بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه مازندران

مدل سازی عددی پیل سوختی متانولی

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته مهندسی مکانیک-گرایش تبدیل انرژی

اساتید راهنما:

دکتر کورش صدیقی

دکتر موسی فرهادی

نگارش:

مجتبی پرویزی عمران

زمستان ۸۸

خداوندا

چگونه می توانم نعمت تو را سپاس گفته، آن گاه که مرا همقدم کاروان مشتاقانی قرار دادی که میان انبوه سوال ها و چرا ها به دنبال نیم نگاهی از کلمه کبریایی تو می گردند و آتش عشق به دانش و سوز نیاز به شناخت تو را با اشک قلم فرو می نشاندند.

آن قدر بزرگی که به هر بضاعت اندکی که از وجود بنده ای ناچیز به سوی تو جهت می گیرد نظر می کنی، و من حیران عظمت تو و شرمنده کوچکی گاهایم . قدم در راهی نهاده ام که آرزو دارم در هر منزلش عظمت حضورت را احساس کنم. حرکت مرا بپذیر و آن چنان کن که نظر لطف آن عزیزی که کیتی قائم به وجود اوست بدرقه راهم باشد.

تقدیم به:

مادر عزیزم، او که سیمای مهربانش همواره قوتم بخشید و وجود پر مهرش تکیه گاهم و کلامش استواریه گاهایم و دریای بی کران صبرش آرامش جان من است.

تقدیم به:

پدر بزرگوارم به پاس زحمات بی دریغش

هر چند از جبران الطافشان عاجزم لیکن از خداوند متعال می خواهم که سایه وجودشان را توام با سلامتی بر سرم حفظ نماید.

تقدیم به:

خواهر و برادر عزیزم تکیه گاههای استوار من در زندگی.

و همچنین تقدیم به همه دوستان خوبم که بودن در کنارشان سختی های دوران تحصیل را به لحظات خوش و خاطره انگیز مبدل ساخت.

مجتبی پرویزی عمران

اسفند ۸۸

باتقدیر و تشکر فراوان از اساتید راهنما و مشاور

جناب آقای دکتر فرهادی و دکتر صدیقی

استاتید عزیزم، که دستاوردهای این پروژه در سایه‌ی هدایت و نظارت ایشان بدست آمده است و همواره اطمینان حضورشان باعث دلگرمی من در به سرانجام رساندن این آغاز بود.

جناب آقای مهندس آقاجانی

مشاور بزرگوارم که صبورانه مرا از تجربیات گرانبهایشان بهره مند ساختند.

و همچنین اساتید محترم که زحمت مطالعه پایان نامه اینجانب را متقبل شدند.

چکیده

در این پایان نامه شبیه سازی جریان سیال و واکنش های شیمیایی در یک پیل سوختی متانولی[1] مورد توجه قرار گرفته است. مدل سازی به صورت سه بعدی و در نرم افزار FLUENT صورت گرفته که به طور بالفعل امکان مدل سازی فرآیندهای شیمیایی یک پیل سوختی متانولی در آن فراهم نیست. لذا برای این کار از قابلیت توابع تعریف شده توسط کاربر[2] استفاده شده است. واکنش های شیمیایی، چه در قسمت آند و چه در قسمت کاتد به صورت تک فاز وچندجزئی[3] فرض شده که برای محدوده غلظت حل شده، فرضی منطقی است و سازگاری خوب نتایج به دست آمده با نتایج آزمایشگاهی صحت این ساده سازی را تایید می کند.

تاثیر پارامترهایی مانند دما، غلظت، عمق و پهنای کانال بر منحنی های پولاریزاسیون[4]، چگالی توان[5] و گذرمتانول[6] بررسی شده است. نتایج به دست آمده درک روشنی از چگونگی و میزان تاثیر این پارامترها بر منحنی های عملکرد را نشان می دهد که می تواند به عنوان نتایج قابل استنادی در بهینه سازی این نوع پیل سوختی مورد توجه قرار گیرد.

