دانشکده فنی مهندسی
بخش مهندسی مکانیک

رساله دکتری گروه تبدیل انرژی

# توسعه مدل بولتزمن شبکه‌ای برای مطالعه جریان سیال و انتقال حرارت در پیل سوختی غشای تبادل پروتون

مهدی صدیق
استاد راهنما: دکتر مهدی معرفت

خرداد ۱۳۹۱

**دانشکده :فنی-مهندسی**

**رساله دکتری رشته: مهندسی مکانیک گرایش: تبدیل انرژی**

**عنوان رساله:**

# توسعه مدل بولتزمن شبکه‌ای

# برای مطالعه جریان سیال و انتقال حرارت

# در پیل سوختی غشای تبادل پروتون

**نام دانشجو:**

**مهدی صدیق**

**استاد راهنما:**

دکتر مهدی معرفت

**استاد مشاور:**

دکتر مسعود میرزایی

خرداد ۱۳۹۱

## آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده ۱- حق نشر و تکثیر پایان نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین نامه های مصوب انجام شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده ۵- این آیین‌نامه در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ۸۷/۴/۱ در شورای پژوهشی و در تاریخ ۸۷/۴/۲۳ در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ ۸۷/۷/۱۵ شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

«اینجانب *مهدی صدیق* دانشجوی رشته *مهندسی مکانیک* ورودی سال تحصیلی *۱۳۸۵* مقطع *دکترا* دانشکده *فنی-مهندسی* متعهد می شوم کلیه نکات مندرج در آئین نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته های علمی مستخرج از پایان نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین نامه فوق الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضا: .....۹۱/۴/۱۲.....

تاریخ: .....

## آیین نامه چاپ پایان‌نامه (رساله)های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله)های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه،دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می‌شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله)ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته *مهندسی مکانیک* است که در سال *۱۳۹۱* در *دانشکده فنی-مهندسی* دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر *مهدی معرفت*، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر *مسعود میرزایی* و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر ـــــ از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه‌های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت‌چاپ) را به «دفتر نشر آثارعلمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می‌تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر درمعرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت‌مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می‌تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می‌دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده ۶: اینجانب *مهدی صدیق* دانشجوی رشته *مهندسی مکانیک* مقطع *دکترا*

تعهد فوق وضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: مهدی صدیق

تاریخ و امضا:

۹۱/۴/۱۲

بسمه تعالی

# تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از رساله دکتری

آقای مهدی صدیق رساله ۲۴ واحدی خود را با عنوان **توسعه مدل میکرو مقیاس برای مطالعه جریان سیال و انتقال حرارت در پیل سوختی غشای تبادل پروتون** در تاریخ ۱۳۹۱/۳/۲۰ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این رساله را از نظر فرم و محتوا تایید کرده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه دکتری مهندسی مکانیک - تبدیل انرژی پیشنهاد می کنند.

| عضو هیات داوران | نام و نام خانوادگی | رتبه علمی | امضا |
|---|---|---|---|
| استاد راهنما | دکتر مهدی معرفت | دانشیار | |
| استاد مشاور | دکتر مسعود میرزایی | دانشیار | |
| استاد ناظر | دکتر قاسم حیدری نژاد | استاد | |
| استاد ناظر | دکتر علی جعفریان | استادیار | |
| استاد ناظر | دکتر مهرداد تقی زاده منظری | استاد | |
| استاد ناظر | دکتر مجید بازارگان | دانشیار | |
| استاد ناظر | دکتر قاسم حیدری نژاد | استاد | |

تقدیم به

پدر فداکار و مادر دلسوزم که شریک تمام سختی‌های انجام رساله بودند.

## تشکر و قدردانی

به انجام رسیدن این رساله مرهون حمایت و راهنمایی‌های مؤثراستاد ارجمندم جناب آقای دکتر معرفت است و جا دارد که در اینجا از زحمات ایشان صمیمانه قدردانی کنم. همچنین از همکاری و پشتیبانی استاد گرامی جناب آقای دکتر میرزایی در مراحل مختلف انجام رساله که در هدایت مسیر پژوهشی و ارتقای کیفیت کار کمک‌های شایانی نموده‌اند سپاسگزاری می‌کنم.

