displacements, due to fluid-solid-heat interactions, cause thermal and mechanical stresses. The maximum stress is about 3500 kN/m² in the electrolyte due to its displacement limit (average displacement 12.8 nm). Then the relation of voltage variation with current density, stress, fuel flow rate, displacement and fuel cell temperature was shown. Also the results showed that the assumption of fluid-solid-heat interaction reduces the fuel cell power density by about 3%. Finally, the effect of different parameters such as fuel and air channel radius, electronic and ionic conductivity were investigated. For example, at a voltage of 0.4 volt, 20 percent reduction in the radius of air or fuel channels, or 100 percent increase in the electron or ionic conductivity, increases the electrical current density by about 2.17, 0.05, 3.69, and 40 percent, respectively.

Keywords: Tubular PEM fuel cell, Three dimensional geometry, Energy, Stress- strain, Fluid- solid- heat interaction.

فهرست علائم

عامل محرک انتقال به روش نفوذ (1/m)	d_k	میدان سرعت (m/s)	V
جرم مولی (g/mol)	M_n	چگالی (kg/m ³)	ρ
کسر مولی	x_k	لزجت دینامیکی (Pa.s)	μ
ضریب نفوذ دوتایی (m ² /s)	D_{ik}	فشار (Pa)	P
ضریب استوکیومتری واکنش	ν_i	تخلخل	ϵ
چگالی جریان الکتریکی (A/m ³)	i	نفوذ پذیری (m ²)	K
تعداد الکترون‌های واکنش	n	چشمه جرمی (kg/m ³ .s)	S_{mass}
ثابت فارادی (C/mol)	F	کسر جرمی	ω_i
رسانندگی یونی (siemens/m)	σ_m	شار جرمی (kg/m ² .s)	j_i
پتانسیل الکتریکی (V)	ϕ_m	پتانسیل اضافی (V)	η
رسانندگی الکتریکی (siemens/m)	σ_s	ضریب انتقال الکترون کاتدی	α_c
سطح ویژه (m ² /m ³)	a_v	ضریب انتقال الکترون آنودی	α_a
دما (K)	T	پتانسیل تعادلی (V)	E_{eq}
چشمه گرمایی (W/m ³)	S_{temp}	ثابت گازها (J/mol.K)	R
ظرفیت گرمایی ویژه (J/kg.K)	C_p	رسانندگی گرمایی (W/m.K)	k
تنسور تنش (Pa)	σ	بردار جابجایی (m)	L_s
مدول یانگ (Pa)	E_m	کرنش (m)	ϵ
عبارت دوم لامه (Pa)	G_s	ضریب پواسون	ν_p
عبارت اول لامه (Pa)	ψ_s	ضریب انبساط حرارتی (m/K)	α_T

۱- مقدمه

اجتناب‌ناپذیر شده است. پیل سوختی با تبدیل انرژی شیمیایی به انرژی الکتریکی یکی از منابع مورد نظر است. پیل سوختی با غشای تبادل پروتونی یا غشای پلیمری با ویژگی‌هایی همچون زمان راه‌اندازی پایین، هزینه مقرون به صرفه، سروصدای کم،

در دهه‌های اخیر با توجه به کاهش منابع سوخت‌های فسیلی و نیاز روز افزون بشر به منابع جدید انرژی، استفاده از منابع انرژی جایگزین از جمله باد، موج و خورشیدی و ...

دما‌ی عملیاتی پایین و سازگاری با محیط زیست به‌عنوان یک منبع انرژی مناسب شناخته می‌شود [۱]. در سال‌های اخیر پنج نوع پیل سوختی به‌طور خاص مورد پژوهش قرار گرفته‌اند. این پنج نوع عبارتند از غشا با الکترولیت پلیمری، اکسید جامد، آلکالین، اسید فسفریک و کربنات مذاب. پیل سوختی با غشای پلیمری که غشای آن از نفیون به‌عنوان رساننده پروتون و مواد با پایه پلاتین به‌عنوان کاتالیست ساخته می‌شود [۲]. از مهم‌ترین کاربردهای پیل سوختی پلیمری، استفاده در صنعت حمل و نقل به‌خاطر اثرات کم زیست محیطی آن است. امروزه بسیاری از صنایع خودروسازی مانند هوندا، بنز و ... محصولات را با قوای محرکه از نوع پیل سوختی روانه بازار کرده‌اند. پیل‌های سوختی پلیمری با قابلیت دستیابی به ۶۰ درصد بازدهی الکتریسته و بیش از ۸۰ درصد بازدهی گرمایی-الکتریکی در سامانه‌های تولید هم‌زمان و همچنین اثرات گلخانه‌ای کم‌تر نسبت به موتورهای احتراق داخلی متداول، از قابلیت‌های مناسبی برای جایگزینی در این حوزه برخوردار هستند. از مهم‌ترین چالش‌های استفاده از پیل سوختی پلیمری دوام و هزینه است. با این وجود، این نوع پیل سوختی در تولید برق در وسایل قابل حمل و همچنین توزیع برق ساکن نیز کاربرد دارد [۳]. در ادامه چند مورد از پژوهش‌های صورت گرفته در حوزه پیل‌های سوختی پلیمری و دستاوردهای آنها به اختصار بیان می‌شود.

شیمپالی و همکاران، در سال ۲۰۰۰، اثر توزیع دما بر کارکرد پیل سوختی پلیمری را به‌صورت عددی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد، در نظر گرفتن توزیع دما باعث کاهش عملکرد پیل سوختی می‌شود. همچنین با توجه به ایجاد بیشتر چگالی جریان در نواحی مرکزی، افزایش دمای بیشتری در میانه پیل سوختی مشاهده می‌شود [۴]. در سال ۲۰۰۳، وانگ و همکاران، اثر مقدار رطوبت جریان را بر کارکرد پیل سوختی پلیمری به‌صورت آزمایشگاهی و عددی بررسی کردند. نتایج نشان داد که تغییرات دمای مرطوب در ناحیه آند، برخلاف ناحیه کاتد، بر توان خروجی پیل سوختی اثر گذار است.

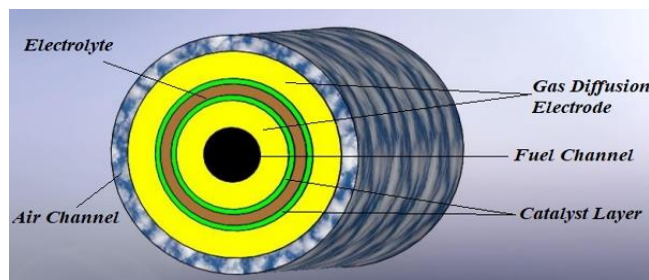
روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۱، شماره ۱، تابستان ۱۴۰۱

همچنین مشاهده شد که با وجود درصد رطوبت کافی، افزایش دما باعث افزایش چگالی جریان پیل سوختی می‌شود حال آنکه با کاهش رطوبت، بازدهی پیل سوختی کاهش می‌یابد [۵]. گروچیسیک و همکاران در سال ۲۰۰۴ بهینه‌سازی کارایی یک پیل سوختی پلیمری را به‌صورت تک‌فاز و دو بعدی مورد بررسی قرار دادند. با افزایش بهینه مقدار عبارت‌های فشار هوا و سوخت ورودی و همچنین کاهش ضخامت کاتد، نشان داده شد که عملکرد پیل سوختی می‌تواند تا ۱۰ درصد افزایش پیدا کند [۶]. ژو و همکاران، در سال ۲۰۰۵، توزیع دمای سه‌بعدی را در یک پیل سوختی پلیمری شبیه‌سازی و بررسی کردند. در این پژوهش، با فرض جریان هوای تک‌فاز، چشمه‌های گرمایی ناشی از برگشت‌ناپذیری واکنش‌های شیمیایی، افزایش آنتروپی و گرمای ژول^۱ در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که با مقدار بالای چگالی جریان و یا ضریب رسانندگی پایین الکتروند نفوذ گاز^۲، پیل سوختی به دمای بحرانی می‌رسد [۷]. صدیق و همکاران، در سال ۲۰۰۸، اثر پارامترهای گوناگون را با فرض غشای متخلخل و جایجایی مولکول‌های آب به‌همراه پروتون از آند و کاتد، بر کارکرد پیل سوختی بررسی کردند. نتایج حاکی از رابطه مستقیم مقدار غلظت اکسیژن و فشار جریان و رابطه معکوس ضخامت غشا با اندازه چگالی جریان و توان پیل سوختی بود [۸]. البغدادی، در سال ۲۰۰۹، کارکرد پیل سوختی پلیمری را با فرض عبور آب از غشا در دو هندسه صفحه‌ای و لوله‌ای با استفاده از یک کد حجم محدود، مورد بررسی و مقایسه قرار داد. نتایج نشان داد که با توجه به تلفات انتقال جرم و فعال‌سازی کم‌تر، کارکرد پیل سوختی پلیمری لوله‌ای از نوع صفحه‌ای بیشتر است [۹]. هنریکوئس و همکاران، در سال ۲۰۱۰، با فرض پدیده انتقال آب از غشا، اثر ابعاد هندسه را بر کارکرد پیل سوختی پلیمری به‌صورت آزمایشگاهی و عددی مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که با بهینه‌سازی ابعاد هندسه و تغییر سطح کانال‌ها، توان پیل سوختی تا ۲۶ درصد بهبود پیدا می‌کند [۱۰]. محمدی احمر و همکاران، در سال ۲۰۱۶، یک پیل سوختی پلیمری را با هندسه لوله‌ای و با سه

نسبت به آند بود. همچنین مشاهده شد که افزایش فشار کاری موجب ارتقای توان پیل سوختی با افزایش رسانش یونی و الکتریکی می‌شود [۱۵]. در سال ۲۰۲۰، ژانگ و همکاران کارکرد پیل سوختی پلیمری را در دو حالت شرایط نامناسب (کمبود رطوبت و یا غرق‌آبی) و عادی با استفاده از معادلات مختلف افت ولتاژ، بررسی و مقایسه کردند. در پایان، معادله اتلاف ولتاژ مناسبی جهت محاسبه توان پیل سوختی در حالت‌های مختلف معرفی شد [۱۶]. آگودلو و همکاران، در سال ۲۰۲۰، یک پیل سوختی پلیمری دما بالا را با سوخت ورودی هیدروژن خالص به‌صورت آزمایشگاهی مورد مطالعه قرار دادند. در این پژوهش، پیل سوختی با الکتروکاتود سوخت دو لایه با تخلخل‌های متفاوت در دما و فشار کاری به‌ترتیب ۱۶۰ درجه سانتی‌گراد و یک اتمسفر قرار داده شد. نتایج نشان داد که مقدار تخلخل بیشتر کارکرد پیل سوختی را بهبود می‌بخشد. در پایان مشخص شد که بیشینه چگالی توان به مقدار ۳۲۹/۲۵ وات بر مترمربع و پس از پنج ساعت کار، به‌دست می‌آید [۱۷]. پان و همکاران، در سال ۲۰۲۰، یک پیل سوختی پلیمری را با جریان تک‌فاز و به‌صورت یک‌بعدی مورد بررسی آماری قرار دادند. اتلاف ولتاژ ناشی از نشت جریان، انتقال جرم در غشا و تشکیل فرآورده‌ها در نظر گرفته شد. در پایان، یک مدل ریاضی براساس رگرسیون عددی و با دقت بالا جهت پیش‌بینی توان پیل سوختی با استفاده از دما و میدان جریان، معرفی شد [۱۸]. یونسکو در سال ۲۰۲۰، یک پیل سوختی پلیمری دما پایین را با فرض عبور جریان آب از غشای متخلخل، به‌صورت یک بعدی مورد بررسی عددی قرار داد. نتایج نشان داد، تعداد مولکول‌های جابجا شده از غشا موجب کاهش توان پیل سوختی می‌شود و افزایش دمای کاری می‌تواند با کاهش رطوبت در غشا، توان را بهبود بخشد [۱۹].

