

第四章 模擬結果

4-1 基本模組模擬

4-1-1 模擬說明及結果

基本的模式參考[15]的參數輸入，採取反向進氣，陽極陰極不等壓設定，全增濕進口氣體（fully-humidify），上下表面對稱設定單電池模擬。

基本物理假設：

1. 氣體為理想氣體
2. 穩態的模擬
3. 均質的材料
4. 在邊界設定上採用 353K 定溫邊界條件
5. No-slip 邊界條件
6. 層流和不可壓縮流
7. 膜電極組（MEA）各組件均為均質的多孔性材料

圖 4.1 為電池配置示意圖，圖 4.2 為正面的格點分佈。在流道和 GDL 部分的格點採邊界緊湊而中央寬鬆的分配，這種配置為了能較精確計算邊界上差異比較大的溫度及濃度梯度。表 4.1 為模擬各項物理參數輸入和幾何尺寸，表 4.2 為各部分格點數和總數，表 4.3 為入口氣體的各質量分率，整個模擬計算以 Dupont 公司研發的 Nafion 117 交換膜的性質參數進行模擬。由於無法模擬零電流的情況，性能曲線（I-V 圖）在高電壓時無法決定起始點，故將模擬出來的低電流的點與[15]低電流第一點接合，看整條性能曲線的變化是否與[15]相仿，圖 4.3 為模擬之後的性能曲線與[15]的比較，可以看出與[15]的曲線相當的接近。

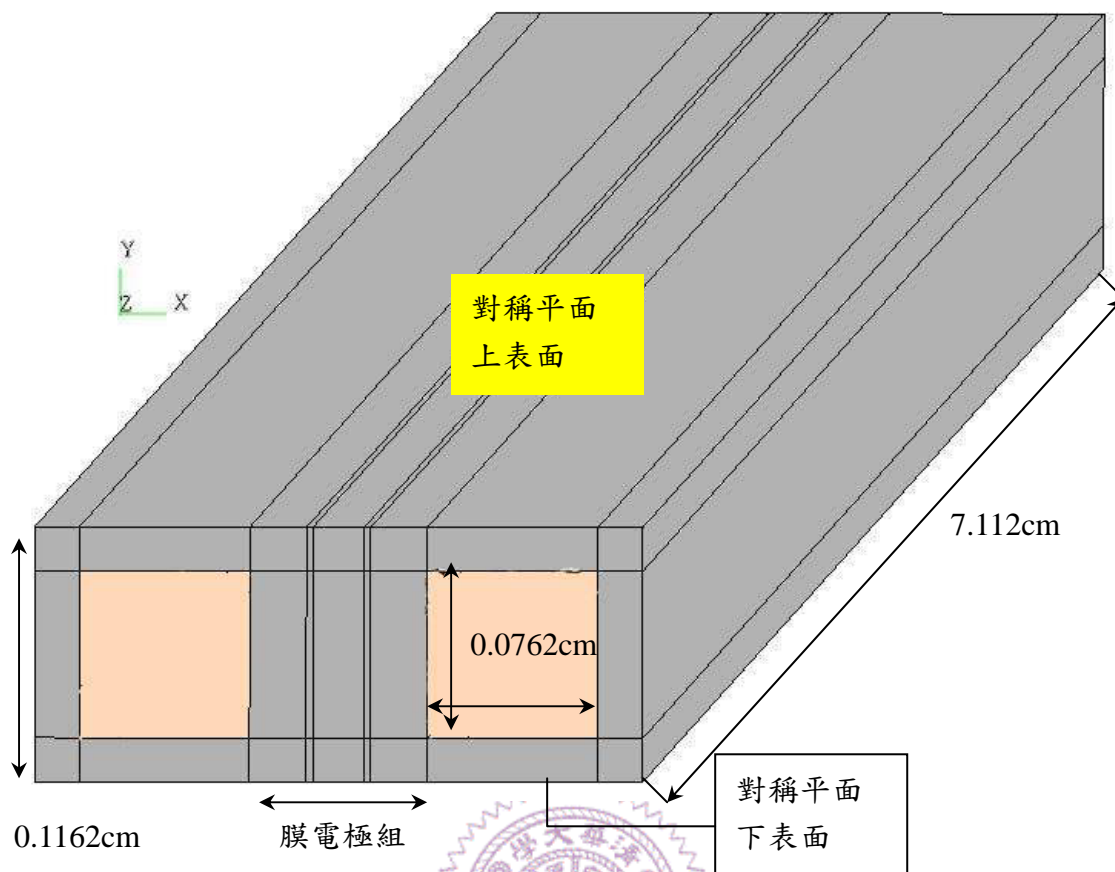


圖 4.1 電池配置示意圖

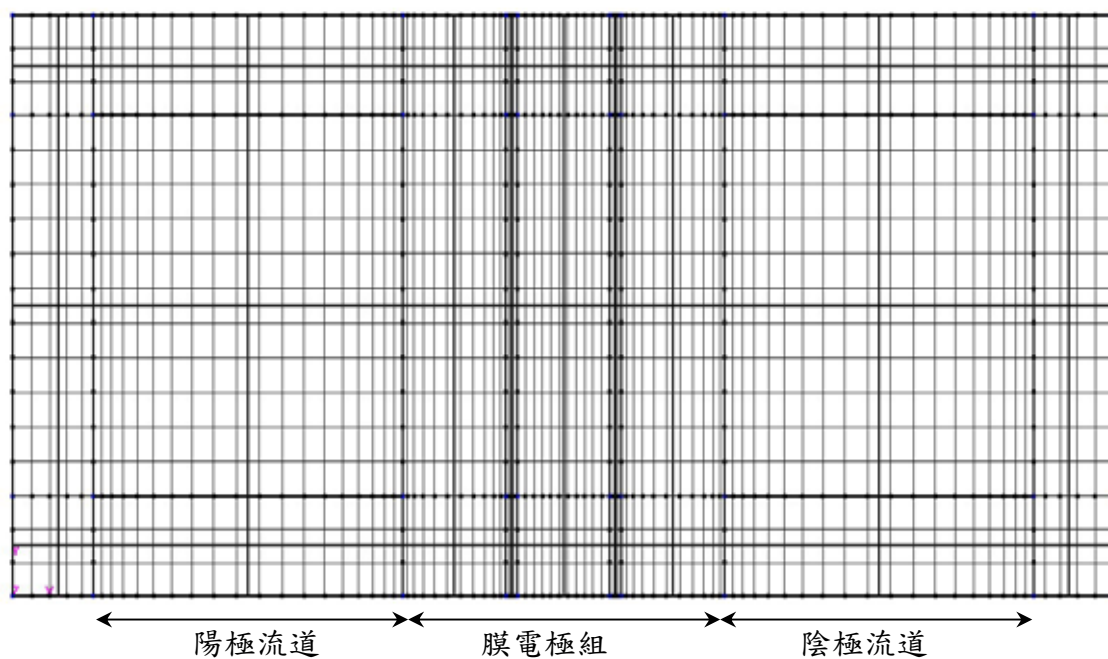


圖 4.2 電池格點分佈前視圖

表 4.1 幾何形狀尺寸與物理參數表

數值模式參數		值/計算方法
流道長度		0.07112 m
流道高度		7.62×10^{-4} m
流道厚度		7.62×10^{-4} m
擴散層厚度		2.54×10^{-4} m
觸媒層厚度		2.87×10^{-5} m
薄膜厚度		2.30×10^{-4} m
自由狀態下氣體擴散係數		Chapman-Enskog Equations (Bird et al., 1960)
電池操作溫度		353K
有效擴散係數		Bruggeman model
薄膜	tortuosity	$\tau = 5$
	孔徑大小	1e-6 m
	熱傳導係數	150.6 W/mK
	孔洞率	0.28
	滲透係數	$1e-18 \text{ m}^2$
	流體電傳導係數	f(H ₂ O, T), Springer et al., 1991
觸媒層	tortuosity	$\tau = 1.5$
	電傳導係數	53 1/ Ω m
	反應表面積對體積比值	5000
	孔徑大小	1e-6 m
	固體熱傳導係數	150.6 W/mK
	孔洞率	0.4
	滲透係數	$1e-11 \text{ m}^2$
	流體電傳導係數	4.2 W/mK
陽極反應	傳導係數(Tafel constant)	0.5
	Concentration dependence	0.5 (H ₂)
	交換電流密度	$9.23E+8 \text{ (A/m}^3\text{)(m}^3\text{/kg-mole H}_2\text{)}^{1/2}$
陰極反應	傳導係數(Tafel constant)	1.5
	Concentration dependence	1.0 (O ₂)
	交換電流密度	$1.05E+6 \text{ (A/m}^3\text{)(m}^3\text{/kg-mole H}_2\text{)}^{1/2}$

表 4.2 各部分格點數

Grids NO.	X	Y	Z	Total
Channel	20	12	50	12000
Membrane	12	18	50	10800
Catalyst layer	4	18	50	3600
GDL	12	18	50	10800
Full cell	88	18	50	79200

表 4.3 陽極陰極入口混和氣體分佈

	進口流速	組成成分	H2	H2O	N2	O2
陽極入口	0.2 m/sec	80°C 下 3 大氣壓下質量分率	0.37	0.63		
陰極入口	0.3 m/sec	80°C 下 5 大氣壓下質量分率		0.06	0.73	0.21

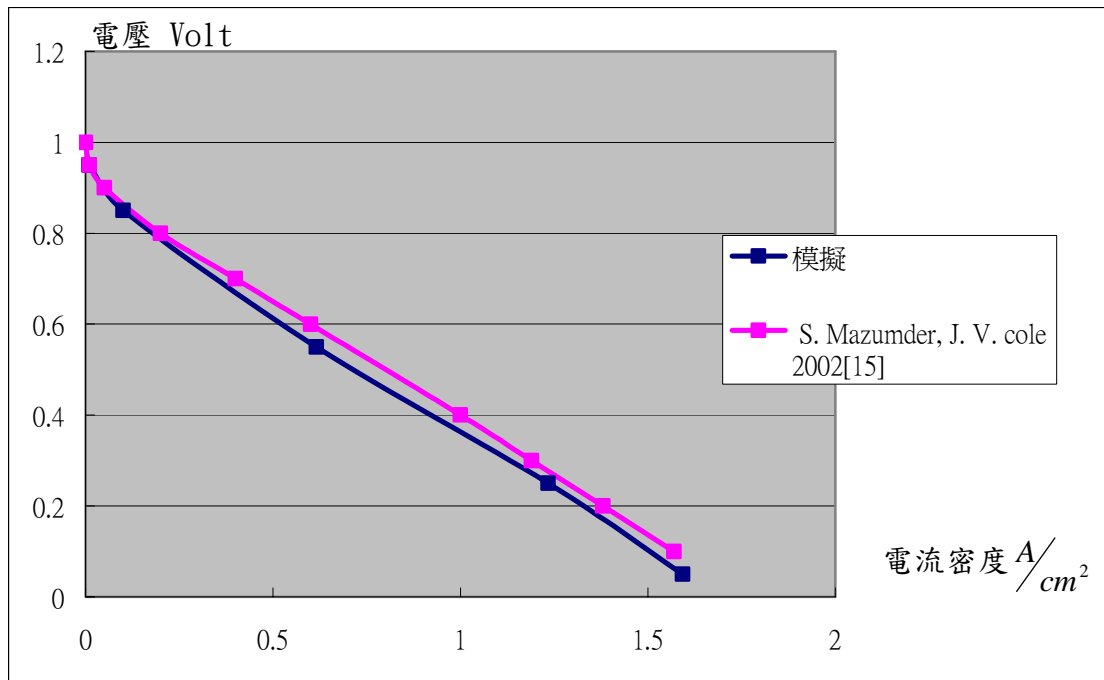


圖 4.3 模擬出的性能曲線 (I-V 曲線)

4-1-2 質量、壓力與熱水流分佈

下面以陽極陰極電壓差為 0.8V 時的模擬結果，說明模擬之電池質量、壓力與熱水流的分佈。圖 4.4 (a) 和 4.5 (a) 中顯示出陽極流道裡氫氣的質量分率因為反應消耗後逐漸往出口遞減，圖 4.6 (a) 靠近觸媒層的部分因為氫氣被反

應消耗，濃度大幅下降，較大的濃度梯度是因為在擴散層中的多孔材質擴散的速率較流道來的低的原因；圖 4.4 (b) 4.5 (b) 顯示陰極流道裡氧氣的質量分率因為反應消耗後逐漸往出口遞減，圖 4.6 (b) 靠近觸媒層的部分因為氧氣被反應消耗後，濃度下降，較大的濃度梯度是因為在擴散層中的多孔材質擴散的速率較流道來的低的原因，陽極流道中還有些許的氧氣質量分率，是因為此程式無法完全模擬隔絕氣體的質子交換膜性質。但在陰極中觀察不到氫氣的存在，是因為陰極壓力大於陽極壓力，而且氫氣的分子量太低，少量的氫氣穿透在陰極的質量分率影響不大。由於通過的氣體對陽極流道的氫氣質量分率影響不大，所以對整體電池效率的影響應該不大。圖 4.7 (a) 顯示出水蒸汽的質量分率順著陽極流道遞減，這是由於 4.7 (b) 圖所示氫氣穿透質子交換膜導致的水蒸汽質量分率下降，此現象是質子交換膜中不符合實際現象使氣體穿透而致。

圖 4.8 是顯示流道和擴散層中氣體壓降的情形 (a) 陽極總壓降為 6.178 Pa (參考壓力為 3 大氣壓)；(b) 陰極壓降為 18.1094Pa。兩個流道中的壓力皆是均勻的下降，表示在模擬中化學反應對於壓力降的影響並不大，壓降則主要來自於流體與邊界上的摩擦壓降。圖 4.9 (b) 可以看到流體在陰極中在靠近入口端不遠的地方，流道的速度分佈已呈現一個均勻的分佈，可視為一個完全展開 (fully-develop) 的穩定流，而 4.9 (a) 可以看到陽極流道中氣體流速在入口處雖然很快形成完全展開，不過流道後段的流速則是逐漸下降，因為氫氣的大量消耗和水蒸汽凝結成液態水，大量的減少了質量通率 (陽極流道入口質量流率為 $5.4325\text{E}-08 \text{ kg/s}$ ，出口質量流率為 $4.2033\text{E}-8 \text{ kg/s}$)。

圖 4.10 為電池內部 saturation 分佈，saturation 在 CFD-ACE+ 中為一個表示液態水的參數，含意為液態水充斥孔隙中的比例，可是在流道中還是有其參數存在，推想應為微小液珠 (droplet) 浮在空間中的比例。可以看到 saturation 在陽極流道中凝結比例比陰極的高，因為氫氣的大量消耗使得流速降低，在壓力下降不多的情況，水蒸汽的所佔比率上升，成了過飽和狀態，所以凝結成液態水的比例比較多。圖 4.11 中可看到在流道中 saturation 的變化，可以看到在入口附近的 saturation 為最低，在電池中段中陽極流道內 saturation 分佈比陽極出口附近的還要來的高，推測為逆向進氣的關係，使得液態水因為另一端的流向相反的關係，在電池中匯集然後流出。陰極流道中的 saturation 分佈都比陽極來

的低，主要原因可能為流速比較快，所以 saturation 的值偏小。

圖 4.12 (a) (b) (c) 為陽極和陰極 MEA (質子交換膜，氣體擴散層，觸媒層組合統稱) 的中段的溫度分佈。在 MEA 中，因為反應所產生的熱量由陰極產生所以在 (b) 裡陰極端的溫度比陽極部分來的高，而在 (c) 陰極流道中所出現的中央溫度比兩旁高的分佈，推想是由於陰極產生的水氣在陰極流道中凝結成液態水放出熱量，又由於氣體的傳熱效應較兩旁 GDL 和雙極板來的差，所以流道中央的溫度會比兩旁來的高。圖 4.13 所示為沿著 X-軸方向之濃度分佈。圖 4.14 為 X 軸方向的電流密度分佈，可以看到雙極板和質子交換層中的連接板 X 軸電流密度在接近陰極入口方向稍微比接近陽極入口方向來的高，主要原因在圖 4.15 看出氧氣質量分率與 X 軸方向電流密度的關係，氧氣的質量分率下降使得在接近陽極入口的反應比較小，在有液態水的情況下，雖然質量分率跟沒有液態水的模擬類似，可是因為孔隙被阻隔的關係，使得氧氣的傳輸到觸媒層的通量減少，在圖 4.11 中陰極流道出口附近 saturation 的數值變大，形成電流密度產生有著類似 flooding 效應而向下的趨勢。陽極則因為濃度足夠以及限制反應為陰極半反應的關係，所以電池反應得到的電流與氧氣質量分率有著正相關的關係。模擬出的平均電流密度為 1.2462 A/cm^2 。

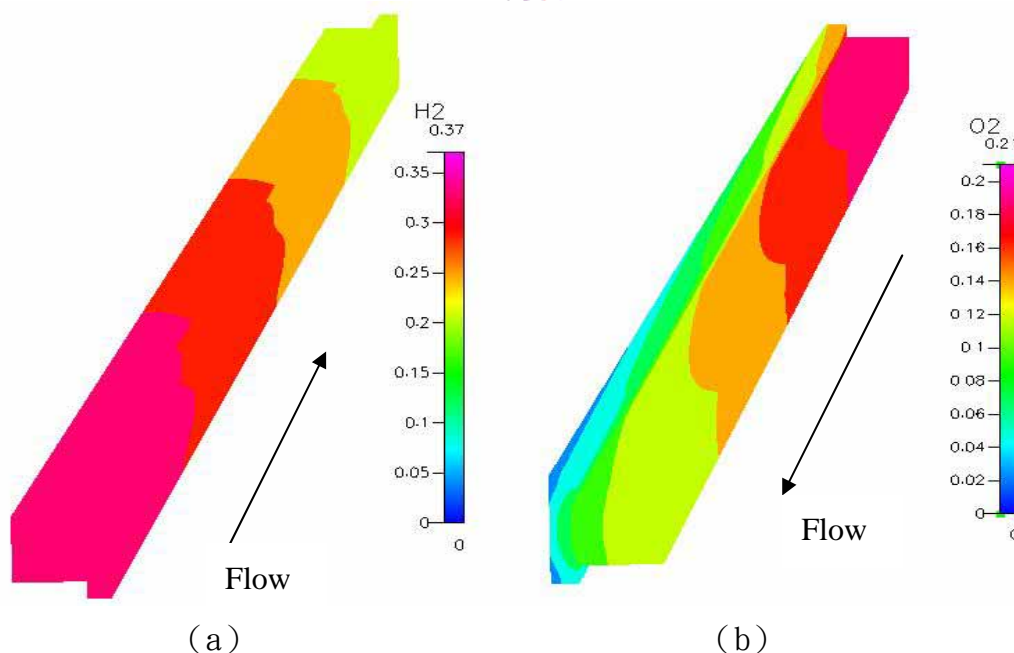
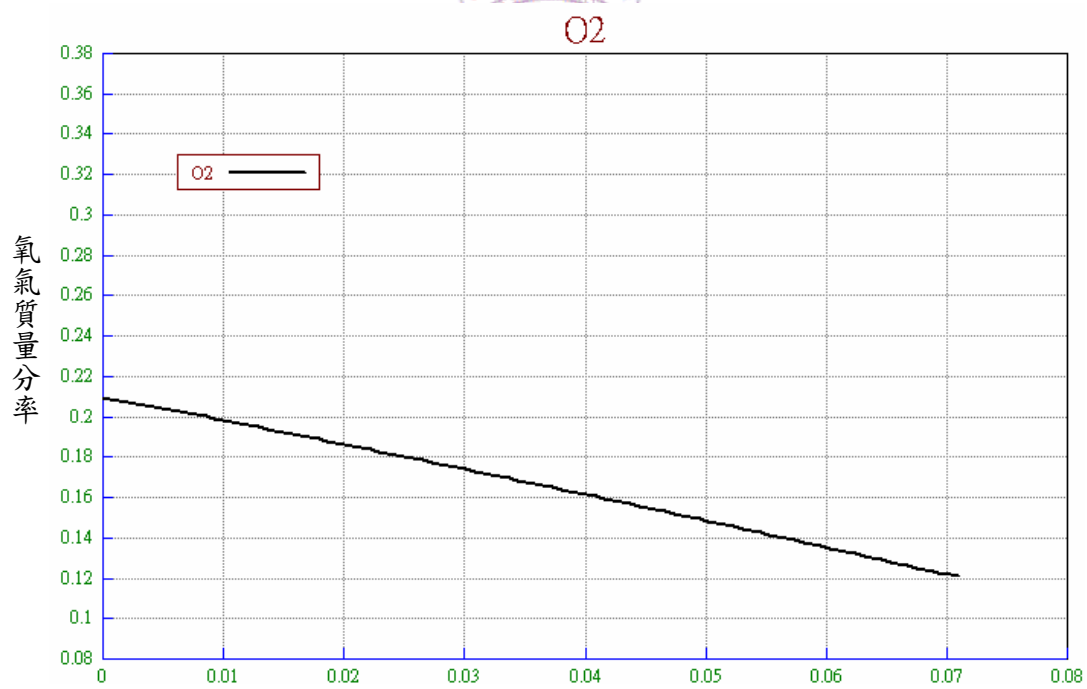
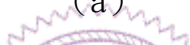


圖 4.4 基本案例流道和擴散層中 (a) 陽極氫氣與 (b) 陰極氧氣質量分率分佈圖



陽陰極入口方向到出口方向(m)

(a)



陰極入口方向到出口方向 (m)

(b)

圖 4.5 基本案例 $y=0.00581m$ (a) $x=0.00058m$ 氫氣由陽極入口到出口的質量分率遞減圖 (b) $x=0.00214m$ 氧氣由陰極入口到出口的質量分率遞減圖

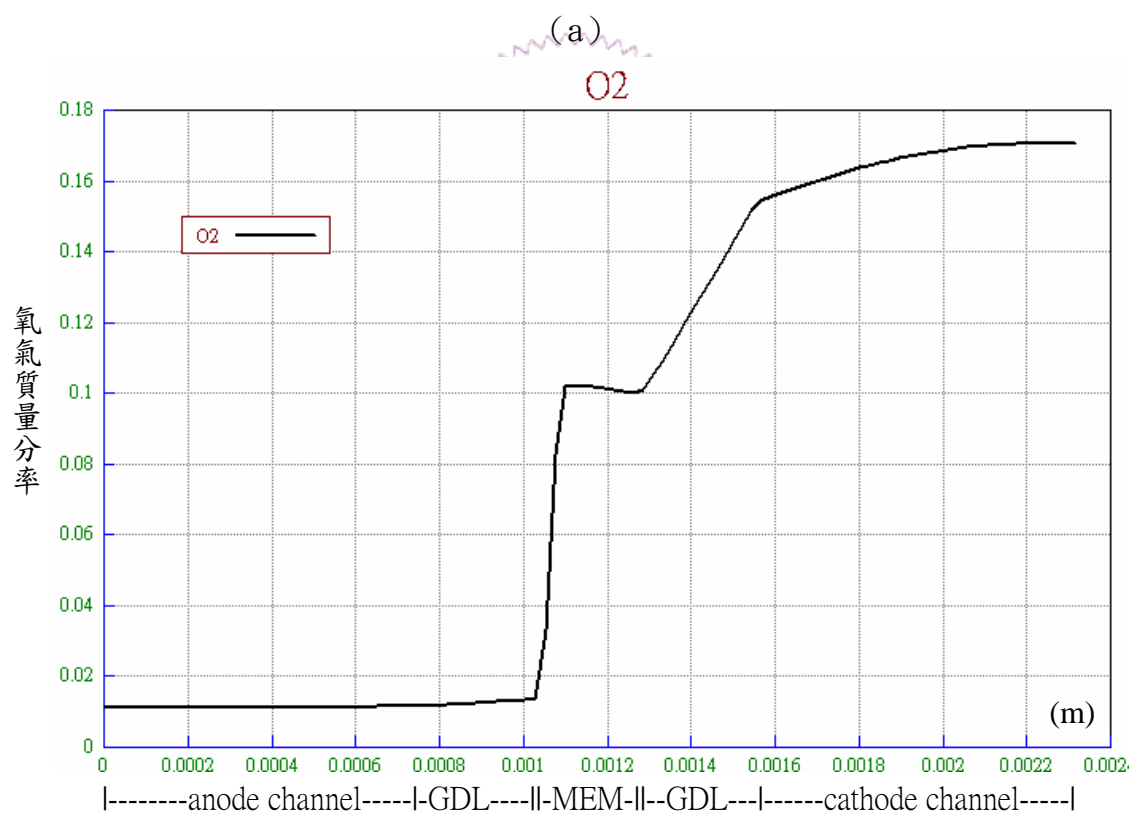
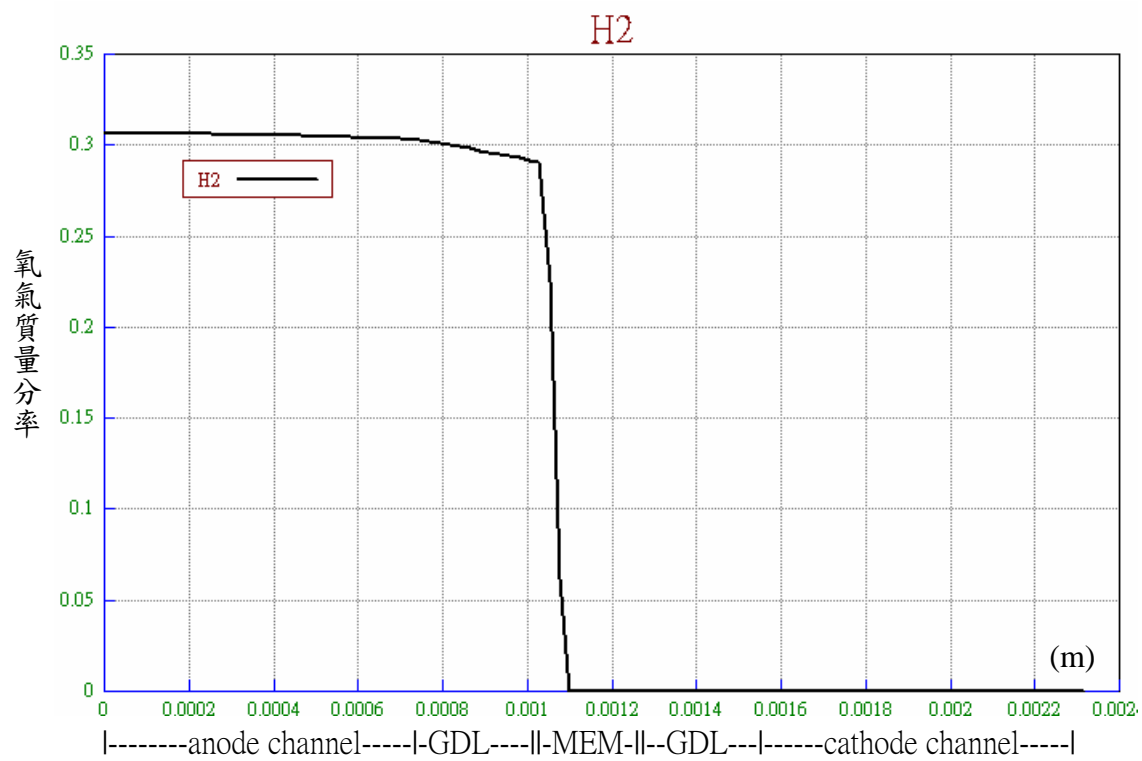