# چکیده

اصلاح و ارتقای عملکرد پیل سوختی غشای تبادل پروتون مستلزم انجام تحقیقات بسیاری است که این امر بدون شبیه‌سازی جریان سیالات، انتقال حرارت و فرآیندهای الکتروشیمیایی میسر نمی-شود. روش بولتزمن شبکه‌ای با قابلیت‌هایی مطلوب در شبیه‌سازی مسائل میکرو-مقیاس و چند گونه‌ای، برای مطالعه پیل سوختی می‌تواند ابزاری مناسب باشد. اما این روش به دلیل نوپا بودن، دچار مسائل و مشکلاتی است و در برخی زمینه‌ها راه‌کار رضایت‌بخشی برای مدل‌سازی ارائه نمی-نماید. به همین دلیل نیاز به توسعه و ارتقای آن در زمینه شبیه‌سازی فرآیندهای پیل سوختی احساس می‌شود. در این رساله با توسعه گام به گام مدلی دوبعدی به روش بولتزمن شبکه‌ای، محیط متخلخل، جریان گونه‌های مختلف، انتقال حرارت و فرآیندهای الکتروشیمیایی در یک پیل سوختی غشای تبادل پروتون شبیه‌سازی شده است. برای نیل به این مدل، تلاش‌هایی جهت اصلاح روش-های موجود صورت گرفته که منجر به توسعه روشی جدید در پیاده‌سازی شرط مرزی دما-ثابت، توسعه روشی جدید در مدل‌سازی انتقال حرارت ترکیبی و ارائه راه‌کارهای عددی مختلفی برای ارتقای مدل‌سازی هیدرودینامیکی و حرارتی روش بولتزمن شبکه‌ای گردیده است. در نهایت با استفاده از مدل حاصل، جریان سیالات، انتقال حرارت و فرآیندهای الکتروشیمیایی پیل در کاتالیست سمت کاتد مورد مطالعه قرار گرفته است.

**کلمات کلیدی:** روش بولتزمن شبکه‌ای، پیل سوختی غشای تبادل پروتون، شرط مرزی دما-ثابت، انتقال حرارت ترکیبی، محیط متخلخل، جریان چندگونه‌ای

# فهرست مطالب

فهرست جدولها ..... د
فهرست شکلها ..... ه
فهرست علائم و نشانه‌ها ..... ز
**مقدمه** ..... ۱
**فصل ۱ مدل ریاضی کمیت‌های پیل سوختی** ..... ۴
۱-۱ کمیت‌های الکتروشیمیایی ..... ۵
۱-۲ خواص ..... ۹
**فصل ۲ مدل‌سازی با روش بولتزمن شبکه‌ای** ..... ۱۰
۲-۱ مبانی روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۱۰
۲-۱-۱ مدل‌سازی جریان سیال ..... ۱۱
۲-۱-۲ مدل‌سازی موازنه انرژی ..... ۱۵
۲-۲ شرایط مرزی در روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۱۷
۲-۳ مدل‌سازی تخلخل ..... ۱۹
۲-۳-۱ مدل‌سازی به روش مستقیم ..... ۱۹
۲-۳-۲ مدل‌سازی به روش غیر مستقیم ..... ۲۰
۲-۴ سطح تماس محیط متخلخل با جریان آزاد ..... ۲۲
۲-۵ شرط مرزی دما-ثابت ..... ۲۳
۲-۶ مدل ارتقا یافته بولتزمن شبکه‌ای برای شبیه‌سازی پیل سوختی ..... ۲۶
۲-۷ سایر روش‌های عددی در مدل بولتزمن شبکه‌ای ..... ۳۰
۲-۷-۱ مدل‌های شبکه ..... ۳۰
۲-۷-۲ روش‌های مدل‌سازی انتقال حرارت ..... ۳۱
۲-۷-۳ زمان‌های آرامش چندگانه ..... ۳۲
**فصل ۳ تحقیقات جاری** ..... ۳۴
۳-۱ پیشینه تحقیقات پیل سوختی با مدل‌های مبتنی بر پیوستگی ..... ۳۴
۳-۲ پیشینه تحقیقات هیدرودینامیک محیط متخلخل با روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۳۸
۳-۳ تحقیقات جاری مدل‌سازی انتقال حرارت با روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۳۸
۳-۴ تحقیقات جاری مدل‌سازی انتقال حرارت ترکیبی به روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۴۲
۳-۵ پیشینه مدل‌های بولتزمن شبکه‌ای برای شرط مرزی دما-ثابت ..... ۴۴
۳-۶ تحقیقات جاری شبیه‌سازی پیل سوختی با مدل‌های مقیاس میکرو و نانو ..... ۴۵
۳-۶-۱ تحقیقات در مورد پیل‌های سوختی غشای تبادل پروتون با استفاده از روش‌های غیر از بولتزمن شبکه‌ای ۴۵
۳-۶-۲ تحقیقات در مورد پیل‌های سوختی غیر غشای تبادل پروتون با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۴۷
۳-۶-۳ تحقیقات در مورد پیل‌های سوختی غشای تبادل پروتون با استفاده از روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۴۸

