

國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

陰極蛇形流道中擋板位置對質子交換膜燃料電池性能之影響



Effects of baffle location on the performance of PEM fuel cell with cathode serpentine flow field

研究生：栢榮祥

指導教授：陳俊勳 教授

曲新生 教授

中華民國九十六年七月

陰極蛇形流道中擋板位置對質子交換膜燃料電池性能  
之影響

Effects of baffle location on the performance of PEM  
fuel cell with cathode serpentine flow field

研究生：柏榮祥

Student：Rung-Shiang Bo

指導教授：陳俊勳、曲新生

Advisor：Chiun-Shinn Chen

Hsin-Sen Chu

國立交通大學

機械工程學系

碩士論文

1896

A Thesis

Submitted to Department of Mechanical Engineering

National Chiao Tung University

In Partial Fulfillment of the Requirements

For the Degree of

Master

In

Mechanical Engineering

July 2007

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十六年七月

# 國立交通大學

## 論文口試委員會審定書

本校 機械工程 學系碩士班 柏榮祥 君

所提論文(中文)陰極蛇形流道中擋板對質子交換膜燃料電池性能  
之影響

(英文)Effect of baffle location on the performance  
Of PEM fuel cell with cathode serpentine flow field

合於碩士資格水準、業經本委員會評審認可。

口試委員：顏維謀 陳俊強

曲新吉

指導教授：陳俊強 曲新吉

系主任：張 教授

中華民國 96 年 7 月 12 日

# 陰極蛇形流道中擋板位置對質子交換膜燃料電池性能之影響

研究生：柏榮祥

指導教授：陳俊勳、曲新生

國立交通大學機械工程學系

## 摘要

本論文係利用計算流體力學軟體 CFDRC 建立燃料電池之三維模型探討蛇形流道在不同位置加入擋板對整體性能影響。流道加入了擋板利用強制對流的方式迫使氧氣強制進入氣體擴散層與觸媒層以增加電池性能與提高剪應力來強化排水。首先針對蛇形流道加入擋板是否能移除水分並提高性能，其次試著在不同位置加入擋板探討對電池性能、氧氣分佈與水分佈的情形，最後改變氣體擴散層滲透率來觀察對多孔層介面的現象

研究得知不同蛇形流道的 I-V 與 P-I 分佈性能優劣為蛇形流道在第一條流道加入擋板(Type I) > 蛇形流道在最後一條流道加入擋板(Type III) > 單蛇形流道(未加擋板設計) > 蛇形流道在第六條流道加入擋板(Type II)。適當位置加入擋板可以提高電池性能，蛇形流道 Type I 的 cross-flow 是提高氧氣進入多孔層的關鍵，所以在第一條流道加入擋板能強化整體的性能提高氧氣的進入多孔層與水的排除。進一步探討不同流率對四種不同流道設計的影響，當流率提高則 cross-flow 越趨明顯使得各流道性能提升。最後改變蛇形流道 Type I 氣體擴散層的滲透率得知提高的滲透率( $1.76 \times 10^{-7}$ )對電池性能較佳，並且排水率、氧氣分佈與壓力梯度較為平緩。

# Effects of baffle location on the performance of PEM fuel cell with cathode serpentine flow field

Student : Rung-Shiang Bo

Advisor : Chiun-Shinn Chen

Hsin-Sen Chu

Department of Mechanical Engineering

National Chiao Tung University

## Abstract

The purpose of this thesis is to establish a three-dimensional computational model of the proton exchange membrane fuel cell .The main object is to investigate the effect of baffle location in the serpentine channel. First, we try to discussion whether baffle can effective remove water to lift the cell efficiency . Second, focusing on the different location of baffle in the channel to discuss the cell performance 、 oxygen concentration and water distribution. Finally we try to change the permeability of gas diffusion layer in order to observe the phenomenon of porous media.

The simulation results that serpentine with baffle will approve the cell efficiency ; the cell performance from good to bad are the first channel with baffle (Type I) > last channel with baffle (Type III) > traditional serpentine channel (without baffle)> the sixth channel with baffle (Type II) . The cross-flow effect approves the first channel with baffle (Type I) when oxygen enters the porous media. Changing the flow rate of four different types serpentine channel that the first channel with baffle still show the best performance of all. Last we try to change the permeability of serpentine channel Type I that higher permeability will approve cell efficiency 、 oxygen concentration 、 the water removal rate and much more distribution stable including the pressure gradient.

## 誌 謝

兩年的研究所光陰如梭般的飛驟，感謝吾師曲新生老師在學業及生活上的指導，從他身上學及到許多研究及處理事情的哲學。老師常要求我們做事要腳踏實地，一步一步的努力學習才能有所突破。”魔鬼藏身於細節處”這是老師對我們做研究所需要注意的，因為一個小細節往往會破壞了整個系統，當一切順遂時，更應該居安思危，有所警惕。

此外感謝實驗室的學長時明、建平、木勝、清益、建新、孟熹、家瑜、智堡、子淵學長及純怡學姐，在課業及生活上的照顧與關心，並且感謝我的同學祥哲、式堯與陳俊勳實驗室的吳迪翰，當研究不順利的時候你們鼓勵我並幫助我度過難關。

最後我要感謝我的家人，你們的期待與關懷是我在研究所的精神堡壘，有你們的支持我才能心無旁騖的做研究；感謝我的女友香如，因為有你，我的研生活變的多彩多姿，也因為有你，我的人生有了新的轉折。

# 目錄

中文摘要.....	i
英文摘要.....	ii
誌謝.....	iii
目錄.....	iv
表目錄.....	vi
圖目錄.....	vii
符號說明.....	x
<b>一、緒論.....</b>	<b>1</b>
1.1 燃料電池的發展.....	1
1.2 燃料電池的種類.....	2
1.2.1 低溫燃料電池.....	2
1.2.2 中溫燃料電池.....	4
1.2.3 高溫燃料電池.....	4
1.3 燃料電池的基本原理.....	6
1.4 文獻回顧.....	10
1.5 研究動機.....	17
<b>二、理論分析.....</b>	<b>24</b>
2.2 數學模式.....	25
2.3 邊界條件.....	32
<b>三、數值方法.....</b>	<b>39</b>

3.1 數值方法 .....	39
3.1 SIMPLEC .....	39
3.2 上風差分法 .....	42
3.3 有限體積積分法 .....	43
3.4 解題流程 .....	46
3.5 格點數測試 .....	46
3.6 文獻結果比較 .....	47
<b>四 結果與討論 .....</b>	<b>52</b>
4.1 單蛇形流道(未加擋板設計)與加入擋板的差異 ...	52
4.1.1 單蛇形流道(未加擋板設計) .....	53
4.1.2 蛇形流道 Type I .....	53
4.1.3 蛇形流道 Type II .....	55
4.1.4 蛇形流道 Type III .....	55
4.2 不同流率對蛇形流道 TYPE I 的影響 .....	57
4.3 氣體擴散層不同滲透率對蛇形流道 TYPE I 影響 .	57
<b>五、結論與建議 .....</b>	<b>86</b>
5.1 結論： .....	86
5.2 建議： .....	87
<b>參考文獻 .....</b>	<b>88</b>

# 表目錄

表 2-1 模型參數 ..... 35



# 圖目錄

圖 1-1 世界主要能源存量[1] .....	18
圖 1-2 原油價格從 1861 年~2006 年[1] .....	19
圖 1-3 燃料電池的應用範圍之概括圖 .....	20
圖 1-4 質子交換膜燃料電池元件圖 .....	21
圖 1-5 燃料電池反應示意圖 .....	22
圖 1-6 燃料電池極化曲線圖 .....	23
圖 2-1 質子交換膜燃料電池物理模型，單蛇形流道未加擋板設計..	37
圖 2-2 質子交換膜燃料電池物理模形 Type I，在陰極流道第一條流道 位置( $y=0.11m$ )加入擋板 .....	37
圖 2-3 質子交換膜燃料電池物理模形 Type II，在陰極流道第一條流道 位置( $y=1.31m$ )加入擋板 .....	38
圖 2-4 質子交換膜燃料電池物理模形 Type III，在陰極流道第一條流 道位置( $y=2.75m$ )加入擋板 .....	38
圖 3-1 控制體積格點示意圖(a).....	48
圖 3-1 控制體積格點示意圖(b) .....	48
圖 3-1 控制體積格點示意圖(c).....	48
圖 3-2 解題流程圖 .....	49
圖 3-3 不同格點數對燃料電池極化曲線的影響 .....	50
圖 3-4 三維蛇形燃料電池數值分析之比較 .....	51
圖 4-1 蛇形流道與在不同位置加入擋板的蛇形流道之極化曲線圖..	59
圖 4-2 蛇形流道與在不同位置加入擋板的蛇形流道之功率比較圖..	60
圖 4-3 操作電壓 0.7V 下單蛇形流道(未加擋板設計)質子交換膜電流密 度分佈圖.....	61
圖 4-4 操作電壓 0.7V 下 Type I 在質子交換膜電流密度分佈圖 .....	62

圖 4-5 操作電壓 0.7V 下 Type II 在質子交換膜電流密度分佈圖 .....	63
圖 4-6 操作電壓 0.7V 下 Type III 的質子交換膜電流密度分佈圖 ....	64
圖 4-7 操作電壓 0.7V 下單蛇流道(未加擋板設計)在氣體擴散層與觸媒 層介面之氧氣濃度分佈圖 .....	65
圖 4-8 操作電壓 0.7V 下單蛇流道(未加擋板設計)在氣體擴散層與觸媒 層介面之水分佈圖 .....	66
圖 4-9 操作電壓 0.7V 下 Type I 在觸媒層與氣體擴散層介面之氧氣濃 度分佈圖.....	67
圖 4-10 操作電壓 0.7V 下 Type I 觸媒層與氣體擴散層介面之水分佈圖 .....	68
圖 4-11 操作電壓 0.7V 下單蛇形流道(未加擋板設計)氣體擴散層與流 道在流道入口長 0.018m、0.0195m、0.0210、0.225m 的剖視 圖。.....	69
圖 4-12 操作電壓 0.7V 下 Type I 氣體擴散層與流道在流道入口長 0.018m、0.0195m、0.021m 與 0.0225m 的剖視圖.....	70
圖 4-13 操作電壓 0.7V 下 Type II 之氧氣濃度分佈圖 .....	71
圖 4-14 操作電壓 0.7V 下 Type II 之水分佈圖 .....	72
圖 4-15 操作電壓 0.7V 下 Type III 之氧氣濃度分佈圖 .....	73
圖 4-16 操作電壓 0.7V 下 Type III 之水分佈圖 .....	74
圖 4-17 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與 觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 位置沿著 $x$ 方向的電流密度分佈圖.	75
圖 4-18 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與 觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 位置著 $x$ 方向的水分佈圖.....	76
圖 4-19 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與 觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 位置沿著 $x$ 方向的氧氣濃度分佈圖.	77

圖 4-20 蛇形流道與在不同位置加入擋板在流率 375.3576cc/min 下之極化曲線分佈圖 .....	78
圖 4-21 單蛇形流道(未加擋板設計)與在不同位置加入擋板在新流率 375.3576 ml/min 下之功率比較圖 .....	79
圖 4-22 操作電壓 0.7V 下 Type I 在流率 375.3576 ml/min 質子交換膜之電流密度分佈圖 .....	80
圖 4-23 操作電壓 0.7V 下 Type I 在流率 375.3576 ml/min 下 氣體擴散層與觸媒層介面的氧氣濃度分佈圖 .....	81
圖 4-24 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 的位置沿著 $x$ 方向之電流密度分佈圖 .....	82
圖 4-25 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 的位置沿著 $x$ 方向之氧氣濃度分佈圖 .....	83
圖 4-26 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 的位置沿著 $x$ 方向之水分佈圖 .....	84
圖 4-27 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面 $y=1.15\text{cm}$ 的位置沿著 $x$ 方向之不同滲透率對壓力的影響圖 .....	85

# 符號說明

## 英文字母符號

$a$	: 水蒸氣之活性
$A_e$	: 以 P 點為中心之控制體積之界面 e 的面積
$b$	: SIMPLEC 的源項，但不包含壓力梯度項
$a_a j_0^{ref}, a_c j_0^{ref}$	: 參考電流密度( $A/m^3$ )
$C_F$	: 二次阻力因子(Quadratic Drag Factor)
$C_n$	: 第 $n$ 成分之燃料濃度
$C_w$	: 水蒸氣濃度
$D_n$	: 第 $n$ 成分之擴散係數( $m^2/s$ )
$D_{n,eff}$	: 有效擴散係數( $m^2/s$ )
$F$	: 法拉第常數( $96500C/mol$ )
$j_a, j_c$	: 化學反應產生之電流密度( $A/m^3$ )
$M$	: 水莫耳數( $Kmol$ )
$P$	: 電池之操作壓力( $atm$ )
$P_{cw}$	: 陰極之氣態水壓力( $atm$ )
$P_{sat}$	: 氣態水之飽和壓力( $atm$ )
$R$	: 氣體常數( $8.341J/K \cdot mol$ )
$s$	: 液態水佔多孔性介質內孔隙體積之比值
$S_c$	: 濃度方程式之修正項
$S_L$	: 考慮液態水效應之源項
$S_u, S_v, S_w$	: 動量方程式之源項
$S'_{porous}$	: 多孔材質的表面積( $m^2$ )
$S_\phi$	: 源項(source term)

$T$	: 溫度(K)
$t$	: 時間
$\bar{u}$	: 速度向量
$U, V, W$	: 流道入口燃料流速(m/s)
$V'_{porous}$	: 多孔材質的體積( $m^3$ )
$i_x, i_y, i_z$	: 相位差產生之電流密度( $A/m^2$ )
$X, Y, Z$	: 三維直角座標(m)

### 希臘字母符號

$\varepsilon$	: 孔隙度
$\varepsilon_d$	: 擴散層孔隙度
$\varepsilon_{d,eff}$	: 有效擴散層孔隙度
$\varepsilon_c$	: 觸媒層孔隙度
$\varepsilon_{c,eff}$	: 有效觸媒層孔隙度
$\varepsilon_{mem}$	: 質子交換膜孔隙度
$\varepsilon_{mem,eff}$	: 有效質子交換膜孔隙度
$\Phi$	: 質子交換膜內之相電位(V)
$\eta$	: 過電位(V)
$\lambda$	: 氫離子之水含量
$\kappa$	: 燃料滲透係數( $m^2$ )
$\kappa_d$	: 擴散層滲透係數( $m^2$ )
$\kappa_c$	: 觸媒層滲透係數( $m^2$ )
$\kappa_{mem}$	: 質子交換膜滲透係數( $m^2$ )

$k_{con}$	: 水凝結率( $m^2$ )
$k_{eva}$	: 水蒸發率( $1/m^2$ )
$\nu$	: 動黏滯係數( $m^2/s$ )
$\rho$	: 燃料密度( $kg/m^3$ )
$\sigma_m$	: 膜傳導性( $1/\Omega \cdot m$ )
$\sigma_m^{ref}$	: 參考離子傳導率( $1/\Omega \cdot m$ )
$\tau$	: 多孔性介質內孔隙之曲率(Tortuosity)
$\tau_d$	: 擴散層內孔隙之曲率
$\tau_c$	: 觸媒層內孔隙之曲率
$\tau_m$	: 質子交換膜內孔隙之曲率
$\phi$	: 相關變數(Dependent Variable)
$\Gamma_\phi$	: 交換係數(Exchange Coefficient)



# 一、緒論

## 1.1 燃料電池的發展

隨著 20 世紀工業的發展，人類大舉開發地球上的資源，造成地球上能源速率急遽消耗，所面臨的問題，除了能源匱乏以外，石化能源使用造成溫室氣體濃度增加也是關注的焦點之一，前者導致國際油價高漲及能源爭奪的問題，後者則引發能源使用型態轉變的需求。依據英國石油能源統計年鑑 BP Statistical Review of World Energy 2007[1]的調查，截至 2007 為止，世界上僅存的天然氣約 64 年，煤炭約 155 年，而目前使用最廣的石油僅約 40 年，如圖 1-1 所示，而隨著能源的耗竭，能源的價格從 2000 年之後開始飆高，如圖 1-2 所示，各國紛紛開發替代能源以因應國際油價飆漲的衝擊。而燃燒化石燃料排放的二氧化碳為全球暖化的主因，為了減緩地球暖化，工業先進國家在 1997 年 12 月於日本京都召開聯合國氣候變化綱要公約會議，協議 2008 年至 2012 年間，二氧化碳、甲烷等六種溫室氣體排放量要比 1990 年減少 5.2%，依據民國 94 年全國能源會議具體結論，我國為因應京都議定書規範，未來能源政策重點除了進行溫室氣體減量以外，也積極規劃提升能源效率的技術獎勵，包括：研擬能源效率提升技術獎勵、提升在生能源與替代能源技術研究經費、推動氫能源研發與利用，氫能便成為未來能源產業之明星產業之一。氫為世界上最充裕的元素，且無污染，而燃料電池便是氫經濟下的產物，藉由氫氣與氧氣的電化學反應，直接由化學能轉為電能，佈景效率高，應用範圍廣，而且不會排放有害氣體，使得燃料電池成為未來解決能源問題的關鍵。圖 1-3 為燃料電池用於各領域的概括圖。燃料電池是風力、水力、火力、核能及太陽能等發電技術以外的新發電技術，它不像二次

電池一樣只能充當電能的儲存單位，也不是如內燃機一般將燃料燃燒而產生熱來作功，而係利用電化學的原理，直接將燃料中的化學能轉化為電能並釋放出熱能的裝置。燃料電池的發展歷史，最早可以追溯到 1839 年英國法官威廉·葛羅夫爵士（Sir William Grove）在實驗中無意間發現，把水電解過程逆向操作，並把浸在硫酸溶液中一對鍍上一層鉑黑的白金絲電極接上負載以後，氫氣和氧氣即可因為電化學反應而產生直流電流，因而發明了燃料電池，120 年後阿波羅（Apollo）太空船利用鹼性燃料電池（AFC）與 1960 年雙子星（Gemini）5 號使用陽離子交換膜氫氧燃料電池（SPFC），說明了燃料電池用於太空科技的實用性。

## 1.2 燃料電池的種類

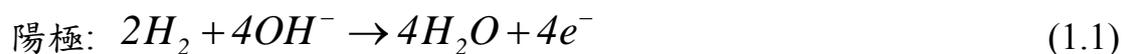
燃料電池的種類繁多且分類方式也各有不同，若以溫度來分類的可以分作：



### 1.2.1 低溫燃料電池

#### 1. 鹼性燃料電池 (Alkaline Fuel Cell, AFC)

AFC 以氫氧化鉀（KOH）溶液為電解質，操作溫度在 60~200 °C 之間。是用在太空計畫的燃料電池之一，為所有燃料電池中效率最高的，然而使用燃料限制非常嚴格，必須通入純的燃料氣體，及純的氧化劑。此外，AFC 電解質的腐蝕性強，造成電池壽命較短，使得鹼性燃料電池的應用範圍受到極大的限制。其電極反應式為：



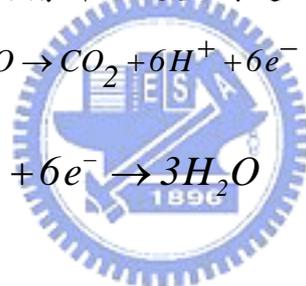
## 2. 質子交換膜燃料電池 (Proton Exchange Membrane Fuel Cell PEMFC)

質子交換膜燃料電池又稱為固態聚合物電解質燃料電池，是以質子導體之氟樹脂係離子交換膜為電解質。操作溫度一般為 80~100 °C，應用領域廣大，與其他燃料電池相較起動性與小型、輕量化具有壓倒性的優勢。在此領域中，主要的突破是由於杜邦公司 (Dupont) 發展出的 Nafion 薄膜，此種薄膜主要是以聚全氟磺酸 (polymerized perfluorosulfonic acid, PFSA) 膜，不僅比先前的聚苯乙烯磺酸鹽的聚合物安定，且延長了電池壽命並有效地解決了電池生成水被污染的問題。我們可以將 Nafion 膜分成三個區域 (a) 主幹：由類似鐵氟龍的結構所組成，結構強韌而穩定，能夠有效地分隔陽極氫氣與陰極的空氣。(b) 離子簇：由亞硫酸根離子與氫離子、水分子等組成，又稱質子交換側，此團簇區域吸入水，而質子一面伴隨著水，一面經由磺酸基自陽極移往陰極。(c) 側鏈：其主要功用為連結主幹分子與離子簇。在開發上 PEMFC 也面臨到一些問題。其中之一為成本，因其所使用的材料昂貴，且在電極與質子交換膜交界面塗著一層白金觸媒以促使化學反應產生，造成價格難以大幅降低。第二為高性能化及長壽命化。因其所通入的燃料中含有一氧化碳，促使白金觸媒被一氧化碳所吸附造成燃料電池的性能嚴重下降，此即為一氧化碳毒化問題。除此之外，水管理對質子交換膜燃料電池的性能亦具有關鍵性的影響，水管理意指平衡薄膜中水合作用及水氾濫現象的避免。存在著兩種互相矛盾的需求，為了使高分子聚合物的電解質含有充分的水含量，進而促進質子傳導能力，可以降低燃料電池的歐姆極化。然而，過多的水將會堵住觸媒層及氣體擴散層的孔洞，導致嚴重的水氾濫現象，缺乏適當的水管理，將使得燃料電池內水呈現不平

衡的狀態，造成膜脫水（Dewatering）、電汲水氾濫（Flooding）、或是反應氣體被水蒸氣稀釋（Dilution）等負面效應。

### 3. 直接甲醇燃料電池 (Direct Methanol Fuel Cell, DMFC)

直接甲醇燃料電池係自 1990 年代開始研發之新型燃料電池。此種電池只需注入甲醇與水，在室溫下發電。由於構造簡單，可製作成超小型之發電設備。甲醇 1 分子可以產生 6 個電子，因此理論上可以製作能量密度高之燃料電池。由於甲醇燃料電池是沿用質子交換膜燃料電池的結構，薄膜部分無法阻止甲醇的滲透，造成甲醇從陽極跑到陰極和陰極觸媒發生反應的情形，稱之為甲醇穿透（Methanol cross-over）。其次，是燃料（陽極）之反應速度慢，因此欲改善直接甲醇燃料電池之性能，尚需解決這些問題。其電極的反應式如下



#### 1.2.2 中溫燃料電池

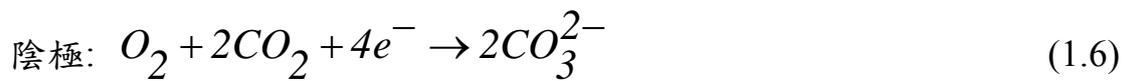
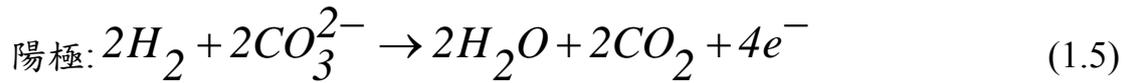
##### 磷酸燃料電池 (Phosphoric Acid Fuel Cell, PAFC)

商業化的角度，磷酸燃料電池為所有燃料電池中最先進的。其電解質為液態磷酸，故在長期運轉下會有腐蝕與電解質洩漏的問題。此種燃料電池主要用在固定式的發電廠中，其反應式和質子交換膜燃料電池相同。具有建造簡單、低污染、低噪音等優點。且因其商用機能以達信賴性及耐久性的目標，使得磷酸燃料電池對防止地球暖化有很大的貢獻，甚至作為商用電力系統停電時之輔助電源而備受矚目。

#### 1.2.3 高溫燃料電池

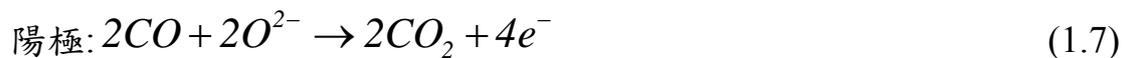
## 1. 熔融碳酸鹽燃料電池 (Molten Carbonate Fuel Cell, MCFC)

熔融碳酸鹽燃料電池為高溫型燃料電池，操作溫度一般在 650 °C 左右，發電效率高，可以降低燃料使用量或二氧化碳氣體排放量。適合中、大型分散電源，將成為未來重要發電方式之一。其電解質為鋰和鈉的熔融混合液，其電極的化學反應式如下：



## 2. 固態氧化物燃料電池 (Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)

固態氧化物燃料電池的電解質為固態的氧化鋯，其操作溫度較高約為(800~1000°C)，不需採用白金等貴金屬，電極反應速度也可以相當快，還可以利用高溫所排放的廢熱，供給燃料重整反應用，有效將熱再轉換成燃料。在電極方面，陽極為鎳與陶瓷的混合材料，陰極為 P 型的半導體材料。在 SOFC 的串連設計上有平板式和圓管式兩種。平板式的優點為成本較低、效率較高、組裝容易。缺點為不容易找到好的連接材料與密封劑。而圓管式的優點為不需要密封劑，且有較高的穩定性。然而 SOFC 的製作也是相當具有挑戰性的工作，因其室溫與運轉溫度差造成材料中性質熱膨脹，導致使用狀態易產生破裂。而且，為使電性連接性良好，因此界面之接觸相當重要，此外，為了不使二種氣體混合，電解質與連接板必須緻密。因此兩種材料要如何配置也是 SOFC 電池堆的關鍵技術之一。其電極的化學反應式為：



