

燃料電池陽極流道表面結構效應之數值模擬

劉昭忠¹ 程冠儒² 黃啟郎³

¹ 中州科技大學 電機與能源科技系

^{2,3} 中州科技大學 工程技術研究所

摘要

主要探討質子交換膜燃料電池 (PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell) 的燃料氣體 (氫氣) 在陽極流道內的傳輸行為。氫氣在陽極從流道輸入氣體, 經由擴散層和觸媒層解離成氫離子和電子, 其中電子往集電板移動, 氫離子經質子交換膜往陰極移動。因此, 燃料氣體在陽極的傳輸方式會受流道結構之影響。為了準確模擬燃料氣體在陽極流道之傳輸特性, 在數值方法上以結構性多區塊、交錯網格系統進行空間離散, 並採用有限體積法來依序疊代求解連續、動量等守恆方程式, 而流場中速度與壓力間的耦合以 PISO 演算法計算之。從計算結果得知, 凸塊高度增加, 凸塊區間的迴流效應愈加明顯, 且 Cf 值變大, 代表電流密度也隨之增加。當凸塊高度固定為 0.5, 凸塊寬度增為 1.5 倍時, 發現凸塊區間的迴流區大小與未增加凸塊寬度的差異不大, 且兩者的 Cf 值變化很小, 凸塊寬度幾乎不會影響電流密度。

關鍵字：質子交換膜燃料電池、陽極、表面結構

壹、前言

燃料電池是一種化學反應裝置, 將化學能轉變為電能。燃料氣體 (氫氣) 在陽極從流道輸入氣體, 經由擴散層和觸媒層解離成氫離子和電子, 其中電子往集電板移動, 氫離子經質子交換膜往陰極移動。因此, 氫氣在陽極的傳輸方式會受流道結構、溫度效應和燃料濃度等因素之影響, 進而改變燃料電池之效能。在過去文獻中, Lee 等人 (1999) 描述在 PEM 電池中, 燃料氣體的擴散作用對於電極的影響。Amphlett 等人 (1996, 1994) 利用電化學模式 (Electrochemical Model), 以相關條件、氣體壓力及輸出結果來模擬燃料電池的狀況。在氣體通過渠道的模擬方面, Dutta (2000) 對於氣體流量與電壓、電流作了理論的分析, 藉以了

通訊作者

姓名：劉昭忠

E-mail：c00jcl00@dragon.ccut.edu.tw

解到氣體流量對於電壓、電流的影響。Hohlein (1996)、Amphlett 及 Mann 等人 (1996) 在陽極渠道中使用甲醇 (Methanol) 分解得到氫作為燃料電池的燃料，不但可得到充分的燃料氣體供應，也不會影響燃料電池效能。至於在氫氣的使用上及在渠道的實用上，Argyopoulos 和 Scott (1999, 1999) 作了氫氣在渠道流動的實驗，並配合電極板的設計來求取最佳的狀況。Menzer (1998) 及 Hohlein (1998) 利用甲醇產生氫氣，探討燃料電池所輸出的能量功率的變化。陳馨德 (2001) 在 PEMFC 陽極流道加入微小凸塊，以週期邊界條件的二維穩態數值計算模式，模擬燃料氣體的傳輸行為，並研究陽極流道的凸塊高度對燃料電池的電流密度的影響。

從陳馨德 (2001) 和 Mickley (1954) 的文獻得知，紐賽數 (Nusselt: Nu) 數與電流密度 (Current Density: i) 兩者成正比，再由 Nu 數與斯坦頓 (Stanton: St) 數定義獲知 $Nu=St*Re*Pr$ ，從 Reynolds Analogy 可知 $St = C_f / 2$ ，其中 C_f 為摩擦阻力係數。若雷諾數 (Reynolds: Re) 數和普朗特 (Prandtl: Pr) 數為固定值時，結合上述的關係式可知電流密度 i 正比於 $C_f/2$ ， C_f 值愈大，電流密度也愈大。

基於上述之研究，本文將模擬氫氣在三維陽極流道之暫態傳輸現象，改變流道內的表面結構，藉此探討其流動特性，並計算電極板 C_f 值的大小，以初步判斷電流密度所受之影響。

貳、研究方法

一、物理及數學模式

主要是模擬氫氣在陽極流道內之傳輸現象 (圖 1, 圖 2)，其中流道下層壁面為電極板；內、外和上層壁面為分隔板。為了簡化物理模式的計算，假設不可壓縮三維層流，燃料為純氫氣和忽略重力。所需的統御方程如下：