**فصل ۴ مدل‌سازی شرط مرزی دما-ثابت** ..... ۵۷
۴-۱ مدل‌های فعلی ..... ۵۷
۴-۲ اهمیت مدل‌سازی شرط مرزی دما-ثابت در روش بولتزمن شبکه‌ای ..... ۵۸
۴-۳ فرمول‌بندی مدل حاضر ..... ۶۰
۴-۴ نتایج و بحث ..... ۶۳
۴-۴-۱ میدان حل ..... ۶۳
۴-۴-۲ صحه‌گذاری ..... ۶۳
۴-۴-۳ ارزیابی مدل حاضر ..... ۶۴
۴-۵ جمع‌بندی ..... ۶۸
**فصل ۵ مدل‌سازی انتقال حرارت ترکیبی** ..... ۷۰
۵-۱ مدل‌های فعلی ..... ۷۱
۵-۲ فرمول‌بندی مدل حاضر ..... ۷۱
۵-۳ شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و حرارتی جریان پله معکوس با دیواره ضخیم ..... ۷۴
۵-۳-۱ میدان حل و شرایط مرزی ..... ۷۴
۵-۳-۲ صحه‌گذاری، نتایج و بحث ..... ۷۵
۵-۴ شبیه‌سازی هیدرودینامیکی و حرارتی جریان کانال با موانع متصل به دیواره‌ها ..... ۸۰
۵-۴-۱ میدان حل ..... ۸۰
۵-۴-۲ شرایط مرزی توسعه‌یافته تناوبی ..... ۸۱
۵-۴-۳ صحه‌گذاری، نتایج و بحث ..... ۸۲
۵-۵ جمع‌بندی ..... ۸۵
**فصل ۶ مدل‌سازی جریان سیال و انتقال حرارت در محیط متخلخل** ..... ۸۷
۶-۱ میدان حل ..... ۸۷
۶-۲ مدل عددی ..... ۸۸
۶-۳ نتایج و بحث ..... ۹۰
۶-۳-۱ صحه‌گذاری ..... ۹۱
۶-۳-۲ تغییرات سرعت سیال در عرض کانال ..... ۹۲
۶-۳-۳ تجزیه و تحلیل حرارتی ..... ۹۵
۶-۴ جمع‌بندی ..... ۱۰۰
**فصل ۷ شبیه‌سازی و بررسی مشخصه‌های پیل سوختی** ..... ۱۰۲
۷-۱ ویژگی‌های فیزیکی مسأله و مزایای روش بولتزمن شبکه‌ای در مدل‌سازی آن ..... ۱۰۳
۷-۲ نگاهی به مدل‌های بولتزمن شبکه‌ای برای مطالعه پیل سوختی ..... ۱۰۵
۷-۳ روش حل مسأله ..... ۱۰۶
۷-۳-۱ میدان حل ..... ۱۰۶
۷-۳-۲ مدل عددی ..... ۱۰۷
۷-۳-۳ شرایط مرزی ..... ۱۰۹

