

國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

平板式固態氧化物燃料電池雙極板流道設計對發電

性能的影響分析

Numerical Investigation of Power Generation of a

Single Planar Solid Oxide Fuel Cell

研究生：魏世昕

指導教授：吳宗信 博士

二零一二年七月

平板式固態氧化物燃料電池雙極板流道設計對發電性能的影響分析

**Numerical Investigation of Power Generation of a Single Planar Solid  
Oxide Fuel Cell**

研究生：魏世昕

Student: S. H. Wei

指導教授：吳宗信 博士

Adviser: Dr. J. S. Wu

國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

A Thesis

Submitted to Department of Mechanical Engineering

College of Engineering

National Chiao Tung University

In Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master of Science

In

Mechanical Engineering

December 2011

Hsinchu, Taiwan

二零一二年七月

# 平板式固態氧化物燃料電池雙極板流道設計對發電性能的影響分析

學生：魏世昕

指導教授：吳宗信 博士

國立交通大學機械工程學系

## 摘要

燃料電池是一種高效率且乾淨無污染的發電方式。而固態氧化物燃料電池(SOFC)屬於高溫型燃料電池(500-1000°C)，配合熱電共生系統(CHP)，其發電效率的理論值更可以達到 90%以上，是相當有競爭力的能源技術之一。

本研究在探討平板式固態氧化物燃料電池雙極板的流道設計對單電池整體效率以及燃料使用率的影響。並藉由數值分析的方式模擬來改善設計，以補足實驗所無法觀察到的現象。我們利用商用計算流體力學(CFD)程式”Ansys-Fluent”中的 SOFC 模組進行單電池模擬。測試電池在各種不同的氣體流道設計時，對電池運作的整體與細部的變化和影響。其中包含流場分析，溫度分析，電化學分析。並設計出最適合的電池堆方案，使電池運作時的效率能夠增加，提高燃料使用率，降低系統成本。

結果顯示，當參考 2011 年 William J. Sembler 等人[1]研究的材料參數來分析時，使用以雙極板對角線為流場方向的新型設計(Type C)將可比傳統的逆向流流場設計(Type A)增加 12%的電池效率與 14.6%的燃料使用率。其設計更能減少材料成本與電池堆的系統複雜度。

# Numerical Investigation of Power Generation of a Single Planar Solid Oxide Fuel Cell

Student: S. H. Wei

Advisor: Dr. J. S. Wu

Department of Mechanical Engineering

National Chiao Tung University

## Abstract

Fuel cells have demonstrated very high efficiency and are also much less harmful impact to the environment in general. Among these, solid oxide fuel cell (SOFC) has been considered as one of the promising energy technologies due to its high efficiency (up to 90%) that can be achieved by hybridizing with combined heat and power (CHP) system because of its operation at high temperature (500-1000 °C)

In this thesis, we are interested in exploring the effect on efficiency and fuel utilization by changing flow channel design of the planar solid oxide fuel cell stack. Through numerical investigation for improving the design, we can obtain several important operating parameters which can not be obtained through experiments. Therefore, we employ a commercial Computational Fluid Dynamics (CFD) code, named Ansys Fluent, by using its SOFC module in the current study. These studies include flow analysis, thermal analysis, and electrochemical analysis.

The results show that a new design, named Type C, in which the gas flow is directly across the interconnects diagonally, 12% and 14.6% of power density and fuel consumption, respectively, are found as compared to the counter flow design presented in Sembler *et al.* [1].



## 誌謝

時光飛逝，轉眼間兩年的碩士生涯也即將結束。撰寫論文時過去研究時光的點點滴滴也都歷歷在目，即使大家即將各奔東西這兩年的相處時光也絕不會忘記。

在這兩年中，最需要感謝的人就是我的導師吳宗信老師。從大學的專題生至今，每次的錯誤都有老師細心耐心的指導，讓我學習到許多以前大學所學習不到的東西。不僅僅是課業上的幫助，也教導我們對人生的態度，更讓我們體會到對科學研究的熱愛，讓我們能有勇氣去追尋自己的夢想。也要感謝一起在同一個實驗室打拼的豪哥、邱哥、昆哥、Kubee、雅茹學姐、孟樺學姐、蘇學長、kevin 哥、宜偉哥以及其他各位學長、學姊和已經畢業的綠豆、柏村、曄能、煌欽，還有後來進博班總是忙到不在實驗室的冠榮。你們的經驗與指導讓我總是能在我最困惑的時候給我最大的幫助。還要感謝我的好同學志東、康閔、育安和志華，跟你們一起討論一起研究一起歡樂真的是我人生中最難忘的經驗。拋棄我們先進入博班的志東也要好好加油。以及我最親愛的學弟學妹們，哲偉、國淳、駿平，時常請你們幫我打雜還要幫有點迷糊的我找東西真的是太謝謝你們了，當然還有你們在研究上的幫助啦。再來是即將進入我們實驗室大家庭的亭浩、聖毅、清榕，雖然你們才剛進來就要被我使喚，還是要感謝你們的幫忙，也祝福你們未來碩班能夠順利。另外還有老師的助理，王姐和惠云，時常請你們處理麻煩的計畫和帳管的事情真的很謝謝你們。

最後是要感謝周遭所有幫助過我的人，不管是我的家人，系上或非系上的同學們，還有各個老師們，社團的學弟妹們。有你們的幫助和指引才能有現在的我，很多事情只靠我自己是無法成功的，真的很感謝有大家的幫助。在這邊祝各位都能順順利利，心想事成。

2012 年 7 月 26 日

# 目錄

摘要.....	i
Abstract .....	ii
誌謝.....	iii
目錄.....	iv
圖目錄.....	vii
表目錄.....	xiii
術語.....	xv
第一章 緒論 .....	1
1.1 背景 .....	1
1.2 研究動機.....	3
1.3 研究目的.....	4
第二章 燃料電池簡介與文獻回顧.....	5
2.1 燃料電池簡介.....	5
2.1.1 燃料電池的運作原理.....	7
2.1.2 燃料電池構造 .....	7
2.1.3 燃料電池的理論效率.....	8
2.2 固態氧化物燃料電池簡介.....	9

2.2.1 固態氧化物燃料的電解質種類 .....	10
2.2.2 固態氧化物燃料電池結構 .....	10
2.2.3 固態氧化物燃料電池操作溫度 .....	11
2.2.4 固態氧化物燃料電池運作方式 .....	12
2.3 雙反應室平板式固態氧化物燃料電池堆設計與模擬 .....	16
2.3.1 雙極板設計模擬 .....	17
2.3.2 雙極板前後流道設計模擬 .....	19
2.3.3 電池堆設計模擬 .....	20
第三章 數值方法 .....	23
3.1 統御方程式 .....	23
3.2 數值方法 .....	26
3.3 材料參數設定 .....	27
3.4 邊界條件設定 .....	27
3.6 操作程序 .....	28
第四章 結果與討論 .....	30
4.1 參數設定與數據比對 .....	30
4.1.1 材料參數與邊界條件設定 .....	30
4.1.2 幾何尺寸與網格設定 .....	32

4.1.3 數據比對結果 .....	34
4.2 直流道設計的改善與研究 .....	36
4.2.1 材料參數與邊界條件 .....	36
4.2.2 流道幾何尺寸影響分析 .....	37
4.2.3 針對空氣側流道影響分析 .....	46
4.3 單電池前後流道設計改善與研究 .....	50
4.3.1 前後流道設計與網格測試 .....	50
4.3.2 前後流道設計與流場均勻性影響分析 .....	56
4.3.3 對角線流場設計影響分析 .....	61
第六章 結論與未來展望 .....	68
6.1 結論 .....	68
6.2 未來工作 .....	69
參考文獻 .....	70
附錄 .....	73
附錄 A .....	73
附錄 B .....	75

## 圖目錄

圖(1- 1) 1980 年至 2011 年，全球主要溫室氣體趨勢圖—二氧化碳、 $N_2O$ 、甲烷、 CFC-11、CFC-12 [3] .....	2
圖(1- 2) 2009 年，台灣溫室氣體排放結構[4] .....	2
圖(2- 1) 固態氧化物燃料電池運作示意圖[8] .....	9
圖(2- 2) 固態氧化燃料電池主要結構分類[9] .....	11
圖(2- 3) 不同操作溫度類型的固態氧化物燃料電池優缺點比較，(+)表示為優點， (-)表示為缺點，(O)為包含(+)(-)的展現狀態[10] .....	12
圖(2- 4) 固態氧化燃料電池運作方式分類[11] .....	12
圖(2- 5) 單反應室平板固態氧化物燃料電池。A：陽極；C：陰極(需有高選擇 性觸媒)；SE：緻密的或多孔性電解質[13] .....	14
圖(2- 6) 混合反應式固態氧化物燃料電池堆(MR-SOFC)設計[13] .....	15
圖(2- 7) 各種形式的平板式固態氧化物燃料電池電流收集板設計[21] .....	18
圖(2- 8) 交錯流(Cross flow)、同向流(Co-flow)、逆向流(Counter flow)的溫度分 佈與電流密度分佈比較[25] .....	18
圖(2- 9) 含導流板的平板式固態氧化物燃料電池電流收集板設計[29] .....	20
圖(2- 10) 美國 Versa Power Systems 公司所研發的電池堆模組系列[32] .....	21

圖(2- 11) 日本 NTT Energy and Environment 公司所設計的圓形燃料電池堆組設計[33].....	22
圖(2- 12) 四種電池堆入口流場分佈模式[31] .....	22
圖(3- 1) 數值分析操作程序圖 .....	28
圖(3- 2) Fluent and SOFC Module[34] .....	29
圖(4- 1) 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)陽極 (d)陰極 (e)陰極流場 (f)陰極極板 .....	33
圖(4- 2) 單電池模型網格繪製 .....	34
圖(4- 3) 數據比對：I-V 曲線 .....	35
圖(4- 4) 數據比對：溫度曲線 .....	35
圖(4- 5) 單電池邊界條件示意圖 .....	36
圖(4- 6) 燃料側流道高度 $h_a$ ；燃料側流道寬度 $w_a$ ；雙極板陽極接觸寬度 $c_a$ ；空氣側流道高度 $h_c$ ；空氣側流道寬度 $w_c$ ；雙極板陰極接觸寬度 $c_c$ .....	37
圖(4- 7) 流道幾何尺寸設定示意圖：(a) $h_a=0.5$ mm, (b) $h_a=0.25$ mm, (c) $h_c=0.5$ mm, .....	38
圖(4- 8) 燃料側流道高度影響：I-V 曲線圖 .....	39



圖(4- 9) 燃料側流道高度影響：氫氣分佈圖( $H_2$ mole fraction)，0.8V 側視觀察	40
圖(4- 10) 空氣側流道高度影響：I-V 曲線圖	41
圖(4- 11) 空氣側流道高度影響：氧氣分佈圖( $O_2$ mole fraction)，0.8V 側視觀察	42
圖(4- 12) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：I-V 曲線圖	43
圖(4- 13) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電流密度分佈 (Current density, $A/m^2$ )，0.6V	44
圖(4- 14) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電解質表面氧氣分佈( $O_2$ mole fraction)，0.6V	44
圖(4- 15) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電解質表面氫氣分佈( $H_2$ mole fraction)，0.8V	45
圖(4- 16) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：切面氫氣分佈( $H_2$ mole fraction)，0.8V	45
圖(4- 17) 空氣側流道寬度與雙極板接觸寬度結構示意圖，紅色圈圈示意氣體難以擴散到的位置	46
圖(4- 18) 針對空氣側流道影響分析模型示意圖	47
圖(4- 19) 針對空氣側流道寬度影響：I-V 曲線圖	47
圖(4- 20) 針對空氣側流道影響：電流密度(Current density, $A/m^2$ )，0.65V	48



圖(4- 21) 針對空氣側流道寬度影響：電解質氫氣分佈( $H_2$ mole fraction)，0.65V	49
圖(4- 22) 針對空氣側流道寬度影響：切面氫氣分佈( $H_2$ mole fraction)，0.65V	49
圖(4- 23) 空氣側多孔性材料電流收集板流道設計示意圖	51
圖(4- 24) 燃料側電流收集板流道設計示意圖	52
圖(4- 25) 六角形電池堆設計示意圖	52
圖(4- 26) 單電池組結構剖面示意圖	52
圖(4- 27) 六角形多電池堆組合示意圖	53
圖(4- 28) 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)單電池片 (d)陰極流場 (e)陰極極板 (f)單電池組	53
圖(4- 29) 直線流道方向網格測試，單電池模型總網格數由 609,150 減少為 320,500 個	54
圖(4- 30) 直線流道方向網格測試，I-V 曲線	55
圖(4- 31) 前後流道網格測試，單電池模型總網格數由 782,388 減少為 433,262 個	55
圖(4- 32) 前後流道網格測試，I-V 曲線	56
圖(4- 33) 六角形多電池堆組合示意圖	57

圖(4- 34) 流量分佈選擇面示意圖 .....	57
圖(4- 35) Type A 與 Type B 流量分佈圖 .....	58
圖(4- 36) Type A 與 Type B 發電效率比較：I-V 曲線圖 .....	59
圖(4- 37) Type A 與 Type B 電流密度分佈比較(Current density, A/m <sup>2</sup> )，0.65V. ....	59
圖(4- 38) Type A 與 Type B 燃料側流道氫氣含量分佈比較(H <sub>2</sub> mole fraction)， 0.65V .....	60
圖(4- 39) Type A 與 Type B 空氣側陰極氧氣含量分佈比較(O <sub>2</sub> mole fraction)， 0.65V .....	60
圖(4- 40) 六角形與正方形燃料側雙極板設計示意圖 .....	62
圖(4- 41) 正方形電池堆設計示意圖 .....	62
圖(4- 42) Type C 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)單電池片 (d)陰極流 場 (e)陰極極板 (f)單電池組.....	63
圖(4- 43) Type A 與 Type C 發電效率比較：I-V 曲線圖 .....	65
圖(4- 44) Type A 與 Type C 電流密度分佈(Current density, A/m <sup>2</sup> )，0.65V .....	66
圖(4- 45) Type A 與 Type C 燃料側流場氫氣含量分佈(H <sub>2</sub> mole fraction)，0.65V .....	66
圖(4- 46) Type A 與 Type C 陰極氧氣含量分佈(O <sub>2</sub> mole fraction)，0.65V .....	66
圖(4- 47) Type A 與 Type C 壓降分佈(Pressure distribution, pa)，0.65V .....	67

圖(4- 48) Type A 與 Type C 溫度分佈(Temperature distribution, K) , 0.65V ..... 67

圖(A- 1) 電池堆不同氣體流道入口直徑切面壓降分佈比較..... 74

圖(B- 1) 3 電池組電池堆模型 ..... 75

圖(B- 2) 單電池與 3 電池組電池堆 I-V 曲線比較..... 76

圖(B- 3) 3 電池組電池堆氫氣截面分佈( $H_2$  mole fraction) , 1.95V..... 76

圖(6- 1) 空氣側流道加寬示意圖 ..... 69

圖(6- 2) 縮短 Type C 設計進出口之間的距離示意圖 ..... 69



## 表目錄

表(2- 1) 各種燃料電池的性質與應用[5-6] .....	6
表(2- 2) 各種燃料電池的優缺點[7] .....	6
表(2- 3) 雙反應室固態氧化物燃料電池(DC-SOFC)的優點與挑戰[12] .....	13
表(2- 4) 單反應室固態氧化物燃料電池(SC-SOFC)的優點與挑戰[12] .....	15
表(2- 5) 直接火焰燃燒燃料電池(DFFC)的優點與挑戰[11] .....	16
表(2- 6) 交錯流(Cross flow)、同向流(Co-flow)、逆向流(Counter flow)的最大溫度差與電流密度差比較 .....	19
表(4- 1) 材料參數 .....	31
表(4- 2) 邊界條件設定 .....	32
表(4- 3) 分析基準值參數設定 .....	37
表(4- 4) 流道幾何尺寸影響分析參數設定 .....	38
表(4- 5) 燃料側流道高度影響：最大能量密度(max power density) .....	40
表(4- 6) 空氣側流道高度影響：最大能量密度(max power density) .....	41
表(4- 7) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：最大能量密度(max power density) .....	43
表(4- 8) 針對空氣側流道影響分析參數設定 .....	46

表(4- 9) 針對空氣側流道寬度影響：最大能量密度(max power density) ..... 48

表(4- 10) Type A 與 Type C 比較：最大能量密度(max power density)，0.65V. 65

表(4- 11) Type A 與 Type C 比較：燃料使用率 (Fuel utilization)，0.65V..... 65

表(A- 1) 電池堆不同氣體入口直徑於各單電池組流量分佈 ..... 73

表(B- 1) 單電池與 3 電池組電池堆最大能量密度(max power density)比較 ..... 76



## 術語

$H$ 、 $H^+$ 、 $H_2$  氫原子、氫離子、氫分子

$O$ 、 $O^{2-}$ 、 $O_2$  氧原子、氧離子、氧分子

$OH^-$  氫氧根離子

$H_2O$  水

$e^-$  電子

$G$  吉布士自由能

$U$  內能

$T$  溫度(K)

$S$  熵

$P$  氣體壓力

$V$  氣體體積、電壓

$H$  焓

$R$  氣體常數

$F$  法拉第常數

$n$ 、 $Z$  離子帶電量

$E$  化學電位

$\rho$  密度



$u$	速度
$t$	時間
$h_a$	陽極側流道高度
$h_c$	陰極側流道高度
$w_a$	陽極側流道寬度
$w_c$	陰極側流道寬度
$c_a$	陽極側電流收集板與陽極接觸寬度
$c_c$	陰極側電流收集板與陰極接觸寬度





# 第一章 緒論

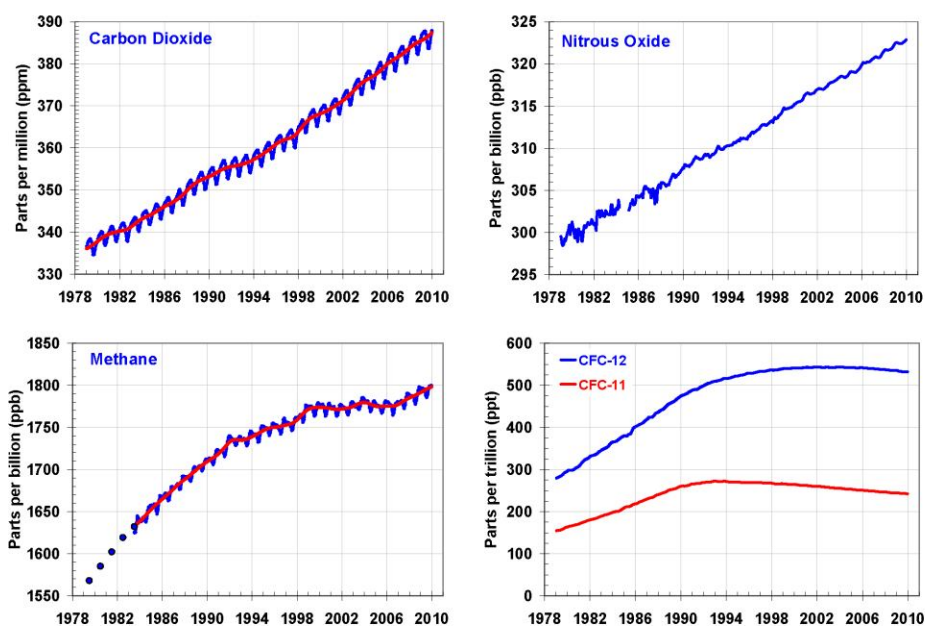
## 1.1 背景

陽光、空氣、水，生命構成的三個基本要素，地球上的各個生物都靠著這三項元素來為生，不管是直接的或間接的。但隨著人類文明的發展，我們正破壞著這賴以為生的三元素，水汙染、空氣汙染、臭氧層的破壞，甚至無止境的燃燒地球孕育了數千萬年的石化燃料。石化燃料日漸枯竭、溫室效應、海平面上升接踵而來，氣候變遷正是目前我們所面對的問題。我們的地球正在發燒。能源、環境、水資源、糧食，為了讓人類和全球能永續發展，這幾項都是缺一不可的。其重要性更以能源問題排第一順位。

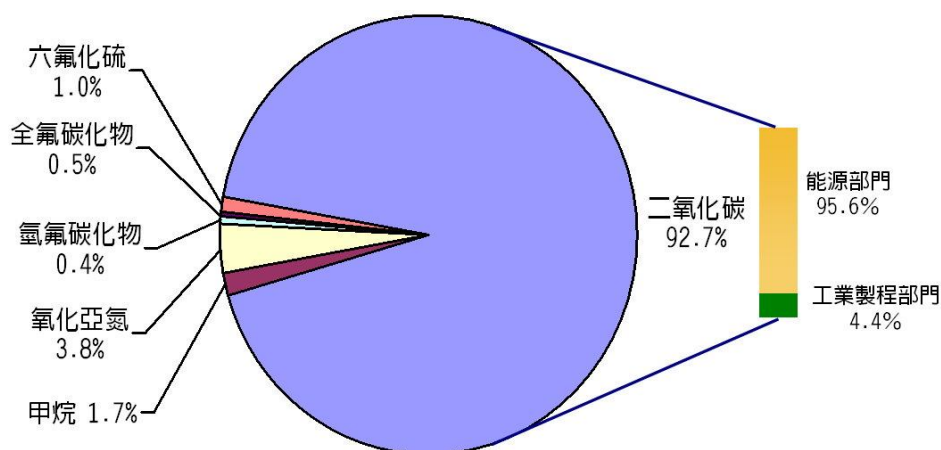
石化燃料即將枯竭，好幾次的石油危機大大影響了世界經濟的發展，溫室效應、氣候變遷也都與人類使用石化燃料脫不了關係。據估計，每年火山爆發釋放約 130-230 萬公噸二氧化碳到大氣中，但人類排放 CO<sub>2</sub> 超過火山爆發排放量 130 倍以上，一年約 270 億公噸。97 年京都議定書的簽訂，09 年的哥本哈根會議，人們正試圖解決日漸嚴重的溫室效應所產生的氣候變遷等問題，甚至哥本哈根會議時更將 CO<sub>2</sub> 列為有毒物質。不管其方法和結論到底是不是正確和公平，但大家一致的認同和目標都是“減少溫室氣體和碳排放量”。火力發電、交通運輸、工業發展，都是主要的碳排放來源。根據台灣行政院環保署統計，台灣工業部門的碳排放量佔了全台灣 50% 以上，整體來說又以能源的使用所產生的碳排放量為最大宗，占了 9 成以上。最主要原因便是因為台灣的發電系統火力和燃氣發電佔了 7 成以上，使得大家用電的同時也都在大量製造二氧化碳。而若以我們台灣每個人在日常生活作為中所產生之 CO<sub>2</sub> 排放量來說，每戶家庭每年 CO<sub>2</sub> 排放量約 7.82 公噸，這當中以交通運具排放的 CO<sub>2</sub> 比例最大（58%），其次為電力（33%）及瓦

斯使用（9%），這些都與能源有關。

台灣 99% 的能源都仰賴進口，包括石油、煤、天然氣、鈾燃料等等。但核能的安全性問題，石化燃料的枯竭導致進口的能源越來越昂貴。根據經濟部能源局統計，99 年平均每人負擔能源進口值由 98 年的新台幣 54,655 元，增加為為 69,317 元[2]，再加上即將徵收的碳稅，自主性能源的研發與新能源的使用是勢在必行。



圖(1-1) 1980 年至 2011 年，全球主要溫室氣體趨勢圖—二氧化碳、 $N_2O$ 、甲烷、CFC-11、CFC-12 [3]



圖(1-2) 2009 年，台灣溫室氣體排放結構[4]

## 1.2 研究動機

隨著地球暖化氣候變遷越來越明顯，科學家們紛紛提出了各種可能性與解決方案，能源議題更受到非常大的關注。不管是核能的安全性解決方案，再生能源，使用替代性能源，智慧電網。這都是為了要有能夠永續發展、乾淨沒有碳排放的能源並減少能源浪費。這當中氫能更是眾多發展項目極具發展潛力的能源之一。

與其他化石燃料類似，氫能屬二次能源。不同的地方在氫能是乾淨的能源，其燃料使用的效率、方便性、穩定性都比其他能源傑出許多。再加上它能量密度高，發電後的副產品水更能夠在其他方面多加利用。氫氣生產上也可配合其他再生能源或生質能等等來製造。雖然氫有容易爆炸的缺點，但就氫所具有的各個特性而論，多數專家相信氫是比現今所使用的其他燃料還要更安全的[5]。

而燃料電池的使用更是將氫能轉換為電能最有效率的其中一種方法。究其原因，是因為能量的轉換只有一個路徑，化學能轉電能。而固態氧化物燃料電池(SOFC)其高溫的特性，除了氫氣甚至天然氣、一氧化碳等碳氫化合物都可當燃料來發電，增加了 SOFC 使用的彈性。若與其他發電方式比較，更有著高電能轉換效率的潛能，再配合熱電共生系統的話，其發電效率甚至可以達到 90%以上。配合電池堆的數量，其發展性，大至一個大型發電廠，小至一個家庭用的小型發電站，甚至汽車皆可拿來使用。這與智慧電網概念下的分散式發電系統相符合。對目前化石能源逐漸枯竭，未來能源的開發使用，更有其接替的作用，使它成為目前極具發展性的燃料電池之一。

目前世界各國的研究機構和大型公司皆將此列為重點研發項目，如美國 Bloom Energy、Delphi、GE，德國 FZJ，日本 Mitsubishi、Tokyo Gas，澳大利亞 CFCL...等。台灣則有核能研究所及其他多所大學在做相關研究，但只有少數在做系統整合的研究，

而我們的目標就是要研發出 1KW 級以上的小型 SOFC 燃料電池系統。

### 1.3 研究目的

SOFC 的高溫操作環境衍生出了許多問題，不僅僅是在結構和材料上，實驗的測量和準確性都有其難度。而在設計 SOFC 系統時，電池堆雙極板的設計佔了舉足輕重的地位。其設計影響著燃料電池氣體流場的分佈方式與發電效率，在燃料電池加溫運作過程中更對電池堆的溫度分佈和結構有不小的影響。為瞭解 SOFC 燃料電池在高溫中通入氣體反應時的狀況，數值分析的研究有其必要性，以輔助實驗所無法觀測的現象，並藉此分析改善設計，提高電池整體效率與燃料使用率。這其中包括：(1)電池片的效能評估。(2)溫度分佈分析。(3)流場、流速與壓力分佈分析。(4)陰陽極氣體成分濃度計算分析。(5)電池堆性能運算。

