

## بررسی رفتار انتقال آب در پیل سوختی غشا پلیمری

ابراهیم افشاری<sup>۱</sup>  
استادیار

در این مطالعه، یک مدل دو بعدی و دو فاز پیل سوختی غشا پلیمری به منظور بررسی رفتار انتقال و تغییر فاز آب توسعه داده شده و روش‌های مختلف انتقال آب شامل پخش، جابجایی و درگ الکترو-اسمزیک در داخل غشا و تغییر فاز آب در لایه پخش گاز کاتد ارزیابی و تحلیل شده است. بدین منظور، معادلات پیوستگی، ممنتم، بقا اجزا و شارژ به همراه روابط سینتیک الکتروشیمیایی در نواحی مختلف پیل سوختی به صورت کوپل، با یک مدل تک ناحیه‌ای و به روش عددی حل شده‌اند و تاثیر انتقال و تغییر فاز آب بر عملکرد پیل سوختی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد رژیم‌های مختلف انتقال آب بر افت‌های داخلی پیل، شناوری کاتد و شرایط تعادل آب در پیل تاثیر می‌گذارد و می‌توان با استفاده از پارامتر کلیدی درصد رطوبت گازهای ورودی، تغییر فاز آب و شناوری را در پیل سوختی غشا پلیمری مدیریت کرد.

سید علی جزایری<sup>۲</sup>  
دانشیار

واژه‌های راهنما: پیل سوختی غشا پلیمری، انتقال آب، شناوری، مدل تک ناحیه‌ای، مدل سازی عددی

### ۱- مقدمه

پیل‌های سوختی غشا پلیمری با مشخصات بارزی از قبیل راندمان بالا، دمای عملکرد پایین، تولید انرژی الکتریکی بدون ایجاد آلودگی، دانسیته انرژی بالا، تنوع و زمان راه‌اندازی کوتاه به عنوان یک گزینه تولید توان برای استفاده در وسایل حمل و نقل و وسایل قابل حمل مطرح می‌باشند. با وجود پیشرفت‌های زیادی که در سال‌های اخیر برای بالا بردن عملکرد کلی پیل انجام شده است، یک محدودیت عمده در پیل سوختی غشا پلیمری، تغییر فاز و انتقال دو فاز مایع و بخار آب می‌باشد. ظرفیت آب پیل سوختی با بالانس آب در حین عملکرد پیل حاصل می‌شود. فاکتورهای شرکت کننده در انتقال آب، شامل درگ الکترو-اسمزیک، پخش برگشتی از کاتد و پخش و جابجایی آب در گازهای تزریقی به پیل می‌باشد. درگ الکترو-اسمزیک وابسته به مقدار آبی است که با عمل اسمزیک همراه پروتون کشیده می‌شود و تخمین زده شده که ۱-۲/۵ مولکول توسط هر پروتون انتقال می‌یابد [۱]. در حین عملکرد پیل، در لایه کاتالیست کاتد آب تولید شده و غلظت آب را در سمت کاتد بالا می‌برد و در نتیجه گرادیان غلظتی ایجاد می‌شود و تحت این شرایط پخش برگشتی آب از کاتد به آند پیش می‌آید. مقدار رطوبت موجود در سوخت و هوا نیز همراه با دو مکانیسم اشاره

<sup>۱</sup> نویسنده مسئول، استادیار، دانشکده فنی و مهندسی، گروه مکانیک، دانشگاه اصفهان [e.afshari@eng.ui.ac.ir](mailto:e.afshari@eng.ui.ac.ir)

<sup>۲</sup> دانشیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر الدین طوسی، تهران

شده بر انتقال و تغییر فاز آب تاثیر می‌گذارد و درصد رطوبت ورودی به منظور مدیریت آب در داخل پیل به کار می‌رود.

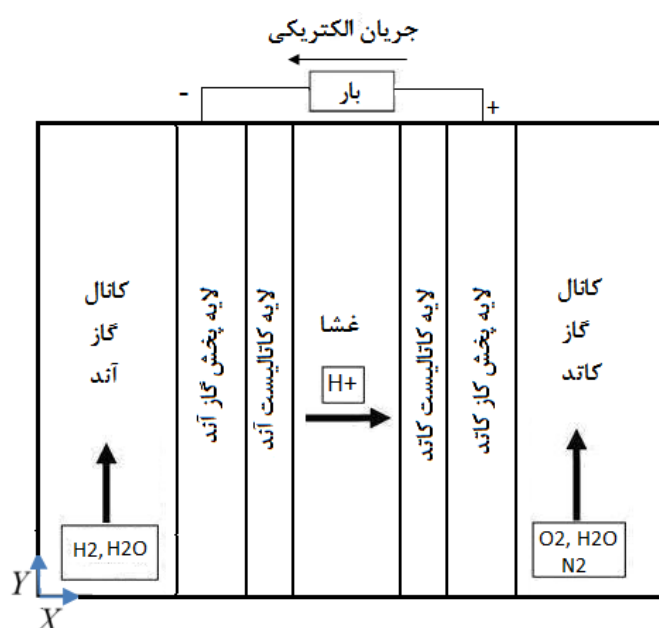
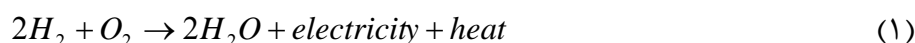
برای اطمینان از بالا بودن هدایت یونی در الکترولیت پیل سوختی غشا پلیمری، نیاز به بالا بودن ظرفیت آب غشا، به خصوص در دانسیته جریان‌های بالا، می‌باشد. هدایت یونی بالای الکترولیت، موقعی اتفاق می‌افتد که غشا کاملاً هیدراته باشد و این امر باعث بالا رفتن راندمان پیل سوختی می‌شود. اما اگر مقدار آب موجود در پیل از حد مجاز بالاتر باشد، آب چگالیده شده و آب مایع تخلخل‌های لایه پخش گاز را مسدود کرده (پدیده شناوری) و در نتیجه انتقال گازهای واکنشگر به لایه کاتالیست با مشکل مواجه می‌گردد. اگر مقدار آب موجود در غشا کم باشد نیز هدایت یون‌ها کم شده و چسبندگی غشا به الکتروود با مشکل مواجه می‌شود. عملکرد پیل با شرایط خشک، شدیداً طول عمر غشا را کم می‌کند. با توجه به محدودیت‌های اشاره شده بررسی انتقال و تغییر فاز آب، در پیل سوختی غشا پلیمری بسیار ضروری می‌باشد.

مطالعات بسیاری انجام شده تا توزیع آب تحت شرایط تک فاز را در پیل سوختی غشا پلیمری پیشگویی کند. Ju و همکارانش [۲ و ۳] یک مدل سه بعدی پیل غشا پلیمری را مطالعه کرده و پدیده‌های انتقال آب و حرارت را داخل پیل بررسی کردند. Djilali و همکارانش [۴-۶] با ارائه یک مدل سه بعدی و دما متغیر، به بررسی انتقال بخار آب و تاثیر دما بر آن پرداختند. آنها همچنین مطالعه‌ای پارامتری بر روی پیل انجام دادند و حساسیت پارامترهای مختلف پیل را بررسی کردند. Wang و همکارانش با توسعه یک مدل تک فاز و دما متغیر، توزیع دما داخل پیل سوختی پلیمری را بررسی کردند. Li و Rowe [۷] و Mishra و همکارانش [۸] یک مدل دو فاز پیل سوختی را بررسی کردند. این مدل‌ها یک بعدی بوده و تغییرات پارامترهای مختلف تنها در جهت ضخامت لایه‌های پیل بررسی شده است. Nam و Kaviani [۹] با در نظر گرفتن یک مدل یک بعدی برای انتقال دو فاز در لایه پخش گاز، بر تاثیر ساختار این لایه متمرکز شدند. Hwang [۱۰] یک مدل دو فاز را انتخاب کرده و الکتروود کاتد پیل را بررسی کرد. Pasaogullari و همکارانش [۱۱ و ۱۲] یک مدل دو فاز و دما متغیر ارائه دادند و انتقال آب و حرارت را در لایه پخش گاز کاتد پیل سوختی غشا پلیمری بررسی کردند. Wang و Wang [۱۳] یک مدل دما متغیر و دو فاز بر مبنای مدل مخلوط چند فاز توسعه داده و اهمیت انتقال آب و حرارت را در پیل سوختی غشا پلیمری از طریق پخش فاز بخار بررسی کردند.

در این مطالعه، یک مدل دو بعدی پیل سوختی غشا پلیمری شامل کانال‌های جریان، لایه‌های پخش گاز، لایه‌های کاتالیست و غشا، با در نظر گرفتن رفتار دو فازی آب توسعه داده شده و روش‌های مختلف انتقال آب و تاثیر شناوری بر عملکرد پیل بررسی شده است. بدین منظور یک مدل تک ناحیه‌ای انتخاب شده است و معادلات پیوستگی، ممنتم، پتانسیل و بقا اجزا شیمیایی، با کمک تئوری مخلوط دو فاز که کارآترین مدل برای شبیه‌سازی جریان دو فازی در داخل پیل سوختی می‌باشد، حل شده‌اند. در این مدل، لایه‌های کاتالیست آند و کاتد با وجود اینکه نسبت به بقیه نواحی نازک هستند، به صورت نواحی مجزا و نه به صورت فصل مشترک بین نواحی، مدل شده‌اند. در پایان، مدل با نتایج آزمایشگاهی موجود در مقالات مقایسه شده که سازگاری بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد.

## ۲- تشریح مدل

نمایی از یک پیل سوختی غشا پلیمری در شکل (۱) نشان داده شده است. دامنه مدل محاسباتی شامل کانال‌های جریان گاز، لایه‌های پخش گاز و لایه‌های کاتالیست آند و کاتد به همراه لایه غشا در بین این لایه‌ها می‌باشد. هوا و هیدروژن مرطوب از طریق کانال‌های گاز کاتد و آند وارد پیل می‌شود. هیدروژن از میان لایه پخش گاز آند که از کربن پارچه‌ای یا کربن کاغذی ساخته شده است به طرف کاتالیست آند پخش می‌شود. در لایه کاتالیست مولکول‌های هیدروژن به دو پروتون و دو الکترون تبدیل می‌شوند که پروتون‌های تولیدی از میان غشاء به طرف لایه کاتالیست کاتد حرکت می‌کنند. غشا رسانای الکترون نمی‌باشد و بنابراین الکترون مدار خارجی را طی کرده و جریان الکتریکی خارجی به وجود می‌آید. در طرف کاتد، اکسیژن از میان لایه پخش گاز کاتد حرکت می‌کند و در سطح لایه کاتالیست با پروتون‌ها و الکترون‌های انتقال یافته از آند واکنش داده و آب تشکیل می‌شود. واکنش کلی پیل که مجموع نیم واکنش‌های آندی و کاتدی می‌باشد به صورت زیر نوشته می‌شود.