連續方程式：

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

動量方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] \quad (2)$$

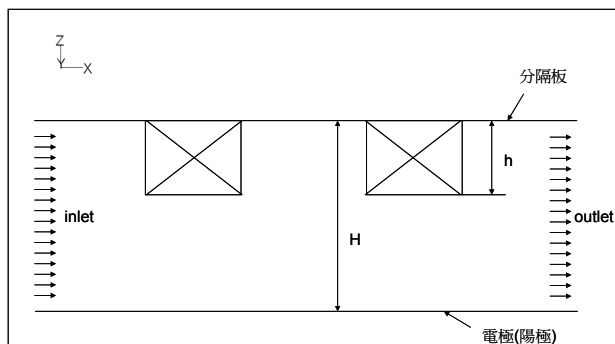


圖 1 陽極流道的幾何示意圖



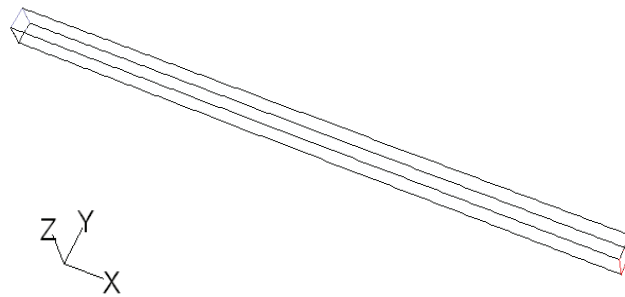


圖 2 陽極平滑直線流道外形圖

在模擬氫氣在陽極流道內之傳輸現象，所需的邊界條件為氣體具有入口速度，而出口為壓力邊界，壁面為不滑動邊界 (No Slip)，初時，陽極流道內並無氫氣流動。

二、數值模式

為了準確模擬燃料氣體在陽極流道之傳輸特性，在數值方法上以結構性多區塊、交錯網格系統進行空間離散，並採用有限體積法來依序疊代求解連續、動量等守恆方程式，而流場中速度與壓力間的藕合以 PISO 演算法計算之。

參、研究結果與討論

為了瞭解氫氣在陽極流道內之傳輸特性，本研究主要採用三維平滑直線流道和三維凸塊直線流道兩種外形設計。對平滑直線流道而言，長 (L) 2.95×10^{-2} m、寬 (W) 1.0×10^{-3} m 和高 (H) 1.0×10^{-3} m，格點總數為 94400 (圖 3)，氫氣以入口速度 4 m/s (雷諾數 200; $Re = \frac{\rho u H}{\mu}$) 進入，其中 ρ 、 u 、 H 、 μ 分別為氫氣之密度、流體速度、特徵長度，黏滯係數。初時，流道內部無氫氣存在。隨著時間增加，由於氫氣入口速度極快，而幾何外形長度很小，約在時間 3.0×10^{-4} s，流道內部流場已經發展完成。圖 4a-4c 是不同時間的流線軌跡圖，因幾何外形為平滑直線流道，故內部軌跡均為直線流動。從流道壓力分佈圖 (圖 5a-5c) 得知，時間從 1.0×10^{-4} s 到 3.0×10^{-4} s 入口處壓力最大，流體沿著流道往下游流動，壓力逐漸變小，在時間 3.0×10^{-4} s 之後，流道壓力分佈圖幾乎沒有差異。為了清楚分辨流道內流場發展完成的時間，圖 6 為電極板平面 (XY 平面) $X=0.0$ m, $Y=5.0 \times 10^{-4}$ m 位置， C_f (摩擦阻力係數: $C_f = \frac{2\tau}{\rho u^2}$) 值沿長度變化的圖形，其中 τ 表示剪應力 ($\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$)。初時，氣體速度受流道壁面黏滯力的影響，且流道內流場尚未發展完成， C_f 值有所變化，隨著時間增加，流道內流場逐漸發展完成，直至 3.0×10^{-4} s 以後， C_f 值的變化不再改變，表示流道內部流場已經發展完成。

當幾何外形為凸塊直線流道時，流道大小長 (L) 2.95×10^{-2} m、寬 (W) 1.0×10^{-3} m 和高 (H) 1.0×10^{-3} m，而凸塊大小，長 (ℓ) 為 1.0×10^{-3} m，寬 (w) 為 1.0×10^{-3} m，高 (h) 包括 h/H 為 0.25、0.5 和 0.75 三種，格點總數分別為 90400、86400 和 82400 等 (圖 7)。另外，

為了探討凸塊寬度的影響，凸塊長 (ℓ) 為 1.0×10^{-3} m、寬 (w) 為 1.5×10^{-3} m，高為 $h/H=0.5$ ，格點總數為 82400。對於凸塊高度 $h/H=0.25$ 時，同樣地，氫氣以入口速度 4 m/s (雷諾數 200) 進入，初時，流道內部無氫氣存在。從計算結果得知，在計算模擬的時間內，因凸塊高度不高，凸塊間的迴流效應並不明顯 (圖 8a-8c)。圖 9 是不同時間內直線流道壓力分佈圖，從圖中也可獲知，凸塊間的壓力往下游方向變小，雖同屬低壓區，但變化不甚強烈，造成凸塊間的迴流效應不甚明顯。當凸塊高度為 $h/H=0.5$ 和 $h/H=0.75$ ，初時，各凸塊間的迴流區已出現，隨著時間增加，凸塊間的迴流效應愈加明顯 (圖 10a-10c，圖 12a-12c)。從圖 10a-10c 和圖 12a-12c 也得知，凸塊高度增加，凸塊間的迴流效應也愈強。圖 11a-11c 和圖 13a-13 為不同時間凸塊間的壓力分佈圖，從圖形獲知，凸塊間的壓力隨著下游方向變小，且相對於流道內之壓力仍屬低壓區，固有迴流產生。至於凸塊高度 $h/H=0.5$ ， $w=1.5 \times 10^{-3}$ m 時，雖增加凸塊寬度，增加方向與氫氣流動方向平行，但因流道內凸塊的間隔距離變小，故迴流效應還是比凸塊高度 $h/H=0.5$ ， $w=1.0 \times 10^{-3}$ m 的明顯 (圖 14a-14c)。

