



高溫蛇形質子交換膜燃料電池反應物分佈情形之數值模擬

A Numerical Simulation on the Reactants Distribution in the High Temperature Proton Exchange Membrane Fuel Cell with Serpentine Channel

蔡錦山¹ 蔡杰儒² Chin-Shan, Tsai¹, Chieh-Ru, Tsai²

南榮科技大學工程科技研究所副教授¹ 國立成功大學電機工程系學生²

摘要

本研究主要是以三維多物種傳輸之物理模型,探討高溫蛇形質子交換膜燃料電池反應物之分佈情 形。本文所模擬之高溫質子交換膜燃料電池,流道結構為三蛇形、其寬度×高度×長度尺寸分別為 0.7847mm×1mm×20mm;分析範圍包括氣體流道、陽極、陰極及質子交換膜,所使用之統御方程式為 質量守恆方程式、動量守恆方程式、物種守恆方程式及電荷守恆方程式,利用有限元素軟體COMSOL Multiphysics求數值解。經由數值模擬結果顯示,增加多孔性材質的孔隙率可提昇燃料電池之性能。燃 料電池中陽極氫氣及陰極氧氣之單位體積莫耳濃度沿著流動方向而降低;水蒸汽之單位體積莫耳濃度 則隨著流動方向而升高;而最高法向離子電流密度發生於流道入口處。

關鍵字:三維多物種傳輸、高溫蛇形質子交換膜燃料電池、孔隙率、法向離子電流密度

一、前言

由於能源之生產與消費跟地球的溫室效應有密切關係,而導致溫室效應的原因, 主要來自於燃燒石化燃料時所排放之二氧化碳。然而,目前石化燃料所提供的能源約 佔世界能源總量的80%,且每年以3%的幅度在增加,預計於2020年會增加趨近2倍, 到2025年時則會增加達到3倍(Fu et al., 2007)。故提高能源的利用率和積極發展環保與 高效率能源,儼然已成為21世紀發展的重要課題之一。開發新能源、提高國家能源生 產力及降低二氧化碳排放量亦為目前學術研究當務之急,而再生能源中之燃料電池是 一種可經由電化學反應將燃料轉化成電能的發電機,具有低污染、高效率、無噪音及 低震動等優點。



燃料電池依電解質與操作溫度可區分為鹼性燃料電池(alkaline fuel cell, AFC)、固 態氧化物燃料電池(solid oxide fuel cell, SOFC)、直接甲醇燃料電池(direct methanol fuel cell, DMFC)、磷酸燃料電池(phosphoric acid fuel cell, PAFC)、熔融碳酸鹽燃料電池 (molten-carbonate fuel cell, MCFC)及質子交換膜燃料電池(proton exchange membrane fuel cell, PEMFC) (Kordesch and Simader, 1996; 鄭煜騰、鄭耀宗, 1997; 吳千舜、諸 柏仁, 2004; 黃鎮江, 2005)。

質子交換膜燃料電池依其操作溫度可分成低溫型(操作溫度為室溫~90°C, 膜電 極組材質為氟碳系列)、中溫型(操作溫度為100~130°C, 膜電極組材質為全氟磺酸 聚氟碳化物/無機奈米粒子, perfluorocarbon sulfonic acid(PFAS)/inorganic nano-particle) 及高溫型(操作溫度為室溫140~200°C, 膜電極組材質為聚苯咪唑, polybenzimidazole (PBI))等三種(元智大學燃料電池中心, 2015)。

目前有關質子交換膜燃料電池性能之研究主要為低溫型,諸如Philip et al. (1999) 認為改善質子交換膜燃料電池的性能,可以從電極間的接觸電阻或提高電子的傳導性 著手;另外流道的設計也會影響電池性能,因流道密度越高,氣體反應面積愈大,而 肋的面積相對減少,那肋與電極接觸面積也就減少,以至於收集電子的面積變少,內 電阻也會隨之提高,所以需求取最佳平衡值。Berning et al. (2002)模擬一個三維的燃料 電池系統,探討燃料電池中反應物濃度、溫度、電流密度及質傳率的分佈。Berning et al. 在其研究中,將陰極催化層界面處的電流密度分佈作無因次化分析後發現,當平 均電流密度較小時(*i*=2000A/m²),其電流的無因次化分佈較均勻,當電流密度較高時 (*i*=14000A/m²),在陰極入口處的局部電流密度無因次化可以高達三倍。另外,燃料 電池在產生反應時溫度最高的地方是在質子交換膜內,原因是因為聚合物電解質的導 電性較低所致,一般來說燃料電池的陰極側溫度會比陽極側還要來的高一些。