۷-۴ نتایج و بحث ۱۱۲
۷-۴-۱ صحه‌گذاری ۱۱۴
۷-۴-۲ جریان سیالات در قسمت کاتد ۱۱۸
۷-۴-۳ تحلیل مشخصه‌های الکتروشیمیایی در کاتالیست کاتد ۱۲۱
۷-۵ جمع‌بندی ۱۲۷
**نتیجه‌گیری** ۱۲۹
**پیشنهادها** ۱۳۲
**فهرست مراجع** ۱۳۵
پیوست الف. آشنایی با پیل سوختی پ۱
پیوست ب. زیربناهای روش بولتزمن شبکه‌ای پ۱۰
پیوست ج. مراحل برنامه کامپیوتری مدل‌سازی پیل سوختی پ۱۴

## فهرست جدول‌ها

جدول ۴-۱ تعریف مدل‌های مورد آزمون برای ارزیابی مدل دما-ثابت حاضر ۶۵
جدول ۶-۱ مسأله کانال با هسته متخلخل، مقایسه اعداد نوسلت مدل با نتایج منتشر شده ۹۲
جدول ۷-۱ خواص و پارامترهای فیزیکی ۱۱۲
جدول ۷-۲ مشخصات و شرایط عملکردی سلول مبنا ۱۱۳

## فهرست شکل‌ها


شکل ۲-۱ شبکه D2Q9 ۱۲

شکل ۲-۲ شبکه‌بندی مرزی و توابع توزیع مجهول. الف: چینش گره‌ها روی مرز؛ ب: چینش گره‌ها پشت مرز ۲۵

شکل ۳-۱ بلوک‌های جامد با دمای ثابت سطح برای مدل‌سازی تخلخل [۶۹]. پارامتر ppi تعداد ریز-منفذها بر اینچ را نشان می‌دهد. ۴۰

شکل ۳-۲ میدان حل مدل مرجع [۷۰] با بلوک‌های جامد دما-ثابت ۴۰

شکل ۳-۳ توزیع‌های حرارتی گذرا از سطح واسط سیال با جامد در حالتی که گره‌ها روی سطح واسط چیده نشده باشند. ۴۳

شکل ۳-۴ میدان حل در نظر گرفته شده در مرجع [۹۰] ۵۰

شکل ۳-۵ بخشی از نتایج ارائه شده در مرجع [۹۰]: بردارهای سرعت در مقطع‌هایی از کانال برای یکی از حالت‌های شبیه‌سازی. با توجه به مختصات تعریف شده در شکل ۳-۶، شکل سمت چپ مقطع x-y و شکل سمت راست مقطع y-z را نشان می‌دهند. ۵۱

شکل ۳-۶ میدان پیل سوختی در مدل مرجع [۱۰۲] ۵۶

شکل ۴-۱ توابع توزیع مورد استفاده در محاسبه توزیع‌های مجهول در مدل حاضر، الف: طرح A، ب: طرح B ۶۰

شکل ۴-۲ میدان حل مورد استفاده در اعتبارسنجی مدل شرط مرزی دما-ثابت ۶۳

شکل ۴-۳ دماهای به دست آمده در گره‌های مجاور مرز ۶۶

شکل ۴-۴ شارهای حرارتی مماس بر مرز در گره‌های مجاور مرز ۶۶

شکل ۴-۵ شارهای حرارتی مماس بر مرز محاسبه شده برای روی دیواره ۶۷

شکل ۵-۱ توزیع‌های مورد استفاده در محاسبه توزیع‌های شماره ۱ و ۵ روی سطح واسط سیال – جامد در مدل حاضر ۷۲

شکل ۵-۲ جریان پله معکوس با دیواره ضخیم، به عنوان میدان حل مدل شده ۷۴

شکل ۵-۳ خطوط جریان در جریان پله معکوس با رینولدز ۱۰۰ ۷۶

شکل ۵-۴ منحنی تغییرات عدد نوسلت در طول سطح واسط سیال با دیواره پایین کانال در جریان پله معکوس با دیواره ضخیم ۷۷