در این پژوهش، پیل سوختی پلیمری لوله مانند به‌صورت سه بعدی و پایا شبیه‌سازی شده و مورد مطالعه قرار گرفته است. برای بررسی جامع و دقیق کارکرد پیل سوختی نسبت به سایر پژوهش‌ها، تمامی بخش‌های پیل سوختی شامل الکترودها

سطح مقطع دایره‌ای، مربعی و مثلثی شبیه‌سازی و بررسی کردند. نتایج نشان داد که چگالی جریان با سطوح مقطع دایره‌ای و مربعی به‌ترتیب ۲۷/۵ و ۸ درصد از هندسه اصلی بیشتر می‌شود. همچنین مشخص شد در حالت مثلثی، ۱۴/۳۷ درصد چگالی جریان دچار افت می‌شود. دلیل این امر عدم وجود گوشه‌های تیز در دو حالت دایره‌ای و مربعی و سطح واکنش بیشتر در حالت دایره‌ای است که باعث توان خروجی بیشتر می‌شود [۱۱]. سزگین و همکاران، در سال ۲۰۱۶، اثر سرعت جریان ورودی را در یک پیل سوختی پلیمری با فرض حالت پایا و بدون عبور آب از غشا به‌صورت آزمایشگاهی و عددی مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان داد که توان بهینه و هم‌خوانی کارکرد پیل سوختی، در دو حالت آزمایشگاهی و عددی، به‌ترتیب با سرعت سوخت و هوای ورودی ۰/۱۳۳ و ۱/۳ متر بر ثانیه اتفاق می‌افتد [۱۲]. جردانی و همکاران، در سال ۲۰۱۷، با شبیه‌سازی سه‌بعدی یک پیل سوختی پلیمری، اثر هندسه و رطوبت نسبی را بر چگالی جریان بررسی کردند. با فرض جریان سوخت تراکم ناپذیر، آرام و پایا، نتایج نشان داد که چگالی جریان با ضخامت غشا رابطه عکس دارد و در دمای ۳۳۳ کلوین رطوبت نسبی بهینه می‌شود، به‌طوری که هیدروژن و اکسیژن با مقدار مناسب می‌توانند در لایه کاتالیستی^۳ نفوذ کرده و واکنش بدهند [۱۳]. چیناسا و همکاران، در سال ۲۰۱۷، اثر تغییرات دما بر یک پیل سوختی پلیمری را به‌صورت آزمایشگاهی و عددی بررسی کردند. نتایج آنها نشان داد که با افزایش دما، غلظت هیدروژن در آند در حدود ۶۴ درصد کاهش می‌یابد درحالی که غلظت اکسیژن در کاتد تنها ۶ درصد کاهش می‌یابد. همچنین مشخص شد که توان بهینه پیل سوختی در ولتاژ ۰/۷ ولت و چگالی جریان ۰/۴۲ آمپر بر سانتی‌متر مربع اتفاق می‌افتد [۱۴]. جمال آبادی و همکاران، در سال ۲۰۱۹، اثر پارامترهای گوناگون از جمله تخلخل الکترودها، ضریب رسانایی الکتریکی و یونی و فشار جریان را بر کارکرد پیل سوختی پلیمری دما بالا با فرض هندسه سه‌بعدی و جریان‌های تک‌فاز بررسی کردند. نتایج حاکی از افت فشار بیشتر در کاتد



شکل ۱- هندسه پیل سوختی لوله‌ای

جدول ۱- ابعاد هندسه پیل سوختی [۲۰]

اندازه (میلی متر)	پارامتر
۰/۵	شعاع کانال جریان سوخت
۰/۲۶	ضخامت الکتروود نفوذ گاز
۰/۰۲۸۷	ضخامت لایه کاتالیستی
۰/۲۳	ضخامت الکتروولیت
۱	ضخامت کانال جریان هوا
۱۰	طول پیل سوختی

است. به طوری که جریان ورودی سوخت از مرکز (کانال آندی^۴) و جریان هوا (کانال کاتدی^۵) از اطراف وارد می‌شوند. سپس گازها با عبور از الکتروودها، وارد لایه‌های کاتالیستی می‌شوند. در کاتالیست آند، هیدروژن وارد واکنش کاهش می‌شود و پروتون‌های حاصل از راه الکتروولیت وارد کاتالیست کاتدی می‌شوند. در کاتالیست کاتدی، واکنش اکسیداسیون هیدروژن رخ می‌دهد. آب به‌عنوان فرآورده واکنش از راه کانال هوا از پیل سوختی خارج می‌شود. هندسه مذکور و قسمت‌های گوناگون آن در شکل (۱) نمایش داده شده است. در جدول (۱)، اندازه قسمت‌های مختلف پیل سوختی آورده شده است.

۳- معادلات

برای حل و بررسی رفتار جریان‌های سوخت و هوا در نواحی گوناگون پیل سوختی از معادلات بقای جرم و مومتم استفاده می‌شود. در ناحیه کانال‌های سوخت و هوا، جریان به‌صورت پایا و تراکم پذیر در نظر گرفته شده است. معادلات پیوستگی و

و کاتالیست‌های متخلخل، غشا و کانال‌ها با فرض برهم‌کنش با جریان‌های تراکم پذیر سوخت و هوا شبیه‌سازی شده است. برای توصیف حقیقی کارکرد پیل، مشخصه‌های سیالاتی (لزجت، چگالی و ...) و ترموفیزیکی (رسانندگی گرمایی هوا، نفوذپذیری و ...) جریان‌های سوخت و هوا، انتقال جرم به بخش‌های متخلخل آند و کاتد، چشمه‌های گرمایی مؤثر (واکنش‌های الکتروشیمیایی، برگشت‌ناپذیری واکنش‌ها اتلاف‌های مکانیکی، اهمی و ...)، تنش‌ها و کرنش‌های گرمایی و مکانیکی ناشی از تغییرات دما و برهم‌کنش جریان و بخش‌های گوناگون پیل سوختی در نظر گرفته شده‌اند. در پایان نیز به‌صورت موردی اثر توزیع دما، تغییرات شعاع کانال جریان‌ها و ضرایب رسانایی یونی و الکترونی بر کارکرد پیل سوختی مورد بررسی قرار گرفته است.

۲- هندسه

هندسه پیل سوختی، به‌طور کامل سه‌بعدی شبیه‌سازی شده

ممنوم برای این نواحی به صورت زیر است [۱۵]:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = S_{\text{mass}} \quad (1)$$

$$\rho((\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V}) = \nabla \cdot [-P\mathbf{I} + \mu(\nabla \nabla + (\nabla \mathbf{V})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{V})\mathbf{I}] \quad (2)$$

در معادله (۱)، S_{mass} چشمه جرمی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی است. این عبارت در لایه‌های کاتالیستی آندی و کاتدی کاربرد دارد. در معادله (۲) نیز، عبارت‌های V ، μ ، P و ρ به ترتیب میدان سرعت، لزجت دینامیکی، فشار و چگالی جریان هستند. برای بررسی جریان در محیط‌های متخلخل الکتروود و کاتالیست با صرف نظر کردن از نیروی وزن، از معادله برینکمن^۶ استفاده می‌کنیم. در معادله زیر ε و K به ترتیب ضریب تخلخل و نفوذ پذیری محیط هستند [۱۵].

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \left((\mathbf{V} \cdot \nabla) \frac{\mathbf{V}}{\varepsilon} \right) = \nabla \cdot \left[-P\mathbf{I} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\mu(\nabla \nabla + (\nabla \mathbf{V})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{V})\mathbf{I} \right) \right] - \left(K^{-1}\mu + \frac{S_{\text{mass}}}{\varepsilon^2} \right) \mathbf{V} \quad (3)$$

توزیع و انتقال جرم گاز هیدروژن و بخار آب به‌عنوان جریان ورودی سوخت و گازهای اکسیژن، نیتروژن و بخار آب به‌عنوان جریان ورودی هوا با استفاده از معادله ماکسول-استفان بررسی می‌شود. در این معادله انتقال به دو روش نفوذ و جابجایی در نظر گرفته شده است. معادلات بقای جرم، شار جرمی و ضریب نفوذ دوتایی به صورت زیر هستند [۱۵].

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_i + \rho(\mathbf{V} \cdot \nabla)\omega_i = R_i \quad (4)$$

$$\mathbf{j}_i = -\rho\omega_i \sum_k D_{ik, \text{eff}} \mathbf{d}_k \quad (5)$$

$$\mathbf{d}_k = \nabla x_k + \frac{1}{P} [(x_k - \omega_k) \nabla P], \quad x_k = \frac{\omega_k}{M_k} M_n \quad (6)$$

$$M_n = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (7)$$

$$D_{ik, \text{eff}} = D_{ik} \times \varepsilon^{\frac{2}{3}} \quad (8)$$

در معادله (۴) که بقای جرم است، ω_i ، R_i و \mathbf{j}_i به ترتیب کسر

جرمی، چشمه جرمی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی و شار جرمی ذره‌ها از راه نفوذ هستند. در معادلات (۵) و (۶)، d_k ، M_n و x_k به ترتیب عامل محرک انتقال به روش نفوذ، جرم مولی و کسر مولی هستند. در معادله (۸)، $D_{ik, \text{eff}}$ و D_{ik} به ترتیب ضریب نفوذ مؤثر دوتایی^۷ در محیط متخلخل و ضریب نفوذ دوتایی گونه‌ها (ذره‌ها) هستند. در معادلات (۱)، (۳) و (۴) S_{mass} نیز به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$S_{\text{mass}} = \sum_i M_i R_i \quad (9)$$

$$R_i = -\frac{v_i i}{nF} \quad (10)$$

در معادله (۱۰)، v_i ، i ، F و n به ترتیب ضریب استوکیومتری واکنش، چگالی جریان الکتریکی، ثابت فارادی و تعداد الکترون‌های شرکت کننده در واکنش هستند. علامت منفی نشان‌دهنده مصرف اکسیژن و هیدروژن و علامت مثبت معرف تولید آب است.