Um and Wang (2004)利用模擬方式,比較三維指叉式流道與直通式流道之性能, 在其研究中指出指叉式流道電流密度較傳統直通式流道高40%,主要原因是指叉式流 道可增加氣體進入反應區的濃度。Singh et al. (1999)在其研究中顯示單一燃料電池最 大的電壓損失源自於陰極氧氣的緩慢反應。Grujicic et al. (2004)探討氧氣和氫氣的供 給變化對指叉型質子交換膜燃料電池之電子電位及質子電位的影響,並以催化層中團





塊模式(agglomerate model)計算電流密度,由模擬之結果,發現提高陰極入口壓力、 肋和氣體擴散層(gas diffusion layer, GDL)接觸的長度或減少陰極擴散層的厚度,可改 善電流─電壓曲線。

Seel et al. (2009)在其研究中,發現以聚苯咪唑作為膜電極組(PBI-based membrane) 材質之高溫型質子交換膜燃料電池,由於具有較快之反應速率及較佳之水管理,因此 其性能優於傳統之低溫型質子交換膜燃料電池。PBI-based membrane之高溫型質子交 換膜燃料電池具有低電滲透性(electro-osmotic)及高質子傳導性(proton conductivity)之 優點,可簡化燃料電池之設計及降低維修成本,因此成為PEMFC的發展趨勢(Seel et al., 2009),本文將以三蛇形流道(triple serpentine channel)之高溫型PEMFC作為研究對象。

二、高溫蛇形質子交換膜燃料電池物理模型

本研究主要是針對高溫蛇形質子交換膜燃料電池,以物理耦合軟體 COMSOL Multiphysics 作為分析工具,並提出合理可行之設計、分析方法與數值分析,探討其 反應物分佈情形。

(一)幾何形狀與尺寸

本文所研究之高溫質子交換膜燃料電池,為三維多物種傳輸之數值模型,其流道 型式為三蛇形,模擬區域則包括陽極、質子交換膜及陰極三個部分,其中陽極、陰極 由氣體流道出入口、雙極集電板、氣體擴散層及觸媒層所組成。為簡化問題,將流道 出入口、集電板及觸媒層視為邊界條件;本研究之物理模型如圖一所示,所模擬之流 道寬度×高度×長度尺寸分別為0.7847mm×1mm×20mm。

(二) 基本假設

本文利用數值模擬之計算結果,探討高溫蛇形質子交換膜燃料電池之反應物分佈 情形,為了簡化方程式的困難性,針對模型做了以下之假設:

1. 忽略重力場及磁力場之影響,且流場為穩態之層流流場。

2. 燃料電池之溫度場為均勻分佈。

3. 所有反應物及生成物均為氣體,且為不可壓縮之理想氣體、牛頓流體。



4. 流體的黏滯係數與密度均為常數。

- 5. 陽極流體為氫氣、水蒸汽;陰極流體為氧氣、水蒸汽及氮氣。
- 6. 擴散層及質子交換膜為均質、等向之多孔性介質。
- 7. 質子只能在質子交換膜中傳輸;電子則僅能在固相中傳輸。

(三) 統御方程式

分析高溫蛇形質子交換膜燃料電池所使用之統御方程式,主要為質量守恆方程式、 動量守恆方程式、物種守恆方程式及電荷守恆方程式。

多孔性介質中之流體流動情形,可以質量守恆方程式及動量守恆方程式描述,而 質量守恆方程式如式(1)及式(2)所示:

$$\nabla \cdot \left(\rho \vec{u}\right) = S_u \tag{1}$$

$$S_u = \sum_i S_a \frac{i_{ct,i} M_i}{n_i F} \tag{2}$$

式中 ρ 為混合物密度(kg/m³)、 \vec{u} 為速度向量(m/s)、 S_u 為平衡觸媒層電化學反應的質量 消耗與生成之源項(kg/m³·s)(在觸媒層以外的區域 $S_u = 0$)、 S_a 為單位體積的反應表 面積(m²/m³)、 i_{ct} 為局部轉移電流密度(A/m²)、M為莫耳質量(kg/mol)、n為參與反應 之電子數、F為法拉第常數(Faraday's constant)。