کلمات کلیدی: مدل سازی عددی، جریان عبوری، پیل سوختی متانولی، معادلات تافل[7]، نرم افزار FLUENT.

---

[1] *Direct methanol fuel cell(DMFC)*

[2] *User defined function (UDF)*

[3] *Multi component*

[4] *Polarization curve*

[5] *Power density*

[6] *Cross over*

[7] *Tofel kinetics equation*

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه ۱

۱-۱ مقدمه ۱

۱-۲ مروری بر کارهای انجام شده ۳

فصل دوم: معرفی پیل سوختی ۶

۲-۱ مقدمه ۶

۲-۲ اصول پایه ۶

۲-۳ انواع پیل‌های سوختی ۸

۲-۳-۱ پیل‌های سوختی پلیمری (PEFC) ۸

۲-۳-۲ پیل های سوختی متانولی (DMFC) ۸

۲-۳-۳ پیل‌های سوختی آلکالینی (AFC) ۹

۲-۳-۴ پیل‌های سوختی اسید فسفریکی (PAFC) ۹

۲-۳-۵ پیل‌های سوختی کربنات مذاب (MCFC) ۹

۲-۳-۶ پیل‌های سوختی اکسید جامد(SOFC) ۱۰

۲-۴ اجزاء جانبی پیل‌های سوختی ۱۰

۲-۵ پیل سوختی هیدروژنی ۱۴

۲-۶ پیل های سوختی متانولی ۱۷

۲-۶-۱ اصول پایه ۱۷

۲-۶-۲ واکنش‌های الکتروشیمیایی آندی و کاتدی ۲۲

۲-۶-۳ کاتالیست‌های آند ۲۴
۲-۶-۴ الکترولیت ۲۵
۲-۶-۵ پدیده گذر متانول ۲۶
۲-۶-۶ روش‌های استاندارد برای کاهش پدیده نفوذ سوخت ۲۷
۲-۶-۷ مدیریت گاز در سمت آند ۳۰
۲-۶-۸ کاربردهای پیل سوختی متانولی ۳۱
فصل سوم : هندسه و معادلات حاکم مسئله ۳۳
۳-۱ مقدمه ۳۳
۳-۲ فرضیات شبیه سازی ۳۳
۳-۳ هندسه مسئله ۳۵
۳-۴ معادلات حاکم ۳۸
۳-۴-۱ معادلات پیوستگی وممنتوم ۳۸
۳-۴-۲ معادلات غلظت اجزا ۳۹
۳-۴-۳ معادله انتقال تافل ۴۱
۳-۴-۴ محاسبات گذر متانول ۴۳
۳-۵ پارامتر های جریان ۴۵
۳-۶ الگوریتم حل معادلات ۴۷
۳-۷ گسسته سازی و حل عددی ۵۰
۳-۸ شرایط مرزی مسئله ۵۰
۳-۹ بررسی وابستگی حل به شبکه ۵۱
فصل چهارم :تحلیل و بررسی نتایج ۵۴
۴-۱ مقدمه ۵۴

۴-۲ اعتبار سنجی مسئله ۵۴
۴-۳ اثر تغییر غلظت متانول ۵۶
۴-۴ اثر تغییرات دما ۶۴
۴-۵ اثر تغییر عمق کانال ۶۸
۴-۶ اثر تغییر پهنای کانال ۷۱
فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادات ۷۵
مراجع ۷۷
ضمائم ۸۱