۳-۱- معادلات الکتروشیمیایی

پروتون‌ها از راه غشا و الکترون‌ها از طریق الکتروودها حرکت می‌کنند و باعث جریان‌های یونی و الکتریکی می‌شوند. معادلات بقای شارژ برای بررسی جابجایی پروتون‌ها و الکترون‌ها کاربرد دارند. این معادلات از قوانین اهم به دست می‌آیند.

$$\nabla \cdot (\sigma_m \nabla \phi_m) = S_{\text{pot}} \quad (11)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_s \nabla \phi_s) = -S_{\text{pot}} \quad (12)$$

در روابط (۱۱) و (۱۲)، σ_m و ϕ_m به ترتیب رسانندگی یونی و پتانسیل الکتریکی در غشای پلیمری هستند. σ_s و ϕ_s نیز معرف رسانندگی الکتریکی و پتانسیل الکتریکی در الکتروودها و کاتالیست‌ها هستند در این پژوهش σ_m و σ_s به ترتیب ۹/۸۲۵ و ۲۲۲ زیمنس بر متر است [۱۵]. S_{pot} چشمه پتانسیل الکتریکی است که در لایه کاتالیست کاتدی i و در لایه کاتالیست آندی $-i$ است. پتانسیل اضافی^۸ در آند ($\eta_{\text{act}, a}$) و کاتد ($\eta_{\text{act}, c}$) به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\eta_{\text{act}, a} = \phi_s - \phi_m - E_{\text{eq}, H_2} \quad (13)$$

$$\mathbf{V}_s(\mathbf{r}^*) = \mathbf{V}_f(\mathbf{r}^*), \quad (\mathbf{r}^* \in I_{fs}) \quad (20)$$

$$\mathbf{F}_s(\mathbf{r}^*) = \mathbf{F}_f(\mathbf{r}^*), \quad (\mathbf{r}^* \in I_{fs}) \quad (21)$$

در روابط فوق، \mathbf{V}_s سرعت جابجایی دیواره الکتروودها و \mathbf{F}_s نیرویی است که از سوی دیواره به سیال وارد می‌شود. I_{fs} سطح تماس سیال و جامد است. معادله جابجایی-تنش به صورت زیر است [23-25].

$$\rho_E \frac{\partial^2 \mathbf{L}_s}{\partial t^2} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (22)$$

در معادله فوق، ρ_E چگالی قسمت‌های مختلف (الکتروودها، کاتالیست‌ها و الکتروولیت)، \mathbf{L}_s بردار جابجایی و $\boldsymbol{\sigma}$ تنسور تنش آن است. اگر تنسور تنش ایزوتروپیک فرض شود، قانون هوک به صورت رابطه زیر در می‌آید.

$$\boldsymbol{\sigma}^* = 2G_s \boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (23)$$

در رابطه (23)، $\boldsymbol{\sigma}^*$ و $\boldsymbol{\varepsilon}^*$ ، به ترتیب تنسور تنش و کرنش انحراف هستند که به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

$$\boldsymbol{\sigma}^* = \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{3} \text{tra}(\boldsymbol{\sigma}) \mathbf{I} \quad (24)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^* = \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{1}{3} \text{tra}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} \quad (25)$$

در روابط (24) و (25)، \mathbf{I} ماتریس واحد و $\frac{1}{3} \text{tra}(\boldsymbol{\sigma})$ میانگین تنسور تنش در نقطه و $\text{tra}(\boldsymbol{\varepsilon})$ تغییرات کرنش بر واحد حجم است. با جایگذاری روابط (24) و (25) در رابطه (23) رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\boldsymbol{\sigma} = 2G_s \boldsymbol{\varepsilon} - \psi_S \text{tra}(\boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} \quad (26)$$

G_s و ψ_S عبارت‌های اول و دوم لانه^{۱۴} هستند که به صورت زیر محاسبه می‌شوند [26 و 27].

$$G_s = \frac{E_m}{2(1+\nu_p)} \quad (27)$$

$$\psi_S = \frac{2G_s}{2-\nu_p} \quad (28)$$

از رابطه (26)، تنسور تنش و از رابطه (22) جابجایی قسمت‌های مختلف پیل سوختی محاسبه می‌شود. در روابط فوق، E_m و ν_p به ترتیب مدول یانگ^{۱۵} و نسبت پواسون^{۱۶} هستند. در ادامه برای محاسبه کرنش حرارتی از رابطه زیر استفاده شده است.

$$\eta_{act, c} = \phi_s - \phi_m - E_{eq, O_2} \quad (14)$$

در روابط (13) و (14)، E_{eq} پتانسیل تعادلی است که با رابطه نرنست^۹ مشخص می‌شود. در ادامه برای تعیین رابطه بین جریان و پتانسیل اضافی از رابطه بوتلر-ولمر^{۱۰} استفاده شده است.

$$i_{loc} = i_s \left(\exp\left(\frac{\alpha_a F \eta}{RT}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_c F \eta}{RT}\right) \right) \quad (15)$$

$$i = a_V i_{loc} \quad (16)$$

در رابطه (15)، عبارت‌های α_c ، α_a ، i_s ، i_{loc} و a_V به ترتیب ضریب انتقال^{۱۱} کاتدی، آندی و چگالی جریان تبادل، چگالی جریان محلی و سطح ویژه هستند.

۳-۲- معادلات انرژی

برای بررسی توزیع دما در پیل سوختی، اثر چشمه‌های گرمایی الکتروشیمیایی در نظر گرفته شده است. واکنش‌های کاتالیستی، تولید و انتقال جریان باعث ایجاد گرما در لایه‌های کاتالیستی و الکتروولیت می‌شوند. معادله انرژی به صورت زیر است [14].

$$\nabla \cdot \left((\rho C_p)_{eff} \nabla T \right) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_{temp} \quad (17)$$

در رابطه (17)، S_{temp} ، k_{eff} ، $(\rho C_p)_{eff}$ به ترتیب چشمه گرمایی، رسانندگی گرمایی مؤثر و ظرفیت گرمایی ویژه مؤثر هستند. عبارت‌های مذکور با روابط زیر محاسبه می‌شوند [9].

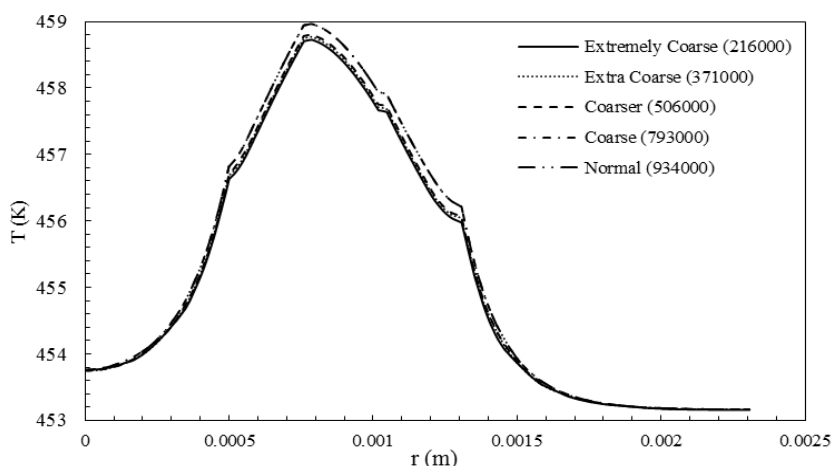
$$(\rho C_p)_{eff} = \varepsilon \rho_f C_p^{fluid} + (1-\varepsilon) \rho_s C_p^{solid} \quad (18)$$

$$k_{eff} = \varepsilon \rho_f k^{fluid} + (1-\varepsilon) \rho_s k^{solid} \quad (19)$$

۳-۳- معادلات تنش - کرنش

الکتروودها و کاتالیست‌ها، با توجه به نوع پیل سوختی، ساختار متفاوتی دارند. در این پژوهش، به صورت یک ماده الاستیک خطی^{۱۲} تعریف می‌شوند. به منظور بررسی اثر متقابل جریان‌های سوخت و هوا با سطح الکتروودها از روش برهم کنش دو طرفه سیال-جامد^{۱۳} استفاده شده است. در این روش در سطح تماس سیال و جامد شرط‌های مرزی زیر برقرار است [21 و 22].

روش‌های عددی در مهندسی، سال ۴۱، شماره ۱، تابستان ۱۴۰۱



شکل ۲- استقلال از شبکه بندی محاسباتی

۴-۱- اعتبار سنجی

برای اعتبار سنجی حل عددی، پژوهش آزمایشگاهی یونگ و همکارانش شبیه سازی شد. نتایج نمودار ولتاژ-آمپر در شکل (۳) با یکدیگر مقایسه شد. همان طور که در شکل واضح است، نتایج دارای اختلاف اندکی هستند [۲۸].

در ادامه نتایج پژوهش با کار عددی جمال آبادی و همکاران در فشار مرجع ۱ اتمسفر انجام شد [۱۵]. همان طور که در شکل (۴) مشخص است نتایج دو شبیه سازی دارای تطابق خوبی است

۴-۲- شرایط مرزی

برای حل معادلات مذکور در سه بعد و محاسبه متغیرهای مجهول شامل میدان سرعت و فشار جریان های سوخت و هوا، توزیع دما، غلظت جزها، جابجایی قسمت های مختلف و برهم کنش آنها بر یکدیگر، تعریف شرایط مرزی مشخص ضرورت دارد. از این رو برای معادله انرژی، شرط مرزی دمای ۱۸۰ درجه سانتی گراد در ورودی کانال ها قرار داده شده است. برای معادله الکتروشیمیایی، شرط اولیه پتانسیل الکتریکی الکترولیت و الکترودها صفر و در کاتد برابر ۰/۹۵ ولت مشخص شده است. برای معادله تنش- کرنش، تمامی مواد متخلخل به صورت الاستیک خطی و با ضریب پواسون و مدول یانگ مربوطه

$$\varepsilon_{\text{thermal}} = \alpha_T(T - T_{\text{ref}}) \quad (29)$$

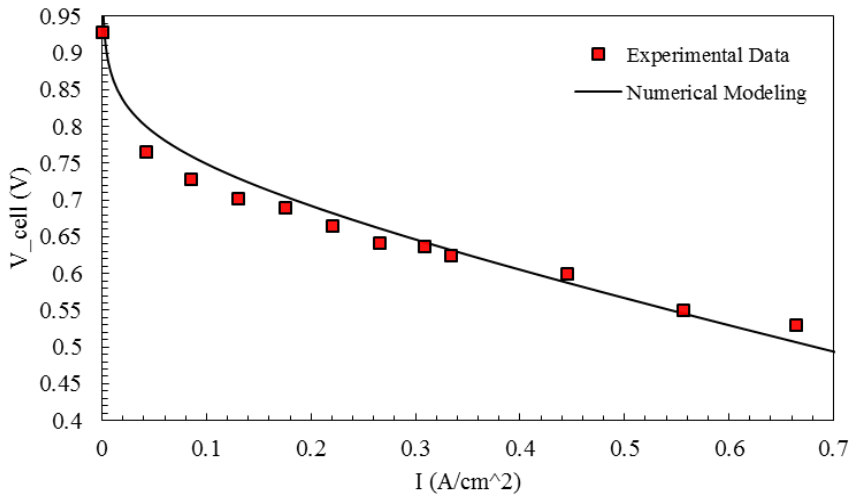
در رابطه (۲۹)، α_T ضریب انبساط حرارتی^{۱۷} است [۲۳].