多孔性介質中之流體速度可由式(3)之動量守恆方程式(Brinkman方程式)求得:

$$\left(\frac{\mu}{\kappa} + S_u\right)\vec{u} = \nabla \cdot \left[-p\vec{I} + \frac{\mu}{\varepsilon} \left(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{u})\right)\vec{I}\right]$$
(3)

$$\rho = \frac{p}{R_u T} \sum_{i=1}^N M_i x_i \tag{4}$$

式中 κ 為多孔性介質之滲透性(permeability, m²)、 μ 為動黏滯性係數(Pa-s)、 ε 為孔隙 率、p為壓力(Pa)、 R_u 為通用氣體常數(J/mol·K)、T為燃料電池操作溫度(K)、M為 莫耳質量(kg/mol)、x為莫耳分率。

描述流道中之流體流動情形,則如式(5)及式(6)所示:

$$\nabla \cdot \left(\rho \vec{u}\right) = 0 \tag{5}$$





$$\rho(\vec{u}\cdot\nabla)\vec{u} = \nabla\cdot\left[-p\vec{I} + \mu\left(\nabla\vec{u} + \left(\nabla\vec{u}\right)^T - \frac{2}{3}\left(\nabla\cdot\vec{u}\right)\right)\vec{I}\right]$$
(6)

高溫蛇形質子交換膜燃料電池因操作溫度高於120℃,因此其陽極流體為氫氣及 水蒸汽; 陰極則為氧氣、水蒸汽及氮氣。當多孔性介質中發生異種(heterogeneous)化 學反應時,其成分之消耗或生成分佈情形,可以式(7)之Maxwell-Stefan方程式描述:

$$\rho \vec{u} \cdot \nabla \omega_i + \nabla \cdot \left\{ -\rho \omega_i \sum_{j=1}^N D_{ij}^{eff} \left[\nabla x_j + \left(x_j - \omega_j \right) \frac{\nabla p}{p} \right] \right\} = R_i$$
(7)

式中 ρ 為式(4)之混合物密度(kg/m³)、 \overline{u} 為速度向量(m/s)、 ω 為質量分率、x為莫耳分 率、下標*i*代表流體成份為氫氣(H₂)、水蒸汽(H₂O)、氧氣(O₂)、氮氣(N₂), R_i為源項 $(kg/m^3 s) \circ D_{ii}^{eff}$ 為多孔性介質之等效擴散係數 (m^2/s) ,其值與溫度及彎曲度(tortuosity) 有關。

一般而言,觸媒層結構十分複雜,在操作原理上,氧氣及水蒸汽由流道進入後, 藉由擴散效應擴散至氣體擴散層,然後再往觸媒層擴散,並發生電化反應,其過程遵 守成分平衡及電位平衡方程式,在氣體流動上二元氣體擴散係數D;;之值如式(8)-式(12) 所示(Gurau et al., 1998),因擴散係數受多孔性介質孔隙率 ε 的影響,在本研究中以 Bruggeman修正模式計算多孔性介質之等效擴散係數(Ju et al., 2005):

$$D_{O_2,H_2O} = 2.82 \times 10^{-5} \times \left(\frac{T}{308.1}\right)^{1.5}$$
(8)

$$D_{O_2,N_2} = 2.20 \times 10^{-5} \times \left(\frac{T}{293.2}\right)^{1.5}$$
(9)

$$D_{H_2O,N_2} = 2.56 \times 10^{-5} \times \left(\frac{T}{307.5}\right)^{1.5}$$
(10)

$$D_{H_2,H_2O} = 9.15 \times 10^{-5} \times \left(\frac{T}{307.1}\right)^{1.5}$$
(11)

$$D_{ij}^{eff} = D_{ij}\varepsilon^{\tau} \tag{12}$$

式中 7 為彎曲度。在質子交換膜燃料電池中,可以使用式(13)及式(14)之電荷守恆方程 式,計算質子電位及電子電位之分佈情形:



$$\nabla \cdot (-\sigma_m \nabla \phi_m) = S_m \tag{13}$$
$$\nabla \cdot (-\sigma_s \nabla \phi_s) = S_s \tag{14}$$