فهرست اشکال

شکل ۲-۱ نمای شماتیک یک پیل سوختی[۱]. ۷
شکل ۲-۲ قابلیت‌ها و محدوده کاری انواع مختلف پیل سوختی [۱۹]. ۱۲
شکل ۲-۳ شماتیکی از منحنی پولاریزاسیون و منحنی چگالی توان[۱]. ۱۳
شکل ۲-۴ نمای جانبی از لایه های مختلف پیل سوختی هیدروژنی [۱۷]. ۱۵
شکل ۲-۵ اجزا اصلی پیل سوختی و نوع فرایندهایی که در آنها رخ می‌دهد [۱۷]. ۱۶
شکل ۲-۶ نمایی از یک توده پیل سوختی متانولی [۲۵]. ۱۸
شکل ۲-۷ الگوهای مختلف شارش جریان در کانال پیل سوختی. ۲۰
شکل ۲-۸ منحنی مقایسه منحنی پولاریزاسیون پیل سوختی متانولی و هیدروژنی[۲۰]. ۲۱
شکل ۲-۹ مراحل مختلف اکسیداسیون در پیل سوختی متانولی [۱۸]. ۲۳
شکل ۲-۱۰ ساختار کاتالیست آند[۲۰]. ۲۴
شکل ۲-۱۱ ساختار الکترولیت [۲۰]. ۲۵
شکل ۲-۱۲ تغییرات نفوذ متانول در کاتد با غلظت سوخت در آند و جریان[۲۱]. ۲۸

شکل ۱۳. شکل گیری حبابهای CO_2 و به هم پیوستن آنها در کانال ورود سوخت [۲۵]. ۳۱
شکل ۳-۱ فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی در پیل سوختی متانولی ۳۴
شکل ۳-۲ نمایی سه بعدی از هندسه حل شده ۳۶
شکل ۳-۳ محدوده حل،با در نظر گرفتن شرط تقارن ۳۷
شکل ۳-۴ روند حل معادلات مختلف پیل سوختی متانولی ۴۹
شکل ۳-۵ شبکه بندی محدوده حل ۵۲
شکل ۴-۱ مقایسه نتایج عددی با نتایج آزمایشگاهی ۵۵
شکل ۴-۲ منحنی تغییرات ولتاژ در غلظت های مختلف. ۵۶
شکل ۴-۳ منحنی تغییرات چگالی توان با غلظت. ۵۷
شکل ۴-۴ منحنی تغییرات گذر متانول با غلظت. ۵۸
شکل ۴-۵ مقایسه گذر متانولی ناشی از گرادیان غلظت و گذر متانولی الکترواسمتیک. ۵۸
شکل ۴-۶ منحنی تغییرات پتانسل اضافی آندی با غلظت ۵۹
شکل ۴-۷ منحنی تغییرات پتانسیل اضافی کاتدی با غلظت. ۶۰
شکل ۴-۸ کانتور غلظت متانول درچگالی جریان ا لف) ۰.۰۶۵ و ب) ۰.۱۲ آمپر بر سانتی متر مربع ۶۱
شکل ۴-۹ توزیع غلظت متانول در چگالی جریان ۰.۱۲ و در ا لف) کانال جریان ب) ناحیه نفوذ. ۶۲
شکل ۴-۱۰ کانتور غلظت اکسیژن درچگالی جریان ا لف)۰.۰۶۵ و ب) ۰.۱۲ آمپر بر سانتی متر مربع ۶۲
شکل ۳۱ مقایسه کسر جرمی متوسط متانول در لایه های مختلف آندی. ۶۳
شکل ۴-۱۲ کانتور سرعت آند. ۶۴
شکل ۴-۱۳ منحنی تغییرات ولتاژ سل با دما ۶۵
شکل ۴-۱۴ منحنی تغییرات چگالی توان با دما. ۶۶
شکل ۴-۱۵ منحنی تغییرات گذر متانول با دما. ۶۷
شکل ۴-۱۶ منحنی تغییرات ولتاژ سل برای عمق های مختلف. ۶۸