搜尋電池堆設計的相關文獻後發現，目前並沒有一個結構簡單且有效增加效率與燃料使用率的設計，也未有針對流道幾何尺寸影響的相關研究。本研究即是針對雙極板的流道設計，用數值分析的方式，觀察其設計對平板式固態氧化物燃料電池運作的影響。包含改變流道的寬度、高度，雙極板與電池接觸寬度等等，以確認其改善的重點方向，再對此進行雙極板流道與電池堆系統設計並做模擬分析，以期能以最簡單的方式提高電池發電效率，增加燃料使用率，降低電池堆系統製作成本。



## 第二章 燃料電池簡介與文獻回顧

### 2.1 燃料電池簡介

燃料電池(Fuel cell)，顧名思義即是一種使用燃料來進行發電的裝置。與一般的發電機不同，燃料電池的發電方式是直接將燃料的化學能轉變為電能，也因此可以有很高的發電效率，配合熱回收、汽電共生的技術，其效率甚至可以到達 90%。比起現今使用燃料燃燒加熱水產生水蒸氣再來推動渦輪的發電方式，效率整整提高了 50% 以上。而燃料電池的燃料選擇性也非常高，包括氫氣、甲醇、乙醇、天然氣，甚至汽油都可以作為燃料。發電過程中只有大約 50 dB 幾乎無噪音。其發電後產生的水更是完全無害甚至有利的產物。因為它的特性，太空中除了使用太陽能板，還使用了燃料電池作發電方式。現在燃料電池車、分散式發電站的研發也正在如火如荼的進行中，是現在非常有發展潛力的新能源技術[5-6]。

根據目前所發展的燃料電池，主要分為以下六種類型：

- (1) 鹼性燃料電池 (Alkaline Fuel Cell, AFC)
- (2) 質子交換膜燃料電池 (Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)
- (3) 直接甲醇燃料電池 (Direct Methanol Fuel Cell, DMFC)
- (4) 磷酸燃料電池 (Phosphoric Acid Fuel Cell, PAFC)
- (5) 熔融碳酸鹽燃料電池 (Molten Carbonate Fuel Cell, MCFC)
- (6) 固態氧化物燃料電池 (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)

其詳細的性質與應用以及優缺點如表(2-1)、表(2-2)所示[5-7]。

電池種類	AFC	PEMFC	DMFC	PAFC	MCFC	SOFC
電解質	KOH	質子交換樹脂膜	質子交換樹脂膜	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	鈉或鎂碳酸鹽	固體氧化電解質 (yttria, zirconia)
傳輸離子	OH <sup>-</sup>	H <sup>+</sup>	H <sup>+</sup>	H <sup>+</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	O <sup>2-</sup>
操作溫度	60~120℃	50-100℃	50-80℃	~220℃	~650℃	~1000℃
燃料	純氫	純氫	甲醇	純氫	氫氣、天然氣、或其他碳氫化合物	氫氣、天然氣、或其他碳氫化合物
發電效率	35-55%	35-45%	30%	40%	>50%	>50%
發電量與應用	<5kW, 軍用、太空	5-250kW, 汽車、攜帶用	mW-kW, 3C 產品、攜帶用	200kW, 商用、發電業	200kW-MW, 商用、發電業	kW-MW, 商用、家用、發電業

表(2-1) 各種燃料電池的性質與應用[5-6]

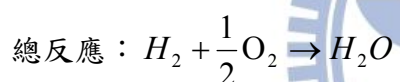
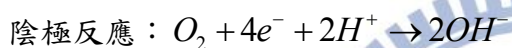
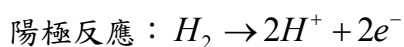
電池種類	AFC	PAFC	PEMFC	MCFC	SOFC
優點	使用高純度氫氣為燃料，啟動快、效率高，且低腐蝕性較易選材料。	構造簡單、穩定、電解質揮發度低。	壽命長、功率密度高、可室溫工作、啟動迅速、低腐蝕性及低溫、較易選擇材料。	不受 CO 影響、使用電極觸媒成本較便宜，廢熱可利用。	燃料來源廣，不受 CO 影響、不需仰賴觸媒的特殊作用、廢熱可利用。
缺點	以純氧做氧化劑、白金電極觸媒成本高、電解液容器有滲漏問題。	進氣中過多 CO 會導致觸媒中毒、成本高，低於峰值功率輸出時性能下降。	對 CO 非常敏感、材料成本昂貴、效率較低。	工作溫度高，有材料及安全性考量。	工作溫度高，啟動性能慢。

表(2-2) 各種燃料電池的優缺點[7]

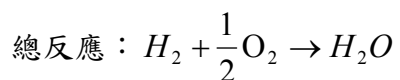
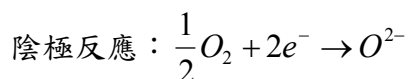
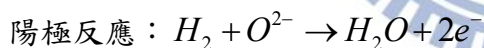
### 2.1.1 燃料電池的運作原理

如同電解水會產生氫氣和氧氣，燃料電池的原理即是輸入氫氣或含有碳-氫鍵的化合物作燃料以及氧氣或空氣作氧化劑，並藉由電極的觸媒催化產生氧化還原反應使傳輸電子至外電路產生電能。依其電解質傳輸的離子種類又分質子型(氫離子)與氧離子型兩種。其相關化學反應如下所示：

#### (1) 質子型



#### (2) 氧離子型



### 2.1.2 燃料電池構造

不同類型的燃料電池其構造也不太相同，但主要的構件有下列四項：

- (1) 陽極(anode)：材料通常包含觸媒，催化進行氧化還原反應。
- (2) 陰極(cathode)：材料通常包含觸媒，催化進行氧化還原反應。
- (3) 電解質層(electrolyte)：傳輸離子。



- (4) 雙極板連接器(interconnector, bi-polar plate)：單片電池的電位差約 1.1 伏特，若需要更高的電位差可藉由雙極板串聯來使用。

### 2.1.3 燃料電池的理論效率

內燃機的發電方式是藉由燃燒產生高溫使高溫氣體做功，以卡諾循環來說，其熱效率為  $1 - T_c/T_h$ 。 $T_c$  通常是室溫，因此  $T_h$  越高，熱機性能越好，而這也是內燃機的最大熱效率限制，也就是我們所知卡諾循環限制。

燃料電池則是從化學能轉成電能，所以並不受卡諾循環的限制。而一般電化學之能量轉換是以反應物和生成物的吉普士自由能(Gibbs Free Energy)差來描述的。

$$G = U - TS + PV = H - TS$$

$$\Delta G = G_{product} - G_{reactant}$$

$$\Delta G = \Delta G^0 - RT \ln Q \quad Q = \frac{[products]}{[reactants]}$$

其中  $U$  是系統的內能， $T$  是溫度， $S$  是熵， $P$  是壓強， $V$  是體積， $H$  是焓。

若以適當的條件產生最大的吉普士自由能差，理論上，在一大氣壓  $25^\circ\text{C}$  下，最高的發電開路電壓為 1.23 V。

$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln Q \quad \text{or} \quad E_{OCV} = -\frac{\Delta G}{ZF}$$

但因各種燃料電池不同的操作溫度與材料性質，我們還必須考慮到電池本身的內電阻、接觸電阻以及陽極與陰極的反應極化電位損失。以氫氧燃料電池為例：

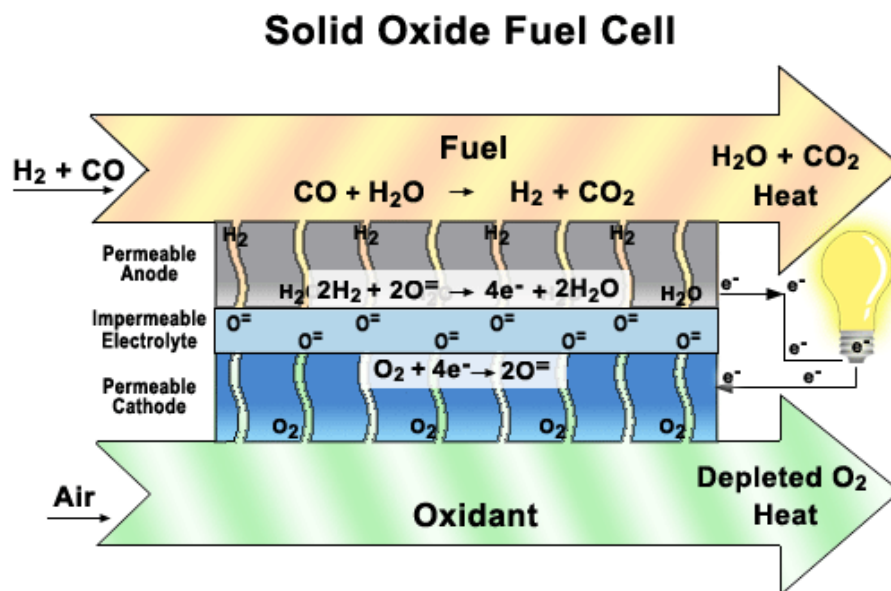
$$E_p = E^0(T) - \frac{RT}{nF} \ln \left( \frac{P_{H_2} P_{O_2}^{1/2}}{P_{H_2O}} \right)$$

$$E = E_{OCV} - \Delta V_{activation} - \Delta V_{ohmic} - \Delta V_{mass\ transfer}$$

當溫度越高時電阻也會變高，材料的機械與化學性質都會變得不穩定，但化學反應速率卻會加快，因此降低操作溫度並增加化學反應速率便成了大家共同努力的目標。

## 2.2 固態氧化物燃料電池簡介

固態氧化物燃料電池(SOFC)是一種將燃料的化學能轉化為電能、熱能及水的裝置。透過燃料與空氣的輸入，並藉由高溫環境中陽極與陰極的化學催化反應，使氧離子於電解質中傳輸來進行發電，屬於氧離子傳輸型的燃料電池，其操作溫度約在 500~1000°C 之間。相較其他類型的燃料電池，SOFC 具有最高的發電效率，還可以使用氫氣以外的燃料。而固態的電解質和電極材料，使電池片方便管理不易腐蝕變質，也比其他燃料電池更容易組成電池堆。小至數百瓦，大至數千萬瓦，皆有不少應用。其材料的選擇相當豐富，主要構成皆為陶瓷材料，不須使用貴金屬。因此在量產及造價和每單位發電的成本上都有著極高的優勢。



圖(2-1) 固態氧化物燃料電池運作示意圖[8]

目前全世界有關 SOFC 的研究論文、專利非常多，許多大型公司都相繼加入研發行列。不管是在材料方面的演進，以及製造結構和應用方式皆出現了許多與以往不同的重大改變。各種不同種類的 SOFC 如雨後春筍般出現，接著將在下面介紹。

### 2.2.1 固態氧化物燃料的電解質種類

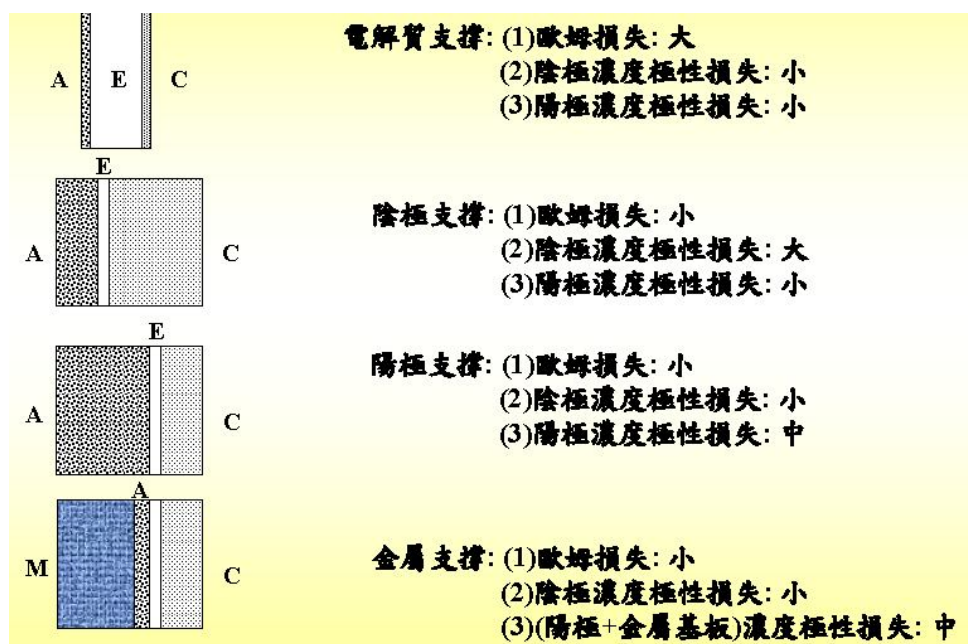
依電池電解質材料在運作時傳輸離子的種類，可分為傳輸質子(氫離子)的 P-SOFC 與傳輸氧離子的 O-SOFC 兩種。目前主要發展的類型為 O-SOFC，其水蒸氣的生成會在陽極。而 P-SOFC 的好處就在於水蒸氣的生成在陰極，一般來說通入陰極的空氣速率會比陽極大很多，這讓電池反應時所產生的水蒸氣可以更有效的帶走，提升電池反應的效率。但目前仍受限於材料研發上的困難，主要的發展仍是以 O-SOFC 為主。

### 2.2.2 固態氧化物燃料電池結構

電池本體主要由固態陶瓷材料作為電解質並與充滿孔隙的固態陰極和陽極所連接組成。為了使氣體容易擴散至電解質層，電極孔隙率是越高越好，但增加孔隙率的同時機械強度也會跟著下降，使得加溫時容易因為各層間的熱膨脹係數不同而碎裂。

目前，依電池片的製程分類，可分為電解質支撐、陰極支撐、陽極支撐與金屬支撐型。如下圖(2-2)所示。早期因為電池結構上容易碎裂的問題，製作上都以電解質支撐為主，但此類電池的操作溫度需求較高，衍生出許多其他材料應用上的問題。為了降低操作溫度，減少電解質的厚度視為必要的方法之一。而在考慮成本與製作上的難易度後，

以陽極支撐型固態氧化物燃料電池為目前發展的最大宗。



圖(2-2) 固態氧化物燃料電池主要結構分類[9]

### 2.2.3 固態氧化物燃料電池操作溫度

固態氧化物燃料電池依操作溫度可分為高溫型(800~1000°C)、中溫型(600~800°C)與低溫型( $\leq 600^\circ\text{C}$ )三種。一般來說，越高溫化學反應速率越快電池效率越好，但機械性質越差電池越容易損壞。而越低溫則電解質傳導氧離子的能力越差，電池的效率就越低。目前的電池材料研發很多都是在尋找低溫狀態時(600°C)有好的離子導電度的材料。本研究所探討的是中低溫型的固態氧化物燃料電池(600-700°C)。其不同操作溫度的相對優缺點比較如圖(2-3)所示。



800 °C			600 °C		
high temperature		medium temperature	low temperature		
+	materials available	o	materials available	-	materials available
+	technology existent	o	technology existent	-	technology existent
+	cell performance	o	cell performance	-	cell performance
+	fuel processing	o	fuel processing	-	fuel processing
o	long term stability	o	long term stability*	+	long term stability*
-	dynamic operation	o	dynamic operation*	+	dynamic operation*
-	system costs	o	system costs*	+	system costs*

\*estimated

圖(2-3) 不同操作溫度類型的固態氧化物燃料電池優缺點比較，(+)表示為優點，(-)表示為缺點，(O)為包含(+)(-)的展現狀態[10]

## 2.2.4 固態氧化物燃料電池運作方式

依電池的運作方式，分為雙反應室、單反應室、直接火焰式燃料電池，圖(2-4)。而單反應室、直接火焰式燃料電池為最近新的研究發向，待解決的問題還相當多。雙反應室則為目前發展較成熟，應用最廣的一種形式。

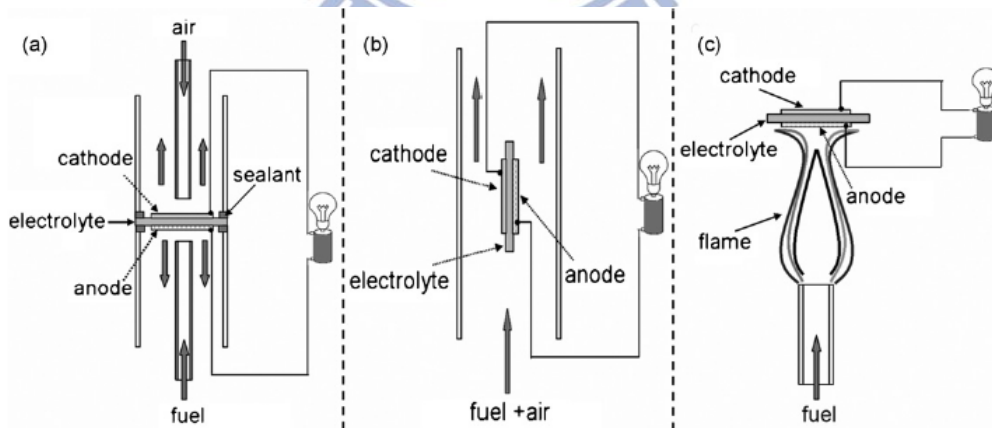


Fig. 1. Schematic of fuel cells: (a) dual-chamber SOFC; (b) single-chamber SOFC; (c) flame fuel cell.

圖(2-4) 固態氧化燃料電池運作方式分類[11]

#### 2.2.4.1 雙反應室固態氧化物燃料電池 (Dual-Chamber Solid Oxide Fuel Cell,

#### DC-SOFC)

雙反應室固態氧化物燃料電池是目前主要發展也發展最久的一種運作方式。其主要是藉由密封材料在電池片的周圍密封形成兩個氣體反應室，再分別於陽極和陰極通入燃料和空氣進行反應，以達到發電的目的。這種形式對氣體密封的要求非常嚴格，電解質的緻密性也是非常重要的。因此，在系統的複雜度上也比另外兩種類型要來的複雜許多。其雙反應室的優缺點如下表(2-3)所示。

早期發展因為材料與結構上的限制都以圓管型的燃料電池為主，近期由於各種材料的進步與未來使用上的便利性，平板式固態氧化物燃料電池變成了主要發展方向。而當電池片放大並堆疊時，如何收集電流並讓氣體順利通過電池片的電流收集板設計就變得很重要了。這也是本研究的主要研究方向。

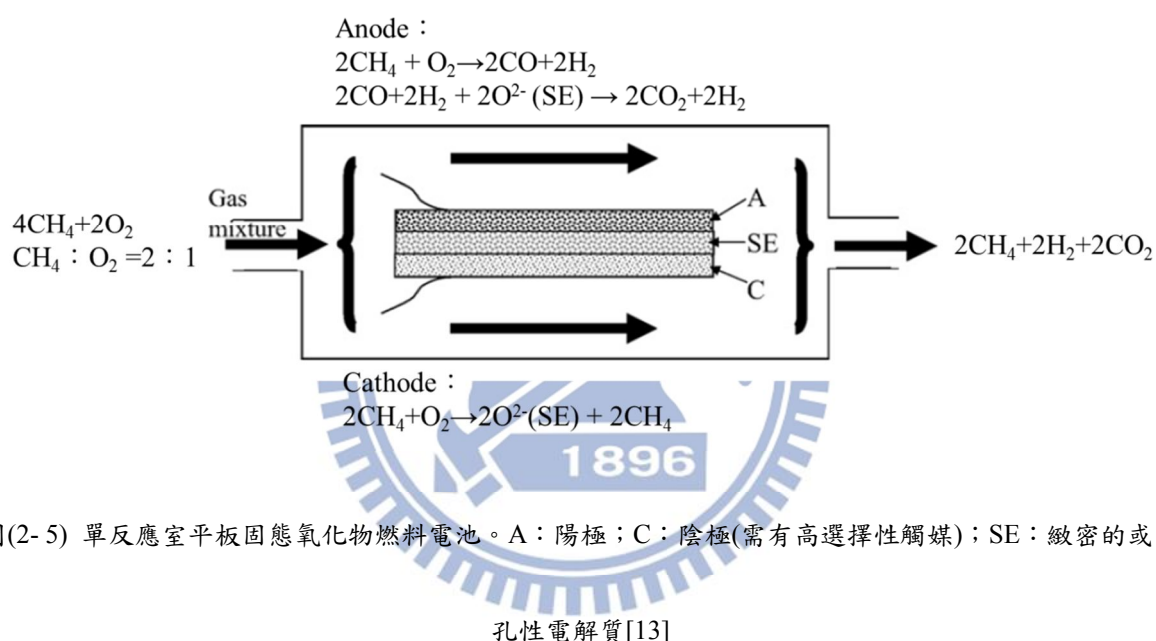
Advantage	Challenges
<ul style="list-style-type: none"><li>● Does not require catalytically selective electrodes</li><li>● Large-scale stationary power generation.</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>● Configuration is not considered suitable for portable applications in which frequent and rapid start-up and shut-down</li><li>● Large internal stress during the heating and cooling processes between cell components and sealant.</li></ul>

表(2- 3) 雙反應室固態氧化物燃料電池(DC-SOFC)的優點與挑戰[12]

#### 2.2.4.2 單反應室固態氧化物燃料電池 (Single-Chamber Solid Oxide Fuel Cell,

#### SC-SOFC)

SC-SOFC 是分別在陽極與陰極中加入不同的高選擇性觸媒材料，藉此來達到對已經混合的燃料與空氣氣體進行反應發電。由於受限於觸媒的選擇目前的主要限制在於電池必須平行於流場方向放置，且流速必須要夠快陰極的反應才會比較好。其反應方式如下圖(2-5)所示：

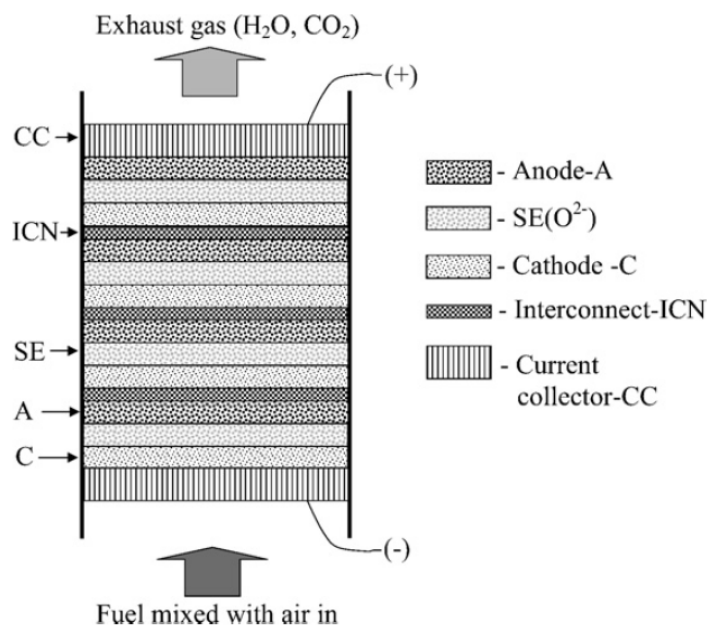


圖(2-5) 單反應室平板固態氧化物燃料電池。A：陽極；C：陰極(需有高選擇性觸媒)；SE：緻密的或多

孔性電解質[13]

此種方式的主要優點在於不用封裝也不需要緻密的電解質，可以降低系統的複雜性減少電池製作上的困難，電池片的設計也因此可以有多種變化。雖然偏低的燃料使用率可以藉由多串聯數個同樣的系統來改善但發電效率偏低仍然是急待改善的缺點。最終目標是直接將數個電池直接串連，並使混合氣體垂直通過電池組。如下圖(2-6)所示，此種方式不僅可改善低的燃料使用率，高流速更能降低混合氣體在單片電池的停留時間，快速帶走反應後不需要的氣體。此類型又被稱為混合反應式固態氧化物燃料電池 (Mixed Reactant SOFC, MR-SOFC)。SC-SOFC 詳細的優缺點，如下表(2-4)所示。





圖(2- 6) 混合反應式固態氧化物燃料電池堆(MR-SOFC)設計[13]

Advantage	Challenges
<ul style="list-style-type: none"> <li>● Sealing-free structure</li> <li>● Less complex gas manifolding</li> <li>● Increased thermo mechanical stability</li> <li>● More compact and simplified designs</li> <li>● Easier stack assembly</li> <li>● Great potential for miniaturization</li> <li>● No need for gas-tight electrolyte</li> <li>● Exothermic reactions to sustain cell temperature</li> <li>● New cell designs</li> <li>● Easier fabrication</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Highly selective and catalytically active materials necessary.</li> <li>● Low efficiency due to parasitic, non-electrochemical reactions.</li> <li>● Lower fuel utilization than in dual-chamber SOFCs.</li> <li>● Risk of explosion for fuel-air mixtures at high temperatures.</li> </ul>

表(2- 4) 單反應室固態氧化物燃料電池(SC-SOFC)的優點與挑戰[12]

#### 2.2.4.3 直接火焰燃料電池 (Direct-Flame Solid Oxide Fuel Cell, DFFC)

直接火焰燃燒燃料電池是直接藉由缺氧燃燒的方式燃燒酒精或其他燃料來提供電池發電時所需的熱能和燃料。此種方式改善了傳統雙反應室 SOFC 啟動時間過久的缺點，並且可以迅速地開啟和關閉電源。但在整個系統的發展上仍然有許多問題需要解決。DFFC 詳細的優缺點，如下表(2-5) 所示。

Advantage	Challenges
<ul style="list-style-type: none"><li>● Ultra-simple cell configuration</li><li>● Highly flexible fuel selection</li><li>● Frequent and rapid start-up and shut-down</li><li>● Portable power generation</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>● Thermal management.</li><li>● The uneven heating of the flame will induce the thermal stress within the fuel cell and may cause it to crack.</li><li>● Fuel utilization.</li><li>● Most of the fuel is consumed by combustion and therefore the total electrical efficiency is low.</li><li>● System design.</li><li>● Flames in real situations are generally hard to control and may often be unstable.</li></ul>