شکل ۱- ساختمان و دامنه محاسباتی پیل سوختی

## ۳- فرمولاسیون ریاضی

### ۳-۱- فرضیات و معادلات حاکم

در این تحقیق یک مدل دو بعدی برای تحلیل پیل سوختی در نظر گرفته شده است. دیگر فرضیات به صورت زیر می‌باشد.

- مخلوط گازهای واکنشگر گاز کامل هستند.
- مدل دما ثابت است.

- جریان داخل کانال‌ها دائم، آرام و تراکم ناپذیر می‌باشد.
  - لایه‌های کاتالیست و غشا یکنواخت و همگن هستند.
  - از افت اهمی و افت پتانسیل الکتریکی در بخش جامد لایه پخش گاز و لایه کاتالیست صرف نظر می‌شود.
  - از تاثیرات تشعشع، سورت و دوفورت صرف نظر می‌شود.
  - ویسکوزیته مخلوط گاز ثابت بوده و با استفاده از شرایط ورودی به دست می‌آید.
- بر اساس فرضیات بالا، مدل پیل سوختی شامل معادلات بقای جرم، ممنتوم، اجزای شیمیایی و شارژ الکتریکی می‌باشد که با در نظر گرفتن یک مدل تک ناحیه‌ای حل شده‌اند. مزیت مدل تک ناحیه‌ای عدم نیاز به مشخص کردن شرایط مرزی در فصل مشترک بین نواحی مختلف پیل می‌باشد و شرایط مرزی فقط در مرزهای بیرونی مدل مورد نیاز است. عدم اعمال این شرایط مرزی به دقت مسأله افزوده و حل معادلات را آسان می‌کند؛ هر چند که زمان محاسبات کامپیوتری طولانی می‌شود. فرمولاسیون معادلات بر اساس مدل مخلوط دو فاز (مدل  $M^2$ ) که در مرجع [۱۴] ارائه شده است، می‌باشد. یک مزیت عمده مدل مخلوط دو فاز نسبت به مدل‌های دو سیال کلاسیک این است که در این مدل نیاز به تعقیب فازهای مختلف در فصل مشترک بخار - مایع نمی‌باشد و بنابراین پیچیدگی روش عددی جریان دو فاز و مدل‌سازی آن ساده می‌گردد. دیگر برجستگی مدل مخلوط دو فاز این است که در این مدل، همه معادلات در سه نوع رژیم می‌تواند ممکن است در پیل اتفاق بیفتد، معتبر هستند. این سه رژیم شامل تک فاز گاز، دو فاز گاز - مایع، تک فاز مایع می‌باشد. همچنین در این مدل بر خلاف مدل‌هایی مانند تئوری جریان اشباع، فرض فشار گاز ثابت بر روی مساله گذاشته نمی‌شود.

### معادله پیوستگی

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (2)$$

در معادله بالا  $\bar{u}$  بردار سرعت و  $\rho$  دانسیته مخلوط گاز و مایع می‌باشد و از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\rho = \rho_l s + \rho_g (1-s) \quad (3)$$

در رابطه بالا  $\rho_g$  دانسیته مخلوط گاز،  $\rho_l$  دانسیته مایع،  $(1-s)$  نسبت حجم اشغال شده توسط مخلوط گاز به حجم کل و  $s$  نیز نسبت حجم اشغال شده توسط مایع به حجم کل می‌باشد. این پارامتر که به اشباع مایع معروف است به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$s = \frac{V_l}{V} \quad (4)$$

### معادله بقا ممنتوم

$$\frac{1}{\varepsilon^2} \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + S_{Darcy} \quad (5)$$

$p$ ،  $\tau$  و  $\varepsilon$  به ترتیب فشار، تنش برشی و ضریب تخلخل می‌باشد. در نواحی متخلخل برای برقراری پیوستگی شار جرم، در فصل مشترک نواحی متخلخل و کانال‌های جریان، از سرعت‌های ظاهری استفاده می‌شود و خواص انتقالی اصلی با خواص انتقالی موثر اصلاح می‌شود. از این‌رو در نواحی متخلخل، در

معادلات ممنتم ترم چشمه قرار می‌گیرد. باید توجه داشت که ضریب تخلخل در کانال‌های جریان برابر ۱ و ترم چشمه صفر می‌باشد.

$$S_{Darcy} = -\frac{\mu}{K} \bar{u} \quad (۶)$$

در رابطه بالا،  $K$  نفوذپذیری محیط متخلخل و  $\mu$  ویسکوزیته مخلوط دو فاز می‌باشد و بر اساس مدل  $M^2$  محاسبه می‌شود.

$$\mu = \rho \left[ \frac{k_{rl}}{v_l} + \frac{k_{rg}}{v_g} \right]^{-1} \quad (۷)$$

در معادله بالا  $v_g$  و  $v_l$  ویسکوزیته سینماتیکی مایع و مخلوط گاز می‌باشد.  $k_{rl}$  و  $k_{rg}$  نیز به ترتیب نفوذپذیری نسبی فاز مایع و گاز بوده و بر اساس اشباع مایع محاسبه می‌شود.

$$k_{rl} = s^3 \quad (۸)$$

$$k_{rg} = (1-s)^3 \quad (۹)$$

### معادله بقا اجزا

$$\nabla(\gamma_c^i \bar{u} C^i) = \nabla[\varepsilon D_g^{i,eff} (1-s) \nabla C_g^i] - \nabla \left[ \left( \frac{mf_l^i}{M^i} - \frac{C_g^i}{\rho_g} \right) \bar{j}_l \right] + S_k \quad (۱۰)$$

در این معادله  $C^i$  و  $M^i$  غلظت کل و جرم مولکولی جزء  $i$  می‌باشد. چون فاز گاز و فاز مایع، میدان‌های جریان متفاوتی دارند، انتقال اجزا در هر فاز توسط فاکتور جابجایی  $\gamma_c$  تصحیح می‌شود.

$$\gamma_c = \begin{cases} \frac{\rho}{C_{H_2O}} \left( \frac{\lambda_l}{M_{H_2O}} + \lambda_g \frac{C_{sat}^{H_2O}}{\rho_g} \right) & \text{for water} \\ \frac{\rho \lambda_g}{\rho_g (1-s)} & \text{for other species} \end{cases} \quad (۱۱)$$

در رابطه بالا  $\lambda_l$  و  $\lambda_g$  به ترتیب قابلیت تحرک نسبی فاز مایع و گاز می‌باشد.

$$\lambda_k = \frac{k_{rk} / v_k}{\sum_k k_{rk} / v_k} \quad (۱۲)$$

زیر نویس  $k$  مربوط به مایع،  $l$ ، و گاز،  $g$ ، می‌باشد. نسبت جرمی مخلوط به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳].

$$\rho mf^i = \rho_g mf_g^i (1-s) + \rho_l mf_l^i s \quad (۱۳)$$

در رابطه بالا،  $mf_l^i$  و  $mf_g^i$  نسبت جرمی جزء  $i$  در فازهای مایع و گاز می‌باشد. همچنین شار موین،  $j_i$  در معادله (۱۰) تابعی از فشار گاز و فشار مایع بوده که توسط رابطه زیر به دست می‌آید. باید توجه داشت که در مدل  $M^2$  فشار گاز ثابت نیست.

$$j_l = \frac{\lambda_l \lambda_g}{v} K [\nabla p_c + (\rho_l + \rho_g) g] \quad (۱۴)$$

$p_c$  فشار موین است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$p_c = \sigma \cos(\theta_c) \left(\frac{\varepsilon}{K}\right)^{1/2} J(s) \quad (15)$$

در رابطه بالا  $\sigma$  کشش سطحی و  $J(s)$  تابع Leverett است و بر اساس رابطه تجربی زیر به دست می‌آید [۱].

$$J(s) = \begin{cases} 1.417(1-s) - 2.120(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3, & \text{if } \theta_c < 90^\circ \\ 1.417s - 2.120s^2 + 1.263s^3 & \text{if } \theta_c > 90^\circ \end{cases} \quad (16)$$

در یک محیط آب گریز، فاز گاز، فاز مرطوب کننده می‌باشد و رابطه دوم معادله (۱۶)، استفاده می‌شود. زاویه تماس لایه پخش گاز،  $\theta_c$ ، وابسته به درصد آب گریزی است و از خواص محیط متخلخل می‌باشد. ترم چشمه در معادله بقا اجزا ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی و درگ الکترو - اسمزیک آب از آند به کاتد است. این ترم برای اجزا واکنشگر (به غیر از آب) در لایه کاتالیست به صورت زیر است.

$$S_k = -\frac{sto^i j}{nF} \quad (17)$$

ترم چشمه برای آب در لایه کاتالیست:

$$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F} I\right) - \frac{sto^i j}{nF} \quad (18)$$

ترم چشمه برای آب در لایه غشا ناشی از درگ الکترو - اسمزیک:

$$S_k = -\nabla \cdot \left(\frac{n_d}{F} I\right) \quad (19)$$

در معادلات بالا  $sto^i$  ضریب استوکیومتری واکنش‌های سمت آند و کاتد است و بر اساس نیم واکنش‌های پیل برای هیدروژن، اکسیژن و آب به دست می‌آید. همچنین  $j$ ،  $I$ ،  $F$  و  $n$  به ترتیب دانسیته جریان انتقال، دانسیته جریان، ثابت فارادی و تعداد الکترون‌ها می‌باشد.