圖 4.6 基本案例 $y=0.000581\text{m}$ $z=0.03556\text{m}$ (a) 氫氣質量分率分佈 (b) 氧氣質量分率分佈

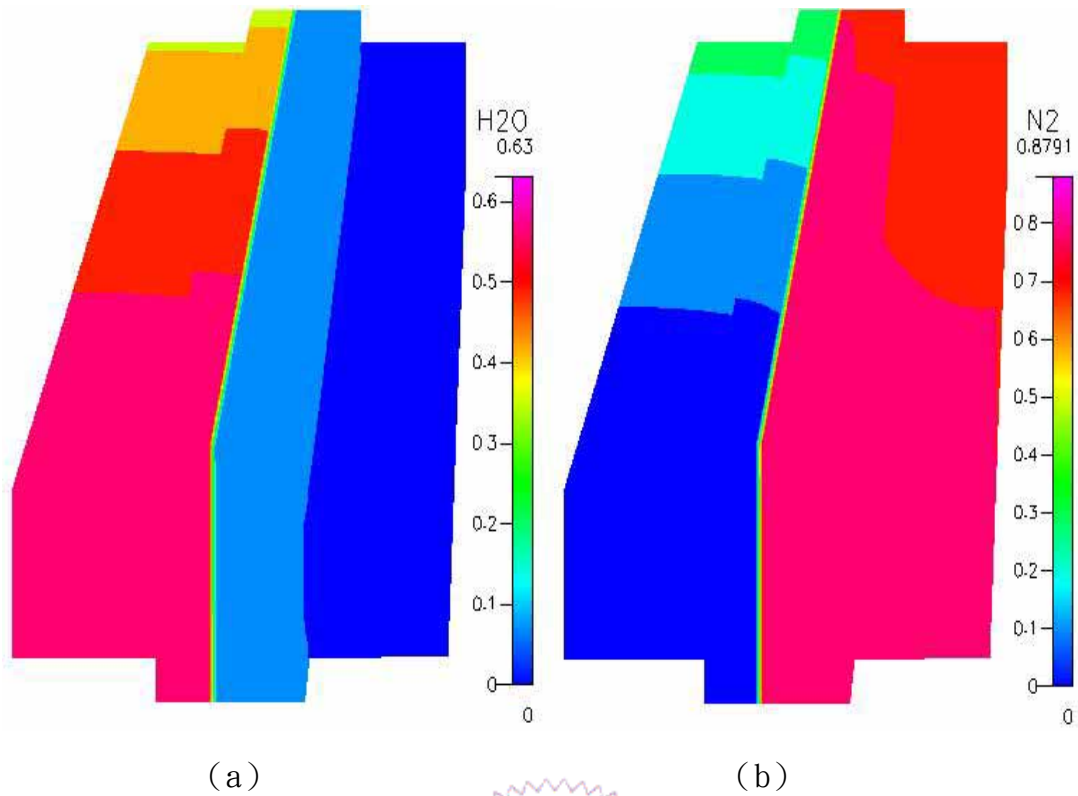


圖 4.7 基本案例電池內 (a) 水蒸汽質量分率分佈 (b) 氮氣質量分率分佈

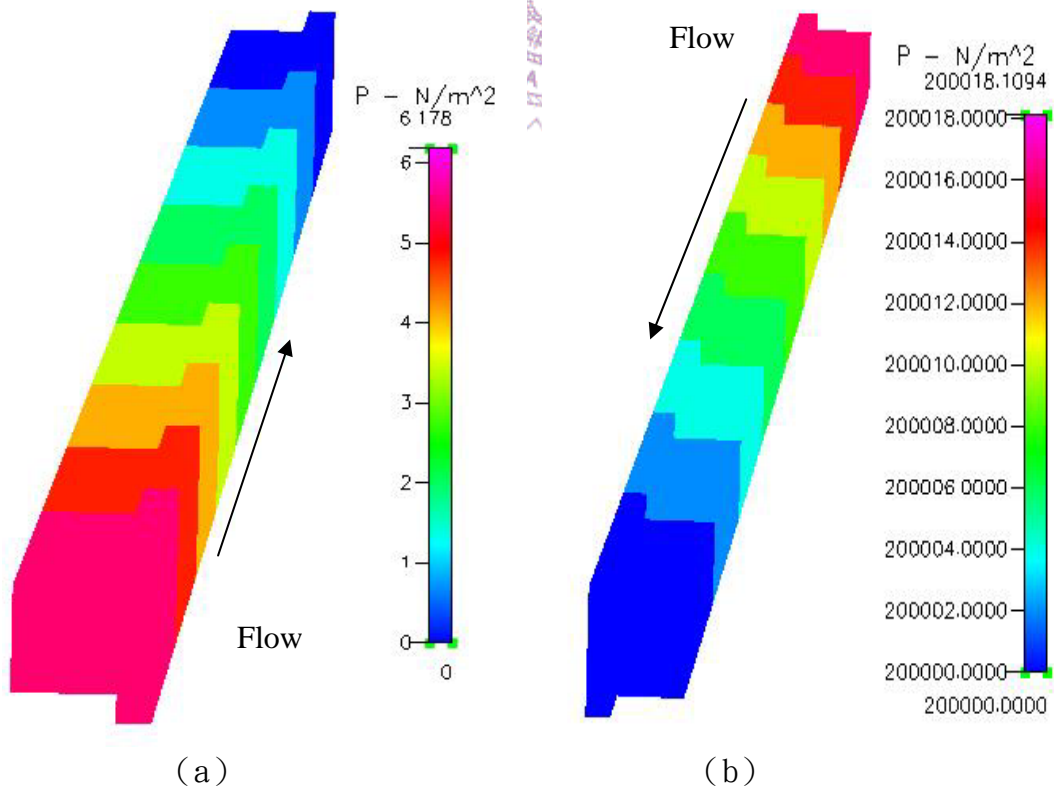
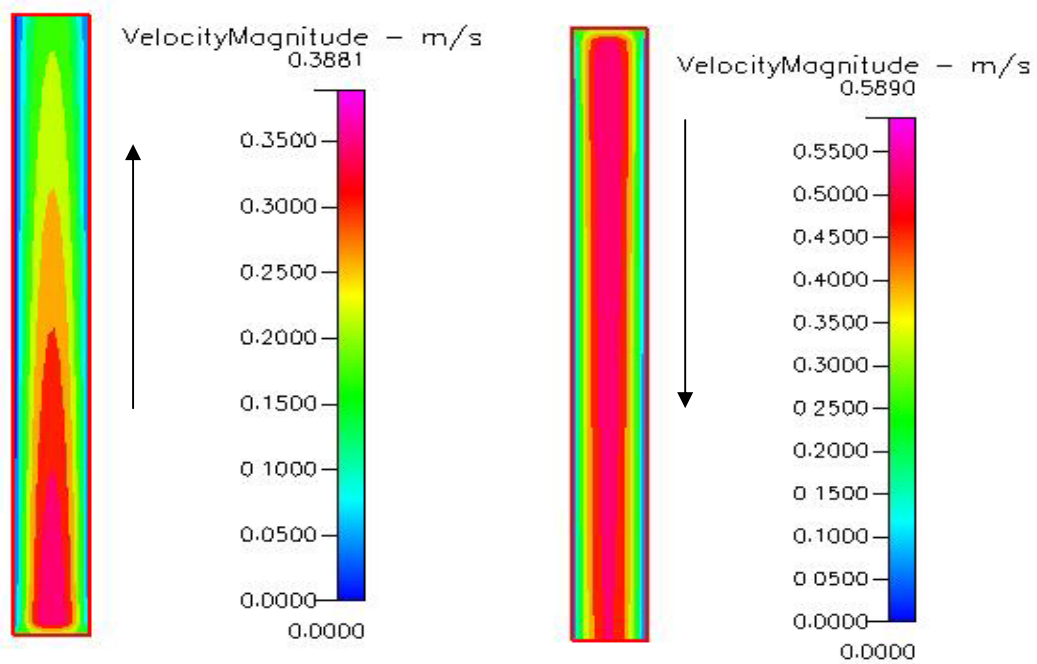


圖 4.8 基本案例 (a) 陽極流道和擴散層中的壓降 (b) 陰極流道和擴散層中的壓降



(a)

(b)

圖 4.9 基本案例流道中央 ($y=0.000581\text{m}$) (a) 陽極流道的速度分佈 (b) 陰極流道的速度分佈

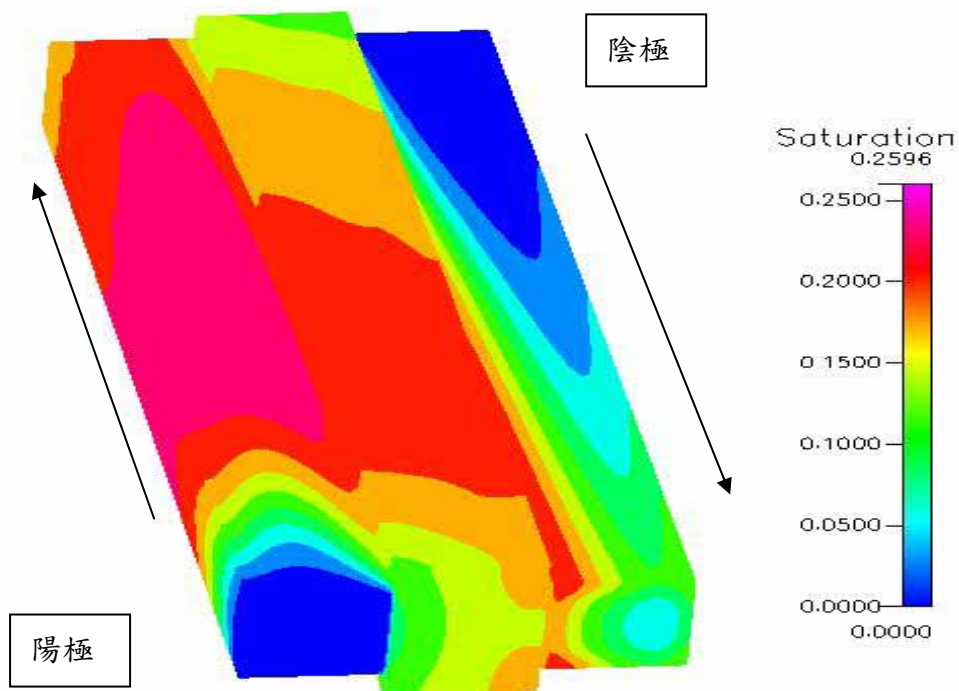


圖 4.10 基本案例電池內 saturation 的分佈

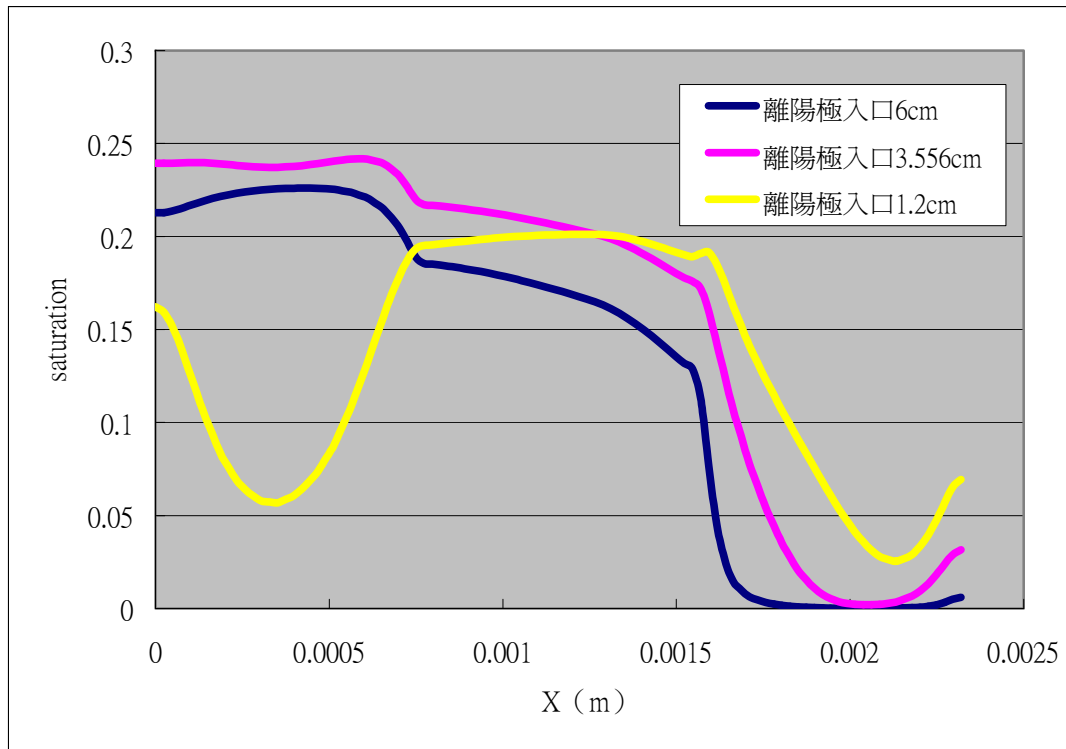


圖 4.11 基本案例 $y=0.00581\text{m}$ X 軸方向 saturation 變化

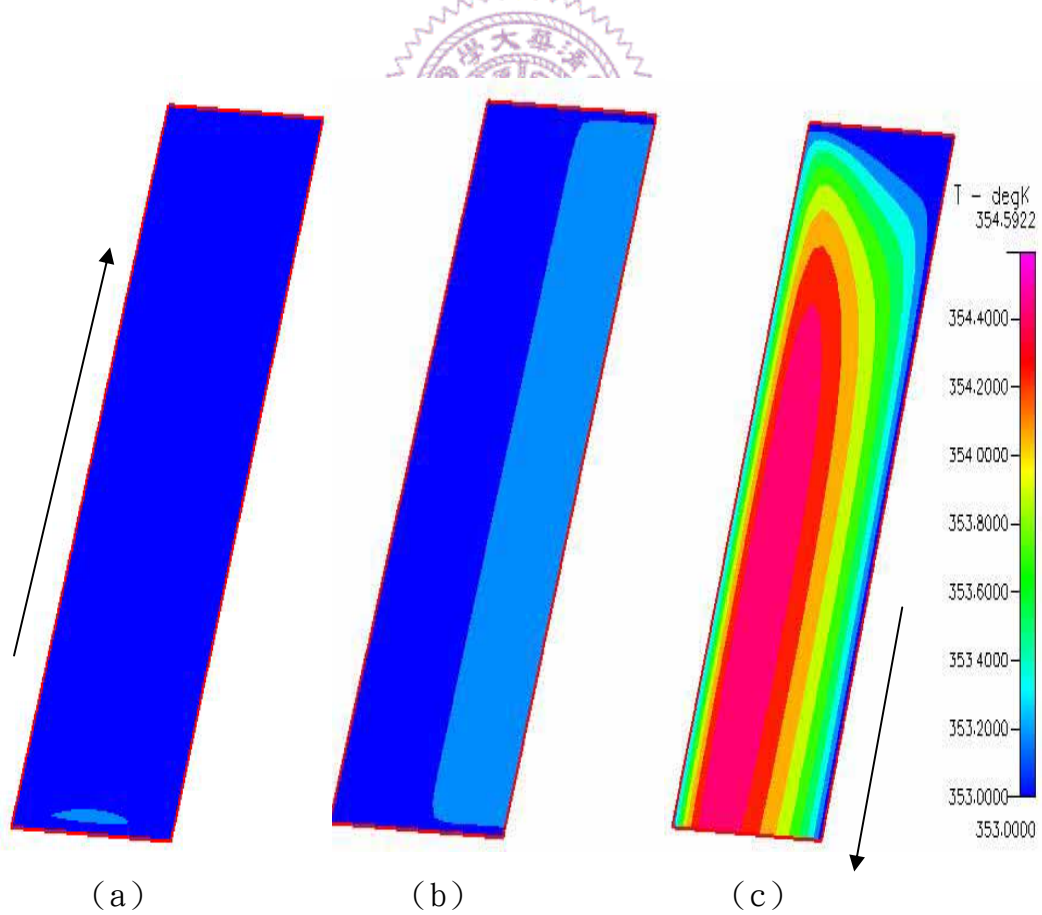


圖 4.12 基本案例 (a) 陽極流道中段溫度分佈 (b) MEA 中段溫度分佈 (c) 陰極流道中段溫度分佈

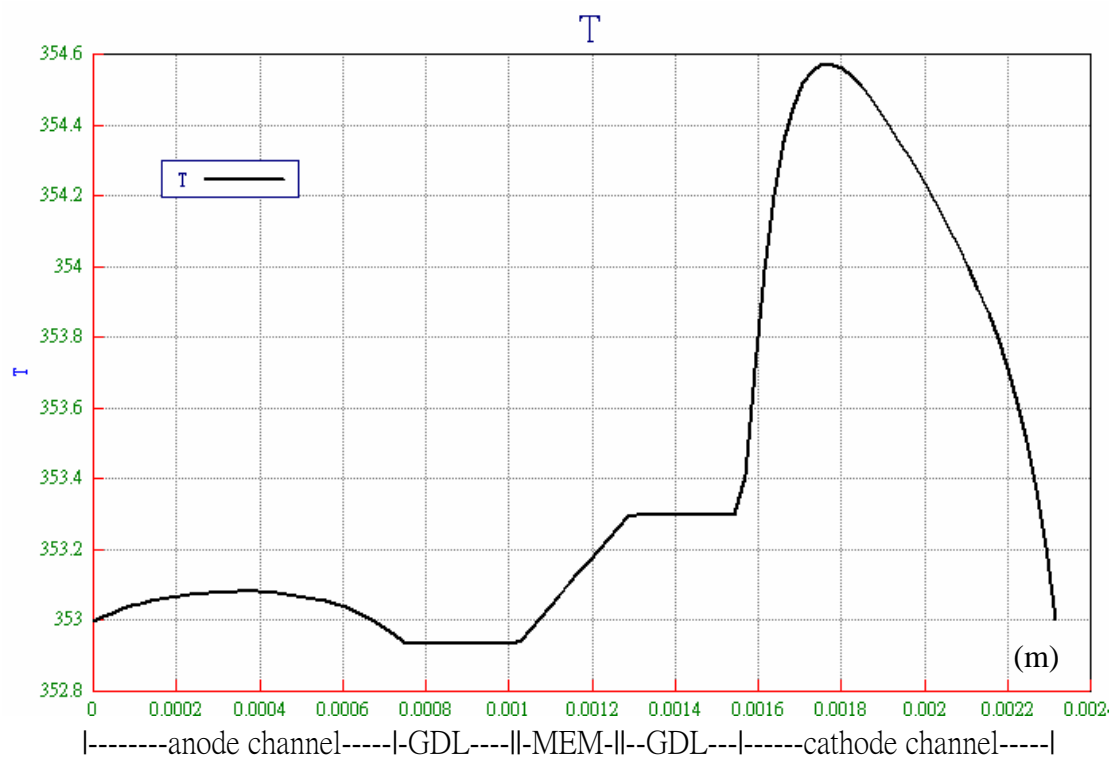


圖 4.13 基本案例 $y=0.000581\text{m}$ $z=0.03556\text{m}$ 溫度分佈

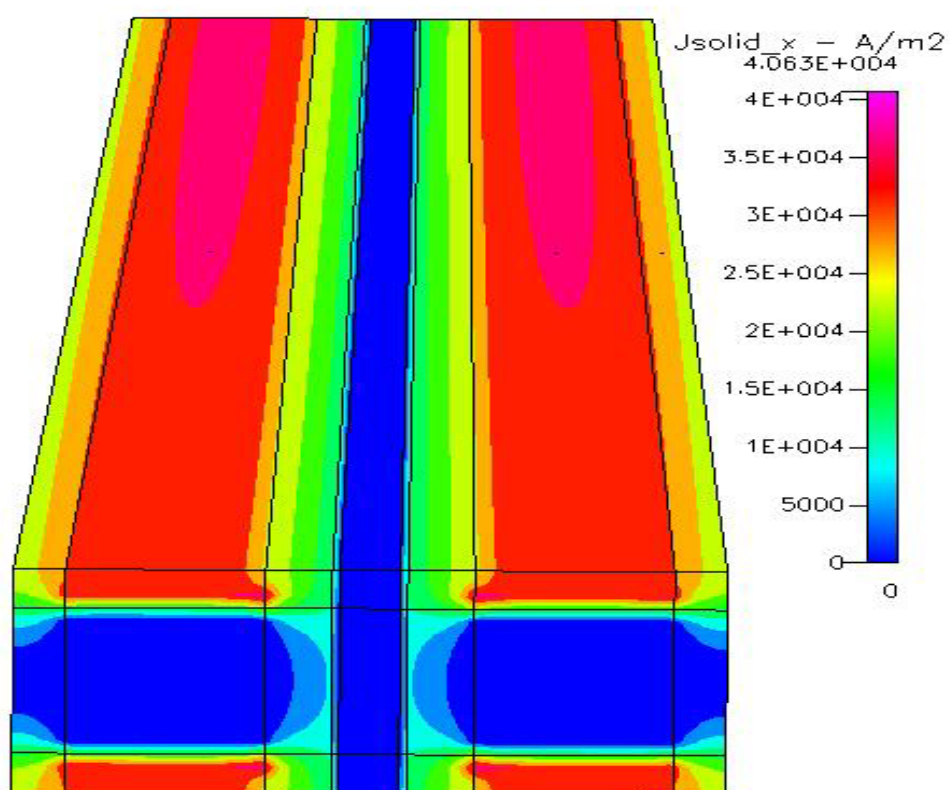


圖 4.14 基本案例電池內 X 軸方向電流密度分佈圖

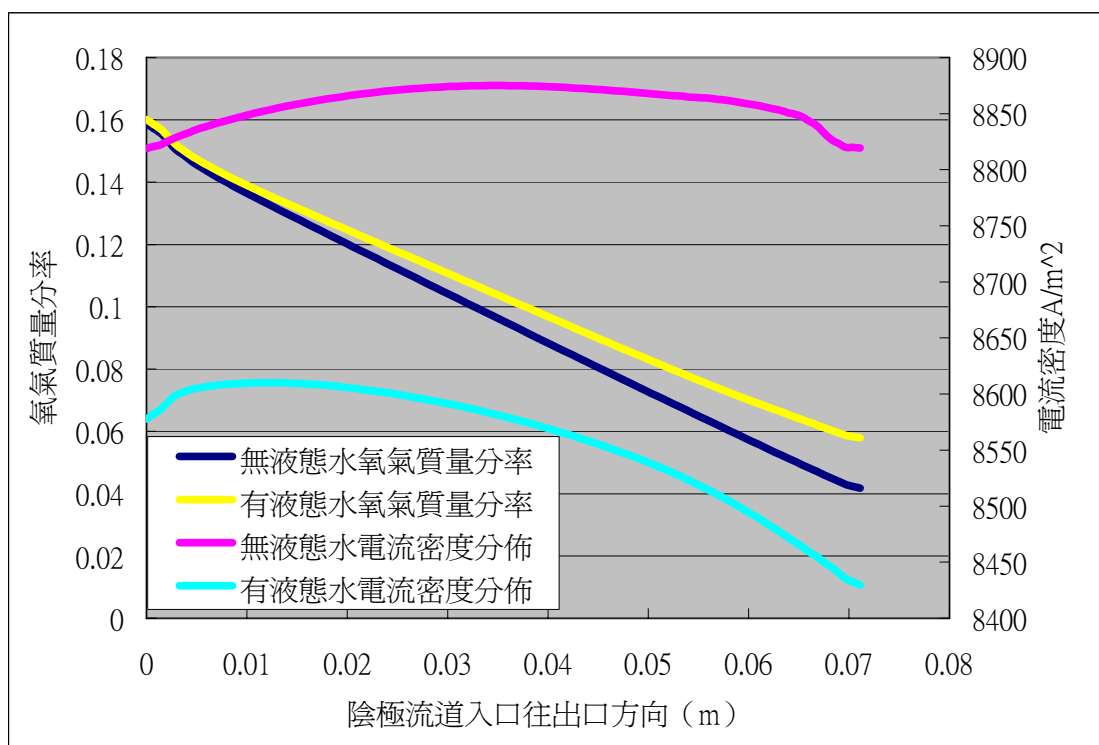


圖 4.15 基本案例陰極流道入口到出口方向催化層上氧氣質量分率與 X 軸方向電流密度的關係圖

4-2 靈敏度分析

接下來的章節將以基本模組為基準，進行參數的修改，以觀察電池內部的變化以及對於電流密度的影響。

4-2-1 MEA 的熱傳係數更改

在[15]中，質子交換膜、擴散層和觸媒層所用的熱傳導係數都是採用 150.6 W/mK 的高傳導係數，因為擴散層和觸媒層的主要結構為碳紙 (carbon paper)，由[22]可查出碳的熱傳導係數為 1.6W/mK，質子交換膜的熱傳係數為 0.67W/ mK [23]。跟原本的輸入差了大約兩個數量級，為了更真切模擬電池，將 MEA 內的熱傳導係數修改為 2W/mK，沒有直接採用各組件材料真實的熱傳導係數是因為在模擬中熱傳計算的收斂性比較差，為了節省時間，將 MEA 各部分組件的熱傳係數調整為一樣且靠近真實的數值，以期得到較快的收斂。

在圖 4.16 (a) 和 4.17 (a) 中看到陽極流道中氫氣質量分率的分佈，質量分率在進口後有上升的趨勢，原因在於圖 4.23 (a) (b) 中陽極催化層、質子交

換層和流道的溫度下降，使得原本接近飽和的進氣，因為溫度下降呈現過飽和而凝結成液態水，造成氫氣質量分率在進口有上升的情況出現，相較於基本的模組來說，水蒸汽的質量分率在流道中下降速率比較快。之後因為氫氣反應的關係又恢復逐漸下降的趨勢，修改導熱度後，由圖 4.18(b)和圖 4.19 (a)(b) 中可看出氣體的穿透現象則依然存在。

圖 4.20 是顯示流道和擴散層中氣體壓降的情形 (a) 陽極總壓降為 5.749Pa (b) 陰極壓降為 18.906Pa。壓力的改變跟基本的模組差不多，表示改變熱傳導係數對於壓力的影響並沒有很大。圖 4.21 為陽極流道和陰極流道中速度的變化，也與基本的模組差異不大，也表示改變熱傳導係數也對於速度分佈沒太大影響。

圖 4.22 (a)(b)(c) 為陽極、陰極和 MEA 的中段的溫度分佈。在 MEA 中，因為反應所產生的熱量由陰極產生所以在 (b) 裡陰極端的溫度比陽極部分來的高，而在 (b) MEA 中陽極催化層的溫度呈現一個吸熱現象，而在陰極的催化層中卻呈現相反的高溫狀況，在燃料電池中為一個極不合理的現象，表示在原本未改變導熱度的時候，因為過高的導熱度使得陽極的吸熱現象掩蔽不清，陰極的熱量也因為導熱度的改變，產生一個高溫的狀況，而原本在基本模組中出現的陰極流道的一溫度上升，也可能因為陰極催化層的高溫而看不見。圖 4.23 為電池中 X 軸向的溫度分佈。

圖 4.24 和圖 4.25 液態水的分佈，明顯的看出在陽極的液態水跟基本模組的差異在於原本大多集中在流道壁面的液態水，改變了熱傳導係數後，陽極的液態水大多靠近於陽極 GDL 附近，原因在於陽極的溫度低於進口溫度，造成靠近陽極 GDL 的水蒸汽凝結於此，靠近陽極 GDL 的水蒸汽質量分率下降，所以靠近陽極流道壁面的水蒸汽會向陽極 GDL 方向補充，靠近壁面的水蒸汽質量分率也因為沒有過飽和所以沒有在壁面凝結的現象。

圖 4.26 為整個電池模擬下對於 X 軸方向的電流密度分佈，可以看到雙極板和擴散層中的連接板 X 軸電流密度在接近陰極入口方向稍微比接近陽極入口方向來的高，也是與氧氣的質量分率下降有關。模擬出的電流密度為 1.2529 A/cm^2 ，改變導熱係數後會使電流有些微上升，但大約 0.5% 的影響。