由文獻 (Mickley, 1954, 陳馨德, 2001) 所述，Nu 數 (紐賽數： $Nu = hL/k_{fluid}$) 與電流密度 i 兩者成正比，再由 Nu 數與 St 數定義了解 $Nu=St*Re*Pr$ ，從 Reynolds Analogy 可知 $St=C_f/2$ ，($C_f/2 = Nu/Re*Pr \equiv St$)。若 Re 數和 Pr 數 (普朗特數： $Pr = \nu/\alpha$) 為固定值時，結合上述的關係式可知 i 正比於 $C_f/2$ ， C_f 值愈大，電流密度也愈大。其中 h 、 L 、 k_{fluid} 、 ν 、 α ，分別為熱對流係數、特徵長度、流體熱導率、動黏滯係數、熱擴散率。

當凸塊高度增加，凸塊間的迴流區變大且變強，會往下擠壓流道內的流場，改變氫氣沿電極板流動的摩擦力，亦即氫氣沿電極板流動的 C_f 值會有所變化。圖 15a-15c 是不同時間內，比較平滑直線流道和不同高度與寬度的凸塊直線流道，在電極板平面 (XY 平面) $X=0.0$ m， $Y=5.0 \times 10^{-4}$ m 位置， C_f 值沿流道長度變化的圖形。由圖形得知，除平滑直線流道外，不同高度與寬度的凸塊直線流道，因凸塊間隔相等，導致 C_f 值有週期性波峰波谷的變化。在凸塊高度 $h/H=0.75$ ， C_f 值最大，而 $h/H=0.25$ ， C_f 值最小，至於在 $h/H=0.5$ 時，無論增不增加凸塊寬度， C_f 值幾乎相等。代表凸塊高度增加，電流密度也增加，而凸塊寬度幾乎不會影響電流密度。