### معادله بقا شارژ

$$\nabla \cdot (\kappa^{eff} \nabla \varphi_e) + S_e = 0 \quad (20)$$

در معادله بالا  $\varphi_e$  و  $\kappa^{eff}$  پتانسیل الکتریکی و ضریب هدایت یونی موثر الکترولیت می‌باشد. در این معادله نیز ترم چشمه برای انتقال جریان بین ماتریس جامد و فاز الکترولیت در داخل هر کدام از لایه‌های کاتالیست کاتد و آند استفاده می‌شود.

$$S_e = j \quad (21)$$

دانسیته جریان انتقال در آند و کاتد به ترتیب توسط روابط زیر به دست می‌آید.

$$j_a = a i_0^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}}\right)^{1/2} \left(\frac{\alpha_a + \alpha_c}{RT} \cdot F \cdot \eta\right) \quad (22)$$

$$j_c = a i_0^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\alpha_c}{RT} \cdot F \cdot \eta\right) \quad (23)$$

روابط سینتیکی بالا مربوط به واکنش اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن در لایه کاتالیست آند و کاتد می‌باشد. این معادلات حالت ساده شده معادله باتلر - ولمر می‌باشند. رابطه سینتیکی اکسایش هیدروژن با

خطی‌سازی معادله باتلر - ولمر و با فرض سریع بودن واکنش حاصل می‌شود. رابطه کاهش اکسیژن نیز با نادیده گرفتن واکنش آندی در معادله باتلر - ولمر به دست می‌آید. مجموع ضرایب انتقال آند و کاتد،  $\alpha_a + \alpha_c$ ، در واکنش اکسایش هیدروژن مساوی ۲ است و ضریب انتقال کاتد،  $\alpha_c$ ، در واکنش کاهش اکسیژن برابر ۱ می‌باشد [۱۴]. با فرض اینکه پتانسیل مدار باز مرجع در آند تابعی از دما و در کاتد صفر باشد، اضافه پتانسیل آند و کاتد به ترتیب به صورت زیر مشخص می‌شود.

$$\eta = \phi_s - \phi_e - U_o \quad (\phi_s = 0, U_o = 0) \quad (24)$$

$$\eta = \phi_s - \phi_e - U_o \quad (\phi_s = V_{cell}, U_o = 1.23 - 0.9 \times 10^{-3}(T - 298.15)) \quad (25)$$

### خواص فیزیکی

هدایت پروتون ( $\kappa$ ) و ضریب درگ الکترو - اسمزیک آب ( $n_d$ ) با استفاده از ظرفیت غشا ( $\lambda$ ) که خود تابعی از فعالیت آب ( $a$ ) است، به دست می‌آید.

$$\kappa_m = (0.0005139\lambda - 0.000326) \exp(1268.0(\frac{1}{303} - \frac{1}{T})) \quad (26)$$

$$n_d = \begin{cases} 1.0 & \text{for } \lambda \leq 14 \\ 1.5/8(\lambda - 14) + 1.0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (27)$$

ظرفیت غشا و فعالیت آب نیز از روابط زیر به دست می‌آیند.

$$\lambda = \begin{cases} 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 & \text{for } 0 < a \leq 1 \\ 14 + 1.4(a - 1) & 1 < a \leq 3 \\ 16.8 & a > 3 \end{cases} \quad (28)$$

$$a = \frac{C_g^{H_2O} RT}{P_{sat}} \quad (29)$$

$P_{sat}$  و  $C_g^{H_2O}$  غلظت بخار آب و فشار اشباع می‌باشند. هدایت پروتونی موثر لایه‌های کاتالیست آند و کاتد نیز توسط رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\kappa_{cat}^{eff} = \varepsilon_{mc}^{1.5} \kappa_m \quad (30)$$

$\varepsilon_{mc}$  نسبت حجمی اینومر در لایه‌های کاتالیست می‌باشد.

ضریب پخش جرم جز  $k$  ام در کانال‌های آند و کاتد تابعی از دما و فشار است. در نواحی متخلخل پیل عبارت مربوط به ضریب پخش با استفاده از ضریب تخلخل اصلاح می‌شود.

$$D_k = D_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^{3/2} \left(\frac{P_0}{P}\right) \quad (31) \quad \text{در کانال‌های جریان:}$$

$$D_k^{eff} = \varepsilon_i^{eff} D_k \quad (32) \quad \text{در نواحی متخلخل:}$$

پخش آب در غشا نیز از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$D_m^{H_2O} = \begin{cases} 3.1 \times 10^{-7} \lambda (e^{0.28\lambda} - 1) e^{(-2346/T)} & \text{for } 0 < \lambda \leq 3 \\ 4.17 \times 10^{-8} \lambda (1 + 161e^{-\lambda}) e^{(-2346/T)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (33)$$

غلظت آب تعادل در غشا توسط رابطه زیر به دست می‌آید.

$$C_m^{H_2O} = \frac{\rho_{dry,m} \lambda}{EW} \quad (34)$$

$\rho_{dry,m}$  و  $EW$  وزن تعادلی الکترولیت و دانسیته غشا خشک می‌باشد. چون پتانسیل فاز الکترولیت و هدایت پروتونی غشا به کمک دانسیته جریان موضعی به دست می‌آید، دانسیته جریان متوسط با انتگرال‌گیری از دانسیته جریان موضعی روی غشا به دست می‌آید.

$$I = -\kappa^{eff} \nabla \phi_e \quad (35)$$

$$I_{ave} = \frac{1}{A_m} \int_{A_m} I dA \quad (36)$$

### ۳-۲- شرایط مرزی و روش حل عددی

معادلات ۲، ۵، ۱۰ و ۲۰ یک دستگاه از معادلات حاکم را برای حل ۵ مجهول  $\phi_e, C_k, p, v, u$  تشکیل می‌دهند ( $C_k$ ، غلظت اکسیژن، هیدروژن، آب و نیتروژن می‌باشد). برای حل این معادلات نیاز به مشخص شدن شرایط مرزی مناسب می‌باشد. چون در این مطالعه از روش تک ناحیه‌ای استفاده شده است، فقط شرایط مرزی بیرونی باید مشخص شود و نیاز به شرایط مرزی بین لایه‌های مختلف پیل سوختی نمی‌باشد. شرط شار صفر در مرزهای بیرونی به استثنا ورودی و خروجی کانال‌های جریان به کار می‌رود. در ورودی کانال کاتد و آند، غلظت اجزا با توجه به شرایط فشار و نسبت رطوبت مشخص می‌شود. فشار جزئی بخار آب ورودی مساوی با فشار اشباع در دمای مرطوب سازی واکنشگرهای ورودی می‌باشد. سرعت ورودی آند و کاتد نیز با استفاده از نسبت استوکیومتریک تعیین می‌شود. نسبت استوکیومتری، نسبت مقدار واکنشگرهای تامین شده به واکنشگرهای مورد نیاز برای واکنش الکتروشیمیایی بوده که دانسیته جریان مرجع،  $I_{ref}$  را تولید کند.

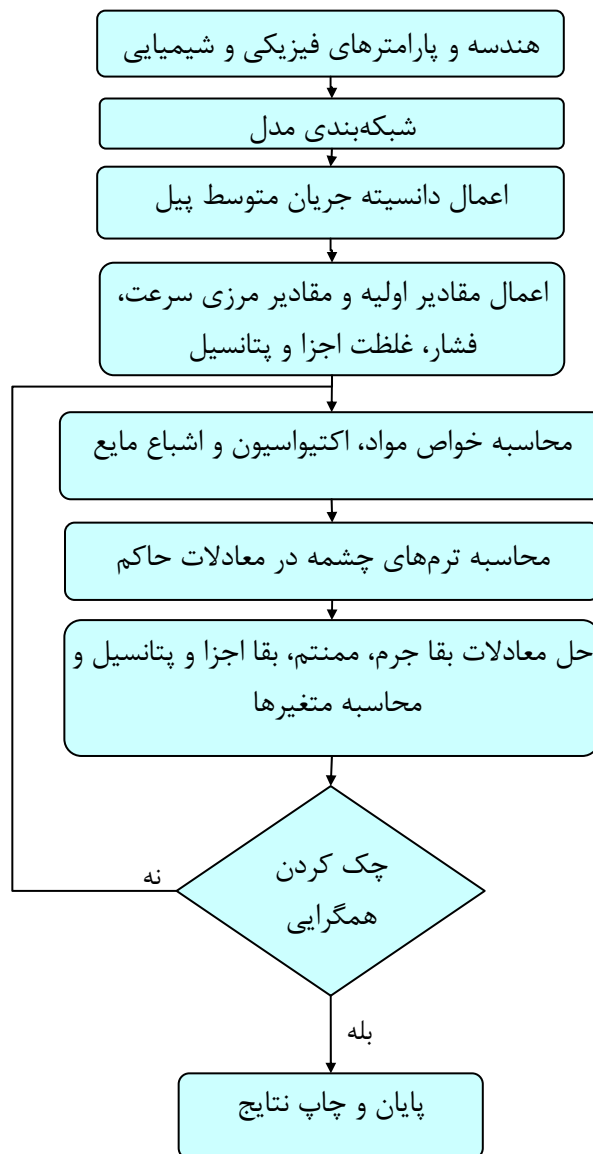
$$\zeta_a = C_{H_2,in} u_{a,in} \frac{2F}{I_{ref}} \frac{A_{a,in}}{A_{react}} \quad (37)$$

$$\zeta_c = C_{O_2,in} u_{c,in} \frac{4F}{I_{ref}} \frac{A_{c,in}}{A_{react}} \quad (38)$$

شرایط مرزی سرعت و اجزا در خروجی به صورت کاملاً توسعه یافته در نظر گرفته می‌شود. معادلات حاکم همراه با شرایط مرزی مشخص شده، با استفاده از یک کد کامپیوتری که به زبان فورترن نوشته شده است، حل شده‌اند. در این کد، میدان‌های سرعت و فشار با استفاده از الگوریتم سیمپل به دست آمده است [۱۵]. برای حل مجموعه معادلات از یک روند تکراری استفاده شده و تا رسیدن به همگرایی با دقت  $10^{-6}$  حل ادامه پیدا کرده است. فلوجارت روند حل معادلات در شکل (۲) نشان داده شده است. برای شبکه‌بندی مدل مورد نظر، از یک شبکه مستطیلی با ۲۵۰ گره در راستای  $x$  و تعداد ۵۰، ۳۰، ۱۰، ۶۰ گره در هر کدام از نواحی کانال، لایه پخش گاز، لایه کاتالیست و لایه غشا استفاده شده است. تعداد شبکه طوری



تنظیم شده که نتایج مدل عددی مستقل از تعداد شبکه شود. شبکه مذکور در راستای طولی یکنواخت بوده ولی در راستای ضخامت به دلیل ضخامت کم لایه‌های پخش گاز، کاتالیست و غشا، غیر یکنواخت می‌باشد.