شکل ۴-۱۷ منحنی تغییرات چگالی توان برای عمق های مختلف کانال. **۶۹**

شکل ۴-۱۸ منحنی تغییرات گذر متانول برای عمق های مختلف کانال..... **۷۰**

شکل ۴-۱۹منحنی تغییرات ولتاژ سل برای پهنای مختلف کانال. **۷۱**

شکل ۴-۲۰ منحنی تغییرات چگالی توان برای پهنای مختلف کانال..... **۷۲**

شکل ۴-۲۱ توزیع غلظت متانول در لایه های مختلف آند و چگالی جریان۰/۱۲ و برای پهنای کانال الف)۱/۵ ب) ۱.۰ میلی متر. **۷۲**

شکل ۴-۲۲ منحنی تغییرات گذر متانول برای پهنای مختلف کانال **۷۳**

فهرست جداول

جدول ۳-۱ جرئیات هندسی مسئله [۳۰] **۳۷**

جدول ۳-۲. ترم های چشمه ممنتوم و جرم در نواحی مختلف **۴۰**

جدول ۳-۳ پارامترهای فیزیکی و شیمیایی مدل **۴۵**

جدول ۴ مقایسه ولتاژ سل برای مش بندی های مختلف در چگالی جریان ۰/۰۶۴۲. ..... **۵۳**

جدول ۵ مقایسه ولتاژ سل برای مش بندی های مختلف در چگالی جریان ۰/۱۶۹. ..... **۵۳**

جدول ۴-۱ مقایسه عددی نتایج به دست آمده از تغییرات هندسی کانال..... **۷۴**

فهرست علائم

A_{cell}: مساحت سل(m^2)

$C_{CH_{ac/m}}$: کسر جرمی متانول در دیواره مشترک کاتالیست-غشا

C_{CH}^{ref}: غلظت مرجع متانول($mol.m^{-3}$)

C_{O2}^{ref}: غلظت مرجع اکسیژن($mol.m^{-3}$)

D_k: ضریب نفوذ($m^2.s^{-1}$)

D_k^{eff}: ضریب نفوذ موثر($m^2.s^{-1}$)

D_{CH}^{m} : ضریب نفوذ متانول در غشا($m^2.s^{-1}$)

E_{cell} : ولتاژ مدار باز(V)

F: ثابت فارادی($Col.mol^{-1}$)

$\Delta\overline{g}_f$: انرژی گیپس($KJ.mol^{-1}$)

H_c: ارتفاع کانال(mm)

I : چگالی جریان متوسط($A.cm^{-2}$)

I_{par} : جریان پارازیت($A.cm^{-2}$)

$\vec{J}_k$: شار نفوذ($Kg.m^{-2}.s^{-1}$)

K: ضریب نفوذ(m^2)

L_c : طول کانال(mm)

M_{CH}: جرم مولی متانول ($Kg.mol^{-1}$)

M_w: جرم مولی آب($Kg.mol^{-1}$)

m_k: جرم اجزا(Kg)

m_T: جرم کل(Kg)

N_M^{CH}: شار مولی متانول به کاتد($mol.m^{-2}.s^{-1}$)

P: فشار(Pa)

P_0 : فشار مرجع(Pa)

Q_{anode}^{inlet} :دبی ورودی آند($mlit.\min^{-1}$)

$Q_{cathode}^{inlet}$: دبی ورودی کاتد($mlit.\min^{-1}$)

$R_{contact}$: مقاومت تماسی غشا($\Omega.cm^2$)

R : ثابت گازها($J.mol^{-1}.K^{-1}$)

S_k : چشمه جرم غلظت($Kg.m^{-3}.s^{-1}$)

S_u : چشمه جرم ممنتوم($Kg.m^{-3}.s^{-1}$)

T : دما(K)

T_0 : دمای مرجع(K)

$\boldsymbol{U}$: میدان سرعت سیال($m.s^{-1}$)

V : ولتاژ خروجی(V)

W_c: پهنای کانال(mm)

W_r: پهنای شیار(mm)

ε: ضریب تخلخل

ρ: چگالی سیال($Kg.m^{-3}$)