۴- حل عددی و استقلال از شبکه محاسباتی

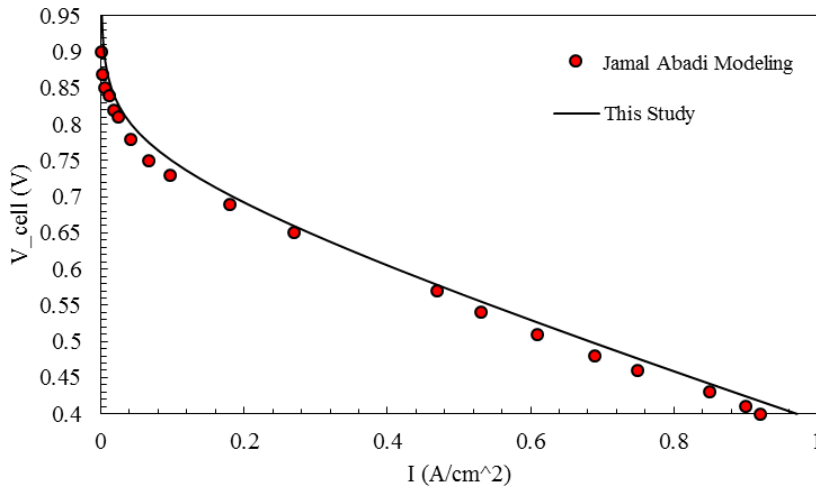
در این پژوهش معادلات الکتروشیمیایی، پیوستگی، ممتوم، انرژی، تنش- کرنش- جابجایی و برهم کنش سیال- جامد- دما به صورت یک برنامه عددی المان محدود در نرم افزار کامسول تعریف، کوپل و حل شده اند. همچنین هندسه سه بعدی مسأله با نرم افزار سالیید ورک طراحی شده است.

برای بررسی دقت محاسبات، دمای شعاعی پیل سوختی در ولتاژ ۰/۴ ولت با پنج حالت شبکه بندی محاسباتی در نرم افزار کامسول محاسبه و مقایسه شده است. نتایج در نمودار شکل (۲) نشان داده شده است.

همان طور که در شکل (۲) مشاهده می شود، نتایج دما در حالت های مختلف مشرزی نرم افزار از حالت کم ترین (۲۱۶۰۰۰) تا بیش ترین (۹۳۴۰۰۰) تعداد المان محاسباتی دارای اختلاف اندکی هستند که در این پژوهش با توجه به انطباق نمودار دما در دو حالت پایانی، تعداد ۹۳۴۰۰۰ المان محاسباتی با توزیع بیشتر در ناحیه کاتالیست ها در نظر گرفته شد که زمان تقریبی محاسبات با این تعداد المان و معیار هم گرایی ۰/۰۰۰۱، در هر ولتاژ به حدوداً هشت ساعت رسید.



شکل ۳- اعتبار سنجی آزمایشگاهی



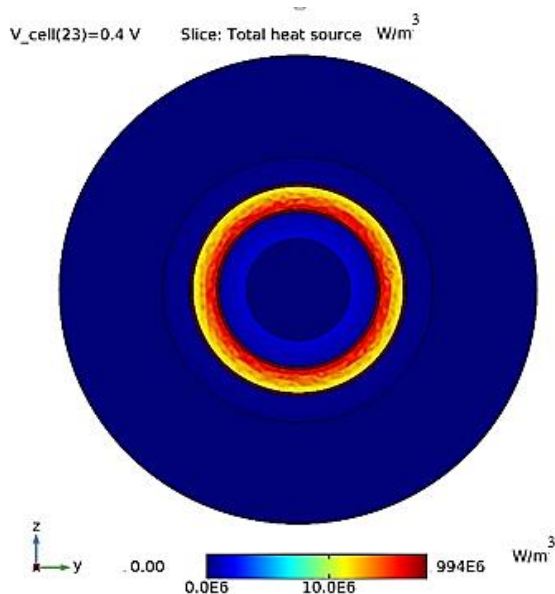
شکل ۴- اعتبار سنجی عددی

$$U_{in, Anode} = \frac{\xi_a I A_{MEA} R T_{in}}{\gamma F x_{H_2} P_a A_{ch}} \quad (30)$$

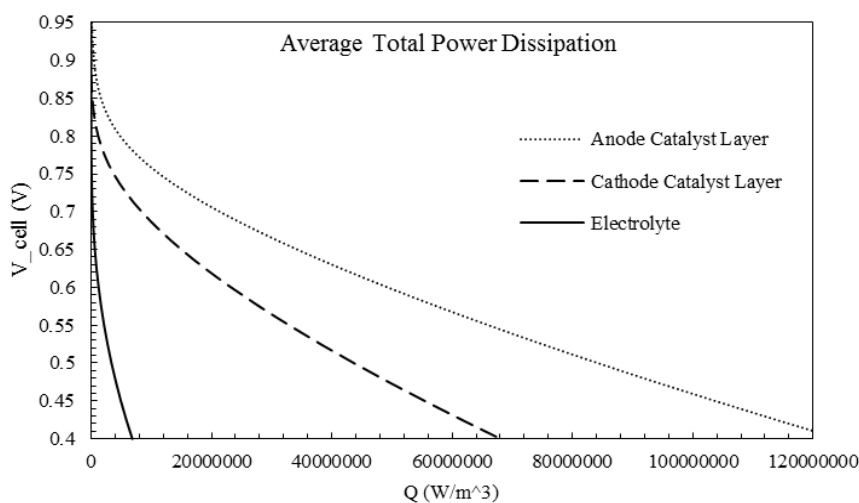
$$U_{in, cathode} = \frac{\xi_c I A_{MEA} R T_{in}}{\gamma F x_{O_2} P_c A_{ch}} \quad (31)$$

در معادلات ۳۰ و ۳۱، ξ_a و ξ_c ضرایب استوکیومتری H_2 و O_2 اند و کاتد هستند که ۲ در نظر گرفته شده‌اند. عبارت‌های P_a و P_c به ترتیب فشار ورودی کاتد و آنود هستند که برابر با فشار مرجع یعنی معادل ۱ اتمسفر در نظر گرفته شده‌اند. همچنین A_{ch} و A_{MEA} ، سطح مقطع کانال‌های جریان‌های ورودی گاز و سطح

تعریف شده‌اند. همچنین برای مرز بین سیال و الکترودها شرط مرزی برهم کنش سیال- جامد قرار داده شد که در معادلات به آن اشاره شد. برای مرزهای الکترولیت، کاتالیست‌ها و الکترودها شرط امکان جابجایی مشخص شده است. برای حل معادله انتقال جرم، با فرض دمای مرطوب ۲۸ درجه سانتی‌گراد و رطوبت نسبی ۱۰۰ درصد، غلظت بخار آب، گاز هیدروژن و اکسیژن مشخص شد. برای حل معادله پیوستگی و ممتوم، شرط مرزی ورودی به صورت سرعت توسعه یافته با رابطه زیر تعیین شد [۲۰].



شکل ۵- تغییرات چشمه‌های گرمایی



شکل ۶- میانگین اتلاف گرمایی در بخش‌های گوناگون

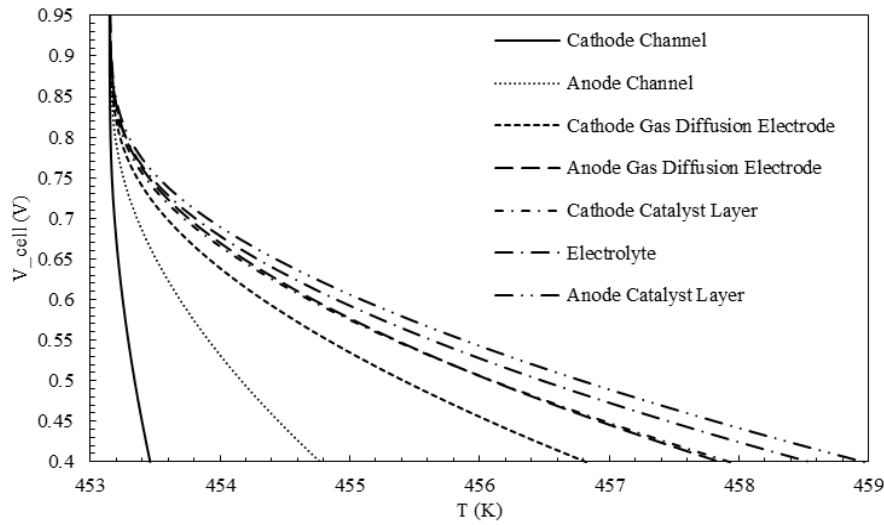
چشمه‌های گرمایی پیل سوختی در میانه آن و در راستای قطر نشان داده شده است.

در شکل (۵) مشخص است که بیش‌ترین چشمه‌های گرمایی در ناحیه کاتالیست‌ها و حاصل از واکنش‌های الکتروشیمیایی است. تغییرات دیگر ناشی از جابجایی پروتون‌ها در الکترولیت و الکترون‌ها در الکترودها است که با توجه به مقاومت اهمی آنها ایجاد می‌شود. در شکل (۶) چشمه‌های

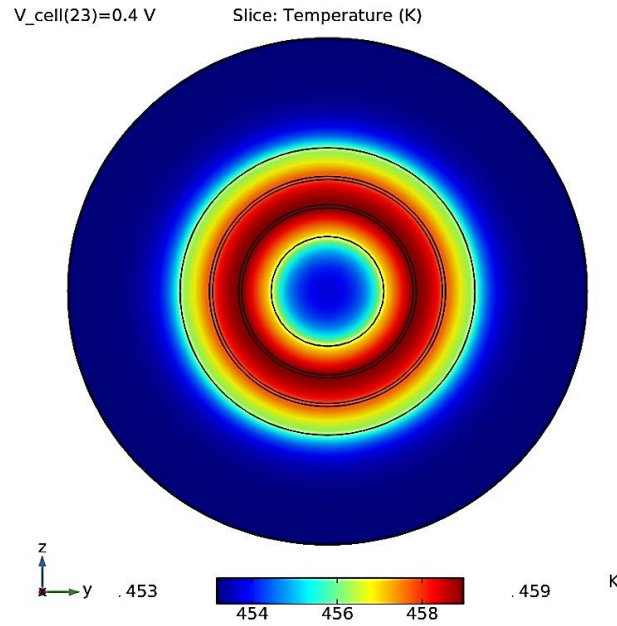
هندسی مونتاژی غشا و الکترودها^{۱۹} است. برای شرط مرزی خروجی معادله ممتوم فشار ثابت و برای سایر متغیرها، گرادیان صفر در جهت جریان (شرط مرزی نیومن) تعیین شده است [۹].