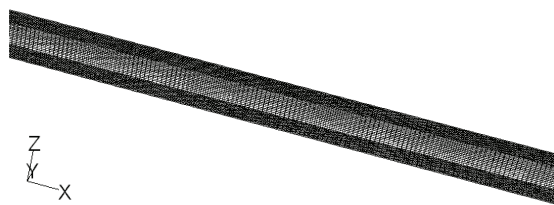


圖 3 陽極平滑直線流道局部網格示意圖



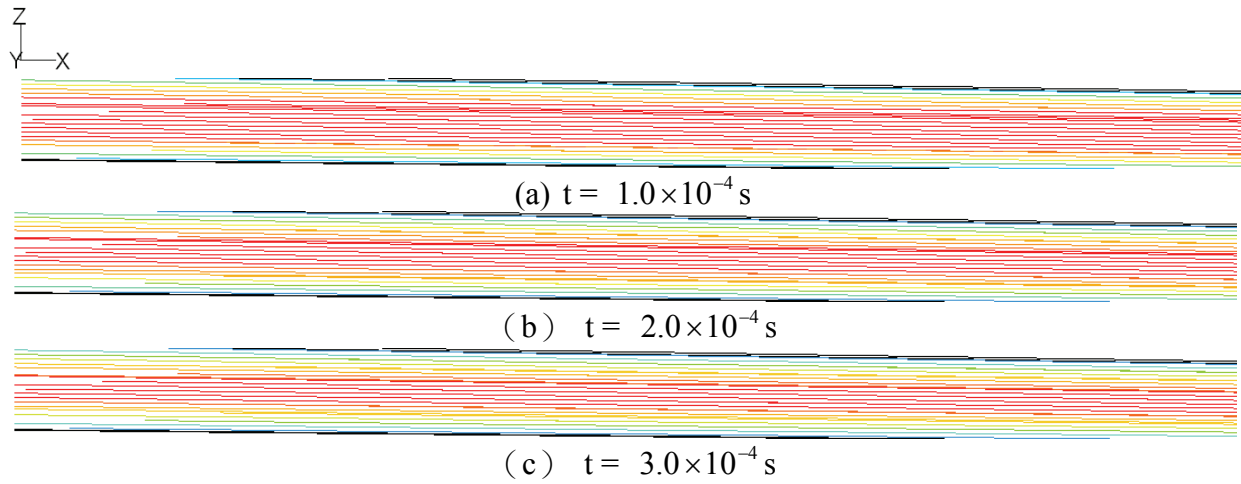


圖 4 不同時間內，平滑直線流道軌跡圖

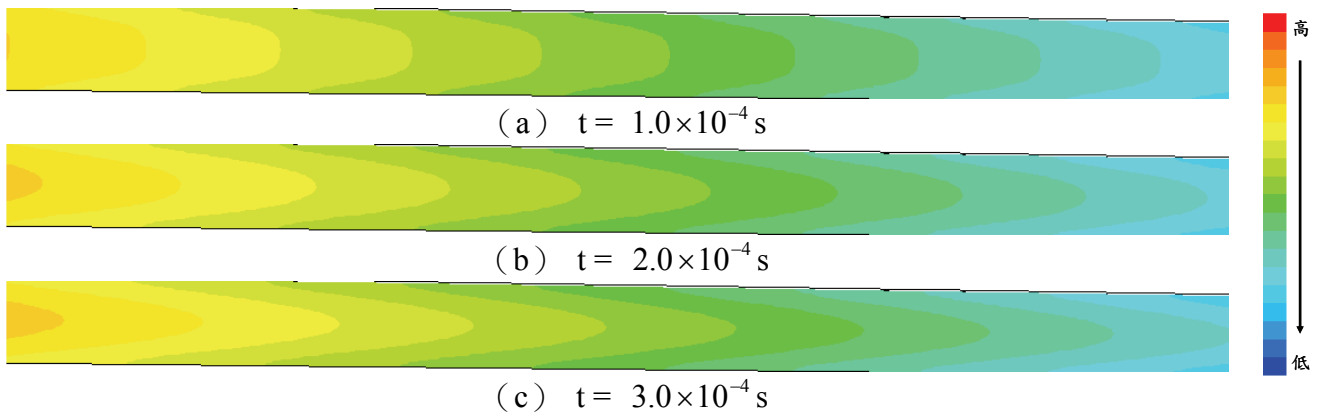


圖 5 不同時間內，平滑直線流道壓力圖

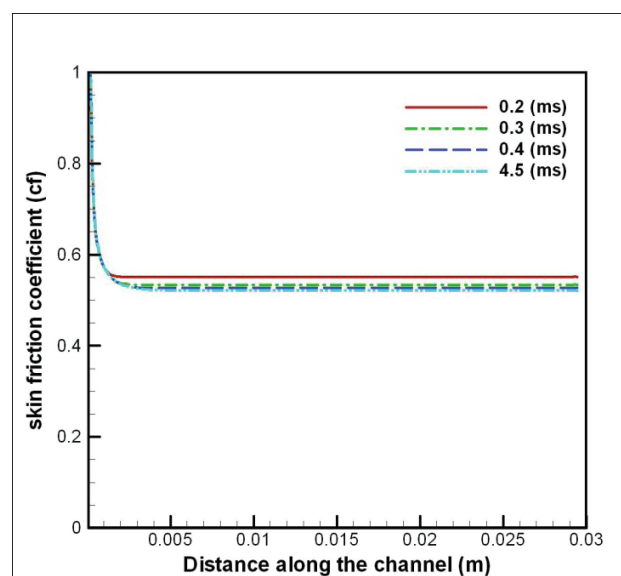


圖 6 不同時間內，在電極板平面 (XY 平面) $X=0.0 \text{ m}$ ， $Y=5.0 \times 10^{-4} \text{ m}$ ， C_f 沿流道長度的變化圖