表(2- 5) 直接火焰燃燒燃料電池(DFFC)的優點與挑戰[11]

### 2.3 雙反應室平板式固態氧化物燃料電池堆設計與模擬

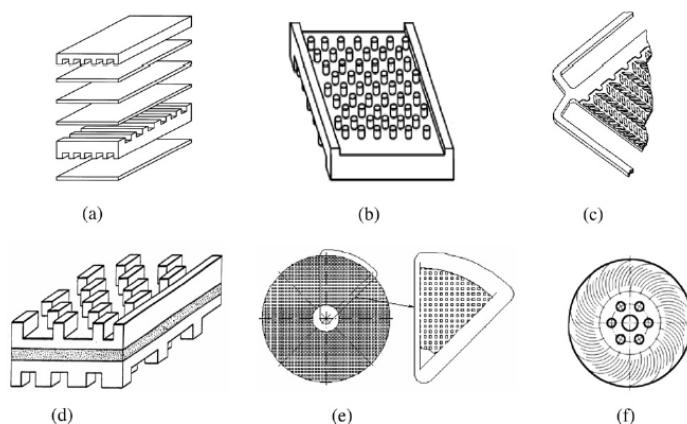
固態氧化物燃料電池是在高溫環境中運作的，這讓它有著許多的優點，但也造成了不管是研發上或設計上的困難。有許多參數是實驗所無法得知的，像是質量和能量的傳輸、電化學反應的狀況、氣體成分的分佈分析等等。因此數值模擬就變成很重要的研究工具。我們可以藉由數值分析了解電池在運作過程中的內部變化，像是流道中的流體運動狀況、氣體成分分析、應力分析、溫度分佈和電流密度分佈，以及平均發電功率的

大小。這可幫助我們減少成本進行燃料電池系統的設計與改善。其中，若以電池堆的設計來說，主要分為熱流場模擬、結構應力模擬與電化學模擬三方面。

針對雙反應室平板式固態氧化物燃料電池的熱流場與電化學模擬方法，除了自己撰寫程式外，目前市面上也有眾多商用CFD軟體有支援燃料電池模擬。例如：STAR-CD、CFD-RC、Fluent等等。每個軟體都有其操作上的優缺點和擅長的部份。

### 2.3.1 雙極板設計模擬

在電池堆的設計中，雙極板或稱電流收集板(current collect)的設計是非常重要的環節。其設計的方式顯著的影響了電池片溫度與電流的分佈狀況，如何對電池堆組均勻且有效率的通入氣體，降低進氣的壓降阻抗並帶走廢氣，以及收集反應時所產生的電流減少接觸阻抗損失是這個設計的重點[14]。收集相關文獻，在流道的設計上有各種不同的樣式。有直流道[15-16]、突出型電流收集板流道[17]、網狀流道[18-19]、虛線型直流道[20]、雙層流道[21]、波浪狀流道[22]等等，還有圓形平板式 SOFC 的設計類型[23-24]。如下圖(2-7)所示。每種都有其優缺點，目的不外乎增加氣體反應面積、收集電流、降低成本等等，而最常見的仍以使用於方形電池片的直流道類型為主。其原因就在於製作和系統架設上的簡易性與氣體進氣均勻性且壓降損失也不大。另外，方形電池片比起圓形電池片更容易以刮刀塗佈(tape casting)的方式大量製造。



圖(2-7) 各種形式的平板式固態氧化物燃料電池電流收集板設計[21]

若以燃料與空氣的流場流向方式來做分類，主要可分為同向流(Co-flow)、逆向流(Counter flow)和交錯流(cross flow)。根據 2003 年，K. P. Recknagle 等人[25]的研究，逆向流可以有最好的發電效率，同向流的電池片溫度差最小，而交錯流的發電效率最低且溫度差也最大，如圖(2-8)、表(2-6)所示。但在電池堆的設計中，交錯流卻可以有較簡易且較省空間的流道系統設計。也因此目前的實驗產品也多是使用交錯流的設計。

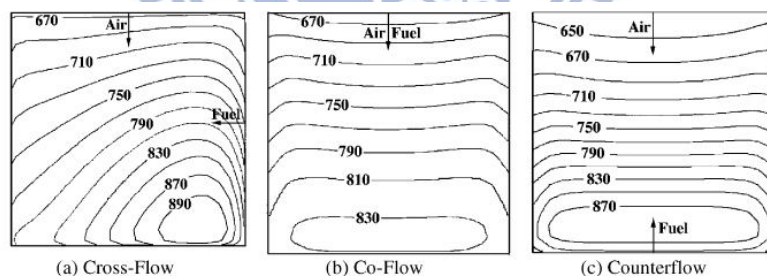


Fig. 4. Temperature distribution on the active cell area, °C.

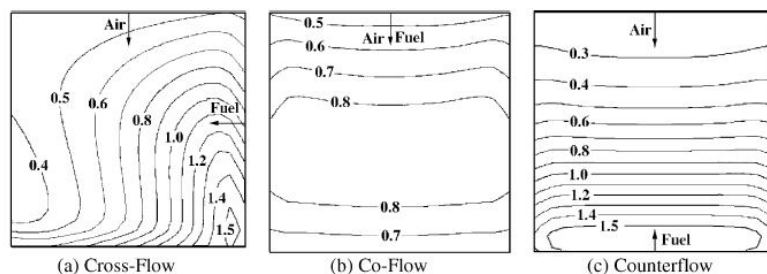


Fig. 5. Current density distribution on the active cell area, A/cm<sup>2</sup>.

圖(2-8) 交錯流(Cross flow)、同向流(Co-flow)、逆向流(Counter flow)的溫度分佈與電流密度分佈比較[25]

Outcome results (0.7V)				
Flow configurations	PEN temp $^{\circ}\text{C}$	PEN delta temp $^{\circ}\text{C}$	I avg. A/cm $^2$	Fuel utilization %
Cross-flow	769	269	0.69	62
Co-flow	763	184	0.71	64
Counter flow	758	267	0.73	63

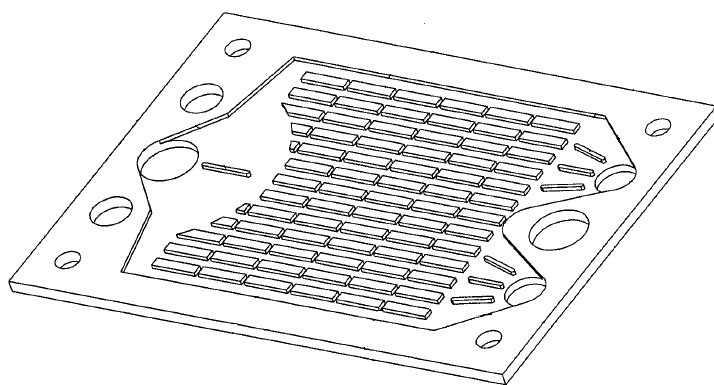
表(2- 6) 交錯流(Cross flow)、同向流(Co-flow)、逆向流(Counter flow)的最大溫度差與電流密度差比較

### 2.3.2 雙極板前後流道設計模擬

由前述文獻我們可以知道，目前雙極板的主流設計都以直流道的逆向流或交錯流為主。但相關文獻的研究都必須在流場是均勻流入的條件下才成立。而根據 2007 年，Ping Yuan 與 Syu-Fang Liu 的研究[26]，在交錯流中，不均勻的入口流場分佈會顯著的影響電池片的溫度分佈與電流密度分佈。其中，空氣側流場主要影響溫度分佈，燃料側流場影響電流密度分佈。往燃料出口漸漸增大的空氣入口分佈可以有較小的溫度差分佈，但不均勻流場對電池效率都有不良的影響，尤其是燃料側均勻度所造成的電流密度分佈影響更大，因此燃料側的均勻度是非常重要的。而在溫差過大的溫度分佈上容易導致電池結構損壞。

常見的改善方法為加寬入口與出口的進氣寬度，使與電池片同寬，讓氣體在進入電池前都是均勻的狀態。但此方法因為結構上的限制只適用於交錯流的設計，而交錯流對電池效率與均勻性又有不好的影響。因此，若要採用逆向流的氣體流動方式，勢必得有較佳的進出口設計。對此，2008 年 C. M. Huang 等人[27]與 Valery A. Danilov 等人[28]都提出在入口增設導流板可使流場更加均勻並且提高燃料電池之效率，如圖(2-9)所示。





圖(2-9) 含導流板的平板式固態氧化物燃料電池電流收集板設計[29]

另外也有看到以中間密外面疏的直線流道設計來達到均勻流場目的的方式[30]。但此兩種設計不管是在構造上還是製作方面都稍嫌複雜。

### 2.3.3 電池堆設計模擬

為了達到空間的最有效利用，電池片的堆疊發電是必要的方向，這也是為什麼要使用平板式固態氧化物燃料電池的原因。如圖(2-10)為美國 Versa Power Systems 公司所研發的電池堆模組系列。圖(2-11)則為日本 NTT Energy and Environment 公司所設計的圓形燃料電池堆組設計。藉由單電池片大小與電池片堆疊的數量來決定系統的發電功率。但堆疊的方式、電池堆進出口流道的形狀都會影響氣體流場的分佈，這也需要數值模擬的輔助來設計。對此本研究也做了相關的文獻和專利搜尋。

在 2011 年 William J. Sembler 等人的研究中[1] 有提到，可以藉由單電池的模擬結果來預估多電池堆的狀況，但這是在假設電池堆入口流場都是均勻的情況下。而根據 2008 年 Ping Yuan 的研究[31]，他們測試了四種可能的電池堆入口流場分佈來做分析比較，如圖(2-12)所示。並得出在這四種模式中，不均勻的燃料入口流場主要影響電池堆電壓的分佈狀況，也就是燃料輸入越多其發電功率越高。而不均勻的空氣入口流場則主



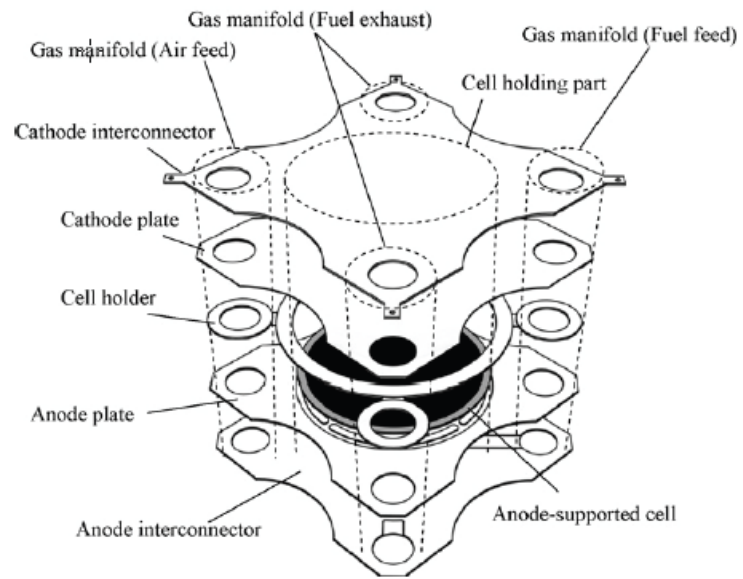
要影響電池堆的溫度分佈，輸入越多則電池的平均溫度越低。不過這四種模式的總體發電功率是差不多的。

總結來說，雖然不均勻的入口流場並不影響電池堆整體的發電功率，但不均勻的電壓和溫度分佈卻還是會影響電池堆的結構強度和使用狀況，因此設計上仍然要以均勻流場為主。對此，結合兩邊的設計考量，電池堆設計上其氣體入口管道大小不能太小，以提高電池堆流場均勻性，如附錄 A 的說明。

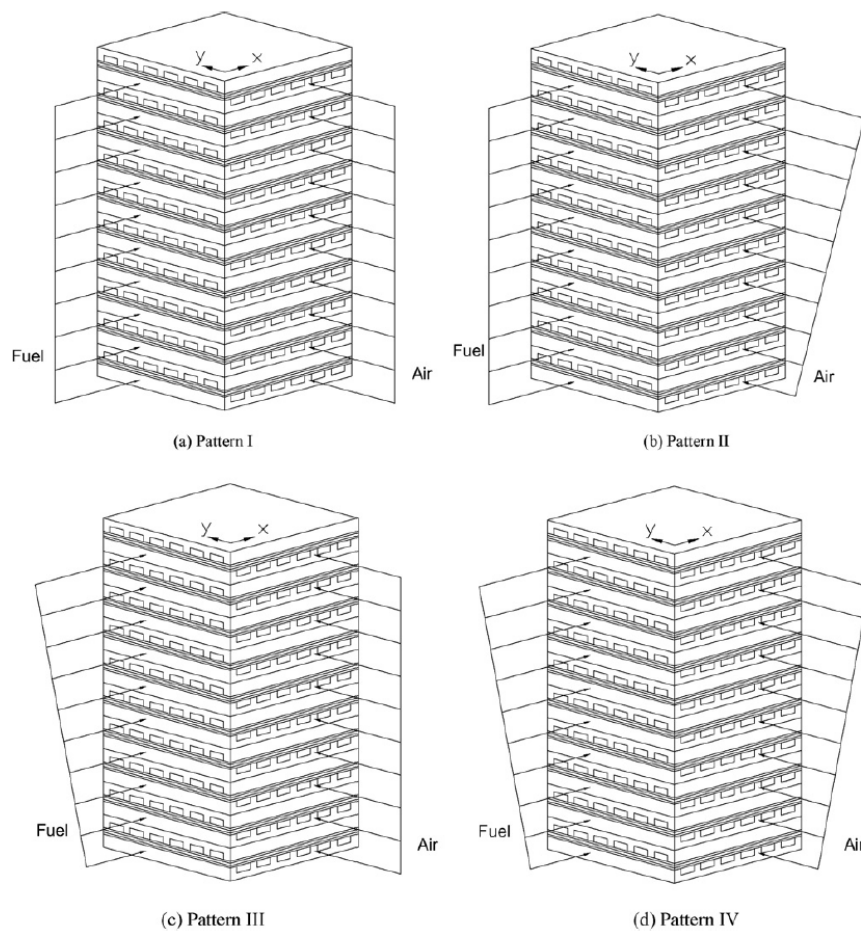
而為節省數值分析計算時間，考慮使用 2011 年 William J. Sembler 等人的研究所使用的方式，以單電池堆來預測多電池堆的狀況。但 William J. Sembler 等人的研究並沒有考慮前後流場，因此本研究先初步分析了包含前後流場的單電池組設計與多電池堆的發電性能比較，確認此方式即使在有前後流場的情形下也是可行的研究方式。於附錄 B 說明。



圖(2- 10) 美國 Versa Power Systems 公司所研發的電池堆模組系列[32]



圖(2- 11) 日本 NTT Energy and Environment 公司所設計的圓形燃料電池堆組設計[33]



圖(2- 12) 四種電池堆入口流場分佈模式[31]

## 第三章 數值方法

數值分析方法，除了可以利用下列 CFD 及電化學相關方程式自行撰寫程式，如 C++ 或 MATLAB 等來進行模擬。目前市面上也有不少商用軟體已開發燃料電池的相關模擬，像是 STAR-CD、ESI-CFD、Fluent、Comsol、ANSYS-CFX 等。為節省開發時間，參考目前各個商用軟體的優缺點，ANSYS-fluent 擁有相當完整之流體力學運算模式加上可隨計算修正網格之功能，可節省計算時間，在電池細部的分析也較為充足，且其溫度計算結果數據可藉由 ANSYS-workbanch 介面轉換給 ANSYS 相關的結構應力分析軟體，使得模擬熱應力分析時較為方便。所以，本研究主要以 Ansys 13.0 中的 fluent 進行流場、溫度場相關模擬，再配合內建的 SOFC 模組進行電化學分析。其相關方程式、邊界條件設定、數值方法之設定描述如下。

### 3.1 統御方程式

#### A. 納維－斯托克斯方程式(Navier-Stokes equations)

##### A.1 質量守恆方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m$$

##### A.2 動量守恆方程式

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau) + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

$$\tau = \mu[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I]$$

##### A.3 能量守恆方程式

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\tau_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h$$

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}$$

## B. 濃度方程式

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_m + F_{m,j}) = R_m$$

## C. 孔洞性材料之有效擴散係數

$$D_{ij,eff} = \frac{\varepsilon}{\tau} D_{ij}$$

$\varepsilon$  孔隙率 (porosity)

$\tau$  扭曲率 (tortuosity)



## D. 電化學模式

電池電位計算

$$V(i) = V_{Nernst} - V_{Ohmic} - V_{Butler-Volmer} + V_{anode} + V_{cathode}$$

### D.1 電荷守恆

$$\nabla \cdot i = 0$$

$$i = -\sigma \nabla \phi$$

### D.2 能斯特方程式 (Nernst equation)

反應方程式為： $\text{H}_2 + \text{O}^{2-} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^-$

$$\phi_{ideal} = \phi^0 + \frac{RT}{2F} \ln \frac{p_{\text{H}_2} p_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}}{p_{\text{H}_2\text{O}}}$$

理想電位：

$$V_{Nernst} = \frac{RT}{2F} \ln \frac{p_{\text{H}_2} p_{\text{O}_2}^{\frac{1}{2}}}{p_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{RT}{4F} \ln \left( \frac{p_{\text{O}_2, cathode}}{p_{\text{O}_2, anode}} \right)$$

### D.3 Butler-Volmer equation

$$i = i_0 \left( e^{\frac{a_a n (\phi - \phi_0) F}{RT}} - e^{-\frac{a_c n (\phi - \phi_0) F}{RT}} \right)$$

電化學反應產生的極化現象電位：

$$V_{Butler-Volmer} = \frac{RT}{\alpha F} \sinh^{-1} \left( \frac{i}{2i_0} \right)$$

### D.4 電池內電阻電位損失

$$V_{Ohmic} = iR_i$$

### D.5 陽極活化電位

$$V_{anode} = \frac{RT}{2F} \ln \left( 1 - \frac{i}{i_a} \right)$$

### D.6 陰極活化電位

$$V_{cathode} = \frac{RT}{4F} \ln \left( 1 - \frac{i}{i_c} \right)$$

## 3.2 數值方法

### A. Pressure-based finite volume discretization

給定任意純量  $\phi_k$ ，Ansys Fluent 將這些統御方程式表示成

$$\frac{\partial \rho \phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i \phi_k - \Gamma_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right) = S_{\phi_k} \quad k = 1, 2, \dots, N$$

$\Gamma_k$  和  $S_{\phi_k}$  分別是擴散係數與發源項。當探討的現象為穩態時，因  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ，可將上述方程

式化簡為

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i \phi_k - \Gamma_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i} \right) = S_{\phi_k} \quad k = 1, 2, \dots, N$$

### B. 空間離散

B.1 梯度離散：本論文在梯度之離散法選用最小平方法。

B.2 壓力：本論文在壓力之離散法選用標準法(standard)。

B.3 其他：本論文對於其他未在上述之兩項的離散方法選用 MUSCL (Monotone upwind-centered scheme for conservation laws)



### 3.3 材料參數設定

在 SOFC 燃料電池系統中，電池核心部分組件主要包含電池、雙極板及密封材料和外殼。在單電池模擬分析時，為節省計算時間，外殼影響以邊界條件取代。密封材料部分則都先假設元件接合處皆為密封，所以先不考慮。

一般來說，在材料參數的設定部分是必須先由實驗來確定其值，例如厚度、密度、電導性...等等，少數很難事先量測的參數設定則可能需要推測，以吻合實驗數據的表現，例如孔隙材料的黏滯係數、曲度(Tortuosity)、陽極轉換係數(Anode transfer coefficient)等等。如此，才可針對材料部分進行性質設計與改善。

### 3.4 邊界條件設定

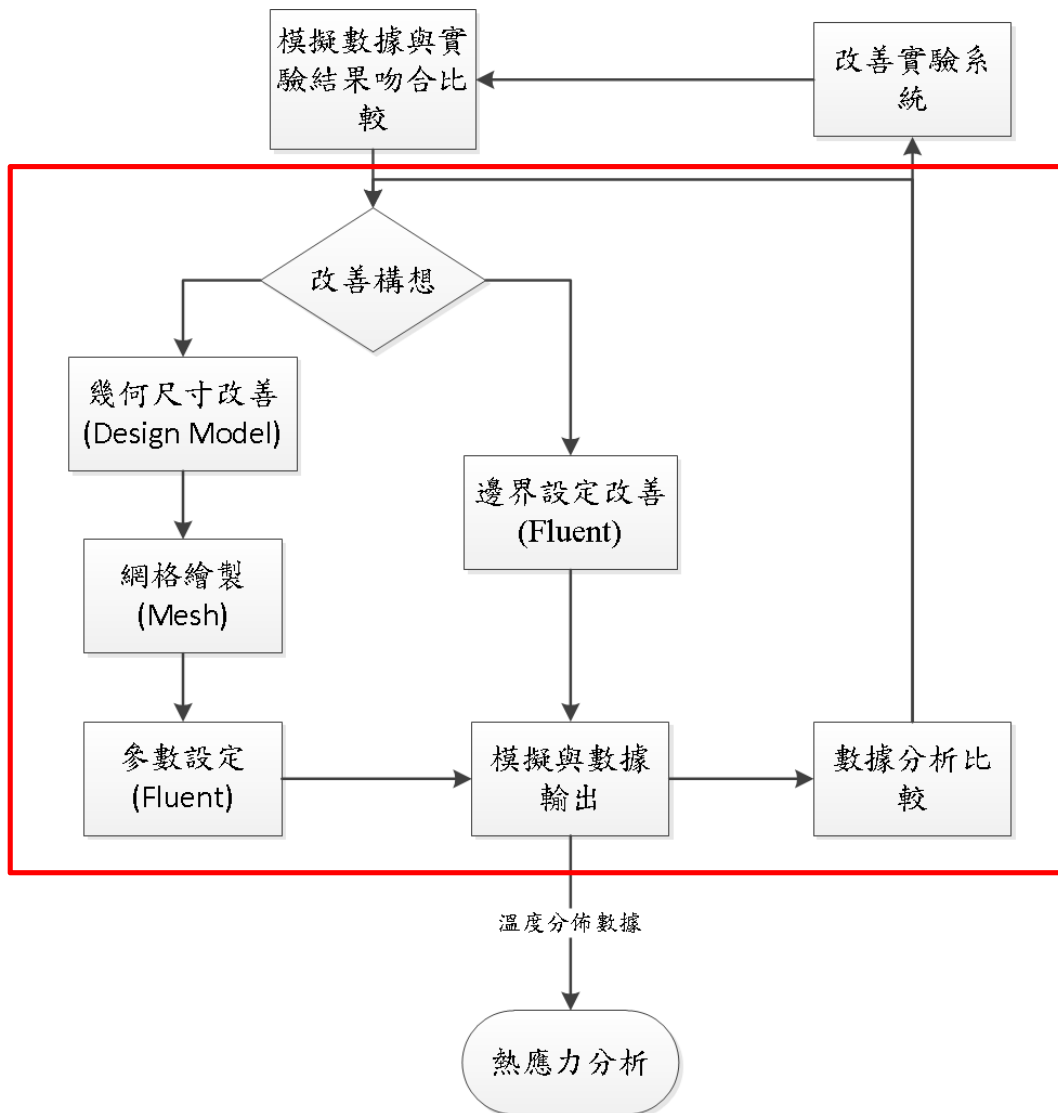
此部分包含進出口設定、外部邊界與內部邊界設定。

在進出口設定方面，需根據實驗狀態來加以設定。設定上有固定流量、固定流速和固定上游壓力輸入三種。出口設定則以固定壓力輸出較為常見。

在外部邊界方面，考慮有兩種方式加熱系統。一種是將系統以高溫爐包覆加熱，另一種則是預先加熱進氣氣體，再以加熱後的燃料與空氣氣體進行系統加熱。因此在設定上可分為絕熱邊界、定溫邊界、傳熱邊界三種。

內部邊界則為氣體與固態結構之間的邊界，設定為耦合邊界。此邊界可使流體與固體之間有熱交換但並無質量交換，此及氣體與雙極板之間的設定。而電池的陰極與陽極為富含孔隙的結構，氣體可直接進入，所以是將電極的性質設定為流體並增加孔隙結構的限制條件。

### 3.6 操作程序



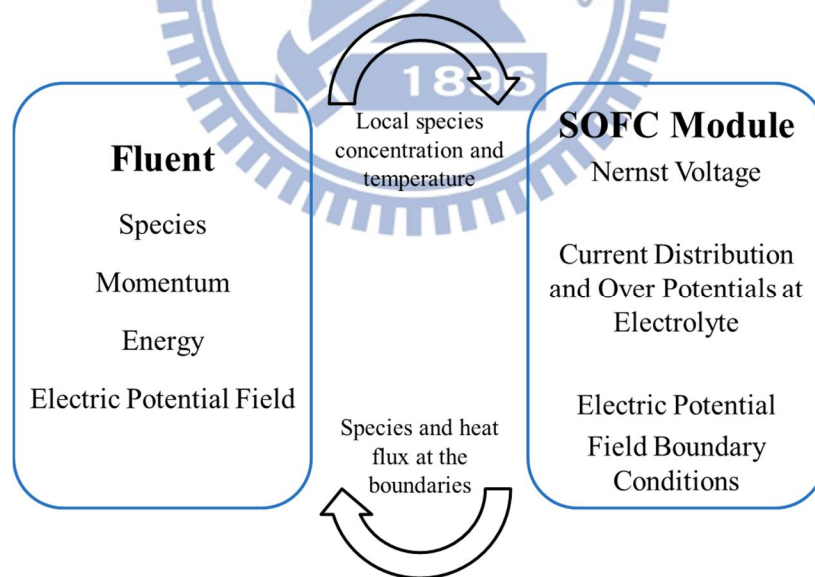
圖(3- 1) 數值分析操作程序圖

在模擬分析前，須先確認在同樣條件下模擬結果與實驗結果是相同的，以增加模擬的可信度並進行設計分析。但由於計畫前期實驗設備還不夠完善，在數據比對上是先與其他研究團隊的研究成果做比對再進行設計分析。主要的操作程序以紅色框框內的步驟為主。