شکل ۵-۵ میدان دما در مسأله جریان پله معکوس با دیواره ضخیم، الف: $K_r = 10$ ، ب: $K_r = 1$ ۷۸

شکل ۵-۶ میدان چگالی در مسأله جریان پله معکوس. واحد چگالی، شبکه‌ای است. ۷۹

شکل ۵-۷ الف-طرح‌واره کانال بی‌نهایت با موانع متصل به دیواره‌ها، ب-صورت ساده شده برای مدل‌سازی ۸۰

شکل ۵-۸ خطوط جریان در مسأله کانال با موانع متصل به دیواره‌ها با $\mathrm{Re}=50$ ۸۲
شکل ۵-۹ نوسلت روی سطوح مانع‌ها و مقایسه با نتایج منتشر شده در مسأله کانال با موانع متصل به دیواره‌ها ۸۳
شکل ۵-۱۰ میدان دما در مسأله کانال با موانع متصل به دیواره‌ها الف- $k_r=10$ ب- $k_r=1$ ۸۵
شکل ۶-۱ میدان حل مسأله کانال با هسته متخلخل ۸۸
شکل ۶-۲ پروفیل‌های سرعت در جریان توسعه یافته کانال با هسته متخلخل با $W_{cor}=0.5$ به همراه اعتبارسنجی ۹۱
شکل ۶-۳ منحنی‌های ضریب اثرگذاری هیدرودینامیکی هسته متخلخل ۹۳
شکل ۶-۴ پروفیل‌های دما در مسأله کانال با هسته متخلخل، الف- $k_r=10$ ب- $k_r=0.5$ ۹۶
شکل ۶-۵ منحنی‌های نوسلت در مسأله کانال با هسته متخلخل به ازای $k_r=10$ ۹۷
شکل ۶-۶ منحنی‌های نوسلت در مسأله کانال با هسته متخلخل به ازای $k_r=1$ ۹۷
شکل ۶-۷ منحنی‌های نوسلت در مسأله کانال با هسته متخلخل به ازای $k_r=0.5$ ۹۸
شکل ۷-۱ میدان حل مدل شده برای بررسی پیل سوختی ۱۰۷
شکل ۷-۲ کانال‌های ورودی و خروجی در آرایش مارگونه ۱۱۰
شکل ۷-۳ مقایسه منحنی‌های تغییرات دما در لایه کاتالیست کاتد میان مدل حاضر و مرجع [۱۱۱] ۱۱۵
شکل ۷-۴ مقایسه کمترین غلظت اکسیژن در لایه انتشار کاتد میان مدل حاضر و مرجع [۵۷] ۱۱۵
شکل ۷-۵ منحنی قطبیدگی مدل حاضر و داده‌های تجربی ۱۱۷
شکل ۷-۶ میدان فشار در مقطع پیل سوختی بر حسب pa ۱۱۹
شکل ۷-۷ الف- خطوط جریان کلی سیال، ب- مؤلفه افقی لغزش بی‌بعد اکسیژن، ج- مؤلفه عمودی لغزش بی‌بعد اکسیژن ۱۲۰
شکل ۷-۸ میدان دما در مقطع پیل سوختی ۱۲۲
شکل ۷-۹ منحنی دما در بارهای مختلف در کاتالیست کاتد ۱۲۳
شکل ۷-۱۰ منحنی‌های نرمال شده چگالی جریان کاتد ۱۲۴
شکل ۷-۱۱ منحنی‌های ولتاژ فعال‌سازی در کاتالیست کاتد ۱۲۵
شکل ۷-۱۲ منحنی‌های غلظت اکسیژن در کاتالیست کاتد ۱۲۵
شکل ۷-۱۳ منحنی‌های غلظت آب در کاتالیست کاتد ۱۲۶

