

## 附錄

### 運用 CFDRC 模擬 PEMFC 使用心得

使用數值模擬的程式，最常遇到的狀況除了就是某一參數設定錯誤，導致整個結果出現錯誤外，還有就是程式無法收斂得到答案。PEMFC 為一個多相、多種流體和化學反應的模擬，輸入的參數之多，還有收斂的困難，自然是不在話下。CFDRC 為一個功能相當強大的 CFD 數值程式，除了 CFD-ACE+ 的主程式外，還附有格點建立前處理的 CFD-GEOM 程式，和數值輸出後處理的 CFD-VIEW 程式，當然也可以運用其他軟體建立格點以及數據輸出處理。

進行 PEMFC 模擬的時候，除了無法收斂的問題在程式執行中可發現外，其餘的問題大多是在進行後端處理的時候發現跑出來的結果竟然是不符合物理現象，或是不應該出現的結果。以下依照我的經驗對常見的問題提供可能的解決方法。

#### 1. 程式發散：

- I. 參數輸入過大：程式中的參數很多，有時候參考的數值單位沒有換成程式中使用單位，誤差可能在 1 個到兩個數量級以上，在程式執行的時候就可能跑出發散的結果。
- II. 格點太密或太疏：格點太密會對電腦記憶體的使用量變大，有時候數值誤差因為過密的格點而被放大，太疏的格點則可能會忽略微小區域的變化，而得不到精確的答案。
- III. 鬆弛係數的調整：relaxation factors 為數值計算中為了加速以及改善收斂速度的一個調整參數，CFD-ACE+ 中使用了 linear relaxation parameter 和 inertial relaxation parameter 兩種鬆弛係數來改善收斂的速度。其中 linear relaxation parameter 數值座落在 0~1 之間，數值越大此次收斂用的初始值表示越接近最新一次收斂得到的數值，越小表示越接近再上一次收斂得到的數值；inertial relaxation parameter 數值沒有限制範圍，數值越小表示此次收斂用的初始值越接近最新一次收斂得到的數值，反之數值越大則是越接近再上一次收斂得到的數值。程式中預設的數值可順利求解大部分的模擬，在 PEMFC 如此複雜的模擬中，往往會得到發散的結果，在歷經兩年的程式使用後，得到調整鬆弛係數的經驗如表 A-1，表 A-1 雖然提供了大概的鬆弛係數修正方向，但是不代表反向的調整不會得到比較好的收斂情形，依照每個案例的設定不同，有著各自最好的收斂鬆弛係數，若在表 A-1 得不到收斂的改善情況，則只能用 trial and error 的方式去求得自己的模擬所需的最佳鬆弛係數。

表 A-1 調整鬆弛係數的經驗

Inertial relaxation parameters	改良收斂的數值改善	目前所使用的數值
Velocities	調小	0.2→0.002
P correction	調小	0.2→0.0002
Enthalpy*	調小	0.05→5E-005
Species	無多大影響	0.05
Saturation*	調大	0.05→1000
Electric potential	調大	0.0001→1
Linear relaxation parameter	建議的數值範圍	目前使用的數值
Pressure	0.6~0.4	0.4
Density	無多大影響	1
Viscosity	0.6~0.4	0.4
Temperature	0.6~0.4	0.4

\*1. 改變 enthalpy 得到的收斂影響為所有鬆弛係數最大的，在發散的模擬中，建議第一個嘗試修改 enthalpy 的鬆弛係數，觀察收斂的改善。

\*2. 在有液態水的模擬中，saturation 鬆弛係數的影響也是極大，我使用 1000 的原因是目的得到一個很緩慢但是卻不發散的模擬。

IV. 初始條件的設定：初始條件 (initial conditions) 越靠近結果，則模擬會越快收斂且不易發散，所以在初始條件的設定中，建議使用前一個模擬出來的結果當初始條件，可以讓模擬不發散且加快。若是初建立的模擬，由於沒有前一個結果可以當作初始條件，則是建議將初始值設為常數後，程式模擬大約 1000~2000 步還未收斂的結果停止並存起，然後當同一個模擬的初始條件，並且逐漸調整鬆弛係數使加快模擬速度，重複此步驟直到程式有著明顯收斂趨勢，則可以將程式執行到收斂得到結果。

## 2. 模擬結果錯誤：

I. 沒有電流產生：(1) 在邊界條件 (BC) 設定裡，陰極和陽極的 electric 設定裡，沒有設定為 fixed potential (固定電壓)，或是陰極和陽極端的電壓差為零。(2) 在體積條件 (VC) 中，設定多孔材質性質 (porous media) 觸媒層內反應方式 (reaction type) 沒有設定為電化學 (electro chemical) 方式，或是沒有選擇半反應 (surf reaction name)。

II. 溫度場發生錯誤：(1) 程式尚未收斂，收斂的次數太短或是收斂條件不夠嚴苛使得還沒有到達收斂則程式停止，建議設定最大收斂次數最少為

10000 步以上，收斂的條件 (convergence crit.) 至少為  $1\text{E}-005$  以下，得到的收斂結果比較不會有錯誤。(2) 氣體性質參數的設定錯誤，為本論文中提到內建的質子性質參數非為實際電池所有的水合離子態，修正後應該會去除吸熱現象的產生。

III. 電流密度產生過小：(1) 單位的換算錯誤，參考的論文與自己本身模擬出來的電流密度比較，往往會因為單位的錯誤而差異過大。(2) 反應氣體進氣的增濕度不足，進氣氣體的水蒸氣含量不足，會使得模擬中讓交換膜內水分子含量 (water\_content) 過低而使得電流產生過少，修正混合氣中水蒸氣的含量達到飽和可改善此現象。(3) 反應氣體進氣量不足，在改變壓力或速度的條件下，可能會影響到反應氣體的量，藉由觀察反應氣體的質量分率變化可得知是否為此原因造成的結果。

IV. 電流的產生過大：(1) 尺寸的錯誤，一開始尺寸的設定是否為預期的，而使產生的電流在換算電流密度時，因為面積的錯誤而得到一個錯誤的電流密度。(2) 交換膜的導電度，交換膜為所有組件中，為一沒有導電能力的組件，若交換膜的導電性設定為導體，會使得模擬出來的電流並非完全為化學反應所產生的電流，而得到一個過高的電流密度。

V. 液態水分佈線性化：理論上流道和多孔性材質的傳導液態水的能力不同，程式設定中有時候會疏忽這一點，使得多孔材質和流道中的液態水分佈呈現線性，在流道的體積條件 (VC) 中，化學選項 (chemical property) 裡表面張力係數 (capillary diffusivity) 中建議輸入  $1\text{E}-010\text{m}^2/\text{s}$  即可。

VI. 其他：模擬中產生錯誤不能執行或是其他結果的錯誤，建議以以下的順序去檢查錯誤。(1) out 檔，out 檔中會提供大部分模擬在使用中的參數和錯誤訊息，藉由 out 檔中的訊息去修正輸入的參數錯誤。(2) 逐步比對，依照輸入參數的順序一個一個做地毯式的比對，找出輸入的錯誤。(3) 程式未達收斂，除了溫度場最常因為尚未收斂而有錯誤外，其他的分佈也可能因為尚未收斂而有錯誤。(4) 結果是正確的，只是你在分析上沒有歸納所有因素而認為結果是錯誤的，多跟老師討論或是同學研究吧。(5) 寄信與 ESI-CFDRC 公司，提問此問題。(6) 自己寫個程式，運用 CFD-ACE+ 提供的 user sub 輸入，解決問題。

\* 程式不能執行，可重灌程式或是因為檔名過長，程式不能受理。