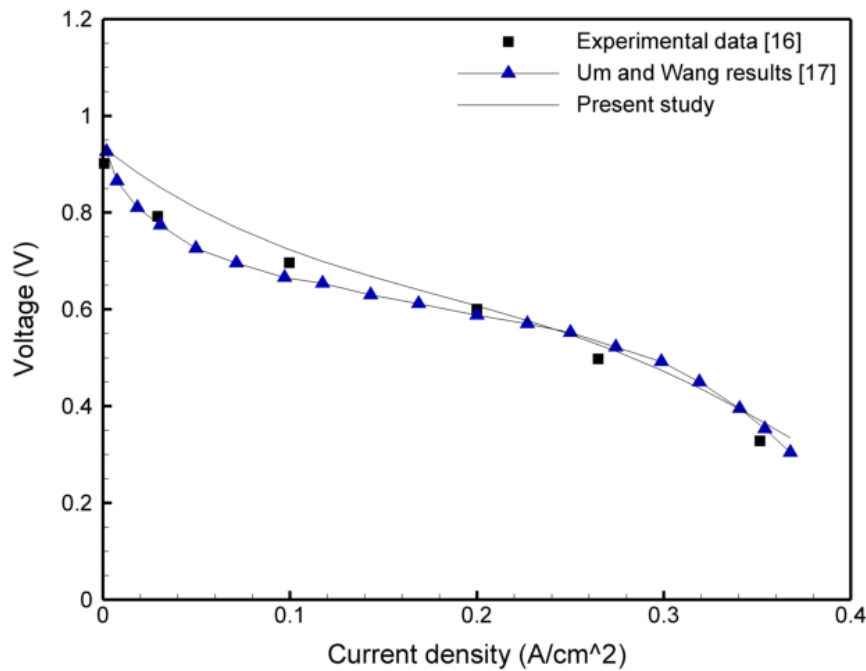


شکل ۲- فلوجارت روند حل معادلات

#### ۴- نتایج و بحث

برای اطمینان از صحت مدل‌سازی، منحنی عملکرد پیل سوختی با نتایج آزمایشگاهی [۱۶] و نتایج عددی مرجع [۱۷] مقایسه شده است. شرایط مدل‌سازی مشابه شرایط آزمایشگاهی است که سوخت و هوای خشک با دمای ۵۰ درجه سلسیوس وارد پیل می‌شود. برای مقایسه نتایج با نتایج عددی مرجع [۱۷] نیز شرایط مدل‌سازی مطابق با شرایط این مرجع است. سوخت و هوا با رطوبت نسبی صفر، نسبت استوکیومتری آند  $1/2$  و نسبت استوکیومتری کاتد  $2/6$  وارد پیل می‌شوند و فشار عملکرد پیل برابر ۱ اتمسفر و دمای عملکرد

پیل ۵۰ درجه سلسیوس است. مطابق شکل (۳) توافق خوبی بین نتایج به دست آمده از مدل حاضر و نتایج آزمایشگاهی وجود دارد و حداکثر اختلاف ۰.۷٪ است. علت این اختلاف دو بعدی بودن مدل حاضر است که محدودیت انتقال جرم در زیر صفحات جمع کننده را مدل نمی‌کند. در دانسیته جریان‌های بالا، نتایج حاضر در مقایسه با مرجع [۱۷]، به نتایج آزمایشگاهی نزدیک‌تر است؛ زیرا مدل حاضر دو فازی بوده و تاثیر شناوری به خصوص در دانسیته جریان‌های بالا، بر عملکرد پیل سوختی در نظر گرفته شده است.



شکل ۳- مقایسه منحنی پلاریزاسیون محاسبه شده با نتایج آزمایشگاهی و نتایج عددی مراجع [۱۶ و ۱۷]

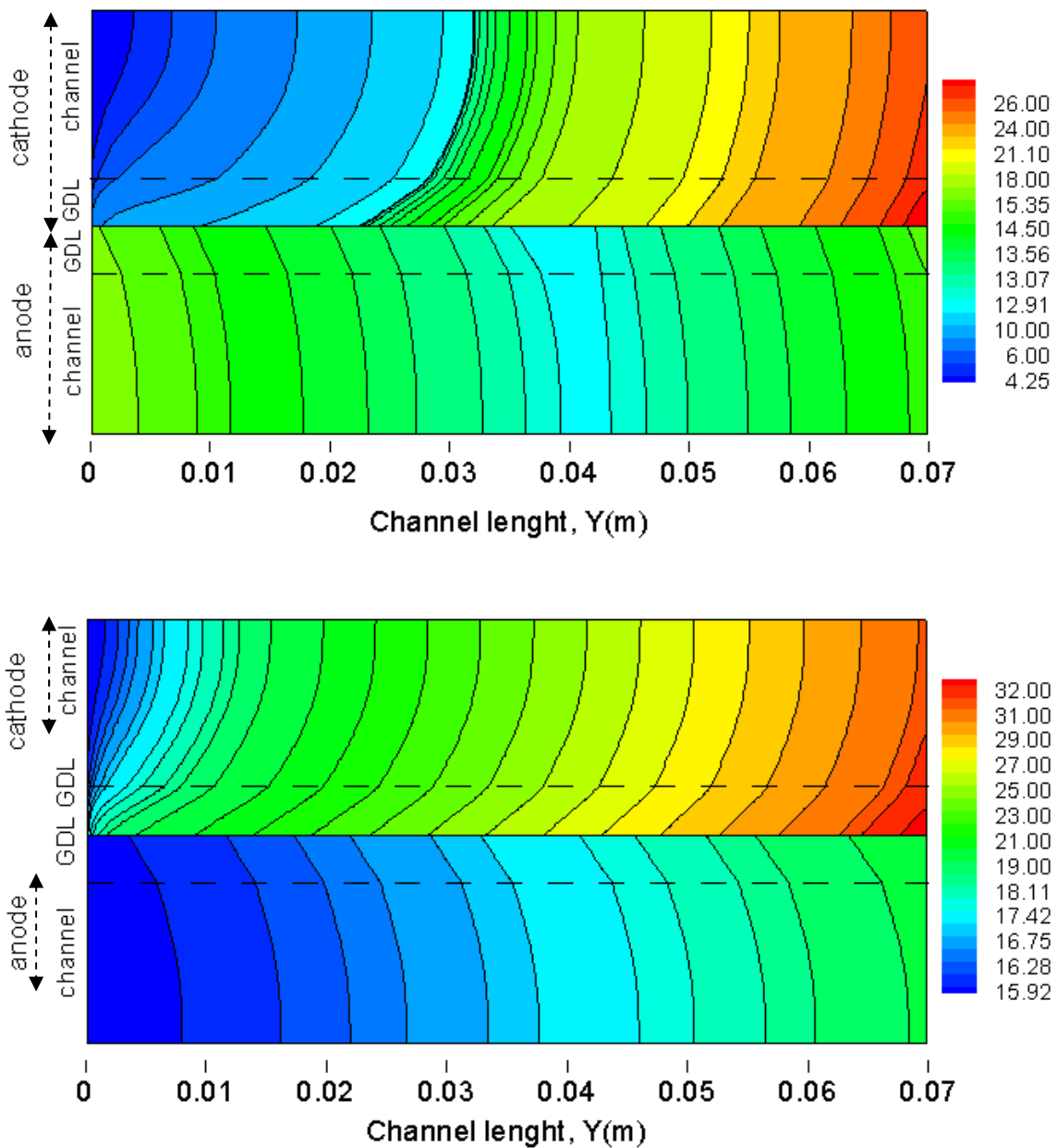
برای اطمینان از هیدراته بودن غشا و در نتیجه مینیمم شدن افت اهمی غشا، در بعضی مدل‌های پیل سوختی، سوخت و هوای کاملاً مرطوب وارد کانال‌ها می‌شود. در این وضعیت، گاز داخل الکتروود کاتد در حین عملکرد پیل می‌تواند فوق اشباع شود و حتی در دانسیته جریان‌های پایین نیز ممکن است شناوری اتفاق افتد. اخیراً در صنعت، تمایل به استفاده از رطوبت نسبی پایین در ورودی کاتد می‌باشد. در این مطالعه، یک مدل عددی، دو بعدی و دو فازی پیل سوختی غشا پلیمری در دو وضعیت: (۱) رطوبت آند ۱۰۰٪ و کاتد با رطوبت نسبی پایین ۲۵٪ (AFCL) و (۲) آند و کاتد کاملاً مرطوب و با رطوبت نسبی ۱۰۰٪ (AFCF) بسط داده شده است. هندسه و پارامترهای انتقال در جدول (۱) آورده شده است.

جدول ۱- پارامترهای پیل سوختی غشا پلیمری [۱۱]

پارامتر	مقدار
<b>پارامترهای ابعادی</b>	
ضخامت کانال، mm	1
ضخامت لایه پخش گاز، $\mu\text{m}$	300
ضخامت لایه کاتالیست، $\mu\text{m}$	10
ضخامت غشا، $\mu\text{m}$	50.8
طول پیل، mm	70
<b>پارامترهای عملکردی</b>	
دمای عملکرد پیل، K	353.15
فشار آند/کاتد، atm	1.5
استوکیومتری آند/کاتد	2
<b>پارامترهای انتقال</b>	
غلظت مولی هیدروژن و اکسیژن مرجع، $\text{mol/m}^3$	40
ثابت فارادی، C/mol	96487
کشش سطحی، N/m	0.0625
ویسکوزیته گاز آند، Pa s	$1.101 \times 10^{-5}$
ویسکوزیته گاز کاتد، Pa s	$1.881 \times 10^{-5}$
ویسکوزیته آب مایع، Pa s	$3.56 \times 10^{-4}$
ضریب پخش هیدروژن در 1.5 atm، 353K، $\text{m}^2/\text{s}$	$5.457 \times 10^{-5}$
ضریب پخش اکسیژن در 1.5 atm، 353K، $\text{m}^2/\text{s}$	$1.806 \times 10^{-5}$
ضریب پخش آب آند در 1.5 atm، 353K، $\text{m}^2/\text{s}$	$5.457 \times 10^{-5}$
ضریب پخش آب کاتد در 1.5 atm، 353K، $\text{m}^2/\text{s}$	$2.236 \times 10^{-5}$
<b>خواص مواد</b>	
تخلخل لایه پخش گاز و کاتالیست آند/کاتد	0.6
نسبت حجمی غشا در لایه کاتالیست	0.26
نفوذپذیری لایه پخش گاز آند/کاتد، $\text{m}^2$	$6.875 \times 10^{-12}$
زاویه تماس لایه پخش گاز آند/کاتد	110
وزن تعادلی غشا، kg/mol	1.1
دانسیتته غشا خشک، $\text{kg/m}^3$	$1.98 \times 10^3$