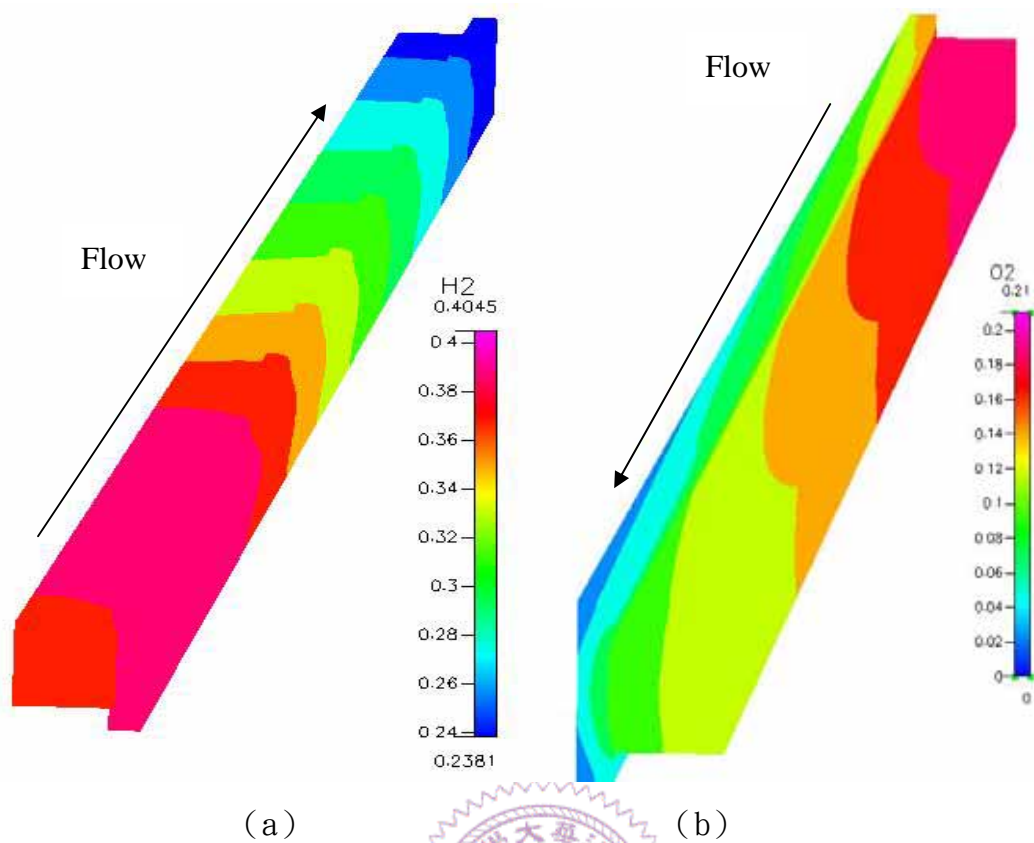
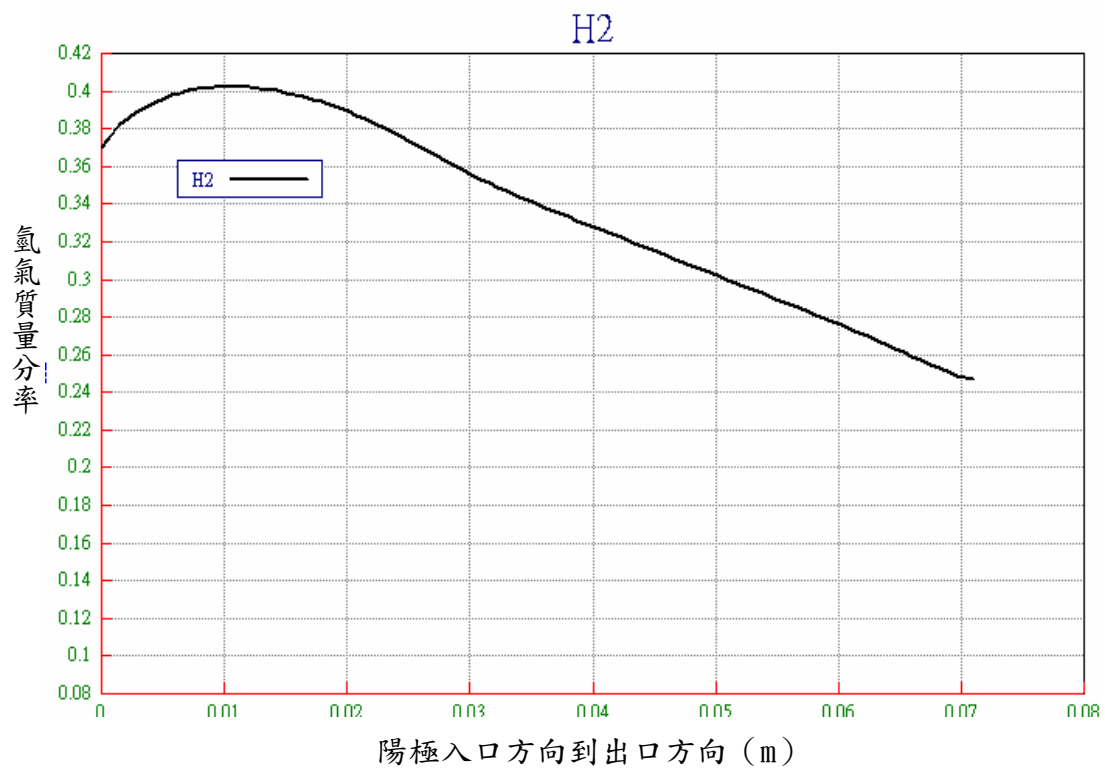
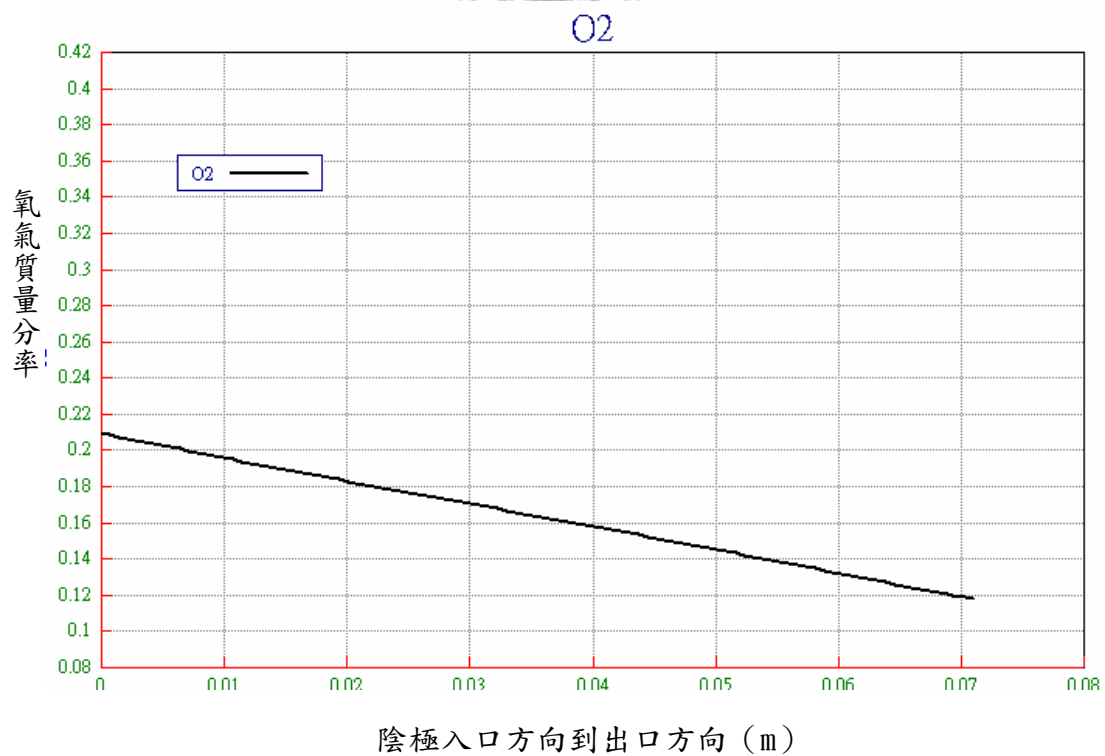


圖 4.16 流道和擴散層中 (a) 陽極氫氣與 (b) 陰極氧氣質量分率分佈圖

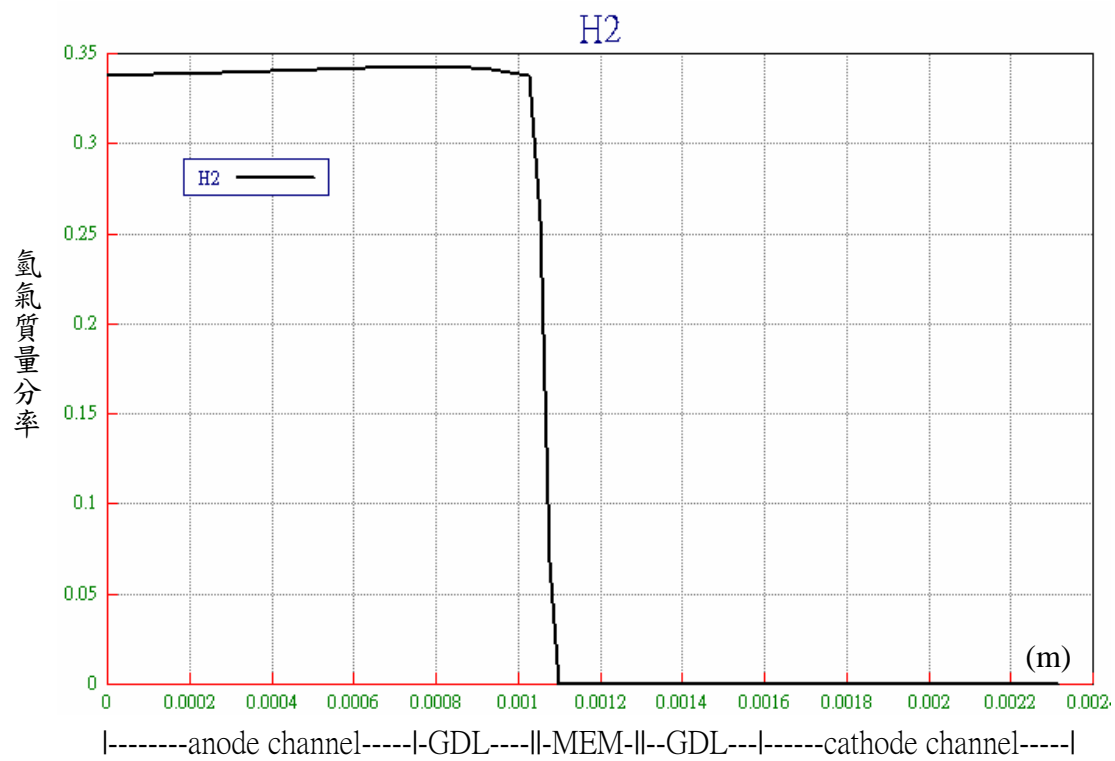


(a)

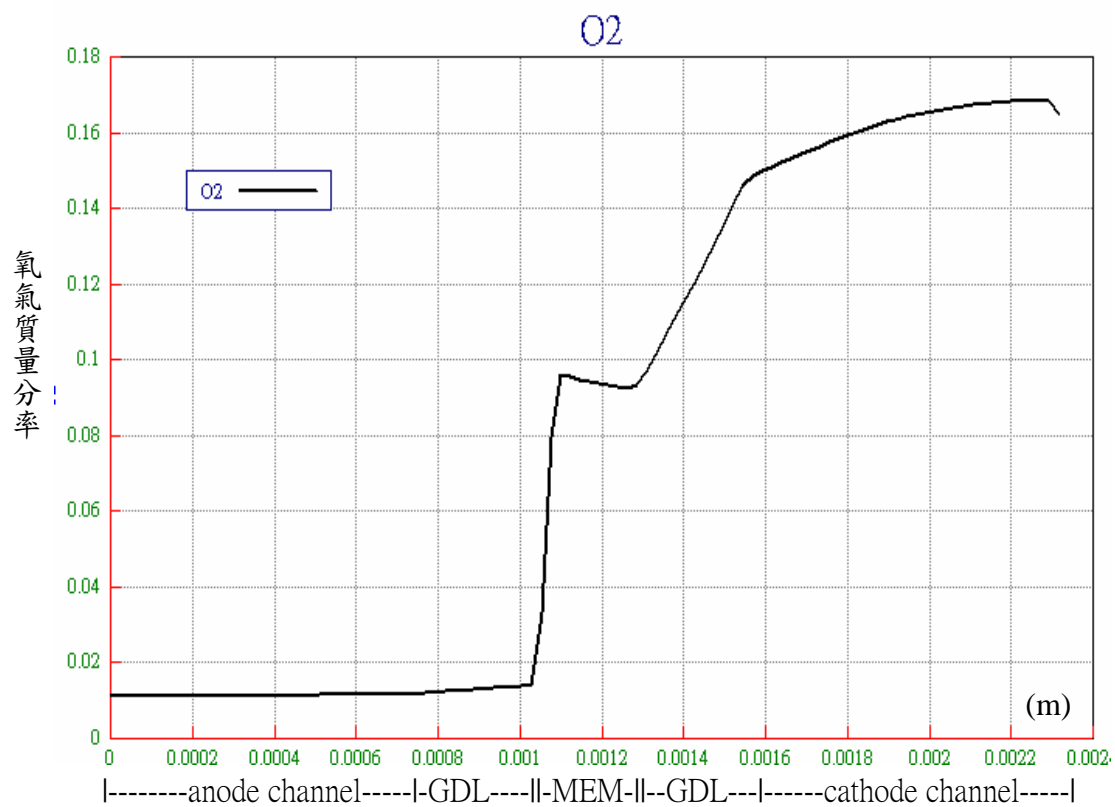


(b)

圖 4.17 $y=0.00581\text{m}$ (a) $x=0.00058\text{m}$ 氫氣由陽極入口到出口的質量分率遞減圖
圖 (b) $x=0.00214\text{m}$ 氧氣由陰極入口到出口的質量分率遞減圖



(a)



(b)