而在這六種燃料電池中，質子交換膜燃料電池由於在低溫運轉下能有

較高的能源密度、啟動快速、無污染、無腐蝕性電解質溢出的危險以及體積小等優點，適合用在車輛的動力裝置和可攜帶式的電子產品，因此近年來成為燃料電池的研發重點。

### 1.3 燃料電池的基本原理

的熱機發電係由石油或天然氣等化石燃料經過燃燒產生熱之之後再產生電之機械系統，可以說是將化石燃料具有的化學能轉換成電能的設備。換言之，由化學能→熱能→機械能→電能之幾個階段的能量轉換過程產生電。因此，的熱機發電必須先將燃料之化學能燃燒轉換成熱能，再利用熱能製造出高壓高溫的水蒸氣來推動渦輪機作功，使熱能轉換為機械能，最後再將機械能轉換為電能。在這一連串的能量轉換過程中，不僅會產生噪音與造成汙染，同時由熱力學第二定律可知，在每一次的能量轉換過程中會造成損失而降低發電效率。燃料電池發電是直接將燃料的化學能轉換成電能，因此，能量轉換的步驟較少、效率高，過程中不會產生汙染，且沒有轉動元件所以噪音低。圖 1-4 為燃料電池堆與單電池示意圖與元件圖，構成燃料電池的基本元件包括端板、集電板、雙極板、氣體擴散層、觸媒層與電解質薄膜。

雙極板：具有進氣導流與收集電流的功能，所以又稱流道板(flow field plates)或是集電板(current collector)，材質多為金屬板、石墨板或碳板。在雙極板上刻畫流道提供反應氣體通道，溝槽的設計上必須有  
1.強化氣體的對流與擴散能力  
2.最佳的流道與肋條比例來增加性能  
3.降低壓力損以減少額外的泵功的輸入

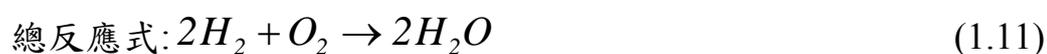
氣體擴散層(gas diffusion layer)：為一多孔碳纖維材質藉由多孔結構將氣體均勻的擴散到觸媒層以提供最大的電化學反應面積，且能將反應產生的電子導出陽極並將外電路來的電子導入陰極

觸媒層(catalyst layer)：電催化是加速電化學反應中電核轉移的一

種催化反應，反應速度由觸媒活性、內電場與電解質本性有關，使反應性能所需的活化能大幅度下降。所以觸媒需要有對特定的電化學反應有良好的活性，並且需要在一定的電位範圍內耐電解質的腐蝕能力。

電解質薄膜(membrane)：主要傳導離子與分隔反應氣體，分為液態電解質(AFC、PAFC、MCFC)與固態電解質(PEMFC、SOFC)，固態電解質可直接製程薄膜以阻隔氣體與傳導離子，液態電解質需藉毛细力吸附在電解質載體的多孔隔膜以工作，需具有承受在電池工作條件下的電解質腐蝕以保結構穩定且電解質載體須是電子絕緣體以防漏電。

當氧氣及氫氣分別進入電池陰、陽兩極再經由擴散層使氧氣及氫氣均勻的進入觸媒層，氫氣到達觸媒層時會被分解成氫離子( $H^+$ )和帶負電的電子( $e^-$ )，氫離子經由電解質來到了陰極；而電子經由外部電路傳輸到負載作功後回到陰極。而陽極的氧氣則與氫離子和電子結合，並在陰極側產生水以及未完全反應的氫氣與氧氣經由電極出口排出。如圖 1-5。其化學式如下：



燃料電池係由電化學反應將化學能轉換成電能，因此，不受限於熱機的卡諾 (Carnot) 效率限制，若處於可逆狀態下，其化學能將全部轉換成電能。然而反應不可能為不可逆反應，一部分的化學反應會轉變成熱的形式消耗掉一般而言，自由能的變化量  $\Delta g < 0$  時，化學反應才能夠自然發生，此自由能的變化量就是此系統在可逆狀態下所作的最大功：

$$-\Delta g = w_R \quad (1.12)$$

當燃料電池的電化學反應中，其自由能改變量全部轉換為電功時可以表示為：

$$-\Delta g = w_R = Q \cdot E_n = nF \cdot E_n \quad (1.13)$$

以氫氧燃料電池為例，其反應式如下：



單位莫耳的自由能改變量可以表示為：

$$\Delta g = (\Delta g)_{H_2O} - (\Delta g)_{H_2} - \frac{1}{2}(\Delta g)_{O_2} \quad (1.15)$$

因此，理想電位可以寫成：

$$E_n = \frac{-\Delta g}{2F} = 1.23V \quad (1.16)$$

燃料電池的理想電壓為 1.23V，但是隨著不同的操作電流密度，會有不同的電池電位損失產生，造成電池壓無法維持理想電壓，如圖 1-6 所示，而這幾類電位損失可分為燃料穿越與內電流的損失、活化過電位、歐姆過電位以及濃度過電位所造成損失。

### 1. 燃料穿越與內電流 (Fuel crossover and internal currents)

當電池在操作過程中，由於質子交換膜的阻隔效果不良，或是使用液態甲醇做為燃料時，特別容易發生，當陽極燃料進入陰極時，會直接與氧氣產生燃燒反應，消耗燃料，恐有安全之虞，由於一個氫氣分子可分解成為兩個電子，因此當氫氣從內部通過時即視為內電流通過，而非實際上之電流。

### 2. 活化過電位 (Activation overpotential)

在低電流密度時，反應速率慢，又同時需要有額外的能量克服活

化能，使化學反應發生，因此會有較多的活化過電位損失，為了要減低活化過電位，一般會使用白金做為觸媒與提高電池操作溫度。活化損失可表示如下：

$$\eta_{act} = A \ln \left( \frac{i}{i_0} \right) \quad (1.17)$$

$A$  為與溫度及傳輸係數有關的常數  $i_0$  代表交換電流密度，使用觸媒相當於降低  $A$  值，而提高操作溫度相當於降低  $A$  與  $i_0$  值。

### 3. 歐姆過電位 (Ohmic overpotential)

當電流密度增大，電池在穩定的環境下操作時，此時電位損失的主要來源為各個電池組件所造成的歐姆電阻，稱為歐姆過電位，這些歐姆電阻的來源，還包括接觸電阻，因此在組裝上，會選擇薄、低阻抗、組裝時提高扭力來改善。歐姆損失可表示如下：

$$\eta_{ohmic} = IR \quad (1.18)$$

$I$  為電池之操作電流密度， $R$  為系統之總歐姆電阻。

### 4. 濃度過電位 (Concentration overpotential)

最後，當電池在高電流密度下操作時，由於反應速率快，外界所提供的氣體可能不足以彌補如此快的氣體消耗，因此達到極限電流密度，此時稱為質傳或濃度過電位。其表示如下：

$$\eta_{con} = \frac{RT}{nF} \ln \left( \frac{i}{i_{lim}} \right) \quad (1.19)$$

$i_{lim}$  代表極限電流密度， $R$  是理想氣體常數， $T$  為電池操作溫度， $n$  為反應過程產生之電子數， $F$  為法拉第常數。

## 1.4 文獻回顧

在現今計算流體力學軟體的成熟發展下，利用數值模型分析已演變成為新的研究趨勢，由於燃料電池內部包含電滲作用、濃度擴散、電化學反應、毛細作用、蒸發與凝結等複雜之反應機制，藉由數值模擬將可預測燃料電池操作中無法直接量測之物理量與電熱質傳等局部分佈，並且數值模型分析還具有降低研發成本、參數設定與電池幾何尺寸修改方便、容易與實驗數據比較等優點，而逐漸廣受各研究單位的重視。為了提高質子燃料電池的性能，許多分析的模型都是為了更加了解內部的情形[2]，像是最佳化的觸媒層設計[3]、水氾濫的問題[4]、一氧化碳毒化與氧化還原的文章都是針對質子交換膜燃料電池的最佳化研究的文章，早期的文章像是 Bernardi and Verbrugge [5, 6]、Springer et al.[7]提出的一維、等溫的交換膜與電極的集合，而 Fuller and Newman [8]提出了近似二維分析的質子交換膜模型，而完整的質子交換膜燃料電池的二維模擬方面，Gurau et al. [9]首先提出完整燃料電池二維分析模式，將燃料電池分為三個區域，分別在陽極與陰極加入氫氣及混合空氣，並假設在膜電極(MEA)中有液態水的生成。研究中指出，在氣體流道、擴散層、觸媒層內反應氣體之濃度與反應速率會因擴散、對流作用及電動力(Electrokinetics)而改變，且反應氣體的分佈與電極性質成相依關係。結果中發現孔隙度、入口速度、溫度愈高，則燃料電池性能愈好；液態水在膜電極組之傳輸會受到壓力、電滲作用、多孔性介質壁面摩擦的影響；在低電流密度時，由於電滲作用所產生的離子力會小於壓力場的影響，因此液態水會由陰極傳輸至陽極，在高電流密度時，液態水會從陽極傳輸至陰極，但是文章中水傳輸並未考慮到氣體擴散層的現象。You and Liu[10]與 Chen et al.[11]發展了二維沿著流道在流道與氣體擴散層對流動與傳輸的分析。許多

針對水對電池影響分析的文章[12-14]，Shimpalee and Dutta [12]利用商用軟體 Fluent 提出三維單相單蛇形流道在不同加濕度下探討多種氣體混合，而燃料電池內的傳輸現象，主要是受到電滲透及擴散作用的影響，而流道內流體流動的方向取決於燃料在膜電極中的質量消耗；由於流體藉穿越作用經過擴散層到達下一個流道，因此蛇形流道的總壓降會小於直通流道的總壓降，Natarajan and Nguyen [14]則提出了三維陰極直通型流道的質子交換膜模型，並對照實驗和 2-D 模型做比較說明沿流道方向的氧氣濃度變化及電流密度對燃料電池陰極性能之影響。氧氣濃度的影響是由於電化學反應及水的稀釋作用所致；流率方面，低化學當量流率的稀釋效應明顯，因為氧氣不均勻分布造成液態水在氣體擴散層阻塞氧氣的值傳造成性能下降，在高化學當量流率時濃度較為均勻且接近入口使性能提高；在燃料氣體加濕度方面，當增加氣體的溼度時會減低電池性能，但與實驗的結果相矛盾，原因在於模擬未考慮到膜乾化的問題，因為實驗的陽極輸入氣體未適當的加濕，所以加濕陰極對膜的濕潤都會有正向的幫助；在溫度方面，提高溫度可以增加交換電流密度和水移除率，提高交換電流密度可以提高電流密度而增加水移除率則減少水的堵塞。而二維、兩相流、多種混何物種的傳輸模型則由 He et al.[15]、You and Liu [10]與 Wang et al.[16]提出，考慮水的蒸發與凝結來探討對電池性能的影響，Baschuk and Li [4]也提出了數學模型探討陰極流道不同程度水氾濫的情形，對照實驗的結果來探討，在高流率下可以提高水的排除率，但當輸入氧氣時，效果會比輸入空氣的效果差，因為氧氣過多會造成反應過快並產生水的氾濫而阻塞電池；增加操作壓力在低電流密度也易產生大量的水；高溫在高電流密度也是同樣的情形，所以模型的結果可以用在最佳化質子交換膜燃料電池的設計與用於電池堆的

情形。針對流道的部份，Yi and Nguyen [17]提出了指差型的設計，在流道的尾端加入了阻擋使氣體經由強制對流進入了氣體擴散層並提高了排水性。而 He et al.[15]的二維、兩相流、多種傳輸則針對指差形流道設計探討電極厚度在相對厚的條件下平均電流密度較高，而更進一步探討流道寬度與肋條寬度比(C/S ratio)得到較大的流道寬度與肋條寬度比(C/S ratio)可以得到較好的電池性能。Um and Wang [18]與 Hu [19]提出了三維直通與指差的不同性能分析與比較。結論指出指差形流道設計的電流密度分部較高、排水性較好，但伴隨的是電流密度分部較不均勻與較大量的水生成和壓降較大。近年來越來越多研究電池性能的文章借由商用軟體或是自己研發的計算流體力學的理論來計算，因此越來越多的三維模擬可以探討燃料電池內部複雜的傳輸現象、電化學現象以求得更明白的解釋，Gurau et al.[9]發表了完整的燃料電池完全二維分析模式，及考慮了流道與膜電極組，Um et al.[20]與 Wang et al.[16]也發展了相同的模式但加入了兩相流(two-phase flow)模式的模擬併考慮了溫度的效應，Berning et al.[21]也同樣發展了三維模式用 CFD 考慮氣體流道中的對流熱傳與質傳，模型考慮反應物在多孔中的擴散、電化學反應、氫離子與水分子在質子交換膜的遷移現象，以及電池的熱傳與電子在固體中的遷移。Mazumder and Cole [22] 利用計算流體軟體 CFDRC 建立三維數值模型，針對燃料電池之性能進行分析。研究中的數值模型以質量、動量、能量守恆方程式為基礎，加入電化學反應方程式，並由有限容積積分法求解，假設水為氣相，並無液態水的生成，即為忽略液態水的存在；為了解不同操作條件與材料特性對燃料電池性能之影響，因此考慮多孔性介質內流體之阻力，並修正其熱質傳係數。比較二維與三維之模擬結果，在低電流密度時並無明顯的差異；但在高電流密度時，電池

因受到質傳之限制，而使得三維模擬之性能較差。基於第一部分不考慮液態水效應的研究發現，電池性能的預測將大於實驗量測數據，然而液態水效應往往是決定電池性能的關鍵，所以又提出了[23] 考慮液態水的形成與傳輸過程，並針對壓力、表面張力、重力與電滲作用對液態水傳輸的影響做分析。在研究中液態水的水含量係利用液態水飽和公式進行計算，以表示飽和水蒸氣中所佔的水含量，而不是完全使用兩相流的分析方法。模擬結果發現，由於加入液態水效應，因此在陰極側將會有液態水的形成，在極限電流密度之下，飽和水蒸氣的含量將超過 50%，這將堵塞多孔性電極，使燃料傳輸受到限制，造成比不考慮液態水效應多出 0.07V 的過電位；在電池操作電流密度 0.6A/cm<sup>2</sup> 以下時，考慮液態水效應的作用與否對電池性能並無明顯影響，而當電流密度大於 0.6A/cm<sup>2</sup> 時，由於電池反應劇烈，將生成較多的液態水，使得電池性能下降，但卻能更真實描述燃料電池實際操作情形。Yan et al. [24]建立二維燃料電池數值模型，分析電池中氣體流動分佈、擴散層幾何形狀與反應氣體從流道傳輸至擴散層之各種現象對燃料電池性能的影響，研究中主要針對流道寬度比、流道數目、擴散層孔隙度與觸媒層之過電位探討電流密度的影響。由結果可知：1. 過電位將強烈影響局部電流的分佈，相對較低的過電位將導致較為均勻電流密度分佈、2. 在固定電池尺寸下，較大的流道寬度將產生較好的電池性能，這是由於較大的流道寬度將增加電池的反應面積，同時在固定流道寬度下，增加流道數目將有較有效的氣體擴散，較為均勻的電流密度分佈，因此提升電池性能、3. 隨著氣體擴散層孔隙度增加，將相對增加反應氣體擴散至觸媒層參與電化學反應的使用量，當孔隙度介於 0.3-0.6 之間時較高的孔隙度電持性能較佳。Siegel et al. [25]藉由二維，穩態之數值計算模型，了解液態水在質子

交換膜燃料電池中之傳輸狀態，研究中將同時考慮多孔電極的液態水傳輸、質子交換膜的水含量、氣體分子與質子和能量之傳輸並在觸媒層使用 agglomerate 模型。結論顯示，在低電流密度下水生成較少則流道內的電流密度分佈較均勻，且水含量穿越過 MEA 的變化較小，當電流密度提高時，陰極的水含量開始增加，MEA 的水分佈也會因為陽極水生成被流道帶走而造成 MEA 水含量減少，當每莫耳的質子由陽極傳輸至陰極時，水的淨遷移量為 0.16-0.34 莫耳，這顯示了在電化學反應與電滲作用下，將有 20-40% 的水累積在陰極，因此在反應氣體高加濕狀態下，水將以液態之形式累積在陰極，並堵塞觸媒層與氣體擴散層之多孔介質，並且在靠近燃料入口處，液態水濃度最高。Oosthuizen et al. [26] 針對蛇形流道之質子交換膜燃料電池，建立三維數值模型，探討氣體擴散層中不同孔隙度對橫向氣體流率、壓力與溫度分佈的影響，研究中藉由 Darcy's Law 來描述擴散層中氣體傳輸的現象，並假設一均勻熱在擴散層生成。由研究結果顯示，氣體擴散層的孔隙度在 0.6 以下時，橫向氣體流率在擴散層的分佈較為均勻，且其值可被忽略，而當孔隙度大於 0.6 時，橫向氣體流率的分佈則較不均勻，同時隨著孔隙度的增加，最大值與最小值的落差將愈趨明顯，然而就壓力分佈來說，孔隙度越小將造成較大的進、出口壓差，且與流道轉折數目呈正比的關係，再則由於流道入口流速較大，因此在入口處有較大的溫度梯度，而擴散層的熱傳導與孔隙度並無明顯之關係，主要取決於流道板之熱傳導係數。Shimpalee et al. [27] 探討大面積  $200\text{ cm}^2$  的流道板在不同蛇形長度水分佈與溫度分佈對整體性能的影響，其中以 13 條入口的蛇形的電池性能最佳，流道的數目並非越多越好，以溫度而言，分佈隨著流道數目增加而減少、壓降隨著流道數目減少而上升，整體壓降雖已 26 條流道最優，但整體電流密度

分佈與壓降曲線來說仍以 13 條最佳，流道數目的增加會造成膜的乾化，而最佳流道數目仍是可探討的方向。Sun et al. [28]探討三維、穩態、單相，梯形截面積單蛇形流道間的氣體經由氣體擴散層的穿越現象、壓力分佈與流道形狀的設計。氣體穿越過多孔層是利用 Darcy's model。結論顯示當流道的  $R$ (流道較寬的長度/流道較窄的長度)增加，則流道的穿越效應提高，而且壓力降會小於沒有穿越效應，文中也提到當增加雷諾數時，流道間的穿越效應也會提高。Shimpalee and Van Zee [29]使用 Star-CD 比較流道寬/肋條寬:0.9/0.9、1.0/0.7、0.7/1.0，針對 stationary condition 與 automotive condition 兩種不同情況下，探討對電流密度分佈、質子交換膜、壓降與溫度的影響，發現在 stationary condition 時較窄流道的性能、質子交換膜水分佈、壓降情況會比寬流道佳，但是在 automotive condition 下較寬的流道佳且較穩定，兩這的相同之處僅在溫度分布上因為大的肋條帶走大量的熱會使得質子交換膜的溫度較低，不易乾掉。至於流道設計方面，由於單蛇形流道與流道間的 cross-flow 效應可能是蛇形流道設計性能較佳的因素，所以像 Kanezaki et al.[30]、Dutta et al.[31]與 Nguyen et al.[32]與 Park and Li [33]等人都提出了對 cross-flow 的探討來強化電池性能，Nguyen et al [32]利用 VTC(voltage to current)探討三維、單相蛇形流道在不同電流密度下的質傳、熱傳與潛能損失，當低電流密度時，氧氣濃度較集中在肋條邊緣，但隨著電流密度的增加則集中區域會趨向流道中央；隨著長度的增加氧氣的濃度也跟著減少。文中也探討歐姆損失也隨著電流密度的增加而增加；至於熱分佈方面由於觸媒層的電化學反應使得在這一層的溫度會較其他層增加約 1~7 度。Park and Li [33]探討三維、單相穩態的單蛇形流道在不同滲透率、氣體擴散層厚度、雷諾數與氣體擴散層的有無對流道間穿透效應(cross-flow)的影

響，因為 cross-flow 可以有效的提高反應面積、減少壓力降與強化排水性能，所以再蛇形流道設計上是一個相當重要的現象，結論指出 cross-flow 效應在流道前 40% 會較明顯，而較低的雷諾數與較厚的氣體擴散層也會提升流道間的 cross-flow 效應；滲透率介於  $10^{-12}$ ~ $10^{-8}$  之間的 cross-flow 效果最佳，因為小於  $10^{-12}$  壓力降太大而大於  $10^{-8}$  時效應較不明顯，所以介於之間的滲透率可以有效的降低壓力降。至於流道設計方面，Soong et al.[34]與 Yan et al.[35, 36]為了探討流道形狀對電池性能的影響，在流道中加入了擋板來增加對流的效應。Soong et al.[37]探討了二維流道加入擋板對半電池產生的影響，針對擋板的開口比例與數量、壓力降與孔隙度在氣體擴散層的影響。由於擋板的強制對流可使氣體進入氣體擴散層的比例增高；孔隙度則決定了反應氣體進入的量與排水性；擋板數量決定了有幾個強制對流與壓降大小，文中擋板的開口比例小於 0.1、數量 3~5 個、孔隙度 0.7 時為最佳設計以供參考 Yan et al.[35] 利用實驗探討多種不同陰極流道對電池的性能的影響，分別為平行流道、Z 形流道、蛇形流道、Z 形加擋板、直通加擋板五種流道比較在不同的空氣與氧氣流率，結論指出，在自然對流下直通的流道數目雖是蛇形流道的三倍，但蛇形流道的轉折會增加性能，反而蛇形流道的性能會比直通流道的性能佳，然而在加入了擋板的效應之後，強制對流增進了反應氣體進入多孔層的機率，使電池性能高於自然對流的流道設計，而直通加擋板的性能會優於 Z 行加擋板的性能，更比自然對流(平行流道、Z 形流道與蛇形流道)的效率佳。因為直通加擋板的流到數目多於 Z 形加擋板，燃料的傳輸率較慢反應較完全，所以性能較佳。Yan et al. [36]利用實驗探討直通流道與指差流道的性能差異，探討加入擋板對反應氣體的反應面積產生的性能影響，針對加入擋板的位置改變反應面積並改變氣體流

率、電池溫度與加濕溫度等參數以探討最佳化的控制。結論指出 1. 指叉型流道設計性能曲線會比直通型設計佳，而指叉形設計的電壓降或質傳損失在較高的電流密度會延後發生 2. 較高的加溼度可以避免質子交換膜的乾化提高電池性能。

## 1.5 研究動機

近年來燃料電池的研究，無論是實驗量測亦或是數值模擬，往往藉由不同的流道設計來提升電池性能，而在國內外目前常見的流道設計，包含傳統流道 (Conventional Flow Field) 設計與指叉流道 (Interdigitated Flow Field) 設計等兩大類，傳統流道設計部分包含：直通型流道 (Parallel Flow Field)、蛇形流道 (Serpentine Flow Field)。回顧以往的文獻發現，在傳統流道方面，直通型流道的研究較為廣泛而蛇形流道卻較為缺乏。直通型流道有較低的流體阻力，所需消耗的泵功率較低，但是因為排水性能不佳，陰極產生的水易堵塞流道使氣體無法通過影響電池的性能；指叉型流道設計在進口反應氣體到達盡頭後必須強制通過壓在肋條底下的氣體擴散層而進入出口流道，有助於增加氣體愈觸媒的接觸機率提高電化學反應效率，另一特色為陰極排水功能極佳，然而最大的缺點為壓降過大，考慮泵功損失對燃料電池影響下，此種流道設計難以實際應用在商業化的電池堆上。所以本文根據 Soong et al. [34] 與 Yan et al. [35, 36] 知道當加入了擋板可以強化電池的性能，氣體除了以擴散作用在傳輸以外，在擋板區域反應氣體因阻擋使得被強制進入氣體擴散層，稱為強制對流作用來增加反應氣體對觸媒直接接觸的機會並且強化水熱的移除，所以本文中針對蛇形流道在不同位置加入了擋板的設計來探討是否會對蛇形流道的性能產生明顯的影響並改變其他參數以達最佳化的設計。

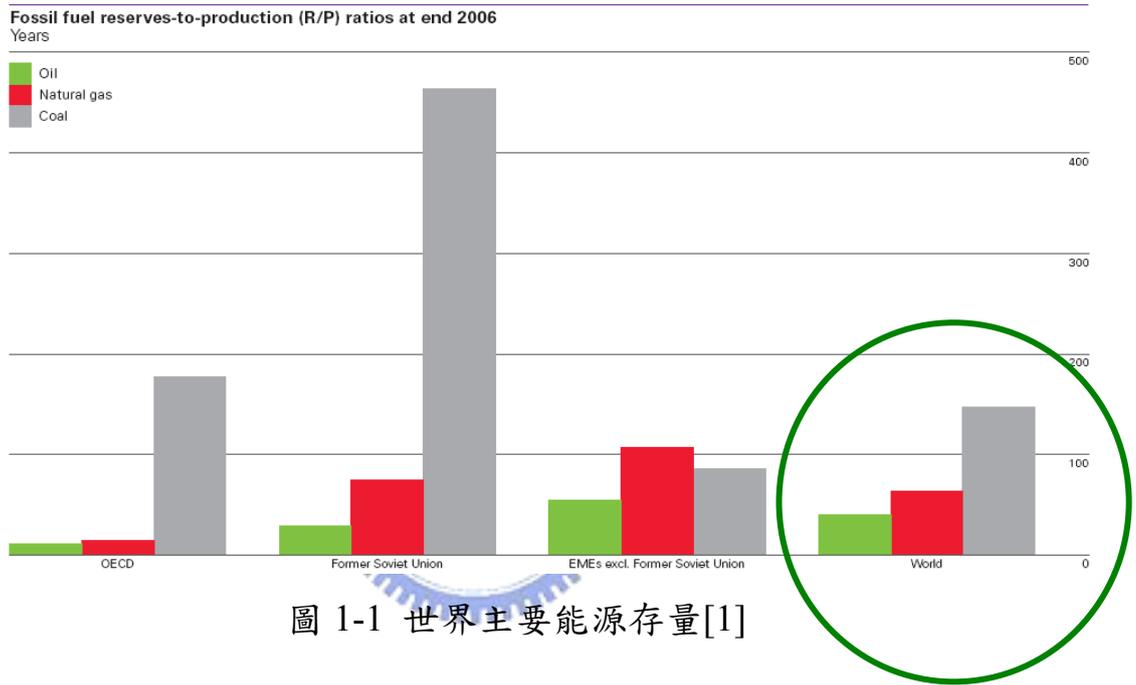


圖 1-1 世界主要能源存量[1]