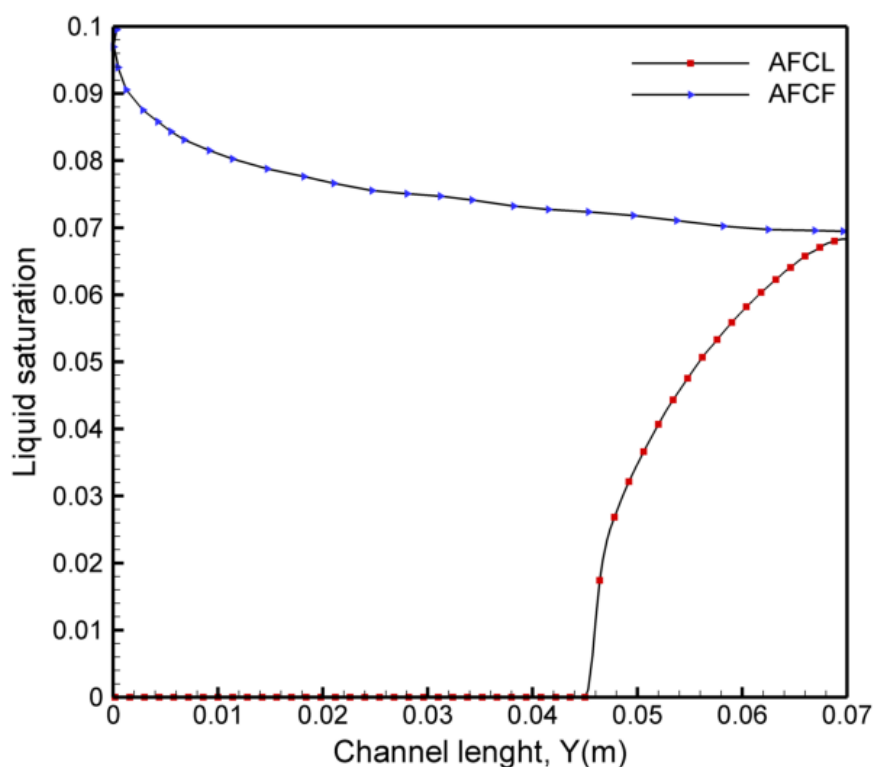
توزیع غلظت آب در کانال‌های آند و کاتد، در حالت‌های AFCL و AFCF و در یک مدل تک فاز در شکل (۴) نشان داده شده است. در شکل (۴، الف) جریان ورودی به آند کاملاً مرطوب و جریان ورودی به کاتد با رطوبت نسبی پایین می‌باشد. آب از ابتدای کانال جریان تا حدود  $L/2$ ، به دلیل بالاتر بودن غلظت آب در سمت آند و درگ الکترو - اسمزیک، از سمت آند به کاتد منتقل می‌شود. از حدود وسط تا انتهای کانال، به دلیل تولید آب ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی در لایه کاتالیست کاتد، غلظت آب در سمت کاتد افزایش

می‌یابد و پخش برگشتی از کاتد به آنند پیش می‌آید. این امر باعث می‌شود غلظت آب در سمت آنند از نیمه کانال تا انتهای آن افزایش یابد. غلظت آب در کاتد نیز به دلیل تولید آب در طول کانال افزایش می‌یابد. به دلیل کاهش دانسیته جریان در طول کانال، نرخ تولید آب در طول کانال کاهش می‌یابد، اما در اثر انتقال آب ناشی از جریان گاز (ترم جابجایی) غلظت آب در پایین دست جریان نسبت به بالادست، بالاتر است. جریان گاز باعث خارج شدن آب از پیل سوختی می‌شود. در شکل (۴، ب) جریان‌های آنند و کاتد کاملاً مرطوب می‌باشند. الگوی جریان در کانال کاتد مشابه وضعیت قبل است و غلظت آب در طول کاتد افزایش می‌یابد. در سمت آنند جهت شار آب در کل طول کانال از کاتد به آنند است که این شار بر درگ الکترو - اسمزیک غلبه می‌کند.



شکل ۴- توزیع غلظت آب در مدل تک فاز در دو وضعیت AFCL (الف: شکل بالا) و AFCF (ب: شکل پایین)

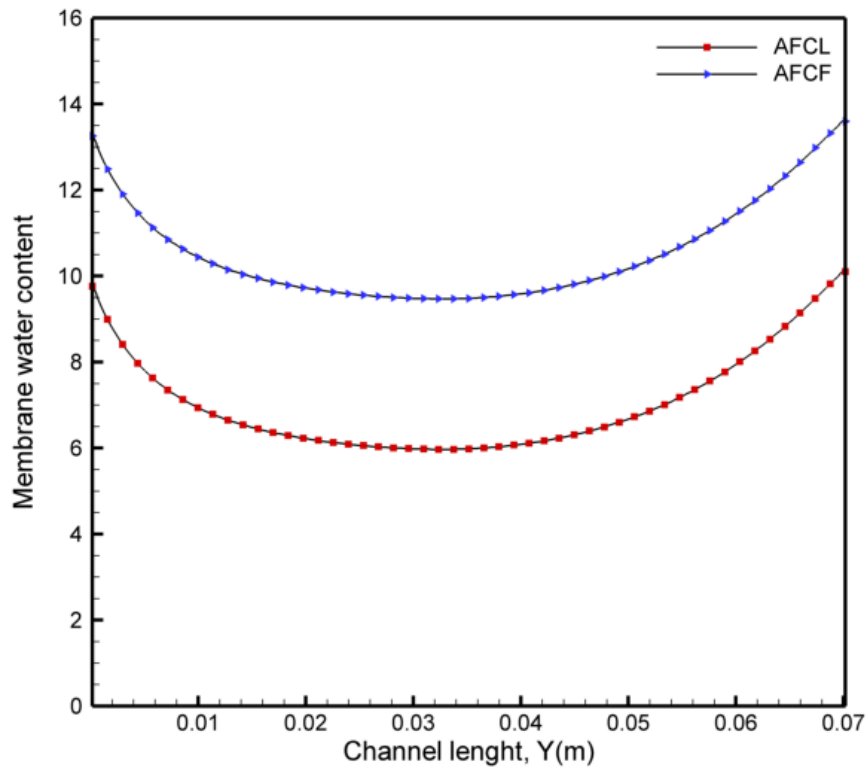
مهمترین اختلاف در مدل‌های دو فاز و تک فاز، مربوط به تغییر فاز آب است. شکل (۵) اشباع آب مایع را در فصل مشترک لایه کاتالیست/لایه پخش گاز کاند در دو حالت AFCL و AFCF نشان می‌دهد. زمانی که غلظت آب از غلظت اشباع بیشتر می‌شود آب چگالیده شده و مایع تشکیل می‌شود. در وضعیت AFCF چگالش از ابتدای کانال شروع شده و در سرتاسر لایه پخش گاز کاند، آب مایع تشکیل می‌شود. آب مایع با بستن تخلخل‌های لایه پخش گاز باعث شناوری این لایه می‌گردد. شناوری مانع رسیدن اکسیژن به لایه کاتالیست می‌شود و در نتیجه نرخ واکنش‌های الکتروشیمیایی در طول پیل کاهش یافته و عملکرد پیل افت پیدا می‌کند. این امر باعث می‌شود آب تولیدی در طول کانال کاهش یابد و در نتیجه اشباع مایع نیز کاهش می‌یابد. در شرایط AFCL چگالش در نزدیکی خروجی شروع می‌شود که مقدار و مکان شروع آن به درصد رطوبت ورودی وابسته است. با افزایش درصد رطوبت ورودی کاند، چگالش از مکانی نزدیک‌تر به ورودی شروع شده و تا انتهای لایه پخش گاز ادامه پیدا می‌کند.



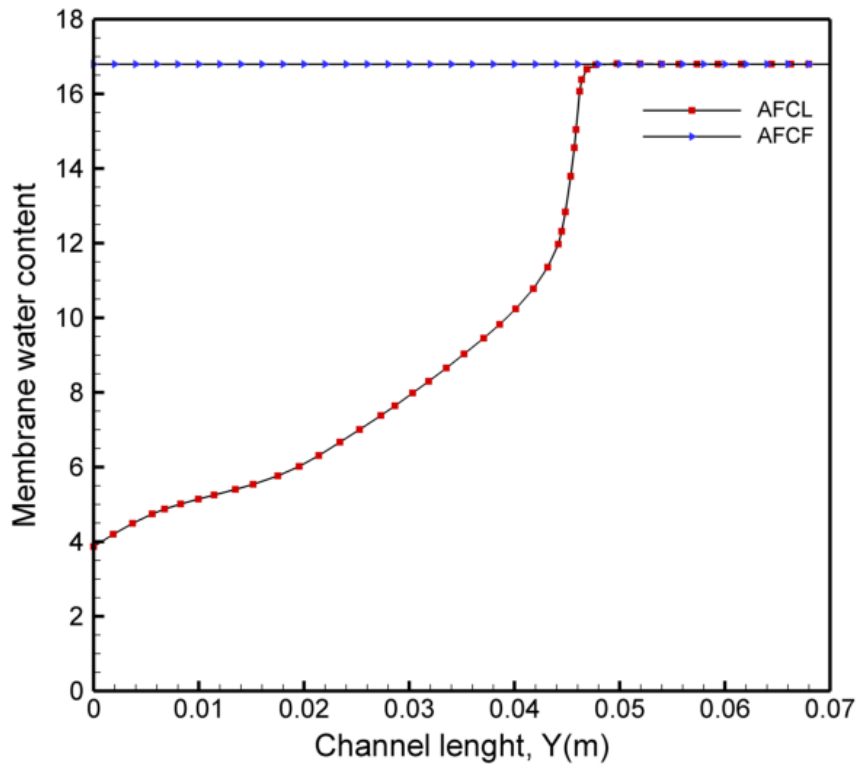
شکل ۵- اشباع آب مایع در فصل مشترک لایه کاتالیست/لایه پخش گاز کاند در دو وضعیت AFCF و AFCL

هدایت یونی غشا به محتوی آب وابسته است و تغییر فاز و اشباع آب مایع بر محتوی آب غشا اثر می‌گذارد. شکل‌های (۶) و (۷) توزیع محتوی آب در سمت آند و کاتد را در طول کانال جریان نشان می‌دهند. در هر دو وضعیت AFCL و AFCF محتوی آب در سمت آند، در طول کانال ابتدا کاهش و به سمت انتهای کانال افزایش می‌یابد. علت این امر این است که در ابتدای کانال به دلیل بزرگ بودن درگ الکترو - اسمزیک شار آب از سمت آند به سمت کاند است. در انتهای کانال، پخش برگشتی از کاتد بر درگ الکترو - اسمزیک غلبه کرده و جهت شار از کاتد به سمت آند می‌شود. مطابق شکل (۷) در وضعیت AFCF غشا در سمت کاند کاملاً هیدراته است و محتوی آب برابر  $16/8$  می‌باشد (رابطه ۲۸) و در وضعیت AFCL

محتوی آب در طول کانال افزایش می‌یابد تا غشا کاملاً هیدراته شود. علت این امر شار ورودی آب ناشی از درگ الکترو - اسمزیک و آب تولیدی از واکنش الکتروشیمیایی کاتدی می‌باشد.