首先將構想之幾何圖形以 CAD 軟體繪製，匯入 Ansys 中的 DesignModeler 軟體並

做些許修改與設定，之後再以 Ansys 的 Mesh 軟體進行網格切割佈置。其中因 fluent 的軟體設定關係，圖形和網格的繪製並不包含電解質層。最後使用 Ansys fluent 設定材料參數、邊界條件、入口流量、模擬方法、收斂條件...等，進行模擬。其數據分析也是由 fluent 來進行，包含氣體分佈、電流密度分佈、溫度分佈、繪製 I-V 曲線等等。未來可利用 Ansys Workbench 將溫度部分的相關數據轉換給其熱應力分析軟體，方便後續的熱應力分析。分析後，依優缺點再做各種可能的改善與模擬，直到確認可行再進行實驗，並與模擬結果比較確認。如此重複進行。

在使用 fluent 模擬分析時，須藉由加裝的 SOFC 模組來輔助模擬。計算過程中，fluent 會先將流場、溫度場、物種濃度分布等之現象解出後，交給 SOFC 模組進行電性分析等等的計算，該模組再將這些結果交給 fluent 進行下一步的計算，如此反覆計算到物理現象收斂為止。如下圖(3-2)所示。其中電解質的計算需於 SOFC 模組中設定。



圖(3- 2) Fluent and SOFC Module[34]

## 第四章 結果與討論

### 4.1 參數設定與數據比對

模擬分析時，為使分析結果更貼近於真實狀況，需與實驗配合並比對結果是否相符，其數據才有其參考價值。本研究前期計畫實驗部分還未準備完善，所以參數設定與數據比對的工作先以 2011 年 William J. Sembler 等人的研究[1]為基準，未來將再進行實驗進行數據比對，已符合系統改善的目的。

#### 4.1.1 材料參數與邊界條件設定

研究初期，為了確認材料參數與其他相關設定，本研究參考 2011 年 William J. Sembler 等人的研究[1]使用相關參數設定並做數據比對的測試。相關材料設定參數如表 (4-1)所示。

類型	參數	值
Porous anode (NiO+YSZ)	Thickness	1.8 mm
	Density	6500 kg/m <sup>3</sup>
	Specific heat	450 J/kg K
	Thermal conductivity	10 W/m K
	Electron conductivity	333,330 1/Ω-m
	Viscous resistance (x,y,z direction)	1e+13 1/m <sup>2</sup>
	Porosity	0.24
	Tortuosity	3
	Anode transfer coefficient	0.7
	Cathode transfer coefficient	0.7
	Exchange current density	200,000

Porous cathode (LSM)	Thickness	0.03 mm
	Density	5620 kg/m <sup>3</sup>
	Specific heat	450 J/kg K
	Thermal conductivity	11 W/m K
	Electron conductivity	7937 1/Ω-m
	Viscous resistance (x,y,z direction)	1e+13 1/m <sup>2</sup>
	Porosity	0.375
	Tortuosity	3
	Anode transfer coefficient	0.7
	Cathode transfer coefficient	0.7
	Exchange current density	800
Electrolyte (YSZ)	Thickness	0.02 mm
	Density	5480 kg/m <sup>3</sup>
	Specific heat	450 J/kg K
	Thermal conductivity	2 W/m K
	Electrolyte resistivity	0.1
Current collector	Density	5480
	Specific heat	446 j/kg-k
	Thermal conductivity	72 w/m-k
	Electron conductivity	1.5e+07 1/Ω-m
	Contact resistance with anode	1e-07 Ω-m <sup>2</sup>
	Contact resistance with cathode	1e-08 Ω-m <sup>2</sup>

表(4-1) 材料參數

在進出口設定方面，進氣口邊界為固定質量流率(mass flow inlet)。出氣口邊界則設定為定壓力出口(pressure outlet)，大小為一大氣壓。外部邊界則設定全部皆為絕熱邊界，詳細邊界設定請見表(4-2)。

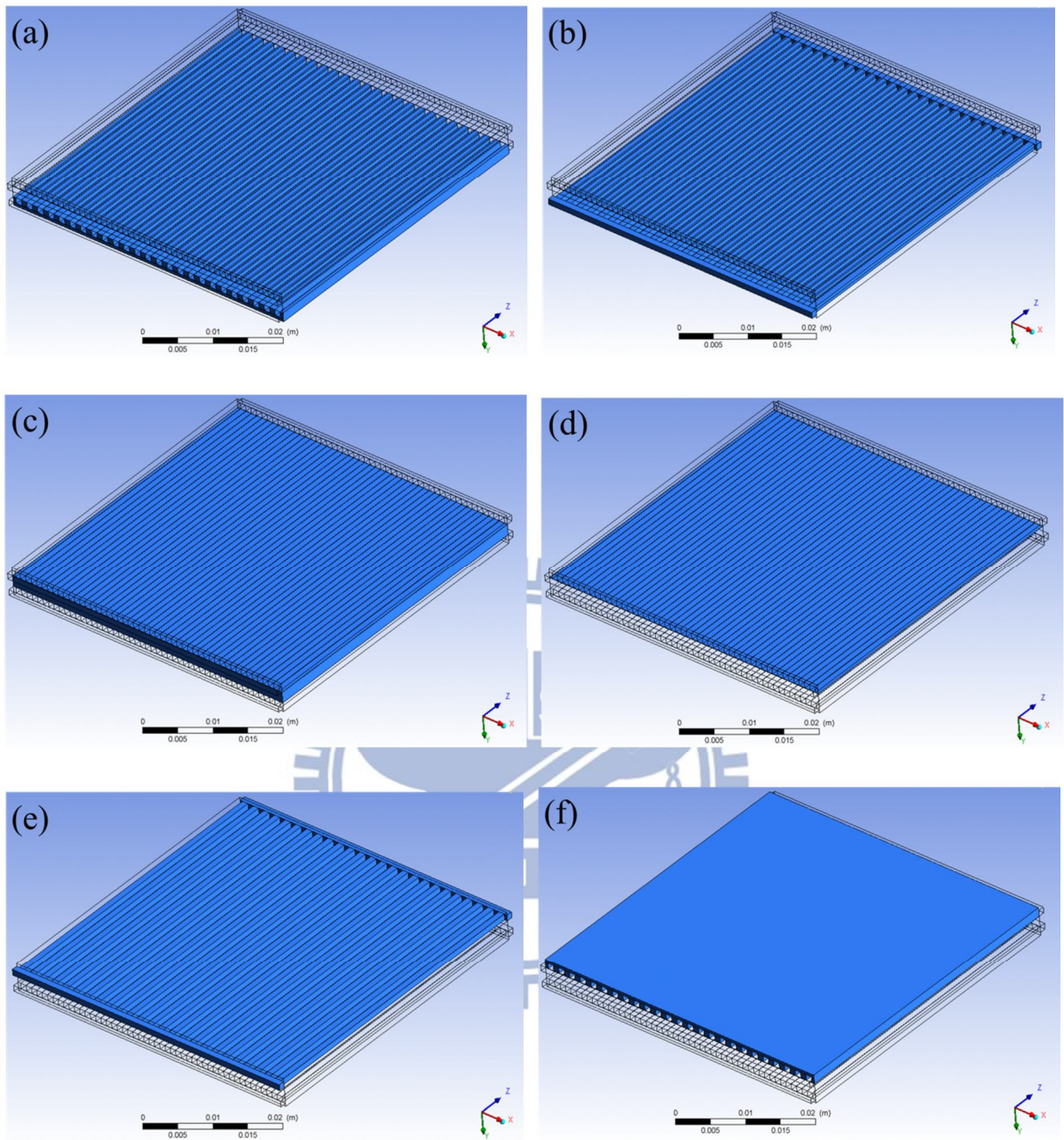
參數	值	單位
陽極入口流量	$4.48 \times 10^{-7}$	kg/s
陽極入口溫度	973	K
陽極(燃料)入口成份	97% H <sub>2</sub> , 3% H <sub>2</sub> O	莫耳比
陰極入口流量	$2.17 \times 10^{-5}$	kg/s
陰極入口溫度	973	K
陰極(空氣)入口成份	100% dry air	
操作壓力	1	atm
外部熱邊界條件	Adiabatic	
氫氧比 (H/O ratio)	2/1.785	莫耳比

表(4-2) 邊界條件設定

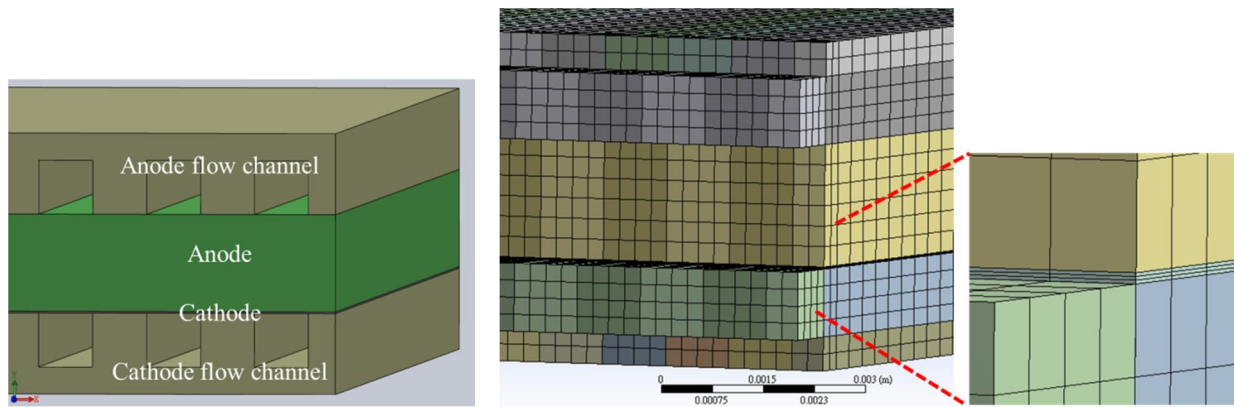
#### 4.1.2 幾何尺寸與網格設定

首先根據 2011 年 William J. Sembler 等人的研究[1]繪製相同幾何尺寸的單電池系統(圖 4-1)，再依照建議尺寸繪製網格。分別是以流道寬度方向  $dx=0.25\text{ mm}$ 、流道高度方向  $dy=0.25\text{ mm}$ 、流道長度方向  $dz=0.5\text{ mm}$  切割。陽極切 6 層、陰極切 3 層，雙極板上下面切 2 層。總網格數約 44 萬網格左右，如圖(4-2)所示。根據計算，在溫度 1123K 時，燃料側氫氣雷諾數為 0.9，空氣側雷諾數為 19.5。兩側皆屬於非常穩定的層流。而網格繪製是將流道部分切割四層，在兩側皆為層流的情況下，此網格數是確實足夠的，並以此來做數據比對分析。不過為了確認數據真實性，我們也做了初步的網格測試比較，將流道寬度與高度分別切八層再和原來切四層的比較，其結果差異都不大，誤差都在 1% 以內。





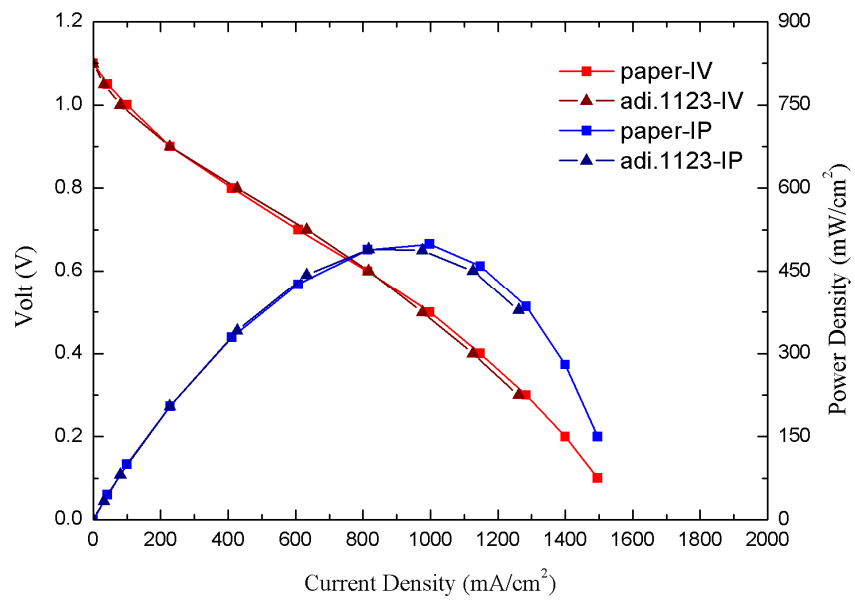
圖(4-1) 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)陽極 (d)陰極 (e)陰極流場 (f)陰極極板



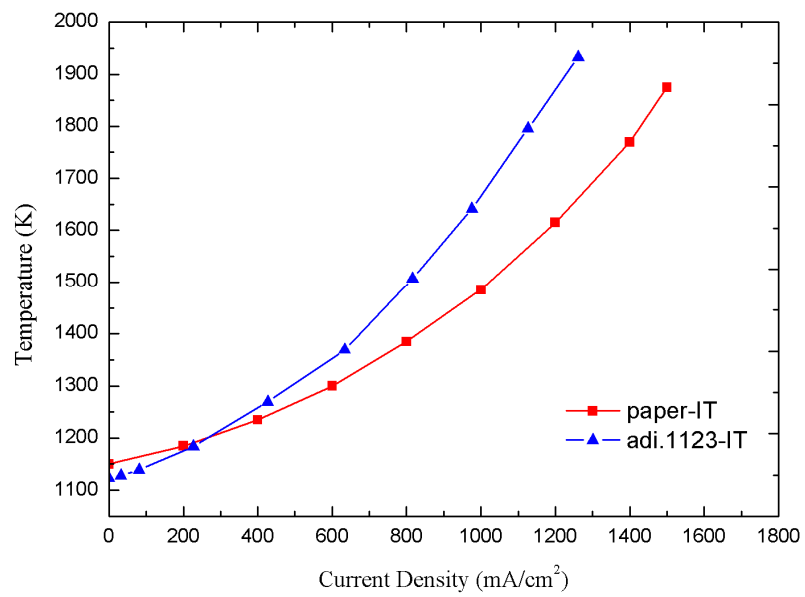
圖(4-2) 單電池模型網格繪製

### 4.1.3 數據比對結果

依照表(4-1)、表(4-2)的設定進行數值計算。在嘗試幾次改變交換電流密度(exchange current density)與其他參數後進行數據比對，其 I-V 曲線與 William J. Sembler 等人的研究結果大致是吻合的，圖(4-3)。溫度曲線的部分則較 William J. Sembler 等人的研究結果溫度高，圖(4-4)。推測其原因在於參數變化很多，但所知的有限，不少還是必須要進行交叉比對測試，導致即使 I-V 曲線吻合，溫度曲線還是會因為有參數設定不一樣而有不同的影響。不過此設定仍然可做為參考依據，將再進行本研究後續的設計分析。未來與實驗做數據比對時仍然是可以使用此法，但材料參數的量測要更詳盡，使找尋未知參數的過程可更容易準確。



圖(4-3) 數據比對：I-V 曲線



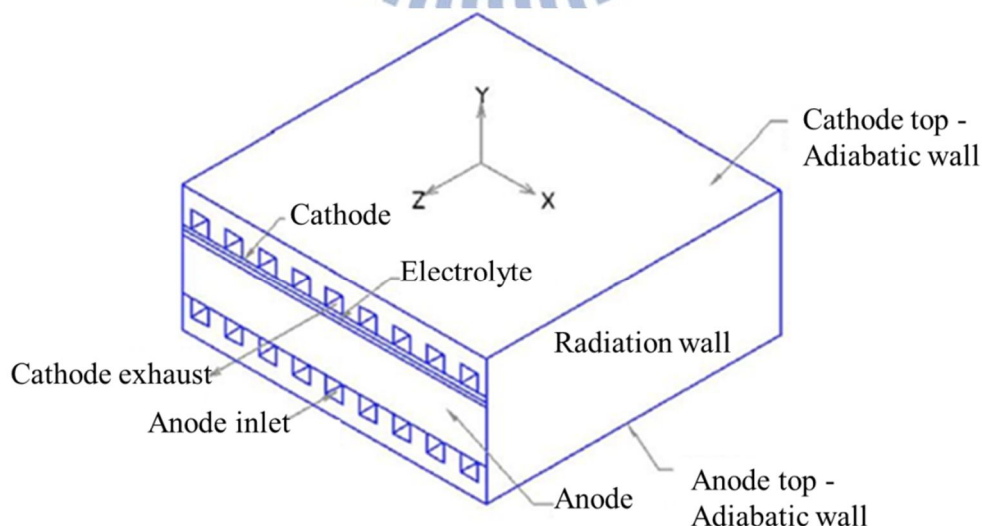
圖(4-4) 數據比對：溫度曲線

## 4.2 直流道設計的改善與研究

在雙極板流道設計上，為減少設計複雜度，降低壓降的影響與加速水氣排出，基本設計上都以直線流道為主。本研究即針對雙極板在直線流道下改變雙極板的流道幾何尺寸設計，分析觀察不同流道尺寸對平板式固態氧化物燃料電池運作時的影響，以了解流道幾何尺寸的最佳設計。其主要分析如下所述。

### 4.2.1 材料參數與邊界條件

為符合未來系統設計的需求，在數據確認吻合後改變陽極厚度由 1.8 mm 改為 1 mm，氫氣與空氣進出口溫度由 1123K 改為 973K。外部邊界上，系統設計是以空氣加熱電池堆並包覆隔熱層與金屬外殼，所以在邊界設定上是預想為已預熱的進氣氣體加熱系統來進行設定。而系統外殼因為會有散熱的狀況，設定上是將電池系統外圍以輻射熱傳邊界來設定。上下邊界則因為電池堆的堆疊設計使不易散熱所以維持設定為絕熱邊界，如圖(4-5)所示，詳細修改邊界設定請見表(4-3)。



圖(4-5) 單電池邊界條件示意圖

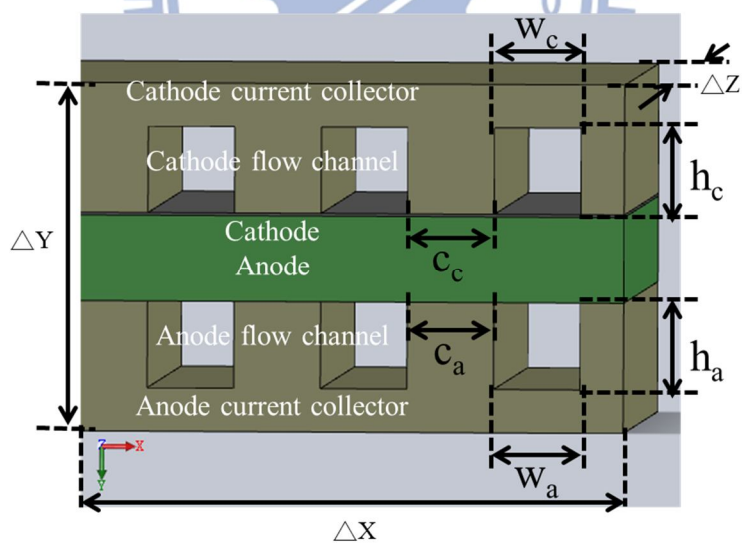


參數	新基準值	單位
陽極厚度	1	mm
陰極厚度	0.1	mm
陽極與陰極入口溫度	973	K
Anode transfer coefficient	0.5	
Cathode transfer coefficient	0.5	
外部邊界條件(周圍)	輻射熱傳 (External Emissivity =1)	
外部邊界條件(上下面)	Adiabatic	

表(4-3) 分析基準值參數設定

#### 4.2.2 流道幾何尺寸影響分析

針對雙極板在直線流道下，燃料側和空氣側的流道寬度、高度以及雙極板和電池的接觸寬度做影響分析，以了解影響性的大小再做更深入的研究。改變的參數如下圖(4-6)、圖(4-7)、表(4-4)所示。

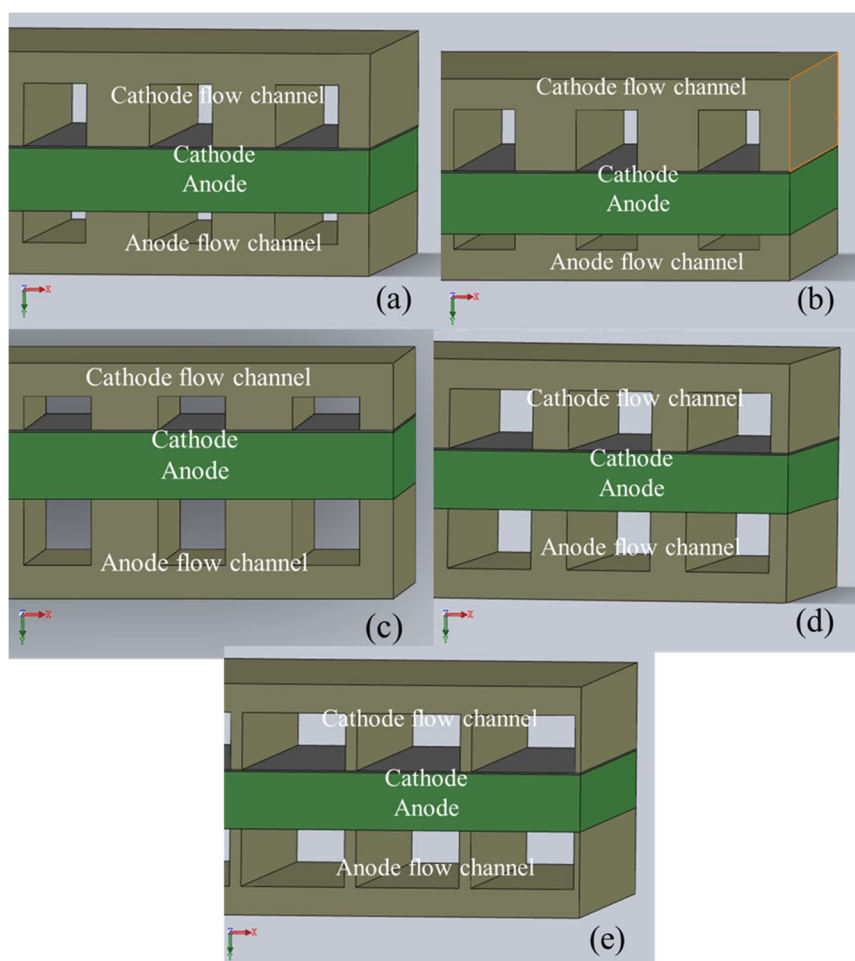


圖(4-6) 燃料側流道高度  $h_a$ ；燃料側流道寬度  $w_a$ ；雙極板陽極接觸寬度  $c_a$ ；空氣側流道高度  $h_c$ ；空氣側

流道寬度  $w_c$ ；雙極板陰極接觸寬度  $c_c$

	參數	原尺寸	改變尺寸
Test 1	$h_a$	1 mm	0.25 mm
			0.5 mm
Test 2	$h_c$	1 mm	0.5 mm
Test 3	$w_a, w_c$	1 mm	1.4 mm
	$c_a, c_c$	1 mm	0.6 mm
Test 4	$w_a, w_c$	1 mm	1.8 mm
	$c_a, c_c$	1 mm	0.2 mm

表(4- 4) 流道幾何尺寸影響分析參數設定



圖(4- 7) 流道幾何尺寸設定示意圖：(a) $h_a=0.5$  mm, (b) $h_a=0.25$  mm, (c) $h_c=0.5$  mm,

(d) $w_a=w_c=1.4$  mm,  $c_a=c_c=0.6$  mm, (e)  $w_a=w_c=1.8$  mm,  $c_a=c_c=0.2$  mm

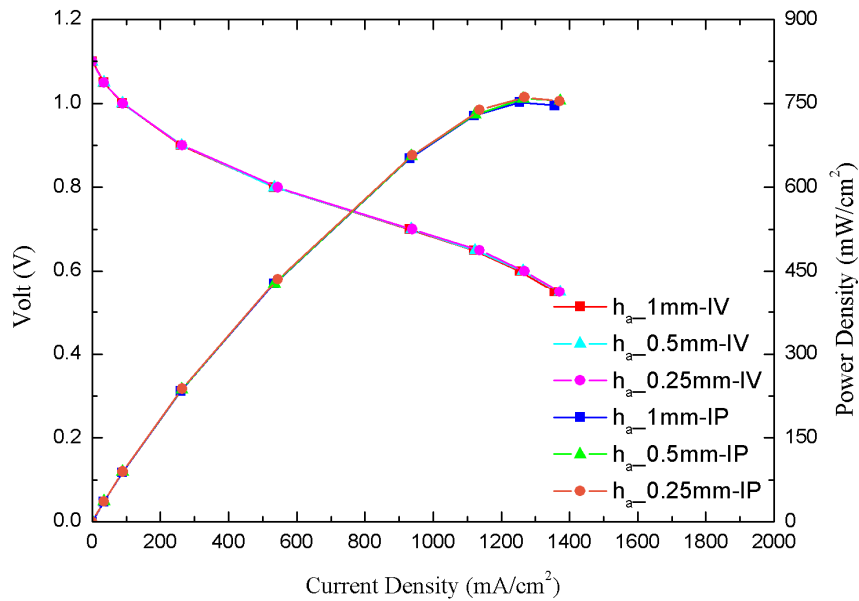


#### 4.2.2.1 燃料側流道高度影響

模型繪製後，以固定電壓的方式，分別模擬 1.1V 到 0.55V 數點來繪製 I-V 曲線。

測試不同的燃料側流道高度( $h_a$ ) 1 mm、0.5 mm、0.25 mm，觀察其對發電性能的影響。

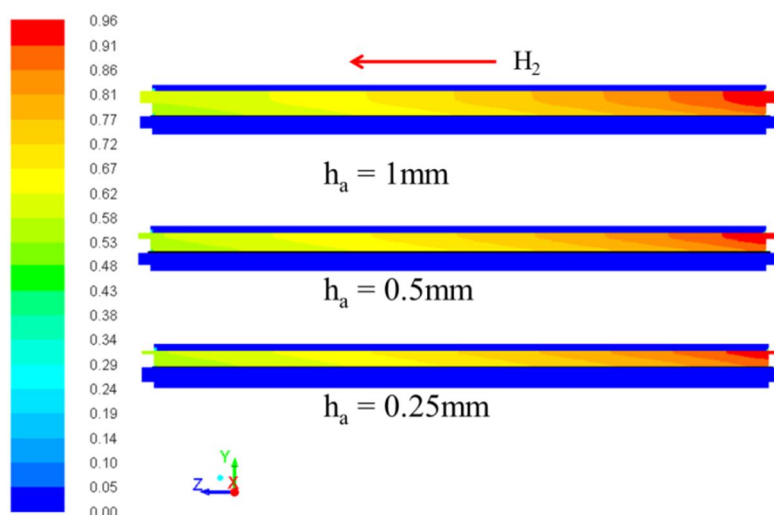
在同樣的流量下，降低流道高度等同於也是增加流速。其結果，在最大能量密度(max power density)上大約提升 1% 左右，圖(4-8)、表(4-5)，可見其影響不大。但觀察燃料側流道氫氣分佈時，圖(4-9)，可以發現降低流道高度，氫氣出口處的氫氣含量是較低的，也就是說降低燃料側流道高度可增加氫氣的使用率。但 0.5 mm 與 0.25 mm 差別不大，為減少壓降影響，往後設計燃料側流道高度選擇 0.5 mm 即可。