μ: لزجت سیال($Kg.m^{-1}.s^{-1}$)

γ_a: مرتبه واکنش آند

γ_c: مرتبه واکنش کاتد

η_a: پتاسیل اضافی آند(V)

η_c : پتانسیل اضافی کاتد(V)

α_a: ضریب انتقال بار آند

α_c: ضریب انتقال بار کاتد

λ_W: ضریب مقاومت الکترواسمتیک آب

λ_{CH} : ضریب مقاومت الکترواسمتیک متانول

j_a^{ref} : چگالی جریان مرجع در واحد حجم آند($A.cm^{-3}$)

J_c^{ref} : چگالی جریان مرجع در واحد حجم کاتد($A.cm^{-3}$)

η_f : ضریب مصرف سوخت

σ_{mem} : هدایت یونی غشا($S.m^{-1}$)

σ^0_{mem}: هدایت یونی مرجع($S.m^{-1}$)

δ_{abt}:ضخامت لایه نفوذ آند(mm)

δ_{act} : ضخامت لایه کاتالیست آند(mm)

δ_{mem}: ضخامت غشا(mm)

δ_{cbt}: ضخامت لایه نفوذ کاتد(mm)

δ_{cct}: ضخامت لایه کاتالیست کاتد(mm)

فصل اول

مقدمه

۱-۱ مقدمه

امروزه بیش از ۹۰٪ انرژی مصرفی دنیا از سوختهای فسیلی است که سهم عمده آن در بخشهای حمل و نقل و نیروگاهها مصرف می‌شود. در این دو بخش انرژی شیمیایی سوخت طی فرایند احتراق آزادشده و کمتر از۳۰٪ آن به کار مکانیکی تبدیل شده و بقیه تلف می‌شود. بازده این روش غیرمستقیم تبدیل انرژی شیمیایی سوخت به کار مکانیکی یا الکتریسیته بدلیل ملاحظات ترمودینامیکی کم بوده و به دلیل وقوع احتراق در درجه حرارتهای بالا گازهای سمی مانند NO_X، SO_X ، CO و غیره تشکیل شده و وارد محیط زیست می‌شوند. با توجه به محدودیت منابع انرژی و مشکلات زیست محیطی ناشی از این آلاینده‌ها لزوم استفاده از روشهای تبدیل انرژی با راندمان بالاتر و همچنین استفاده از سوختهایی که آلوده کننده نبوده و امکان تولید آن از منابع انرژی تجدیدپذیر و تجدید ناپذیر ممکن باشد، اهمیت پیدا می‌کند. پیلهای سوختی بعنوان وسایل تبدیل‌کننده مستقیم انرژی شیمیایی سوختها به انرژی الکتریکی می‌تواند یک راه حل قابل اطمینان برای رفع مشکل انرژی و مشکلات زیست محیطی باشد. ویژگی‌هایی از قبیل راندمان بالا، آلودکنندگی کم، قابلیت استفاده از سوختهای مختلف، نداشتن سروصدا، هزینه تعمیر و نگهداری کم و غیره باعث شده است که پیلهای سوختی گزینه مناسبی جهت کاربردهای ثابت (نیروگاهها) و متحرک(اتومبیل و وسایل برقی قابل حمل) در آینده باشند[۱].

راندمان پیلهای سوختی بدلیل تبدیل مستقیم انرژی شیمیایی سوخت به الکتریسیته (و با حذف مرحله تبدیل انرژی شیمیایی سوخت به حرارت) تابع قانون کارنو نیستند و با تکنولوژی حاضر مقدار راندمان به حدود ۴۰ تا ۶۵ درصد می‌رسد. جریان الکتریکی خروجی پیلهای سوختی جریانی مستقیم با ولتاژ کم است؛ از این رو امکان استفاده مستقیم آن در بسیاری از وسایل برقی وجود دارد. برای تولید قدرتی در حد مطلوب، پیلهای سوختی را می توان بصورت سری و موازی به یکدیگر متصل کرده و یک توده پیل سوختی را تشکیل داد. علاوه بر آن در صورت نیاز به جریان متناوب می توان با استفاده از یک مبدل الکتریکی، جریان مستقیم یک توده پیل سوختی را به یک جریانی متناوب تبدیل کرد.