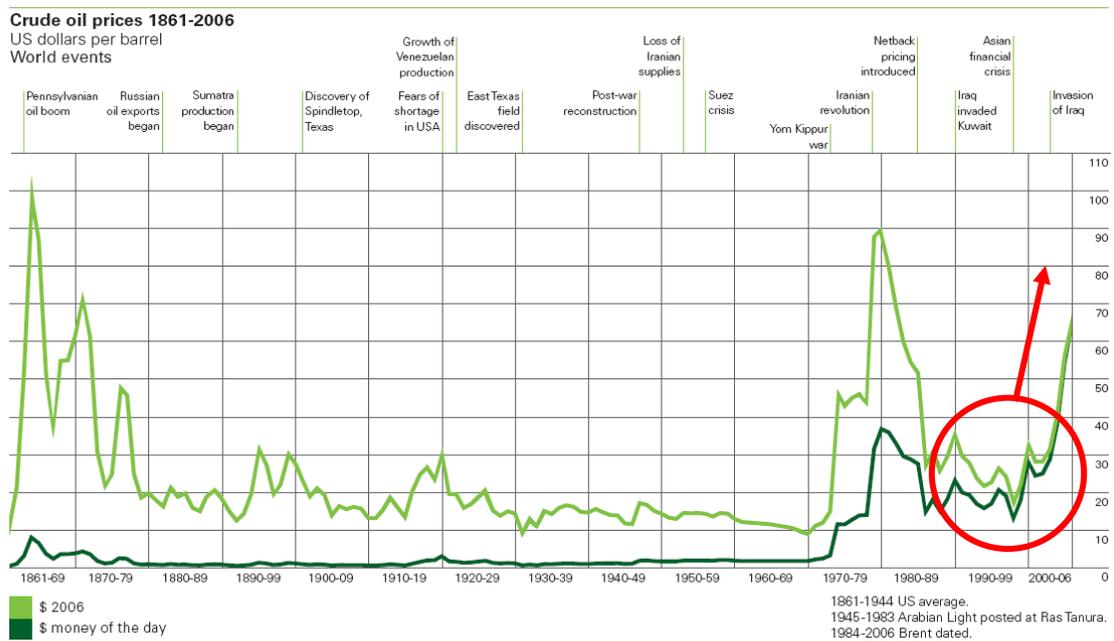


圖 1-2 原油價格從 1861 年~2006 年[1]

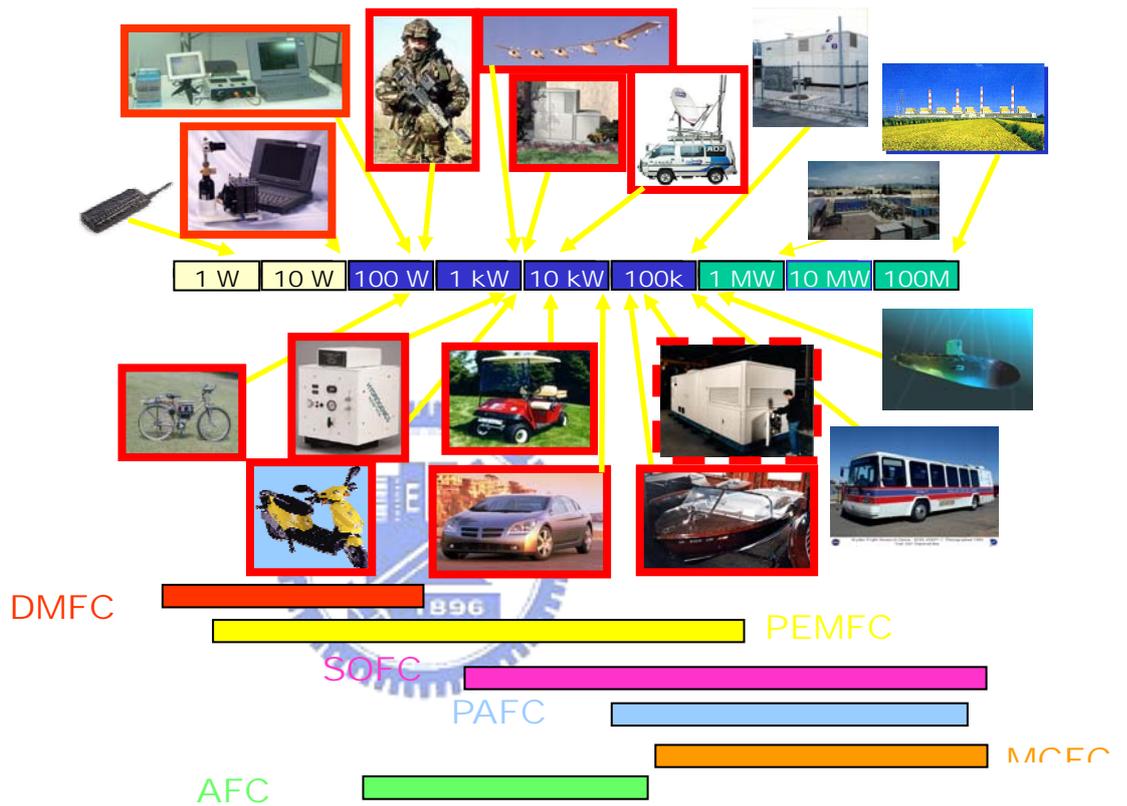


圖 1-3 燃料電池的應用範圍之概括圖

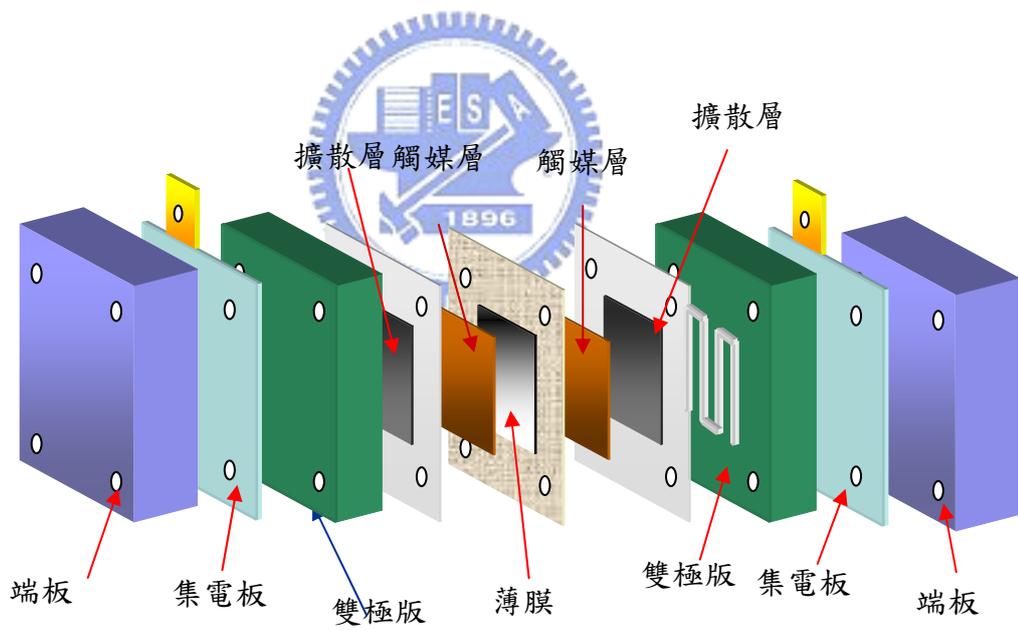
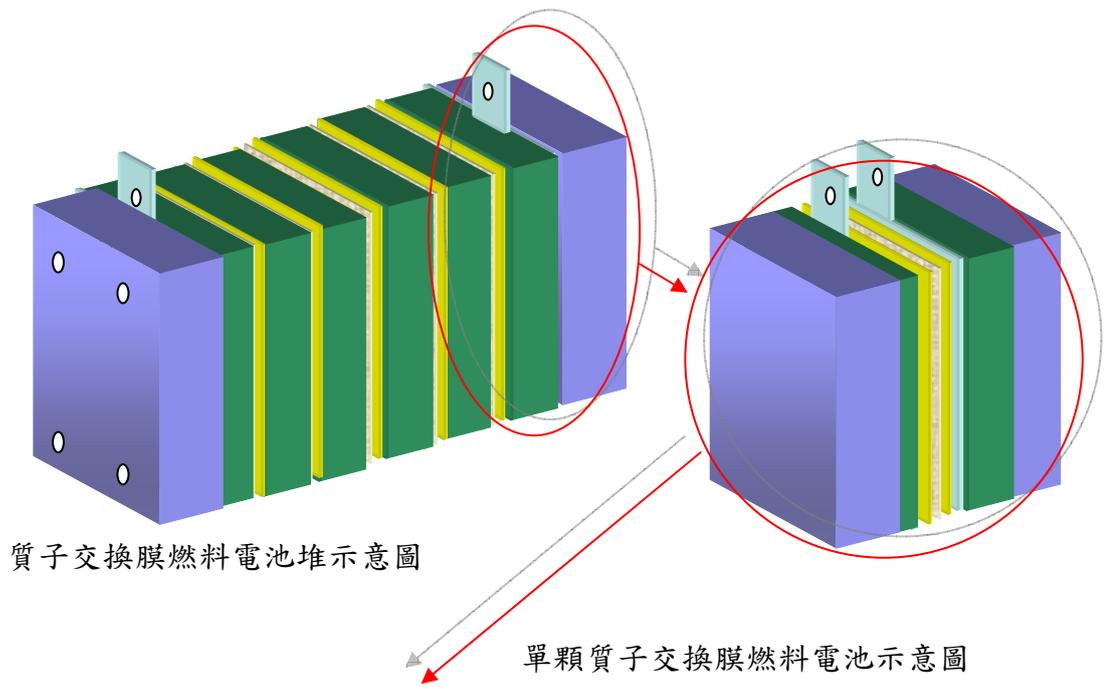


圖 1-4 質子交換膜燃料電池元件圖

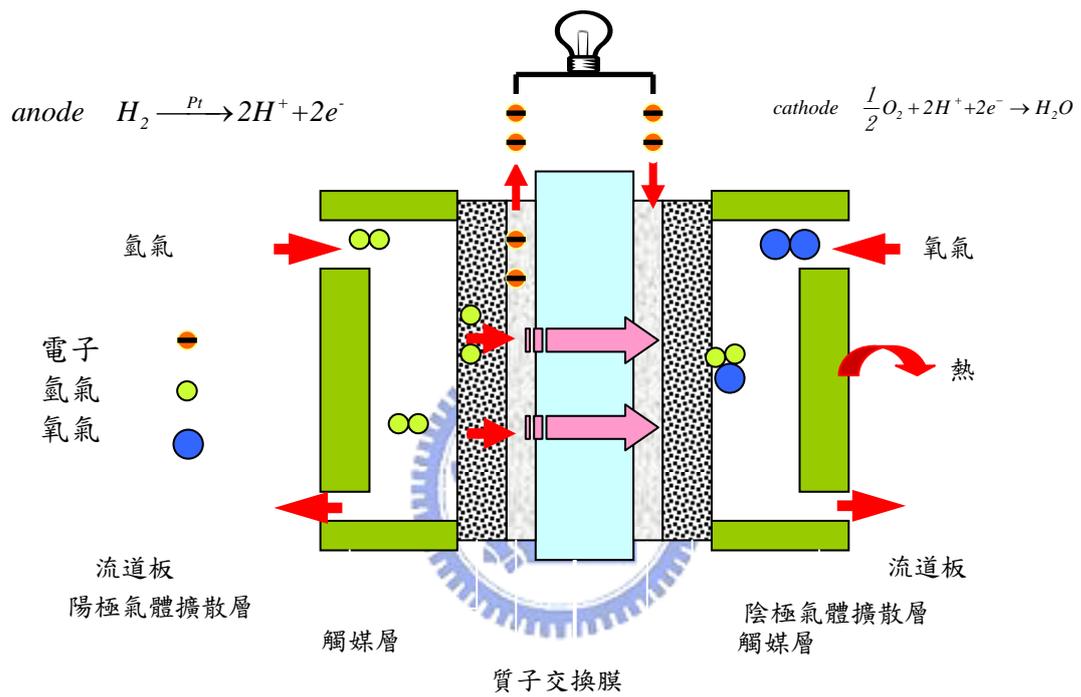


圖 1-5 燃料電池反應示意圖

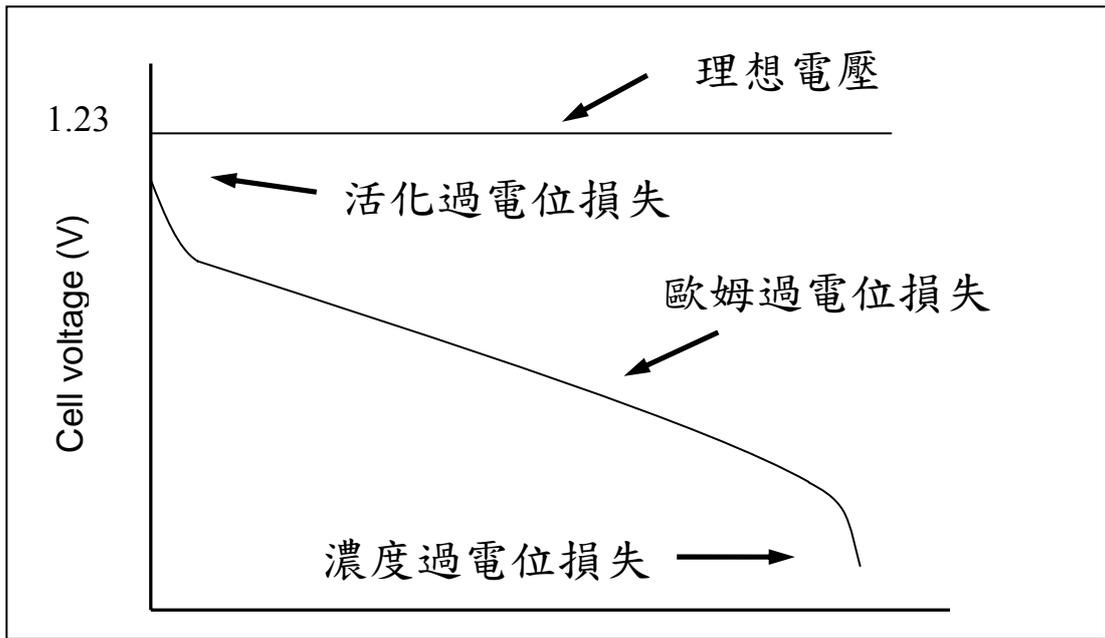


圖 1-6 燃料電池極化曲線圖

## 二、理論分析

近年來，PEMFC 的分析開始採用計算流體力學(Computational fluid dynamics, CFD)模式。Gurau et al.[9]發表了全電池 2-D 分析模式，Um et al.[20]與 Wang et al.[16]也發展相同模式但考慮雙相流模式，Berning et al.[21]發展 3-D 使用 CFD 探討 MEA 的電化學反應考慮了對流熱傳與質傳，Mazumder and Cole [22, 23]同樣探討 3-D PEMFC 的 CFD 水傳輸模式。根據之前的分析模式，本研究欲建立燃料電池之三維全模組計算模型，其模型之幾何尺寸如下：電池尺寸大小為長 23mm x 寬 23mm x 高 2.845mm、擴散層厚 0.4mm、觸媒層厚 0.005mm、質子交換膜厚 0.035mm，肋條 1mm 流道部分，在陽極採用直通型流道設計，而在陰極流道採用單蛇形流道，其流道皆為寬 1mm x 高 1 mm。針對陰極蛇形流道加入擋板的部份，沿著蛇形流道位置在  $y=0.11\text{m}$ 、 $y=1.31\text{m}$  及  $y=2.75\text{m}$  的位置加入長 x 寬 x 高=1mm x 1mm x 1mm 的擋板，並且完全擋住流道使其成為一個指差型設計，如圖 2-1~2-4 所示，針對加入的效應對性能產生的影響作討論。在數值模擬分析中，陽極與陰極之供給燃料各為相對濕度 100%之氫氣與相對濕度 100%之空氣、陽極與陰極入口壓力都為一大氣壓、電池操作溫度為  $T=323\text{K}(50^\circ\text{C})$ 、入口燃料流量陽極與陰極各為 260cc/min，電化學反應參數與各層結構之物理特性如表 2-1 所示。

本論文將燃料電池分為七層，如圖 1-3，分別為

1. 陰極氣體流道(Cathode flow channel)
2. 陰極氣體擴散層(Cathode Diffusion layer)
3. 陰極觸媒層(Cathode catalyst layer)
4. 質子交換膜(Membrane)

5. 陽極觸媒層 (Anode catalyst layer)
6. 陽極氣體擴散層 (Anode Diffusion layer)
7. 陽極氣體流道 (Anode flow channel)

## 2.1 基本假設

1. 氣體為理想氣體
2. 三維、穩態、等溫系統
3. 流場為層流
4. 氣體擴散層、觸媒層與薄膜為均勻等向多孔性材質
5. 在低流速下忽略對流產生的影響，以 Darcy's Law 描述氣體進入氣體擴散層與觸媒層的行為

## 2.2 數學模式

為描述燃料電池內部反應氣體的傳輸、各層界面之質量傳遞及觸媒層所產生的電化學反應，因此研究中將藉由下列統御方程式描述之 (Wang and Cheng, [38]; Wang et. Al., [16])：

連續方程式：

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} + \frac{\partial W}{\partial Z} = 0 \quad (2.1)$$

X-動量方程式：

$$\varepsilon \left( U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} + W \frac{\partial U}{\partial Z} \right) = -\frac{\varepsilon}{\rho} \frac{\partial P}{\partial X} + \nu \varepsilon \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right) + S_u \quad (2.2)$$

Y-動量方程式：

$$\varepsilon \left( U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} + W \frac{\partial V}{\partial Z} \right) = -\frac{\varepsilon}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Y} + \nu \varepsilon \left( \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right) + S_v \quad (2.3)$$

Z-動量方程式：

$$\varepsilon \left( U \frac{\partial W}{\partial X} + V \frac{\partial W}{\partial Y} + W \frac{\partial W}{\partial Z} \right) = -\frac{\varepsilon}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Z} + \nu \varepsilon \left( \frac{\partial^2 W}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Z^2} \right) + S_w \quad (2.4)$$

濃度方程式：

$$\varepsilon \left( U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} \right) = D_{n,eff} \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) + S_c + S_L \quad (2.5)$$

上述之動量方程式中， $n$  表示為各物種氣體，對陰極而言進入氣體為空氣(氧氣、水蒸氣、氮氣)，而對陽極而言進入氣體為氫氣與水蒸氣； $\varepsilon$  表示多孔性介質的孔隙度，並隨著燃料電池各層的結構而有所不同；而  $S_u$ 、 $S_v$ 、 $S_w$  表示擴散層及觸媒層中反應氣體在多孔性介質內流動的修正項，以及質子交換膜中氫離子之傳輸項， $C_F$  表示二次阻力因子(Quadratic Drag Factor)， $C_F = \frac{1.75}{\sqrt{150\varepsilon^{1.5}}}$ ；而  $\varepsilon$  及  $K$  則表示氣體擴散層內多孔性材質的孔隙度及可滲透性，而兩者關係可以 Blake-Kozeny 方程式描述之(Dullien, [39])：

$$k = \left( \frac{D_{porous}^2}{150} \right) \left[ \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \right] \quad (2.6)$$

上式中的  $D_{porous}$  表示體積對面積比，即多孔性材質的等效直徑，其可由下式表示之：

$$D_{porous} \equiv 6V'_{porous} / S'_{porous} \quad (2.7)$$

在濃度方程式中， $C_n$  表示第  $n$  成分的濃度， $D_{n,eff}$  表示第  $n$  成分在擴散層內的有效濃度擴散係數，並且會因燃料電池各層內的反應氣體而有不同的擴散係數(如表 2-2 所示)。進一步可用 Bruggemann 關係式(Berning *et al.*, [21])，描述  $D_{n,eff}$  與  $D_n$  的關係，如下所示：

$$D_{n,eff} = D_n \cdot \varepsilon^\tau \quad (2.8)$$

$S_c$  表示濃度方程式的源項，在觸媒層與交換膜時，由於進行電化學反應，因此考慮實際的物理現象後，故對濃度項作修正。為了簡化液態水所產生的兩相流效應，因此在研究中假設液態水僅阻塞多孔性介質中之孔隙，並不是液氣共存之兩相流體，因此利用濃度方程式之  $S_L$ ，以判斷液態水產生之因子，由下式表示 (Mazumder and Cole,

2003b [23]) :

$$S_L = Mk_{con} \frac{\varepsilon_{eff} C_w}{\rho RT} (P_{C_w} - P_{sat}) \quad \text{if } P_{C_w} > P_{sat} \quad (2.9)$$

$$= k_{eva} \varepsilon_{eff} s (P_{C_w} - P_{sat}) \quad \text{if } P_{C_w} < P_{sat} \quad (2.10)$$

上式中的  $s$  表示在多孔性材質中，液態水佔多孔性介質孔體積之比值、 $M$  表示水莫耳數、 $k_{con}$  表示水凝結率、 $k_{eva}$  表示水蒸發率、 $\varepsilon_{eff}$  即為考慮液態水效應時的有效孔隙度修正項，表示如下：

$$\varepsilon_{eff} = \varepsilon(1-s) \quad (2.11)$$

當燃料電池考慮液態水效應，如果電池中水氣壓力大於或小於水氣飽和蒸氣壓，可用(2.9)式及(2.10)式計算液態水的生成量。圖 2-1 為質子燃料電池的計算物理模型，計算區間由陰極流道計算到陽極流道，而在各層之間的方程式描述分別為：

### 1. 陰極氣體流道(Cathode flow channel)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.12)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} + W \frac{\partial U}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial X} + \nu \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right) \quad (2.13)$$

$$\text{Y 方向：} U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} + W \frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Y} + \nu \left( \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right) \quad (2.14)$$

$$\text{Z 方向：} U \frac{\partial W}{\partial X} + V \frac{\partial W}{\partial Y} + W \frac{\partial W}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Z} + \nu \left( \frac{\partial^2 W}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Z^2} \right) \quad (2.15)$$

濃度方程式：

$$U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} = D_n \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) \quad (2.16)$$

### 2. 陰極氣體擴散層(Cathode Diffusion layer)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.17)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} \frac{\partial P}{\partial X} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} U \quad (2.18)$$

$$\text{Y 方向：} \frac{\partial P}{\partial Y} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} V \quad (2.19)$$

$$\text{Z 方向：} \frac{\partial P}{\partial Z} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} W \quad (2.20)$$

濃度方程式：

$$\varepsilon_d^{eff} \left( U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} \right) = (\varepsilon_d^{eff})^{\tau_d} D_n \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) \quad (2.21)$$

### 3. 陰極觸媒層 (Cathode catalyst layer)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.22)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} \frac{\partial P}{\partial X} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa_d} U \quad (2.23)$$

$$\text{Y 方向：} \frac{\partial P}{\partial Y} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa_d} V \quad (2.24)$$

$$\text{Z 方向：} \frac{\partial P}{\partial Z} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa_d} W \quad (2.25)$$

濃度方程式：

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{c,eff} \left( U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} \right) \\ & = (\varepsilon_{c,eff})^{\tau_d} D_k \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) + S_L + S_c \end{aligned} \quad (2.26)$$

相電位方程式：

$$\frac{\partial}{\partial X} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z} \right) = -j_c \quad (2.27)$$

#### 4. 質子交換膜(Membrane)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.28)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} \frac{\partial P}{\partial X} = \rho \varepsilon_{mem,eff} \frac{\nu}{\kappa_{mem}} U \quad (2.29)$$

$$\text{Y 方向：} \frac{\partial P}{\partial Y} = \rho \varepsilon_{mem,eff} \frac{\nu}{\kappa_{mem}} V \quad (2.30)$$

$$\text{Z 方向：} \frac{\partial P}{\partial Z} = \rho \varepsilon_{mem,eff} \frac{\nu}{\kappa_{mem}} W \quad (2.31)$$

濃度方程式：

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{mem,eff} \left( U \frac{\partial C_{mem}}{\partial X} + V \frac{\partial C_{mem}}{\partial Y} + W \frac{\partial C_{mem}}{\partial Z} \right) \\ & = (\varepsilon_{mem,eff})^{\tau_{mem}} D_{mem} \left( \frac{\partial^2 C_{mem}}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_{mem}}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_{mem}}{\partial Z^2} \right) + S_L + S_c \end{aligned} \quad (2.32)$$