式中 σ_m 為質子在交換膜相的等效導電率(S/m)、 σ_s 為電子在固相(雙極板)的等效導 電率(S/m), ϕ_m 、 ϕ_s 分別為膜相電位(V)及固相(雙極板)電位(V)。 S_m 、 S_s 分別為質 子在交換膜相的電流源項電位(A/m³)及在固相(雙極板)的電流源項電位(A/m³), S_m 、 S_s 在觸媒層以外的區域為0。

在本研究中以Butler-Volmer方程式,描述陽極及陰極之局部轉移電流密度 $i_{ct,a}$ (A/m²)、 $i_{ct,c}$ (A/m²),如式(15)及式(16)所示(Grujicic and Chittajallu, 2004, Ju et al., 2005):

$$i_{ct,a} = i_{0,a} \left(\frac{c_{H_2}}{c_{H_2,ref}} \right)^{0.5} \left(\frac{\alpha_{a,a} + \alpha_{c,a}}{RT} F \eta_a \right)$$
(15)

$$i_{ct,c} = i_{0,c} \left(\frac{c_{O_2}}{c_{O_2,ref}} \right) \exp \left(\frac{\alpha_{a,c} + \alpha_{c,c}}{RT} F \eta_c \right)$$
(16)

式中下標 a 表陽極、c 表陰極, $i_{0,a}$ 與 $i_{0,c}$ 分別為陽極及陰極之交換電流密度(A/m²)、 c_{H_2} 與 c_{o_2} 分別為氫氣及氧氣之濃度(mol/m³)、 $c_{H_2,ref}$ 與 $c_{o_2,ref}$ 分別為氫氣及氧氣之參考濃度 (mol/m³)、F 為Faraday常數(C/mol)、R 為氣體常數(J/kg·K)、T 為燃料電池操作溫度 (K)、 α 為反應物之轉換係數、 η 為過電位(V)。在本研究中 $\alpha_{a,a} = \alpha_{c,a} = 1$ 、 $\alpha_{a,c} = 0$ 、 $\alpha_{c,c} = -1$,過電位 η 之值可由式(17)-式(18)求得:

$$\eta_a = \phi_s - \phi_m - E_{oc,a} \tag{17}$$

$$\eta_c = \phi_s - \phi_m - E_{oc,c} \tag{18}$$

式中 ϕ_m 、 ϕ_s 分別為膜相電位(V)及固相(雙極板)電位(V), $E_{oc,a}$ 和 $E_{oc,c}$ 分別為陽極及 陰極之開路電壓(V),在本研究中令 $E_{oc,a} = 0$ V、 $E_{oc,c} = 1$ V。

(四) 邊界條件

在本研究針對高溫質子交換膜燃料電池單電池模型的邊界條件,主要包括空氣電 極(陰極)、固態電解質(高溫質子交換膜)及燃料電極(陽極)的膜電極組、陽極 與陰極氣體流道及雙極板。在陽極、陰極流道入口及出口處之邊界條件,分別設定為:





陽極入口處:
$$U_{in,a} = \lambda_a \frac{I}{2F} x_{H_2} R_u T / (pA_{channel} n_{channel})$$
 (19)

陽極出口處:
$$p = p_{ref}$$
 (20)

陰極入口處:
$$U_{in,c} = \lambda_c \frac{I}{4F} x_{O_2} R_u T / (pA_{channel} n_{channel})$$
 (21)

陰極出口處:
$$p = p_{ref}$$
 (22)

式中陽極及陰極出口處之壓力值 p_{ref} ,在本研究中設為101325Pa, $U_{in,a}$ 和 $U_{in,c}$ 分別為 陽極及陰極之入口平均流速(m/s)、 λ_a 和 λ_c 分別為陽極及陰極之燃料入口氣體質量流 率當量比(stoichiometric ratio)、I為參考電流密度(A/m^2)、 x_{H_2} 與 x_{O_2} 分別為氫氣及氧氣 之莫耳分率、 $A_{channel}$ 為蛇形流道面積(m^2)、 $n_{channel}$ 為蛇形流道數目,在本研究中流道數 為3。除陽極、陰極流道入口及出口處外,其餘之邊界條件採用無滑移(no slip)邊界。