۳-۴- نتایج

در آغاز در دمای کاری ۱۸۰ درجه سانتی‌گراد و ولتاژ ۰/۴ ولت پیل سوختی پلیمری بررسی شده است. در شکل (۵) تغییرات



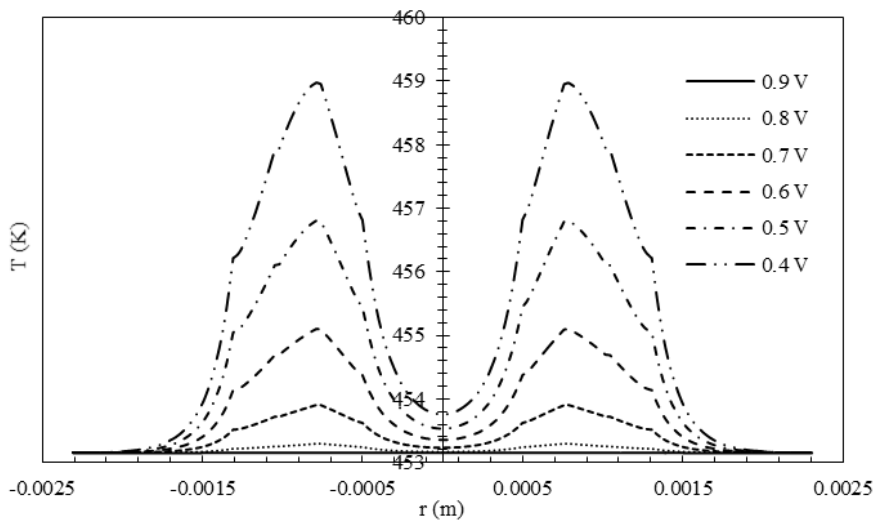
شکل ۷- تغییرات دمای میانگین بخش‌های گوناگون پیل سوختی با کاهش ولتاژ



شکل ۸- کانتور تغییرات دما در میانه پیل سوختی در ولتاژ ۰/۴ ولت

چشمه‌های گرمایی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی و جریان‌های یونی و الکترونی که در شکل (۴) نشان داده شد، دلیل آن هستند. همچنین مشاهده می‌شود که فاصله بیشتر کانال ورودی هوا و دبی بیشتر آن موجب شده است که تغییرات دمایی آن نسبت به کانال ورودی سوخت کمتر باشد. در شکل‌های (۸) و (۹) تغییرات دما در میانه پیل سوختی در

حرارتی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی، مقاومت اهمی و جریان گازها نشان داده شده است. در شکل (۷) تغییرات میانگین دمای بخش‌های گوناگون پیل سوختی با کاهش ولتاژ نشان داده شده است. با توجه به شکل (۷) در می‌یابیم که بیشترین افزایش دما در ناحیه کاتالیست آنودی، کاتدی و الکترولیت رخ می‌دهد.



شکل ۹- تغییرات شعاعی دما در میانه پیل سوختی در ولتاژهای گوناگون

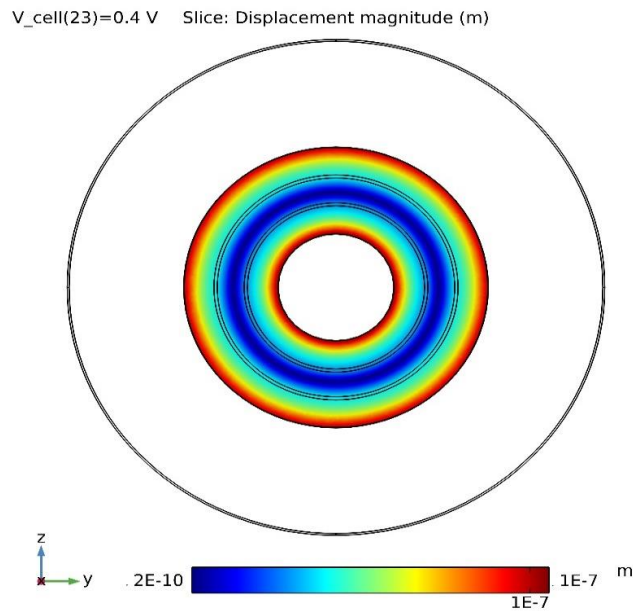
متخلخل الکتروود و کاتالیست و تغییرات دمایی است. همچنین می‌توان دریافت که کم‌ترین تغییرات در الکتروولیت اتفاق می‌افتد که دلیل این اتفاق ایجاد فشار از درون و بیرون پیل سوختی است که مانع از حرکت آن می‌شود. این فشارهای بیرونی موجب افزایش قابل ملاحظه تنش در این ناحیه می‌شود. در شکل (۱۱) تنش فون میزس در پیل سوختی نشان داده شده است.

در شکل (۱۱)، توزیع تنش نشان می‌دهد که جابجایی و تغییر اندازه الکتروودها و کاتالیست‌ها، ناشی از جریان سیال و افزایش دما، بیشترین فشار را به الکتروولیت وارد می‌آورد. بنابر شکل (۱۱)، تنش در این ناحیه قابل توجه‌تر از سایر نقاط است به نحوی که احتمال آسیب‌های مکانیکی را به‌خصوص در حضور عواملی هم‌چون ترک و ... بالا می‌برد. در شکل (۱۲)، میانگین تغییرات حجم قسمت‌های مختلف پیل سوختی نشان داده شده است.

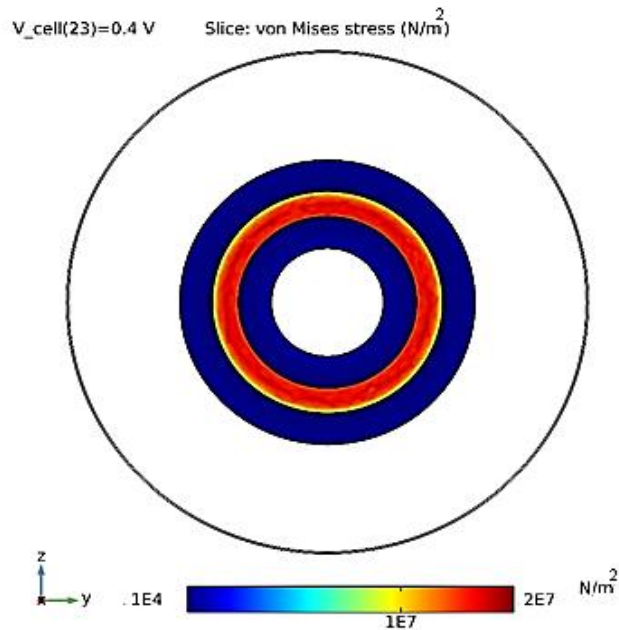
در شکل (۱۲) روند تغییرات حجمی قسمت‌های مختلف پیل سوختی با کاهش پتانسیل نشان داده شده است. با کاهش ولتاژ، تغییرات حجمی بخش‌های گوناگون افزایش می‌یابد. این افزایش در الکتروودها نمود بیشتری دارد و همچنین می‌توان دریافت که الکتروود کاتدی بیشترین و الکتروولیت کمترین تغییر

راستای شعاع در ولتاژ ۰/۴ ولت نشان داده شده است. از شکل (۸) می‌توان فهمید که بیشترین افزایش دما در ناحیه کاتالیست‌ها رخ می‌دهد. در نتیجه تنش‌های حرارتی و مکانیکی حاصل از تغییر اندازه باید در این نواحی باشد. در شکل (۹) تغییرات دمایی به‌صورت نمودار نشان می‌دهد که اثر چشمه‌های گرمایی بر افزایش دمای جریان سوخت ورودی بیش از جریان هوای ورودی است. همچنین مشخص است که بیشینه دما در نزدیکی کاتالیست آندی رخ می‌دهد. این موضوع بخاطر آن است که گرمای تولیدی و شدت واکنش‌ها در این ناحیه قابل توجه‌تر از کاتالیست کاتدی است. در ادامه جابجایی‌های بخش‌های گوناگون پیل سوختی ناشی از اثر جریان‌های سوخت، هوا و تغییرات دما در ولتاژ ۰/۴ ولت نشان داده شده است.

با توجه به شکل (۱۰)، مشخص می‌شود که بیشترین جابجایی در مرز مشترک گاز- جامد رخ می‌دهد. این موضوع نشان می‌دهد که جابجایی ناشی از نیروی سیال بر سطح پیل سوختی بیش از سایر عوامل همچون تغییرات دما است. بعد از سطح بیرونی الکتروودها مشاهده می‌شود که قسمت‌های میانی و سطح کاتالیست‌ها نیز دچار تغییر اندازه می‌شوند. دلیل این امر، نیروی ناشی از سیال بر الکتروود، جریان سیال درون محیط



شکل ۱۰- جابجایی بخش‌های گوناگون پیل سوختی

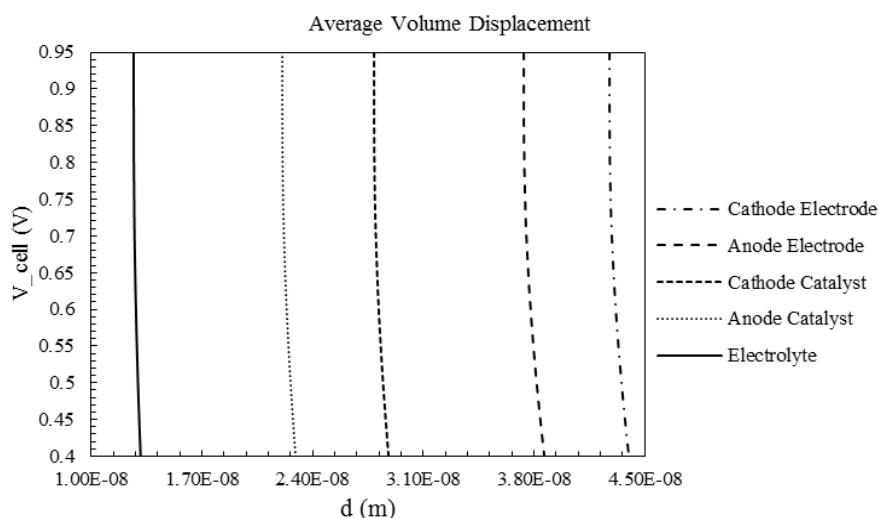


شکل ۱۱- توزیع تنش فون میزس

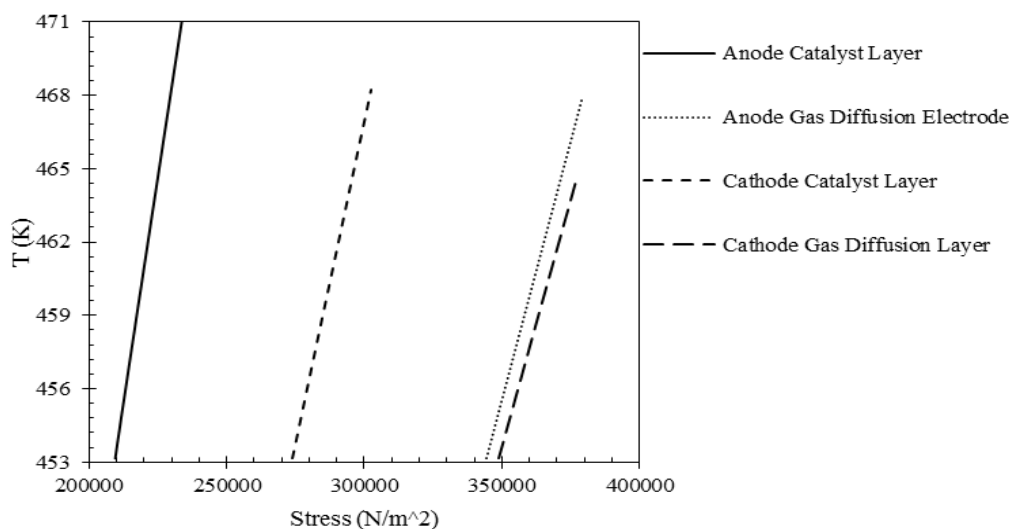
مشخص شده است. در شکل (۱۳) مشاهده می‌شود که افزایش دما و افزایش تنش به‌طور خطی افزایش می‌یابند همچنین مشخص است که بیش‌ترین تغییرات دمایی در لایه کاتالیستی آند و بیش‌ترین تنش در الکتروود نفوذ گاز کاتدی رخ می‌دهد.