انواع مختلفی از پیلهای سوختی وجود دارند که معمولا بر اساس نوع الکترولیت بکار رفته در آنها تقسیم بندی می‌شوند. این پیل ها عبارتند از: پیل سوختی پلیمری، پیل سوختی الکالین، پیل سوختی اسید فسفریک، پیل سوختی کربنات مذاب و پیل سوختی اکسید جامد.

در حال حاضر هزینه تولید پیل های سوختی در مقایسه با موتورهای احتراقی و باتریها زیاد است و برای تجاری شدن آن نیاز به کاهش هزینه‌های تولید است که این کار با کاهش هزینه مونتاژ و افزایش چگالی قدرت تولیدی پیل سوختی از طریق بهینه سازی امکان پذیر است. بهینه سازی پیل های سوختی در صورتی ممکن است که از فرایندهایی که در پیل سوختی واقع می شود، درک عمیق تری داشته و اثر پارامترهای مختلف بر عملکرد آنها را بخوبی بدانیم. با توجه به ابعاد بسیار کوچک کانال و لایه های نفوذ امکان بدست آوردن اطلاعات تجربی نسبتاً کاملی در مورد فرایندهایی که در پیل سوختی رخ می‌دهد، ممکن نیست. از این رو مدل سازی پیل های سوختی امری ضروری و اقتصادی است. مدل سازی امکان بهینه کردن طراحی پیلهای سوختی را چه بصورت تک پیل و چه بصورت توده فراهم می آورد.

۱-۲ مروری بر کارهای انجام شده

تحقیقات انجام شده در زمینه شبیه سازی پیل های سوختی، به خصوص پیل های سوختی هیدروژنی بسیار گسترده و متنوع است [۲].دلیل این مسئله سابقه طولانی تر این نوع پیل های سوختی و همچنین امکاناتی است که برخی نرم افزارهای شبیه سازی مانند FLUENT در اختیار محققین قرار داده است [۳]. ولی در رابطه با مدلسازی CFD و بخصوص برای DMFC شرایط تا حدودی متفاوت است. تحقیقات کمی در این زمینه به دلیل تازگی مسئله و همچنین پیچیدگی فرآیندهای شیمیایی آن در مقایسه با پیل های سوختی هیدروژنی وجود دارد.

شبیه سازی هایی که تاکنون انجام شده به دو دسته کلی قابل تقسیم بندی است:

۱- مدل های یک بعدی یا اصطلاحا 1D-model

۲- مدل های چند بعدی

در مدل سازی یک بعدی ازاثرات تغییر سرعت و غلظت در راستای طولی و عرضی سلول صرفه نظر شده و فقط در جهت عمق، اجزا کاتد و آند در نظر گرفته می شود. به این ترتیب معادلات ممنتوم و غلظت ساده تر شده و به معادلات یک بعدی که با روش های تحلیلی یا عددی قابل حل اند تبدیل می شود . مزیت این روش سادگی و کمی زمان محاسبه در آن است و می تواند به عنوان ابزار مفیدی برای درک کیفی اثر پارامترهای مختلف مورد استفاده قرار گیرد. مشکل این روش خطای قابل توجه ناشی از ساده سازیها است که محدوده اعتبار نتایج به دست آمده را کاهش می دهد. همچنین با چنین مد ل هایی امکان بررسی اثر برخی پارامترها نظیر پارامتر های هندسی وجود ندارد. یکی ازنخستین مدل های یک بعدی-تحلیلی، توسط اسکات[1] و همکاران در سال ۱۹۹۹ارائه شد [۴]. سازگاری خوب نتایج به دست آمده از مدل با نتایج آزمایشگاهی