圖 4.18 $y=0.000581m$ $z=0.03556m$ (a) 氫氣質量分率分佈 (b) 氧氣質量分率分佈

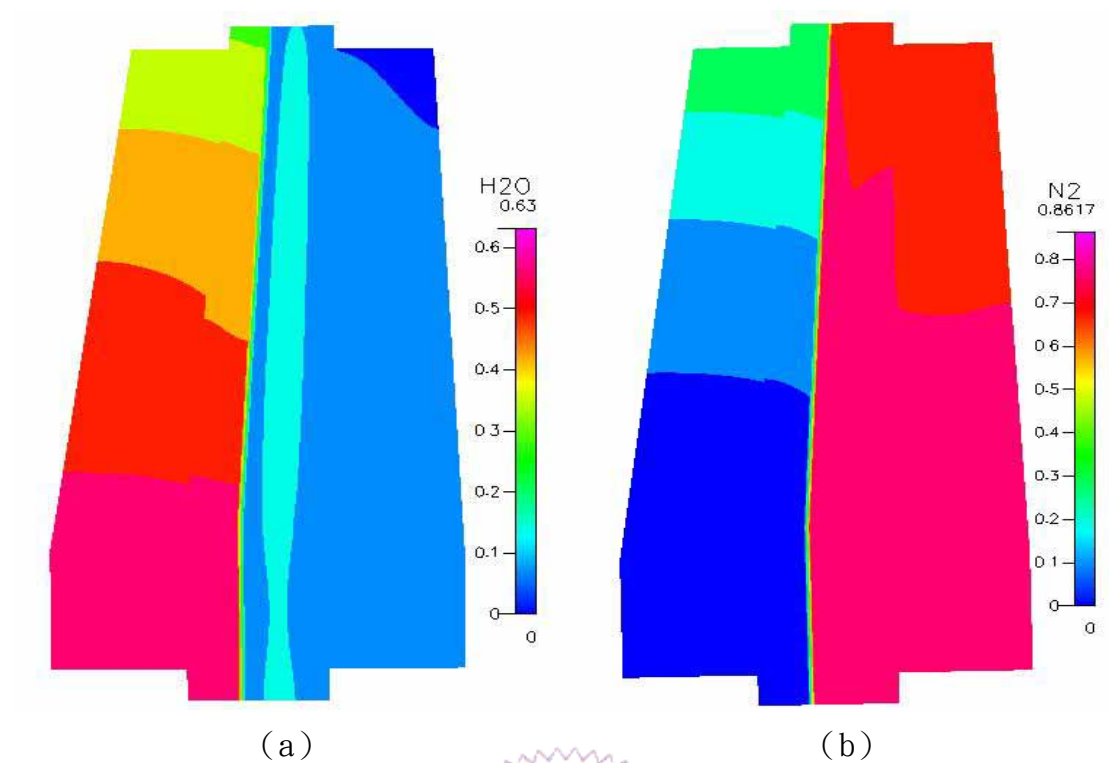


圖 4.19 電池內 (a) 水蒸汽質量分率分佈 (b) 氮氣質量分率分佈

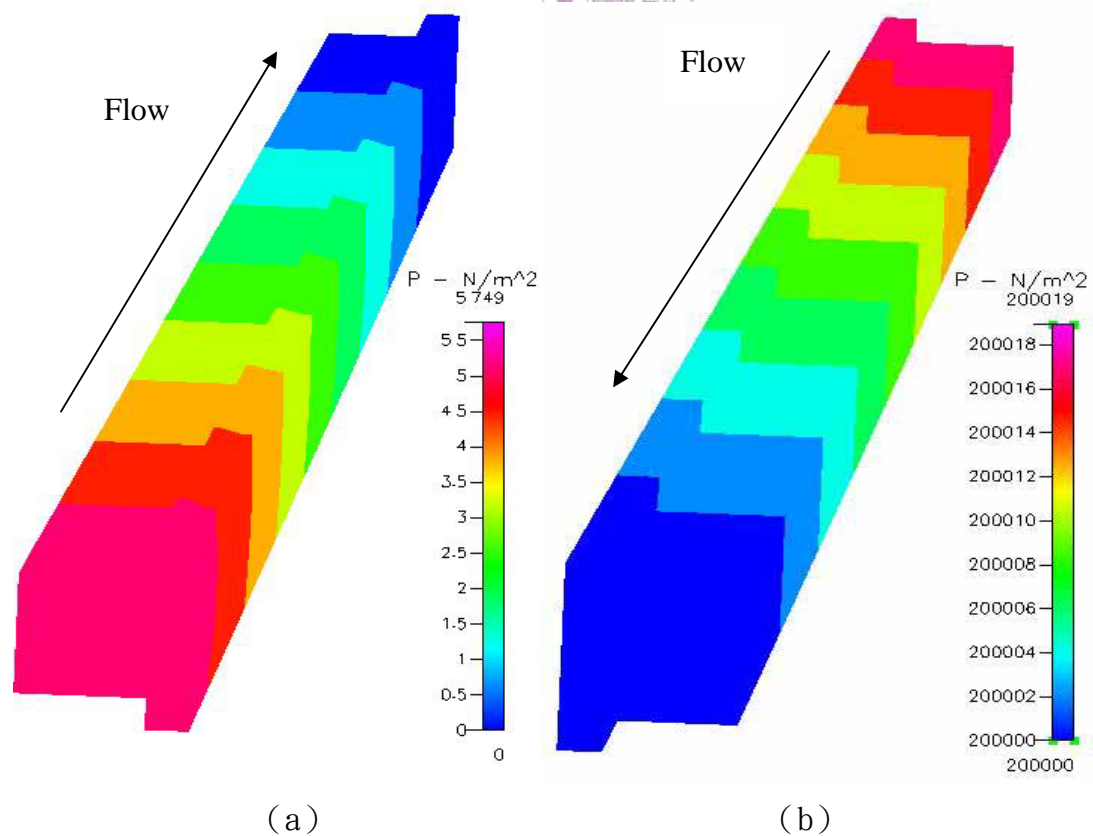


圖 4.20 (a) 陽極流道和擴散層中的壓降 (b) 陰極流道和擴散層中的壓降

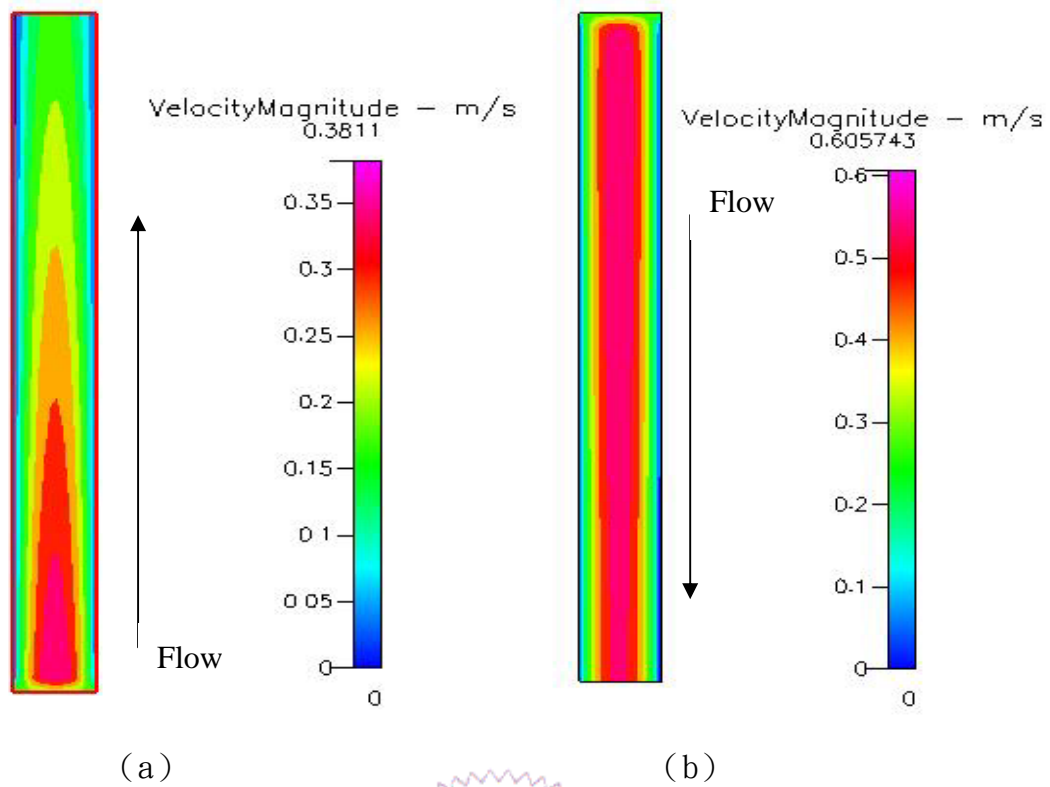


圖 4.21 流道中央 ($y=0.000581\text{m}$) (a) 陽極流道速度分佈 (b) 陰極流道速度分佈

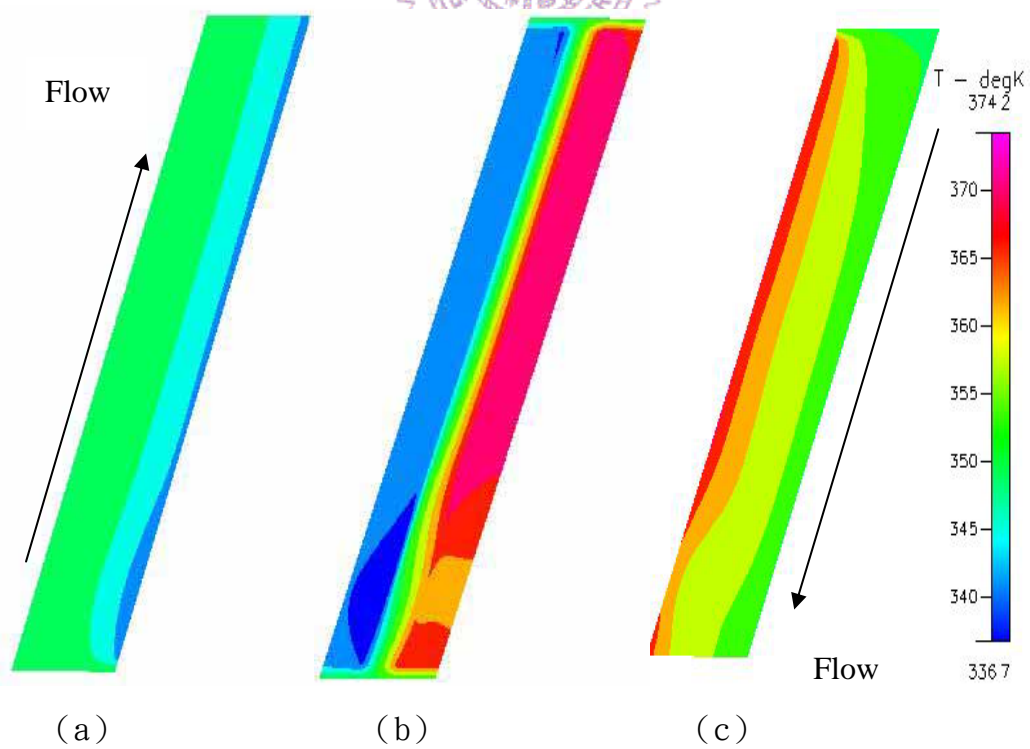


圖 4.22 (a) 陽極流道中段溫度分佈 (b) MEA 中段溫度分佈 (c) 陰極流道中段溫度分佈

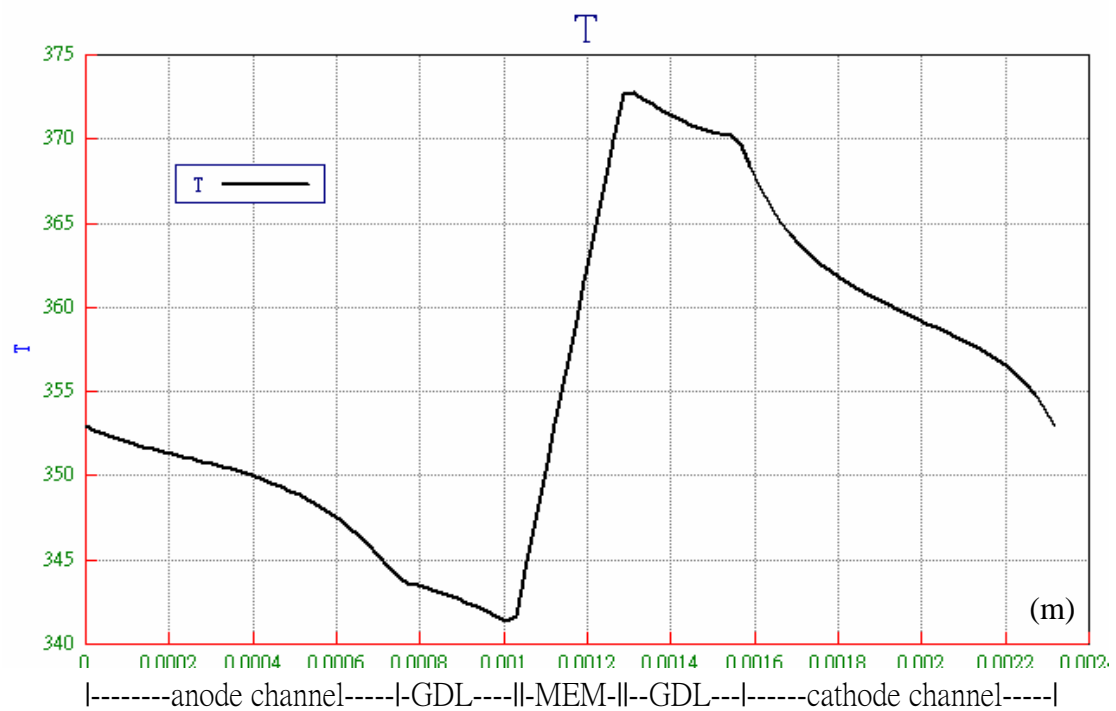


圖 4.23 $y=0.000581\text{m}$ $z=0.03556\text{m}$ 上溫度分佈圖

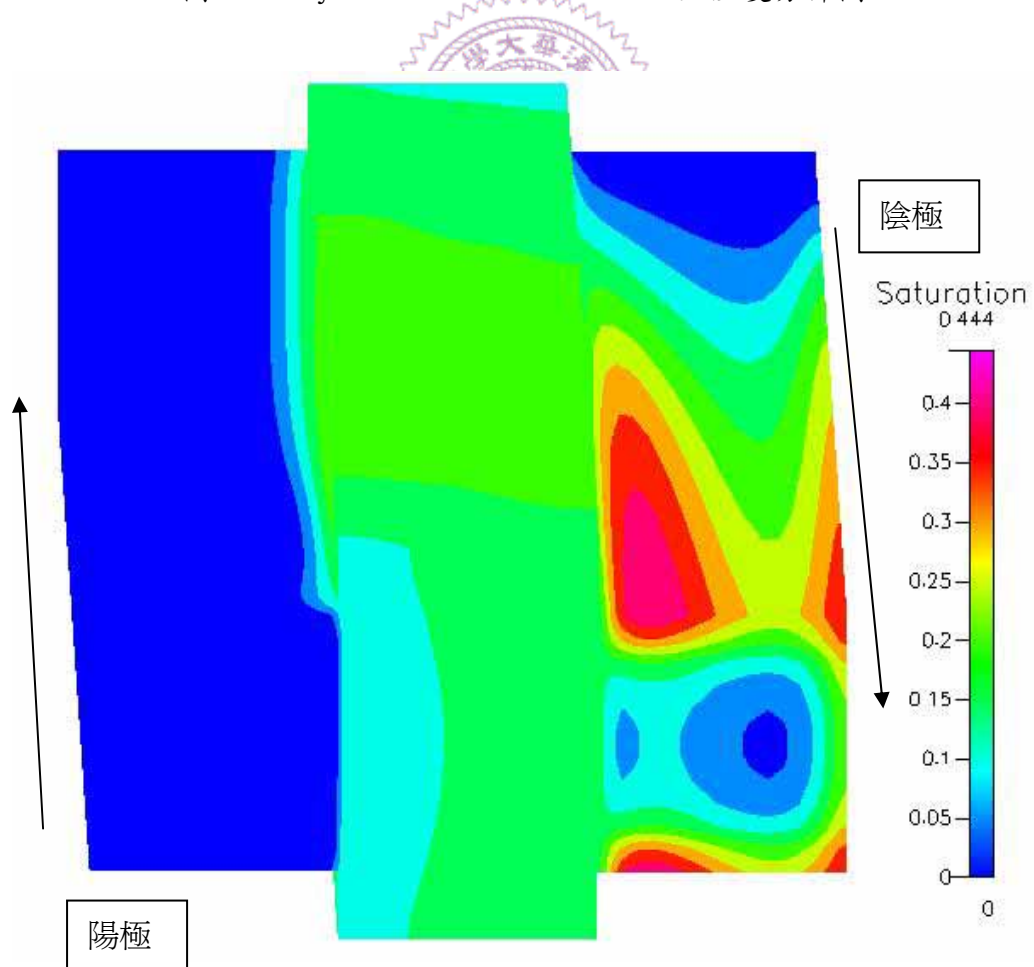


圖 4.24 電池內 saturation 分佈

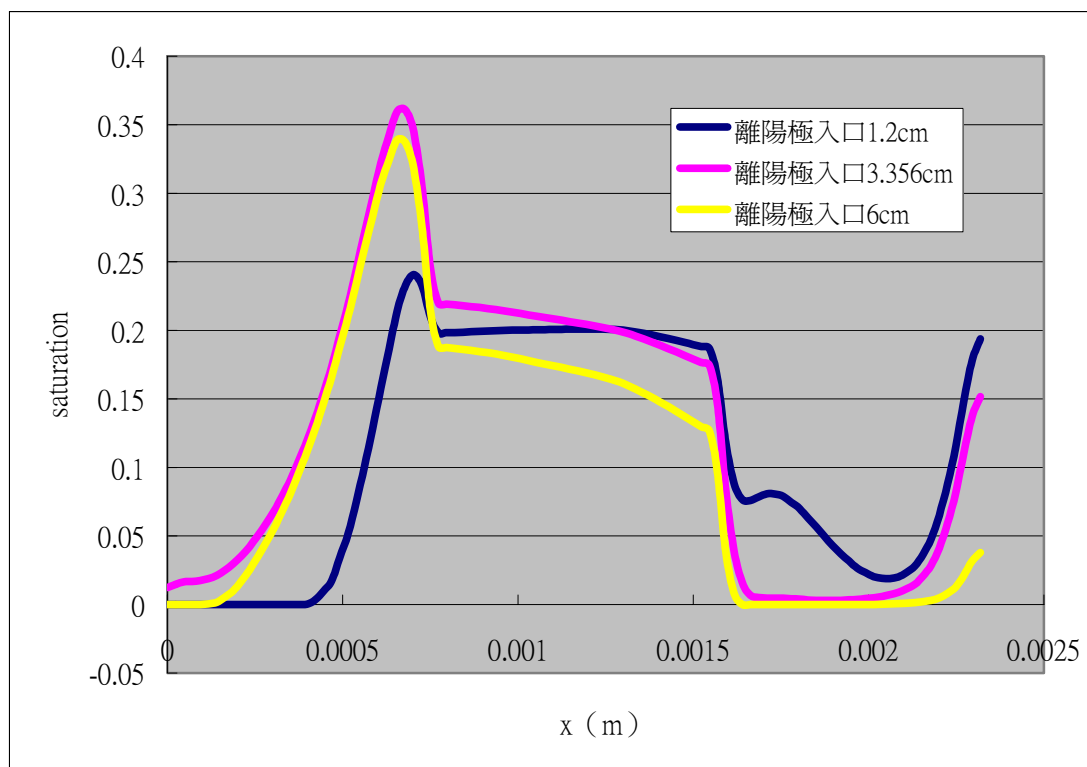


圖 4.25 $y=0.00581\text{m}$ X 軸方向 saturation 變化

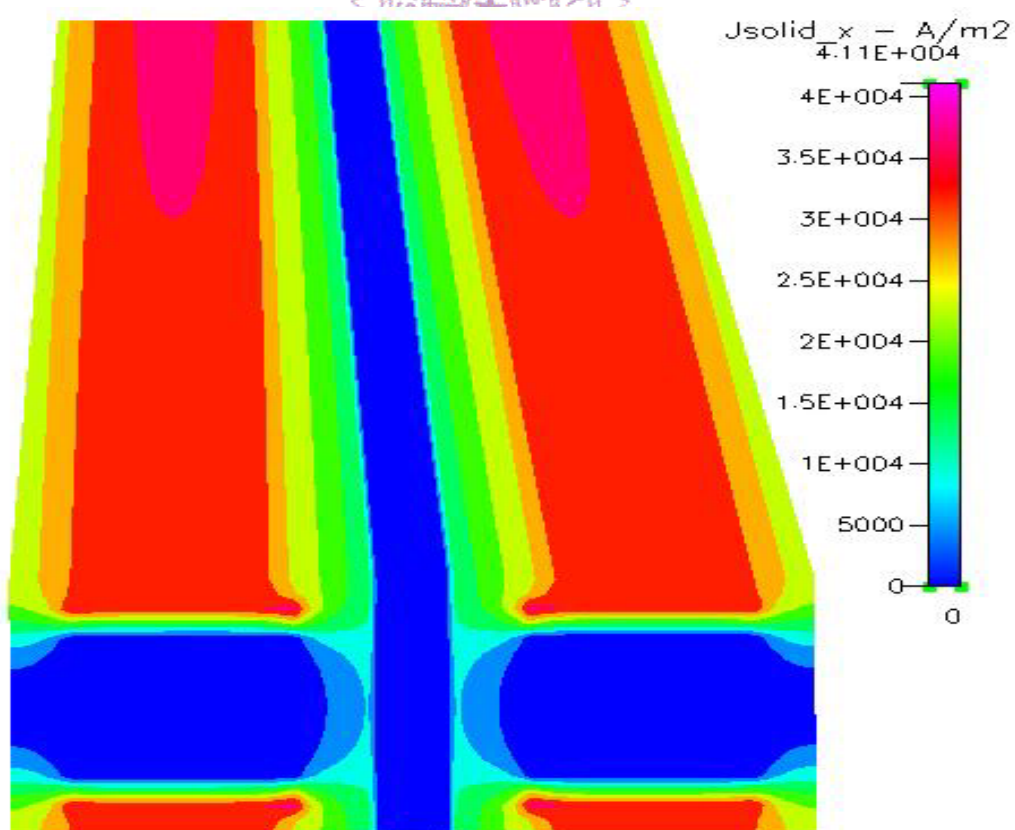


圖 4.26 電池內 X 軸方向電流密度分佈圖

4-2-2 修改氣體性質參數

4-2-1 節中使用較接近實際狀況之 MEA 熱傳導係數結果顯示溫度的不正確分佈，[24]的數據顯示在 298.15K 下氫氣(g)與氫離子(aq)的 enthalpy 都為 0。理論上陽極半反應在 298.15K 下應為無放熱反應，即使在溫度提高到 353K 下，突然變成劇烈的吸熱反應的情況則應該抱持懷疑。檢查 CFD-ACE+的設定中，計算氣體 enthalpy 的公式為 mix-jannaf method，在氣體的性質參數中，氫離子的 enthalpy 卻明顯比氫氣來的高 (H_2 於 300K 時為 $5.59E-2 \text{ KJ/mole}$ ， H^+ 於 300K 時為 1530 KJ/mole)。透過 Nist-Janaf thermochemical table[25]可查出，氫離子在氣態下 enthalpy 大約為 300K 下 1536.297 KJ/mole ，與 CFDRC 裡的氫離子差異不大。由此可瞭解在實際上的化學反應下，由於陽極半反應是在氫氣、水、固體電極三相接觸點將氫氣(g)催化成氫離子(aq)的事實下，CFD-ACE+提供的氫離子參數並非所需的氫離子(aq)態，為氫離子(g)態。Nist-Janaf thermochemical table [25]中，並沒有提供氫離子(aq)態的 enthalpy，基於[24]裡 298.15K 下氫氣(g)與氫離子(aq)的 enthalpy 一樣，且[13]中提出電池的反應的放熱大多在陰極，可忽略陽極的反應放熱，在以下的分析中，將程式提供的氫離子氣體性質參數中 Jannaf method 給的參數修改成與氫氣一樣，以期達到陽極化學半反應的吸放熱為零。

圖 4.27 (a) 和 4.28 (a) 中顯示出陽極流道裡氫氣的質量分率因為反應消耗後逐漸往出口遞減，圖 4.29 (a) 靠近觸媒層的部分因為氫氣被反應消耗後，出現一個濃度梯度下降，較大的濃度梯度是因為在擴散層中的多孔材質擴散的速率較流道來的低的原因；圖 4.27 (b) 4.28 (b) 顯示陰極流道裡氧氣的質量分率因為反應消耗後逐漸往出口遞減，而圖 4.29 (b) 靠近觸媒層的部分因為氧氣被反應消耗後，出現一個濃度梯度下降，較大的濃度梯度是因為在擴散層中的多孔材質擴散的速率較流道來的低的原因，由圖 4.29 (b) 和圖 4.30 (a) (b) 中看出氣體穿透的情形依然存在。

圖 4.31 (a) (b) 是顯示流道和擴散層中氣體壓降的情形 (a) 陽極總壓降為 6.332Pa (b) 陰極壓降為 18.203Pa，與基本的模組壓力變化相仿。圖 4.32 (a)

(b) 為陽極流道和陰極流道中速度的分佈圖，速度變化也與基本模組相仿，表示修改氫離子 Jannaf 參數對於壓力和速度的影響也不大。

圖 4.33 和圖 4.34 為電池內 saturation 的分佈，大概的分佈都跟基本模組的類似，在於溫度的變化大小跟基本模組的差異不多的關係。

圖 4.35(a)(b)(c) 為陽極和陰極 MEA 的中段的溫度分佈。在 (b) 中 4-2-1 節裡出現陽極吸熱現象如預期的不見了，陰極端的溫度比陽極部分來的高，並且在陰極最高溫部分也從 3-2-2 的高於工作溫度 (353K) 多達 21K 下降為高於工作溫度 2.9K，由於下降原本氫離子的 enthalpy 使得在陰極的化學半反應放熱也比 4-2-2 節中來的少，出現一個比較合理的溫度分佈。而在圖 4.36 可看出陰極流道中所出現的中央溫度比兩旁高的分佈，推想是由於陰極產生的水氣在陰極流道中凝結成液態水放出熱量，又由於氣體的傳熱效應較兩旁 GDL 和雙極板來的差，所以流道中央的溫度會比兩旁來的高。

圖 4.37 為整個電池模擬下對於 X 軸方向的電流密度分佈，跟基本的模組模擬出來的類似。模擬出的電流密度為 1.2390 A/cm^2 ，略低於未修正性質參數 1.1 %。

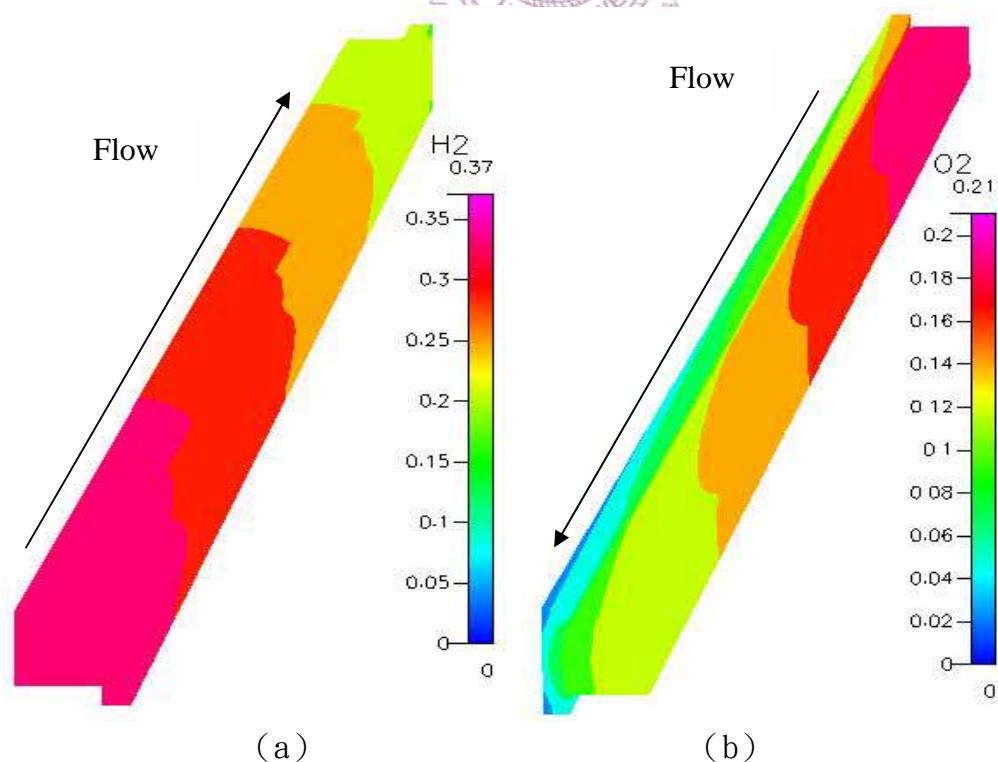
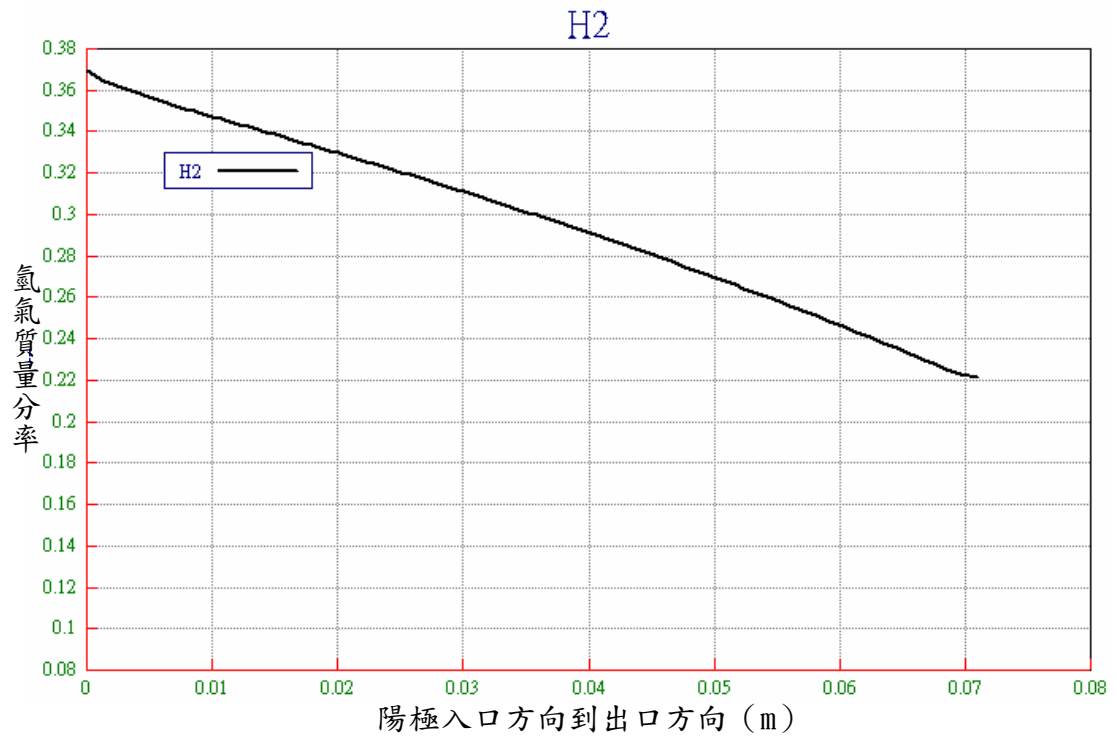
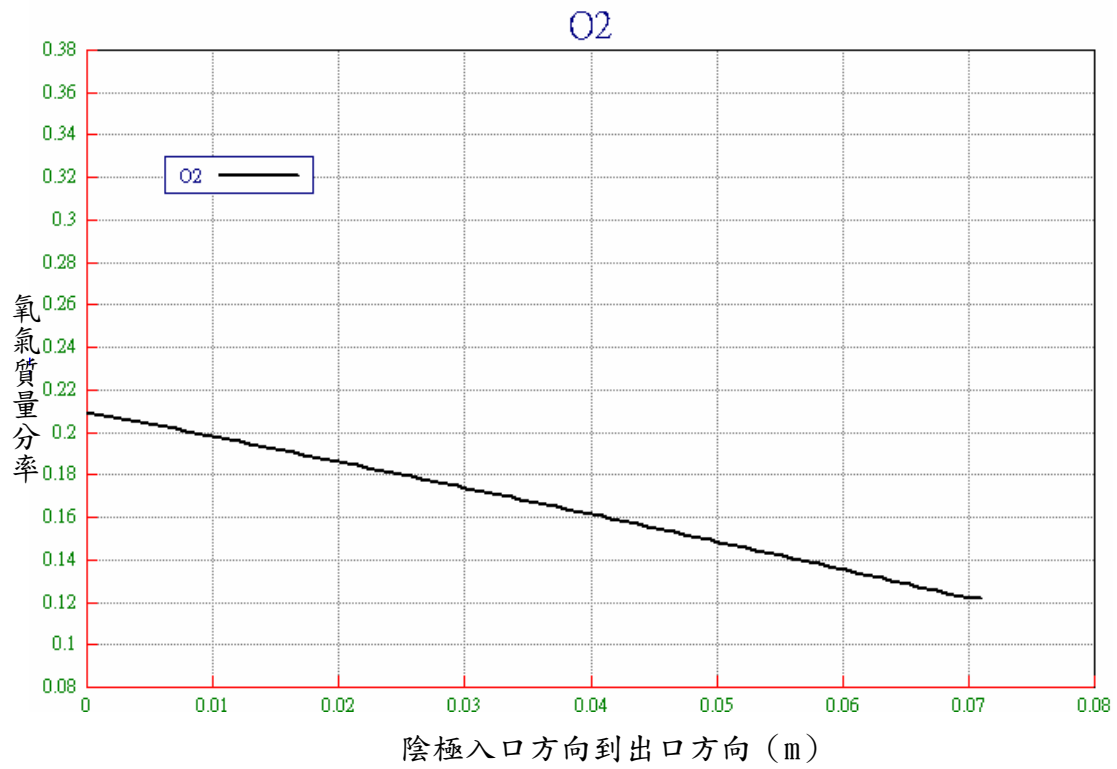


圖 4.27 流道和擴散層中 (a) 陽極氫氣與 (b) 陰極氧氣質量分率分佈圖

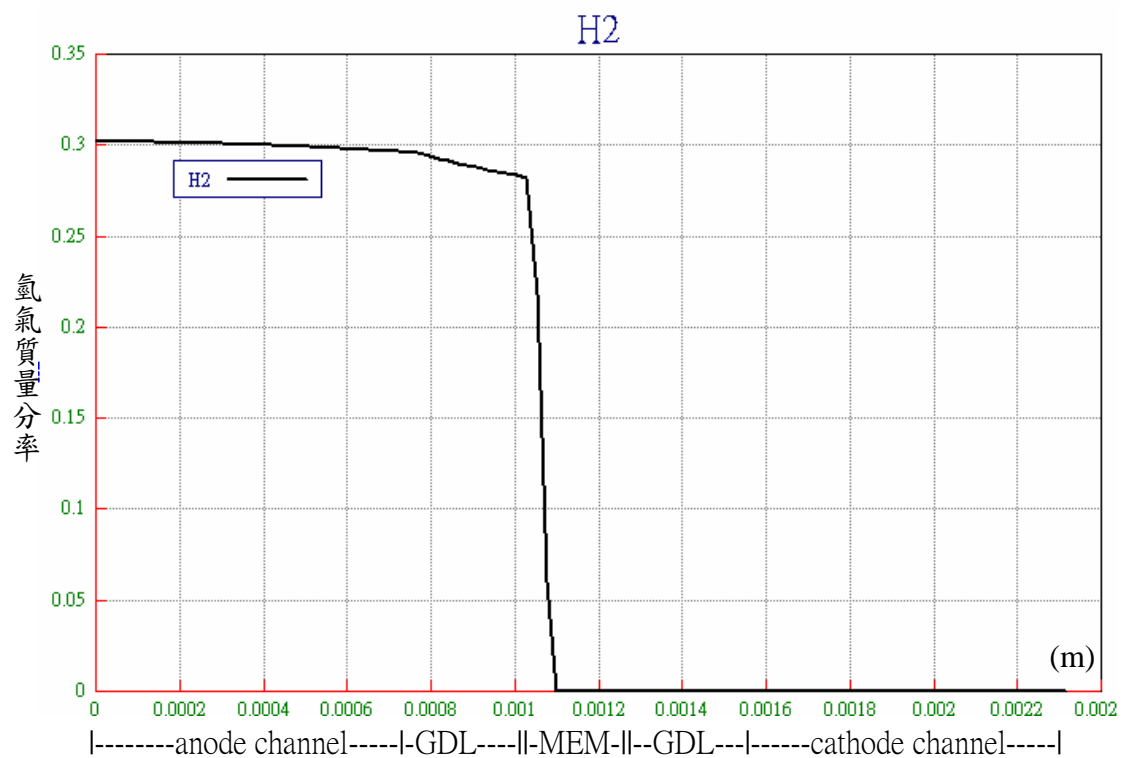


(a)

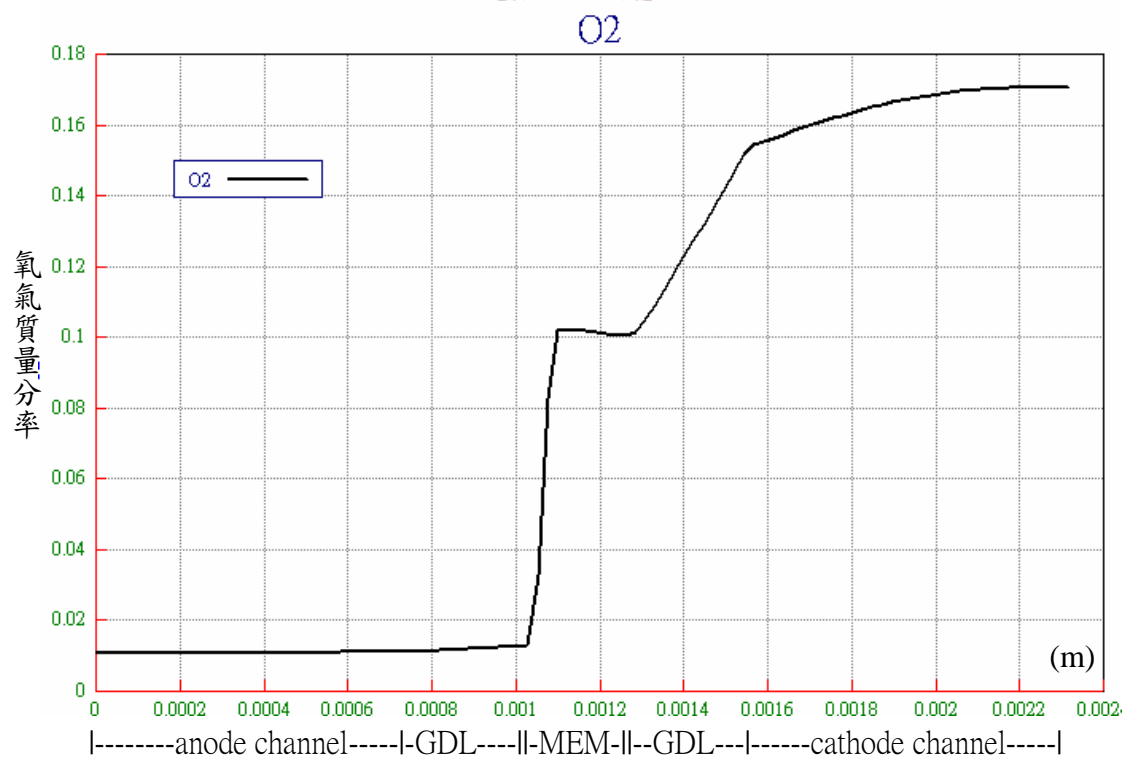


(b)

圖 4.28 $y=0.00581\text{m}$ (a) $x=0.00058\text{m}$ 氫氣由陽極入口到出口的質量分率遞減圖 (b) $x=0.00214\text{m}$ 氧氣由陰極入口到出口的質量分率遞減圖



(a)



(b)