## فهرست علائم و نشانه‌ها

| نشانه | واحد | توضیح |
|---|---|---|
| $a_w$ | - | پارامتر فعالیت آب |
| $C$ | $mol/m^3$ | غلظت حجمی |
| $Cp$ | $J/kg\cdot K$ | ظرفیت حرارتی ویژه |
| $C_{tot}$ | $mol/m^3$ | غلظت حجمی کل گونه‌ها |
| $c$ | - | عدد ثابت |
| $c_0$ | - | پارامتر محاسبه سرعت سیال در محیط متخلخل |
| $c_1$ | - | پارامتر محاسبه سرعت سیال در محیط متخلخل |
| $c_s$ | m/s | سرعت شبکه‌ای صوت |
| $D_\alpha$ | $m^2/s$ | ضریب انتشار جرم گونه $\alpha$ |
| $D_{\alpha\beta}$ | $m^2/s$ | ضریب انتشار دوبه‌دویی گونه $\beta$ در گونه $\alpha$ |
| $D_{hyd}$ | m | قطر هیدرولیکی |
| $Da$ | - | عدد دارسی |
| $du^*_{x\alpha}$ | - | لغزش بی‌بعد گونه $\alpha$ نسبت به سرعت متوسط سیال در جهت $x$ |
| $du^*_{y\alpha}$ | - | لغزش بی‌بعد گونه $\alpha$ نسبت به سرعت متوسط سیال در جهت $y$ |
| $E_0$ | V | پتانسیل بازگشت‌پذیر مدار باز پیل سوختی |
| $e_i$ | m/s | سرعت شبکه‌ای در جهت $i$ |
| $e$ | J/kg | انرژی درونی |
| $F$ | $m/s^2$ | نیروی وارده به سیال از بستر جامد بر واحد جرم |
| $F_i$ | $kg/m^3\cdot s$ | نیروی وارده به سیال در مقیاس شبکه |
| $F_x$ | $m/s^2$ | نیروی وارده به سیال در جهت $x$ بر واحد جرم |
| $F_y$ | $m/s^2$ | نیروی وارده به سیال در جهت $y$ بر واحد جرم |
| $F_\zeta$ | - | تابع هندسی در محاسبات محیط متخلخل |
| $f_i$ | $kg/m^3$ | تابع توزیع جرمی منتج از مرحله برخورد در جهت $i$ |
| $f'i$ | $kg/m^3$ | تابع توزیع جرمی منتج از مرحله اشاعه در جهت $i$ |
| $far$ | C/mol | ثابت فاراده |
| $g_{eq}$ | K | تابع توزیع حرارتی تعادلی |
| $g_f$ | J | انرژی آزاد گیبس |
| $g_i$ | K | تابع توزیع حرارتی منتج از مرحله برخورد در جهت $i$ |
| $g'_i$ | K | تابع توزیع حرارتی منتج از مرحله اشاعه در جهت $i$ |
| $g_i^n$ | K | تابع توزیع حرارتی گره همسایه در جهت $i$ |
| $h_f$ | J | انتالپی تشکیل ماده |
| $I$ | - | ماتریس یکه |
| $i$ | $A/m^2$ | چگالی جریان |
| $i_x$ | $A/m^2$ | چگالی جریان در جهت $x$ |