圖(4-8) 燃料側流道高度影響：I-V 曲線圖

參數	尺寸	Max power density (mW/cm <sup>2</sup> )
$h_a \& h_c$	1 mm	752.23
$h_a$	0.5 mm	758.47 (0.83%)
$h_a$	0.25 mm	761.02 (1.1%)

表(4- 5) 燃料側流道高度影響：最大能量密度(max power density)



圖(4- 9) 燃料側流道高度影響：氫氣分佈圖( $H_2$  mole fraction)，0.8V 側視觀察

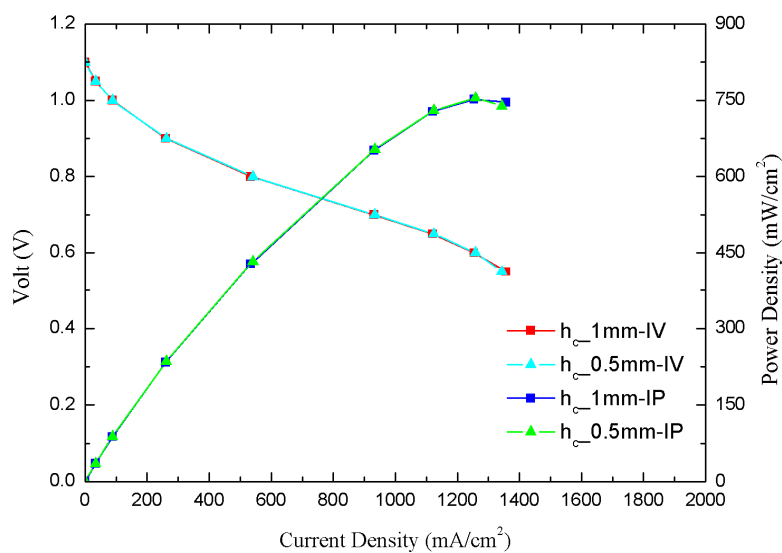
#### 4.2.2.2 空氣側流道高度影響

測試不同的空氣側流道高度( $h_c$ ) 1 mm、0.5 mm，觀察其對發電性能的影響。

結果發現，改變空氣側流道高度對電池片發電效率影響更小(0.36%)，圖(4-10)、表(4-6)。推測這是因為在富氧環境反應狀態下，空氣的狀態改變對發電性能的影響性不大，如同前述 2008 年 Ping Yuan 的研究[31]所提出的，空氣側主要影響電池片溫度的分佈，而縮小流道高度雖然可增加流場流速，但在總流量不變的情況下其溫度影響也有限。不過流速的增快仍然有助於氧氣擴散至電解質層反應。如圖(4-11)，我們仍可發現其電解

質層後段的接觸面氧氣濃度是稍微較高的。

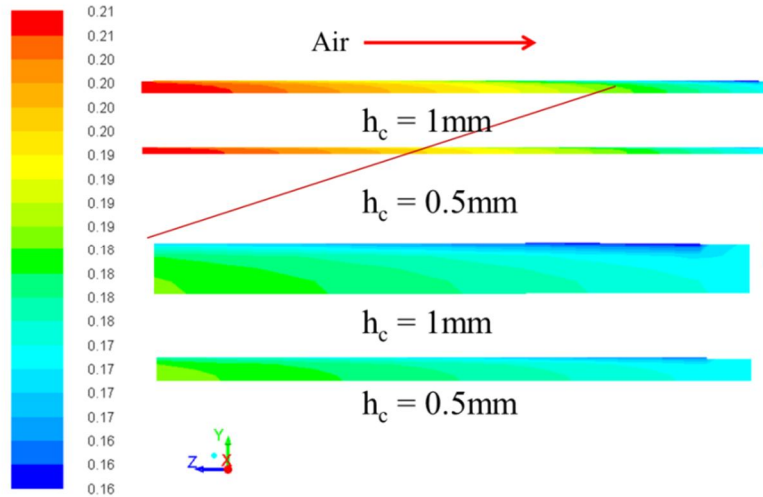
設計上，為減少壓降損失，空氣側流道仍以 1 mm 高度來設計。



圖(4-10) 空氣側流道高度影響：I-V 曲線圖

參數	尺寸	Max power density (mW/cm2)
$h_c$	1 mm	752.2
$h_c$	0.5 mm	754.9 (0.36%)

表(4-6) 空氣側流道高度影響：最大能量密度(max power density)

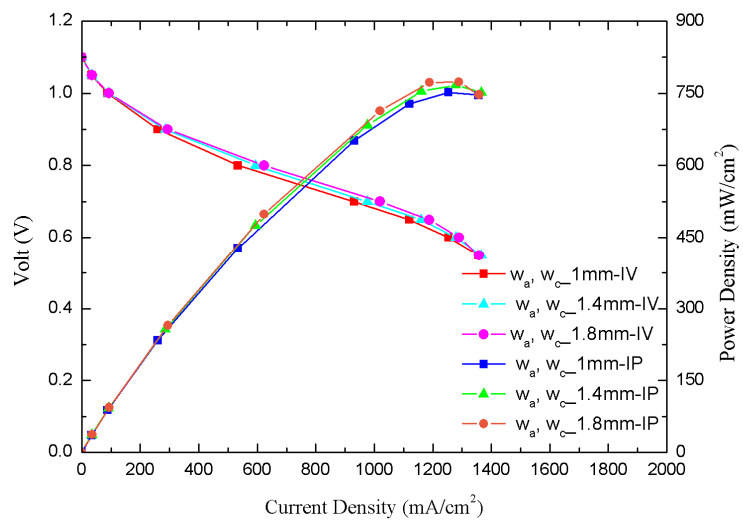


圖(4- 11) 空氣側流道高度影響：氧氣分佈圖( $O_2$  mole fraction)，0.8V 側視觀

#### 4.2.2.3 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響

測試不同的燃料側流道寬度( $w_a$ )與電流收集板的接觸寬度( $c_a$ )，空氣側流道寬度( $w_c$ )與電流收集板的接觸寬度( $c_c$ )，觀察其對發電性能的影響。

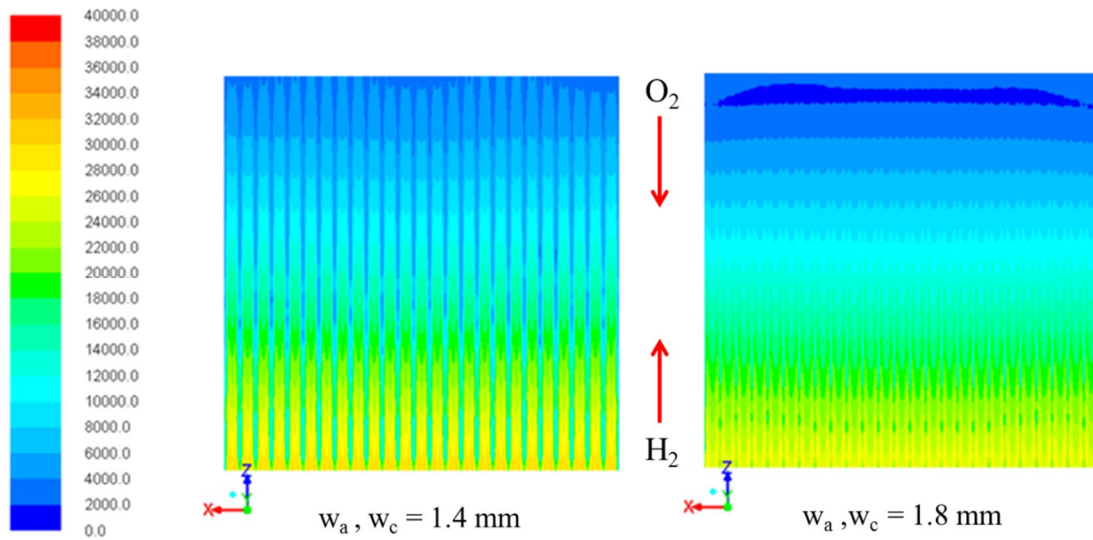
結果發現，改變流道寬度和接觸寬度可以提高 2-3% 的發電效率，圖(4-12)、表(4-7)。仔細分析後可以看到一個現象，當雙極板與電池片的接觸寬度減小時，在電流密度和氧氣分佈上都有更均勻的趨勢，而在氫氣分佈上也可發現氫氣的使用效率有明顯的增加，如圖(4-13)到圖(4-16)所示。這表示增加氣體與電池片的反應接觸面積是可以有效改善電池效率的。而空氣側的接觸寬度改變影響又更為顯著，最主要的原因是因為電解質層的厚度很薄，使得當改變空氣側的流道寬度和雙極板接觸寬度時，接觸寬度越小的設計可以讓空氣更容易進入電解質層反應，流道寬度的增加更增加了反應面積，如圖(4-17)。這樣的結果也與 2011 年 Zuopeng Qu[22] 等人的研究結果是相符合的。



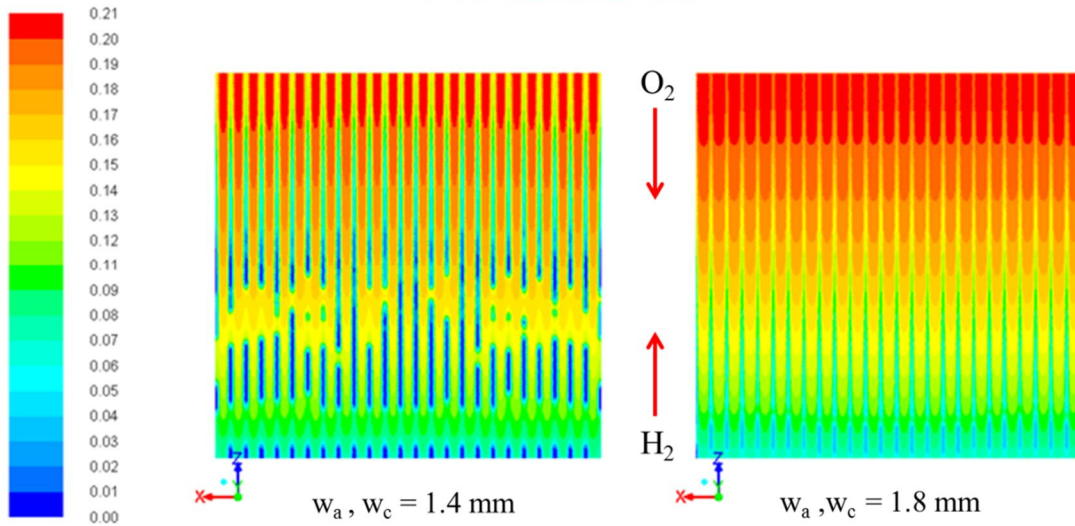
圖(4- 12) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：I-V 曲線圖

參數	尺寸	Max power density (mW/cm <sup>2</sup> )
$w_a$ & $w_c$	1 mm	752.2
$c_a$ & $c_c$	1 mm	
$w_a$ & $w_c$	1.4 mm	767.4 (2%)
$c_a$ & $c_c$	0.6 mm	
$w_a$ & $w_c$	1.8 mm	773.6 (2.8%)
$w_a$ & $w_c$	0.2 mm	

表(4- 7) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：最大能量密度(max power density)

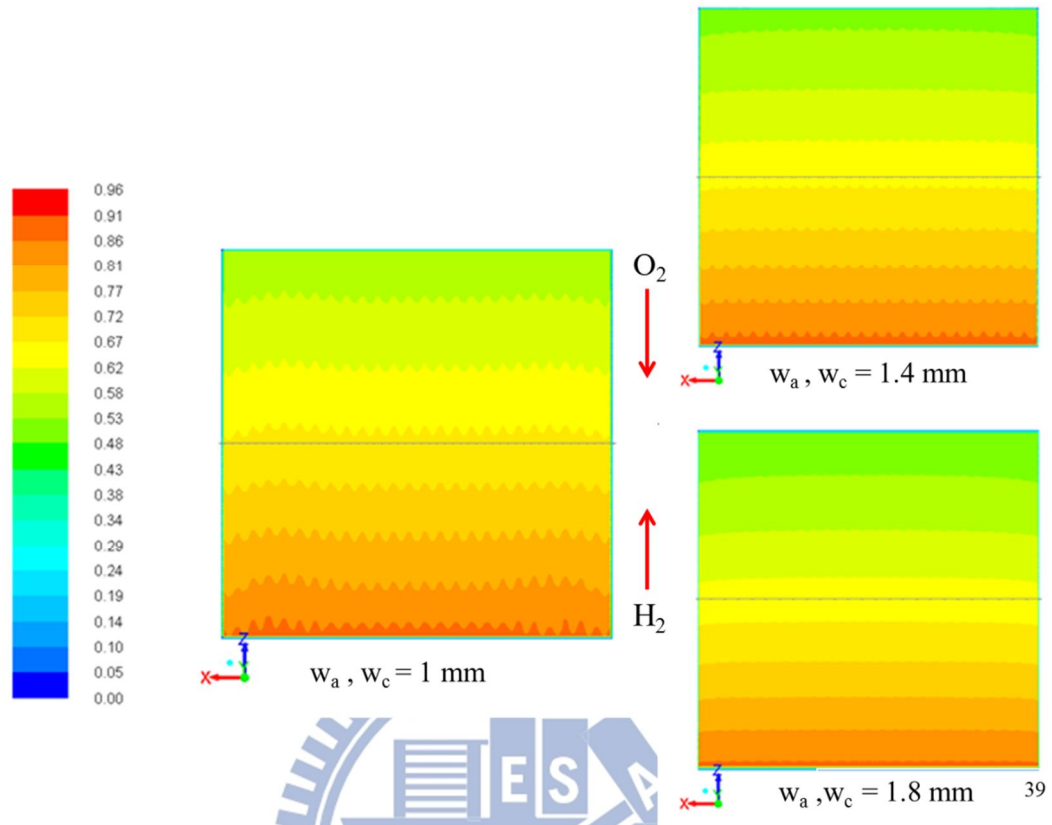


圖(4- 13) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電流密度分佈(Current density, A/m<sup>2</sup>)，0.6V

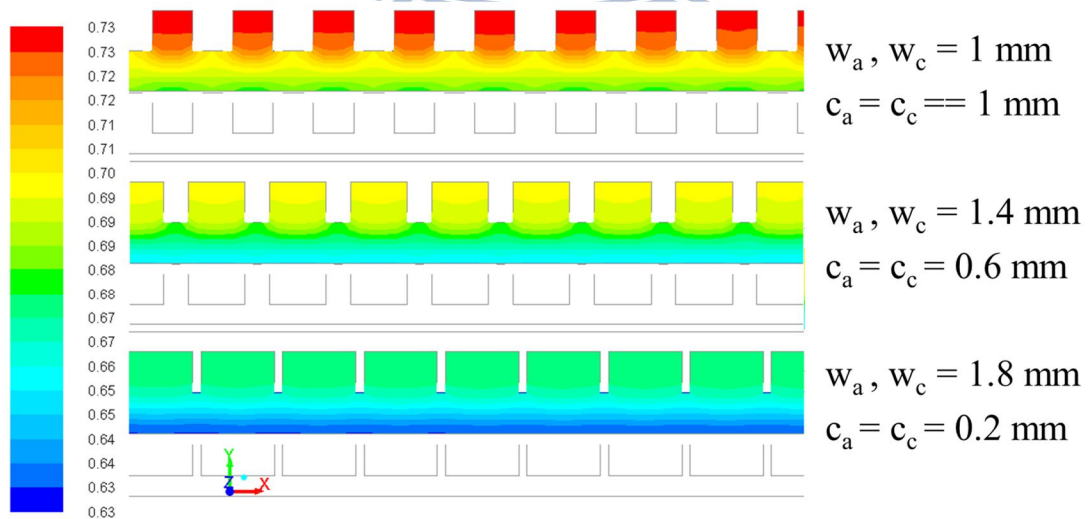


圖(4- 14) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電解質表面氧氣分佈( $O_2$  mole fraction)，0.6V

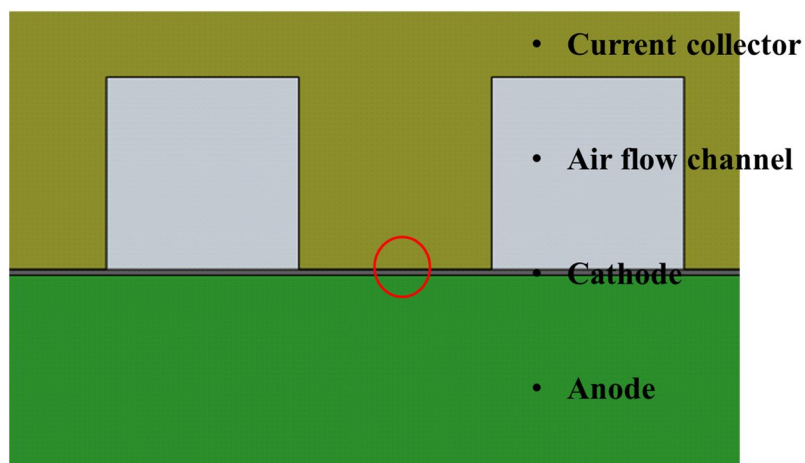




圖(4- 15) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：電解質表面氫氣分佈( $H_2$  mole fraction)，0.8V



圖(4- 16) 燃料側與空氣側流道寬度和雙極板接觸寬度影響：切面氫氣分佈( $H_2$  mole fraction)，0.8V



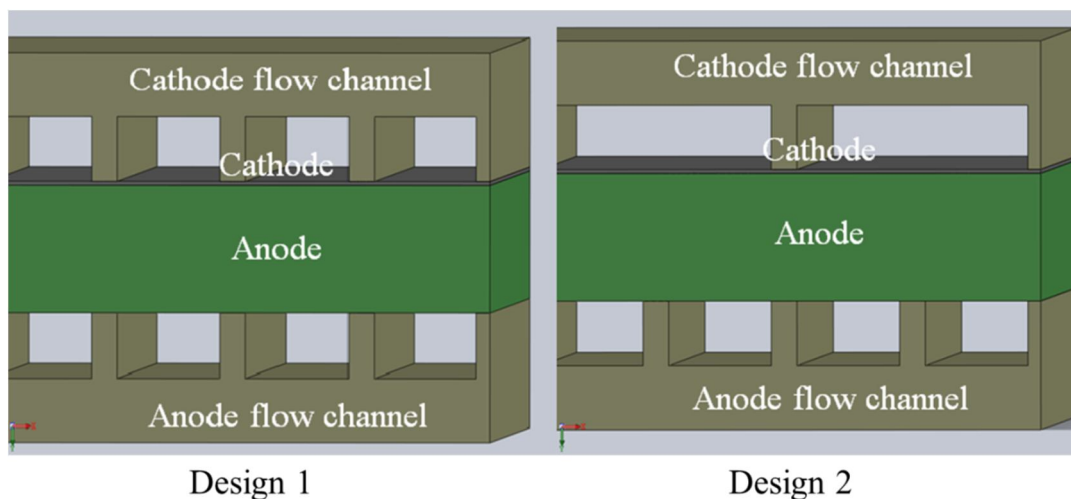
圖(4-17) 空氣側流道寬度與雙極板接觸寬度結構示意圖，紅色圈圖示意氣體難以擴散到的位置

#### 4.2.3 針對空氣側流道影響分析

根據前述分析，發現雙極板的設計在空氣側流道的影響是明顯比較顯著的，對此本研究做了更深入的分析。我們設計了兩種流道來做測試。在同樣雙極板接觸寬度下，Design 1 為空氣側流道寬度與燃料側流道寬度相同，Design 2 則是空氣側流道寬度約為燃料側流道寬度的兩倍。觀察當雙極板與電池接觸寬度極小化後，流道寬度對性能的影響。其改變參數與模型如下表(4-8)、圖(4-18)所示。

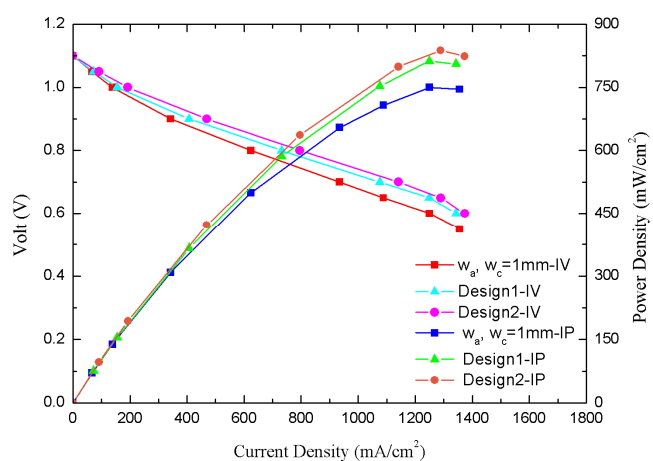
	參數	原尺寸	改變尺寸
<b>Design 1</b>	$w_a, w_c$	1 mm	0.8 mm
	$h_a, h_c$	1 mm	0.5 mm
	$c_a, c_c$	1 mm	0.2 mm
<b>Design 2</b>	$w_a$	1 mm	0.8 mm
	$w_c$	1 mm	1.8 mm
	$h_a, h_c$	1 mm	0.5 mm
	$c_a, c_c$	1 mm	0.2 mm

表(4-8) 針對空氣側流道影響分析參數設定



圖(4-18) 針對空氣側流道影響分析模型示意圖

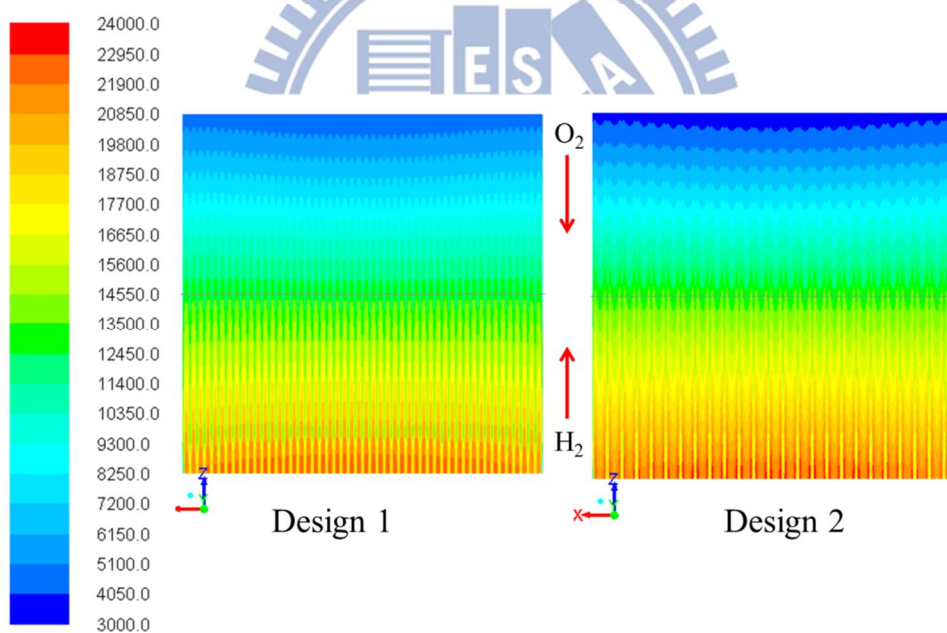
結果可發現，雙極板的接觸是確實影響電池效率的。流道寬度越大，減少雙極板接觸面積可讓氧氣越容易進入電解質層，使得效率和燃料使用率都能提高，均勻性也更好。如圖(4-19)到圖(4-22)、表(4-9)所示。其中 Design 2 比 Design 1 提高了約 3% 的發電效率，此兩種設計甚至還要比原本 1 mm 的流道寬度與接觸寬度設計提高了 8% 以上的發電效率。