相電位方程式：

$$\frac{\partial}{\partial X} \left( \sigma_m \frac{\partial \phi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \sigma_m \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left( \sigma_m \frac{\partial \phi}{\partial Z} \right) = 0 \quad (2.33)$$

#### 5. 陽極觸媒層(Anode catalyst layer)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.34)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} \frac{\partial P}{\partial X} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} U \quad (2.35)$$

$$\text{Y 方向：} \frac{\partial P}{\partial Y} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} V \quad (2.36)$$

$$\text{Z 方向：} \frac{\partial P}{\partial Z} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} W \quad (2.37)$$

濃度方程式：

$$\varepsilon_{c,eff} \left( U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} \right) = (\varepsilon_{c,eff})^{r_d} D_n \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) + S_L + S_c \quad (2.38)$$

相電位方程式：

$$\frac{\partial}{\partial X} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z} \right) = -j_a \quad (2.39)$$

## 6. 陽極氣體擴散層(Anode Diffusion layer)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.40)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} \frac{\partial P}{\partial X} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} U \quad (2.41)$$

$$\text{Y 方向：} \frac{\partial P}{\partial Y} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} V \quad (2.42)$$

$$\text{Z 方向：} \frac{\partial P}{\partial Z} = \rho \varepsilon_{d,eff} \frac{\nu}{\kappa} W \quad (2.43)$$

濃度方程式：

$$\varepsilon_{d,eff} \left( U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} \right) = (\varepsilon_{d,eff})^{r_d} D_n \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) + S_L \quad (2.44)$$

## 7. 陽極氣體流道(Anode flow channel)

$$\text{連續方程式：} \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial U}{\partial Z} = 0 \quad (2.45)$$

動量方程式：

$$\text{X 方向：} U \frac{\partial U}{\partial X} + V \frac{\partial U}{\partial Y} + W \frac{\partial U}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial X} + \nu \left( \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Z^2} \right) \quad (2.46)$$

$$\text{Y 方向：} U \frac{\partial V}{\partial X} + V \frac{\partial V}{\partial Y} + W \frac{\partial V}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Y} + \nu \left( \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2} \right) \quad (2.47)$$

$$\text{Z 方向：} U \frac{\partial W}{\partial X} + V \frac{\partial W}{\partial Y} + W \frac{\partial W}{\partial Z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Z} + \nu \left( \frac{\partial^2 W}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial Z^2} \right) \quad (2.48)$$

濃度方程式：

$$U \frac{\partial C_n}{\partial X} + V \frac{\partial C_n}{\partial Y} + W \frac{\partial C_n}{\partial Z} = D_n \left( \frac{\partial^2 C_n}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 C_n}{\partial Z^2} \right) \quad (2.49)$$

由於質子交換膜有離子的傳遞，為了描述離子在交換膜之間傳遞的情形，則會多出一個相電位的方程式

質子交換膜相電位方程式 (Gurau et.al [9])

$$\frac{\partial}{\partial X} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \right) + \frac{\partial}{\partial Z} \left( \sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z} \right) = 0 \quad (2.50)$$

$\Phi$  表示相電位函數，其與電流密度關係可由下列之關係式描述之：

$$i_x = -\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X} \quad (2.51)$$

$$i_y = -\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y} \quad (2.52)$$

$$i_z = -\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z} \quad (2.53)$$

在不同溫度下的離子傳導性  $\sigma_m (\Omega^{-1} \cdot m^{-1})$  表示如下：

$$\sigma_m(T) = \sigma_m^{ref} \exp \left[ 1268 \left( \frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (2.54)$$

其中  $\sigma_m^{ref}$  為參考離子傳導率，可由下式描述之：

$$\sigma_m^{ref} = 0.005139\lambda - 0.00326 \quad \text{if } \lambda \geq 1 \quad (2.55)$$

在上式  $\lambda$  表示每個氫離子的水含量，其與水蒸氣的活性  $a$  有關，

兩者關係可由下列之關係式描述之：

$$\lambda = 0.043 + 17.81a - 39.85a^2 + 36.0a^3 \quad \text{for } 0 < a \leq 1 \quad (2.56)$$

$$\lambda = 14 + 1.4(a - 1) \quad \text{for } 1 < a \leq 3 \quad (2.57)$$

而上述的水蒸氣活性  $a$ ，可由下面的關係求得 (Springer et al.[7])

$$a = \frac{C_{H_2O}^c}{P^{sat}} \quad (2.58)$$

其中  $C_{H_2O}^c$  表示電池陰極水蒸氣的質量分率、 $P^{sat}$  為飽和蒸氣壓，

可由下式計算：

$$P^{sat} = 10^{-2.1794+0.02953T-9.1837\times 10^{-5}T^2+1.4454\times 10^{-7}T^3} \quad (2.59)$$

觸媒層電化學方程式

陽極側：

$$\frac{\partial}{\partial X}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X}\right) + \frac{\partial}{\partial Y}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y}\right) + \frac{\partial}{\partial Z}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z}\right) = -j_a \quad (2.60)$$

陰極側：

$$\frac{\partial}{\partial X}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial X}\right) + \frac{\partial}{\partial Y}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Y}\right) + \frac{\partial}{\partial Z}\left(\sigma_m \frac{\partial \Phi}{\partial Z}\right) = -j_c \quad (2.61)$$

觸媒層中的電化學反應，可採用 Butler-Volmer equation 計算反應所產生的電流密度。

$$j_a = a_a j_0^{ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2,ref}}\right)^{1/2} \left[ e^{(\alpha_a F / RT)\eta} - \frac{I}{e^{(\alpha_c F / RT)\eta}} \right] \quad (2.62)$$

$$j_c = a_c j_0^{ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2,ref}}\right) \left[ e^{(\alpha_a F / RT)\eta} - \frac{I}{e^{(\alpha_c F / RT)\eta}} \right] \quad (2.63)$$

其中  $a_a j_0^{ref}$ 、 $a_c j_0^{ref}$  為陽極及陰極的交換電流密度、 $\alpha_a$ 、 $\alpha_c$  分別表示陽極及陰極的電荷傳輸率、 $\eta$  為活化過電位、 $F$  為法拉第常數、 $T$  為絕對溫度及  $R$  為氣體常數

## 2.3 邊界條件

流道入口處

$$\text{陽極： } U=0, V=V_{in}^a, W=0, C_{H_2}=C_{H_2}^a, C_{H_2O}=C_{H_2O}^{in} \quad (2.64)$$

$$\text{陰極： } U=0, V=V_{in}^c, W=0, C_{O_2}=C_{O_2}^a, C_{H_2O}=C_{H_2O}^{in}, C_{N_2}=C_{N_2}^{in} \quad (2.65)$$

$$\text{流道與集電板的界面} \quad U=0 \quad V=0 \quad W=0 \quad \frac{\partial C_n}{\partial X}=0 \quad (2.66)$$

$$\text{擋板與流道的界面} \quad U=0 \quad V=0 \quad W=0 \quad \frac{\partial C_n}{\partial Y}=0 \quad (2.67)$$

$$\text{陰極出口處為完全展開流} \quad U=0 \quad \frac{\partial W}{\partial Y}=0 \quad V=0 \quad \frac{\partial C_n}{\partial Y}=0 \quad (2.68)$$

氣體流道與氣體擴散層的界面

$$\begin{aligned} \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial U}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \frac{\partial U}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{channel}}, & \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial V}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \frac{\partial V}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{channel}}, \\ \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial W}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \frac{\partial W}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{channel}}, & U_{Z=Z_{GDL}} &= U_{Z=Z_{channel}}, & V_{Z=Z_{GDL}} &= V_{Z=Z_{channel}}, \\ W_{Z=Z_{GDL}} &= W_{Z=Z_{channel}}, & \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial C_k}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \frac{\partial C_k}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{channel}}, & C_{k,Z=Z_{GDL}} &= C_{k,Z=Z_{channel}} \end{aligned} \quad (2.69)$$

氣體擴散層與觸媒層介面

$$\begin{aligned} \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial U}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial U}{\partial Z} \Big|_{y=Z_{CL}}, & \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial V}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial V}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{CL}}, \\ \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial W}{\partial Z} \Big|_{y=Y_{GDL}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial W}{\partial Z} \Big|_{y=Y_{CL}}, & U_{Z=Z_{GDL}} &= U_{Z=Z_{CL}}, & V_{Z=Z_{GDL}} &= V_{Z=Z_{CL}}, & W_{Z=Z_{GDL}} &= W_{Z=Z_{CL}}, \\ \varepsilon_{eff,GDL} \frac{\partial C_k}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{GDL}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial C_k}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{CL}}, & C_{k,Z=Z_{GDL}} &= C_{k,Z=Z_{CL}} \end{aligned} \quad (2.70)$$

觸媒層與質子交換膜界面

$$\begin{aligned} \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial U}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{CL}} &= 0, & \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial V}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{CL}} &= 0, & \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial W}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{CL}} &= 0, & U_{Z=Z_{CL}} &= 0, & V_{Z=Z_{CL}} &= 0, \\ W_{Z=Z_{CL}} &= 0, & \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial C_k}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{CL}} &= 0, & \varepsilon_{eff,MEM} \frac{\partial U}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{MEM}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial U}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{CL}}, \\ \varepsilon_{eff,MEM} \frac{\partial Z}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{MEM}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial V}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{CL}}, & \varepsilon_{eff,MEM} \frac{\partial W}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{MEM}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial W}{\partial Y} \Big|_{Z=Z_{CL}}, & U_{Z=Z_{MEM}} &= U_{Z=Z_{CL}}, \\ V_{Z=Z_{MEM}} &= V_{Z=Z_{CL}}, & W_{Z=Z_{MEM}} &= W_{Z=Z_{CL}}, \\ \varepsilon_{eff,MEM} \frac{\partial C_s}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{MEM}} &= \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial C_s}{\partial Z} \Big|_{Z=Z_{CL}}, & C_{s,Z=Z_{MEM}} &= C_{s,Z=Z_{CL}} \end{aligned} \quad (2.71)$$

因為離子傳輸和電滲現象引起水在薄膜的傳輸，所以

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{eff,mem} \left. \frac{\partial U}{\partial Z} \right|_{Z=Z_{mem}} &= \varepsilon_{eff,CL} \left. \frac{\partial U}{\partial Z} \right|_{y=Z_{CL}}, \quad \varepsilon_{eff,mem} \left. \frac{\partial V}{\partial Z} \right|_{Z=Z_{mem}} = \varepsilon_{eff,CL} \left. \frac{\partial V}{\partial Z} \right|_{Z=Z_{CL}}, \\
 \varepsilon_{eff,mem} \left. \frac{\partial W}{\partial Z} \right|_{y=Y_{mem}} &= \varepsilon_{eff,CL} \left. \frac{\partial W}{\partial Z} \right|_{y=Y_{CL}}, \quad U_{Z=Z_{mem}} = U_{Z=Z_{CL}}, \quad V_{Z=Z_{mem}} = V_{Z=Z_{CL}}, \quad W_{Z=Z_{mem}} = W_{Z=Z_{CL}}, \\
 \varepsilon_{eff,mem} \left. \frac{\partial C_k}{\partial Z} \right|_{Z=Z_{mem}} &= \varepsilon_{eff,CL} \left. \frac{\partial C_k}{\partial Z} \right|_{Z=Z_{CL}}, \quad C_{k,Z=Z_{mem}} = C_{k,Z=Z_{CL}}
 \end{aligned} \tag{2.72}$$

相電位在觸媒層與質子交換膜的邊界條件

$$\Phi_{CL} = \Phi_{MEM}, \quad \varepsilon_{eff,CL} \frac{\partial \Phi_{CL}}{\partial y} = \frac{\partial \Phi_{MEM}}{\partial y} \tag{2.73}$$



表 2-1 模型參數

流道長度(mm)	L	23
流道寬度(mm)	w	1
流道高(mm)	h	1
肋條寬度(mm)	w <sub>r</sub>	1
流道曲率	$\tau_{ch}$	1
流道孔隙度(m <sup>2</sup> )	$\varepsilon_{ch}$	1
流道滲透係數(m <sup>2</sup> )	$\kappa_{ch}$	$\infty$
氣體擴散層厚度(mm)	t <sub>d</sub>	0.005
氣體擴散層曲率	$\tau_d$	1.5
氣體擴散層孔隙度	$\varepsilon_d$	0.5
氣體擴散層滲透率(m <sup>2</sup> )	$\kappa_d$	1.76E-10
觸媒層厚度(mm)	$\varepsilon_c$	0.005
觸媒層曲率	$\tau_c$	1.5
觸媒層孔隙度	$\varepsilon_c$	0.4
觸媒層滲透率(m <sup>2</sup> )	$\kappa_c$	1.76E-11
質子交換膜厚度(mm)	t <sub>mem</sub>	0.035
質子交換膜曲率	$\tau_m$	Dagon model
質子交換膜孔隙度	$\varepsilon_m$	0.28
質子交換膜滲透率(m <sup>2</sup> )	$\kappa_m$	1.28E-18
陽極參考電流密度	$a_a j_0^{ref}$	9E+008
陰極參考電流密度	$a_c j_0^{ref}$	150
陽極電荷傳輸率	$\alpha_a$	0.5
陰極電荷傳輸率	$\alpha_c$	1.5

陽極壓力		1atm
陰極壓力		1atm
電池溫度		323K
輸入燃料加濕度		100%
輸入空氣加濕度		100%
陽極流率(cc/min)		260
陰極流率(cc/min)		260



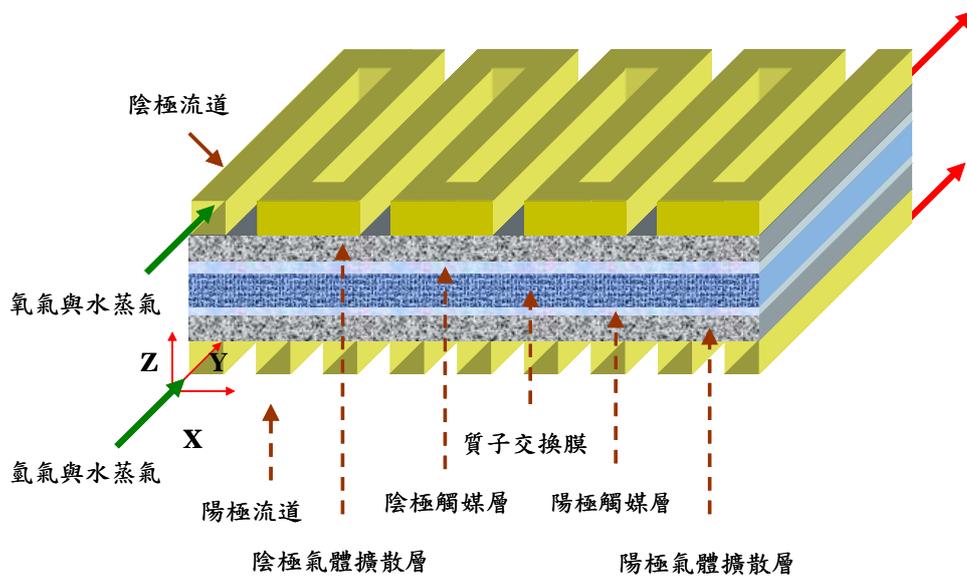


圖 2-1 質子交換膜燃料電池物理模型，單蛇形流道未加擋板設計

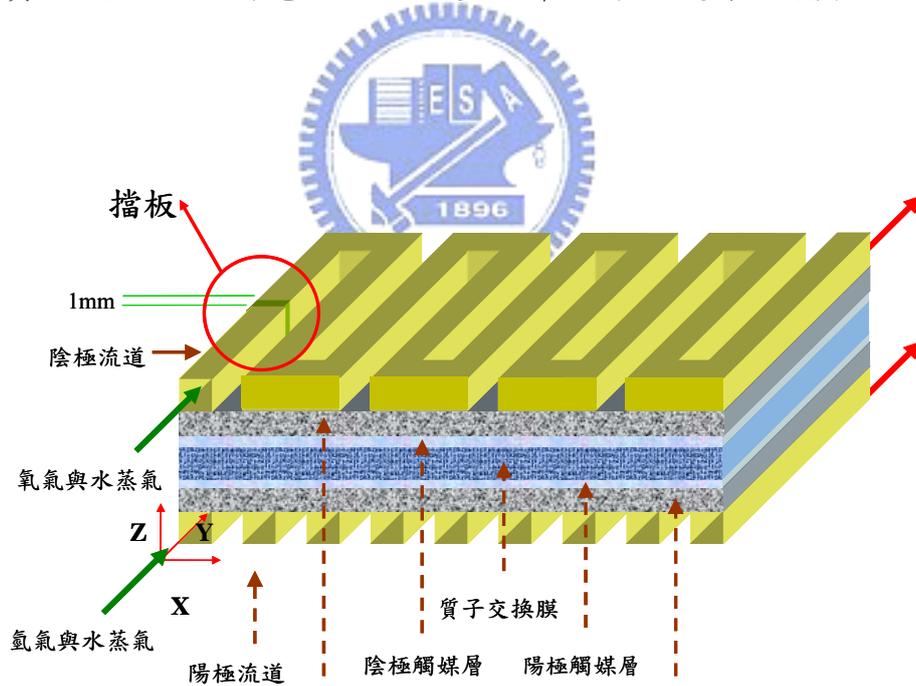


圖 2-2 質子交換膜燃料電池物理模型 Type I，在陰極流道第一條流道位置( $y=0.11m$ )加入擋板

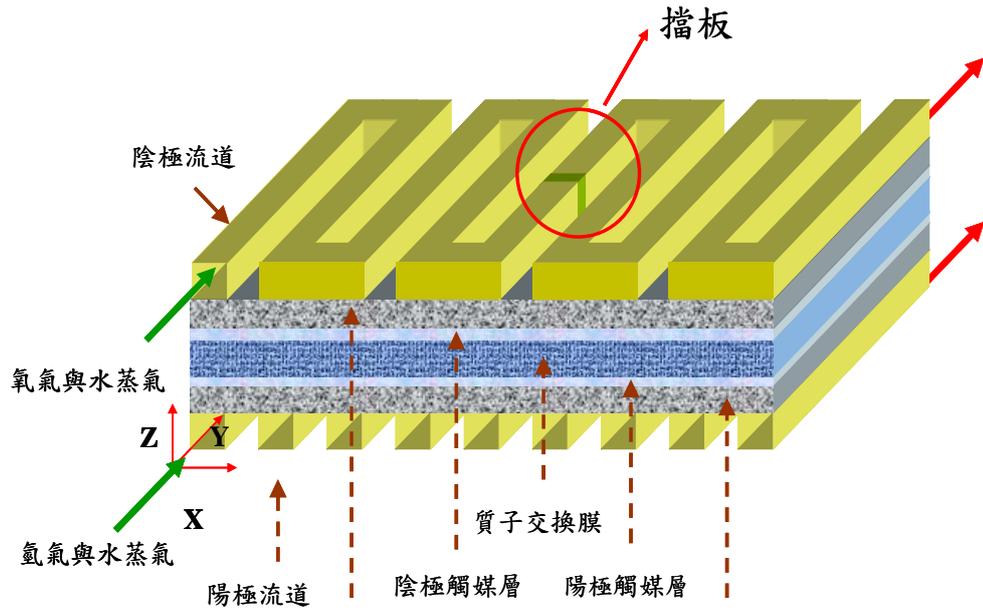


圖 2-3 質子交換膜燃料電池物理模形 Type II，在陰極流道第一條流道位置( $y=1.31\text{m}$ )加入擋板

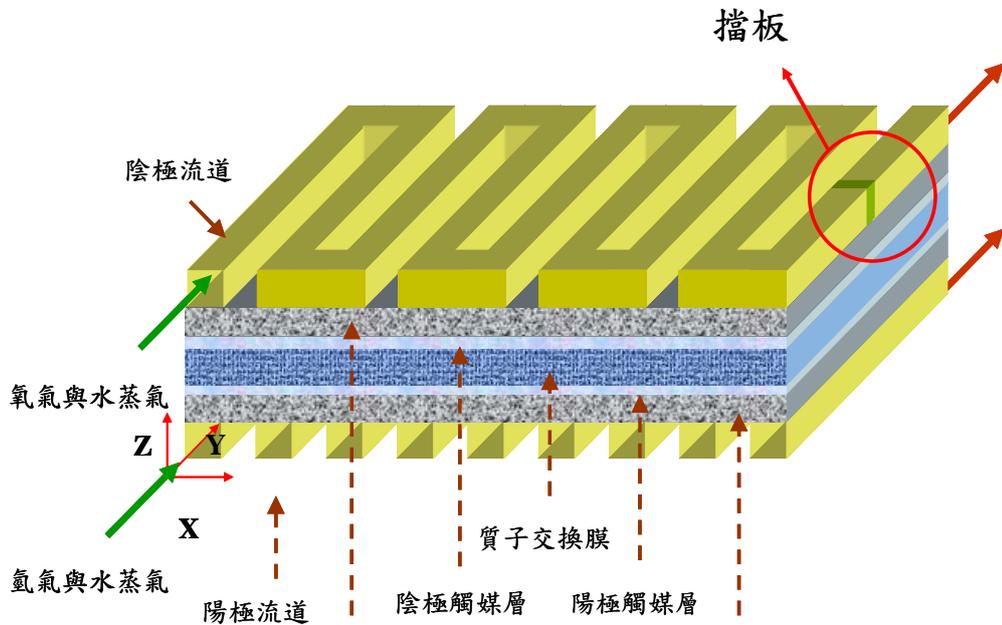


圖 2-4 質子交換膜燃料電池物理模形 Type III，在陰極流道第一條流道位置( $y=2.75\text{m}$ )加入擋板

## 三、數值方法

### 3.1 數值方法

本論文使用 CFD-ACE+程式，針對燃料電池的流體在多孔材質的傳輸、電化學反應及整合質傳、電化學反應及水的傳輸與模擬提供完整的介面使用，並以有限體積積分法 (Finite Volume Method) 將計算區域切割成許多控制體積之計算隔點，在各統御方程式離散為計算隔點上之代數方程式。下式表示之偏微分方程式，即是用來描述系統的物理狀態。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla \cdot (\rho\bar{u}\phi - \Gamma_{\phi}\nabla\phi) = S_{\phi} \quad (3.1)$$

其中

$t$ ：時間。

$\phi$ ：相關變數 (General Dependent Variable)，如速度分量或濃度等。

$\Gamma_{\phi}$ ：交換係數 (Exchange Coefficient)，如黏滯係數或擴散係數等。

$S_{\phi}$ ：源項 (Source Term)，如壓力梯度 (Pressure Gradient) 等。

$\bar{u}$ ：速度向量。

$\rho$ ：密度。

因此，流場之連續方程式、動量及濃度方程式皆能用式(3.1)來表示。

### 3.1 SIMPLEC

CFDRC Code 係運用 SIMPLEC(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Consistent)，是著名的運算法 SIMPLE 的進階，它是一個利用連續方程式的推導來作壓力修正(pressure-correction)及速度修正(velocity-correction)，並經由疊代來求得壓力場及速度場的方法。如圖 3-1(b)、(c)所示使用交錯格點，控制體積中心為  $e$  界面

之  $x$  方向動量方程式的差分形式

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + b_e + A_e (P_P - P_E) \quad (3.2)$$

其中  $P$  壓力、 $A_e$  為以  $P$  點為中心之控制體積之界面  $e$  的面積，而下標代表位置  $e$  周圍的格點。在 3.16 式中必須提供壓力場才能求解速度  $u$ 。然而壓力場卻無法預先知道。假若先用一猜測的壓力(或最近一次疊代中可用的壓力) $P^*$ 來解此方程式，則會得到一速度  $u^*$ 滿足下列方程式

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b_e + A_e (P_P^* - P_E^*) \quad (3.3)$$

通常  $u^*$ 不會滿足連續方程式。而 SIMPLEC 的策略就是找到  $u^*$ 和  $P^*$ 的修正值來獲得一改善的解。

我們用  $u$  和  $P$  在代表速度及壓力的修正值，

$$u = u^* + u' \quad (3.4)$$

$$P = P^* + P' \quad (3.5)$$

將 3.2 式減去 3.3 式可獲得一  $u$  與  $P$  的關係式

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u'_{nb} + A_e (P'_P - P'_E) \quad (3.6)$$

將等號兩邊同減  $\sum a_{nb} u'_e$  則

$$(a_e - \sum a_{nb}) u'_e = \sum a_{nb} (u'_{nb} - u'_e) + A_e (P'_P - P'_E) \quad (3.7)$$

將  $u'_{nb}$  近似  $u'_e$ ，並且將  $u' = u - u^*$  代入 3.7 式則

$$u_e = u_e^* + d_e (P'_P - P'_E) \quad (3.8)$$

在此

$$d_e = \frac{A_e}{a_e - \sum a_{nb}} \quad (3.9)$$

如圖 3-1(a)中之控制體積之連續方程式可表示為

$$(\rho u A)_w - (\rho u A)_e + (\rho u A)_s - (\rho u A)_n = 0 \quad (3.10)$$

利用如 3.8 式的方法導出  $uw$ 、 $ue$ 、 $vs$ 、 $vn$  並代入 3.24 式中則可得 3.11 式

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + b \quad (3.11)$$

$$a_E = (\rho A d)_e \quad (3.12)$$

$$a_W = (\rho A d)_w \quad (3.13)$$

$$a_N = (\rho A d)_n \quad (3.14)$$

$$a_S = (\rho A d)_s \quad (3.15)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S \quad (3.16)$$

$$b = (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho u^* A)_s - (\rho u^* A)_n \quad (3.17)$$