圖 4.29 $y=0.000581m$ $z=0.03556m$ (a) 氫氣質量分率分佈 (b) 氧氣質量分率分佈

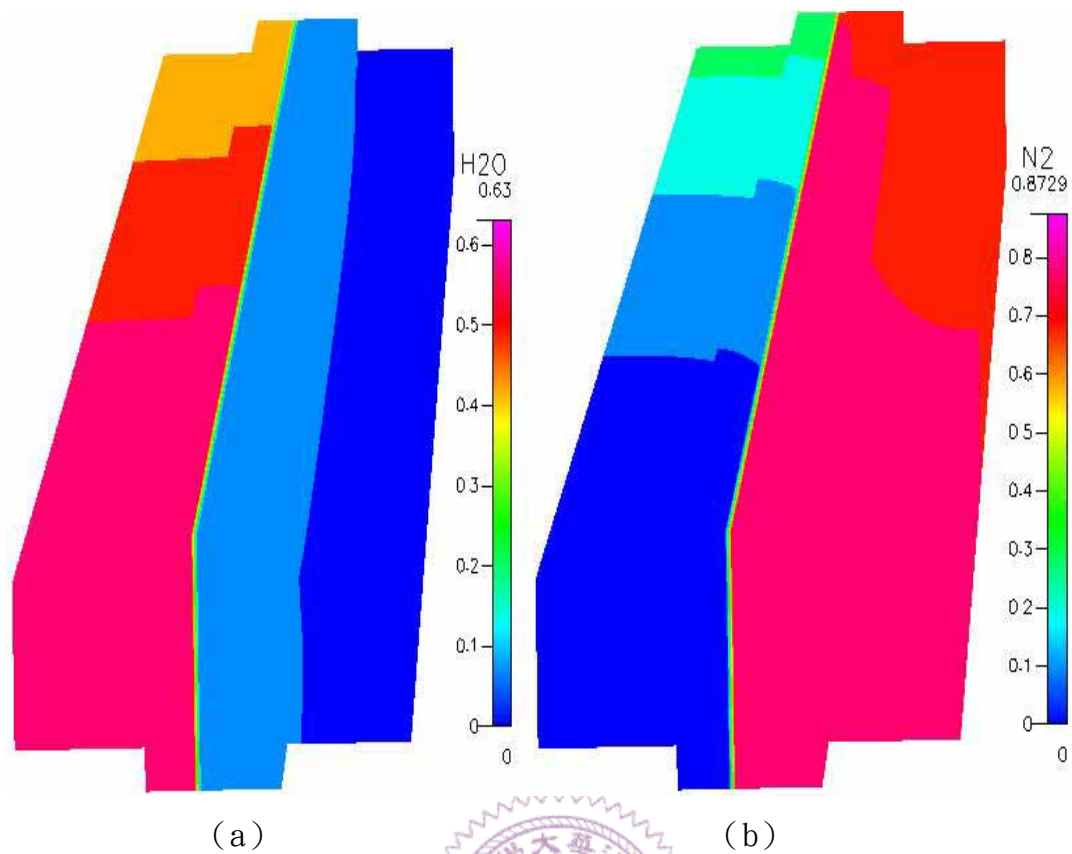


圖 4.30 電池內 (a) 水蒸汽質量分率分佈 (b) 氮氣質量分率分佈

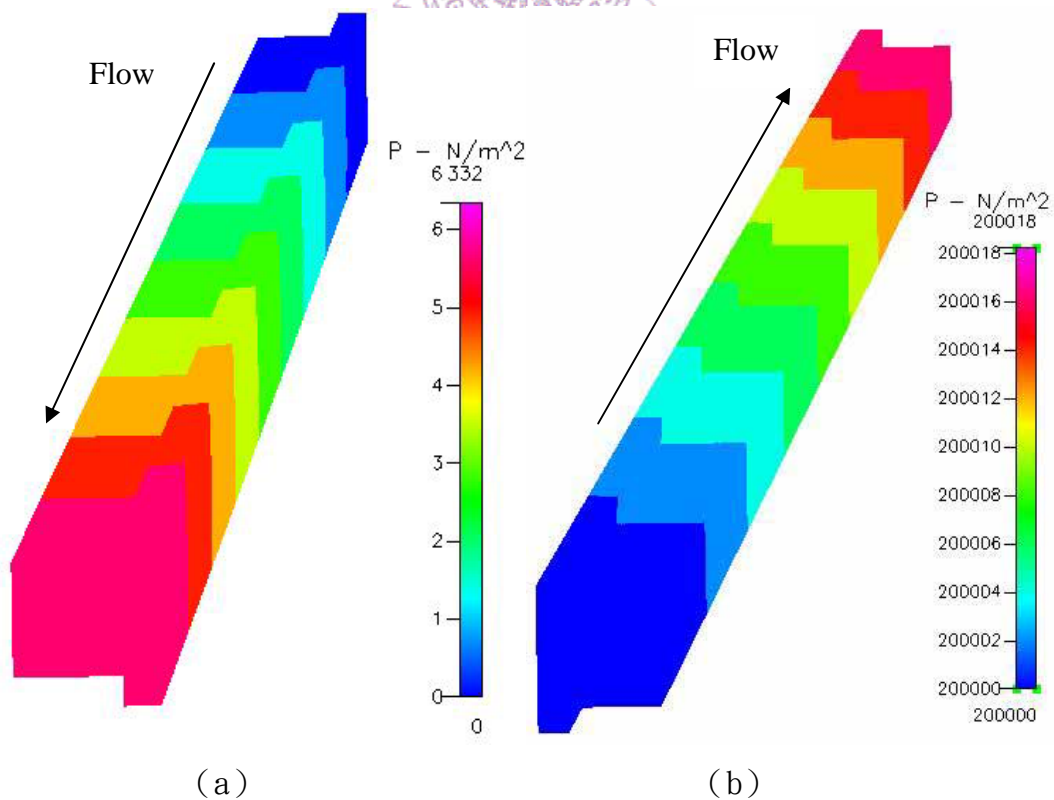


圖 4.31 (a) 陽極流道和擴散層中的壓降 (b) 陰極流道和擴散層中的壓降

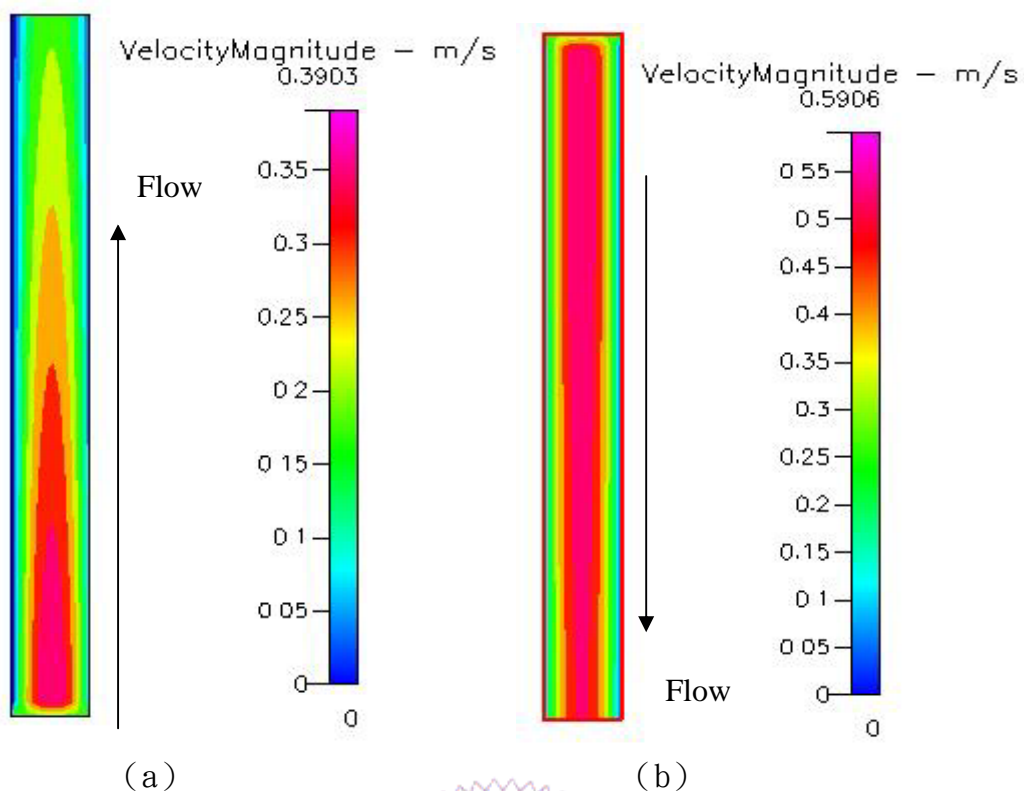


圖 4.32 流道中央 ($y=0.000581\text{m}$) (a) 陽極流道的速度分佈 (b) 陰極流道的速度分佈

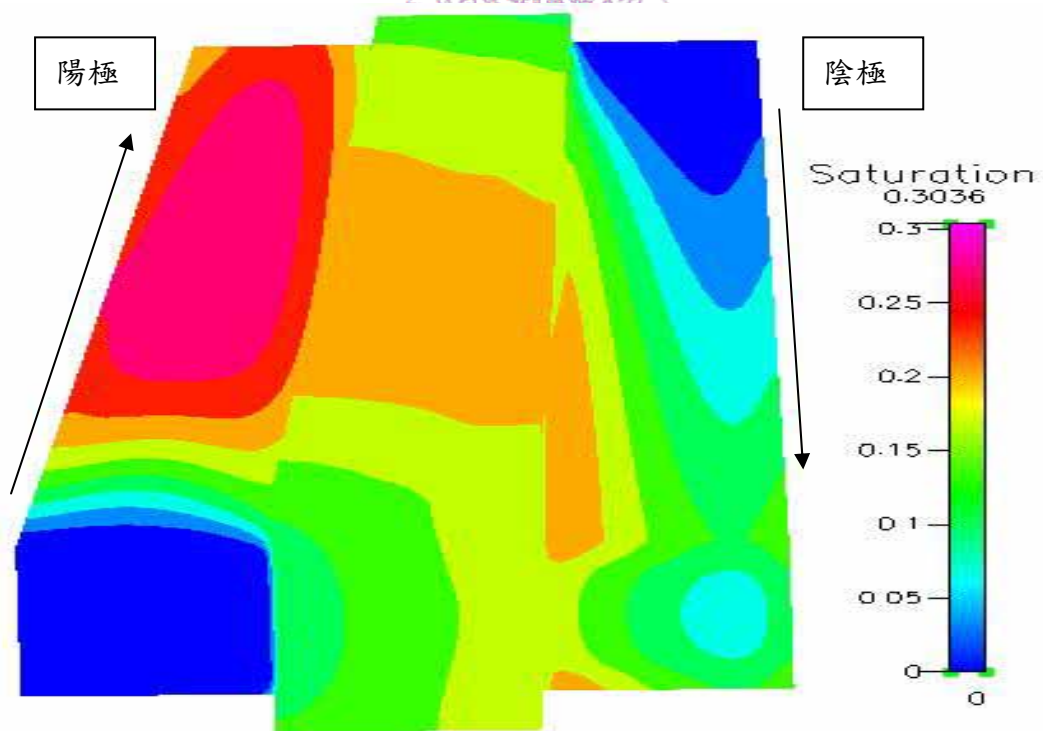


圖 4.33 電池內 saturation 分佈

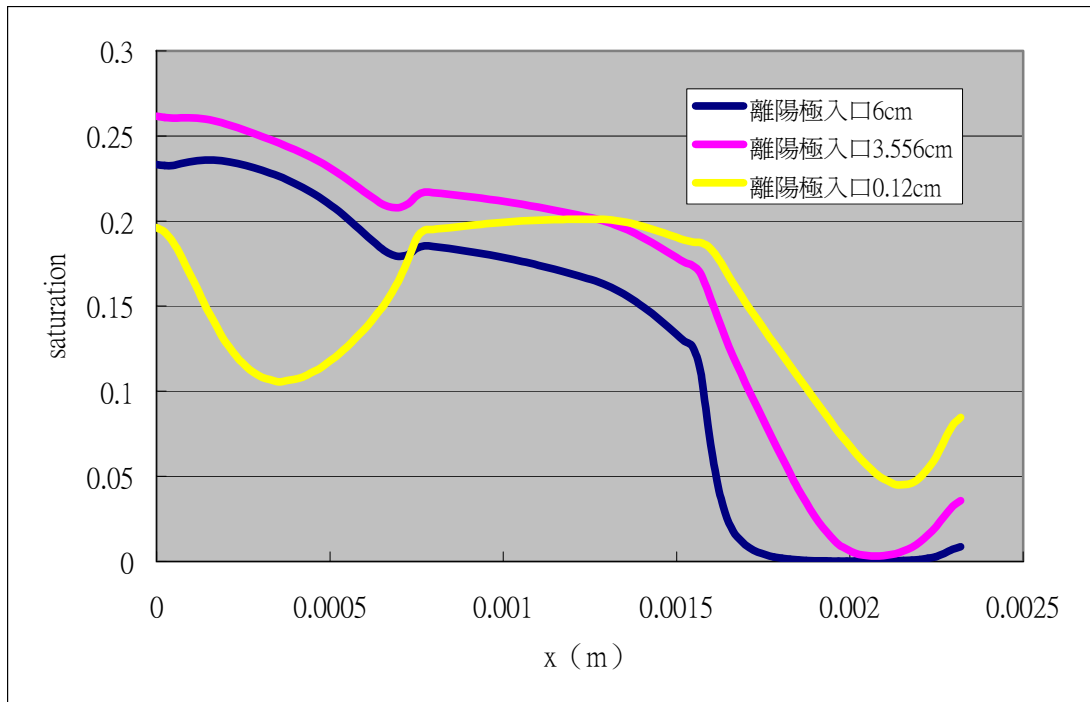


圖 4.34 $y=0.00581\text{m}$ X 軸方向 saturation 變化

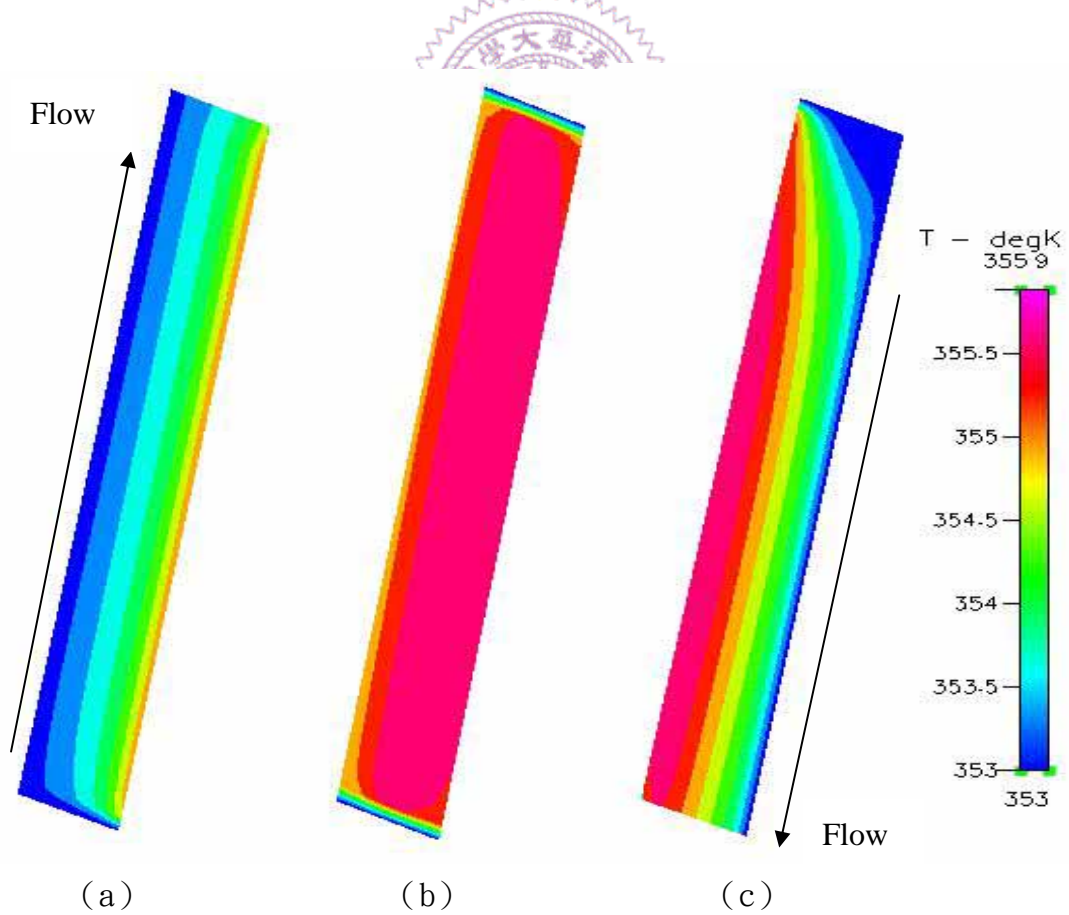


圖 4.35 (a) 陽極流道中段溫度分佈 (b) MEA 中段溫度分佈 (c) 陰極流道中段溫度分佈

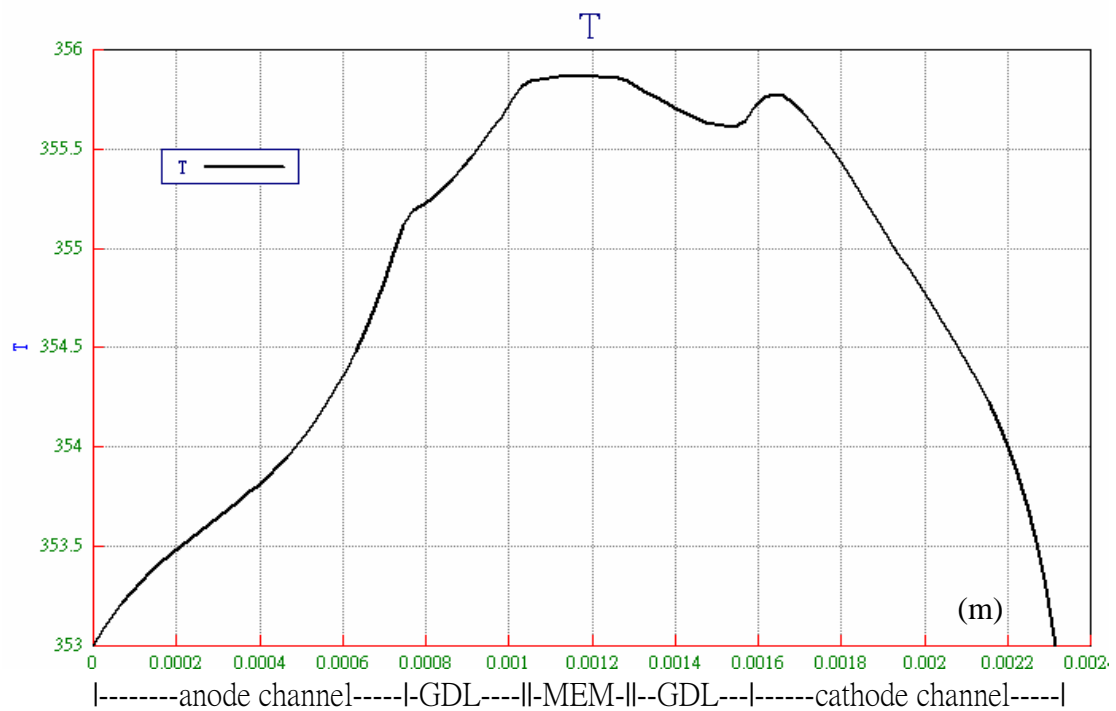


圖 4.36 $y=0.000581\text{m}$ $z=0.03556\text{m}$ 的溫度分佈曲線

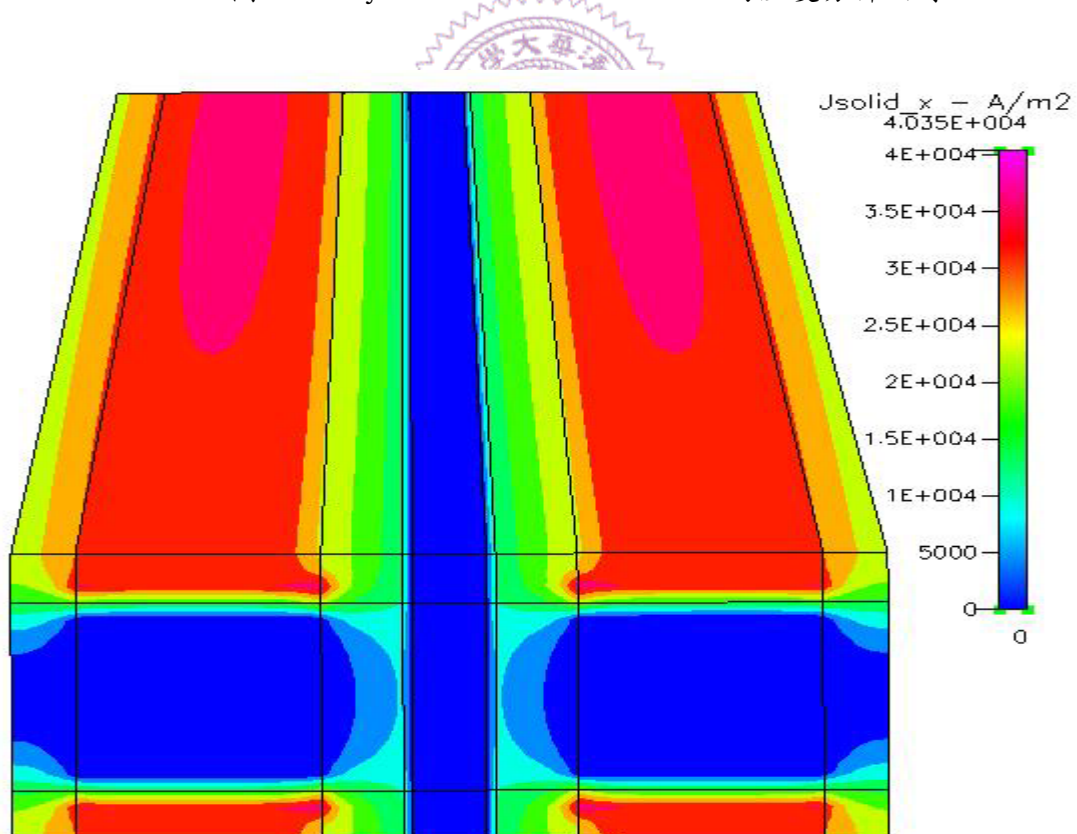


圖 4.37 電池內 X 軸方向電流密度分佈圖

4-2-3 邊界條件的更改

修改過後的電池內部物理參數設定，得出的結果基本上是可以接受的。在電池對外界的散熱機制而言，一般實際設計的燃料電池，除了堆疊成電池堆外，還有外增散熱流道等強制或自然對流散熱。在原本的設定下，是以定溫的邊界條件模擬電池在一個穩定的工作溫度下，所產生的內部熱質能分佈。以下的分析中，將電池的邊界條件上改為一對流的散熱機制，來觀察電池內部的熱質能分佈。強迫對流的熱傳導系數約為 $25\text{--}250 \text{ W/m}^2\text{K}$ [22]，所以選擇外界溫度為室溫（300K），熱對流係數 $100 \text{ W/m}^2\text{K}$ 為單電池模擬的邊界條件。並將陽極陰極入口方向調整為一樣，主要為觀察邊界條件會給予電池模擬上怎樣的改變。

在圖 4.38 (a) 和 4.39 (a) 中可以看到氫氣的質量分率在入口之後有個較大的下降趨勢，主要原因之一在於圖 4.38 (a) 入口氫氣因為反應劇烈而有著大量的消耗的關係，並且陽極流道在入口附近的溫度上升的梯度較大，使得飽和進氣在入口之後形成不飽和狀態，因而帶走 MEA 上的液態水，從圖 4.46 可看出陽極流道入口附近的 saturation 較為低，並且在圖 4.42 可看出水蒸汽的質量分率在靠近入口的地方有上升的趨勢，即是上述兩個原因所造成的上升。在稍微遠離入口的陽極流道中，水蒸汽的質量分率開始有下降的趨勢，原因在於氫氣的穿透影響到質量分率。

圖 4.43 (a)(b) 是顯示流道和擴散層中氣體壓降的情形 (a) 陽極總壓降為 7.296Pa (b) 陰極壓降為 19.344Pa，壓力是均勻的下降，如同基本模組的壓力變化，表示改變邊界條件對於壓力的變化影響不大。

圖 4.44 (b) 可發現陰極流道的速度分佈，並不像前面幾個模組一樣，入口到出口幾乎維持都能一定的流速分佈，反而在流道後端速度產生下降。原因在於入口與出口的質量流率的不同 (入口 $8.2545\text{E-}7 \text{ kg/s}$ 、出口 $7.5321\text{E-}7 \text{ kg/s}$)。除了氫氣和氧氣的穿透現象外，在於水蒸汽的質量流率上升並沒有達到陰極反應下應該產生的質量流率。在陰極流道中，大部分氧氣質量流率為電化學反應消耗減少了 $8.5\text{E-}8 \text{ kg/s}$ ，而水蒸汽的質量流率只上升 $2.578\text{E-}08 \text{ kg/s}$ ，在圖 4.46 和圖 4.47 中可看出陰極流道出口 saturation 的分佈接近於 0，並且在陰極流道中段的 saturation 分佈比後段來的高，表示流道中水蒸汽的凝結成液態水，並

未都由陰極流道流出，而是經過穿透質子交換膜而到達陽極流道裡，驅動力可能來自壓力差（陽極 3 大氣壓，陰極 5 大氣壓）驅動。陽極流道後端速度下降較大，使得前面累積的水蒸汽質量通率過飽和，使後段流道壁面凝結較大量的液態水流出。

圖 4.48 (a) (b) (c) 顯示陽極流道、MEA 和陰極流道中段的溫度分佈，溫度從入口往出口堆積，在圖 4.49 可看到電池中央的溫度分佈，卻發現溫度最高點不在理論上產生熱的陰極催化層，反而在陽極的催化層處，此為一個不合理的溫度分佈現象，其原因待究中。

圖 4.50 為整個電池模擬下對於 X 軸方向的電流密度分佈，入口附近的電流比出口附近的高，主要也是因為氧氣質量分率的關係。模擬出的平均電流密度為 1.226 A/cm^2 ，若模擬反向進氣的平均電流密度為 1.222 A/cm^2 ，並沒有預期會有的反向進氣得到較高的電流密度情況，主要原因在於氧氣的消耗與陰極 saturation 的阻隔都差異不大，所以得出的電流密度也差異不大。在 300K 環境溫度 $100 \text{ W/m}^2\text{K}$ 的熱對流係數邊界設定下，得出來的電流密度略低於定溫邊界條件 1%。

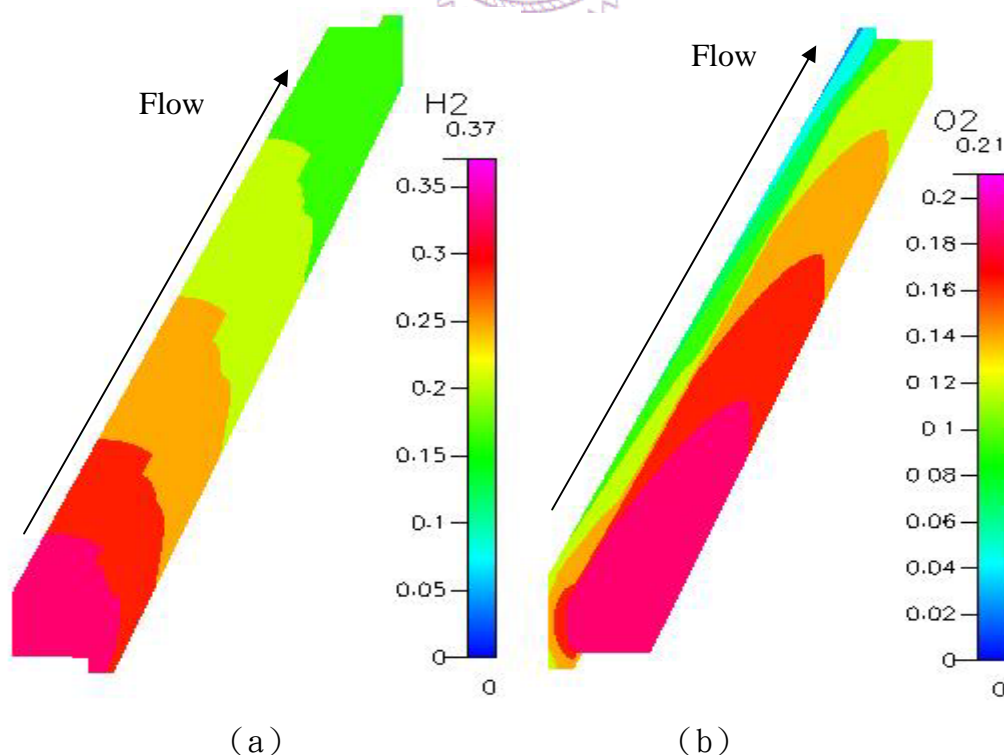
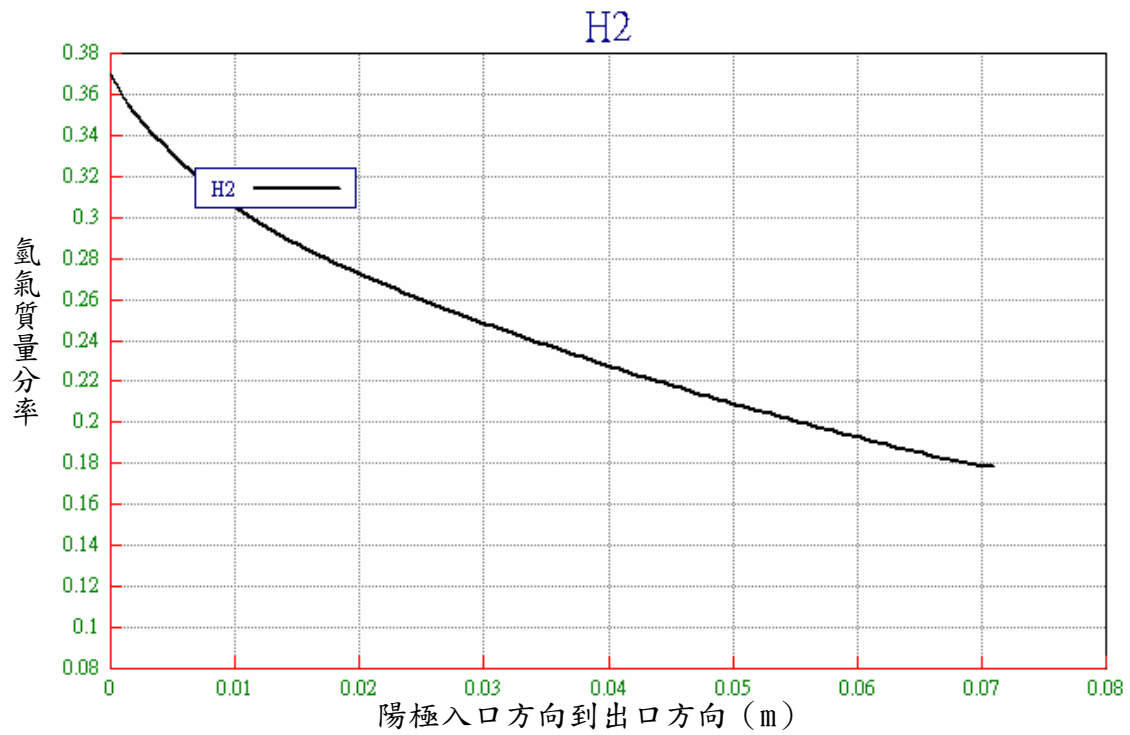
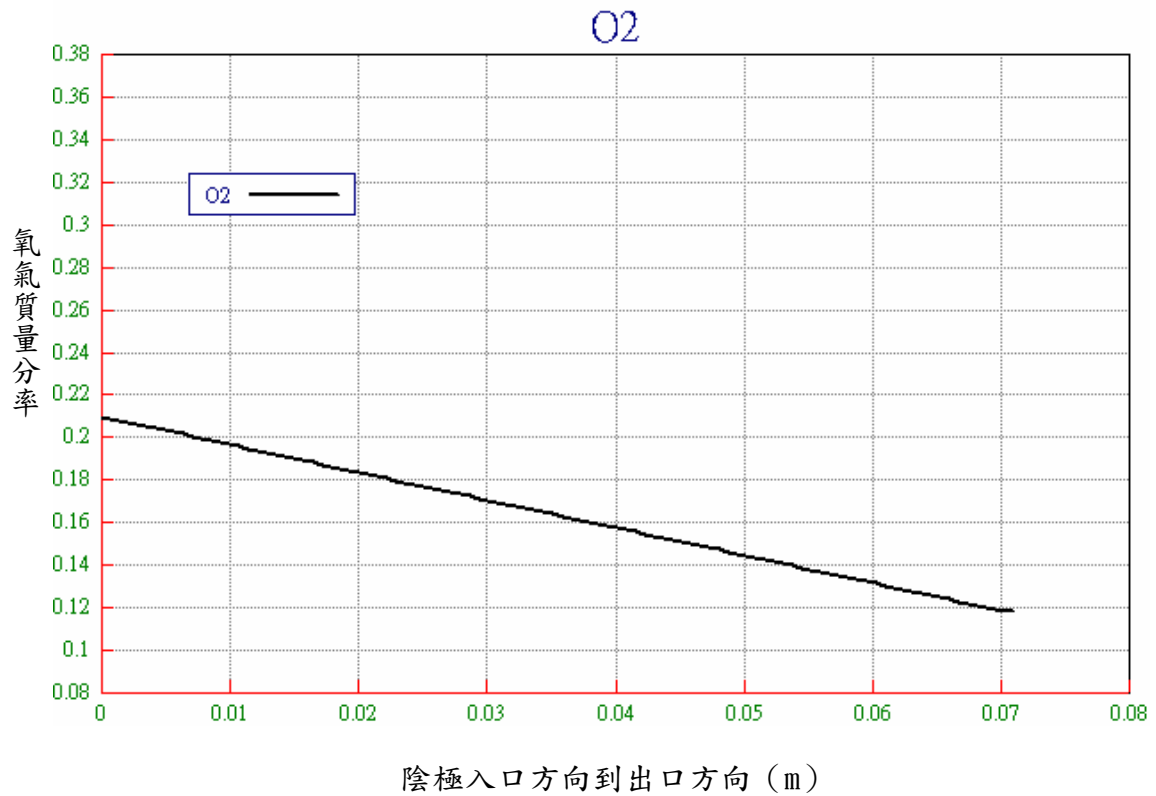