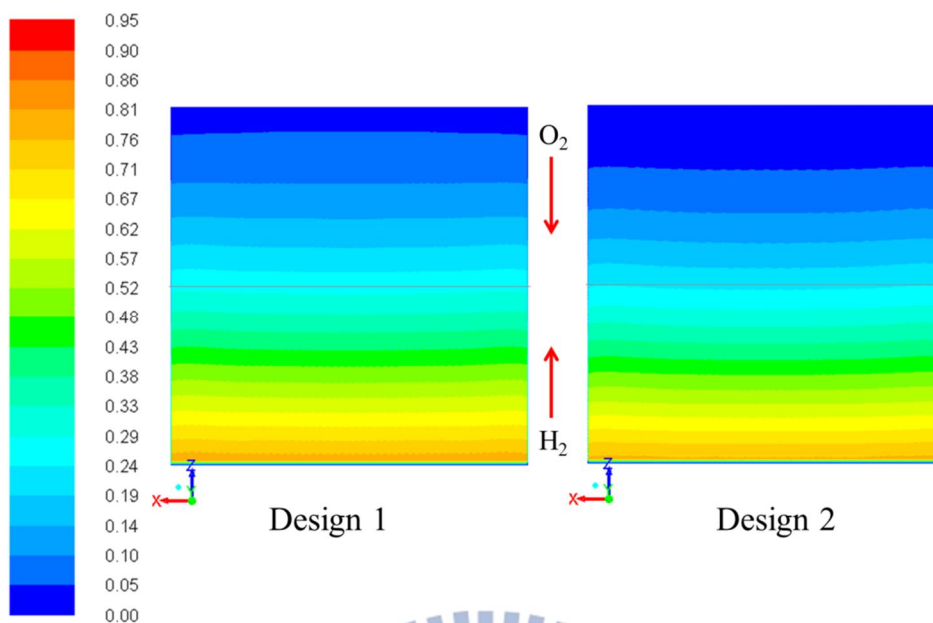
圖(4-19) 針對空氣側流道寬度影響：I-V 曲線圖

參數		尺寸	Max power density ( $\text{mW}/\text{cm}^2$ )
$w_a \& w_c$		1 mm	752.2
$h_a \& h_c$		1 mm	
$c_a \& c_c$		1 mm	
Design1	$w_a \& w_c$	0.8 mm	812.3 (8%)
	$h_a \& h_c$	0.5 mm	
	$c_a \& c_c$	0.2 mm	
Design2	$w_a$	0.8 mm	838.2 (11.4%)
	$w_c$	1.8 mm	
	$h_a \& h_c$	0.5 mm	
	$c_a \& c_c$	0.2 mm	

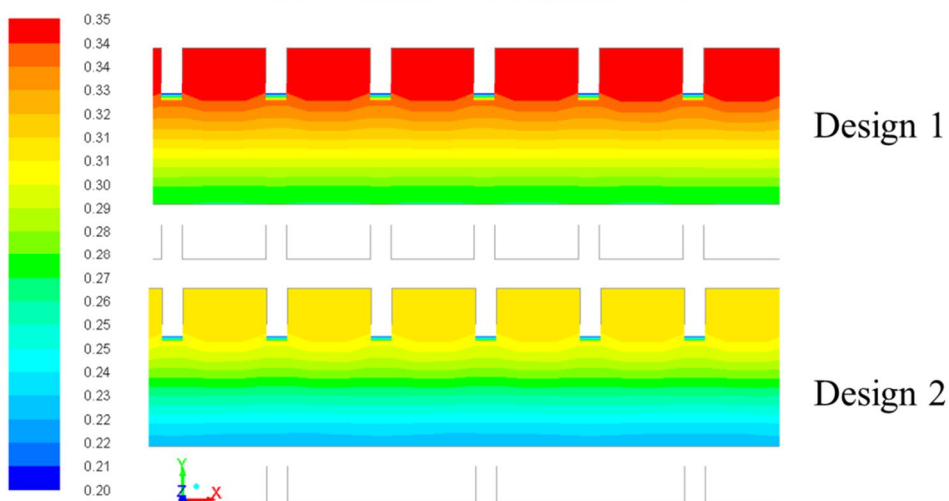
表(4- 9) 針對空氣側流道寬度影響：最大能量密度(max power density)



圖(4- 20) 針對空氣側流道影響：電流密度(Current density,  $\text{A}/\text{m}^2$ )，0.65V



圖(4- 21) 針對空氣側流道寬度影響：電解質氫氣分佈( $H_2$  mole fraction)，0.65V



圖(4- 22) 針對空氣側流道寬度影響：切面氫氣分佈( $H_2$  mole fraction)，0.65V

### 4.3 單電池前後流道設計改善與研究

由前述測試可知道，陰極與電流收集板的接觸面積會顯著的影響電池效率。對此我們將空氣側流道以網狀材料或其他多孔性材料取代。這除了可以減少電流收集板大範圍的接觸覆蓋於陰極面上的面積讓空氣更容易進入陰極反應外，在結構上也更為簡單且更有彈性，可減少應力集中的問題。但此種設計在流場分佈上因為沒有流道整流，在邊界上會有一點不均勻分佈。其中，多孔性材料電流收集板孔隙率設為 0.6，黏滯阻抗為  $1 \times 10^6 \text{ l/m}^2$ 。而在陽極側流道方面，流場的均勻性與電流密度分佈的情況息息相關。為使有最好的電池效率與電流密度分佈並減少系統與製作上的複雜度，設計上先選擇採用逆向流設計並以其他方式達到均勻流場的目的。對此本研究分別提出了六角形電池堆與四角形電池堆設計。詳細相關設計將在下面說明。

#### 4.3.1 前後流道設計與網格測試

為簡化電池堆設計與製造成本增加使用便利性，以蜂巢式組合的概念來設計電池堆。設計上，前後流道不使用導流板設計，以流道中間一個入口並往兩邊流動的兩出口方式來增加流場均勻性，以簡化其設計。當以此方式組合時每個角落都可以藉由三組電池堆組合出流道管線，藉此來達到節省材料與增加使用便利性的目的。而本研究也將針對燃料側流道做更進一步的改善分析。

圖(4-23)為空氣側雙極板設計，氣體由其中一角進入通過電池反應後再往兩邊出口，



其中原本的直流道電流收集板設計改以多孔性材料來取代。

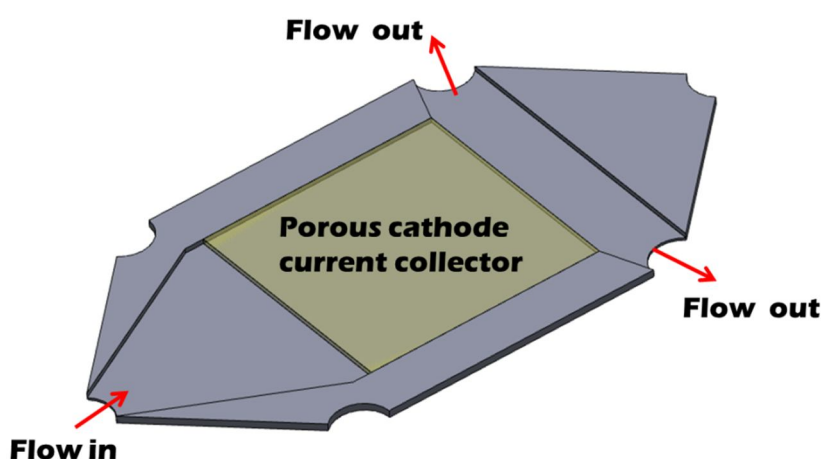
圖(4-24)為燃料側雙極板設計，氣體由其中一角進入通過電池反應後再往兩邊出口出氣，電流收集板以傳統直流道設計。

圖(4-25)為電池堆組合示意圖，燃料與空氣的氣體流場方式為逆向流。

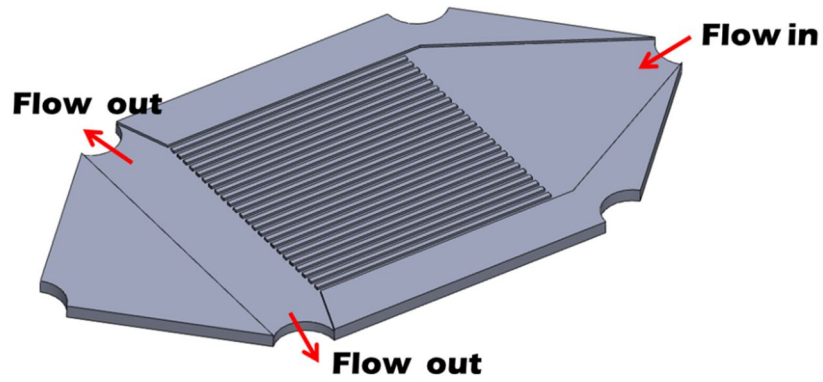
圖(4-26)為電池堆組合剖面圖，空氣側流場方向為進入紙面，燃料側流場方向為出來紙面，燃料側流道高度為 0.5 mm，空氣側流道高度為 1 mm，單電池片包含陽極和陰極為 1.1 mm，電池支架(cell holder)為系統組合時密封電池兩邊氣體用的，於電池外側。

圖(4-27)為多電池堆組合示意圖，類似蜂巢狀組合結構。

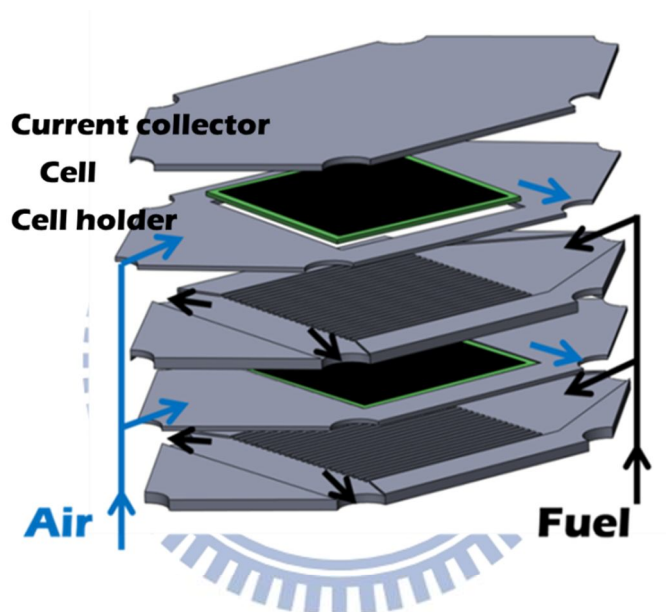
為使數值分析計算更迅速，此部分模型的建構忽略電池堆周圍的模型建置並以邊界條件取代，包含電池支架以及雙極板與電池支架接觸的部分都予以省略。如下圖(4-28)所示。再來針對單電池流道與前後流場網格進行網格測試，使減少模型網格數讓計算更有效率。



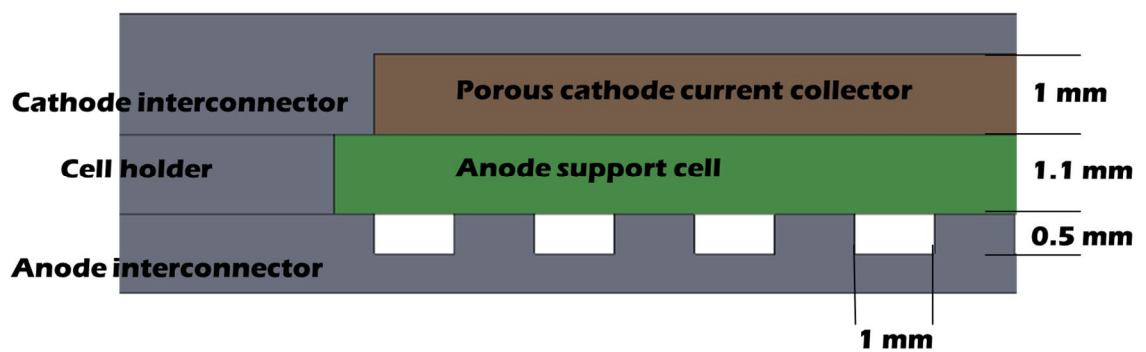
圖(4-23) 空氣側多孔性材料電流收集板流道設計示意圖



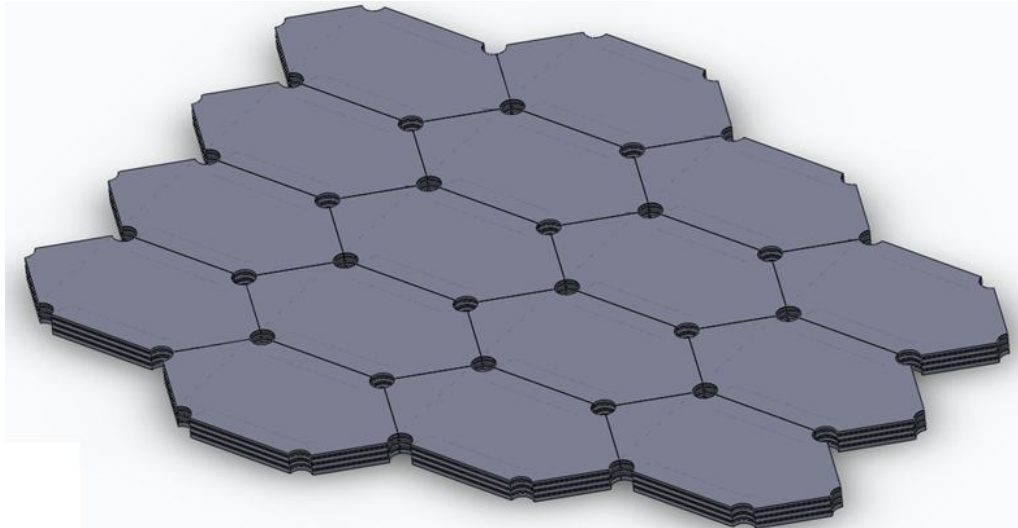
圖(4- 24) 燃料側電流收集板流道設計示意圖



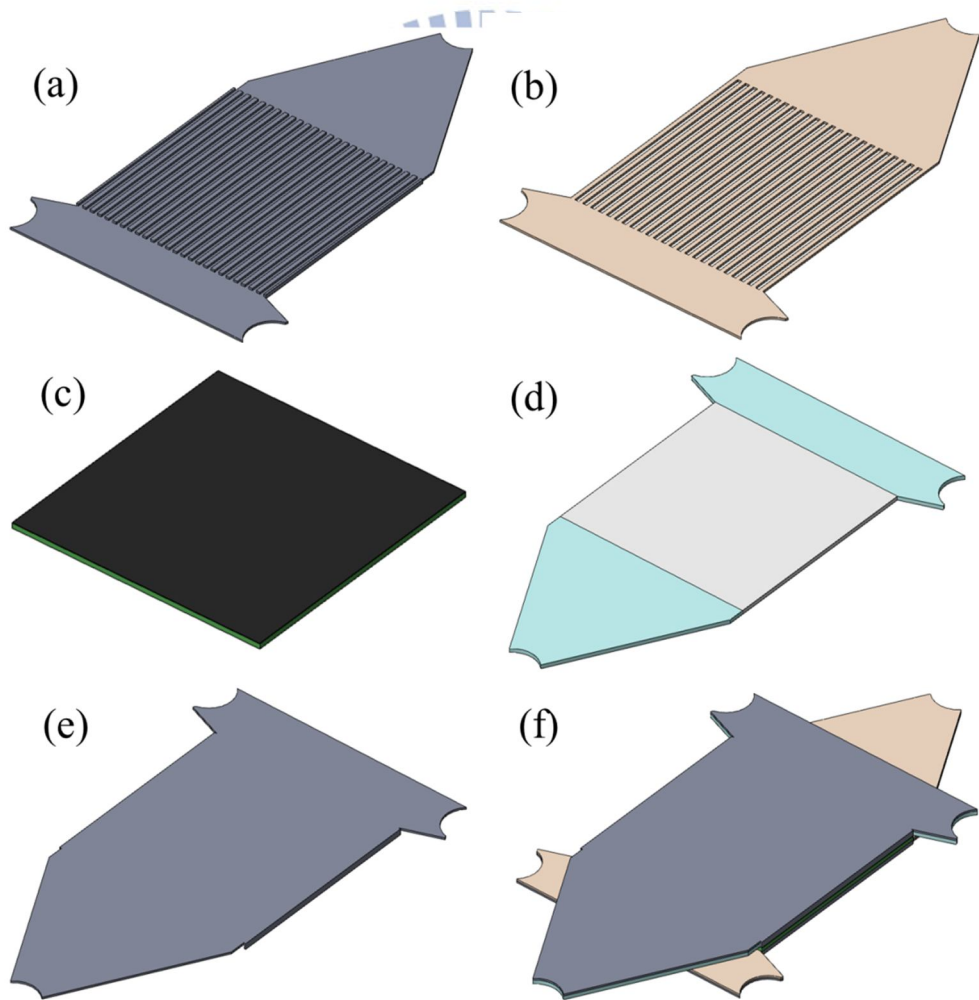
圖(4- 25) 六角形電池堆設計示意圖



圖(4- 26) 單電池組結構剖面示意圖

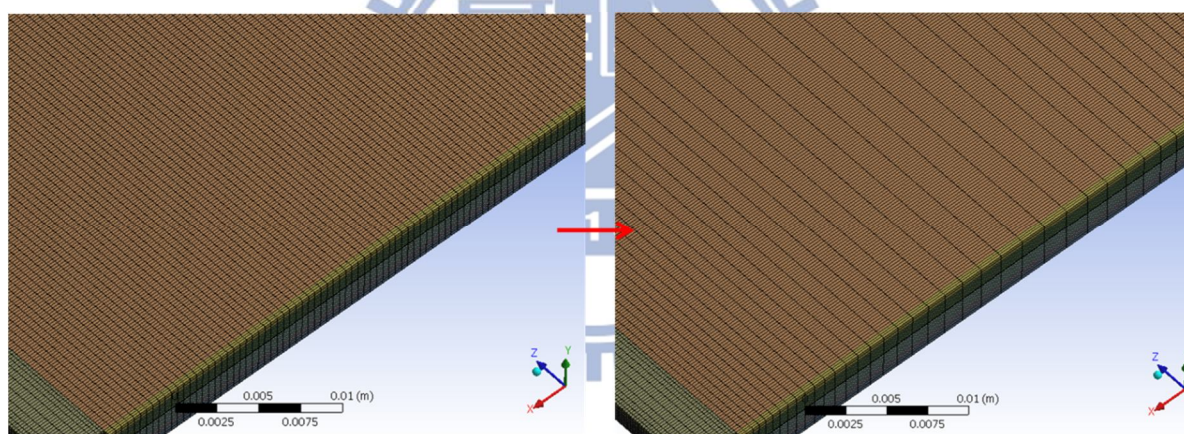


圖(4-27) 六角形多電池堆組合示意圖



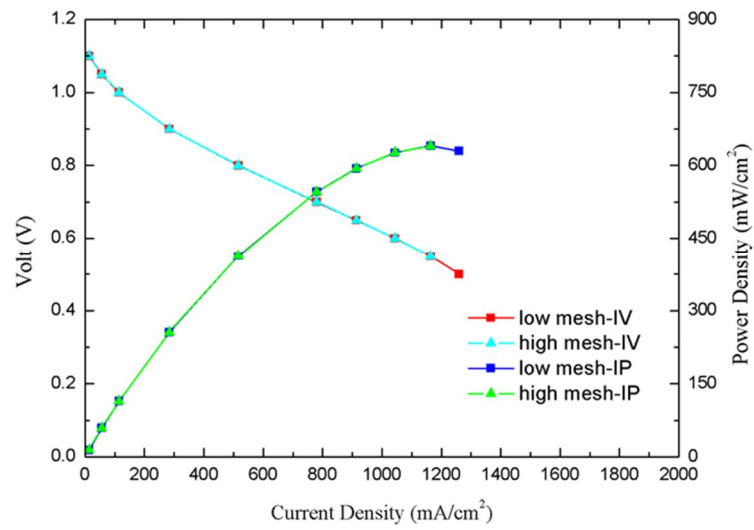
圖(4-28) 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)單電池片 (d)陰極流場 (e)陰極極板 (f)單電池組

網格改善上，由於流道為直線流道，流體為穩定層流，因此本研究將流道前端與後端的網格配置較密，中段網格則較疏，流道高度與寬度的網格數則維持不變，以此方式來縮減網格數。為減少計算時間，測試單電池流道網格，先忽略前後流道的部分。設定上限制流道長度方向網格數量為 50 個，以中間疏兩邊密的方式繪製，其變化係數(Bias factor)為 4，空氣側流道高度切割 5 層，燃料側流道高度切割 3 層，其他網格尺寸繪製上則維持不變。如圖(4-29)，其單電池模型總網格數由 609,150 減少為 320,500 個。進行單電池模擬後分別繪製 I-V 曲線，可以發現其結果差異不大，如圖(4-30)所示。下面將繼續使用此設定進行前後流場網格測試。



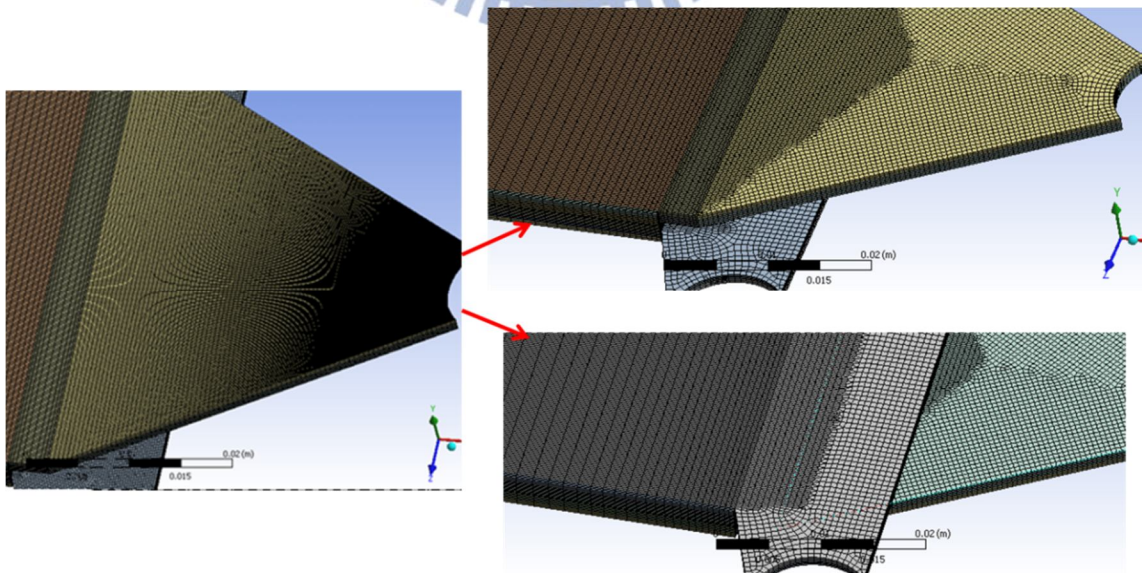
圖(4-29) 直線流道方向網格測試，單電池模型總網格數由 609,150 減少為 320,500 個



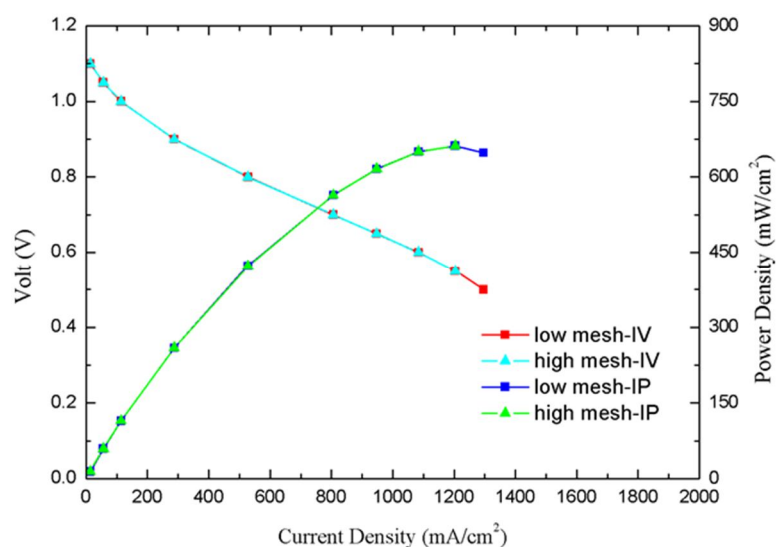


圖(4-30) 直線流道方向網格測試，I-V 曲線

單電池組繪製完成後再繪製前後流場的網格。針對前後流場進行網格測試。將入口處網格放大，接近直線流道入口則維持同樣大小，如圖(4-31)。其單電池模型總網格數由 782,388 減少為 433,262 個。分別繪製 I-V 曲線後，如圖(4-32)，確認結果誤差不大。再來將以此設定進行後續分析。



圖(4-31) 前後流道網格測試，單電池模型總網格數由 782,388 減少為 433,262 個



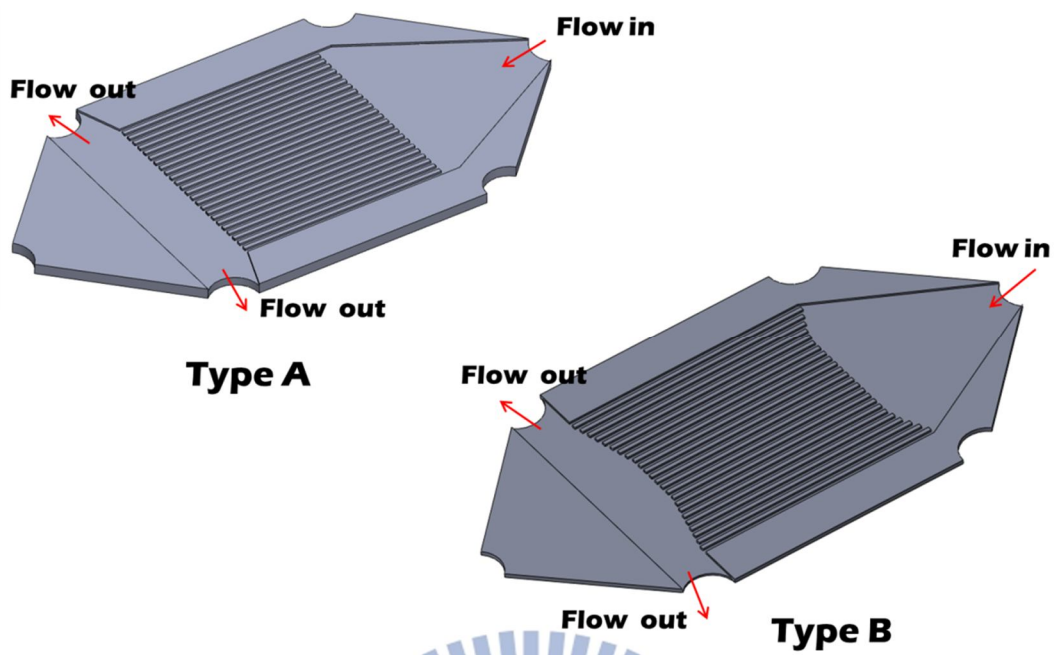
圖(4-32) 前後流道網格測試，I-V 曲線

#### 4.3.2 前後流道設計與流場均勻性影響分析

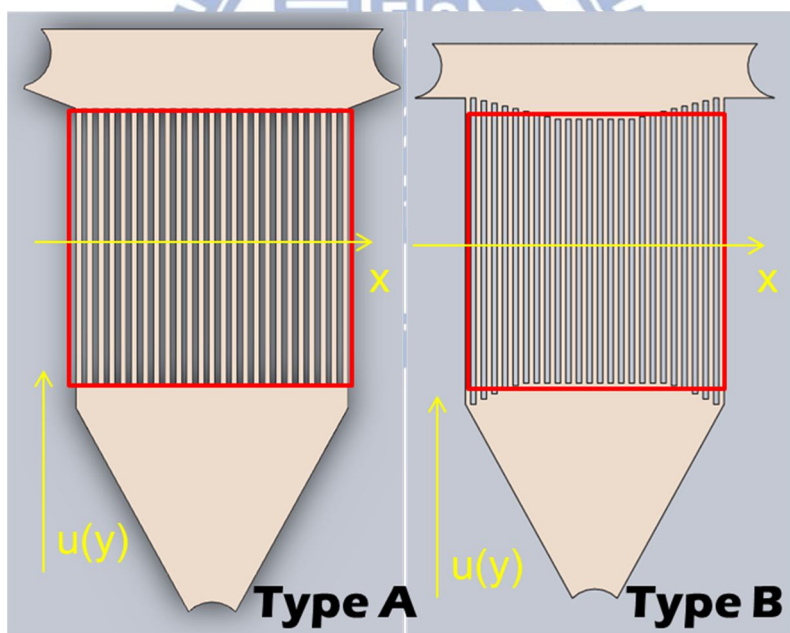
根據前述設計，本研究進行了初步的模擬分析後發現，因為流場無前後導流板設計，原設計的燃料側流場會有兩側的速度較中央快速的不均勻現象。針對此部分，本研究修改了直線流道的設計，加長兩側流道長度使流場更趨於均勻，確認其影響。如圖(4-33)所示，原設計為 Type A，改善流場均勻度的設計為 Type B。