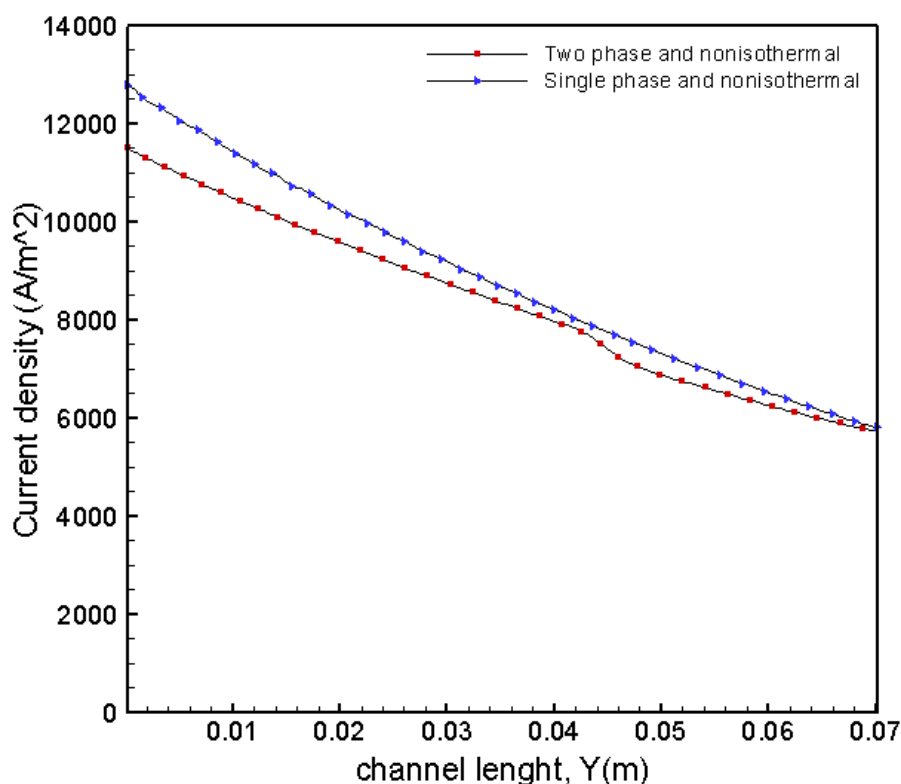


شکل ۶- محتوی آب غشا در سمت آند در دو وضعیت AFCL و AFCF



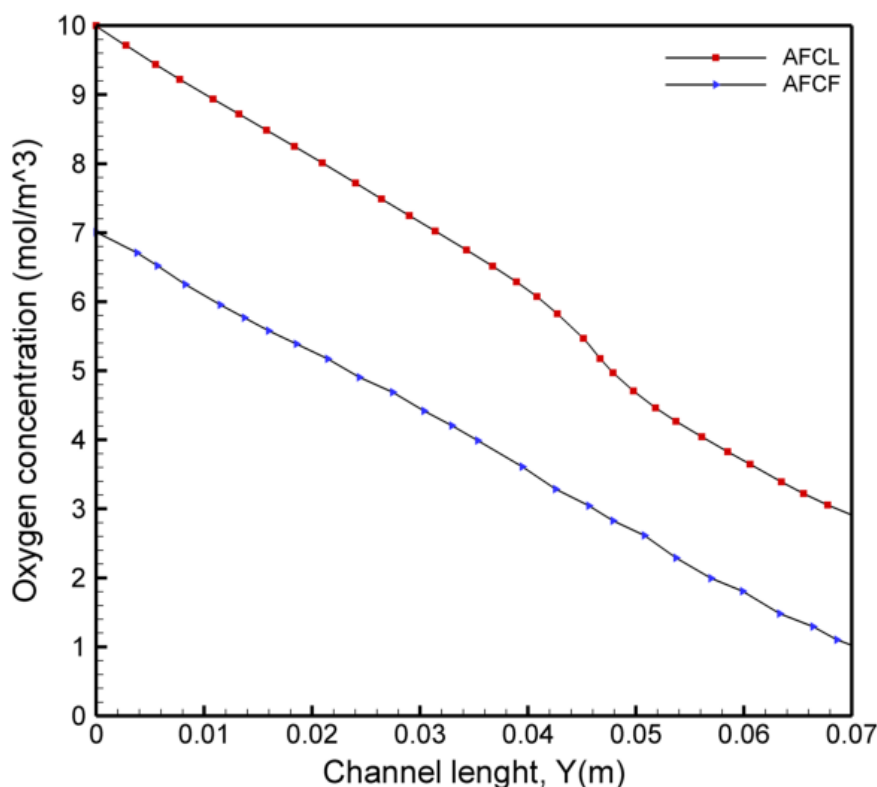
شکل ۷- محتوی آب غشا در سمت کاتد در دو وضعیت AFCL و AFCF

شناوری بر توزیع دانسیته جریان در طول کانال جریان نیز تاثیر می‌گذارد. شکل (۸) توزیع دانسیته جریان را در ولتاژ عملکرد ۰/۶ ولت برای دو مدل تک فاز و مدل دو فاز در وضعیت AFCL نشان می‌دهد. به دلیل بالا بودن نرخ جریان ورودی در کانال‌های آند و کاتد، توزیع دانسیته جریان در هر دو مدل تقریباً یکنواخت است. توزیع دانسیته جریان به دست آمده از محاسبات دو فازی نسبت به مدل تک فاز پایین‌تر است و اختلاف این دو مدل در ابتدای کانال بیشتر بوده و به سمت انتهای کانال این اختلاف کم می‌شود. این امر به دلیل تاثیر شناوری در مدل دو فازی و ایجاد مانع در برابر واکنش‌های الکتروشیمیایی می‌باشد. در مدل دو فازی و در محلی که تغییر فاز روی می‌دهد ( $y=0.045m$ ) شیب منحنی کم می‌شود و دانسیته جریان با نرخ کمتری کاهش می‌یابد. تغییرات دانسیته جریان بر توزیع اکسیژن تاثیر می‌گذارد و بر عکس.



شکل ۸- مقایسه توزیع دانسیته جریان مدل دو فاز و مدل تک فاز در وضعیت AFCL

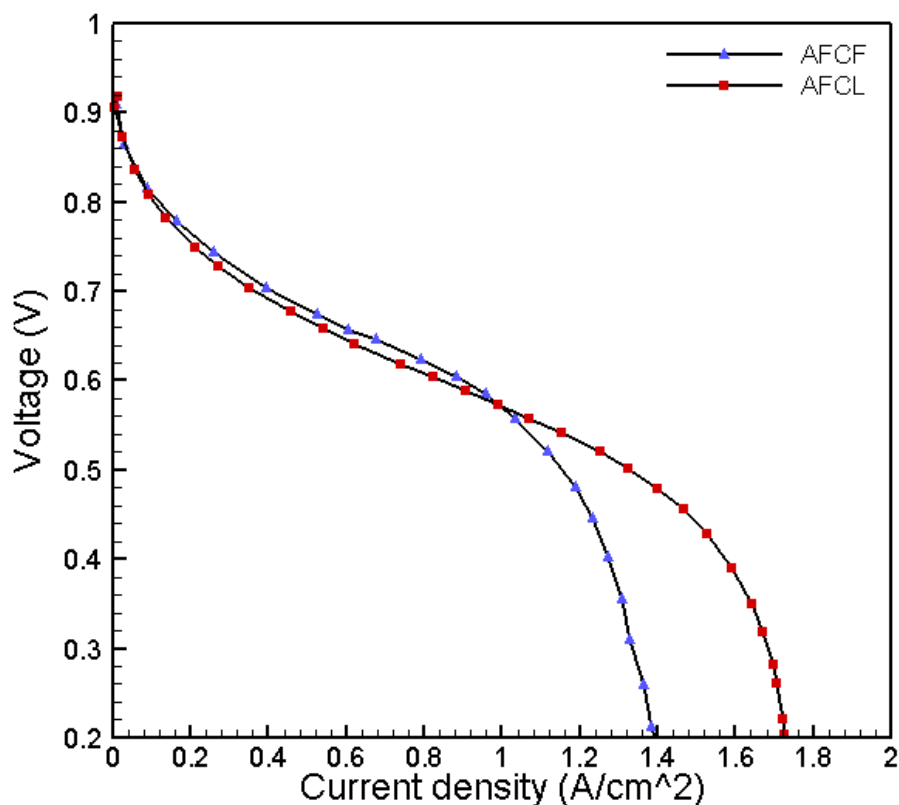
شکل (۹) تغییرات غلظت اکسیژن را در طول کانال، در فصل مشترک لایه کاتالیست/لایه پخش گاز در دو وضعیت AFCL و AFCF نشان می‌دهد. به دلیل مصرف اکسیژن در واکنش کاتدی، غلظت اکسیژن در طول ناحیه کاتد کاهش می‌یابد. در وضعیت AFCL نرخ مصرف اکسیژن در ابتدای کانال بیشتر بوده و بعد از چگالش آب، به دلیل شناوری لایه پخش گاز کاتد، اکسیژن با نرخ کمتری مصرف می‌شود و به همین دلیل شیب منحنی در انتهای کانال کمتر است. در وضعیت AFCL نرخ کاهش اکسیژن بر خلاف وضعیت قبل به دلیل اینکه چگالش از ابتدای کانال شروع می‌شود، در طول کانال تغییرات زیادی ندارد و شیب منحنی در طول کانال تقریباً ثابت است اما نرخ کاهش نسبت به وضعیت AFCL کمتر است.