圖 4.38 流道和擴散層中 (a) 陽極氫氣與 (b) 陰極氧氣質量分率分佈圖

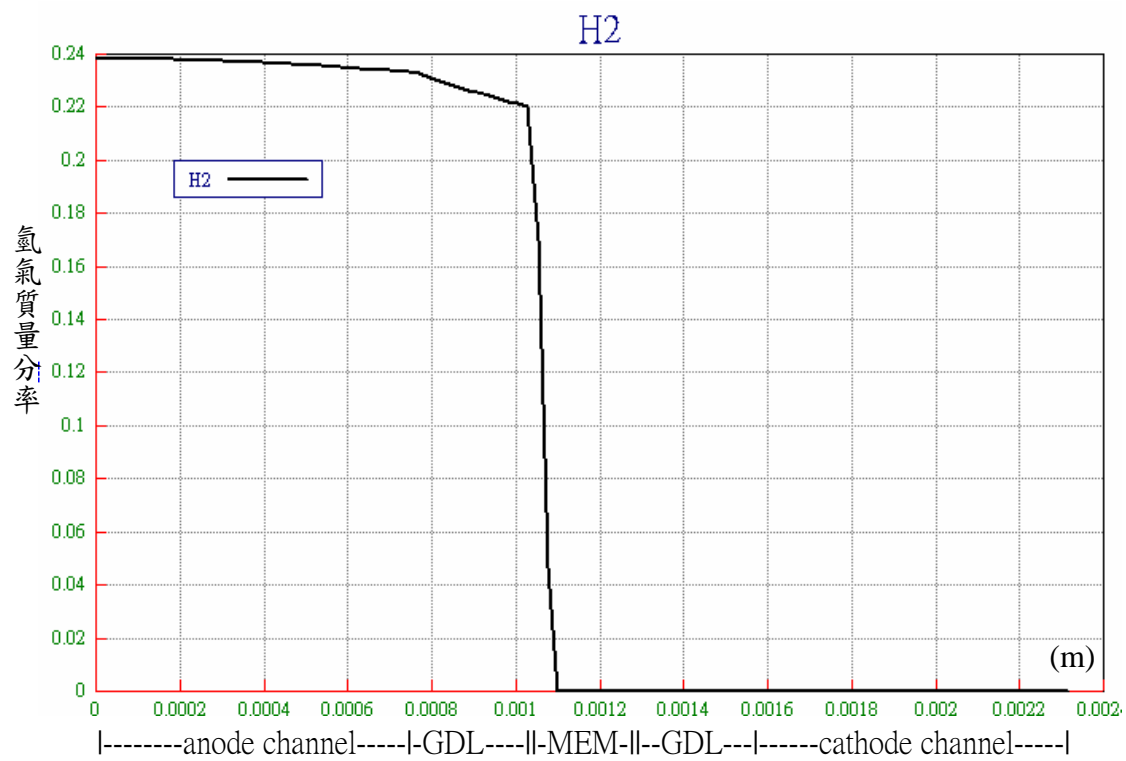


(a)

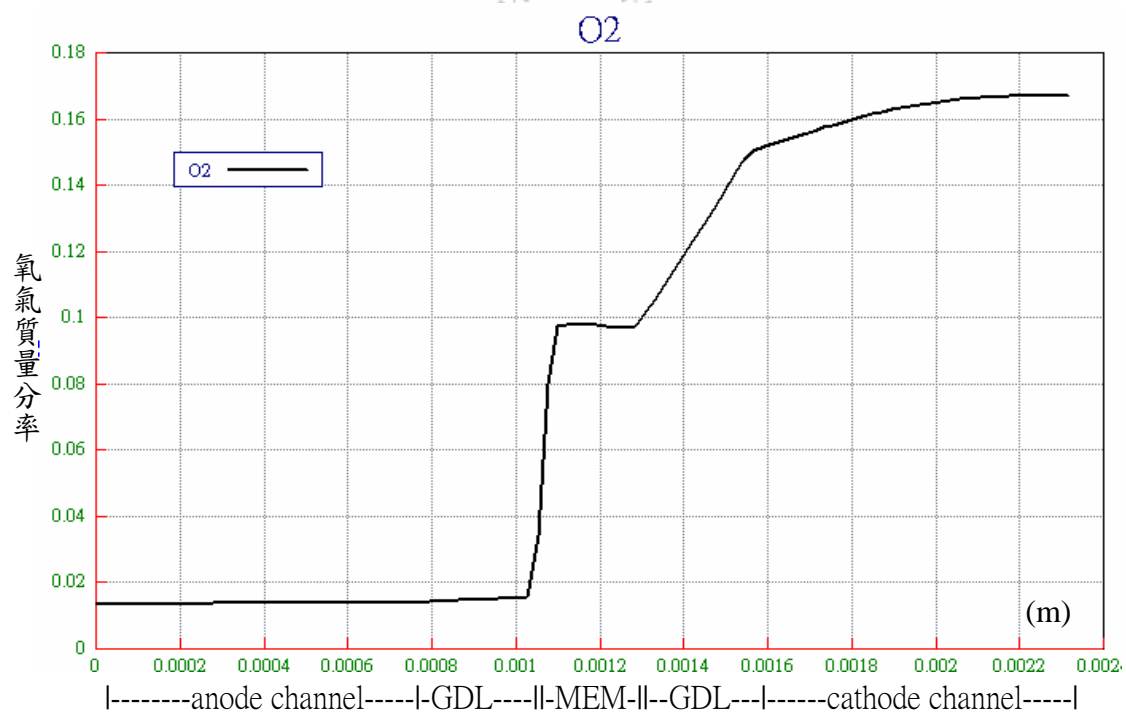


(b)

圖 4.39 $y=0.00581\text{m}$ (a) $x=0.00058\text{m}$ 氫氣由陽極入口到出口的質量分率遞減圖
圖 (b) $x=0.00214\text{m}$ 氧氣由陰極入口到出口的質量分率遞減圖



(a)



(b)