而設計上為節省流道設計時間，針對流道均勻性先以純流場進行模擬分析，並依據各個流道中間的流量，繪製流量分佈圖。如圖(4-34)為 Type A 與 Type B 兩種流道設計的流場示意圖，紅色方框為電池片的接觸區域。圖(4-35) 為 Type A 與 Type B 的流量分佈圖，由結果可發現，Type B 的設計可以有效改善流場均勻性，而此方式在製作上也比在前後流場增加導流板的設計更為簡易。

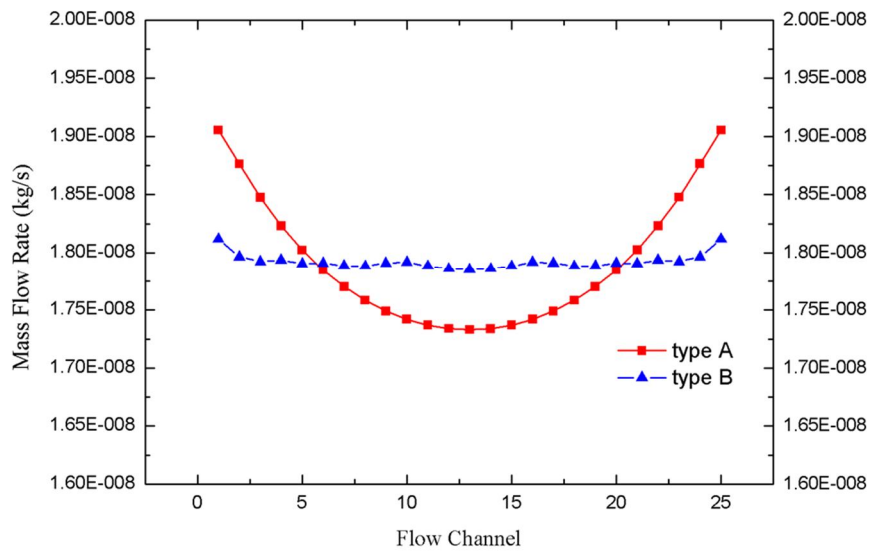




圖(4-33) 六角形多電池堆組合示意圖



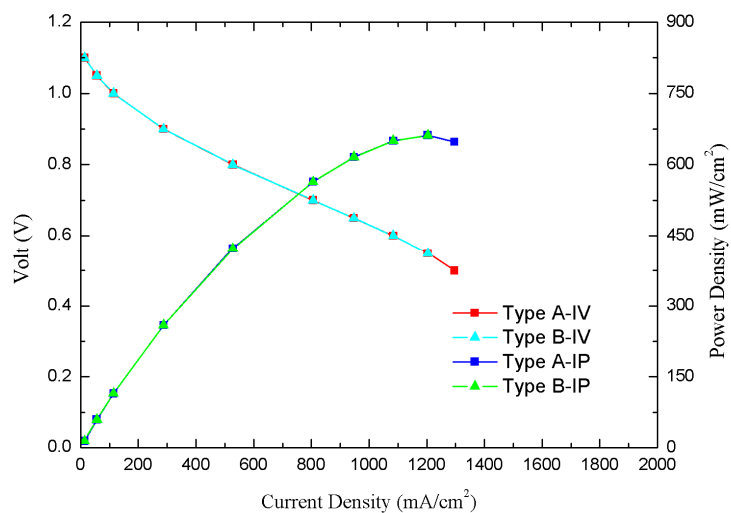
圖(4-34) 流量分佈選擇面示意圖



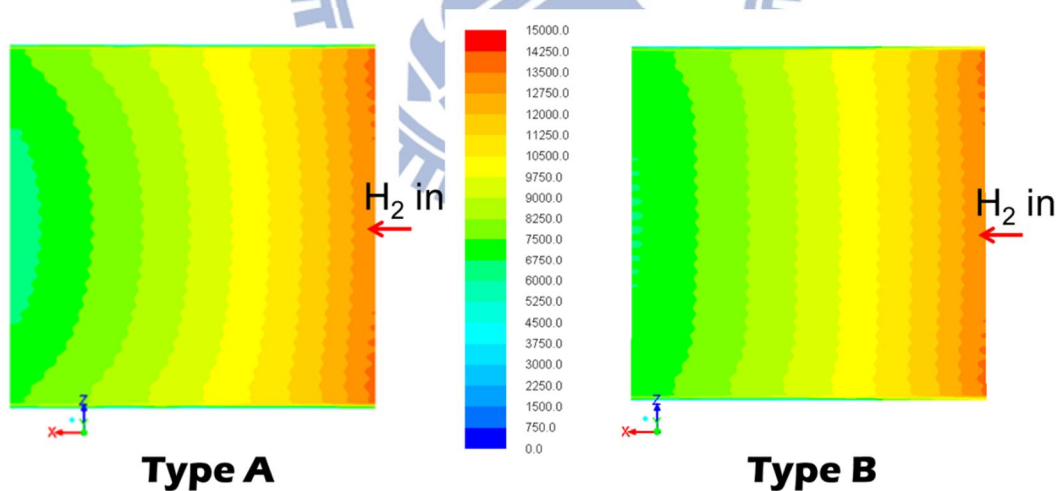
圖(4-35) Type A 與 Type B 流量分佈圖

確認流場的均勻性後，再進行了此兩種設計的單電池模擬分析。在 I-V 曲線上，圖(4-36)，發現 Type A 與 Type B 的發電效率幾乎相同，但觀察電流密度分佈與氫氣分佈，圖(4-37)、圖(4-38)，仍可明顯看到 Type B 的設計其分佈是較為均勻的。推測其原因，在於兩種類型的空氣側流道設計採用的都是多孔隙電流收集板，流場上都是中間快而接近邊界處的兩邊較慢，如圖(4-39)。由於這部分是固定的，根據前述幾何尺寸的流場測試知道空氣與陰極接觸的反應面積是影響電池效率的重點。因此我們可以推測，在相同空氣側流道條件且燃料流量也是固定的情況下，只改變燃料側流場的均勻度並不一定會提高電池效率。而這並不與前述參考文獻相衝突，因參考文獻所做的研究都是空氣側流道與燃料側流道一起改變的。此情況較類似於 2008 年 Ping Yuan[31]的研究，電池堆在固定幾何條件且空氣與燃料的總流量不變的條件下，發電效率是幾乎相同的，其影響只

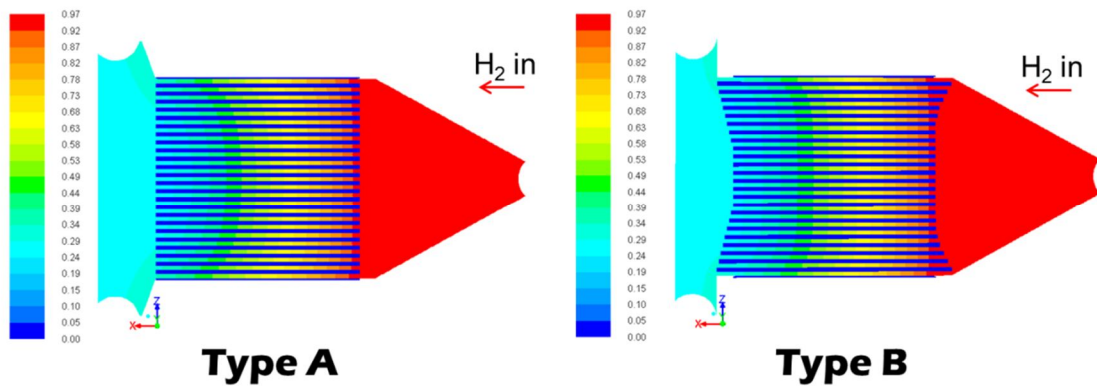
在電壓與溫度的分佈狀況而已。不過考慮電流密度均勻分佈的需求，Type B 的設計仍可列為考量。



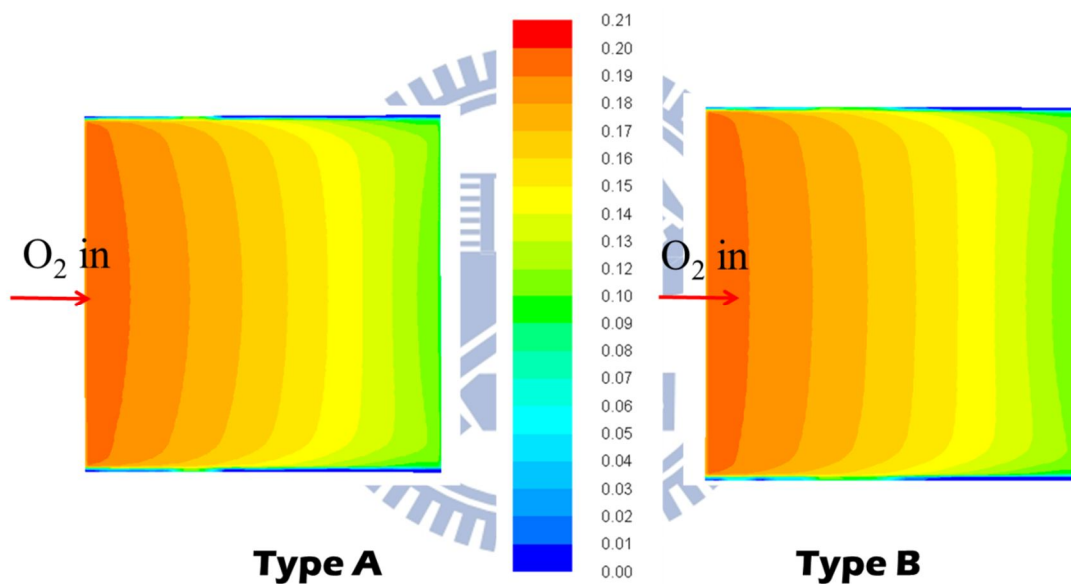
圖(4- 36) Type A 與 Type B 發電效率比較：I-V 曲線圖



圖(4- 37) Type A 與 Type B 電流密度分佈比較(Current density, A/m²)，0.65V



圖(4- 38) Type A 與 Type B 燃料側流道氫氣含量分佈比較( $H_2$  mole fraction) , 065V



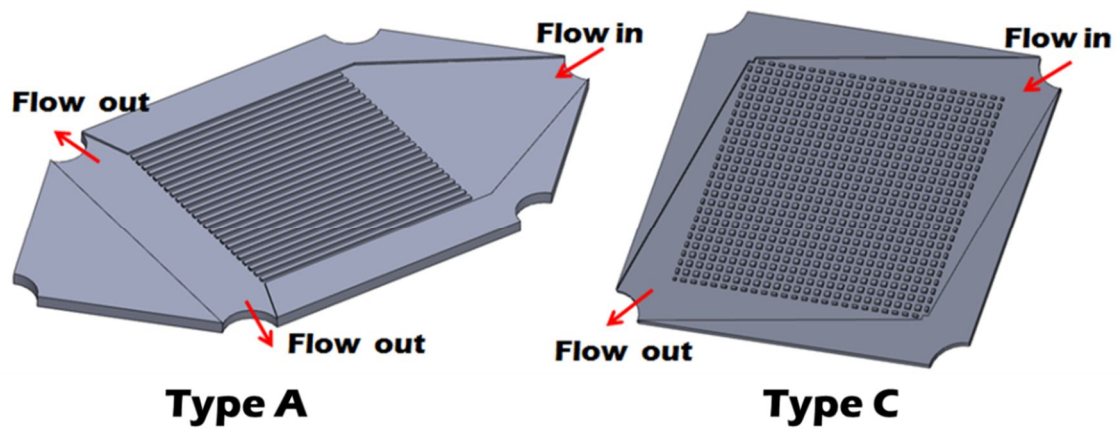
圖(4- 39) Type A 與 Type B 空氣側陰極氧氣含量分佈比較( $O_2$  mole fraction) , 0.65V

### 4.3.3 對角線流場設計影響分析

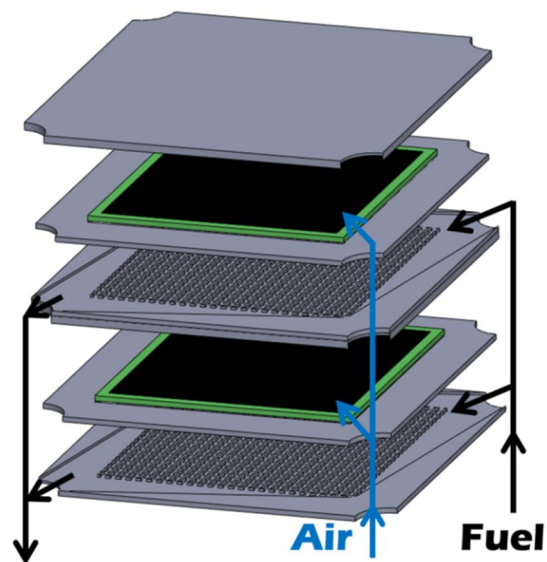
考慮到六角形設計的缺點，此方式仍然耗費過多材料，在多電池堆組合時，非完全對稱性的設計使得一部分電池堆在氣體的進出口部分會相反過來，換句話說本來的二出口會變為二入口，本來的一入口會變為一出口，這對電池堆的發電性能也許會有影響。針對此部分，本研究設計出了新的全對稱雙極板設計，並針對此設計作分析比較。如圖(4-40)所示，新設計為 Type C，此為正方形雙極板設計，如同前述設計概念，可將多電池堆互相組合，每個角落皆由四組電池堆組合出流道管線，而此形狀除了使用材料較少，管線數也更少。流場方向是由雙極板的其中一個角落以對角線方向朝另一角落的出口前進。在電池片的放置方向上，其電池片的對角線也同樣與雙極板對角線的相同方向放置。燃料側流道設計則為棋盤狀結構，這是為了讓燃料氣體能夠更容易的在內部混合流動。而空氣側流道維持原來的多孔隙電流收集板設計，由另一個角落進入。其設計上有點類似交錯流，也因此可以節省不少空間的使用。圖(4-41)為此設計的電池堆示意圖。

在模型建構上，如同前述方式，忽略電池堆周圍的模型建置並以邊界條件取代，如下圖(4-42)所示，並與 Type A 進行比較分析。

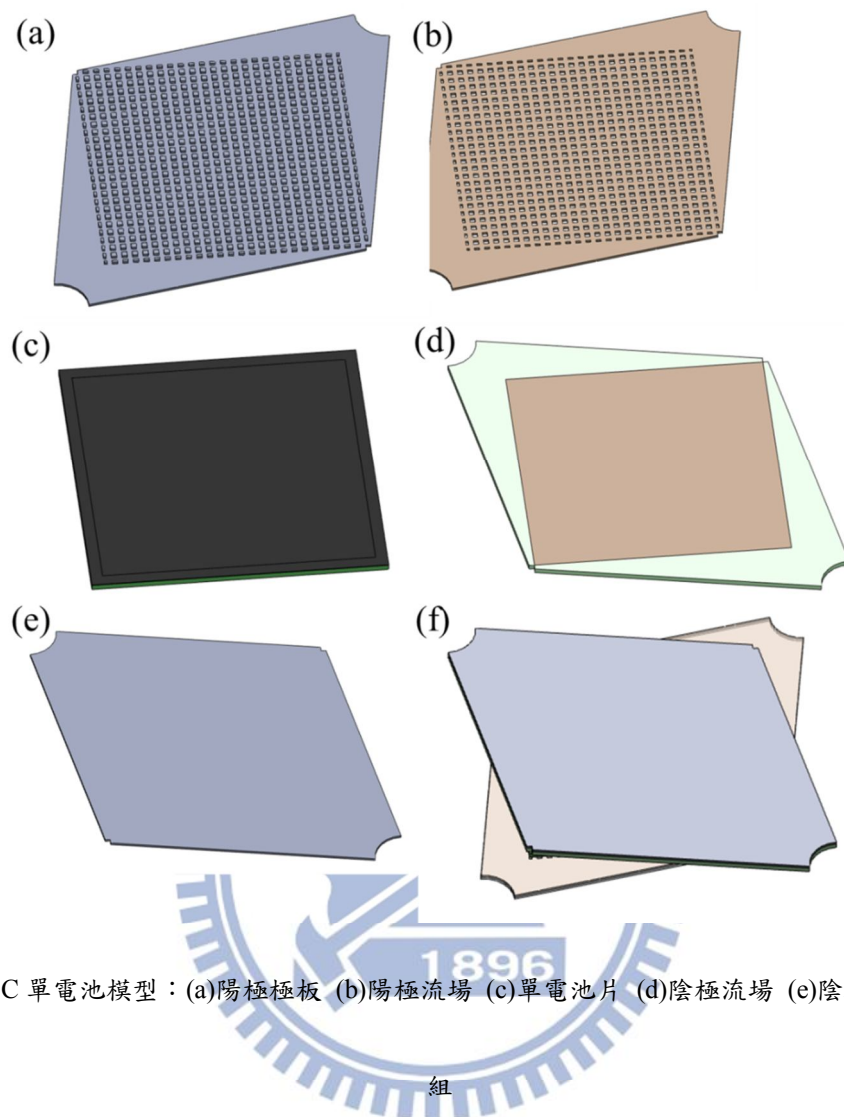




圖(4- 40) 六角形與正方形燃料側雙極板設計示意圖



圖(4- 41) 正方形電池堆設計示意圖



圖(4- 42) Type C 單電池模型：(a)陽極極板 (b)陽極流場 (c)單電池片 (d)陰極流場 (e)陰極極板 (f)單電池

進行單電池模擬分析後發現，Type C 的發電效率可比 Type A 提高約 12%的效率，如圖(4-43)、表(4-10)所示。觀察電流密度分佈，圖(4-44)，也能發現此對角線流場的設計可以有效增加電流密度。觀察氫氣與氧氣分佈，圖(4-45)、圖(4-46)，都能明顯發現燃料使用率的提高，在氫氣分佈上有一部份區域甚至出現氫氣幾乎用完的狀況。對此，本研究計算了兩種設計詳細的燃料使用率。藉由電池堆空氣入口與出口所減少的量可以計算出氧氣的消耗量，再藉此換算出氫氣消耗量。使用公式：

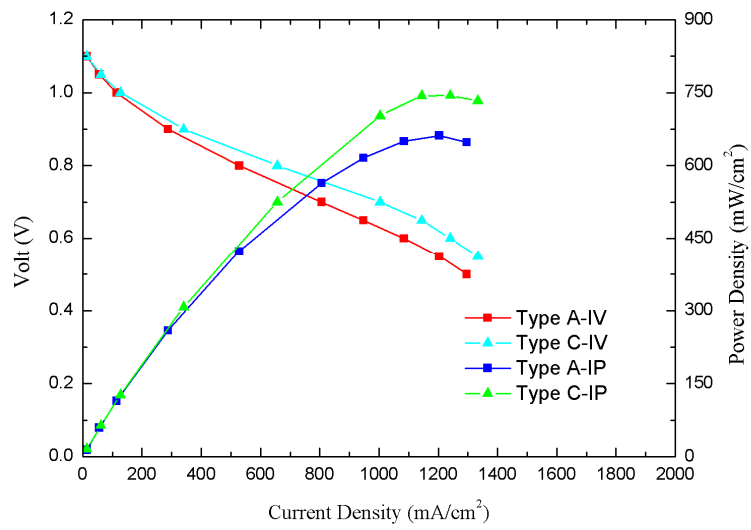
$$\text{Fuel utilization} = \left(1 - \frac{\text{fuel out}}{\text{fuel in}}\right) \times 100\%$$

我們可以得到更精確的燃料使用率數值。經計算，在電壓同樣為 0.65V 的情況下，Type C 的燃料使用率比 Type A 的燃料使用率高出約 14.6%，表(4-11)。

推測其原因在於此種設計不僅僅是單純的交錯流場，也可看作是逆向流與同向流的混合體。而在空氣側流場的氧氣分佈上，可發現在 Type C 的設計中大部分空氣都能與陰極接觸反應，受邊界降低流速的影響較小。但在 Type A 的設計中，陰極非進出口方向的邊界處流場，受到雙極板流道邊界的影響有流速較慢的現象，比較之下，Type C 陰極的整體氧氣濃度是會較 Type A 來的高的。這些原因都提高了新設計的發電效率與燃料使用率。

在壓降分佈上，圖(4-47)，可看到兩種類型的最大壓降是差不多的，這也代表 Type C 在輸入氣體時並不會耗費較多的能量。

在溫度分佈上，圖(4-48)，Type A 的最大溫度差約 13.5 度，Type C 的最大溫度差約 22.6 度。Type C 的溫度差較大，這對未來電池堆的結構可能會有不良影響，不過這部分還有許多改善空間，像是可針對邊界條件或幾何外觀再做改善，電池片的形狀也可設計成圓角的方形電池片，甚至操作上可以藉由控制的方式讓氣體進出口可以在電池操作一段時間後調換，藉此改變溫度分佈。



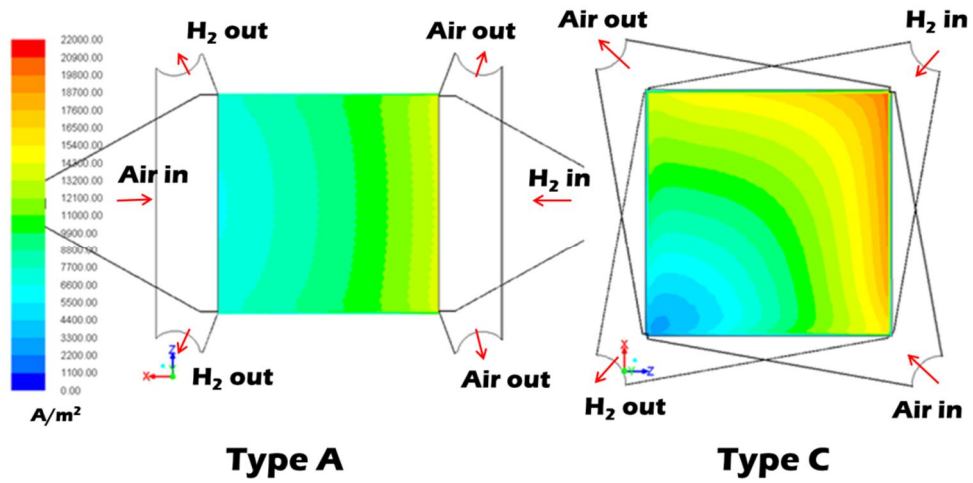
圖(4- 43) Type A 與 Type C 發電效率比較：I-V 曲線圖

類型	Max power density (mW/cm <sup>2</sup> )
Type A	662.2
Type C	744.5 (12%)

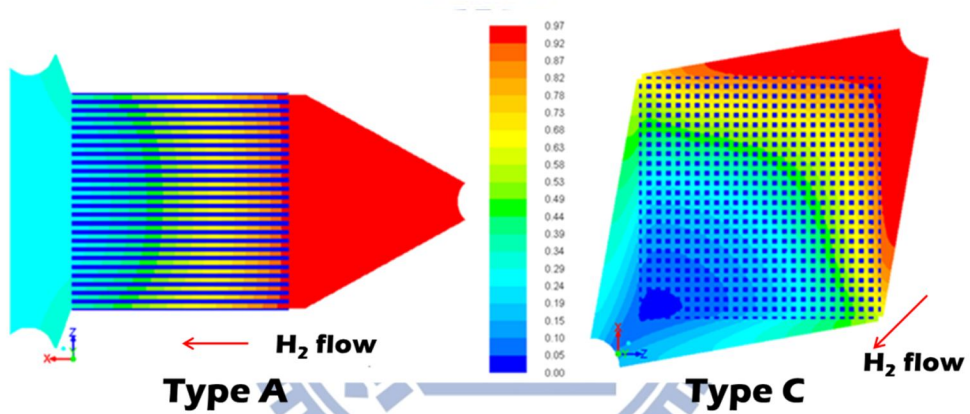
表(4- 10) Type A 與 Type C 比較：最大能量密度(max power density)，0.65V