在本研究中高溫質子交換膜燃料電池陽極之反應氣體為氫氣及水蒸汽;陰極則為 氧氣、水蒸汽及氦氣,因此物種守恆方程式之邊界條件,在陽極入口處設定氫氣質量 分率,陽極出口處則以對流通量(convective flux)求得氫氣及水蒸汽之質量分率;在陰 極入口處設定氫氣及水蒸汽質量分率,陰極出口處則以對流通量求得氧氣、水蒸汽及 氦氣之質量分率。

本文之燃料電池平均電流密度,定義為所有法向質子電流密度之積分平均值。陰極與陽極集電板之電位差即為燃料電池之操作電壓 $V_{cell}(V)$,而燃料電池之操作電壓 V_{cell} 可由式(23)求得,其中 $\Delta\phi_{eq,a}$ 和 $\Delta\phi_{eq,c}$ 分別為陽極及陰極之平衡電位(V),其值分別設定為 $\Delta\phi_{eq,a} = 0$ V、 $\Delta\phi_{eq,c} = 1$ V。在本研究中,將陽極入口處集電板之電位設為接地(ground),而陰極入口處集電板之電位設為燃料電池操作電壓 V_{cell} ,其餘之邊界條件則設為電絕緣(electric insulation)。

$$V_{cell} = \Delta \phi_{ea,c} - \Delta \phi_{ea,a} - V_{pol} \tag{23}$$

式中 V_{pol} 為極化電壓(V)。

本研究以COMSOL Multiphysics軟體求數值解,經由選取模組、繪圖建模、設定 參數、物理性質、邊界條件、建立網格、求解及後處理等步驟,可得到數值模擬結果,



本文進行數值模擬時所使用之主要相關參數預設值如表一所示。

三、結果與討論

燃料電池性能之優劣,主要以其極化曲線作為判斷標準,而本文之燃料電池平均 電流密度,定義為所有法向質子電流密度之積分平均值。燃料電池之曲線可以概分為 低電流密度的活化極化區、中電流密度的歐姆極化區及高電流密度的濃度極化區。燃 料電池必須提供能量去克服各區段的極化現象,使電極上的反應能夠持續進行,因此 也降低了電池在高電流密度的性能表現(EG and G Technical Services Inc., 2004)。

影響燃料電池性能之因素相當多,諸如燃料電池之孔隙率、操作溫度、操作壓力、 滲透性、導電率、當量數、彎曲度及背壓,皆會對燃料電池性能產生影響,在本研究 中則僅探討孔隙率。一般而言,燃料電池之孔隙率愈小時,燃料愈難擴散至觸媒層, 再加上其燃料在觸媒層內之反應面積縮小,此時將減緩電化學反應速率。增加多孔性 材質的孔隙率,可使更多的氫氣及氧氣進入催化層參與反應,因此一般可提高燃料電 池之性能。雖然增加多孔性材質的孔隙率,可提高燃料電池之功率密度,但當孔隙率 值過大時,反而使觸媒層及氣體擴散層之反應面積減少、進而降低燃料電池之性能。 在圖二中可發現,在低電流密度(<0.5A/cm²)時,孔隙率對燃料電池性能之影響並不大; 但在高電流密度(>0.5A/cm²)時,則隨孔隙率之增加、降低濃度極化阻抗,因此可得到 較佳之性能曲線。

為探討高溫蛇形質子交換膜燃料電池反應物分佈的情形,圖一所模擬之燃料電池 其流道結構為三蛇形流道,所模擬之流道寬度×高度×長度尺寸分別為 0.7847mm×1mm×20mm、燃料流向為平行流。由圖三之結果顯示,當燃料電池操作電 壓V_{cell}為0.35V時,燃料電池中陽極之氫氣及陰極之氧氣單位體積莫耳濃度沿著流動方 向而降低,且陰極之氧氣單位體積莫耳濃度在陰極擴散層及陰極流道出口處將明顯低 於陰極流道入口處,但陽極之氫氣單位體積莫耳濃度則較為均勻分佈。由此可知,燃 料電池之性能主要受陰極氧氣濃度分佈之影響,而非陽極之氫氣。