圖 4.40 $y=0.000581m$ $z=0.03556m$ (a) 氫氣質量分率分佈 (b) 氧氣質量分率分佈

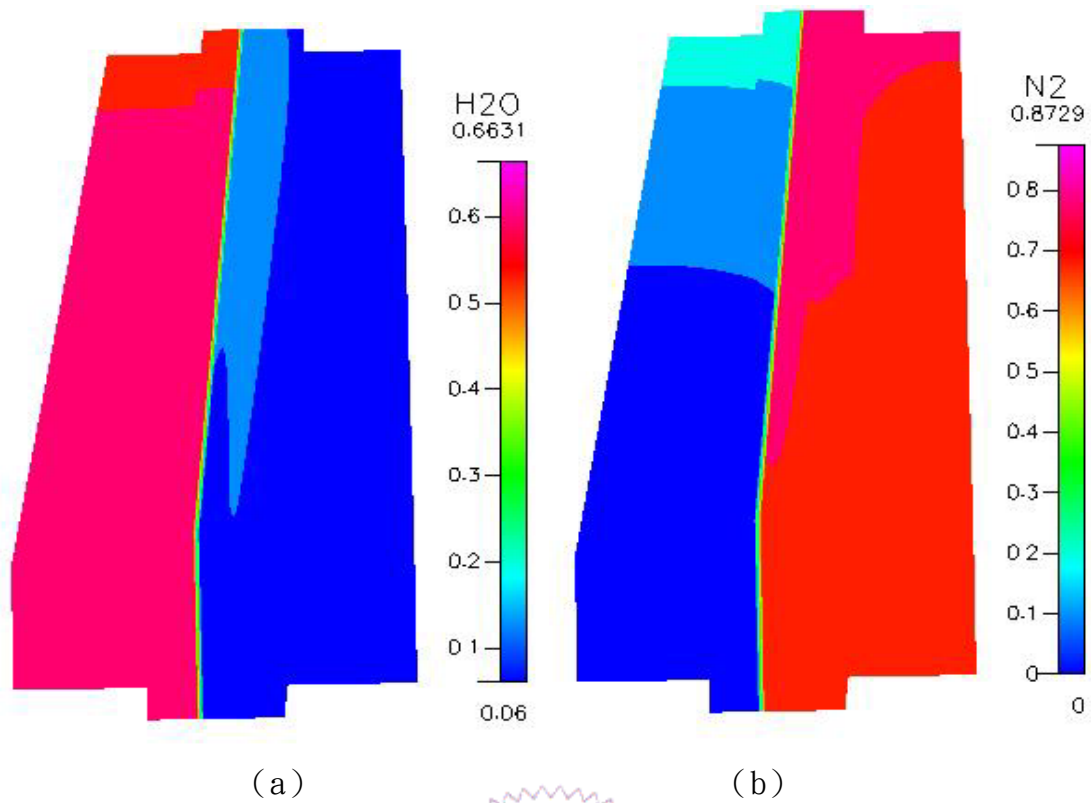


圖 4.41 電池內 (a) 水蒸汽質量分率分佈 (b) 氮氣質量分率分佈

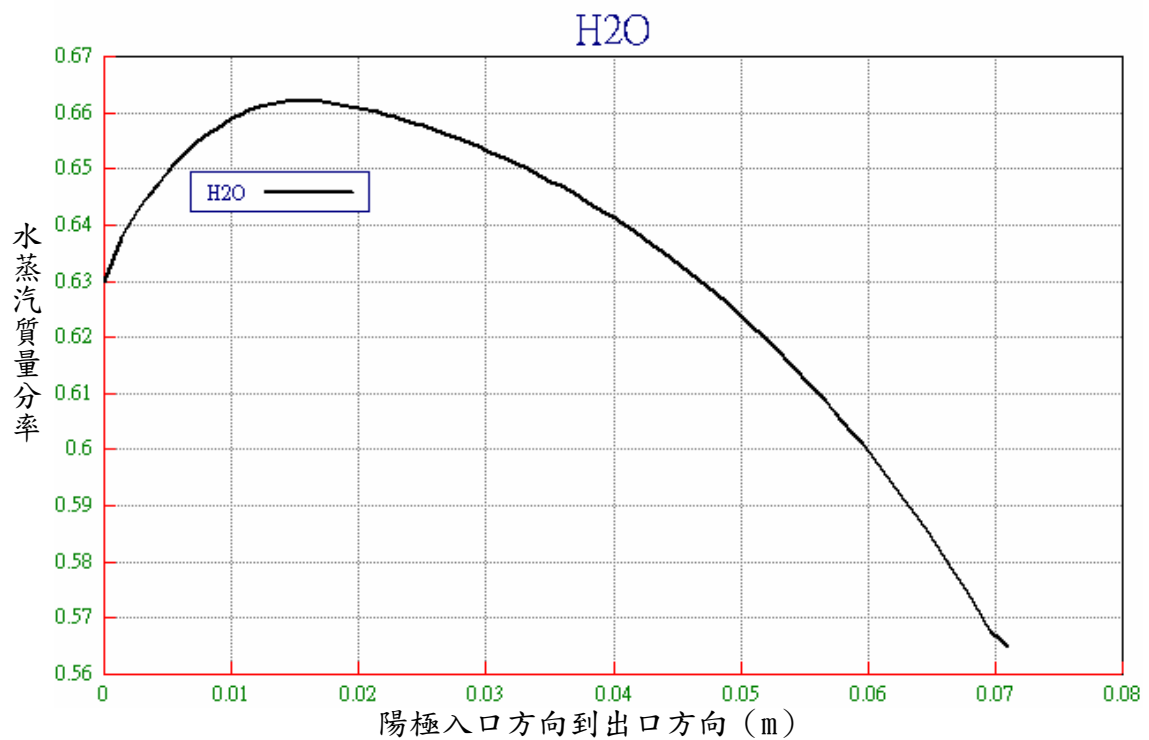


圖 4.42 $y=0.00581\text{m}$ $x=0.00058\text{m}$ 陽極流道中水蒸汽的詳細質量分率分佈

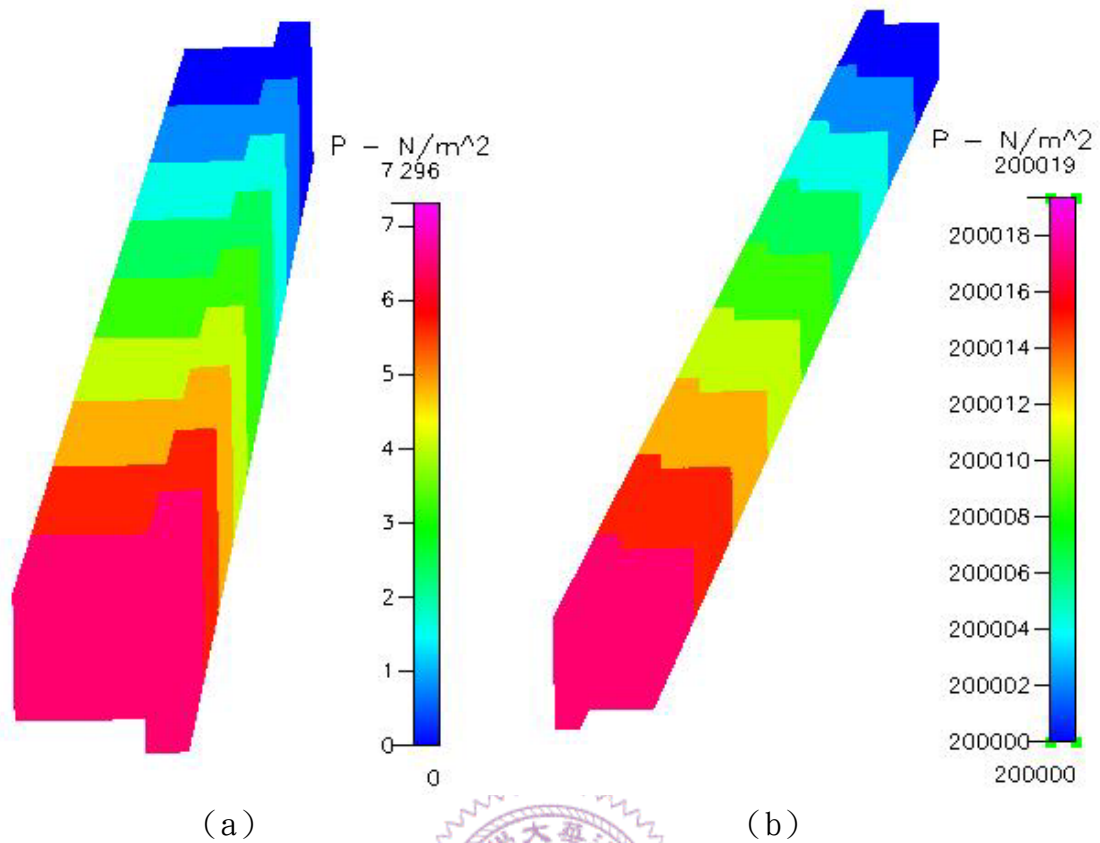


圖 4.43 (a) 陽極流道和擴散層中的壓降 (b) 陰極流道和擴散層中的壓降

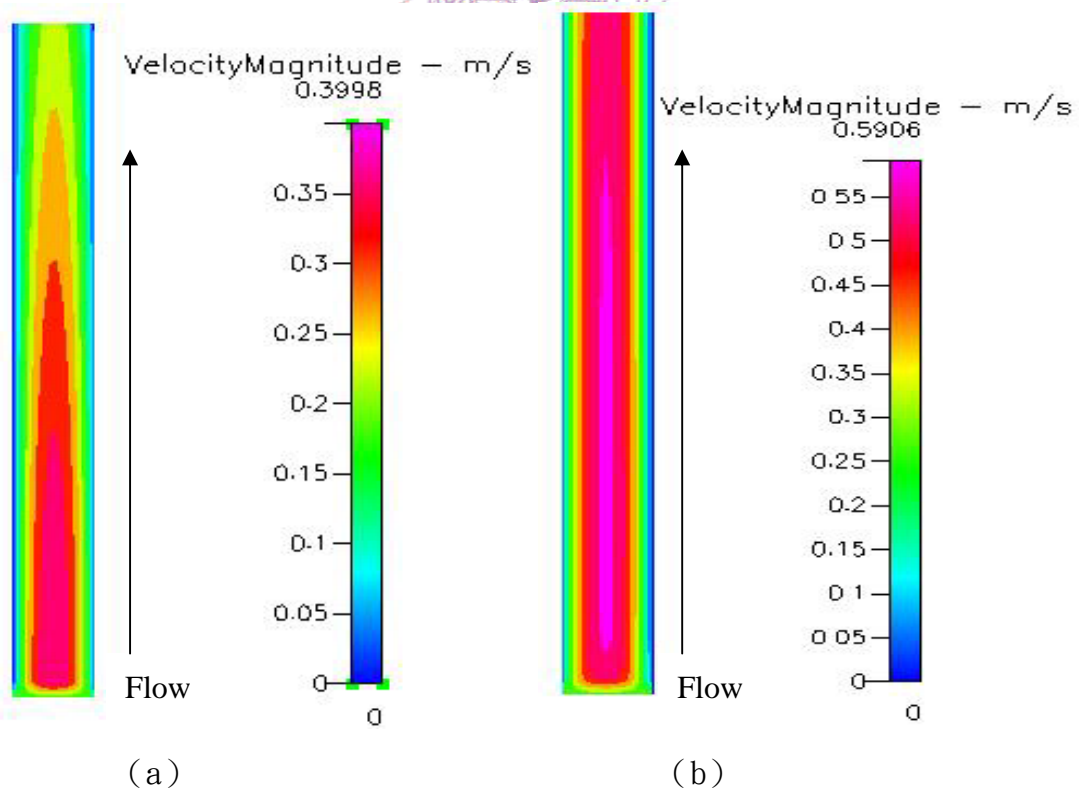


圖 4.44 流道中央 ($y=0.000581\text{m}$) (a) 陽極流道的速度分佈 (b) 陰極流道的速度分佈

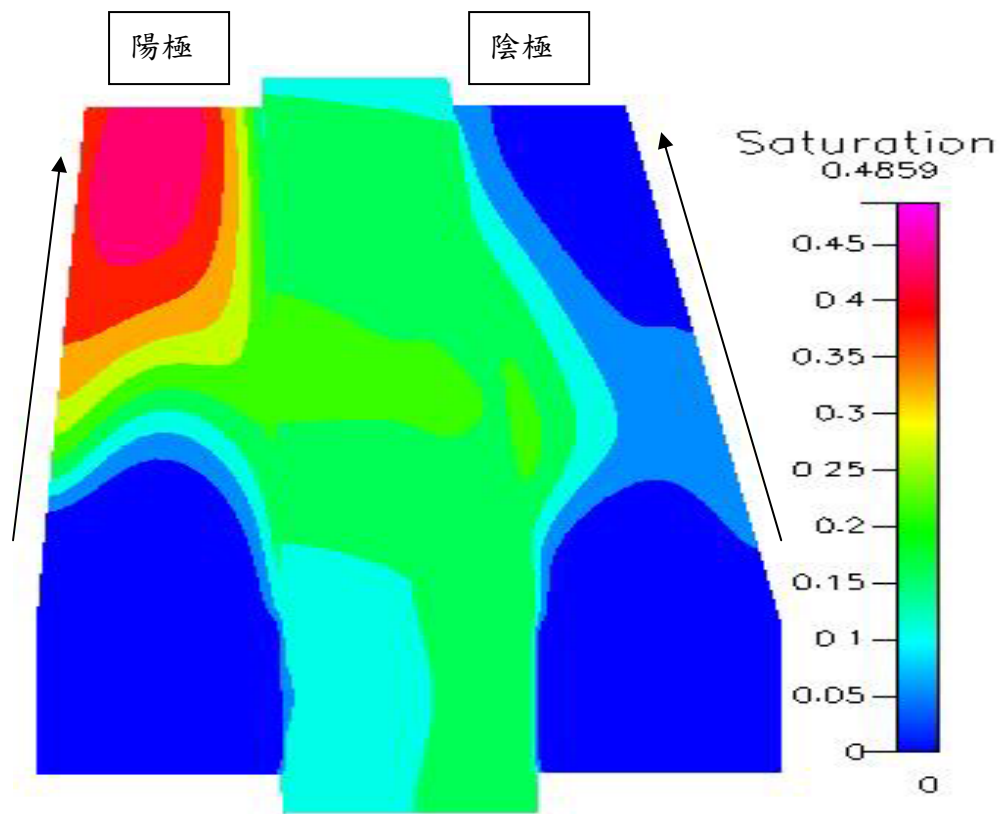


圖 4.45 電池內 saturation 的分佈

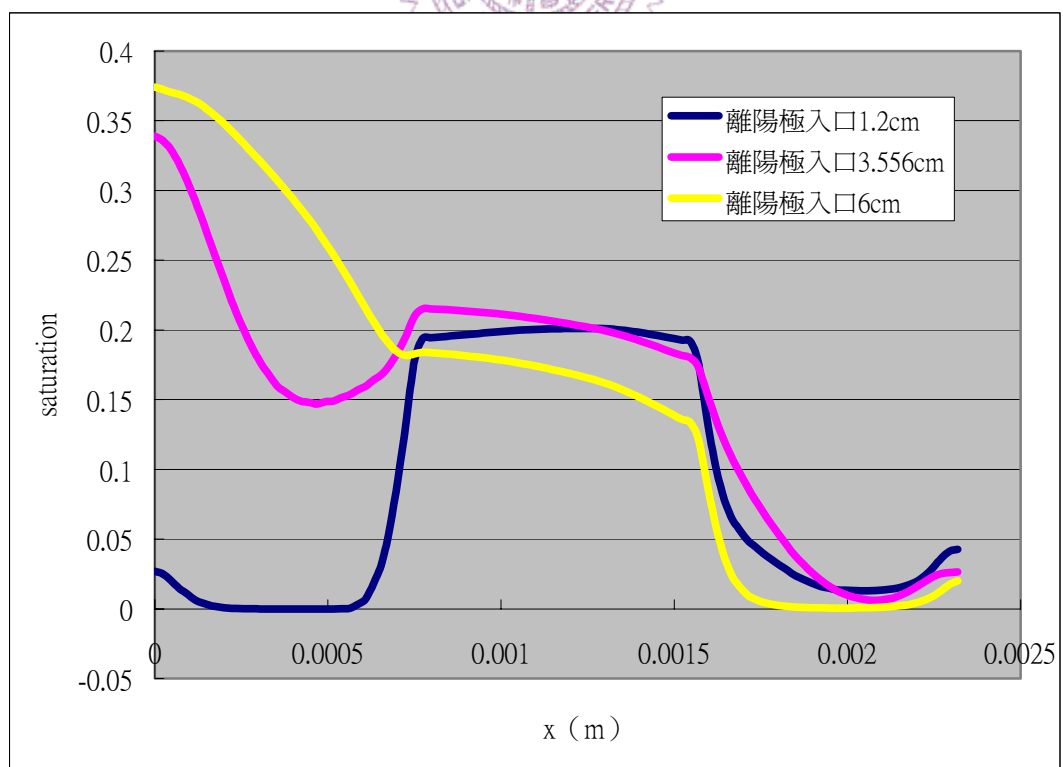


圖 4.46 $y=0.00581\text{m}$ X 軸方向 saturation 變化

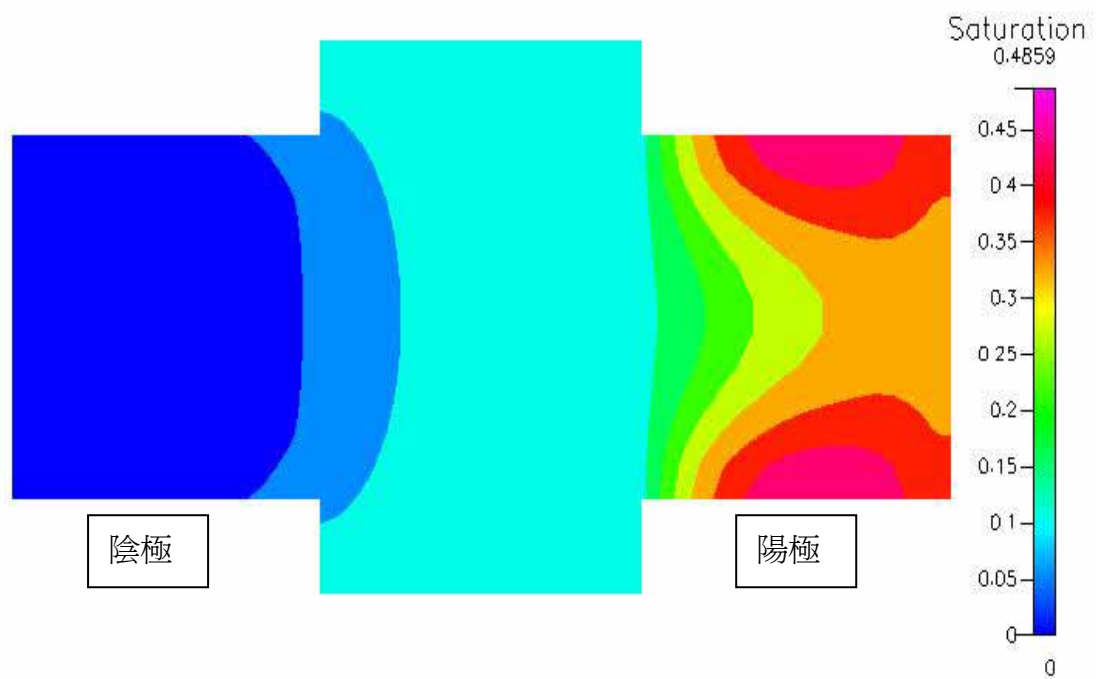


圖 4.47 電池出口處 saturation 分佈

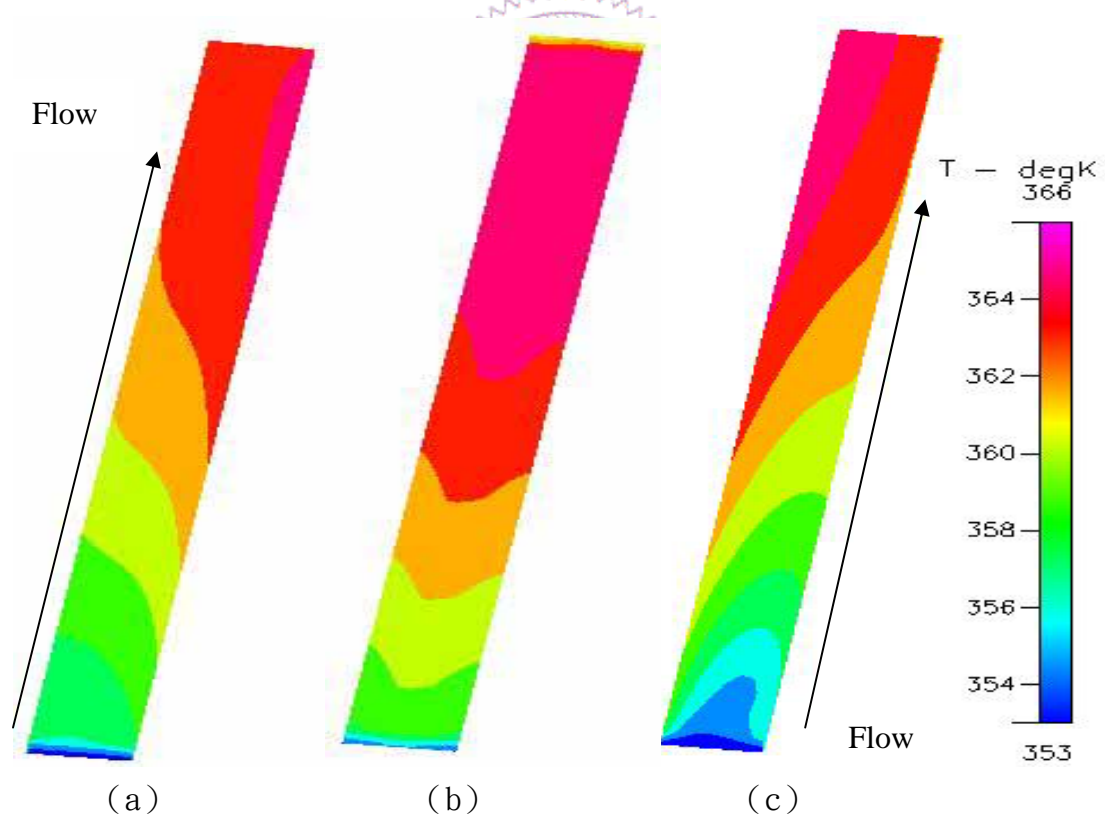


圖 4.48 (a) 陽極流道中段溫度分佈 (b) MEA 中段溫度分佈 (c) 陰極流道中段溫度分佈

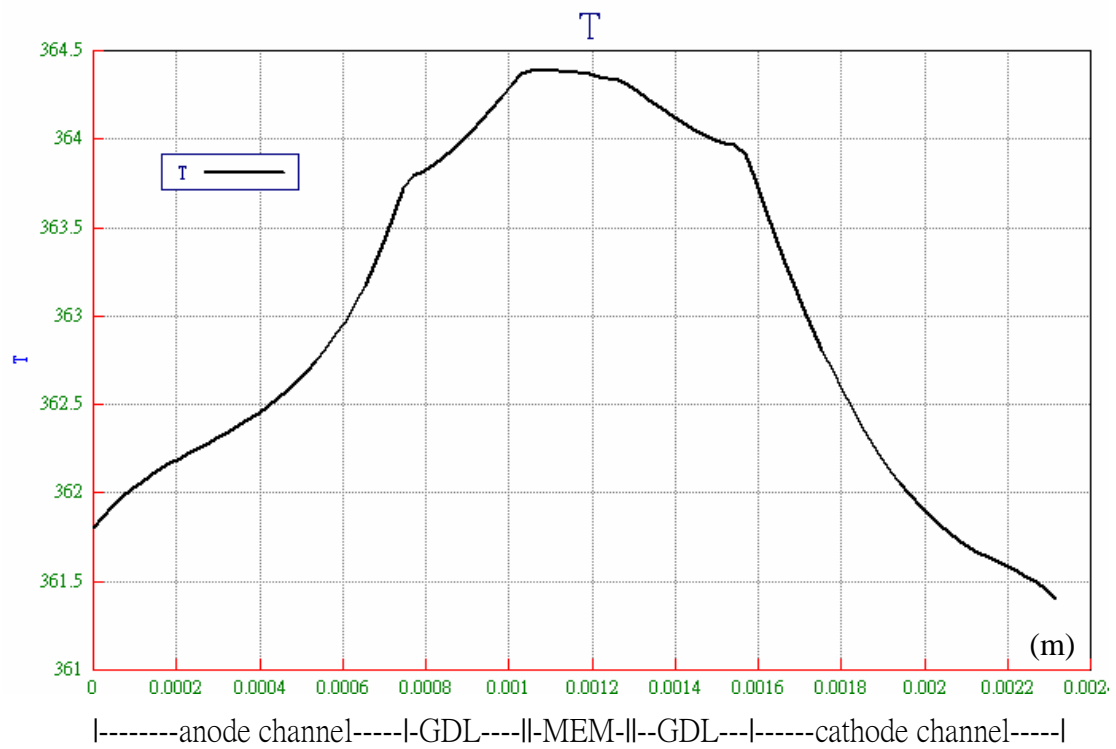


圖 4.49 $y=0.000581\text{m}$ $z=0.03556\text{m}$ 的溫度分佈曲線

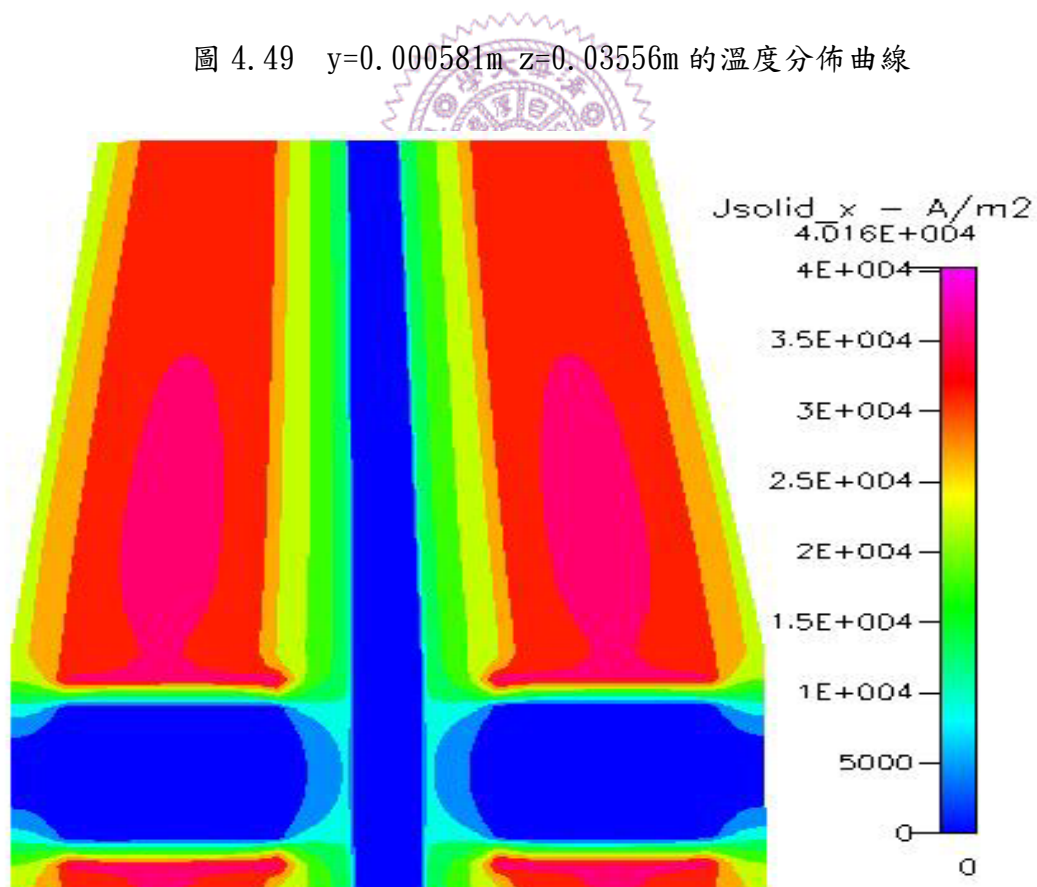


圖 4.50 電池內 X 軸方向電流密度分佈圖

4-2-4 等壓條件

在之前的設定中，往往陰極的氣體會穿透到陽極使得質量分率造成影響，將陰極的壓力從 5 大氣壓調降到 3 大氣壓，藉以除去壓力差所造成的流體穿透情況。降低壓力相對來說也是減低氣體質量流率，為了維持原本流通過的質量分率，依照理想氣體的概念，五大氣壓降低到三大氣壓近似於質量流率下降了 40%，所以在陰極流道中將原本 0.3m/s 的入口流速提高兩倍，相對於原本的進氣質量流率為 1.2 倍，以高於原本的質量流率來彌補壓力提供給陰極反應的損失。

由圖 4.51 (a) 和圖 4.52 (a) 可看出陽極中氫氣的質量分率出現由入口往出口遞增趨勢，由圖 4.53 (a) 看到氫氣質量分率在 GDL 和 Catalyst 處也是有一個梯度下降，表示氫氣有在正常反應，並非為質量分率上升的原因，從圖 4.54 (a) 和圖 4.55 中可看到水蒸汽的質量分率的大量下降，並由圖 4.53 (b) 和圖 4.54 (b) 看到氧氣與氮氣在沒有壓力差的情況下，從陰極穿透質子交換膜到陽極的現象消失了，表示氫氣的質量分率上升的原因來自於水蒸汽的質量分率大量下降。

圖 4.54(a) 與圖 4.55 可以看到水蒸汽的質量分率在進口的时候急遽下降，原因可以從圖 4.58 看出整個電池的溫度在氣體進口後逐步下降，使得飽和的進氣變成過飽和，凝結成液態水，圖 4.61 和圖 4.62 可看到陽極流道在入口附近馬上就有 saturation 的產生，又從圖 4.63 可以看出電池前後半段的電流產生有很大的落差，因為反應的量不足的原因，強迫對流下的邊界條件使得電池的溫度低於 353K，前半段電流較高的部分，是溫度下降比較少並且濃度比較高的部分，在這個範圍中，氫氣的消耗量比較多，使得水蒸汽在凝結的過程中也因為氫氣的大量消耗，當免除了陰極氣體的穿透後，氫氣的質量分率升降即代表水蒸汽的質量分率變化，故圖 4.55(b) 水蒸汽的質量分率在流道方向的下降，在前半區域有一段較為緩和的區域，則是水蒸汽凝結和氫氣的消耗達到相同比率的關係，接下來因為溫度下降，水蒸汽又再凝結，並且反應減緩，氫氣消耗的速率下降，又使得氫氣的質量分率變高。

圖 4.56 是陽極和陰極流道中的壓力下降 (a) 的壓力下降 5.546 Pa 與之前的模組差異不大，(b) 陰極的壓力下降為 37.18pa，壓力降大約為之前的模組兩倍，因為速度上升所以摩擦壓力降也隨之變大的關係。

water_content 在程式中代表著質子交換膜內每一個磺酸根 ($-SO_3^-$) 吸附多少水分子的值，這是 CFD-ACE+內建的參數，water_content 的值會影響整個質子交換膜傳導質子的能力。圖 4.59 是質子交換膜中 water_content 的分佈圖，電池中反應少使得溫度降低，可以從圖 4.60 看出，電流產生較多的區域的質子交換膜 water_content 比其他區域來的高。圖 4.59 (b) 看到 4-2-2 模擬出來的 water_content 比較均勻，整體的 water_content 也比較高，所以得出集電板上的電流密度也相對的來的比較高。由於質子交換膜內的水分子除了靠產生的水濃度差回擴散外，也因為壓力的差使水回擴散，在此模組中少去了壓力差回擴散的因素，使得質子交換膜中的 water_content 因為電滲透 (electro-osmotic) 的關係，大多集中在靠近陰極的部分，使得電池中的反應變小電流密度也相對大幅降低。(4-2-4 電流密度 0.8822 A/cm^2 ，4-2-2 電流密度 1.2390 A/cm^2)

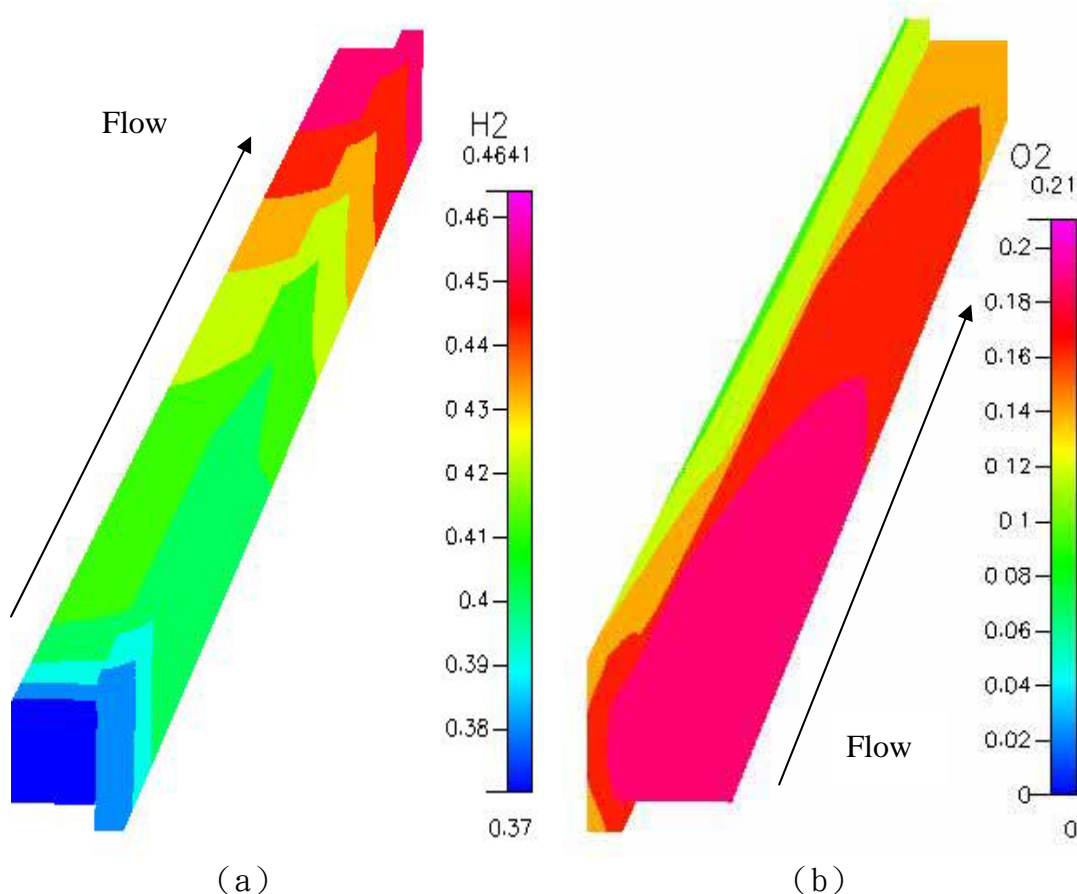


圖 4.51 流道和擴散層中 (a) 陽極中氫氣與 (b) 陰極中氧氣質量分率分佈圖

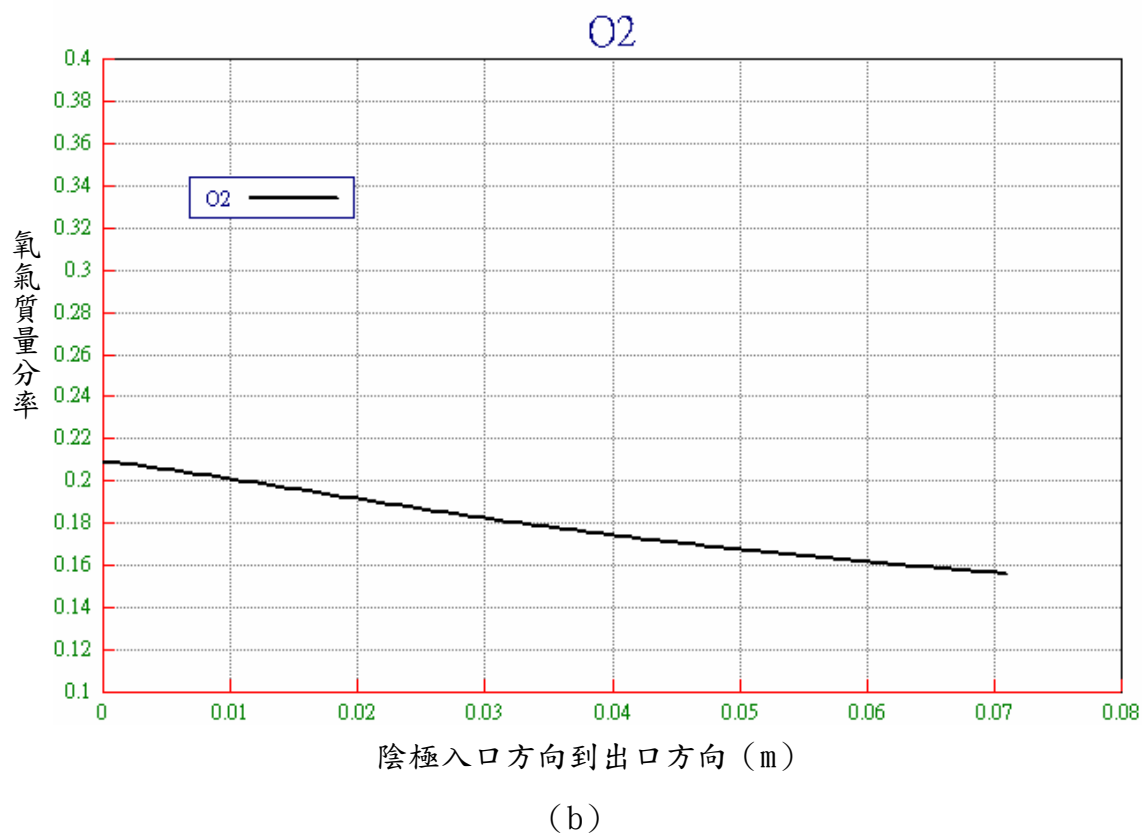
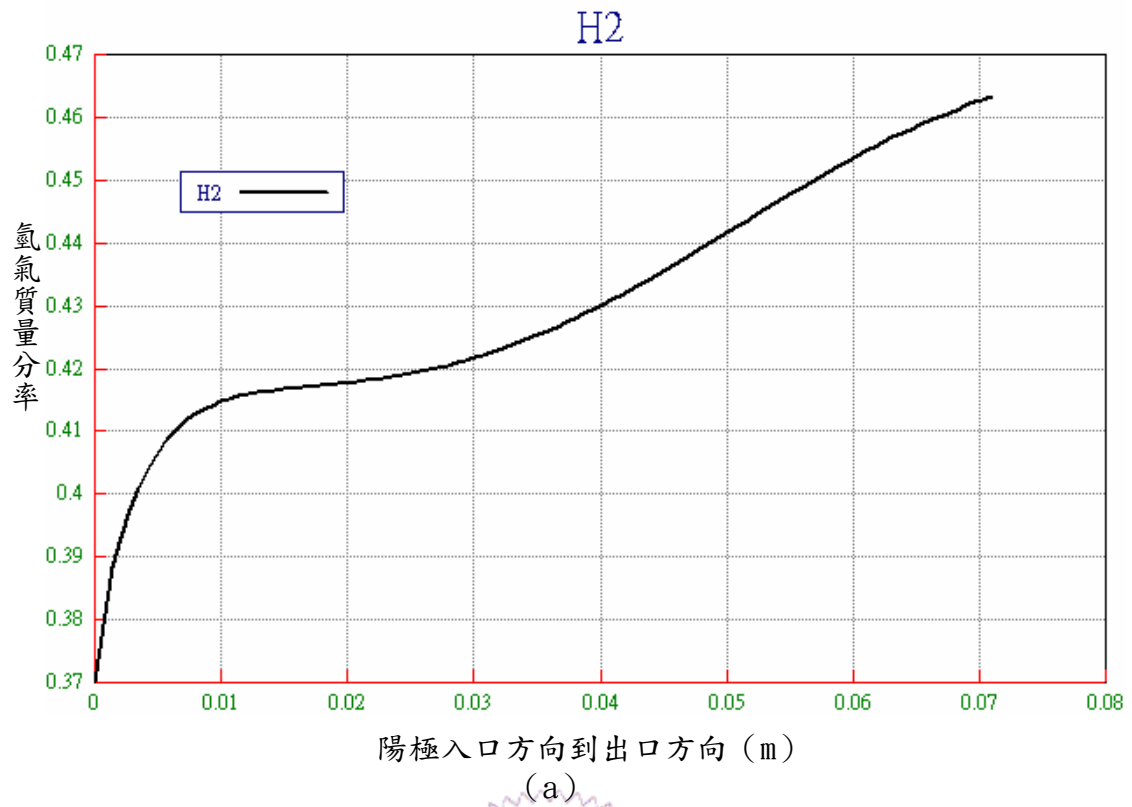
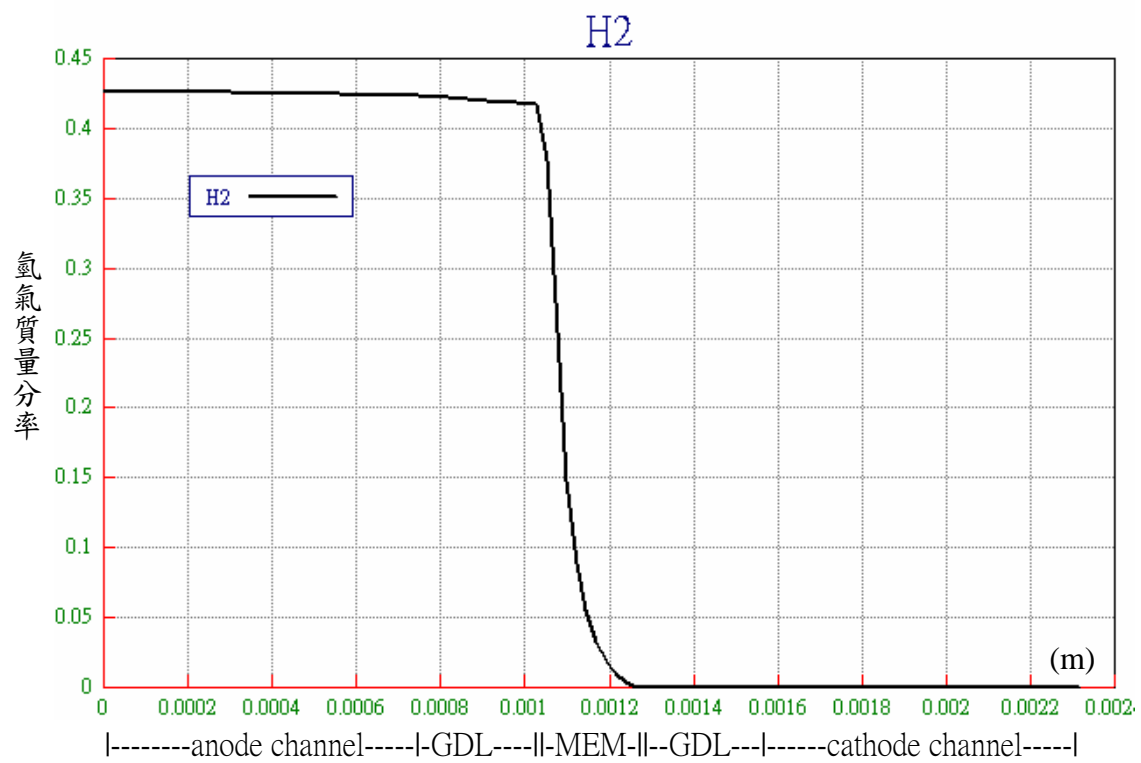
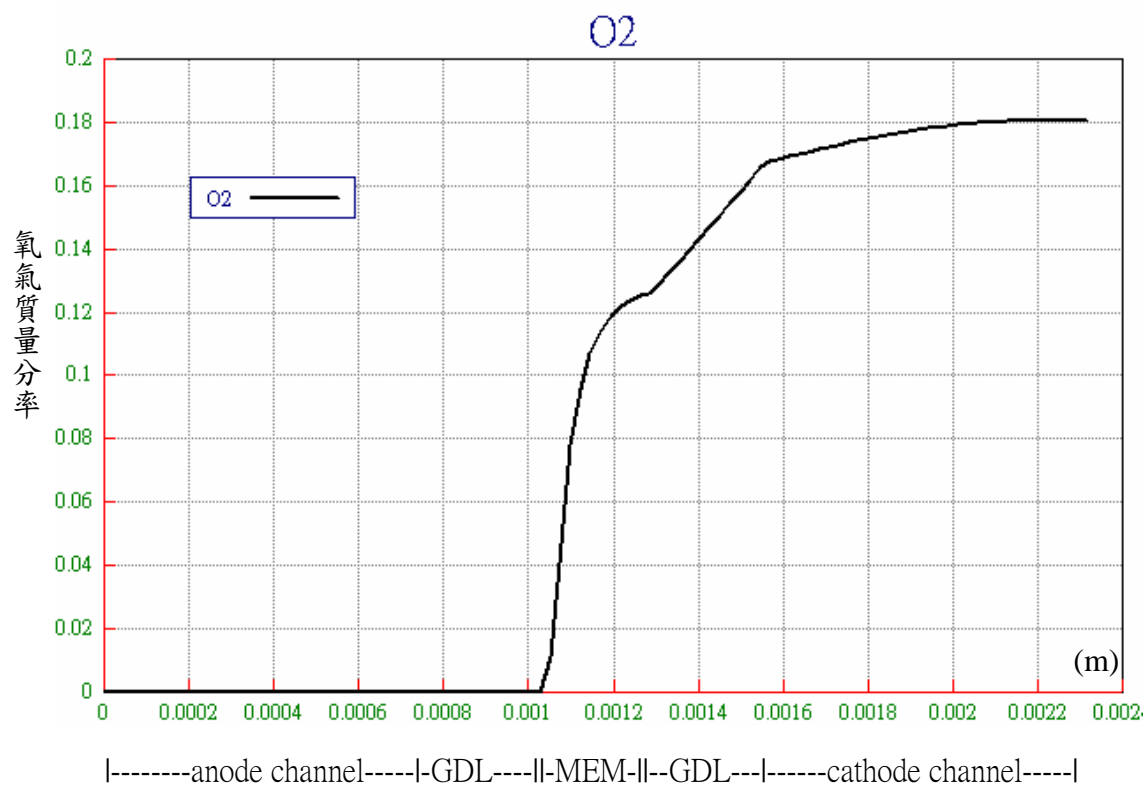


圖 4.52 $y=0.00581\text{m}$ (a) $x=0.00058\text{m}$ 氫氣由陽極入口到出口的質量分率變化圖 (b) $x=0.00214\text{m}$ 氧氣由陰極入口到出口的質量分率遞減圖



(a)



(b)