حجم را دارند. در شکل (۱۳)، رابطه بین تنش و دما در پیل سوختی نشان داده شده است.

در شکل (۱۳)، از پتانسیل ۰/۹۵ تا ۰/۴ ولت، تغییرات میانگین دما تنش فون میزس بخش‌های گوناگون پیل سوختی



شکل ۱۲- میانگین تغییرات حجم بخش‌های گوناگون پیل سوختی

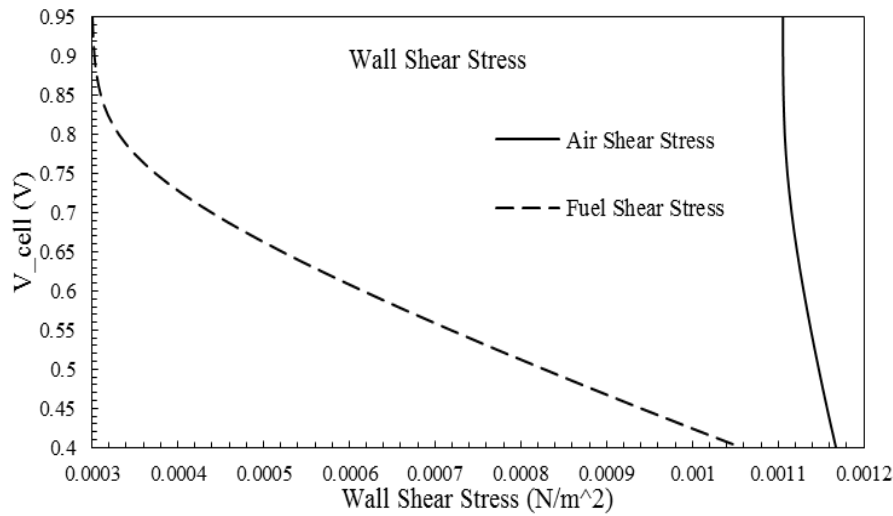


شکل ۱۳- ارتباط بین دما و تنش

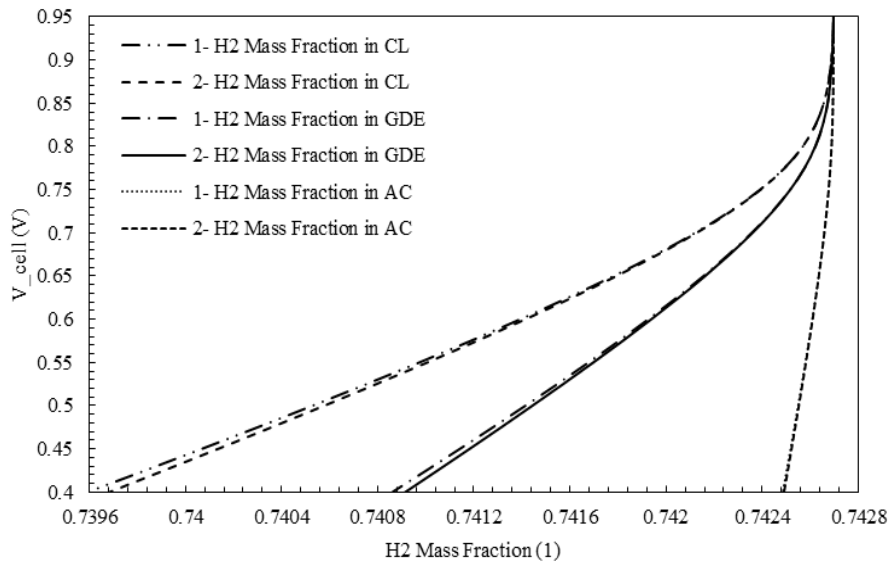
و لزجت دینامیکی به‌خاطر افزایش دما، افزایش سرعت و افزایش نفوذ گاز است. می‌توان دریافت که سطح دیواره الکترود آندی با کاهش ولتاژ بیشتر در معرض تنش و آسیب قرار می‌گیرد و در مورد الکترود کاتدی اثر کاهش ولتاژ کم است ولی مقدار تنش وارده از سوی جریان هوا نسبت به سوخت بیشتر است. در ادامه عملکرد پیل سوختی در دو حالت مقایسه شده است. در حالت نخست، پیل سوختی به‌صورت هم‌دما و بدون فرض برهم‌کنش‌های مکانیکی و گرمایی

می‌توان نتیجه گرفت که عواملی هم‌چون جریان سیال در بیرون و درون الکترود کاتدی و فشارهای بیرونی نقش مؤثرتری در ایجاد تنش بیشتر در این ناحیه را دارند. در ادامه تنش برشی دیواره ناشی از جریان سیال بر سطح بیرونی الکترودها محاسبه شده است که در شکل (۱۴) نمودار آن مشخص است.

کاهش پتانسیل باعث افزایش تنش برشی در سطح مشترک بین الکترودها و سیال می‌شود. این ارتباط معکوس در جریان سوخت ورودی بیشتر است. دلیل این اتفاق افزایش نرخ برش



شکل ۱۴- تغییرات تنش برشی دیواره بر سطح الکترودها



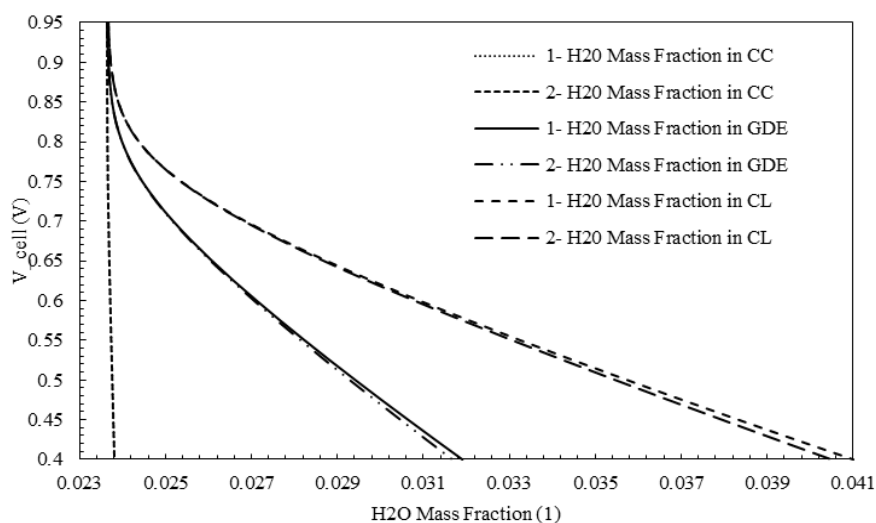
شکل ۱۵- تغییرات کسر جرمی سوخت در کانال آندی، الکترود نفوذ گاز و لایه کاتالیستی در دو حالت ۱: عدم برهم کنش سیال-

جامد- گرما و ۲: برهم کنش سیال- جامد- گرما

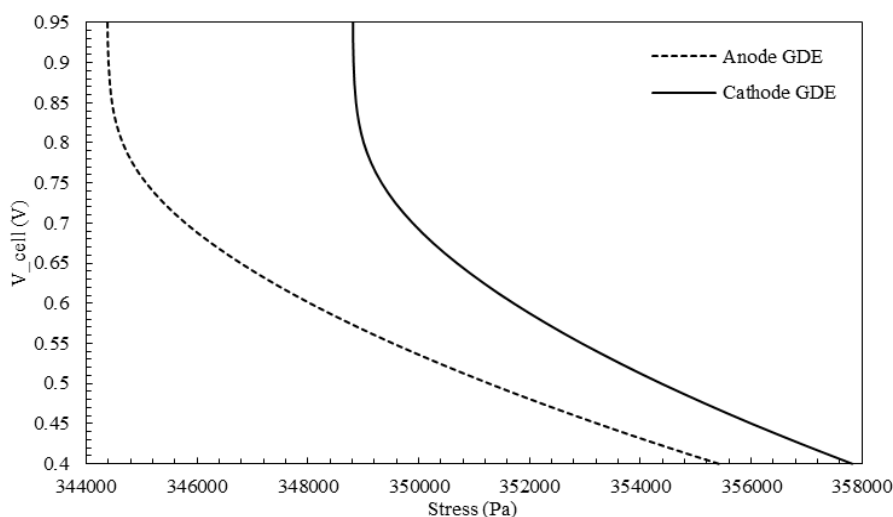
اثرگذار است. در شکل (۱۵)، در حالت ۲، مقدار سوخت در لایه‌های کاتالیستی و الکترودها از حالت ۱ کم تر است. ولی در کانال ورودی سوخت این تفاوت قابل ملاحظه نیست. با نفوذ کم تر سوخت و در پی آن نرخ کمتر انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی، آب کمتری نیز تشکیل خواهد شد. نکته برجسته در مقایسه دو حالت این است که با فرض جریان غیر هم‌دم، نفوذ سوخت به کاتالیست باید افزایش یابد ولی

شبه‌سازی شده و در حالت دوم، تمامی برهم کنش‌های سیال- جامد- گرما در نظر گرفته شده است. در شکل‌های (۱۵) و (۱۶) کسر جرمی سوخت و هوا در بخش‌های گوناگون پیل سوختی در دو حالت نمایش داده شده است.