| | | |
|---|---|---|
| $j$ | $A/m^3$ | چگالی جریان انتقالی |
| $K$ | $m^2$ | نفوذپذیری هیدرولیکی محیط متخلخل |
| $k$ | W/m·K | ضریب هدایت حرارت |
| $k_r$ | - | نسبت ضریب هدایت حرارت جسم جامد یا محیط متخلخل به سیال |
| $L$ | m | طول کانال واقع در میدان حل |
| $L_{ch}$ | m | طول یک نیم‌پیچ از کانال مارگونه پیل سوختی |
| $L_{ij}$ | - | ماتریس برخورد |
| $L_{sp}$ | m | فاصله دو مانع به علاوه طول مانع |
| $M$ | kg/mol | جرم مولکولی |
| $N_y$ | - | تعداد گره‌های محاسباتی در عرض کانال |
| $Nu$ | - | عدد نوسلت |
| $n$ | $mol/m^3$ | عدد چگالی |
| $n_{eod}$ | - | ضریب کشش الکترو-اسمزی |
| $P$ | Pa | فشار |
| $P_{sat}$ | Pa | فشار اشباع |
| $\overline{P}$ | Pa | فشار متوسط در مقطع کانال |
| $p$ | N/kg | تکانه خطی |
| $Q_r$ | $W/m^2$ | شار حرارت موقتی در محاسبات شرط مرزی دما-ثابت |
| $q$ | $W/m^2$ | شار حرارت |
| $q^{1-2}$ | $W/m^2$ | شار حرارتی مماسی درون‌یابی شده بین گره‌های سمت جامد و سیال |
| $q^{2-3}$ | $W/m^2$ | شار حرارتی مماسی برون‌یابی شده از گره‌های داخل سیال |
| $q_t$ | $W/m^2$ | شار حرارتی مماس بر مرز، منتج از مرحله برخورد |
| $q'_t$ | $W/m^2$ | شار حرارتی مماس بر مرز، منتج از مرحله اشاعه |
| $R$ | J/kg·K | ثابت گازها |
| $Re$ | - | عدد رینولدز |
| $r_\alpha$ | - | نسبت جرم مولکولی گونه $\alpha$ام به جرم مولکولی نیتروژن |
| $S$ | m | متغیر مسافت |
| $T$ | K | دما |
| $T_r$ | K | دمای موقتی در محاسبات شرط مرزی دما-ثابت |
| $T_\infty$ | K | دمای توده |
| $\overline{T}$ | K | دمای متوسط در مقطع کانال |
| $t$ | s | متغیر زمان |
| $t_{ct}$ | m | ضخامت لایه کاتالیست |
| $U_c$ | m/s | سرعت سیال در مرکز هسته متخلخل |
| $U_f$ | m/s | سرعت سیال در قسمت آزاد |
| $u$ | m/s | سرعت سیال |
| $u_l$ | m/s | سرعت شبکه‌ای |

| | | |
|---|---|---|
| $u_n$ | $m^2/s^2$ | سرعت مجذور همسایگی در محاسبه توزیع تعادلی |
| $u_x$ | m/s | سرعت سیال در جهت $x$ |
| $u_{x\alpha}$ | m/s | سرعت گونه $\alpha$ در جهت $x$ |
| $u_y$ | m/s | سرعت سیال در جهت $y$ |
| $u_{y\alpha}$ | m/s | سرعت گونه $\alpha$ در جهت $y$ |
| $\bar{u}$ | m/s | سرعت متوسط سیال در مقطع کانال |
| $V_{act}$ | V | افت پتانسیل (ولتاژ) فعال‌سازی |
| $V_{cell}$ | V | پتانسیل (ولتاژ) خروجی سلول |
| $V_{ohm}$ | V | افت پتانسیل (ولتاژ) اهمی |
| $\dot{V}_c$ | sccm | دبی حجمی سیال در کانال سمت کاتد |
| $W$ | m | عرض کانال |
| $W_{ch}$ | m | عرض کانال |
| $W_{cor}$ | m | عرض هسته متخلخل |
| $W_{obs}$ | m | عرض مانع مستطیلی |
| $W_{stp}$ | m | عرض ورودی کانال در جریان پله |
| $w_i$ | - | تابع وزنی در جهت $i$ |
| $ws_i$ | - | تابع وزنی حرارتی در جریان سکون در جهت $i$ |
| $X$ | m | محور طولی |
| $X_\alpha$ | - | کسر غلظت گونه $\alpha$ |
| $X_{th}$ | m | طول حرارتی |
| $x$ | m | محور طولی |
| $Y$ | m | محور عرضی |
| $y$ | m | محور عرضی |
| | | |
| $\Delta x$ | – | گام مکانی شبکه‌ای |
| $\Delta y$ | – | گام زمانی شبکه‌ای |
| $\Omega$ | - | عملگر برخورد |
| $\alpha$ | $m^2/s$ | ضریب انتشار حرارت |
| $\alpha^a, \alpha^c$ | - | ضرایب انتقال جریان در آند و کاتد |
| $\beta, \beta_1$ | - | ضرایب ثابت در محاسبات محیط متخلخل |
| $\delta t$ | s | گام زمانی |
| $\delta y$ | m | گام مکانی |
| $\varepsilon$ | - | ضریب تخلخل |
| $\eta_{hyd}$ | - | ضریب اثرگذاری هیدرودینامیکی هسته متخلخل |
| $\lambda$ | - | محتوای آب غشا |
| $\mu$ | Pa·s | لزجت دینامیکی |
| $\nu$ | $m^2/s$ | لزجت سینماتیکی |