شکل ۹- تغییرات غلظت اکسیژن در طول کانال جریان در دو وضعیت AFCF و AFCL

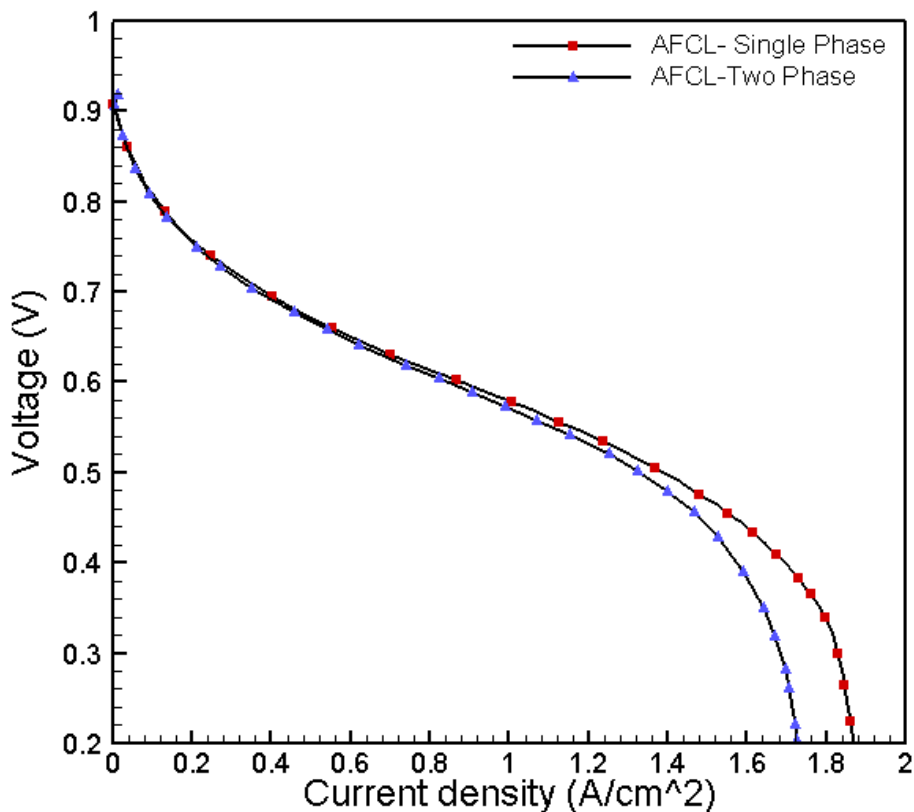
شکل (۱۰)، منحنی دانسیته جریان - ولتاژ پیل سوختی را برای دو وضعیت AFCL و AFCF نشان می‌دهد. در دانسیته جریان‌های پایین که بحث شناوری در پیل مطرح نیست، عملکرد پیل در وضعیت AFCF بهتر است؛ زیرا غلظت آب در پیل و در نتیجه محتوی آب غشا بالاتر بوده و هدایت یونی غشا بالاتر است. در دانسیته جریان‌های بالا، وقتی که کاتد دارای رطوبت نسبی پایین است، عملکرد پیل نسبت به وضعیتی که کاتد کاملاً مرطوب است بهتر می‌باشد؛ زیرا بر خلاف وضعیت AFCL که شناوری در بخشی از لایه پخش گاز اتفاق می‌افتد، در وضعیت AFCF شناوری در سرتاسر لایه پخش گاز اتفاق می‌افتد. شناوری مانع رسیدن اکسیژن به لایه پخش گاز می‌شود و عملکرد پیل افت می‌یابد.



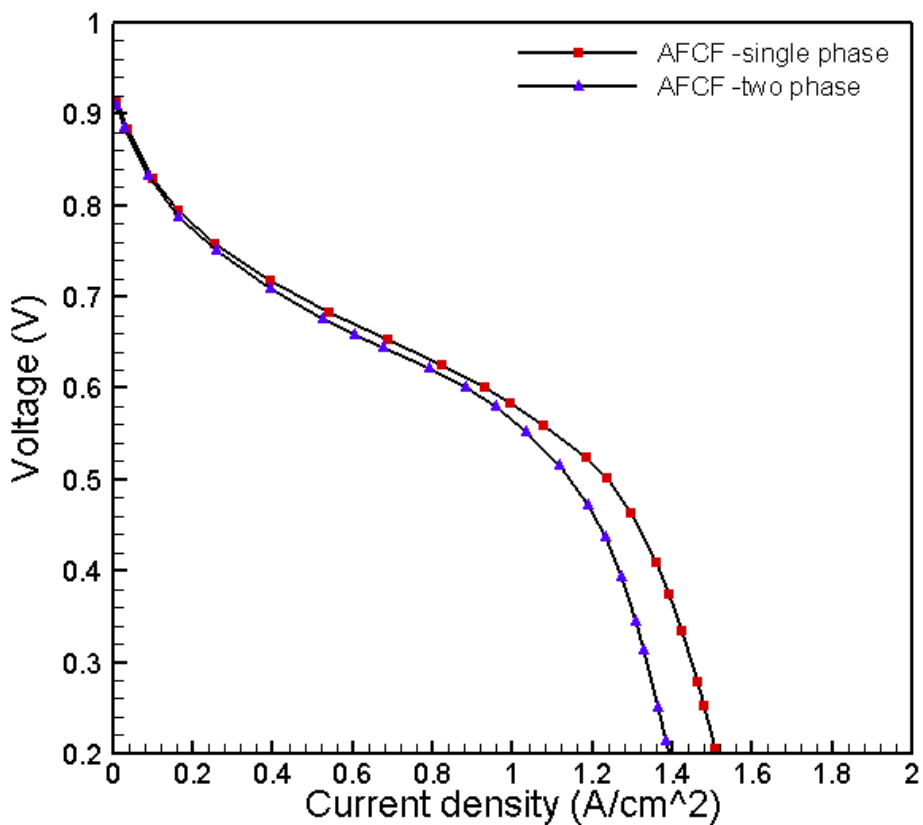


شکل ۱۰- تاثیر میزان رطوبت ورودی کاتد بر عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری

در شکل (۱۱)، عملکرد پیل سوختی در قالب منحنی دانسیته جریان - ولتاژ پیل برای وضعیت AFCL و در دو حالت مدل تک فاز و مدل دو فاز مقایسه گردیده است. در دانسیته جریان‌های پایین که احتمال تشکیل آب مایع ناچیز است، اختلاف دو مدل بسیار کم بوده و در دانسیته جریان‌های بالا به دلیل پدیده شناوری عملکرد پیل در حالت دو فاز کاهش می‌یابد. در وضعیت AFCF، به دلیل بالا بودن رطوبت ورودی کاتد، تشکیل آب مایع در دانسیته جریان‌های پایین‌تری نسبت به وضعیت AFCL رخ می‌دهد و به همین دلیل مطابق شکل (۱۲)، اختلاف مدل تک فاز و دو فاز از دانسیته جریان‌های پایین شروع می‌شود و هر چه دانسیته جریان افزایش یابد اختلاف دو مدل نیز بیشتر می‌گردد.

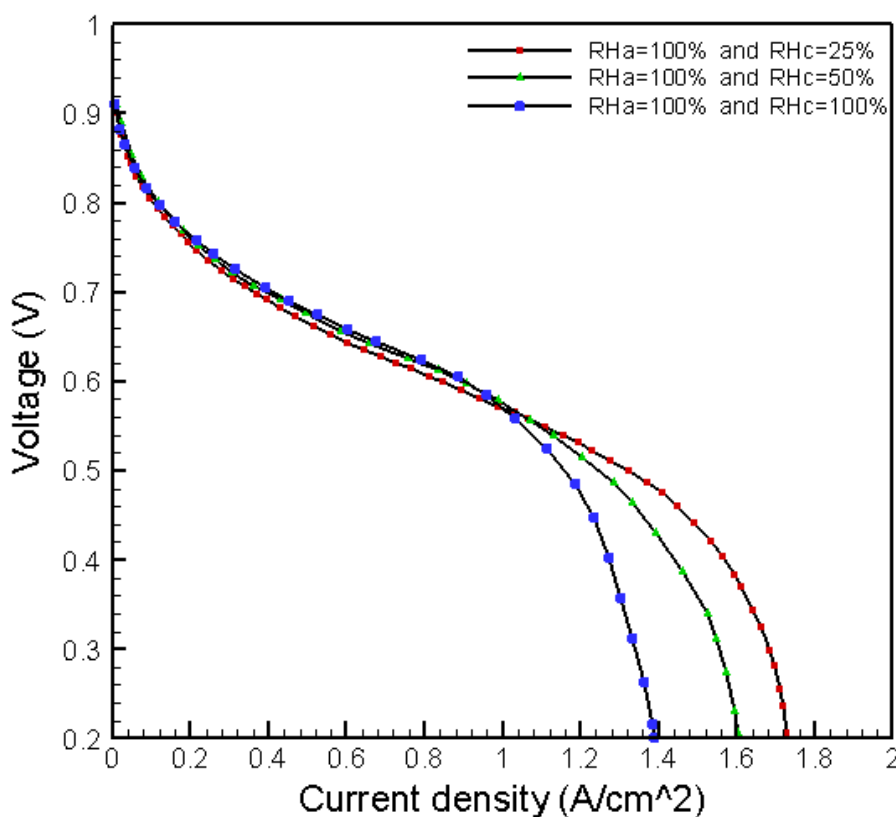


شکل ۱۱- مقایسه عملکرد پیل با مدل دو فاز و مدل تک فاز در وضعیت AFCL



شکل ۱۲- مقایسه عملکرد پیل با مدل دو فاز و مدل تک فاز در وضعیت AFCF

به دلیل هزینه تجهیزات مرطوب‌سازی گازهای ورودی و توان مصرفی که به سیستم پیل سوختی تحمیل می‌شود؛ در صنعت، تمایل بر استفاده از رطوبت نسبی پایین در ورودی کاتد می‌باشد و به همین دلیل بررسی نسبت‌های مختلف رطوبت در سمت کاتد ضروری به نظر می‌رسد. مدل دو فازی پیل سوختی غشا پلیمری در سه وضعیت: (۱) رطوبت نسبی آند ۱۰۰٪ و کاتد با رطوبت نسبی ۲۵٪ ( $RH_a=100\%$  ,  $RH_c=25\%$ )، (۲) رطوبت نسبی آند ۱۰۰٪ و کاتد با رطوبت نسبی ۵۰٪ ( $RH_a=100\%$  ,  $RH_c=50\%$ ) و (۳) آند و کاتد کاملاً مرطوب و با رطوبت نسبی ۱۰۰٪ ( $RH_a=100\%$  ,  $RH_c=100\%$ ) توسعه داده شده است. شکل (۱۳) منحنی‌های ولتاژ - دانسیته جریان را با درصدهای مختلف مرطوب‌سازی کاتد نشان می‌دهند. در دانسیته جریان‌های پایین که تغییر فاز در داخل پیل سوختی روی نمی‌دهد، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت در ورودی کاتد بهبود می‌یابد. در این وضعیت، افت اهمی نسبت به دیگر افت‌ها غالب است و این افت با افزایش محتوی آب غشا، کاهش می‌یابد. با افزایش دانسیته جریان، عملکرد پیل با افزایش درصد رطوبت کاهش می‌یابد. با افزایش رطوبت ورودی، شناوری در ناحیه وسیع‌تری از لایه پخش گاز کاتد اتفاق می‌افتد و وقتی گازهای ورودی کاملاً مرطوب هستند، شناوری در سرتاسر لایه پخش گاز کاتد اتفاق می‌افتد. این پدیده باعث می‌شود که تخلخل‌های لایه پخش گاز بسته شده و اکسیژن کمتری به لایه پخش گاز برسد و در نتیجه، عملکرد پیل افت پیدا می‌کند. چون توان پیل حاصل ضرب ولتاژ پیل در دانسیته جریان می‌باشد، پدیده‌های بیان شده اثرات مشابه‌ای بر منحنی دانسیته توان دارند و وقتی رطوبت نسبی کاتد پایین است ماکزیمم توان قابل دستیابی می‌باشد.