[1] *Scott*

کارایی این نوع مدل سازی را تایید کرد. سپس او در تحقیقات بعدی مدل اولیه ارائه شده را بهبود بخشیده و فرض های ساده کننده کمتری به کار برد [۵-۶]. اثر برخی پارامترها مانند غلظت متانول و توزیع آن در لایه های مختلف، دما و تخلخل بررسی شده تا تصویر روشنی از کیفیت اثر این پارامترها ایجاد گردد. تحقیقات مشابهی نیز توسط کلیکفسکی [1] و همکاران در سال های اخیر صورت گرفته است[۷-۱۰]. قدم بعدی ارائه مدل های دقیق تر دو بعدی و سه بعدی بود. پیشتاز در این زمینه ونگ [2] و همکاران بودند. مدلی دو بعدی از جریان دو فازی با واکنشهای چند جزئی الکتروشیمیایی توسط وی برای یک DMFC خوراک مایع شامل الکترودها، کانالها و جداکننده های غشا ارائه شد[۱۱]. واکنش شیمیایی درلایه کاتالیست آندی و کاتدی در شبیه سازی وی، به صورت یک دیواره تولید جرم در نظر گرفته شد.

بعدها مدل مذکور در تحقیق دیگری توسط ونگ به یک مدل سه بعدی و دو فازی بسط داده شد [۱۲]. یک مدل ریاضی چند جزئی، سه بعدی، تک فاز، برای تزریق مایع DMFC توسط جیابین [3] و همکاران توسعه داده شد [۱۳]. معادلات بقای جرم، ممنتوم و اجزا [4] با سینتیک الکتروشیمیایی در هر دو لایه کاتالیست در آند و کاتد کوپل شدند. در سمت آند فاز مایع و در سمت کاتد فاز گاز تحت بررسی قرار گرفتند. مدل CFD بر اساس حجم محدود برای بسط کد محاسبات عددی استفاده شده است و کد با موفقیت برای شبیه سازی پیل سوختی به کار برده شد. مدل توانایی پیش بینی منحنی های پولاریزاسیون تحت شرایط کاری متفاوت را داشته است واز آن برای تحقیق درباره تأثیرات غلظت متانول ، تخلخل لایه های نفوذ و کاتالیست و دبی جریان استفاده شد. شبیه سازی اخیر نیز مجددا در یک تحقیق جدید با یک مدل دو فازی ارتقا داده شده،

[1] *Kulikovsky*
[2] *Wang*
[3] *Jiabbin*
[4] *Species*

اثر برخی پارامترها مانند کسر حجمی گاز [1]در کانال و در چگالی جریان های مختلف بررسی شد [۱۴]. اخیرا با افزایش قابلیتهای نرم افزارهای تجاری شبیه سازی عددی به خصوص نرم افزار FLUENT، استفاده از آنها برای مدل سازی پیل سوختی متانولی مورد توجه قرار گرفته است. در تحقیق مارکوس [2] مدلی سه بعدی - یک بعدی از MEA پیل سوختی متانولی در FLUENT ارائه شد [۱۵].

در شبیه سازی وی ناحیه کانال و نفوذ آندی به صورت سه بعدی در نظر گرفته شده و سایر اجزا، شامل لایه کاتالیست آندی، غشا ی جداکننده و تمام قسمت های کاتد با یک مدل یک بعدی جایگزین شده است. این دو قسمت با اعمال شرط مرزی برای شار متانول و جریان با کمک قابلیت توابع تعریف شده توسط کاربر با یکدیگر کوپل گردید. شبیه سازی برای غلظت های مختلف متانول و دما های کاری متفاوت برای گذرمتانول، منحنی پولاریزاسیون و چگالی توان انجام شد. پروژه حاضر در حقیقت بسط مدل ارائه شده در آن تحقیق می باشد.

[1] *Void fraction*

[2] *Marcos*