از شکل‌های (۱۵) و (۱۶) می‌توان دریافت که فرض برهم کنش سیال- جامد- گرما، بر مقدار حضور هیدروژن به‌عنوان سوخت و آب به‌عنوان فرآورده در بخش‌های گوناگون



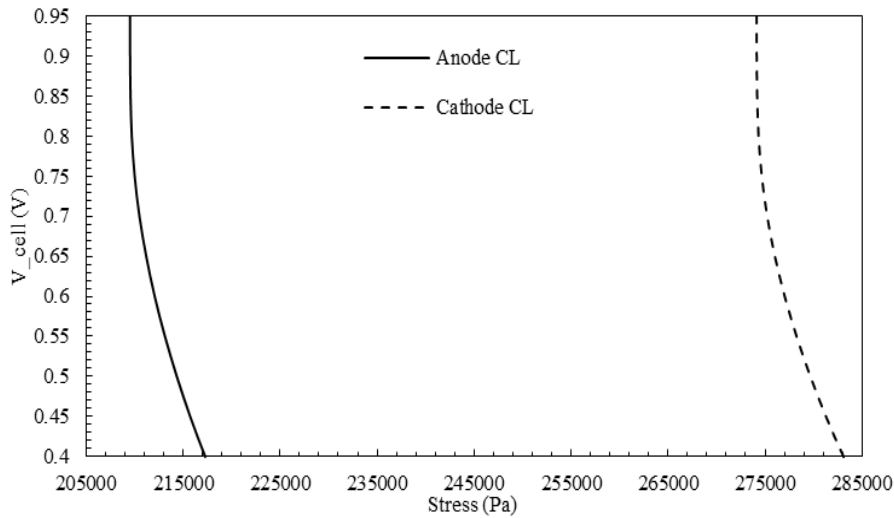
شکل ۱۶- تغییرات کسر جرمی آب در کانال کاتدی، الکترود نفوذ گاز و لایه کاتالیستی در دو حالت ۱: عدم برهم‌کنش سیال- جامد- گرما و ۲: برهم‌کنش سیال- جامد- گرما



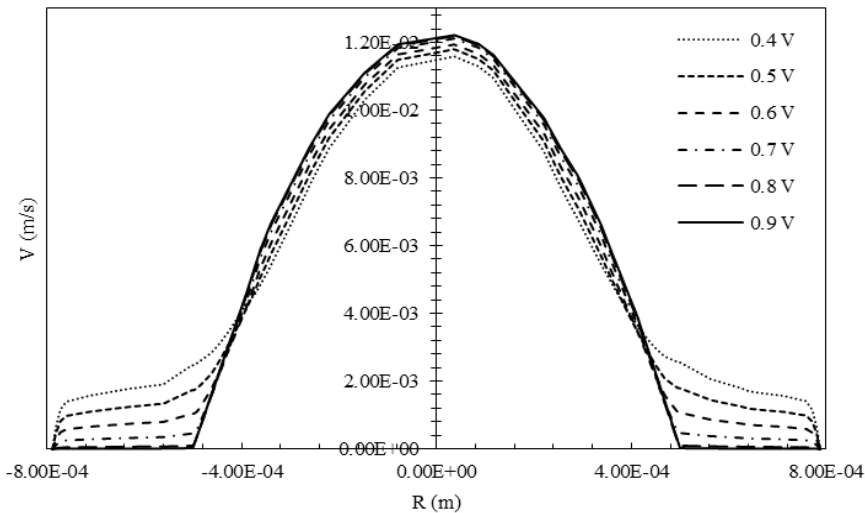
شکل ۱۷- میانگین تغییرات تنش در الکترودهای نفوذ گاز با کاهش ولتاژ

افزایش دما و همچنین برهم‌کنش جریان‌های سوخت و هوا بر سطح و داخل محیط‌های متخلخل الکترود و کاتالیست منجر به ایجاد تنش می‌شود. از دو شکل (۱۷) و (۱۸) می‌توان دریافت که شیب تغییرات تنش در الکترودها و کاتالیست‌ها با کاهش ولتاژ افزایش می‌یابد. ولی این شیب در الکترود آندی بیشتر از بخش‌های دیگر است. دلیل این امر از یکسو نزدیکی این الکترود به کاتالیست آندی است که با توجه به شکل‌های

شکل‌های (۱۵) و (۱۶) نشان می‌دهد که فرض تنش‌های گرمایی، مکانیکی و جابجایی‌های حاصل از آن، اثر بیشتری نسبت به افزایش دما دارد و در نتیجه سوخت کمتری به لایه کاتالیستی پیل سوختی جابجا می‌شود. در شکل‌های (۱۷) و (۱۸) میانگین تغییرات تنش در الکترودها و کاتالیست‌ها با کاهش ولتاژ نشان داده شده است. همان‌طور که پیش‌تر بیان شد، کاهش ولتاژ و در پی آن



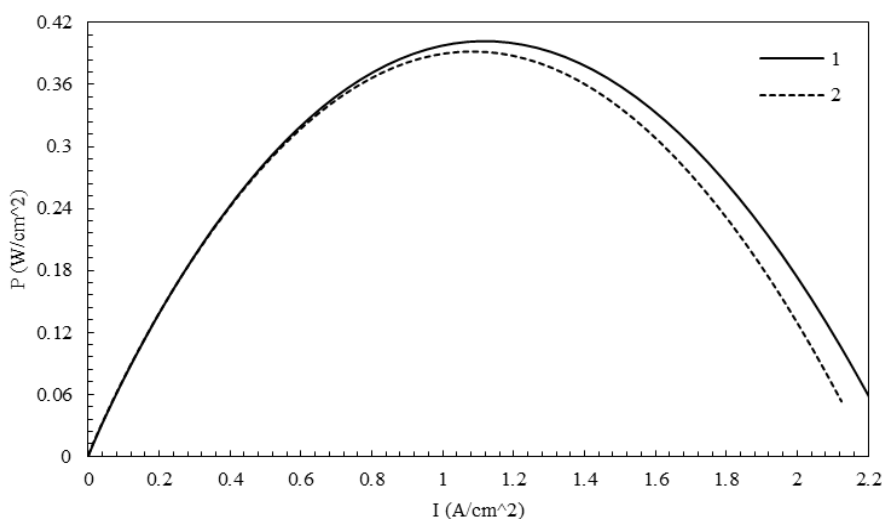
شکل ۱۸- میانگین تغییرات تنش در لایه‌های کاتالیستی با کاهش ولتاژ



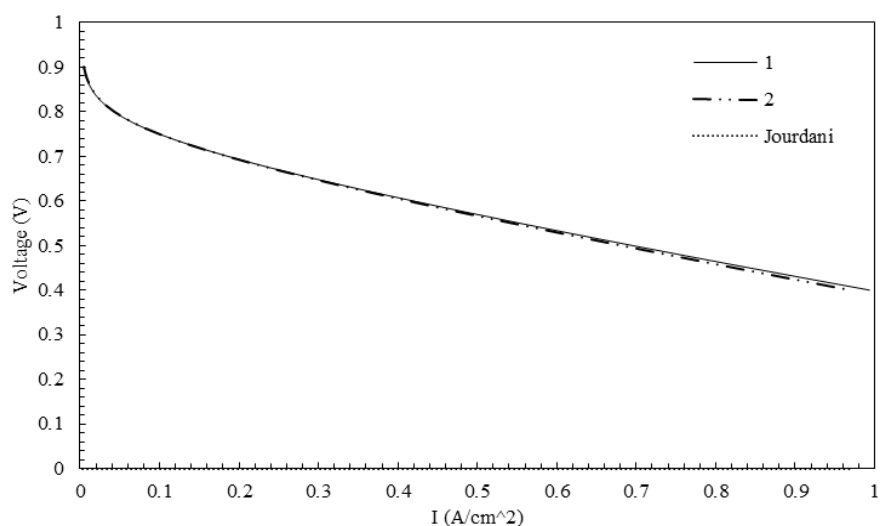
شکل ۱۹- تغییرات سرعت جریان سوخت با کاهش ولتاژ

با توجه به شکل (۱۹)، کاهش ولتاژ موجب سرعت بیشتر جریان سوخت در بخش‌های مختلف می‌شود. این افزایش سرعت در ناحیه‌های متخلخل الکتروود و کاتالیست بیشتر است. تغییرات سرعت باعث تغییرات ممتوم و در نهایت افزایش میزان تنش برشی و فون میزس وارد بر سطح و بخش‌های درونی الکتروود می‌شود که در شکل (۱۷) و (۱۸) نمایش داده شد. در شکل (۲۰)، توان پیل سوختی در دو حالت نشان داده شده است.

(۶) و (۷) دارای بالاترین دما در بین بخش‌های گوناگون پیل سوختی است و تغییرات بیشتر دما باعث افزایش تنش می‌شود. همچنین موقعیت این الکتروود در ناحیه درونی پیل سوختی و تماس آن با جریان سوخت است، که با توجه به شکل (۱۴)، شیب افزایش تنش برشی وارده به الکتروود آندی نسبت به الکتروود کاتدی قابل ملاحظه‌تر است. در شکل (۱۹)، تغییرات سرعت جریان سوخت در کانال، الکتروود و کاتالیست آندی نشان داده شده است.



شکل ۲۰- تغییرات چگالی توان پیل سوختی نسبت به چگالی جریان در دو حالت ۱: عدم برهم‌کنش سیال- جامد- گرما و ۲: برهم‌کنش سیال- جامد- گرما



شکل ۲۱- تغییرات چگالی جریان پیل سوختی نسبت به ولتاژ در دو حالت ۱: عدم برهم‌کنش سیال- جامد- گرما و ۲: برهم‌کنش سیال- جامد- گرما و پژوهش جردانی [۱۳]

به‌منظور مقایسه پژوهش فعلی با پژوهش جردانی و همکاران نیز مقایسه شد. در شکل (۲۱)، نمودارهای ولتاژ-جریان پیل سوختی لوله‌ای در دو حالت برهم‌کنش و عدم برهم‌کنش سیال-جامد-گرما و پیل سوختی صفحه‌ای پژوهش جردانی نشان داده شده است [۱۳]. همان‌طور که مشخص است، پیل سوختی با هندسه لوله‌ای

نتیجه توضیحات بخش‌های پیشین درباره فرض اثر تنش‌های گرمایی و مکانیکی، مقدار نفوذ سوخت، سرعت جریان و تغییرات دما در شکل (۲۰) نشان داده شده است. همان‌طور که مشخص است، در حالت ۲ توان تا حدود ۳ درصد کاهش می‌یابد که نشان دهنده اهمیت فرض مذکور در پیل سوختی با فرض هندسه لوله‌ای است.

جدول ۲- اثر تغییر پارامترهای گوناگون بر عملکرد پیل سوختی

حالات مختلف	بدون برهم کنش سیال- جامد- گرما	با برهم کنش سیال- جامد- گرما	کاهش قطر کانال جریان سوخت (۰/۸ میلی متر)	کاهش ضخامت کانال جریان هوا (۰/۸ میلی متر)	دو برابر شدن ضریب رسانندگی یونی غشا (۲۰٪ زیمنس بر متر)	دو برابر شدن ضریب رسانندگی الکترونی الکتروود (۴۴٪ زیمنس بر متر)
ولتاژ (ولت)	چگالی جریان (آمپر بر سانتی متر مربع)					
۰/۹۵	۰/۰۰۱۲۵۰۸	۰/۰۰۱۲۵۰۸	۰/۰۰۱۳۰۰۲	۰/۰۰۱۲۵۱۹	۰/۰۰۱۲۵۶۰	۰/۰۰۱۲۶۱۳
۰/۹	۰/۰۰۴۳۹۴۳	۰/۰۰۴۳۹۳۲	۰/۰۰۴۵۶۵۸	۰/۰۰۴۳۹۷۹	۰/۰۰۴۴۵۸۰	۰/۰۰۴۳۹۹۸
۰/۸	۰/۰۰۴۲۵۵۸	۰/۰۰۴۲۴۴۴	۰/۰۰۴۴۰۴۷	۰/۰۰۴۲۵۸۸	۰/۰۰۴۷۹۲۳	۰/۰۰۴۲۹۶۹
۰/۷	۰/۱۸۶۰۱	۰/۱۸۴۴۶	۰/۱۹۱۳۰	۰/۱۸۶۱۲	۰/۲۵۵۴۹	۰/۱۹۰۴۱
۰/۶	۰/۴۱۹۰۱	۰/۴۱۳۳۸	۰/۴۲۹۴۱	۰/۴۱۹۲۴	۰/۶۴۰۱۷	۰/۴۳۲۰۷
۰/۵	۰/۶۹۵۱۵	۰/۶۸۲۷۶	۰/۷۱۱۰۹	۰/۶۹۵۵۲	۱/۱۱۱۲	۰/۷۱۹۳۸
۰/۴	۰/۹۹۳۵۰	۰/۹۷۱۷۱	۱/۰۱۵۱	۰/۹۹۴۰۳	۱/۴۹۳۲	۱/۰۳۰۲

۵- نتیجه گیری

در این پژوهش، یک پیل سوختی سه بعدی پلیمری لوله‌مانند، به صورت جامع با حل معادلات پیوستگی، مومنتم، انرژی، غلظت، الکتروشیمیایی و تنش- کرنش به صورت کوپل شده بررسی و تحلیل شد. خلاصه‌ای از نتایج به دست آمده در ذیل آورده شده است.