類型	燃料使用率 (Fuel utilization)
Type A	70 %
Type C	84.6 %

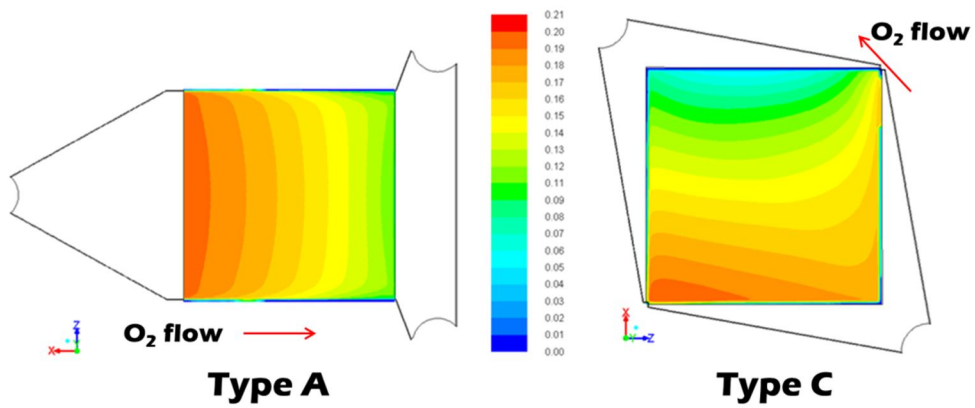
表(4- 11) Type A 與 Type C 比較：燃料使用率 (Fuel utilization)，0.65V



圖(4- 44) Type A 與 Type C 電流密度分佈(Current density, A/m<sup>2</sup>) , 0.65V

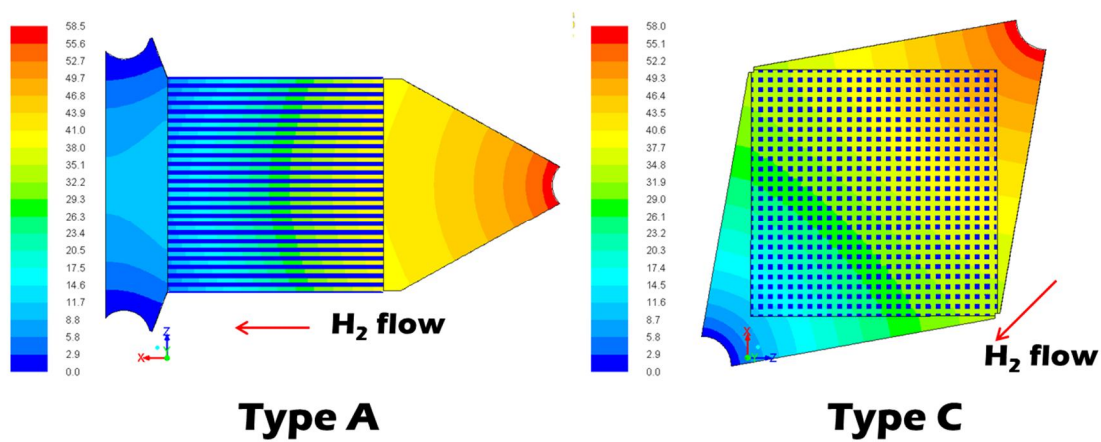


圖(4- 45) Type A 與 Type C 燃料側流場氫氣含量分佈(H<sub>2</sub> mole fraction) , 0.65V

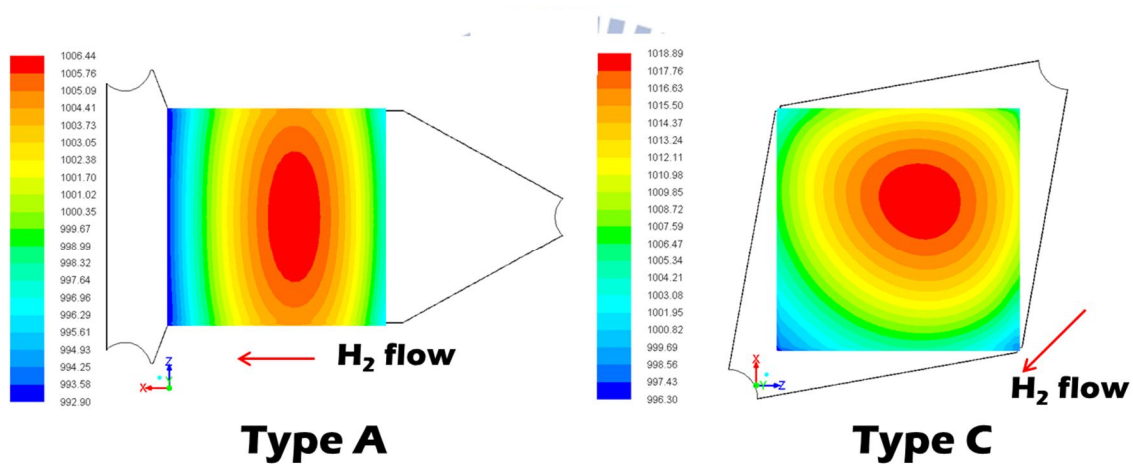


圖(4- 46) Type A 與 Type C 陰極氧氣含量分佈(O<sub>2</sub> mole fraction) , 0.65V





圖(4- 47) Type A 與 Type C 壓降分佈(Pressure distribution, pa) , 0.65V



圖(4- 48) Type A 與 Type C 溫度分佈(Temperature distribution, K) , 0.65V

## 第六章 結論與未來展望

### 6.1 結論

經過數值分析後發現，在雙極板的設計上，改變空氣側流道的幾何尺寸影響大於燃料側的影響。其原因推測是因為氧氣的擴散性並不向氫氣那麼大，而電池的發電效率與氫氣在陽極的濃度和氧氣在陰極的濃度有很大的關係，兩邊濃度越高電流密度也就越大。但在陰極厚度很薄的情況下，傳統直流道電流收集板與陰極的接觸使得空氣擴散至電解質層又更為不易。因此本研究以多孔隙材料來取代傳統的直流道，使空氣能夠更容易擴散至電解質層。

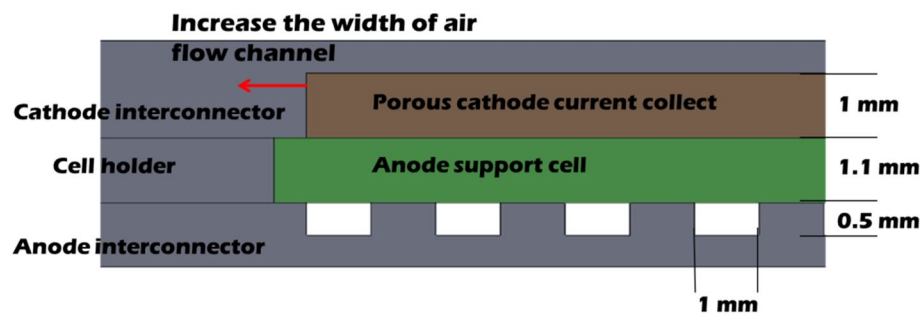
而在傳統逆向流場，為使流場均勻，本研究以加長兩側流速較快的流道來驅使流場變得均勻，這比起增設前後導流板或改變流道寬度是更為簡易的設計。但在 Type A 與 Type B 的比較中有相同的空氣側流場設計，因為空氣側流道並無設計導流板，這導致了空氣側流場在靠近邊界處速度較慢氧氣濃度較低的影響，而這也是影響電池總體效率的主因，所以即使改變了燃料側流場的均勻度，對電池片來說也不一定能有效提高電池效率，但對電流密度的分佈是確實有改善的。

再進一步改善設計後，本研究設計了一種全新的方式，以對角線流場來設計電池堆。這不僅改善傳統交錯流效率不佳的缺點，還能有交錯流電池堆才能有的簡易組裝製造的外型，其空氣側流道的設計更能改善空氣在電池邊界處流量較少的缺點。是充分符合電池效率高、燃料使用率高、減少材料成本、製作與組裝簡單等等優點的一種設計。其發電效率比傳統的逆向流場設計提升了 12%，燃料使用率更提升了 14.6%。

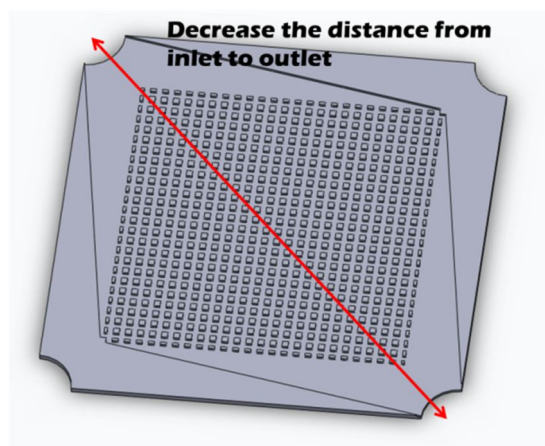
## 6.2 未來工作

在 Type A 與 Type B 的設計中，由於空氣側流道的設計相同，使得電池總體的效率是幾乎一樣的。而此設計中空氣受邊界影響使得電池兩側的氧氣流量較低，對此若要進一步分析可以將空氣側的流道寬度加寬，使降低邊界的影響讓空氣側流場能更均勻分佈，藉此提高空氣與陰極的接觸面積來提升發電效率，如圖(6-1)所示。

在 Type C 的設計中，我們可發現氫氣有提早用完的現象，而電池兩邊角落的氫氣仍然還有剩。對此我們可以針對這部分嘗試再進行幾何尺寸的設計改善，縮短進出口之間的距離，強迫較多的氫氣往中間對角線移動，藉此提高燃料使用率，如圖(6-2)所示。



圖(6-1) 空氣側流道加寬示意圖



圖(6-2) 縮短 Type C 設計進出口之間的距離示意圖

## 參考文獻

- (1) William J. Sembler, Sunil Kumar, Modification of Results From Computational-Fluid-Dynamics Simulation of Single-Cell Solid-Oxide Fuel Cell to Estimate Multicell Stack Performance, *Journal of Fuel Cell Science and Technology* vol.8 (2011).
- (2) 台灣經濟部能源局, 中華民國 99 年能源統計手冊 (2011) 11.
- (3) US Govt, NOAA (<http://www.esrl.noaa.gov/gmd/aggi/>) (2011).
- (4) 台灣行政院環境保護署, 溫室氣體排放統計 (2010).
- (5) 毛宗強, 氫能-21 世紀的綠色能源 (2008).
- (6) 黃鎮江, 燃料電池(第三版), 全華圖書公司 (2008).
- (7) 工研院 IEK-ITIS 計畫 (2005).
- (8) Science@NASA Headline News, Cool Fuel Cells (2003).
- (9) 行政院原子能委員會核能研究所, 固態氧化物燃料電池研習會論文集 (2009) 66.
- (10) Weber, A, Ivers-Tiffée, E, Materials and concepts for solid oxide fuel cells (SOFCs) in stationary and mobile applications, *Journal of Power Sources* 127 (2004) 273-283.
- (11) Kang Wang, Ran Ran, Yong Hao, Zongping Shao, Wanqin Jin, Nanping Xu, A high-performance no-chamber fuel cell operated on ethanol flame, *Journal of Power Sources* 177 (2008) 33-39.
- (12) Melanie Kuhn, Teko W. Napporn, Single-Chamber Solid Oxide Fuel Cell Technology—From Its Origins to Today's State of the Art, *ENERGIES* 3 (2010) 57-134.
- (13) I. Riess, On the single chamber solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources* 175 (2008) 325–337.
- (14) Subhash C Singhal, Kevin Kendall, High Temperature Solid Oxide Fuel Cell: Fundamentals, Design and Applications, Elsevier Ltd (2003).
- (15) C.K. Ashok, E. Singaravelu, US Patent No. 5856035 (1999).
- (16) P.W. Li, S.P. Chen, M.K. Chyu, To achieve the best performance through optimization of gas delivery and current collection in solid oxide fuel cells, *J. Fuel Cell Sci. Technol.* 3 (2) (2006) 188–194.
- (17) George R. King, The Woodlands, TX, US Patent No. US 6656624 B1 (2003).
- (18) K.J. Haltiner, S. Mukerjee, US Patent No. 2007/0248867 A1 (2005).
- (19) Anil Vasudeo Virkar, David W. Prouse, Paul C. Smith, Guang-Young Lin, US Patent No.

- 6770395 B2 (2004).
- (20) Q.M. Nguyen, R.H. Craig, US Patent No. 5290642 (1994).
- (21) Qiuyang Chen, Qiuwang Wang, Jian Zhang, Jinliang Yuan, Effect of bi-layer interconnector design on mass transfer performance in porous anode of solid oxide fuel cells, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54 (2011) 1994–2003.
- (22) Zuopeng Qu, P.V. Aravind, S.Z. Boksteen, N.J.J. Dekker, A.H.H. Janssen, N. Woudstra, A.H.M. Verkooijen, Three-dimensional computational fluid dynamics modeling of anode-supported planar SOFC, *International journal of hydrogen energy* 36 (2011) 10209.
- (23) S. Bedogni, S. Campanari, P. Iora, L. Montelatici, P. Silva, Experimental analysis and modeling for a circular-planar type IT-SOFC, *J. Power Sources* 171 (2) (2007) 617–625.
- (24) U. Bossel, Spirocell: an innovative cell design for low cost SOFC solution, in: *Proceedings of the 8th International Symposium on Solid Oxide Fuel Cells (SOFC VIII)*, The Electrochemical Society Proceedings, Pennington, NJ (2003) 768–775.
- (25) K. P. Recknagle, R. E. Williford, L. A. Chick, D. R. Rector and M. A. Khaleel, Three-dimensional thermo-fluid electrochemical modeling of planar SOFC stacks, *Journal of Power Sources* 113 (2003) 109–114.
- (26) Ping Yuan, Syu-Fang Liu, Numerical Analysis of Temperature and Current Density Distribution of a Planar Solid Oxide Fuel Cell Unit with Nonuniform Inlet Flow, *Numerical Heat Transfer, Part A* (2007), 51: 941–957.
- (27) C. M. Huang, S. S. Shy and C. H. Lee, On flow uniformity in various interconnects and its influence to cell performance of planar SOFC, *Journal of Power Sources* 183 (2008) 205–213.
- (28) Valery A., Danilov, Moses O., Tade, A, CFD-Based Model of a Planar SOFC for Anode Flow Field Design, *International Journal of Hydrogen Energy* 34 (2009) 8998–9006.
- (29) 邱耀平, 施聖洋, 程永能, 顏正和, 中華民國專利 M 273828 (2005).
- (30) Dien Nguyen, Ian Russell, Matthias Gottmann, Deepak Bose, Darren Hickey, Stephen Couse, US Patent No. 2008/0193825 A1 (2008).
- (31) Ping Yuan, Effect of inlet flow maldistribution in the stacking direction on the performance of a solid oxide fuel cell stack, *Journal of Power Sources* 185 (2008) 381–391.



- (32) Michael Pastula, Recent SOFC Developments at Versa Power Systems, Fuel Cell Seminar & Exposition HRD24-4 Pastula (2011).
- (33) Yokoo, M., Tabata, Y., Yoshida, Y., Hayashi, K., Nozaki, Y., Nozawa, K., Arai, H., Highly efficient and durable anode-supported SOFC stack with internal manifold structure, Journal of Power Sources 178 (2008) 59-63.
- (34) Ansys 13.0 user's manual.



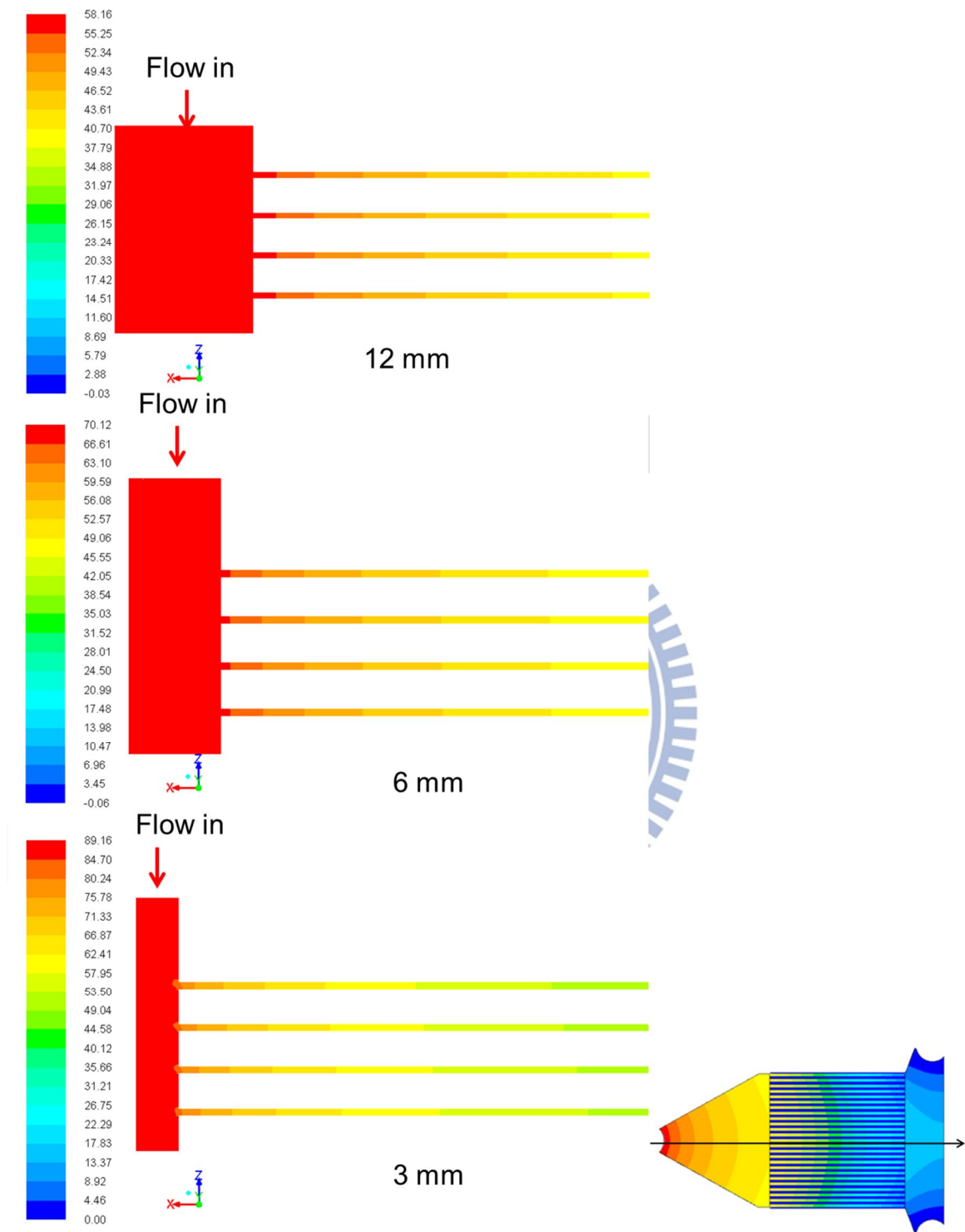
## 附錄

### 附錄 A

如圖(A-1)所示，為 4 組單電池所組合的電池堆氣體入口切面壓降分佈圖，分別進行入口直徑 12 mm、6 mm、3 mm 的純流場模擬分析。可以明顯看到入口直徑越大，壓降分佈會越平均。分析其流量分佈，表(A-1)，將單電池組由上而下依序編號，可以看到入口直徑越大，其每個單電池組的流量越相近，也就是電池堆的流場越均勻。

入口直徑	單電池組	mass flow rate (標準=4.48E-07 kg/s)	差值百分比
12 mm	1	4.47959E-07	-0.0091%
	2	4.47983E-07	-0.0037%
	3	4.47974E-07	-0.0057%
	4	4.47973E-07	-0.0060%
6 mm	1	4.47936E-07	-0.0142%
	2	4.47978E-07	-0.0050%
	3	4.47966E-07	-0.0075%
	4	4.4801E-07	0.0022%
3 mm	1	4.48645E-07	0.1440%
	2	4.47187E-07	-0.1814%
	3	4.47393E-07	-0.1354%
	4	4.48664E-07	0.1483%

表(A- 1) 電池堆不同氣體入口直徑於各單電池組流量分佈

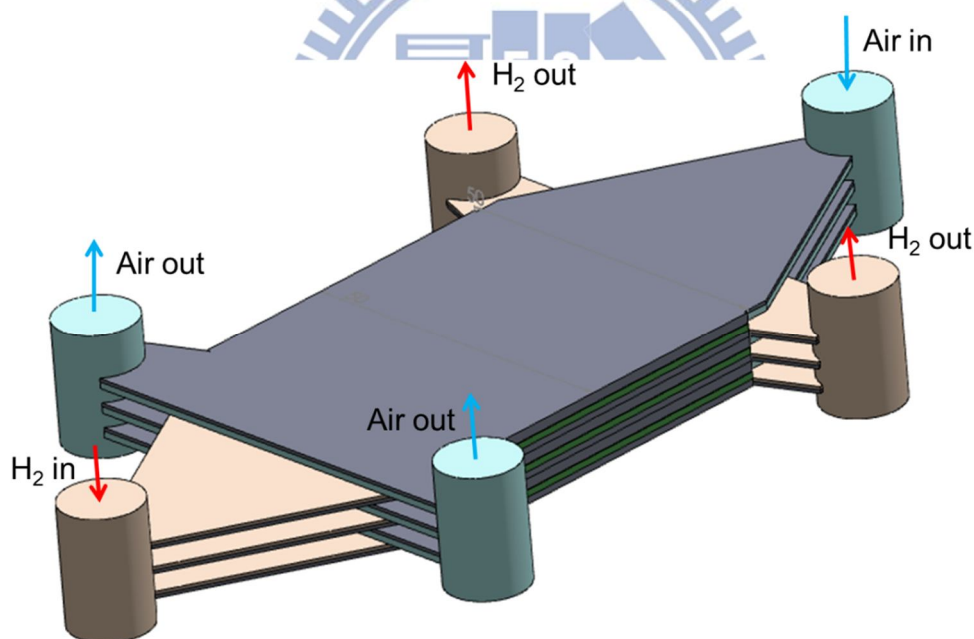


圖(A- 1) 電池堆不同氣體流道入口直徑切面壓降分佈比較

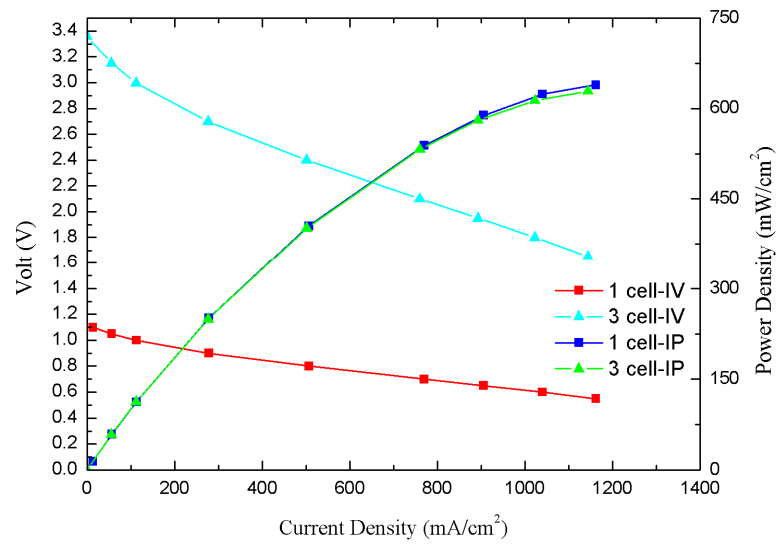
## 附錄 B

為確認包含前後流場的電池堆可否先以單電池組進行模擬預估，進行 3 單電池組的電池堆模擬分析。由於電池堆為 3 單電池組組成，電池堆入口流量為單電池組的 3 倍，其他邊界條件則一樣，其模型如下圖(B-1)所示。

分析後發現，單電池與多電池堆在 I-V 曲線的電池平均能量密度上大致吻合，圖(B-4)。觀察電池堆的氫氣分佈狀況也發現其分佈上是均勻的，圖(B-3)。因此，我們為節省計算時間，先對單電池組進行設計分析是可行的方法。



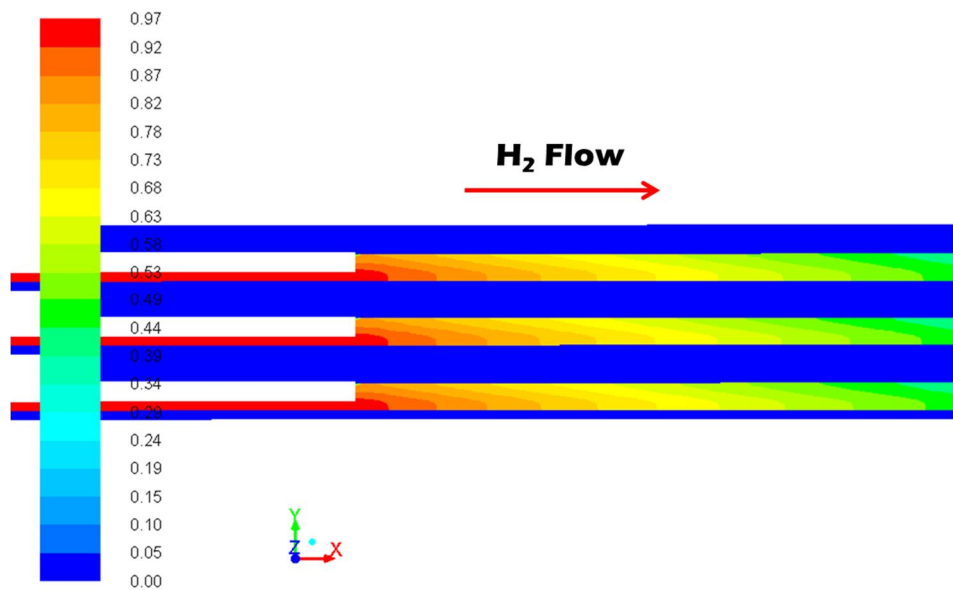
圖(B- 1) 3 電池組電池堆模型



圖(B- 2) 單電池與 3 電池組電池堆 I-V 曲線比較

類型	Max power density (mW/cm <sup>2</sup> )
1 Cell	629
3 Cell	639.1 (1.5%)

表(B- 1) 單電池與 3 電池組電池堆最大能量密度(max power density)比較



圖(B- 3) 3 電池組電池堆氫氣截面分佈(H<sub>2</sub> mole fraction) , 1.95V