對三維而言，3.11 可改為

$$a_P P'_P = a_E P'_E + a_W P'_W + a_N P'_N + a_S P'_S + a_Z P'_Z + a_T P'_T + b \quad (3.18)$$

$$a_E = (\rho A d)_e \quad (3.19)$$

$$a_W = (\rho A d)_w \quad (3.20)$$

$$a_N = (\rho A d)_n \quad (3.21)$$

$$a_S = (\rho A d)_s \quad (3.22)$$

$$a_Z = (\rho A d)_z \quad (3.23)$$

$$a_T = (\rho A d)_t \quad (3.24)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_Z \quad (3.25)$$

$$b = (\rho u^* A)_w - (\rho u^* A)_e + (\rho u^* A)_s - (\rho u^* A)_n + (\rho u^* A)_t - (\rho u^* A)_z \quad (3.25)$$

SIMPLEC 的程序可總結如下：

1. 猜一壓力場的值。
2. 求解動量方程式之離散式 3.3 式獲得  $u^*$ 、 $v^*$  及  $w^*$ 。

3. 求解3.25g 式之b 並求解3.25a式之P。
4. 利用3.22 式修正速度場及3.19 式修正壓力場。
5. 解計算區域中的其他離散式，如能量方程、成份方程等
6. 利用步驟4.所求得之壓力當作下一次疊代的P\*值重複步驟2.~步驟6.直到收斂。

## 3.2 上風差分法

演算法則確定以後，想從複雜的偏微分方程式中求解尚不可得，仍必須以有限元素法(Finite Element Method)或有限差分法(Finite Difference Method)來進行隔點驗算。一般來說，計算流體力學常用有限差分法(Finite Element Method)來計算，而有限差分法中不同的差值法(Interpolation Method)有不同的適用性及優缺點。本文中使用上風差分法作為運算的差值法

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} + a(x)\frac{d\theta}{dx} = c(x) \quad (3.26)$$

上市為二階常微分方程式，需要兩個邊界條件求得且存在且唯一解。若將是中一階微分項係數 a 趨近於無限大值，則此式會降為一階常微分方程式，因而只需要其中一個邊界條件即可。就數值觀點而言，此代表下由隔點的權重係數 (Weighting factor) 應該自動減為零，因此下游邊界條件不會影響到求解過程

其差分形式如下列形式

$$a_w\theta_w - a_p\theta_p + a_E\theta_E = a_R \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} a_w &= 1-z & \text{if } z \leq 0 \\ &= 1 & \text{if } z > 0 \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} a_E &= 1 & \text{if } z \leq 0 \\ &= 1+z & \text{if } z > 0 \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$a_p = a_w + a_E \quad (3.30)$$

$$a_R = c(\Delta x)^2 \quad (3.31)$$

上風差分法分成兩種：一、當流場繼續朝 +X 方向移動( $a \leq 0$ )時，對流項是以後差分(Backward Difference)來離散化。相反的，當流場朝 -X 方向移動時( $a > 0$ )，對流項是以前差分(Forward Difference)來離散化。上風差分法的優點為(3.27)式中的權重係數總為正值，也就是滿足將方程式離散化的基本法則，其所得的解符合實際物理現象。

對於 $|z| = \infty$ 的情況，(3.27)式和(3.29)式的係數變為

$$\begin{aligned} a_w &= -z & \text{if } z \leq 0 \\ &= z & \text{if } z > 0 \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} a_E &= 1 & \text{if } z \leq 0 \\ &= z & \text{if } z > 0 \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$z = a\Delta x \quad (3.34)$$

方便起見，(3.27)式的方法被稱為上風差分法；而對於沒有二次微分項的(3.32)(3.33)式情況，則被稱作完全上風法(Fully Upwind Difference)。當格點 Plect 數(Grid Plect Number  $\equiv a\Delta x$ )足夠大時，完全上風法具有很好的解析能力；相對當 Plect 數足夠小時，中間插分法的解析能力較佳。Spalding 結合兩種方法的特性優點提出了混合差分法(Hybrid Difference)。為了確定權重係數不為負值，此方法在 $|z| \leq 2$ 為中間插分法，而在 $z > 2$ 時便為完全上風法

### 3.3 有限體積積分法

以二維通用守恆方程式為例：

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi \quad (3.35)$$

為了離散此方程式，將計算區域分割成許多各控制體積，如圖 3.1，斜線部分為一控制體積，P 點為此控制機的中心點，而 E、W、N、S 則分別為其相臨之控制體積的中心點。若我們在此斜線之控制

體積中對(3.35)式作體積分，則可獲得(3.36) 式。

$$\int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial y} \right] dx dy = \int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S_\phi \right] dx dy \quad (3.36)$$

首先，說明等號左邊對流項之離散，將對流項體積分後可得(3.37) 式

$$\int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial y} \right] dx dy = [(\rho u \phi)_e - (\rho u \phi)_w] \Delta y + [(\rho u \phi)_n - (\rho u \phi)_s] \Delta x \quad (3.37)$$

u 式中 e、w、n、s 分別為控制體積與控制體積之接面處，在此處之  $\phi$  值我們利用上風法(upwind scheme)來取得，即在該位置上之速度方向上游的值，如下式所示

$$\begin{aligned} \phi_e &= \phi_P \quad u_e > 0 \\ &= \phi_E \quad u_e < 0 \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \phi_w &= \phi_W \quad u_w > 0 \\ &= \phi_P \quad u_w < 0 \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \phi_n &= \phi_P \quad u_n > 0 \\ &= \phi_N \quad u_n < 0 \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} \phi_s &= \phi_S \quad u_s > 0 \\ &= \phi_P \quad u_s < 0 \end{aligned} \quad (3.41)$$



對 3.35 式中等號右邊之擴散項作積體分則可得到(3.42)式，再利用中央差分法(central difference scheme)作離散，如 3.7 式所示，再將 3.7 式代入 3.6 式，獲得擴散項之離散式，如 3.8 式所示。

$$\int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial y} \right] dx dy = [(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x})_e - (\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x})_w] \Delta y + [(\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y})_n - (\Gamma \frac{\partial \phi}{\partial y})_s] \Delta x \quad (3.42)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (3.43)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \quad (3.44)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_n = \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} \quad (3.45)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_s = \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y} \quad (3.46)$$

$$\int_s^n \int_w^e \left[ \frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \phi)}{\partial y} \right] dx dy = \left[ \left( \Gamma \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \right)_e - \left( \Gamma \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x} \right)_w \right] \Delta y + \left[ \left( \Gamma \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta y} \right)_n - \left( \Gamma \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta y} \right)_s \right] \Delta x \quad (3.47)$$

對源項之離散，首先如(3.48)式所示，將其分成兩部分，一為不與 $\phi_P$ 相乘的項之和 $S_c$ ，另一則為與 $\phi_P$ 相乘的項之和 $S_p$ ，若 $S_\phi$ 不為 $\phi_P$ 之函數則， $S_p$ 為零，反之則不為零。若 $S_p$ 亦為 $\phi_P$ 之函數，則其所含之 $\phi_P$ 用前次疊代的值計算。

$$S_\phi = S_c + S_p \phi_P \quad (3.48)$$

對 3.9 式作控制體積之體積分則可獲得 3.10 式。

$$\int_s^n \int_w^e S_\phi dx dy = (S_c + S_p \phi_P) \Delta x \Delta y \quad (3.49)$$

最後，我們將上述各項之離散之結果合併整理獲得有限差分式 (finite difference equation)(3.50)式，其中 $a_P$ 、 $a_E$ 、 $a_W$ 、 $a_N$ 、 $a_S$ 分別為與 $\phi_P$ 、 $\phi_E$ 、 $\phi_W$ 、 $\phi_N$ 、 $\phi_S$ 相乘的項之係數之和，如此一來便可對 3.11 式作疊代計算來求得 f 之值。若(3.50)式為非線性，即 $a_P$ 、 $a_E$ 、 $a_W$ 、 $a_N$ 、 $a_S$ 為 f 之函數，則其所含之 f 用前次疊代的值作計算。

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (3.50)$$

在此

$$a_P = a_S + a_W + a_N + a_E - S_p \Delta x \Delta y \quad (3.51)$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y \quad (3.52)$$

在本文中之三維模式下，可將 3.11 式改寫如 3.14 式之三維模式

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_T \phi_T + a_Z \phi_Z + b \quad (3.53)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_Z - S_p \Delta x \Delta y \Delta z \quad (3.54)$$

### 3.4 解題流程

本文利用 CFDRC 計算流體力學軟體做為燃料電池之數值模擬，解題流程如 3.2 所示。首先先輸入各邊界設之設定的值與條件、並在各計算區域中對計算格點給定值並開始進行疊代運算。在疊代運算中利用 SIMPLEC 法求出壓力場及速度場，並求出電流、電位及濃度場

本文之收斂條件為以整各計算區域兩次疊代之殘值最大相對誤差小於  $10^{-6}$  為基準，格點驗證在三維數值模型中，由於燃料電池為不同性質之七層結構，其每層厚度都不相同，並且燃料電池內產生的電化學反應是在陽極觸媒層與陰極觸媒層所發生，因此在格點配置上，Z 方向將採取非均勻格點之配置，由氣體流道、擴散層往觸媒層方向所建構的格點將漸趨密集；質子交換膜的格點則是以對稱方式往觸媒層漸趨密集，同時在觸媒層將配置較多的格點數，以求數值模擬的精確性。

### 3.5 格點數測試

本文之測試採用三組不同之格點，分別為格點數分別為(I)70 x 70 x 25、(II)93 x 93 x 33、(III)116 x 116 x 41，在基本之操作條件下，陽極與陰極之供給燃料各為相對濕度 100%之氫氣與相對濕度 100%之空氣、陽極與陰極入口壓力都為一大氣壓、電池操作溫度為  $T=323K(50^{\circ}C)$ 、入口燃料流量為陽 260cc/min 與陰極 260cc/min，以探討不同格點數對燃料電池 I-V 性能曲線的影響，由圖 3-3 結果發現，格點數 116 x 116 x 41 與論文模擬所使用的隔點數 93 x 93 x 33 的燃料電池 I-V 性能曲線，並不會因為格點數的不同而有很大的差異，在操作電壓 0.2V 時，誤差約為 0.423%；然而在格點 70 x 70 x 25 時，由於格點數目較 116 x 116 x 41 與 93 x 93 x 33 少，因此燃料電池 I-V 性能曲線之誤差較為明顯，在操作電壓 0.2V 時，與格點 116 x 116 x 41

的誤差約為 5.47%。雖然隨著格點數的增加，數值模擬的結果也可能愈趨準確，但是相對執行分析時間也愈久，因此在考量準確性與執行時間下，本文採用格點數為 93 x 93 x 33 作為模型的格點配置。

### 3.6 文獻結果比較

為了驗證本論文所建立之三維全模組燃料電池之數值模型與實際操作性能之差異性，因此針對燃料電池之極化性能曲線加以比較，並引用 Nguyen *et al.*[32]模型與參數來加以驗證，如圖 3-4 三維燃料電池數值分析結果之比較所示，差異在於反應速率與多孔層的導電度的不同，然而單就性能曲線變化趨勢與其模擬近似並符合實際燃料電池情況，據此本論文所建立之三維全模組燃料電池之數值模型能正確的描述出燃料電池之質傳與電化學現象並用以分析燃料電池的問題。



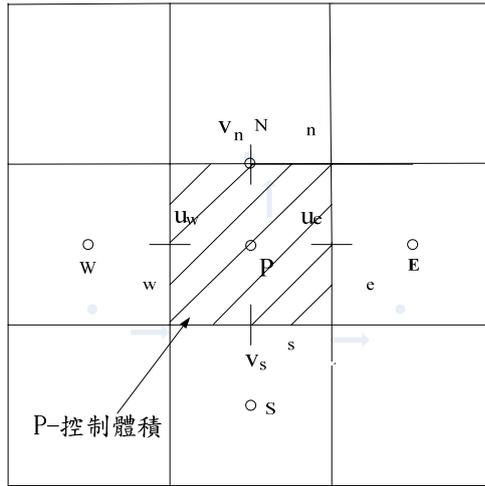


圖 3-1 控制體積格點示意圖(a)

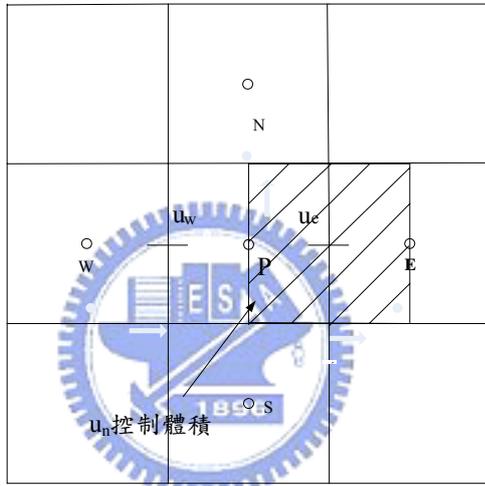


圖 3-1 控制體積格點示意圖(b)

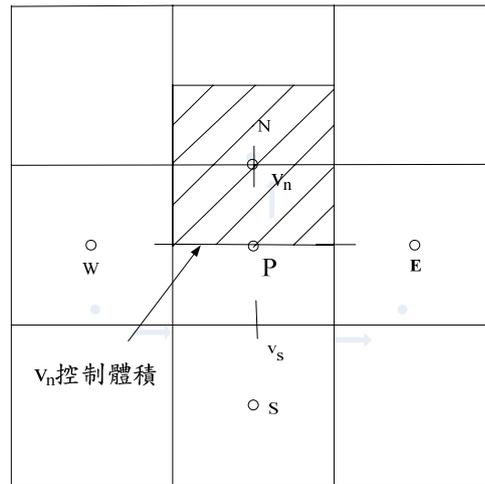


圖 3-1 控制體積格點示意圖(c)

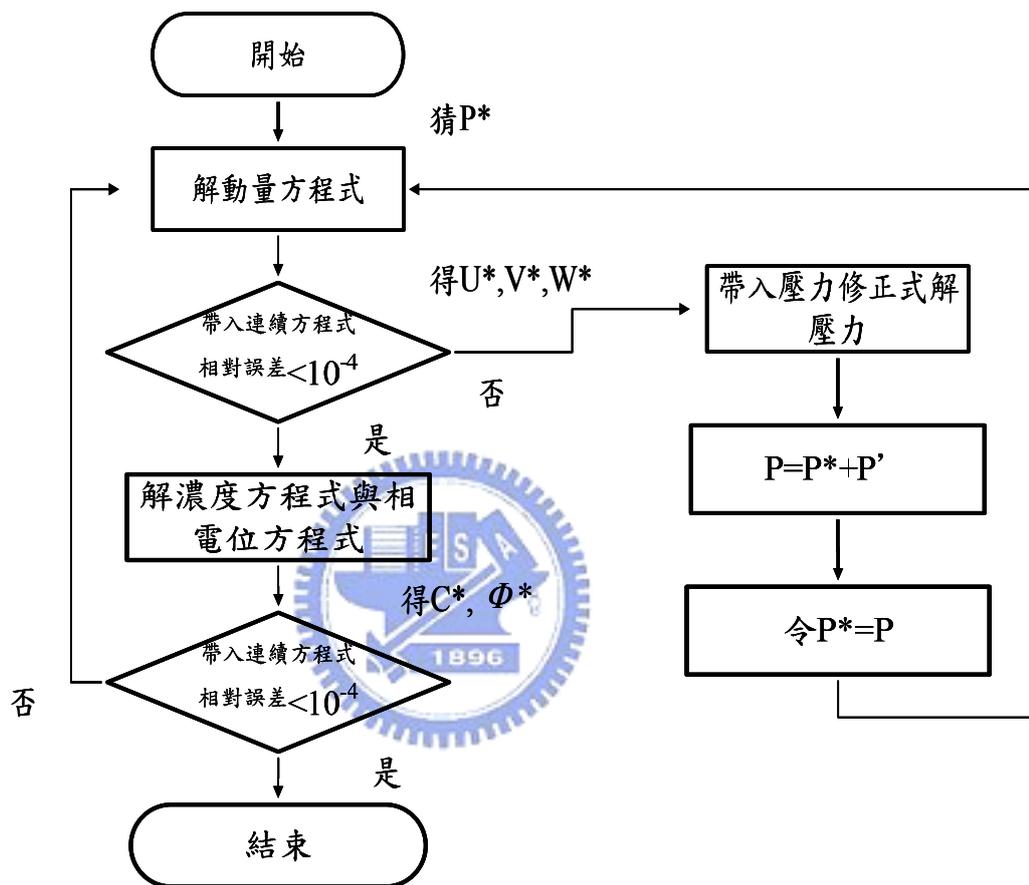


圖 3-2 解題流程圖

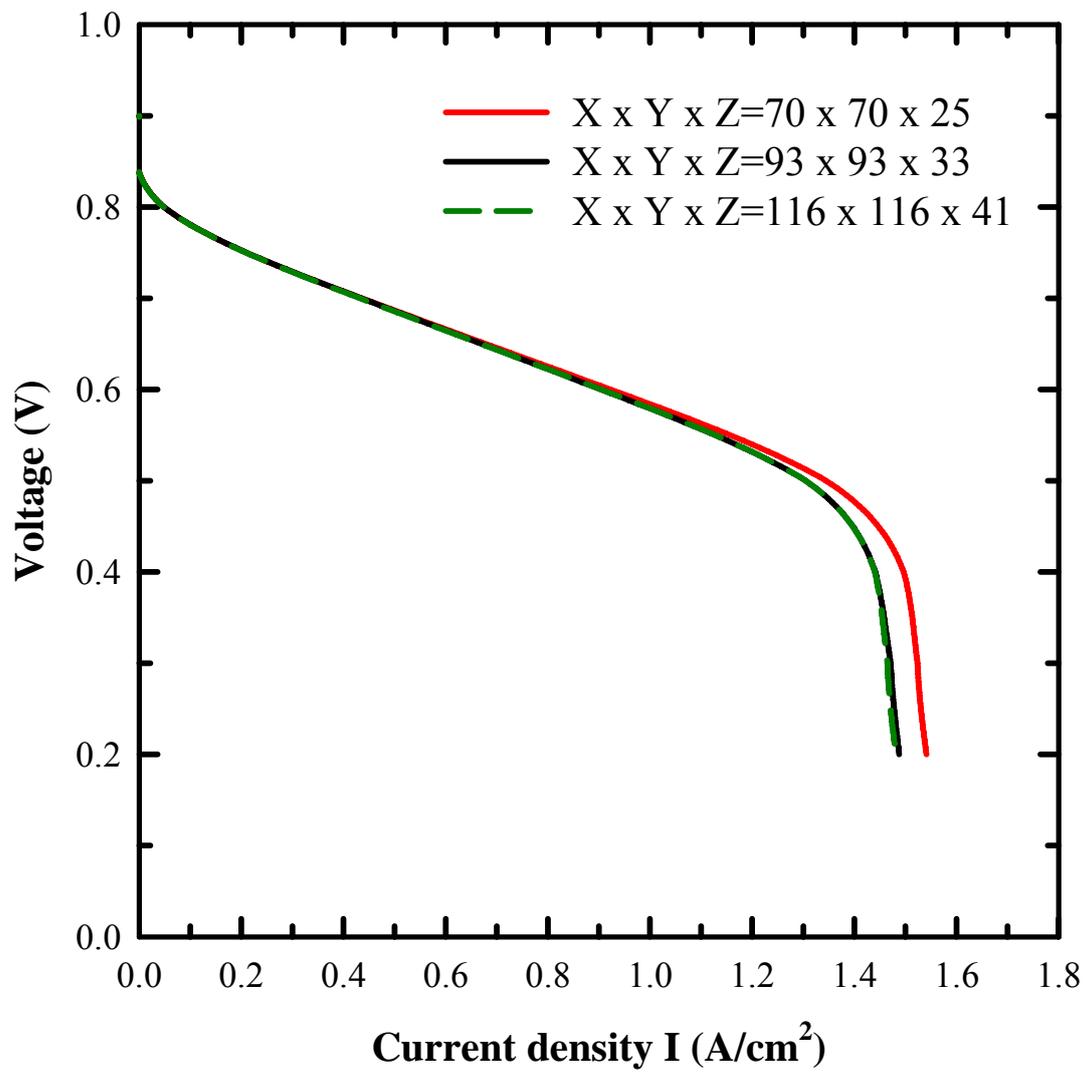


圖 3-3 不同格點數對燃料電池極化曲線的影響

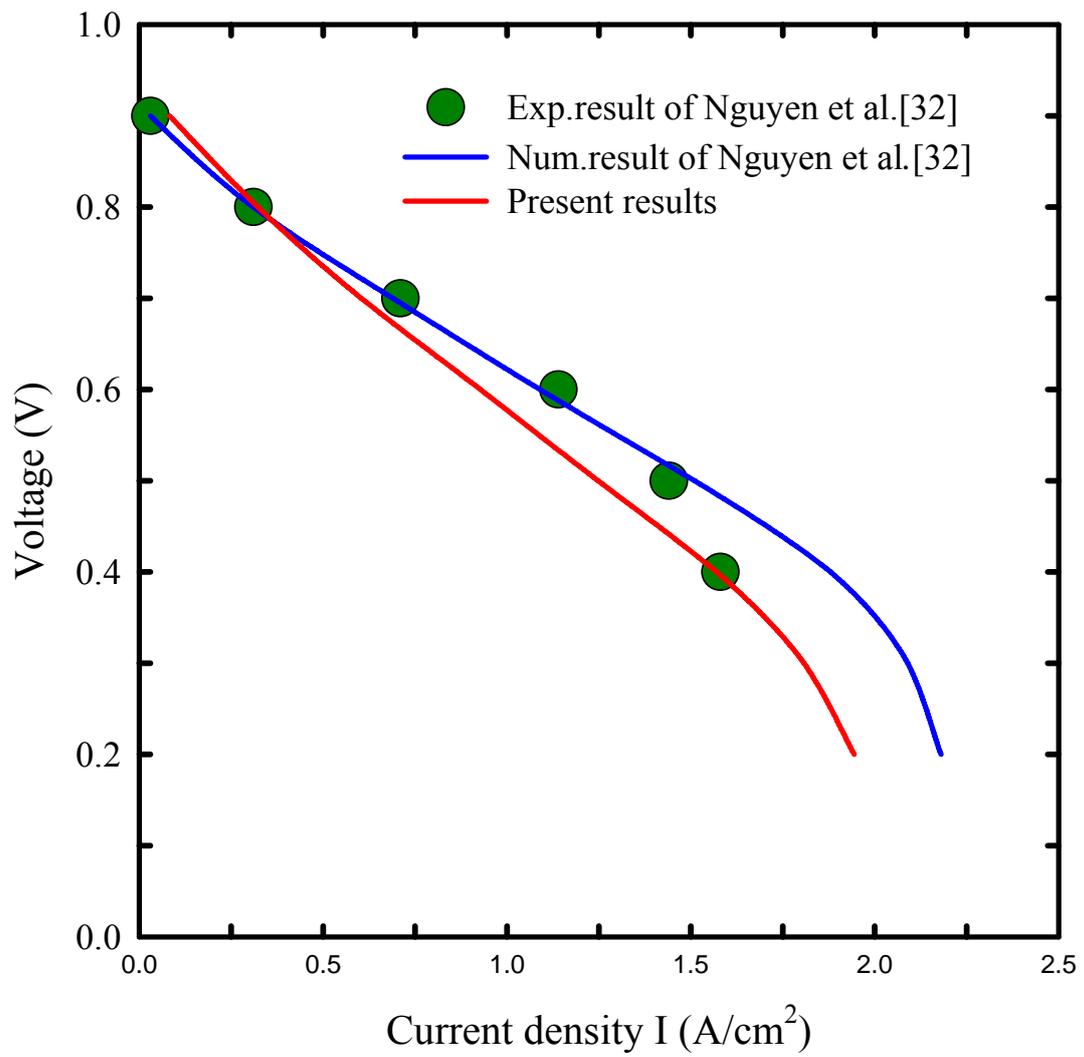


圖 3-4 三維蛇形燃料電池數值分析之比較

## 四 結果與討論

本論文的結果是根據前面章節的基本假設、統馭方程式與邊界條件並配合表 2-1 的參數並使用 CFD-ACE+來進行計算，目的在探討蛇形流道在不同位置加入擋板的條件下對整體效能的影響。沿著蛇形流道位置  $y=0.11\text{m}$ 、 $y=1.31\text{m}$  及  $y=2.75\text{m}$  的位置加入長\*寬\*高= $1\text{mm} \times 1\text{mm} \times 1\text{mm}$  的擋板，並且完全擋住流道使其成為一個指差型設計，如圖 2-1~2-4 所示，針對加入的效應對性能產生的影響作討論。