- با کاهش پتانسیل، چشمه‌های گرمایی ناشی از فعالیت‌های الکتروشیمیایی، مقاومت اهمی و نفوذ گازها افزایش می‌یابد. افزایش دمای پیل سوختی در ناحیه کاتالیست آندی بیش از سایر نواحی است.
- سطح داخلی الکتروود آندی و سطح خارجی الکتروود کاتدی که هر دو در تماس با جریان سوخت و هوا هستند، بیشترین جابجایی را دارند. ناحیه الکتروولیت در میانه پیل سوختی کمترین جابجایی را دارد.
- کاهش ولتاژ، موجب افزایش سرعت جریان، افزایش دما، افزایش جابجایی در بخش‌های گوناگون پیل سوختی می‌شود.
- تنش‌های گرمایی و مکانیکی ناشی از افزایش دما و جابجایی بیشترین اثر را بر ناحیه الکتروولیت وارد می‌کنند.

نسبت به هندسه صفحه‌ای پژوهش جردانی کارکرد مناسب‌تری دارد. همچنین، نتایج در حالت عدم فرض برهم‌کنش سیال- جامد- گرما نسبت به دو حالت دیگر بهتر است. لازم به ذکر است دمای کاری در پژوهش جردانی ثابت فرض شده که با حل معادله انرژی مشابه حالت‌های ۱ و ۲، بازدهی پیل سوختی دچار افت خواهد شد.

در جدول (۲) اثر پارامترهای گوناگون بر عملکرد پیل سوختی مورد ارزیابی قرار گرفته است. در آغاز پیل سوختی در دو حالت دما ثابت و غیر دما ثابت بررسی شد. نتایج نشان داد تأثیر دما می‌تواند تا ۲ درصد چگالی جریان را در پتانسیل ۰/۴ ولت کاهش دهد. در ادامه اثر تغییر هندسی بررسی شد. برای این کار شعاع جریان ورودی سوخت ۱ میلی‌متر کاهش داده شده که در نتیجه آن ۳ درصد چگالی جریان در پتانسیل ۰/۴ افزایش پیدا کرد. در نهایت با تغییر رسانایی یونی و الکترونی غشا و الکتروودها، عملکرد پیل سوختی بررسی شد. نتایج نشان داد، تغییر رسانایی یونی الکتروولیت اثر چشمگیرتری نسبت به رسانایی الکترونی خواهد داشت.

فرض غیرهم‌دما بر عملکرد پیل سوختی اثرگذار است. همچنین کاهش قطر جریان‌گاز ورودی و همچنین افزایش رسانایی یونی و الکترونی باعث افزایش عملکرد پیل سوختی می‌شوند. رسانایی یونی الکترولیت بیشترین اثر را در بین موارد مذکور دارد.

• بیشترین تغییر حجم به‌ترتیب در الکتروود کاتدی، الکتروود آندی، کاتالیست کاتدی و کاتالیست آندی اتفاق می‌افتد.
• بیشترین افزایش دما در کاتالیست آندی و کمترین در الکتروود کاتدی رخ می‌دهد. همچنین اثر تنش‌های ناشی از جابجایی‌های مکانیکی و جریان‌های سیال بر پیل سوختی بیش از اثر تنش‌های ناشی از افزایش دما است.

واژه‌نامه

- | | | |
|----------------------------------|------------------------------------|--|
| 1. joule heating | 8. over potential | 15. Young's module |
| 2. gas diffusion electrode (GDE) | 9. Nernst equation | 16. Poisson ratio |
| 3. catalyst layer (CL) | 10. Butler- Volmer equation | 17. thermal expansion coefficient |
| 4. anode channel (AC) | 11. transfer coefficient | 18. stoichiometry coefficient |
| 5. cathode channel | 12. linear elastic material | 19. membrane electrode assembly area (MEA) |
| 6. Brinkman equation | 13. fluid- solid interaction (FSI) | |
| 7. binary effective diffusivity | 14. .Lame parameters | |

مراجع

- Wang, Y., Diaz, D. F. R., Chen, K. S., Wang, Z. and Adroher, X. C., "Materials, Technological Status and Fundamentals of PEM Fuel Cells—A Review", *Materials Today*, Vol. 32, pp. 178-203, 2020.
- Wang, C. Y., "Fundamental Models for Fuel Cell Engineering", *Chemical Reviews*, Vol. 104, No. 10, pp. 4727-4766, 2004.
- Peighambardoust, S. J., Rowshanzamir, S. and Amjadi, M., "Review of the Proton Exchange Membranes for Fuel Cell Applications" *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35, No. 17, pp. 9349, 2010.
- Dutta, S. S., "Numerical Prediction of Temperature Distribution in PEM Fuel Cells", *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, Vol. 38, No. 2, pp. 111-128, 2000.
- Wang, L., Husar, A., Zhou, T. and Liu, H., "A Parametric Study of PEM Fuel Cell Performances", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 28, No. 11, pp. 1263-1272, 2003.
- Grujicic, M., and Chittajallu, K., "Design and Optimization of Polymer Electrolyte Membrane (PEM) Fuel Cells", *Applied Surface Science*, Vol. 227, No. 1-4, pp. 56-72, 2004.
- Ju, H., Meng, H. and Wang, C. Y., "A Single-Phase, Non-Isothermal Model for PEM Fuel Cells", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 48, No. 7, pp. 1303-1315, 2005.
- Sedigh, M., Khaleghi, H. and Mirzaei, M., "Parametric Study Of Operation and Performance of a PEM Fuel Cell Using Numerical Method", *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 2008.
- Al-Baghdadi, M. A. S., "Performance Comparison Between Planar and Tubular-Shaped Ambient Air-Breathing Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells Using Three-Dimensional Computational Fluid Dynamics Models", *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, Vol. 1, No. 2, p. 023105, 2009.
- Henriques, T., César, B. and Branco, P. C., "Increasing the Efficiency of a Portable PEM Fuel Cell by Altering the Cathode Channel Geometry: A Numerical and Experimental Study", *Applied Energy*, Vol. 87, No. 4, pp. 1400-1409, 2010.
- Mohammadi-Ahmar, A., Osanloo, B., Solati, A. and Ghasemi, J., "Performance Improvement of the Circular Tubular PEMFC by Using Different Architectures and Number of Layers", *Energy Conversion and Management*, Vol. 128, pp. 238-249, 2016.
- Sezgin, B., Caglayan, D. G., Devrim, Y., Steenberg, T. and Eroglu, T., "Modeling and Sensitivity Analysis of High Temperature PEM Fuel Cells by Using Comsol Multiphysics", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 41, No. 23, pp. 10001-10009, 2016.
- Jourdani, M., Mounir, H. and Marjani, A., "Three-Dimensional PEM Fuel Cells Modeling Using COMSOL Multiphysics", *The International Journal of Multiphysics*, Vol. 11, No. 4, pp. 427-442, 2017.
- Chinnasa, P., Khamsuk, P., Seechalee, S., and Swatsitang, E., "Simulation and Experimental Study

- of Bipolar Plate on the Performance PEM Fuel Cell”, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 901, No. 1, p. 012081: IOP Publishing, 2017.
15. Abdollahzadeh Jamalabadi, M. Y., “A 3D Simulation of Single-Channel High-Temperature Polymer Exchange Membrane Fuel Cell Performances”, *Applied Sciences*, Vol. 9, No. 17, p. 3633, 2019.
 16. Zhang, C., Li, W., Hu, M., Cheng, X., He, K. and Mao, L., “A Comparative Study of Using Polarization Curve Models in Proton Exchange Membrane Fuel Cell Degradation Analysis”, *Energies*, Vol. 13, No. 15, p. 3759, 2020.
 17. Bermúdez Agudelo, M. S., Hampe, M., Reiber, T. and Abele, E., “Investigation of Porous Metal-Based 3D-Printed Anode GDLs for Tubular High Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cells”, *Materials*, Vol. 13, No. 9, p. 2096, 2020.
 18. Pan, M., “Design and Modeling of PEM Fuel Cell Based on Different Flow Fields”, *Energy*, Vol. 207, p. 118331, 2020.
 19. Ionescu, V., “Water and Hydrogen Transport Modelling Through the Membrane-Electrode Assembly of A PEM Fuel Cell”, *Physica Scripta*, Vol. 95, No. 3, p. 034006, 2020.
 20. Al-Baghdadi, M. A. S., “Studying the Effect of Material Parameters on Cell Performance of Tubular-Shaped PEM Fuel Cell”, *Energy Conversion and Management*, Vol. 49, No. 11, pp. 2986-2996, 2008.
 21. Souli, M. H. and Benson, D. J., *Arbitrary Lagrangian Eulerian and Fluid-Structure Interaction: Numerical Simulation*, John Wiley & Sons, 2013.
 22. Raback, P., Ruokolainen, J., Lyly, M., and Järvinen, E., “Fluid-Structure Interaction Boundary Conditions by Artificial Compressibility”, *ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference*, wales, UK, 2001.
 23. Fahs, I. and Ghasemi, M., “A New Sensitivity Study of Thermal Stress Distribution for a Planar Solid Oxide Fuel Cell”, *Journal of Renewable Energy and Environment*, Vol. 5, No. 4, pp. 18-26, 2018.
 24. Al-Baghdadi, M. A. S., “A CFD Study of Hygro-Thermal Stresses Distribution in PEM Fuel Cell During Regular Cell Operation”, *Renewable Energy*, Vol. 34, No. 3, pp. 674-682, 2009.
 25. Al-Baghdadi, M. A. S. and Al-Janabi, H. A. S., “Effect of Operating Parameters on the Hygro-Thermal Stresses in Proton Exchange Membranes of Fuel Cells”, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32, No. 17, pp. 4510-4522, 2007.
 26. Sayadian, S. and Ghassemi, M., “Thermal Analysis of a Micro-Scale Proton-Conducting Solid Oxide Fuel Cell”, *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, pp. 1-13, 2020.
 27. Fahs, I., Ghassemi, M., and Fahs, A., “Numerical Study of Detecting Crack Initiation in a Planar Solid Oxide Fuel Cell”, *Environmental Progress & Sustainable Energy*, Vol. 39, No. 6, p. e13443, 2020.
 28. Ubong, E., Shi, Z. and Wang, X., “Three-Dimensional Modeling and Experimental Study of a High Temperature PBI-Based PEM Fuel Cell”, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 156, No. 10, p. B1276, 2009.