圖 4.53 $y=0.000581m$ $z=0.03556m$ (a) 氫氣質量分率分佈 (b) 氧氣質量分率分佈

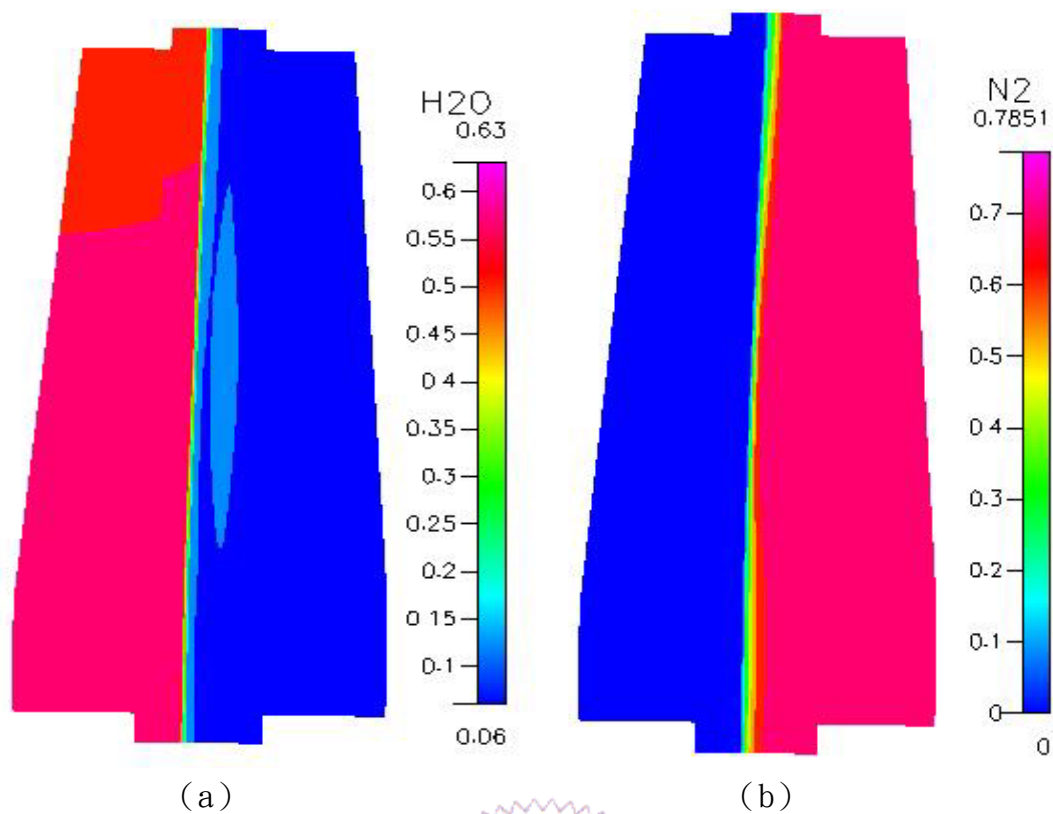


圖 4.54 電池內 (a) 水蒸汽質量分率分佈 (b) 氮氣質量分率分佈

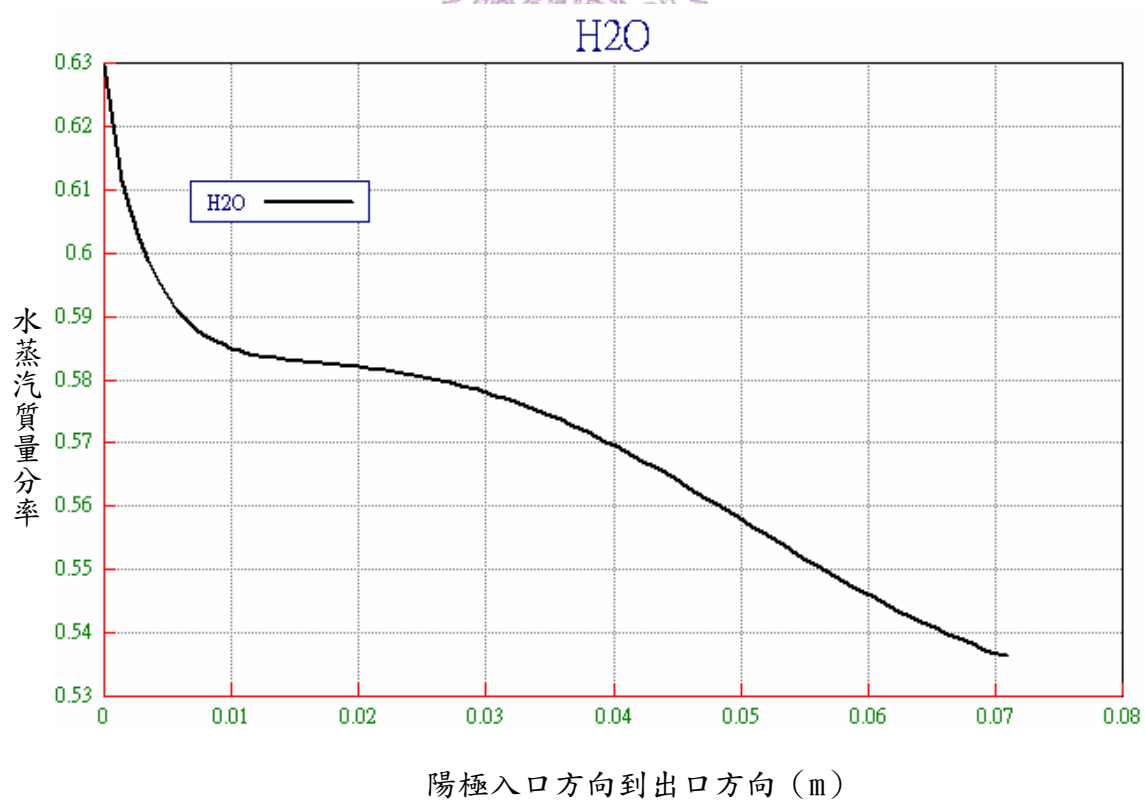


圖 4.55 $y=0.00581\text{m}$ $x=0.00058\text{m}$ 陽極流道中水蒸汽的詳細質量分率分佈

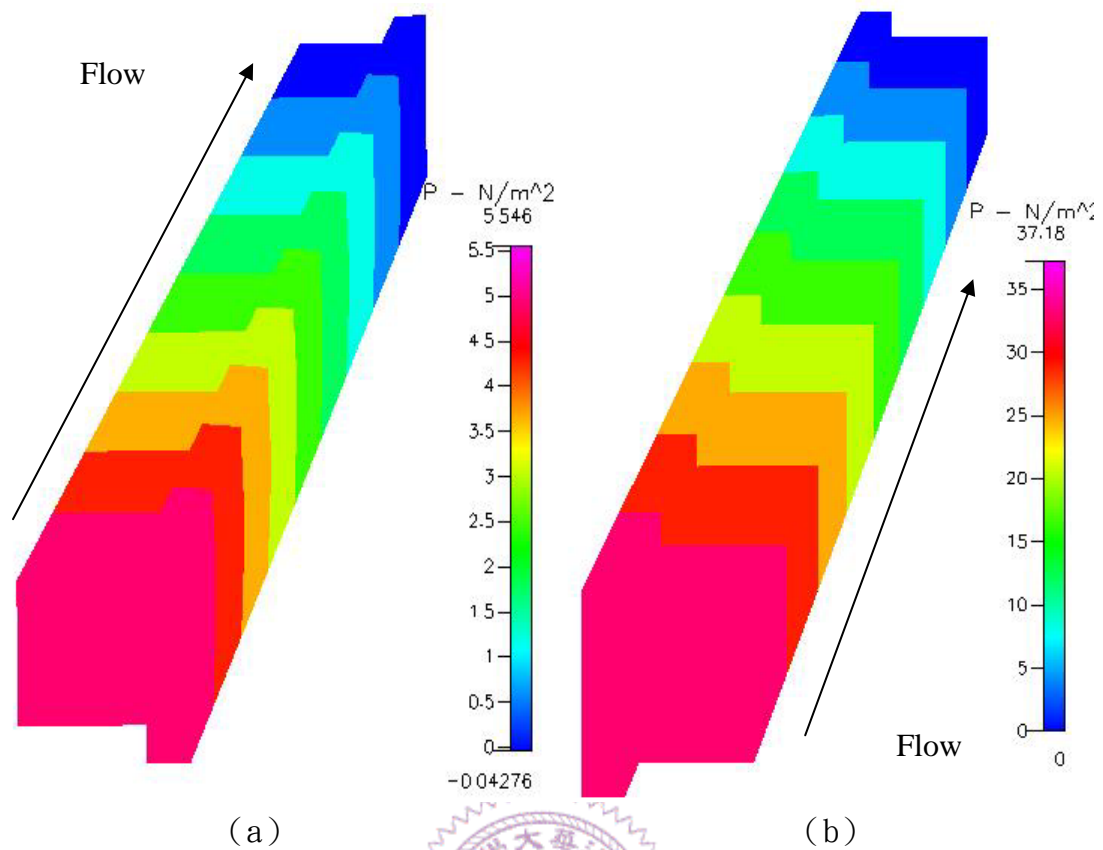


圖 4.56 (a) 陽極流道和擴散層中的壓降 (b) 陰極流道和擴散層中的壓降

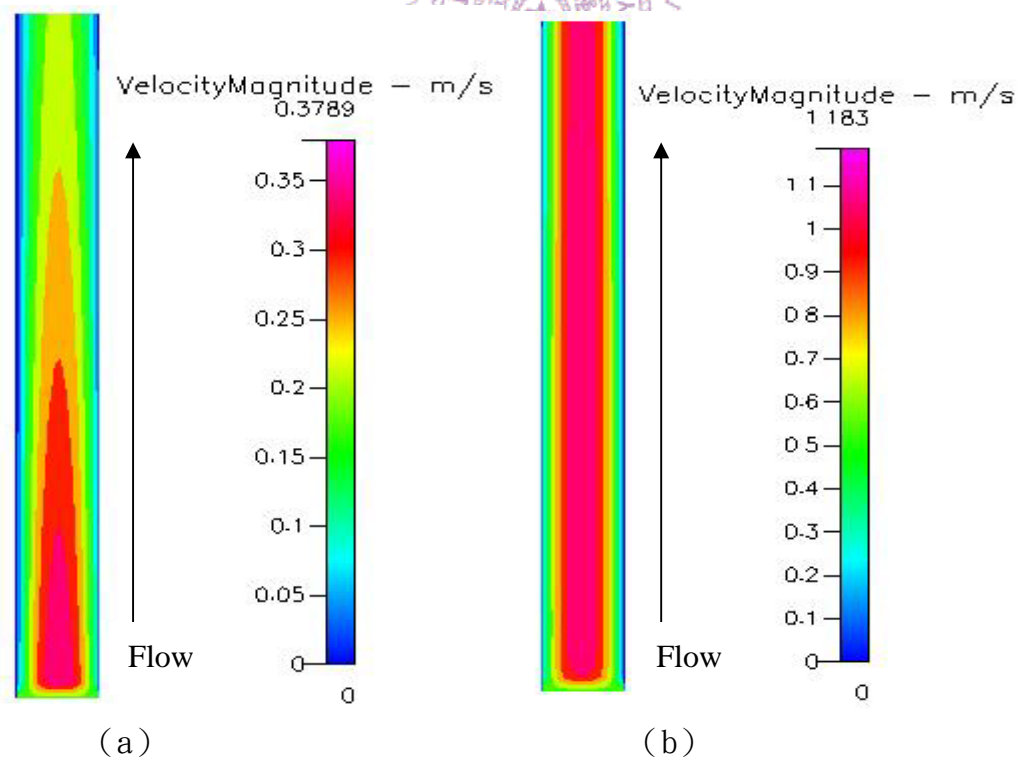


圖 4.57 流道中央 ($y=0.000581\text{m}$) (a) 陽極流道的速度分佈 (b) 陰極流道的速度分佈

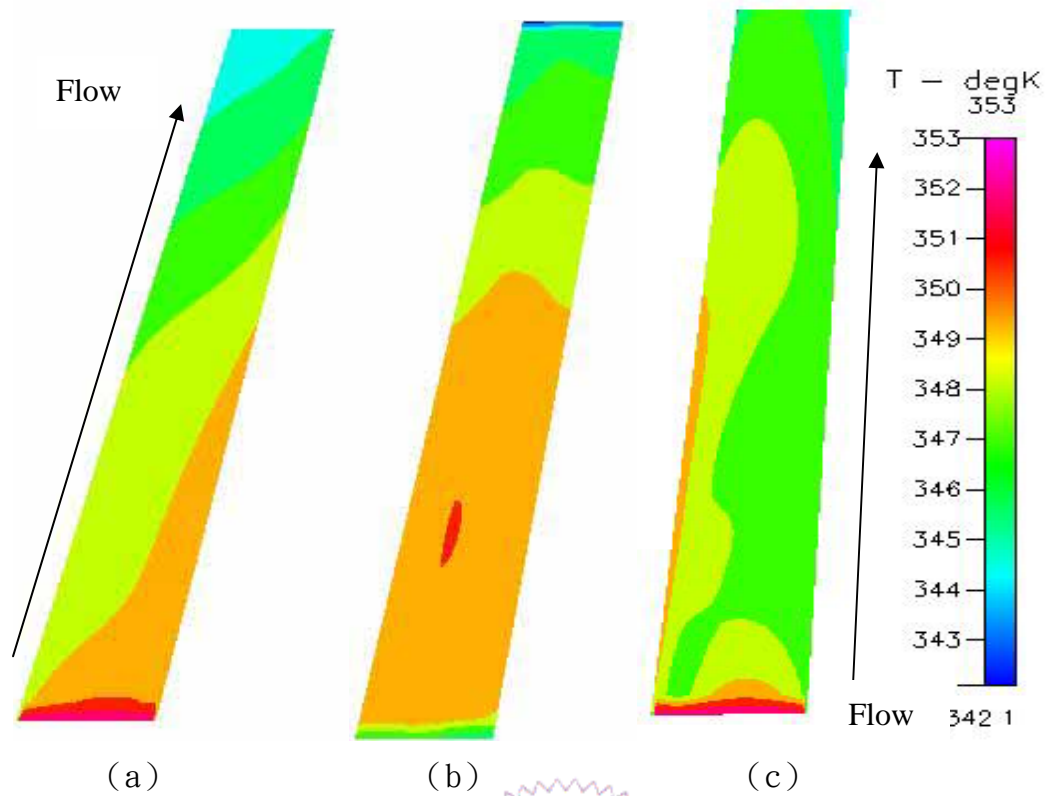


圖 4.58 (a) 陽極流道中段溫度分佈 (b) MEA 中段溫度分佈 (c) 陰極流道中段溫度分佈

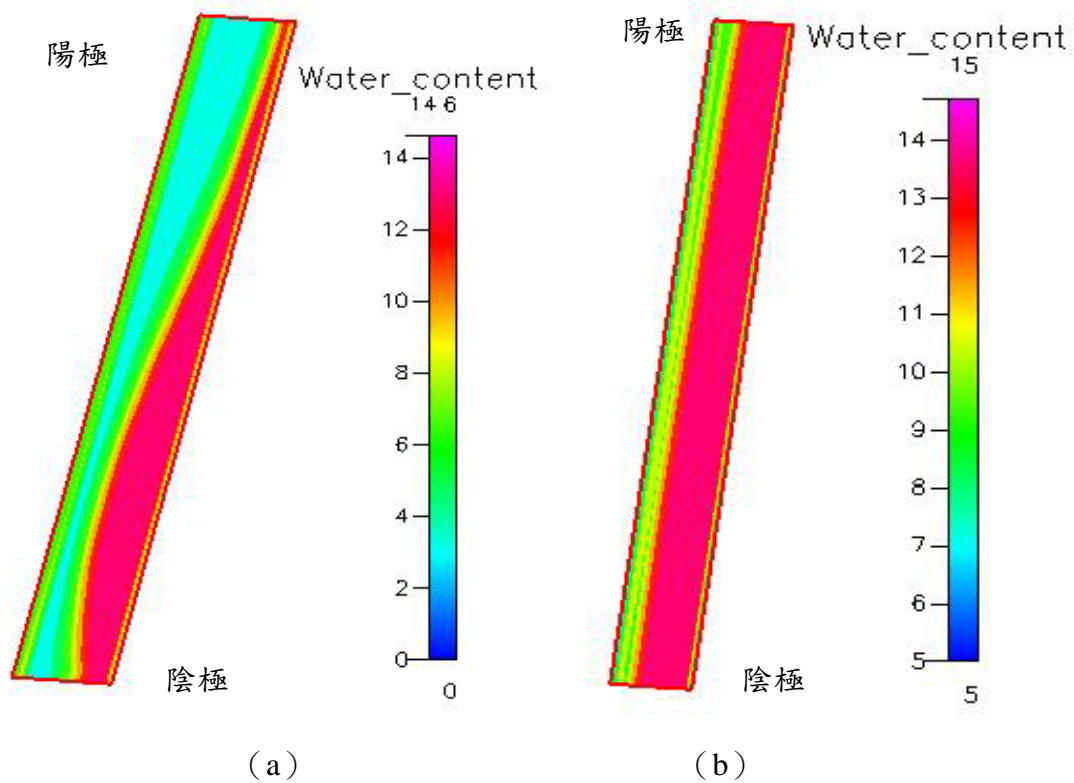


圖 4.59 $y=0.00581m$ (a) 4-2-5 模組質子交換膜中段的 water_content 分佈 (b) 4-2-2 模組質子交換膜中段的 water_content 分佈

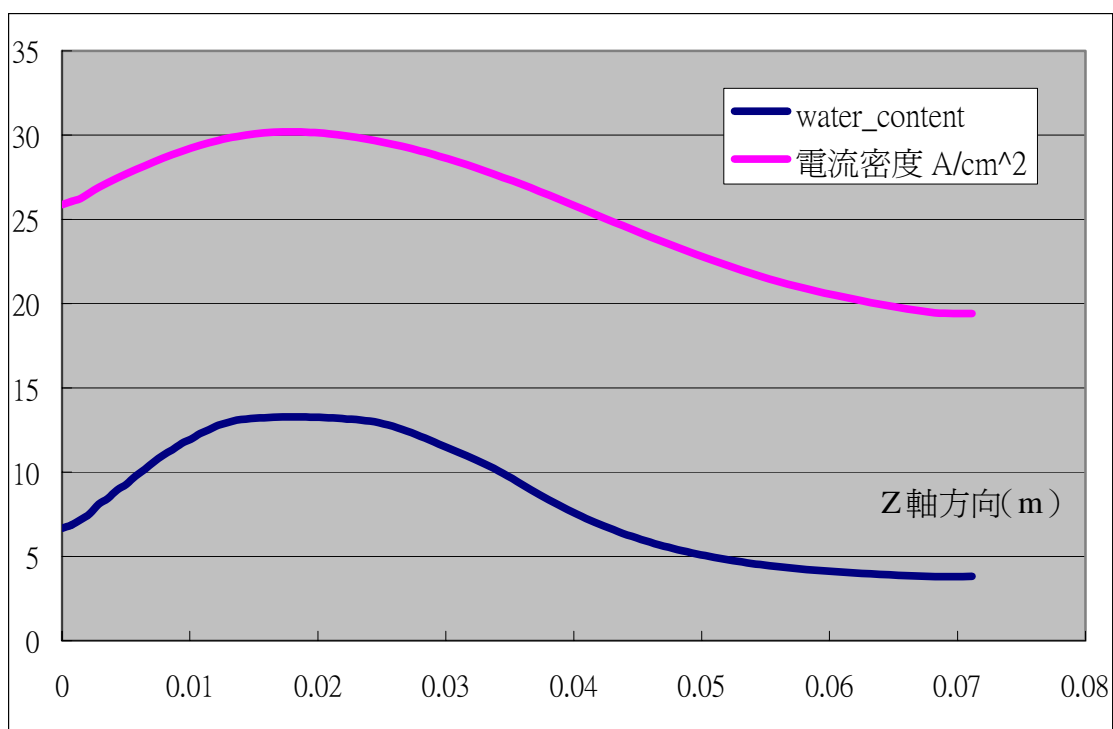


圖 4.60 Z 軸方向質子交換膜內 water_content 與集電板上電流密度關係圖

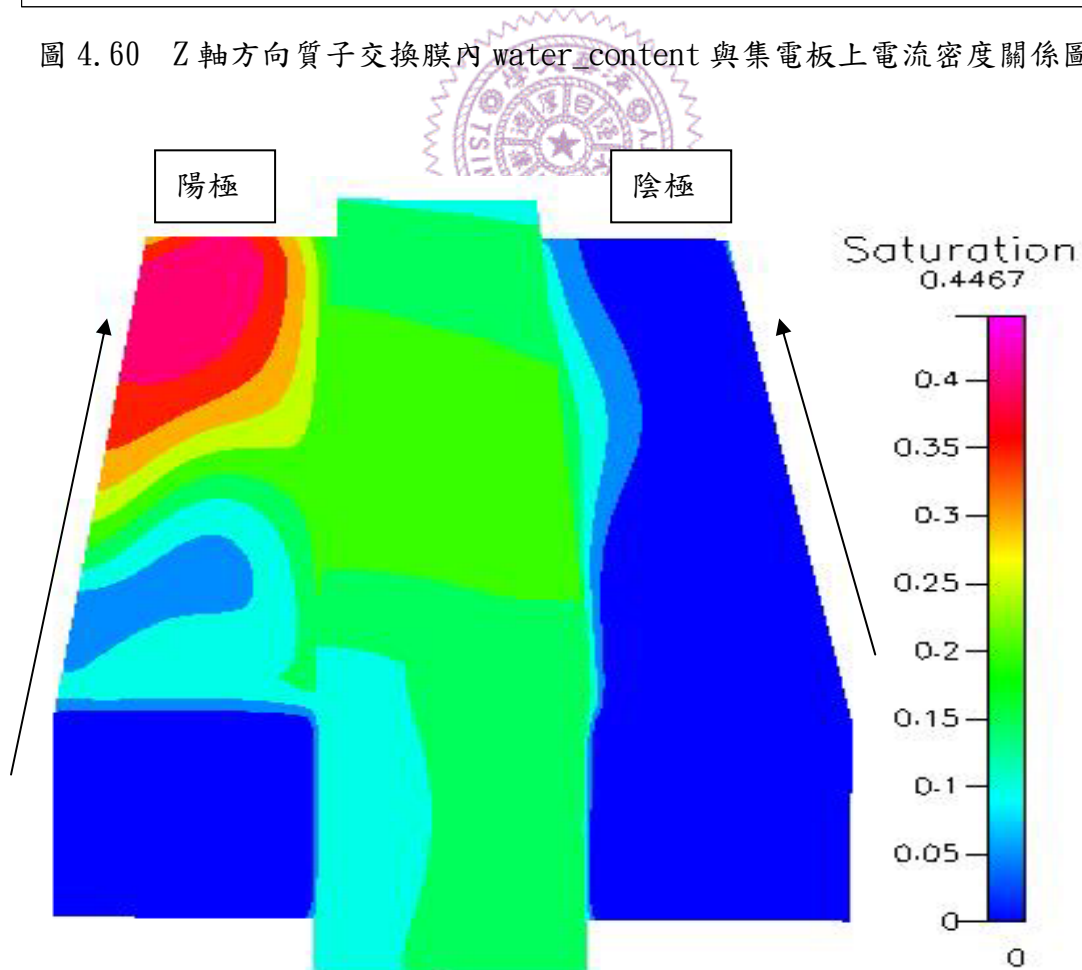


圖 4.61 電池內 saturation 的分佈

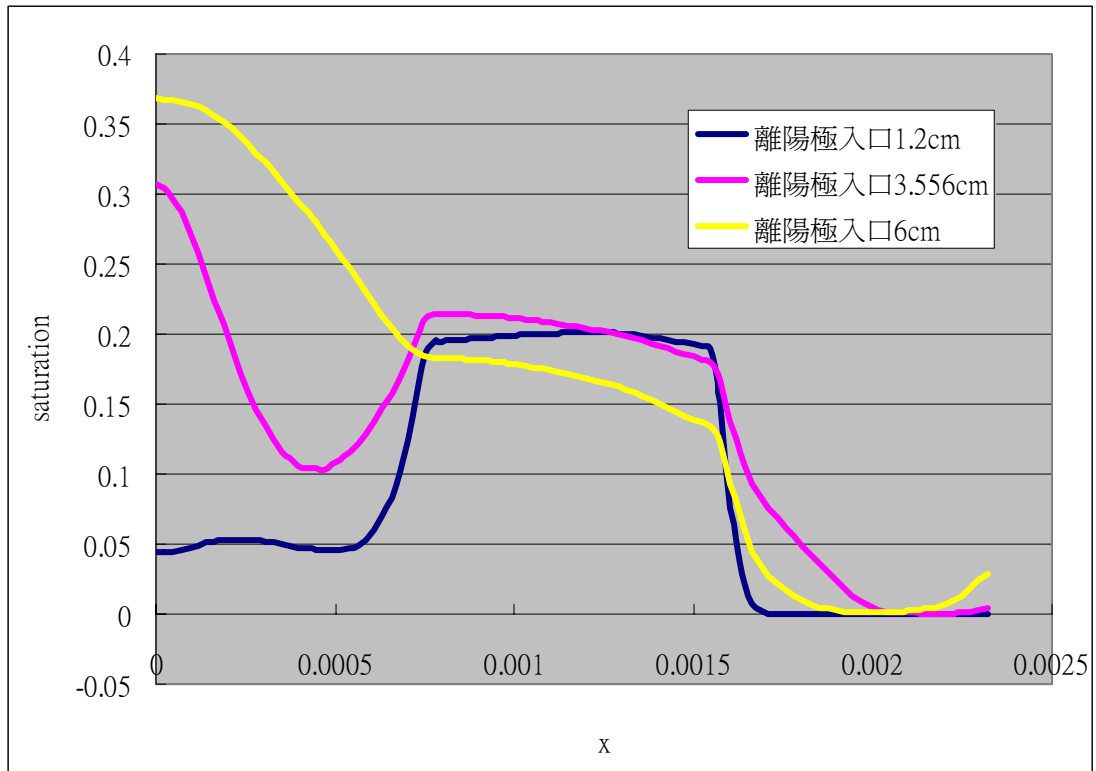


圖 4.62 $y=0.00581\text{m}$ X 軸方向 saturation 變化

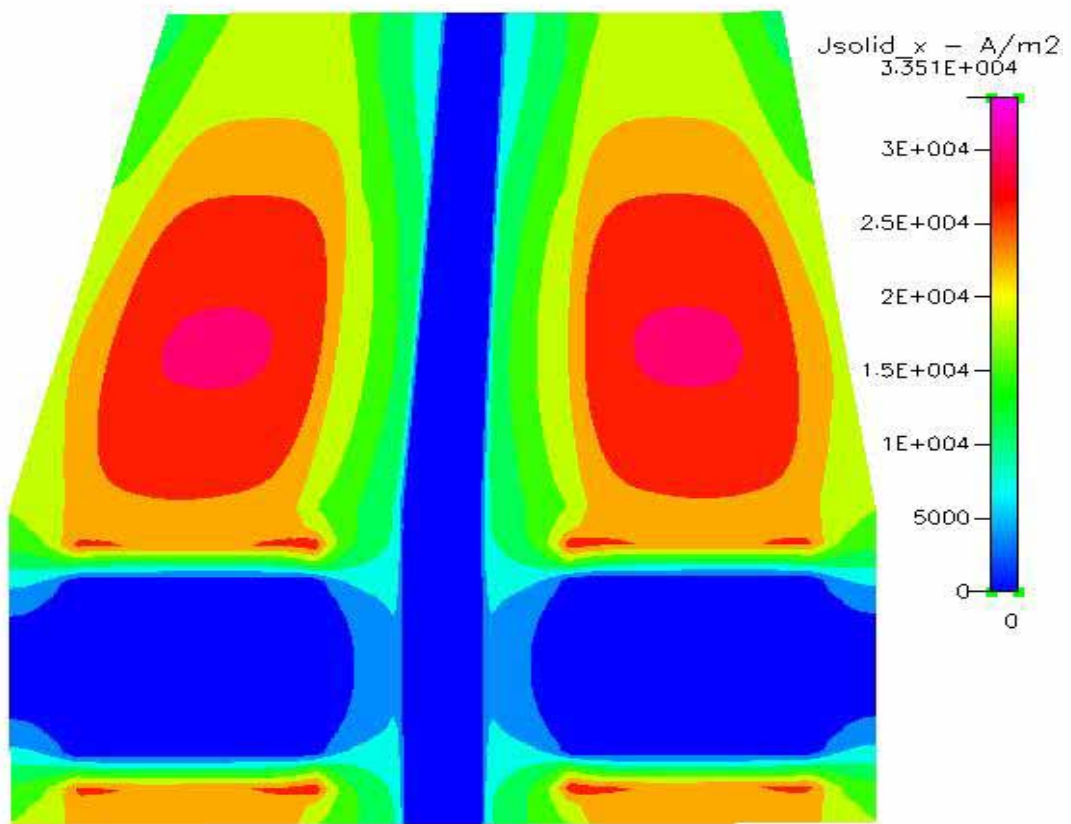


圖 4.63 電池內 X 軸方向電流密度分佈圖