當燃料電池操作電壓V_{cell}為0.35V時,燃料電池中陽極及陰極之水蒸汽單位體積莫





耳濃度將隨著流動方向而升高,如圖四所示。且陰極因氧氣之消耗及水蒸汽之產生, 所造成之水蒸汽單位體積莫耳濃度之增加效果,將大於陽極因氫氣之消耗所產生的結 果。

在圖五中,所顯示之結果為當燃料電池操作電壓Vall為0.35V時,在燃料電池中之 質子交換膜z方向中央之法向離子電流密度分佈情形。結果顯示隨著流動方向(v方向) 反應物濃度之降低,法向離子電流密度將隨之降低;而最高法向離子電流密度則發生 於流道入口處,且因歐姆過電位(Ohmic overpotential)之影響,使得質子交換膜中心處 之法向離子電流密度減少。

四、結論

本研究以三維多物種傳輸數值模型,探討高溫蛇形質子交換膜燃料電池反應物分 佈的情形。經由分析模擬結果,可得到以下之結論:

- 1. 本文所模擬之燃料電池其流道結構為三蛇形流道,所模擬之流道寬度X高度X長度 尺寸分別為0.7847mm×1mm×20mm、燃料流向為平行流。模擬結果顯示增加多孔 性材質的孔隙率可提昇燃料電池之性能。
- 2. 燃料電池中陽極之氫氣及陰極之單位體積莫耳濃度沿著流動方向而降低,水蒸汽 單位體積莫耳濃度則隨著流動方向而升高,而最高法向離子電流密度發生於流道 入口處。
- 燃料電池之性能主要受陰極氧氣濃度分佈之影響。

参考文獻

- 1. 黃鎮江(2005)。綠色能源。新北市:全華。
- 2. 鄭煜騰、鄭耀宗 (1997)。質子交換膜型燃料電池的製造技術。能源季刊,27(2), 118 •
- 3. 吴千舜、諸柏仁(2005)。燃料電池質子交換膜的最新發展。CHEMISTRY (THE CHINESE CHEM. SOC., Taipei) , 62 (1) , 123~138 °





- 4. 元智大學燃料電池中心。質子交換膜及膜電極組實驗室。104 年 11 月 1 日,取自 http://www.fuelcells.org.tw/equipment-detail.php?id=16。
- Berning, T., Lu, D. M., and Djilali, N. (2002). Three Dimensional Computational Analysis of Transport Phenomena in a PEM Fuel Cell. *Journal of Power Sources*, 106, 284-294.
- EG and G Technical Services Inc. (2004). *Fuel Cell Handbook* (the seventh edition).
 U.S. Department of Energy, Morgantown, Virginia, USA.
- Fu, Y. P., Wen, S. H., and Lu, C. H. (2007). Preparation and Characterization of Samaria -Doped Ceria Electrolyte Materials for Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of the American Ceramic Society*, 91 (1), 127-131.
- 8. Grujicic, M. and Chittajallu, K. M. (2004). Design and Optimization of Polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells, *Applied Surface Science*, 227, 56-72.
- Gurau, V., Liu H., and Kakac, S. (1998). Two-Dimensional Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *AIChE Journal*, 44, 2410-2421.
- Ju, H., Meng, H. and Wang, C. Y. (2005). A Single-Phase, Non-Isothermal Model for PEM Fuel Cells, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48, 1303-1315, 2005.
- 11. Kordesch, K. and Simader, G. (1996). *Fuel Cells and their Applications*, VCH, New York, 51-179.
- Philip, L., Barry J., Gary O., and Paul, L. (1999). New Materials for Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell Current Collectors. *Journal of Power Source*, 80, 235-241.
- 13. Seel, D. C., Benicewicz, B. C., Xiao, L. (2009). *Handbook of Fuel Cells–Fundamentals, Technology and Applications*, Chapter 19. John Wiley & Sons, Ltd.
- 14. Singh, D., Lu, D. M., and Djilali, N. (1999). A Two-Dimensional Analysis of Mass Transport Phenomena in Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *International Journal* of Engineer Science, 39, Issue: 3, 431-452.
- Um, Sukkee and Wang, C. Y. (2004). Three-Dimensional Analysis of Transport and Electrochemical Reactions in Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Journal of Power Sources*, 125, 40-51.