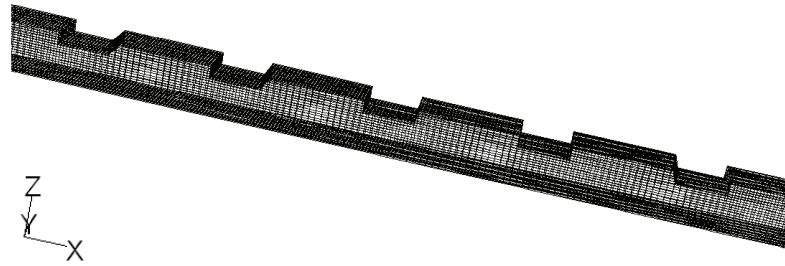


圖 7 陽極凸塊直線流道局部網格示意圖

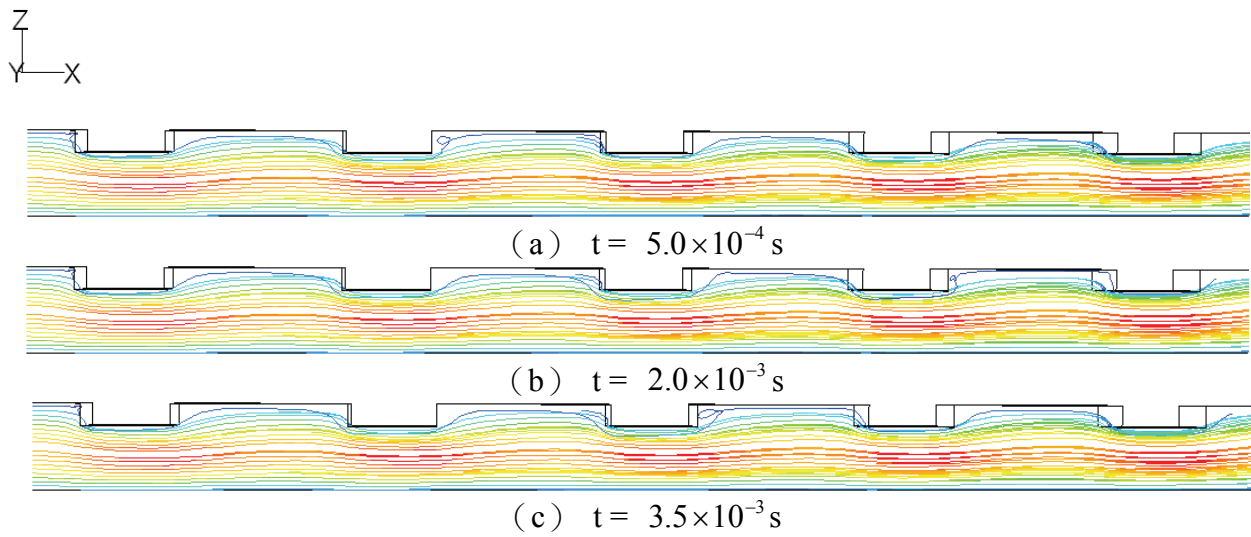


圖 8 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.25$ 直線流道軌跡圖

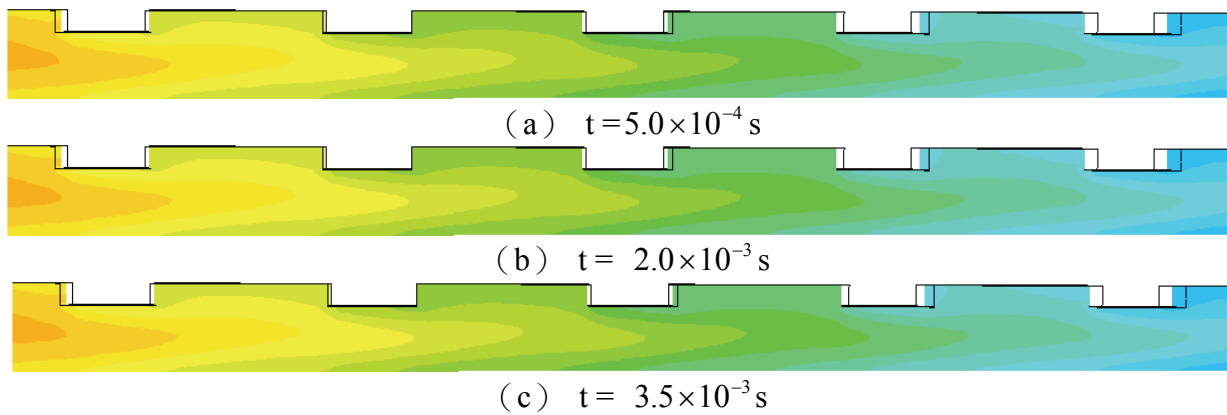


圖 9 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.25$ 直線流道壓力圖



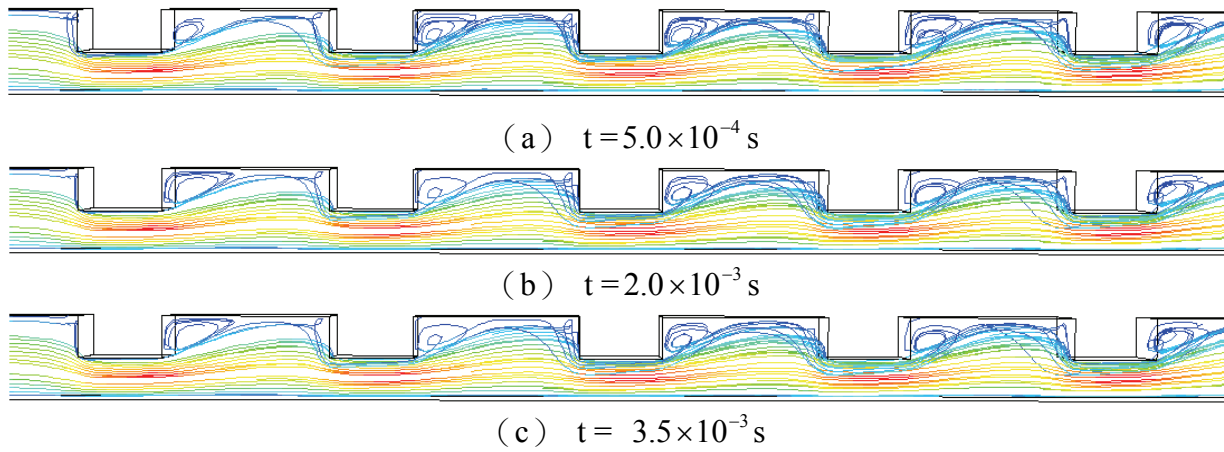


圖 10 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.5$ 直線流道軌跡圖