### 4.1 單蛇形流道(未加擋板設計)與加入擋板的差異

單蛇形流道中的燃料傳輸方式主要是藉由擴散作用與轉折迴流使反應氣體進入擴散層和觸媒層使產生電化學反應，在低操作電壓時因為劇烈的電化學反應使陰極產生大量的水往多孔介質及流道擴散產生水氾濫的問題阻擋氣體的反應面積造成性能下降；加入擋板的目的是藉由強制對流來增加氣體進入氣體擴散層到觸媒層接觸的機會，並且利用對流的作用來帶走電化學反應產生的水達到排水的作用，讓陰極不會因為過多的水阻礙到氣體傳輸到多孔介質以達到最多的反應量。一般而言燃料電池輸出性能的優劣是取決於 I-V 極化曲線與 P-I 功率圖，在理想情況下的開迴路電壓為 1.23V，但由於各種極化損失使電壓下降，圖 4-1 與 4-2 分別表示單蛇形流道與在不同位置加入擋板的蛇形流道之 I-V 極化曲線圖與 P-I 功率圖，圖中可看出加入擋板並不一定能提升電池的性能，與未加入擋板的蛇形流道相比，在第一條流道與最後一條流道加入擋板著實能提高性能，I-V 與 P-I 曲線都會高於單蛇形流道(未加擋板設計)，但是當在單蛇形流道中段，也就是在第六條流道加入擋板時，整體的電池性能會明顯的低於單蛇形流道(未加擋板設計)。圖 4-3~4-6 表示操作電壓 0.7V 時，單蛇

形流道與在各位置加入擋板的蛇形流道對質子交換膜中央介面的電流分佈。比較四種流道分佈，因入口處氧氣濃度較大，電化學反應劇烈使得電流密度較高並往流道後段慢慢遞減，再加上水的生成與累積堵塞住多孔材質與流道使得性能越到下游越呈衰退。四種流道中，以第一條流道加入擋板效應性能最佳，其次是最後一條流道加入擋板，再來是單蛇形流道(未加擋板設計)，最後才是在中間區域第六流道加入擋板。所以進一步討論不同位置的擋板對性能的影響，並將四種流道的設計分開討論

#### 4.1.1 單蛇形流道(未加擋板設計)

圖 4-3 為單蛇形流道(未加擋板設計)的質子交換膜電流密度分佈圖，氣體利用擴散經氣體擴散層到觸媒層產生電化學反應，越到下游由於氧氣濃度越低，所以性能越差；圖 4-7 為單蛇形流道(未加擋板設計)觸媒層與氣體擴散層介面的氧氣濃度分佈圖，圖中可以看出氧氣濃度集中的位置相對電流密度較高，由於氧氣利用擴散作用經氣體擴散均勻的分布在多孔材質上，所以在肋條的部份也會有氧氣濃度的分佈並且越到下游濃度越低；圖 4-8 為單蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層介面的水分佈圖中，電池因為電化學反應產生水會堵塞多孔材質使氧氣無法進到觸媒層，雖然氣體的移動會產生剪應力而帶走水，但越到下游由於速度越慢，所以水會累積在下游阻塞住下游的氧氣進入觸媒層使電池性能下降，所以排水的問題就成了蛇形流道提高性能的一個重要的因素。

#### 4.1.2 蛇形流道 Type I

圖 4-4 為在第一條流道加入擋板的質子交換膜電流密度分佈圖，當一開始加入擋板時因為氧氣的濃度高、速度快且未有水的生成來阻

塞多孔材質與流道，在第一條流道加入擋板能將濃度最高的氧氣經由強制對流的方式經由氣體擴散層到達觸媒層並進行電化學反應，根據 [31] [28] 的研究顯示，由於蛇形流道的氣體在流道與流道間的 cross-flow 體在擴散層行進的方向非唯一，使得氣體擴散層的氣體除了直接進入觸媒層以外也會藉由多孔材質的擴散作用到鄰近的流道。在第一條流道加入了擋板加速了氧氣速度並在擋板介面產生渦流強制氣體進入氣體擴散層，而加速的氣體更會藉由 cross-flow 到第二條流道與第三條流道使氧氣濃度相對的變高，如圖 4-9 所示，進而增加電池的電流密度。而氧氣濃度的轉移與進到氣體擴散層使得擋板後方的氧氣濃度會相對的小於擋板前段使電流密度減少。當進入觸媒層的氧氣濃度增加時，會有較高的電流密度產生，相對的電化學反應所產生的水就會增加，圖 4-10 為氣體擴散層與觸媒層界面的水分佈圖，同樣的電化學反應產生的水會因剪應力及速度將水帶至流道後半段累積，不同的是在擋板後方出現的水較多，進一步探討這區域的現象：圖 4-11 為單蛇形流道(未加擋板設計)氣體擴散層與流道在流道入口長  $y=0.018\text{m}$ 、 $y=0.0195\text{m}$ 、 $y=0.021\text{m}$  與  $y=0.0225\text{m}$  的剖視圖。圖 4-12 為蛇形流道(Type I)氣體擴散層與流道流道在流道入口長  $y=0.018\text{m}$ 、 $y=0.0195\text{m}$ 、 $y=0.021\text{m}$  與  $y=0.0225\text{m}$  的剖視圖，比較兩圖，由於加入了擋板(Type I)強化了對流效應，使反應氣體的速度在擋板後端產生紊流，快速的將水帶到流道後半段累積，而單蛇形流道(未加擋板設計)雖然也會將水帶到流道後方累積，但因為自然對流的速度較慢，水較容易累積在流道中段造成單蛇形流道(未加擋板設計)的水分佈較廣，氣體反應面積較少且性能較差。在第一條流道加入擋板的蛇形流道(Type I)因擋板加速了這個區域的電化學反應產生大量的水向氣體擴散層排出，使得第一條流道與第二條流道的氣體擴散層處

會有較明顯的水堆積；單蛇形流道的蜿蜒設計在 10mm 的短距離因電化學反應產生的水在蜿蜒處產生迴流造成水堆積在這個區域並向流道上方擴散，這也就是為什麼會在第一個蜿蜒處會看到較明顯(紅色)的水累積情形。由於燃料氣體的速度會將水帶離，所以在第二條流道中段處水濃度會開始減少並累積到流道後段區域。但整體比較起來，加入擋板的流道設計水分佈情形較少，氣體較易進入多孔材質使反應增加，使性能提高。

#### 4.1.3 蛇形流道 Type II

圖 4-5 在第六條流道加入擋板的質子交換膜電流密度分佈圖，可以明顯的看出在擋板後方的低電流密度是造成電池性能低下的原因，在擋板後方的藍色區域電流密度介於 1500~3000 之間，近一步探討其中，根據圖 4-13 的氧氣濃度分佈顯示，氧氣在流道加入擋板之後的濃度下降，而在擋板後方的氧氣濃度明顯下降，正比於電流密度分佈，因氧氣濃度與水分佈有關，所以更近一步探討期中水分佈情形，圖 4-14 為氣體擴散層與觸媒層的水分佈圖，水大量分佈在電池的多孔層，與前兩種流道不同的是，擋板前段的水分佈已經相當密集，並非只是單純的累積在反應面積下游累積，水無法順利排出並累積在多孔材質阻礙了氧氣的傳輸，成為性能低下的原因，這時候的擋板反而早成了阻礙水傳輸而非強化對流效應。

#### 4.1.4 蛇形流道 Type III

Fig 4-6 為最後一條流道加入擋板的質子交換膜電流密度分佈圖，根據圖 4-1 與圖 4-2 的性能分析顯示，在最尾端加入擋板的性能僅次於第一條流道加入擋板(Type I)，並且性能優於的單蛇形流道(未加擋板設計)，根據圖 4-15 在最後一條流道加入擋板(Type III)的氧氣

濃度分佈，氧氣濃度分佈仍以前半段最為集中，與圖 4-1 單蛇形流道(未加擋板設計)比較，單蛇形流道(未加擋板設計))的高氧氣濃度分佈面積會略遜於在最後一條流道加入擋板(Type III)的氧氣濃度分佈，這使得 Type III 的流道設計在性能上優於蛇形流道(未加擋板設計)的流道設計，由於在尾端加入擋板使得流道內部的壓力場產生改變，使得氧氣在相對較高的氣體壓力下能更順利的進入多孔層並與觸媒層產生電化學反應，當然高電化學反應會伴隨著大量的水生成，圖 4-16 為最後一條流道加入擋板(Type III)的水濃度分佈，與單蛇形流道(未加擋板設計)相比，Type III 的水分佈較少，雖然水同樣的累積在下游區域並且在擋板前緣大量的累積，但是前半段的高電化學反應與較低水累積使得 Type III 的電池性能會優於蛇形流道(未加擋板設計)的設計。

比較四種流道的設計，圖 4-17 為單蛇形流道(未加擋板設計)與加入擋板的蛇形流道(Type I、Type II、Type III)沿著流道橫截面方向( $x=0.0115\text{m}$ )，質子交換膜中央介面的電流密度分佈；曲線高峰的位置為流道的位置而曲線較低峰為肋條的位置，由於氣體濃度越到下游濃度越低，相對應電流密度越低，所以圖中四條曲線都有向下漸減的趨勢。比較四條曲線，Type I 與 Type III 的電流密度最相近，差別僅在於反應面積位置前 15%與後 15%的藍色高於紅色的區域，而比較圖 4-18 與圖 4-19，當橫向從第一條流道切到最後一條流道時，Type I 在擋板前緣的氧氣濃度較 Type III 高且水濃度也較低，相形之下可以得到較佳的橫截面方向的電流密度分佈。

根據圖 4-9 與圖 4-15 的氧氣分佈分析，Type I 的氧氣分佈會因流道間的 cross-flow 有較高的氧氣濃度分佈產生較高的電流密度分佈，所以在電池前半段的電流密度會較高，而後半段的電流密度因 Type II

的水堵塞擋住了氣體傳輸使得電流密度相對的減低；根據圖 4-9 與圖 4-13 可看出 Type I 與 Type III 的差別在於 Type I 氧氣進入多孔層的量較多而且水的累積較少，並且與圖 4-17 相關。而 Type II 的電池性能最差，端看氧氣濃度分布是高於單蛇形流道(未加擋板設計)，但是比較水分佈可以看出水大量的累積在整塊反應面積，由於堵塞造成氧氣僅能分佈在多孔層界面並不能進入觸媒層參加反應，就以整體而言是比較糟的狀況。

## 4.2 不同流率對蛇形流道 Type I 的影響

根據許多文章可知當增加流速時可以提高氧氣的量並提高電池的性能，圖 4-20 與圖 4-21 可以明顯的看出在提高陰極入口流率為 375.3576 ml/min( $\lambda=2$ )時，Type I 的電池性能仍為最佳，而蛇形流道未加入擋板設計的性能與圖 4-1 相比有向上提升的趨勢，至於 Type II 的性能在增加流率的情況下性能相對越低下。圖 4-22 為在 Type I 在流率 375.3576 ml/min( $\lambda=2$ )下的質子交換膜電流密度分佈圖，與圖 4-4 比較可以知道當流率提高了則電池反應面積也相對的增加了，而圖 4-23 與 4-13 的氧氣濃度相比較之下，由於速度提高，使氧氣更能夠經由多孔層到達下一個流道，則氧氣濃度的分佈會相對的提高，Park and Li[33]提到因速度提高則流道間的 cross-flow 明顯，所以能增加電池的性能。

## 4.3 氣體擴散層不同滲透率對蛇形流道 Type I 影響

在 4.1 節中可以知道當我在第一條流道的位置加入了擋板可以提升電池的性能之後，更進一步探討不同的氣體擴散層滲透率對多孔材質的界面所產生的影響，根據 Park and Li[33]的文章可知滲透率對多孔的影響會比孔隙度明顯，且與 cross-flow 相關，由 (3.55)可知當

滲透率越大時則孔隙越大，一般氣體擴散層使用的滲透率是介於  $10^{-10}\text{m}^2\sim 10^{-12}\text{m}^2$ ，而滲透率的大小與多孔材質的粒子與塗佈有關。圖 4-24 為 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向的電流密度分佈圖，當滲透率提高時，電流密度分佈會相對較佳，滲透率提高表示氧氣越容易進入到多孔的材質，圖 4-25 為 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向的氧氣濃度分佈圖，圖中較高的滲透率可以讓氧氣較易進入氣體擴散層與觸媒層界面以外，也可以讓氧氣進入的阻力變小，由於滲透率提高使得 cross-flow 的效應較明顯，沿著橫向的壓差會相對的變小、氧氣濃度分佈差異較小、而且分佈會較均勻。根據圖 4-18 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向的水分佈圖，水分佈的情形在較大的滲透率時水較不易被堵塞住，剪應力可以順利的將水帶出多孔材質，而在下游處的水累積則是因為越到下游因阻力及電化學的消耗使得氧氣速度變慢、剪應力變小，所以水會慢慢的累積在下游區域。比較圖 4-24~圖 4-26 可知氣體擴散層的滲透率在  $1.76*10^{-9}$  成了一個分界線，當範圍介於  $1.76*10^{-7}\sim 1.76*10^{-9}$  時滲透率的電流密度分佈、氧氣濃度分佈與水分佈的變化量差異不會非常明顯，而且同一滲透率從入口到出口的變化量差異也不會太大，但是當滲透率小於  $1.76*10^{-10}$  時電流密度分佈、氧氣分佈與水分佈曲線會與前一個滲透率的有明顯的分隔開，並且滲透率從入口到出口的變化量呈現大幅度的震盪。根據圖 4-27 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向的不同滲透率對壓力的影響圖，當滲透率較大時，多孔層平均壓力差異小，氧氣可以很順利的往出口移動，但是當滲透率大於  $1.76*10^{-10}$  時，平均壓力差大幅度的提高，容易造成電池性能的不穩與分佈不均勻。