| | | |
|---|---|---|
| $\rho$ | $kg/m^3$ | چگالی جرمی |
| $\sigma$ | S/m | ضریب هدایت پروتون بر واحد طول |
| $\tau_f$ | - | زمان آرامش هیدرودینامیکی |
| $\tau_g$ | - | زمان آرامش حرارتی |
| $\tau_{\alpha\beta}$ | - | زمان آرامش انتشار دوبه‌دویی گونه $\beta$ در گونه $\alpha$ |
| $\omega$ | - | ضریب وزنی |

زیروندها و زبروندها

| | |
|---|---|
| *0* | ورودی کانال |
| *a* | آند |
| *b* | روی مرز |
| *bulk* | توده |
| *c* | کاتد |
| *eff* | مقدار مؤثر |
| *eq* | مقدار تعادلی |
| *f* | سیال |
| $H_2$ | هیدروژن |
| *int* | روی سطح واسط |
| *m1* | گره مستقر در پشت مرز |
| *max* | بیشینه |
| *n* | راستای عمود بر سطح |
| $O_2$ | اکسیژن |
| *p1* | گره مستقر در سیال مجاور مرز |
| *p2* | گره مستقر در سیال مجاور گره *p1* |
| *ref* | مرجع |
| *s* | جامد |
| *t* | راستای مماس بر سطح |
| *w* | روی دیواره |

# مقدمه

پیل سوختی غشای تبادل پروتون معروف به PEM[1] به عنوان گزینه مهمی برای منبع تغذیه خودروهای آینده مطرح گردیده است. به علاوه در موارد دیگری چون منبع تغذیه وسایل الکترونیکی سیار، نیروگاه‌های برق کوچک و متوسط، منابع انرژی پشتیبان و حامل انرژی تولید شده از منابع انرژی نو نیز کاربردهای مختلفی برای آن پیش‌بینی شده است.

درک آنچه در پیل رخ می‌دهد پایه طراحی و بهینه‌سازی عملکرد آن خواهد بود. روش‌های آزمایشگاهی در کنار نتایج معتبر و قابل اتکایی که ارائه می‌دهند، هزینه بالایی می‌برند و به علاوه اطلاعاتی محدود آن هم عمدتاً به صورت کلی و نه در نقاط مختلف سلول ارائه می‌دهند؛ به خصوص با توجه به کوچکی ابعاد و حساسیت محیط، سنسورها خود ممکن است در کارکرد پیل تأثیر گذاشته، دقت آزمایش را زیر سؤال ببرند. بنابراین شبیه‌سازی عددی راه‌کار بسیار سودمند و مهمی در مطالعه پیل‌های سوختی شناخته می‌شود.

اما شبیه‌سازی‌های عددی پیل سوختی نیز مسأله چالش‌انگیزی است؛ فرآیندهای حاضر در چنین مسأله‌ای، مجموعه‌ای از پدیده‌های مکانیکی، حرارتی و الکتروشیمیایی مختلف را شامل می‌شود که هر یک مدل مخصوص خود را دارند. از طرف دیگر سیالات متنوعی با خواص فیزیکی و شیمیایی کاملاً متفاوت حضور دارند که غلظت آنها از مکانی به مکان دیگر تغییر می‌کند و در حالت گذرا به زمان هم وابسته‌اند. پس خواص فیزیکی و شیمیایی مخلوط سیال نیز به تبع آن متغیر

[1] Proton Exchange Membrane