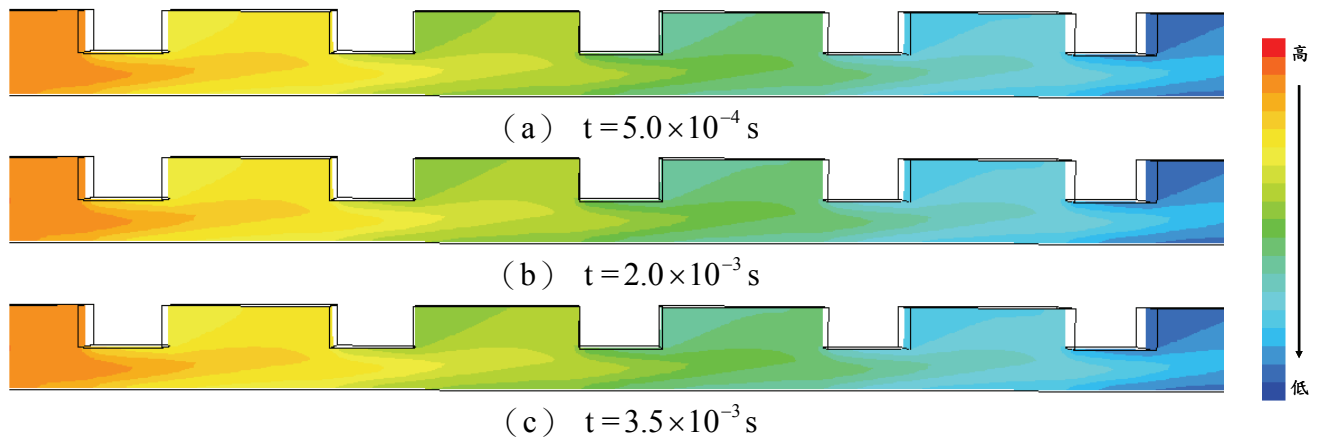


圖 11 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.5$ 直線流道壓力圖

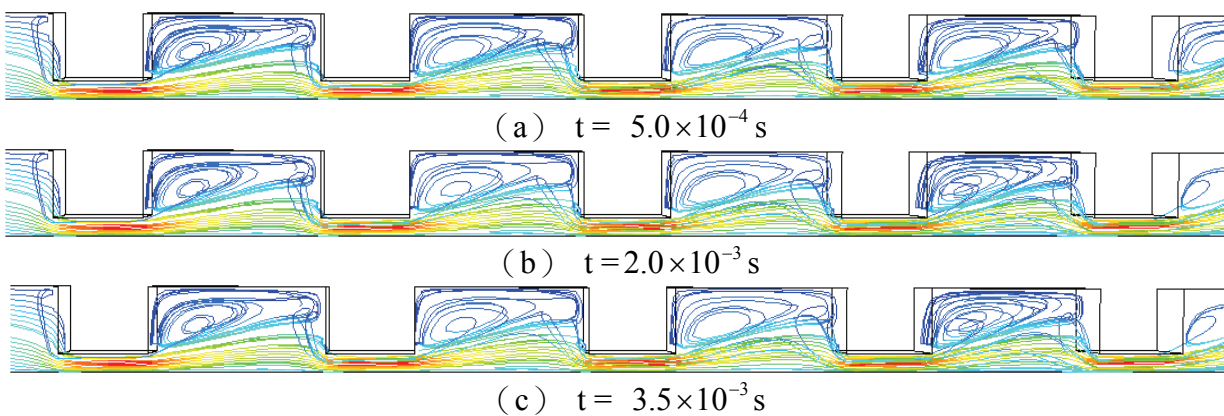


圖 12 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.75$ 直線流道軌跡圖

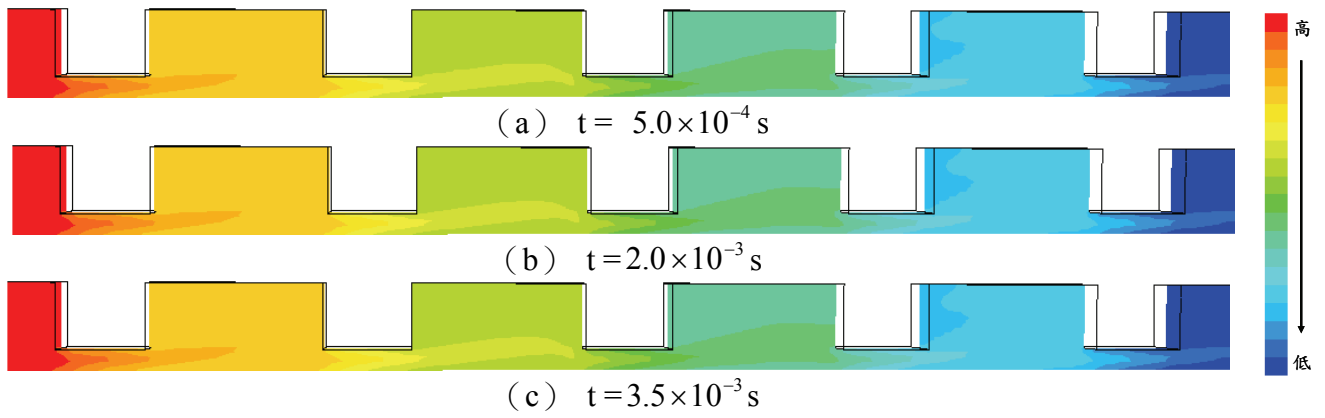


圖 13 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.75$ 直線流道壓力圖

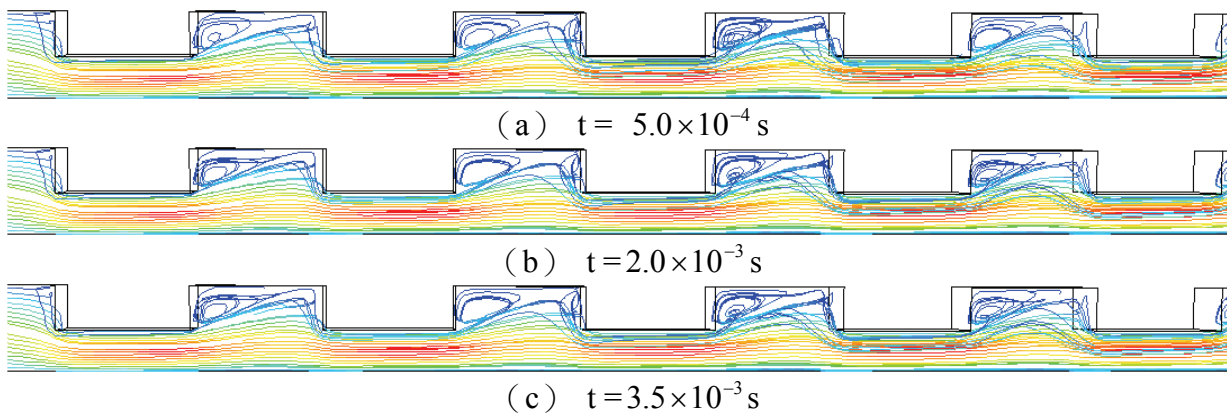