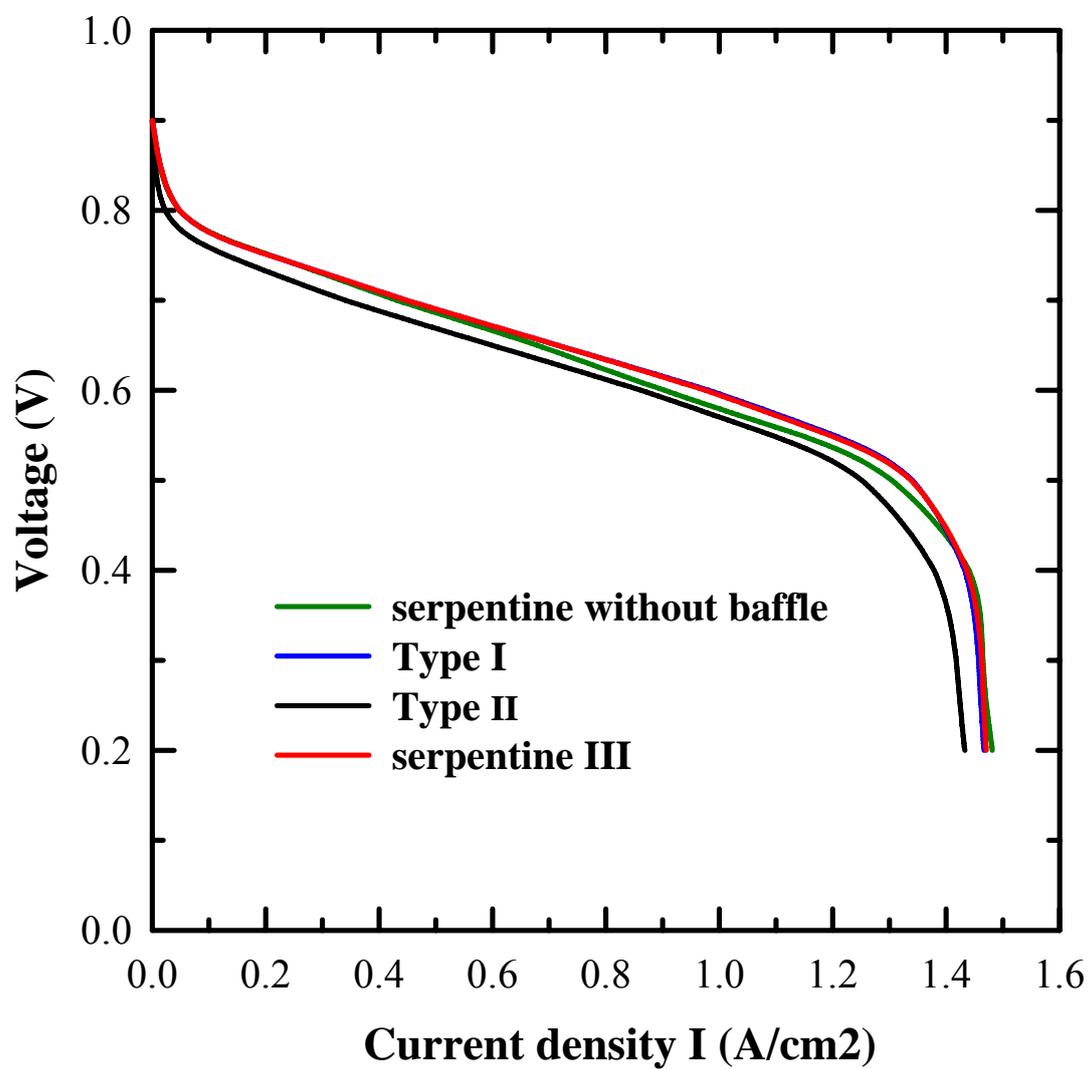


圖 4-1 蛇形流道與在不同位置加入擋板的蛇形流道之極化曲線圖

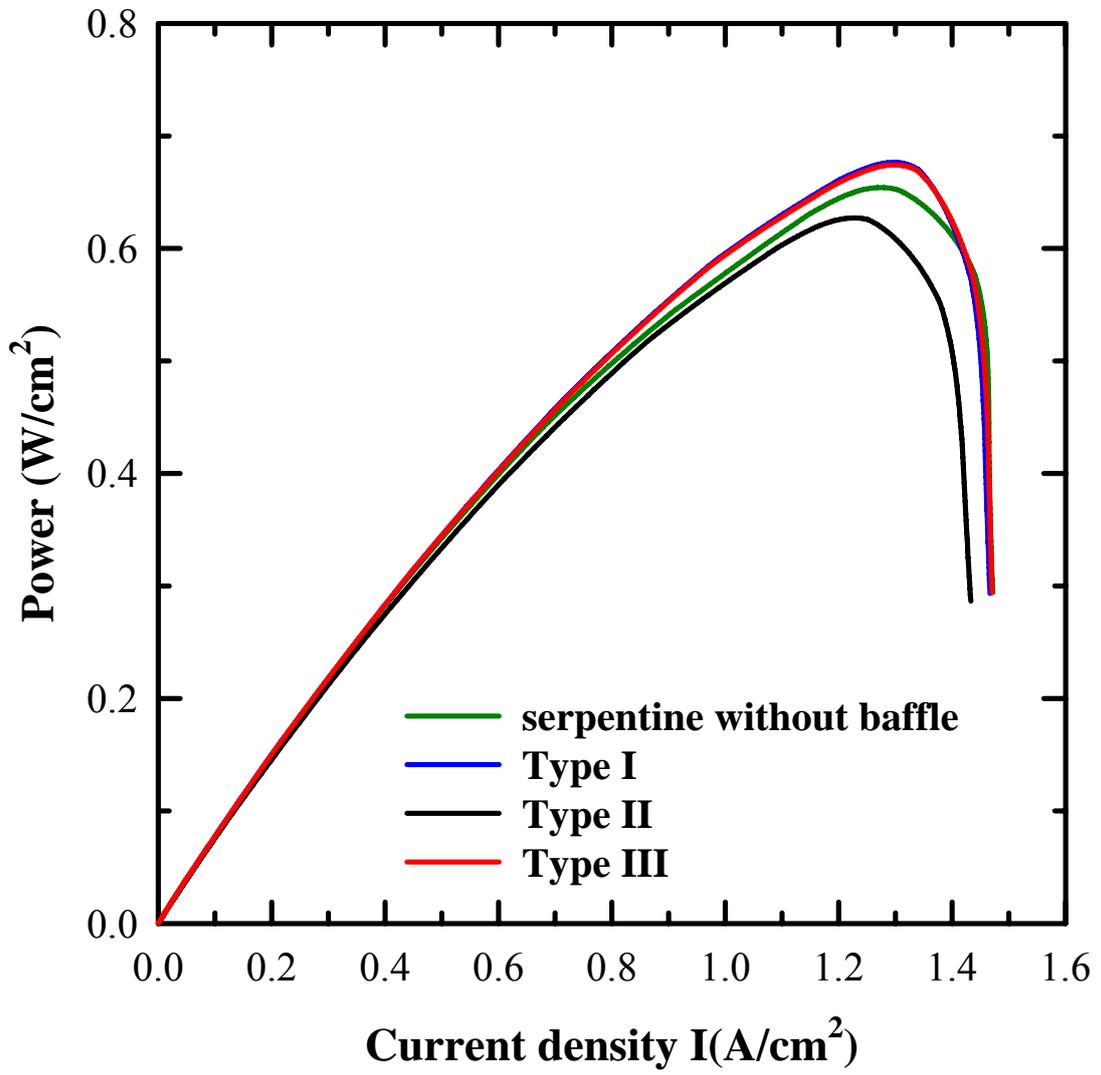


圖 4-2 蛇形流道與在不同位置加入擋板的蛇形流道之功率比較圖

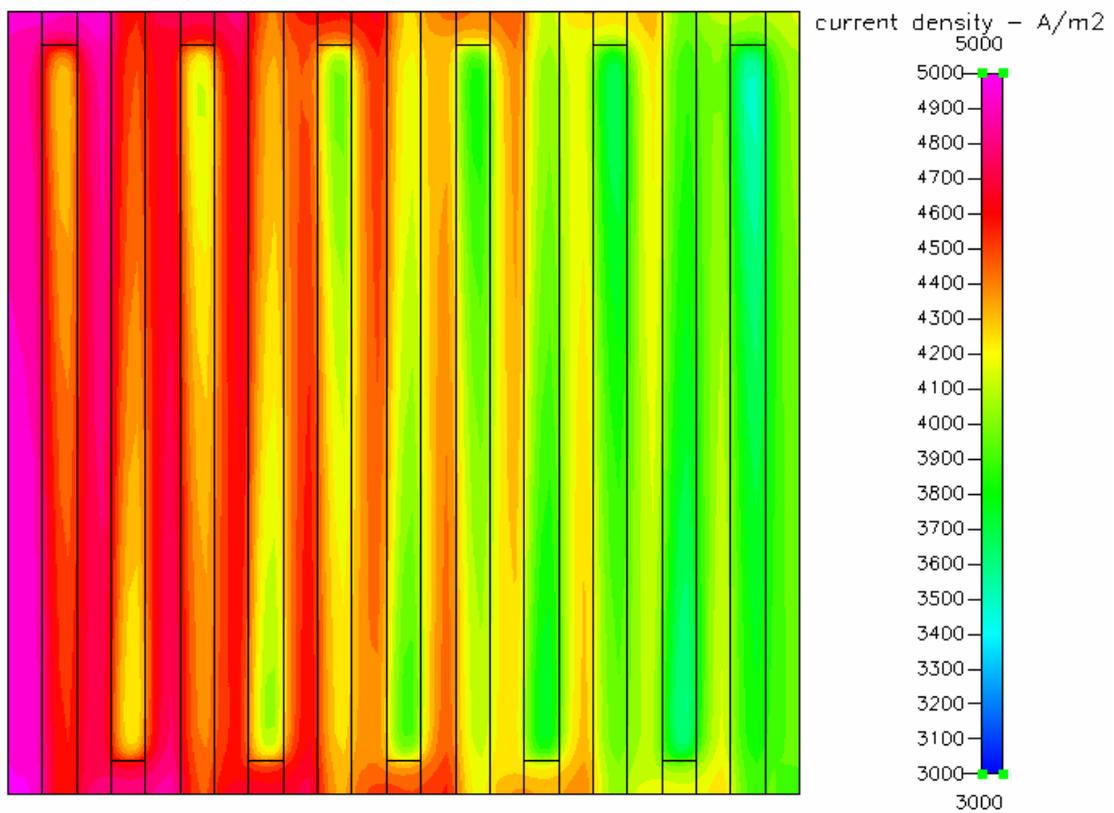


圖 4-3 操作電壓 0.7V 下單蛇形流道(未加擋板設計)質子交換膜電流密度分佈圖

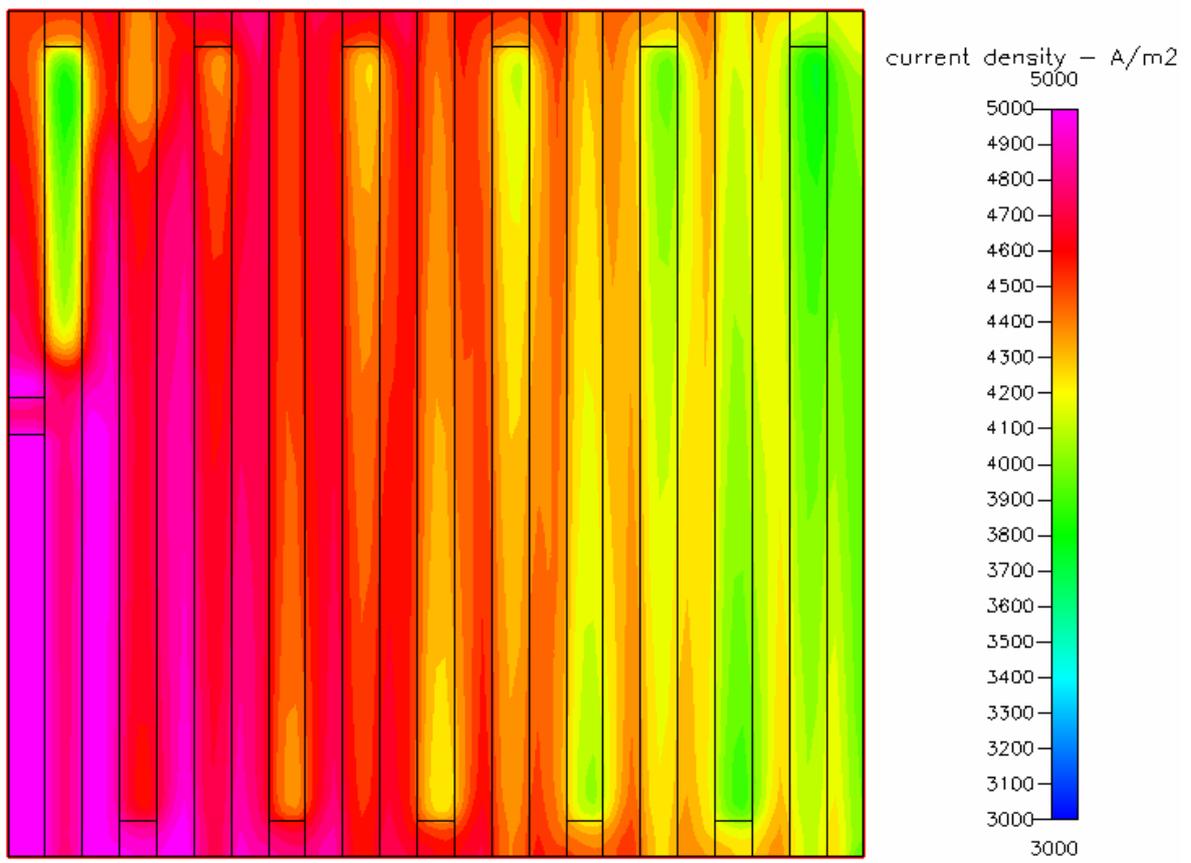


圖 4-4 操作電壓 0.7V 下 Type I 在質子交換膜電流密度分佈圖

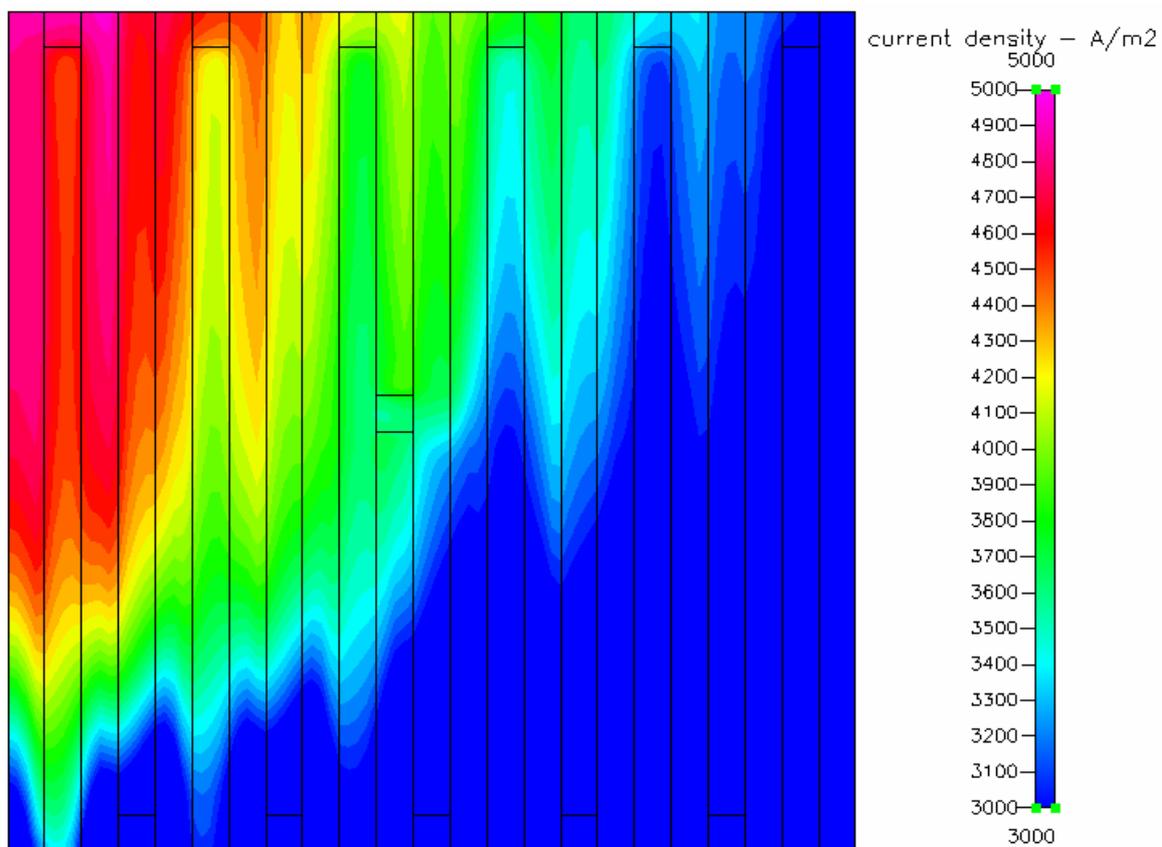


圖 4-5 操作電壓 0.7V 下 Type II 在質子交換膜電流密度分佈圖

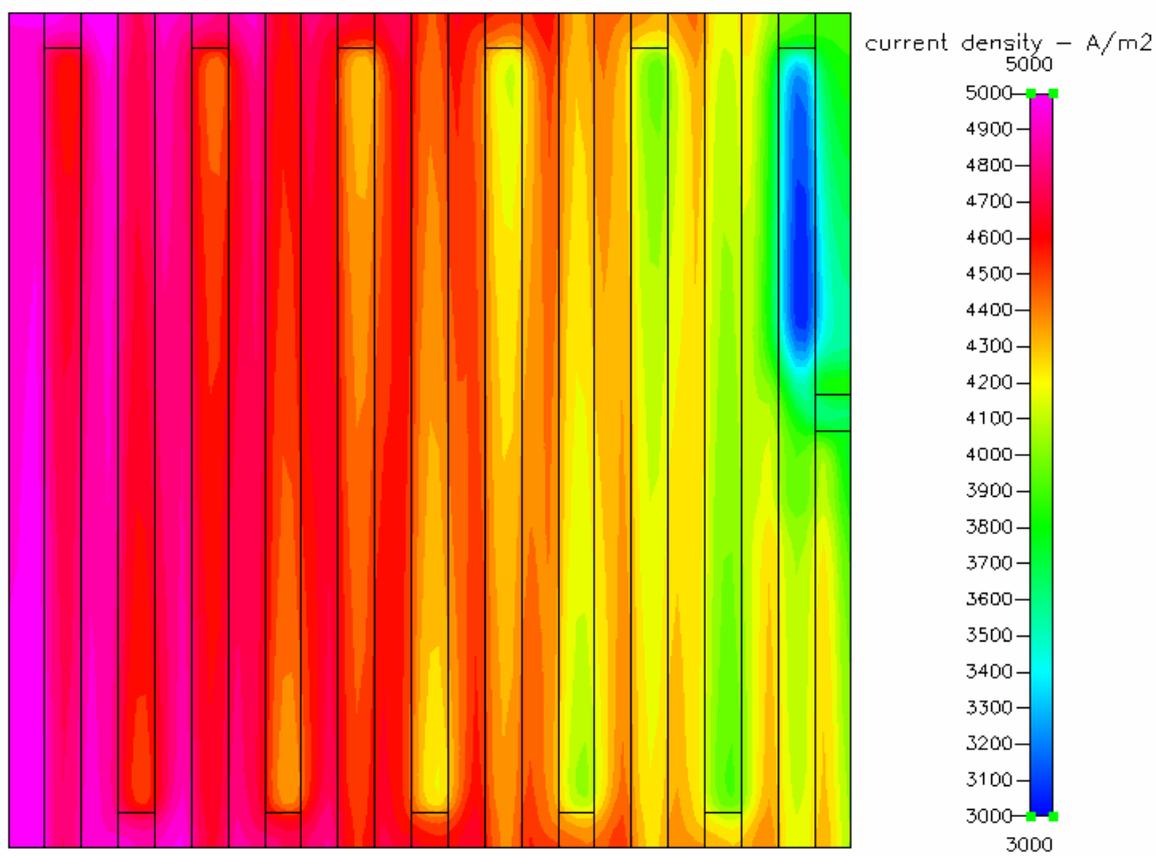


圖 4-6 操作電壓 0.7V 下 Type III 的質子交換膜電流密度分佈圖

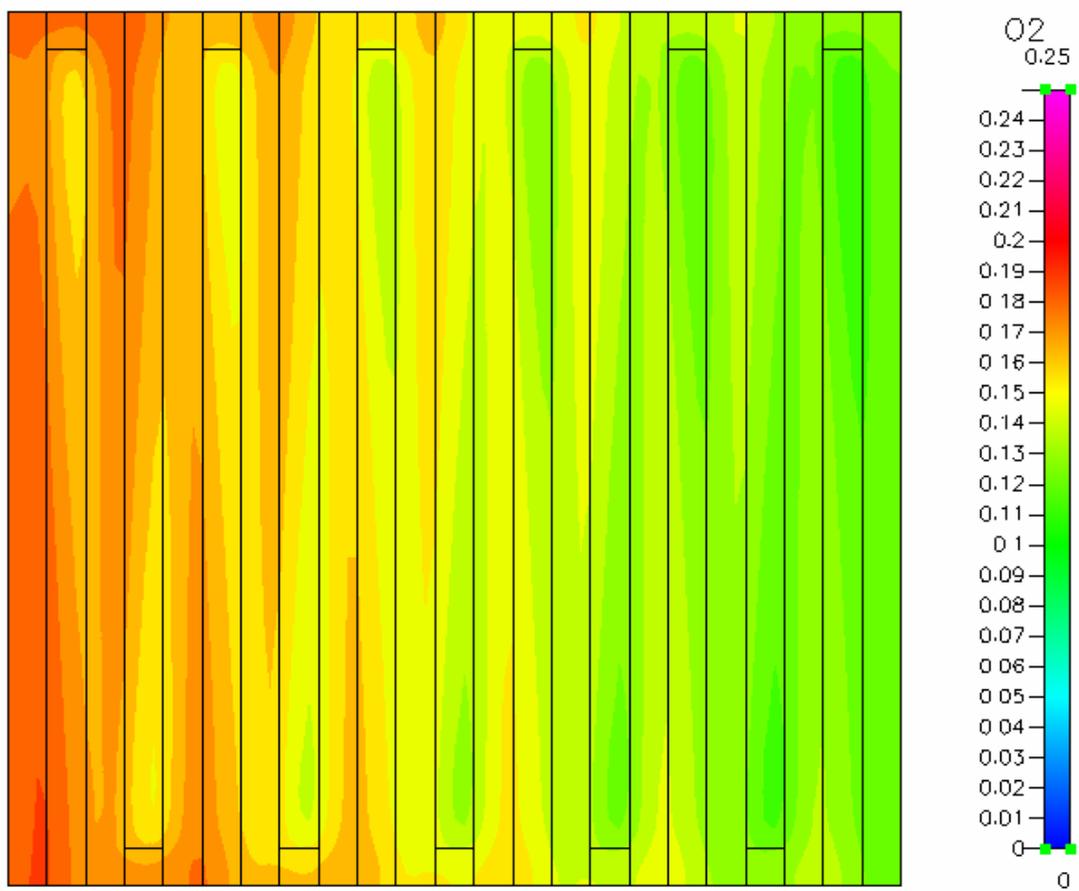


圖 4-7 操作電壓 0.7V 下單蛇流道(未加擋板設計)在氣體擴散層與觸媒層介面之氧氣濃度分佈圖

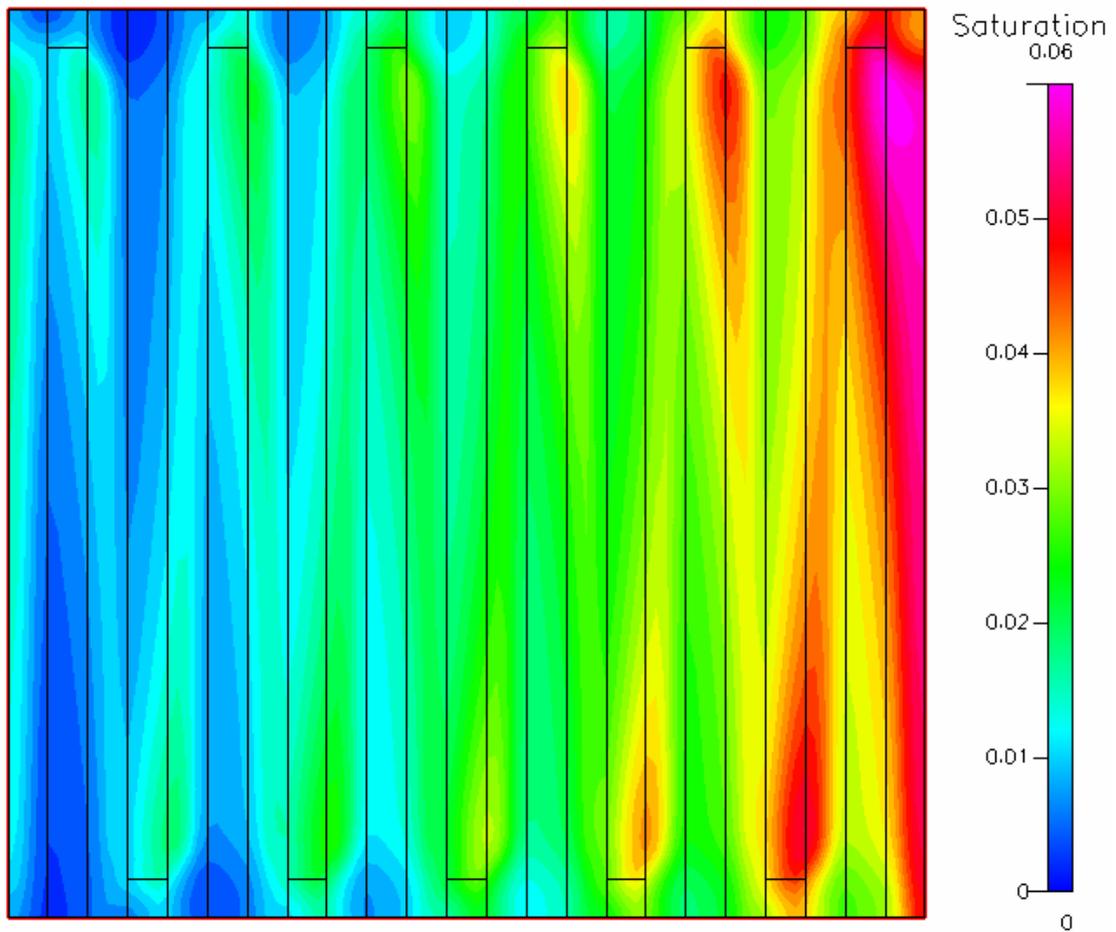


圖 4-8 操作電壓 0.7V 下單蛇流道(未加擋板設計)在氣體擴散層與觸媒層介面之水分佈圖

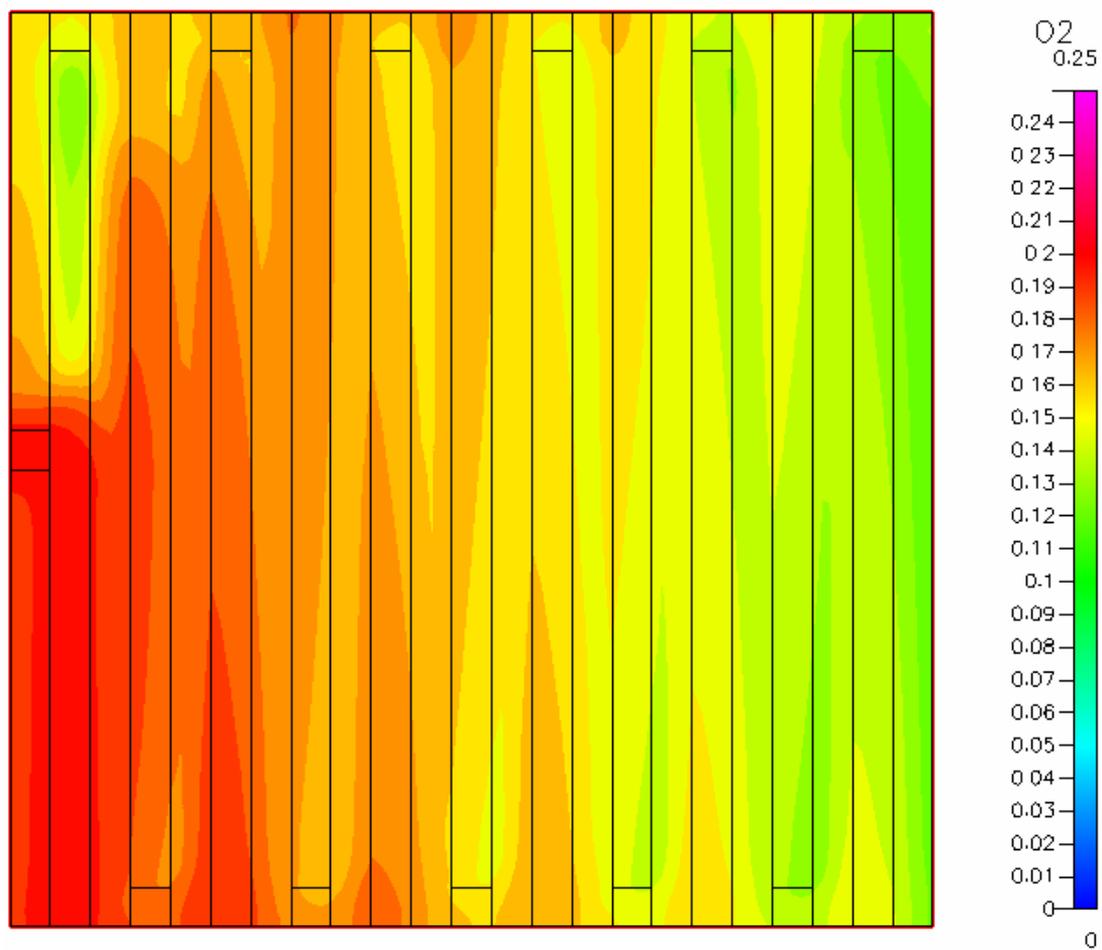


圖 4-9 操作電壓 0.7V 下 Type I 在觸媒層與氣體擴散層介面之氧氣濃度分佈圖

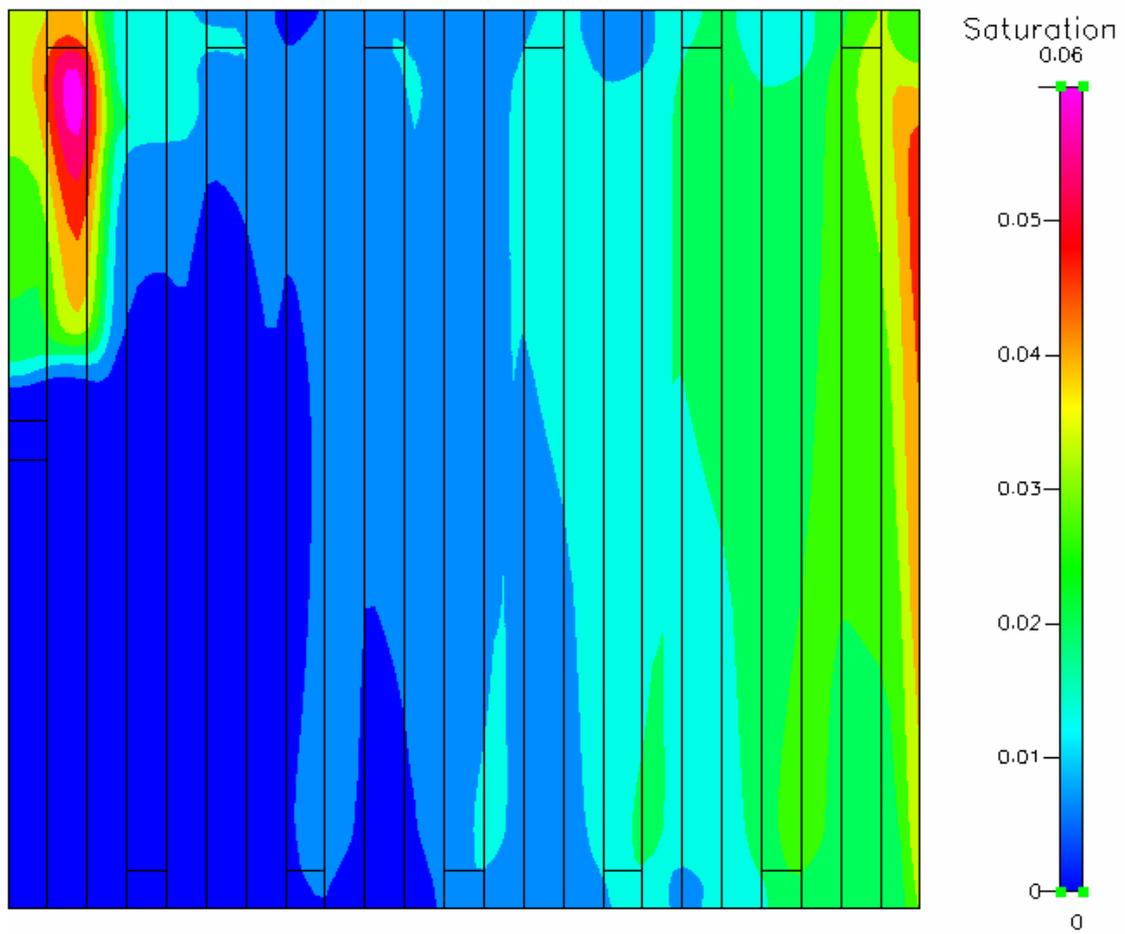


圖 4-10 操作電壓 0.7V 下 Type I 觸媒層與氣體擴散層介面之水分佈圖

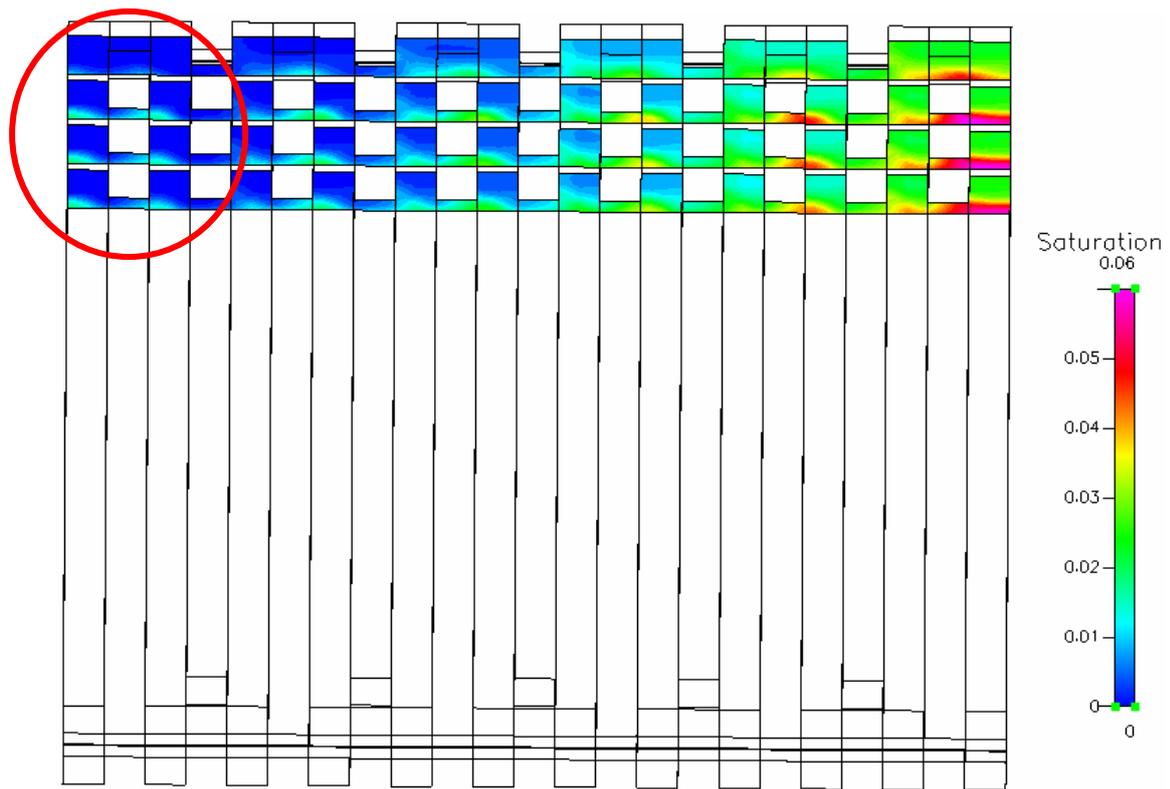