| 物理參數 | 符號 | 預設值 | 單位 |
|-----------|---------|-----------------------|------|
| 陽極動力黏滯性係數 | μ_a | 1.19×10 ⁻⁵ | Pa·s |

表一 數值模擬主要相關參數預設值







| 物理參數 | 符 號 | 預設值 | 單位 |
|---------------------|--|------------------------|-----------------------|
| 陰極動力黏滯性係數 | μ_c | 2.46×10 ⁻⁵ | Pa·s |
| 大氣壓力 | p _{ref} | 101325 | Ра |
| 法拉第常數 | F | 96500 | C/mol |
| 通用氣體常數 | R _u | 8.314 | J/mol·K |
| 陽極交換電流密度 | i _{0a} | 10 ⁵ | A/m ² |
| 陰極交換電流密度 | i _{0c} | 1 | A/m ² |
| 初始電池極化電壓 | V_{pol} | 0 | V |
| 陽極均衡電壓 | $\Delta \phi_{eq,a}$ | 0 | V |
| 陰極均衡電壓 | $\Delta \phi_{eq,c}$ | 1 | V |
| H2摩爾質量 | <i>M</i> _{<i>H</i>₂} | 2 | g/mol |
| O2摩爾質量 | M ₀₂ | 32 | g/mol |
| N2 摩爾質量 | M_{N_2} | 28 | g/mol |
| H2O摩爾質量 | M_{H_2O} | 18 | g/mol |
| H ₂ 參考濃度 | $c_{H_2,ref}$ | 40.88 | (mol/m ³) |
| O2參考濃度 | $c_{O_2,ref}$ | 40.88 | (mol/m ³) |
| 陽極入口 H2 質量分率 | $\omega_{a_{-}H_{2},in}$ | 0.743 | |
| 陰極入口 O2 質量分率 | $\omega_{c_0,in}$ | 0.228 | |
| 陽極入口 H2O 質量分率 | $\omega_{a_{-}H_{2}O,in}$ | 0.257 | |
| 陰極入口 H2O 質量分率 | $\omega_{c_H_2O,in}$ | 0.023 | |
| 燃料電池寬度×高度×長度 | 蛇形 | 0.7847×1×20 | mm×mm×mm |
| 燃料流向 | | 同向流 | |
| 燃料電池操作溫度 | Т | 180 | °C |
| 陽極入口平均流速 | $U_{in,a}$ | 0.2 | m/s |
| 陰極入口平均流速 | $U_{in,c}$ | 0.5 | m/s |
| 陽極燃料入口氣體質量流率當量比 | λ_a | 1.2 | |
| 陰極燃料入口氣體質量流率當量比 | λ_c | 2.0 | |
| 多孔性介質孔隙率 | ε | 0.4 | |
| 多孔性介質彎曲度 | τ | 1.5 | |
| 多孔性介質陽極滲透性 | κ _a | 1.18×10 ⁻¹¹ | m^2 |
| 多孔性介質陰極滲透性 | κ _c | 1.18×10 ⁻¹¹ | m ² |
| 質子交換膜導電率 | σ_m | 9.825 | S/m |
| 電流集電板導電率 | σ_{s} | 222 | S/m |







(b)截面圖



圖一 高溫蛇形質子交換膜燃料電池物理模型圖

(a)極化曲線

(b)功率密度









(a)陽極氫氣

(b)陰極氧氣

圖三 高溫質子交換膜燃料電池陽極氫氣及陰極氧氣單位體積莫耳濃度分佈圖 $(V_{cell} = 0.35 \text{ V})$



(a)陽極

(b)陰極

圖四 高溫質子交換膜燃料電池陽極及陰極水蒸汽單位體積莫耳濃度分佈圖 (V_{cell} = 0.35 V)





- 6





圖五 高溫質子交換膜燃料電池在質子交換膜z方向中央之法向離子電流密度分佈圖 $(V_{cell} = 0.35 \text{ V})$