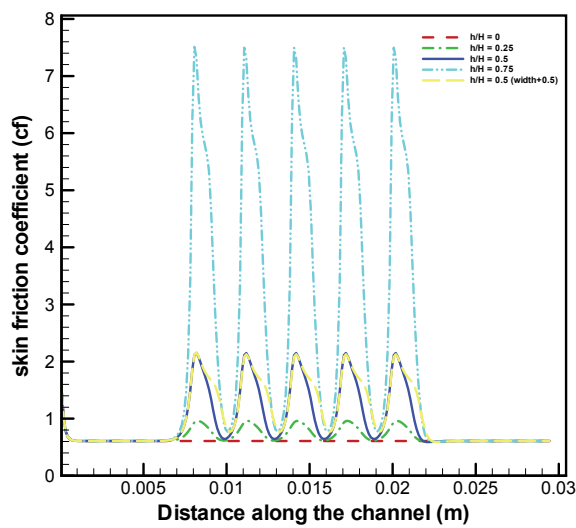
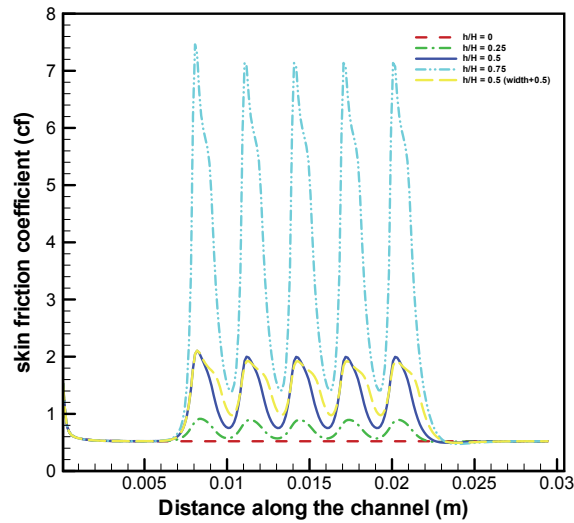


圖 14 不同時間內，凸塊高度 $h/H=0.5$ ， $w=1.5$ mm 直線流道軌跡圖

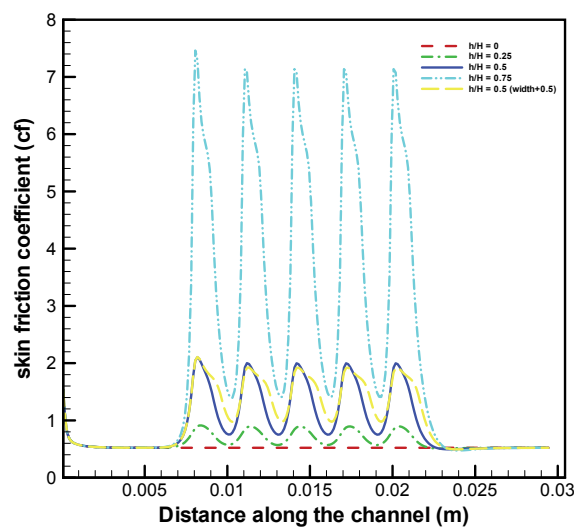


(a) $t = 1.0 \times 10^{-4}$ s





(b) $t = 1.0 \times 10^{-3} \text{ s}$



(c) $t = 4.5 \times 10^{-3} \text{ s}$

圖 15 不同時間內，比較平滑直線流道和不同高度與寬度的凸塊直線流道在電極板平面(XY 平面) $X=0.0 \text{ m}$ ， $Y=5.0 \times 10^{-4} \text{ m}$ ， C_f 沿長度的變化圖