شکل ۱۳- منحنی ولتاژ - دانسیته جریان در سطح‌های مختلف مرطوب‌سازی کاتد

## ۵- نتیجه گیری

در این مطالعه، یک مدل دو بعدی و دو فازی پیل سوختی غشا پلیمری به منظور بررسی رفتار انتقال آب و تاثیر آن بر عملکرد پیل سوختی غشا پلیمری توسعه داده شده است. بر اساس شبیه سازی انجام شده به طور کلی نتایج زیر قابل برداشت می باشد.

- مهمترین اختلاف مدل های دو فاز و تک فاز پیل سوختی، مربوط به تغییر فاز آب است. در مدل دو فازی به دلیل چگالش آب و مسدود شدن تخلخل های لایه پخش گاز، نرخ واکنش های الکتروشیمیایی و در نتیجه عملکرد پیل افت پیدا می کند.
- درصد رطوبت ورودی کاتد به شدت بر عملکرد پیل سوختی تاثیر می گذارد. بر خلاف زمانی که گازهای ورودی به کاتد کاملاً مرطوب بوده و شناوری در سرتاسر لایه پخش گاز کاتد اتفاق می افتد، وقتی درصد رطوبت ورودی کاتد پایین باشد، تغییر فاز آب در لایه پخش گاز کاتد در قسمت انتها اتفاق می افتد و پدیده شناوری در کل طول این لایه مشاهده نمی شود.
- شناوری بر توزیع دانسیته جریان و توزیع اکسیژن تاثیر می گذارد. توزیع دانسیته جریان و اکسیژن در مدل تک فاز یکنواخت بوده و نسبت به مدل دو فاز با نرخ بیشتری در طول کانال کاهش می یابد. شیب تغییرات منحنی دانسیته جریان و اکسیژن، موقعی که جریان ورودی به کاتد کاملاً مرطوب است، در طول کانال تقریباً ثابت است؛ اما زمانی که گازها کاملاً مرطوب نباشند، در محل تغییر فاز یک تغییر شیب در منحنی ها به وجود می آید و اکسیژن با نرخ کمتری مصرف می شود.
- وقتی اکسیژن ورودی به کانال کاتد کاملاً مرطوب است، غشا در طول عملکرد پیل هیدراته است و باعث عملکرد مطلوب پیل در دانسیته جریان های پایین می شود؛ اما در دانسیته جریان های بالا که آب چگالیده می شود شناوری در سرتاسر لایه پخش گاز کاتد اتفاق می افتد و عملکرد پیل افت می یابد. وقتی اکسیژن ورودی کاملاً مرطوب نیست، عملکرد پیل در دانسیته جریان های پایین نامناسب است؛ اما در دانسیته جریان های بالا عملکرد پیل مطلوب می باشد.
- درصد رطوبت گازهای ورودی به کاتد فاکتوری تاثیرگذار بر تغییر فاز آب است و به منظور مدیریت آب در پیل سوختی غشا پلیمری به کار می رود.

## مراجع

- [1] Afshari, E., and Jazayeri, S.A., "Analysis of Heat Transport in a Proton Exchange Membrane (PEM) Fuel Cell", Am. Journal of Applied Science, Vol. 6, No. 1, pp. 101-108, (2009).
- [2] Ju, H., Wang, C.Y., Cleghorn, S., and Beuscher, U., "Nonisothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells I. Experimental Validation", Journal of the Electrochemical Society, Vol. 152, No. 8, pp. A1645-A1653, (2006).

- [3] Ju, H., Wang, C.Y., Cleghorn, S., and Beuscher, U., "Nonisothermal Modeling of Polymer Electrolyte Fuel Cells, II. Parametric Study of Low-humidity Operation", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 153, No. 2, pp. A249-A254, (2006).
- [4] Sui, P. C., and Djilali, N., "Analysis of Water Transport in Proton Exchange Membranes using a Phenomenological Model", *Journal Fuel Cell Science and Technology*, Vol. 2, pp. 1-7, (2005).
- [5] Berning, T., and Djilali, N., "Three-dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a PEM Fuel Cell- a Parametric Study", *Journal of Power Sources*, Vol. 124, pp. 440-452, (2003).
- [6] Sivertsen, B.R., and Djilali, N., "CFD-Based Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 141, pp. 65-78, (2005).
- [7] Rowe, A., and Li, X., "Mathematical Modeling of Proton Exchange Membrane Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 102, pp. 82-96, (2001).
- [8] Mishra, V., Yang, F., and Pitchumani, R., "Analysis and Design of PEM Fuel Cells", *Journal of Power Sources*, Vol. 141, pp. 47-64, (2005).
- [9] Nam, J. H., and Kaviany, M., "Effective Diffusivity and Water-saturation Distribution in Single- and Two-layer PEMFC Diffusion Medium", *International Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 46, pp. 4595-4607, (2003).
- [10] Hwang, J. J., "A Complete Two-phase Model of a Porous Cathode of a PEM Fuel Cell", *Journal of Power Sources*, Vol. 164, pp. 174-181, (2007).
- [11] Pasaogullari, U., Mukherjee, P.P., Wang, C.Y., and Chen, K.S., "Anisotropic Heat and Water Transport in a PEFC Cathode Gas Diffusion Layer", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 154, No. 8, pp. B823-B834, (2007).
- [12] Pasaogullari, U., and Wang, C.Y., "Two-phase Modeling and Flooding Prediction of Polymer Electrolyte Fuel Cells", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 2, pp. A380-A390, (2005).
- [13] Wang, Y., and Wang, C.Y., "A Nonisothermal Two-phase Model for Polymer Electrolyte Fuel Cells", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 153, No. 6, pp. A1193-A1200, (2006).
- [14] Wang, C.Y., and Cheng, P., "Multiphase Flow and Heat Transfer in Porous Media", *Int. Journal of Heat Mass Transfer*, Vol. 39, pp. 3607-3618, (1996).
- [15] Patankar, S. V., "*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*", McGraw Hill, New York, (1980).
- [16] Buchi, F.N., and Srinivasan, S., "Operating Proton Exchange Membrane Fuel Cells without External Humidification of the Reactant Gases", *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 144, pp. 2767-2773, (1997).

[17] Um, S., and Wang, C.Y., "Computational Study of Water Transport in PEM Fuel Cells", Journal of Power Sources, Vol. 156, pp. 211–223, (2006).

### فهرست نمادهای انگلیسی

فعالیت آب	:	a
غلظت جز $i$ ، $\text{mol/m}^3$	:	$C^i$
ضریب پخش جز $i$ ، $\text{m}^2/\text{s}$	:	$D^i$
وزن تعادلی الکترولیت، $\text{kg/mol}$	:	EW
ثابت فارادی، $96487 \text{ C/mol}$	:	F
دانسیته جریان تبادل، $\text{A/m}^2$	:	$i_0$
دانسیته جریان، $\text{A/m}^2$	:	I
جریان انتقالی، $\text{A/m}^3$	:	j
تابع Leveret	:	J
شار جرمی جز $k$ ، $\text{kg/m}^2 \text{ s}$	:	$\vec{J}_k$
نفوذپذیری نسبی فاز $k$	:	$k_{rk}$
نفوذپذیری هیدرولیکی، $\text{m}^2$	:	K
وزن مولکولی جز $i$ ، $\text{kg/mol}$	:	$M^i$
نسبت جرمی جز $i$ در فاز $k$	:	$mf_k^i$
تعداد الکترون	:	n
ضریب درگ الکترو - اسمزیک	:	$n_d$
فشار، Pa	:	P
ثابت عمومی گاز، $8.314 \text{ J/mol K}$	:	R
اشباع مایع	:	s
ترم چشمه در معادله انتقال	:	S
دما، K	:	T
سرعت، $\text{m/s}$	:	u
پتانسیل پیل، V	:	$V_{\text{cell}}$
پتانسیل مدار باز، V	:	$U_0$

### نمادهای یونانی

ضریب انتقال ظاهری واکنش	:	$\alpha$
زاویه تماس، $^\circ$	:	$\theta_c$

پتانسیل، V	:	$\varphi$
ضریب تخلخل	:	$\varepsilon$
نسبت حجمی فاز اینومر در کاتالیست	:	$\varepsilon_{mc}$
ضریب تصحیح انتقال اجزا	:	$\gamma_c$
رطوبت نسبی	:	$\zeta$
محتوی آب پلیمر	:	$\lambda$
نفوذپذیری نسبی فاز k	:	$\lambda_k$
ویسکوزیته، Pa.s	:	$\mu$
اضافه پتانسیل، V	:	$\eta$
هدایت یونی، S/m	:	$\kappa$
دانسیته، kg/m <sup>3</sup>	:	$\rho$
دانسیته غشا خشک، kg/m <sup>3</sup>	:	$\rho_{dry,m}$
ویسکوزیته سینماتیکی، m <sup>3</sup> /s	:	$\nu$
کشش سطحی، N/m	:	$\sigma$

#### زیرنویس‌ها و بالا نویس‌ها

آند	:	a
مویین و کاتد	:	c
الکترولیت	:	e
موثر	:	eff
جز شیمیایی	:	i
ورودی	:	in
گاز	:	g
فاز	:	k
مایع	:	l
واکنش	:	react
مرجع	:	ref
جامد	:	s
اشباع	:	sat
شرایط استاندارد، 298.15K و 101.3kPa	:	0

**Abstract**

In this study, a two dimensional, two-phase model of a proton exchange membrane (PEM) fuel cell is presented and analyzed phase change and water transport through the membrane by convection, and diffusion electro-osmotic drag. A set of governing equations, conservation of mass, momentum, species, energy and charge for gas diffusion layers, catalyst layers and the membrane regions are considered. The multiphase mixture formulation for the two-phase transport process is used and developed numerical model is treated as a single-domain. The result indicates that water transport through the membrane could effect on cathode flooding and humidification of inlet streams could control water phase change and flooding in the PEM fuel cell. The results are validated with experimental data available that are in good agreement.