肆、結 論

以數值方法計算氫氣在陽極流道內之傳輸特性，為了探討陽極流道表面結構效應之影響，在此，採用三維平滑直線流道和三維凸塊直線流道兩種外形設計。在凸塊高度 (h/H) 為 0.25、0.5 和 0.75 三種外形條件下，從計算結果得知，凸塊高度為 0.25 時，凸塊區間已有迴流區產生。凸塊高度為 0.5 時，凸塊區間的迴流區有變大和變強的趨勢。當凸塊高度增為 0.75 時，迴流區大小幾乎等於整個凸塊區間的空間。至於 C_f 值大小，以凸塊高度為 0.75 最大，

凸塊高度為 0.5 次之，凸塊高度為 0.25 最小，但全部的凸塊流道設計均大於直線流道設計。藉由文獻 (Mickley, 1954, 陳馨德, 2001) 所知，Cf 值增加，代表電流密度增加。因此，在陽極流道內設計凸塊會增加電流密度，尤其凸塊高度為 0.75 效果更好。在凸塊高度固定為 0.5，凸塊寬度增為 1.5 倍時，發現凸塊區間的迴流區大小與未增加凸塊寬度的差異不大，且兩者的 Cf 值變化很小，代表在這計算條件下，凸塊寬度幾乎不會影響電流密度，但若要瞭解在固定凸塊高度下，凸塊寬度的大小是否有影響電流密度，則需有更多的計算結果才能獲得探討。

參考文獻

- [1] H. S. Mickley, R. C. Ross, A. L. Squyers, and W. E. Stewart (1954) . NACA Technical Note 3208.
- [2] Woo-kum Le, Chien-Hsien Ho, J. W. Van Zee and Mahesh Murthy (1999) . The effect of compression and gas diffusion layers on the performance of a PEM fuel cell. *Journal of Power Sources*, vol.84, pp. 45-51.
- [3] J. C. Amphlett, F.F .Mann, B. A. Peppley, P. R. Roberge and A. Rodrigues (1996) . A model predicting transient responses of proton exchange membrane fuel cells. *Journal of Power Sources*, vol. 61, pp. 183-188.
- [4] P. Costamagna, E. Arato, E. Achenbach and U. Reus (1994) . Fluid dynamic study of fuel cell devices: simulation and experimental validation. *Journal of Power Sources*, vol.52, pp. 243-249.
- [5] S. Dutta, S. Shimpallee and J. W. Van Zee(2000) . Three-dimensional numerical simulation of straight channel PEM fuel cells. *Journal of Applied Electrochemistry*, vol.30, pp. 135-146.
- [6] B. Hohlein, M. Boe, J. Bogild-Hansen ,P. Brockerhoff, G.. Colzman, B. Emonts, R. Menzer and E. Riedel (1996) . Hydrogen from methanol for fuel cells in mobile systems: development of compact reformer. *Journal of Power Sources*, vol.61, pp. 143-147.
- [7] J. C. Amphlett, R. F. Mann and B. A. Peppley (1996) . On board hydrogen purification for ateam reformation/PEM fuel cell vehicle power plants. *Int. J. Hydrogen energy*, vol. 21, no. 8, pp. 673-678.
- [8] P. Argyropoulos, K. Scott and W. M. Taama (1999) . One-dimensional thermal model for direct methanol fuel cell stocks Part1. Model development. *Journal of Power Sources*, vol. 79, pp. 169-183.
- [9] P. Argyropoulos, K. Scott and W. M. Taama (1999) . One-dimensional thermal model for direct methanol fuel cell stocks Part2. Model based parametric analysis and predicted temperature profiles. *Journal of Power Sources*, vol. 79, pp. 184-198.



- [10] R. Menzer and B. Hohlein (1998) . Analysis of energy and water management in terms of fuel-cell electricity generation. *Journal of Power Sources*, vol. 71, pp. 294-301.
- [11] K. Scott, W. M. Taama and P. Argyropoulos (1998) . Engineering aspects of the direct methanol fuel cell system, Accepted for publication. *Journal of Power Sources*.
- [12] 陳馨德 (2001) 。燃料電池氫氣燃料在流道中傳輸現象之研究。私立中原大學機械工程學系碩士論文。

The Numerical Simulation for Surface Structure Effect in the anode channel of PEMFC

Chao-Chung Liu¹, Guan-Ru Cheng², Chi-Lang Huang³

¹Department of Electrical Engineering and Energy Technology, Chung Chou University of Science and Technology

^{2,3}Graduate School of Engineering Technology, Chung Chou University of Science and Technology

Abstract

The main purpose of this study is to calculate the transport phenomena of fuel gas in the anode channel of proton exchange membrane fuel cells (PEMFC). In this code, the structured single-block and staggered grid system are adopted for discretization of the space domain, while the finite volume method is applied to solve iteratively the governing equations of mass and momentum. The coupling among the velocities and pressure is handled by PISO methods. The transport characteristics of flow field in the anodic Channel are presented with the variant parameter. Furthermore, it is investigated the relation between the electric current density and surface structure effect in anode channel.

Keywords : PEMFC, Anode Channel, Surface Structure