圖 4-11 操作電壓 0.7V 下單蛇形流道(未加擋板設計)氣體擴散層與流道在流道入口長 0.018m、0.0195m、0.0210、0.225m 的剖視圖。

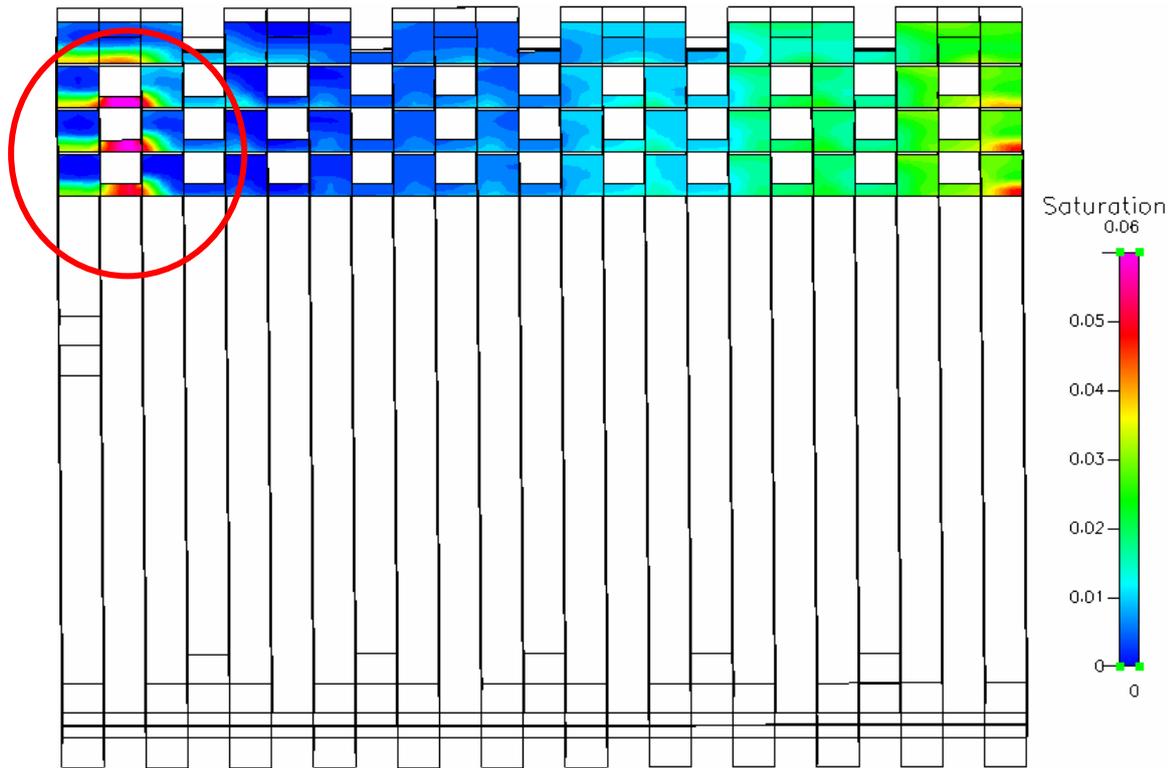


圖 4-12 操作電壓 0.7V 下 Type I 氣體擴散層與流道在流道入口長  
0.018m、0.0195m、0.021m 與 0.0225m 的剖視圖

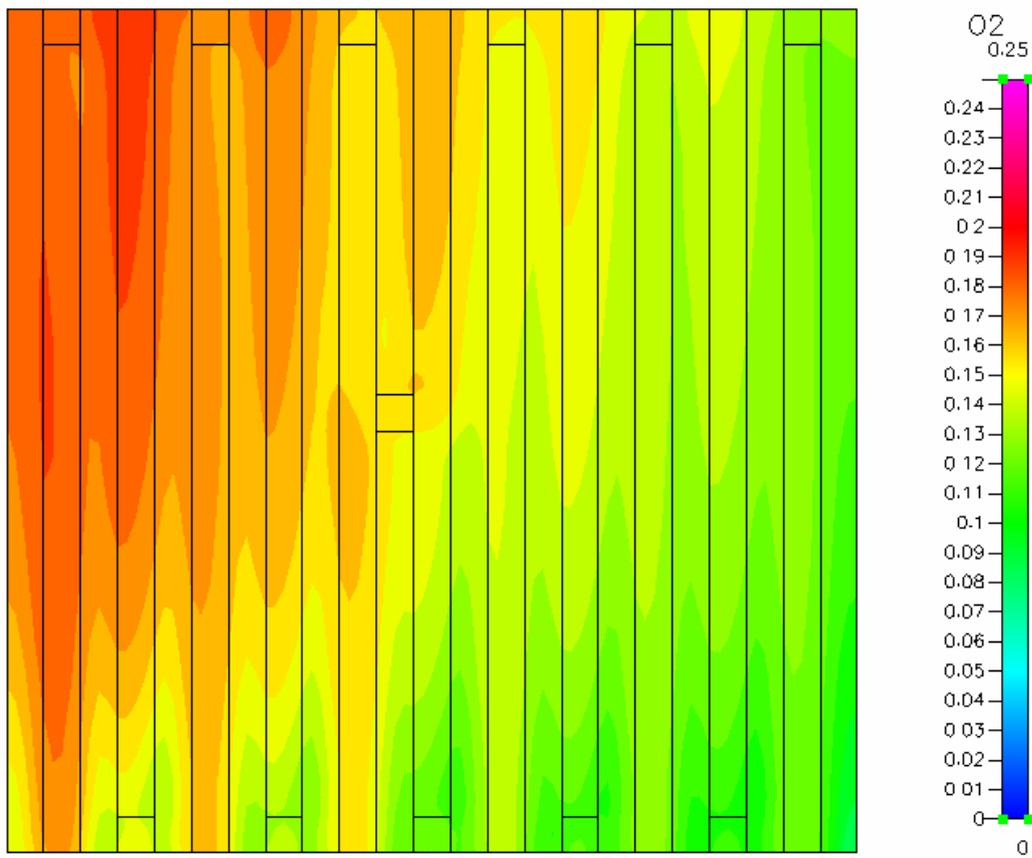


圖 4-13 操作電壓 0.7V 下 Type II 之氧氣濃度分佈圖

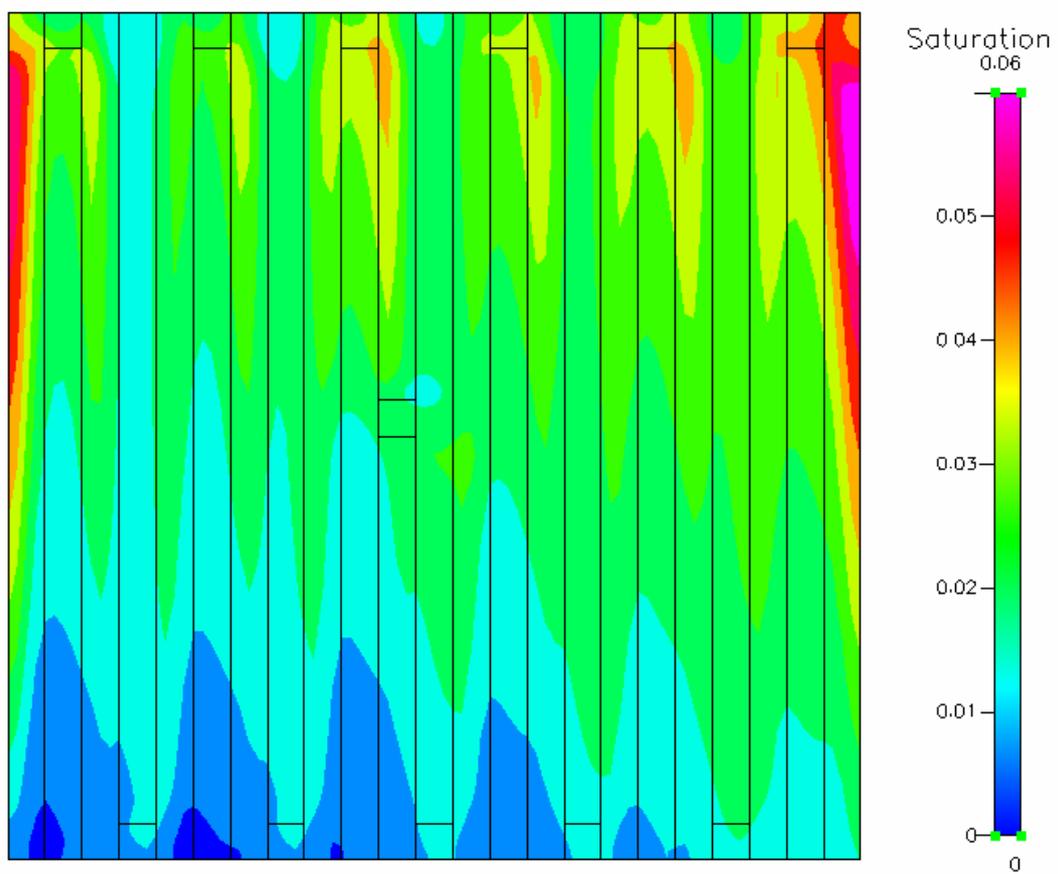


圖 4-14 操作電壓 0.7V 下 Type II 之水分佈圖

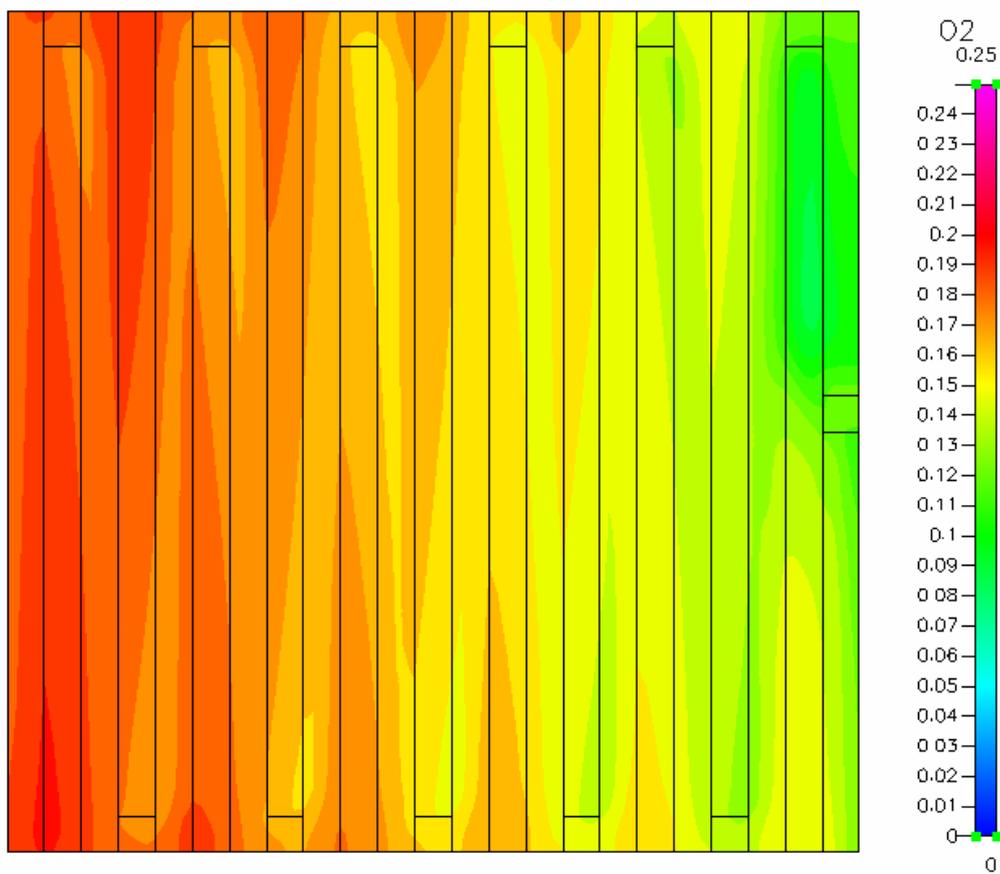


圖 4-15 操作電壓 0.7V 下 Type III 之氧氣濃度分佈圖

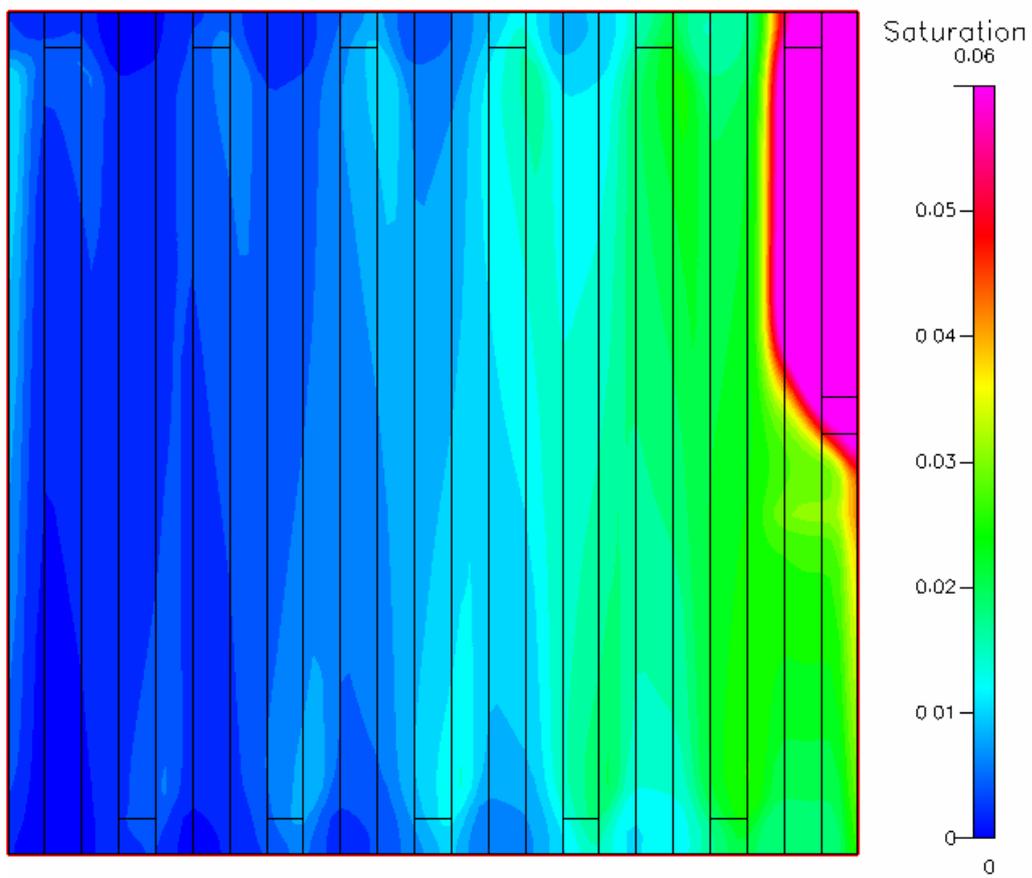


圖 4-16 操作電壓 0.7V 下 Type III 之水分佈圖

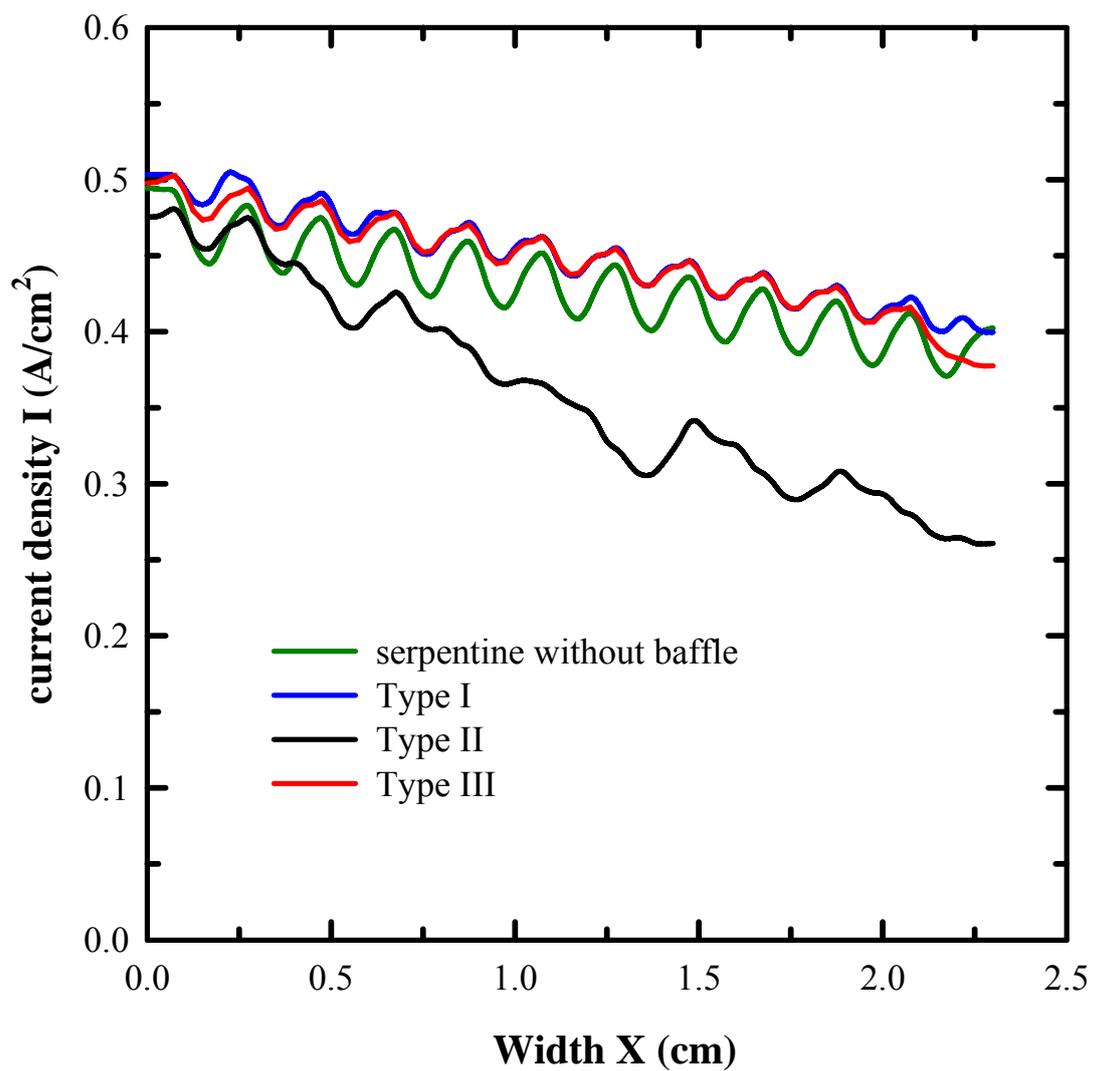


圖 4-17 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  位置沿著  $x$  方向的電流密度分佈圖

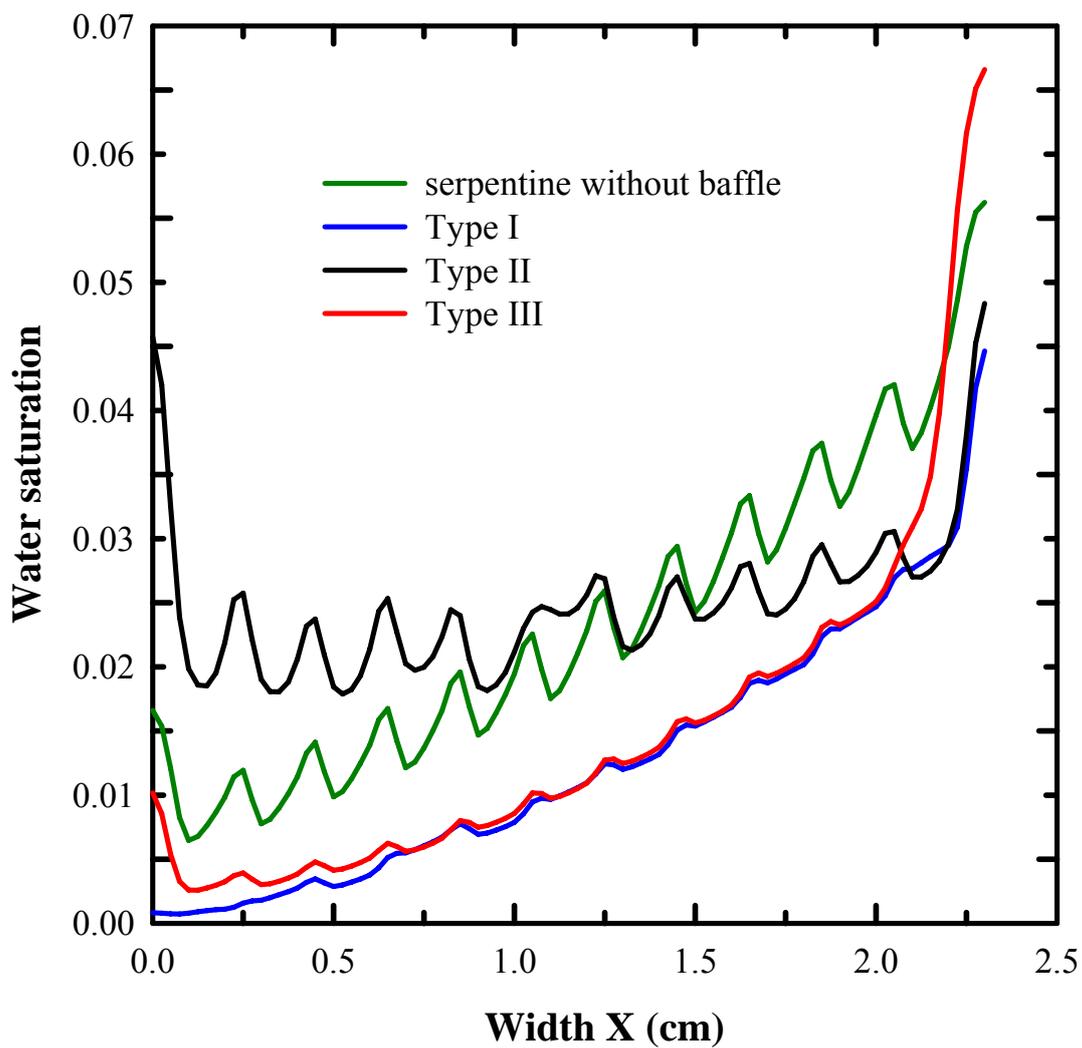


圖 4-18 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  位置著  $x$  方向的水分佈圖

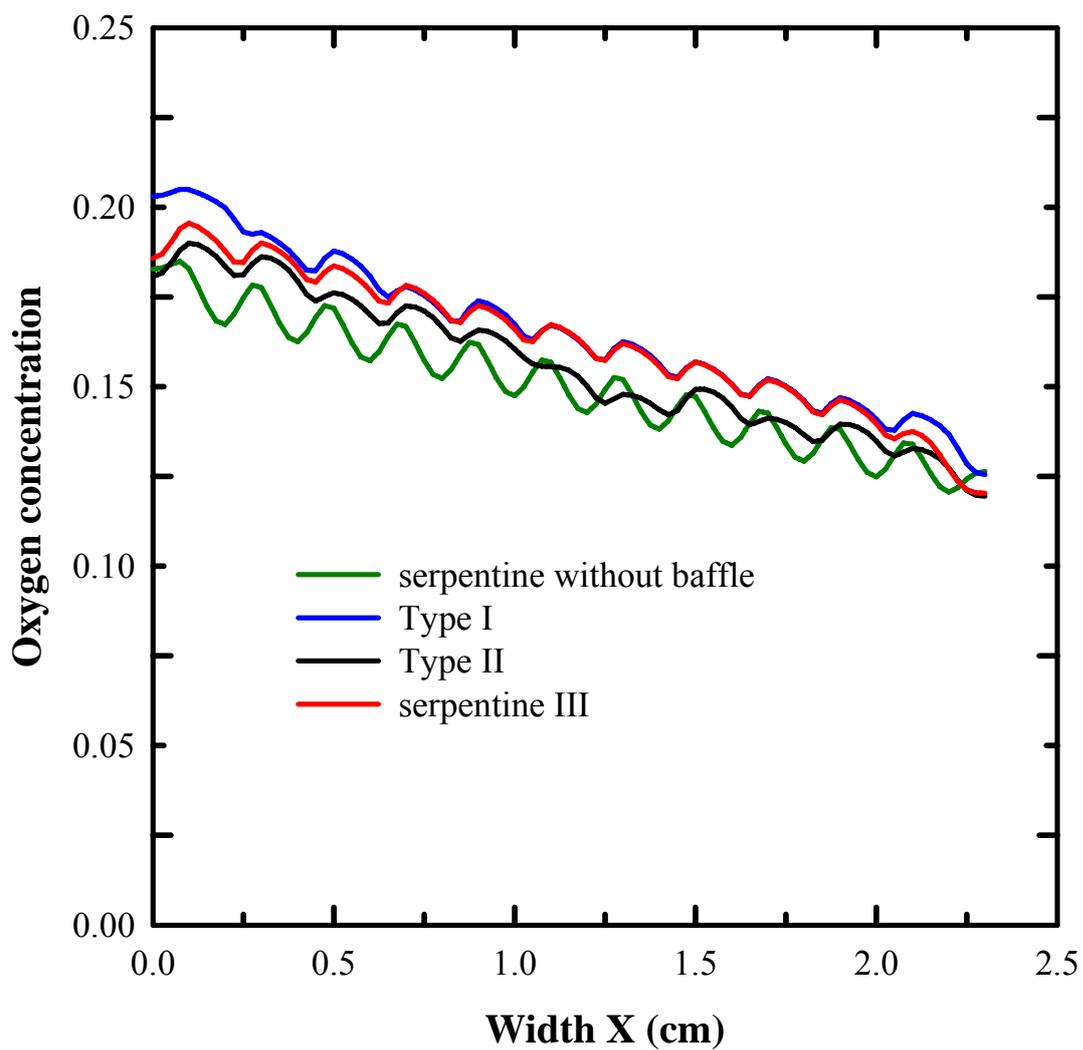


圖 4-19 單蛇形流道與不同位置加入擋板的蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  位置沿著  $x$  方向的氧氣濃度分佈圖

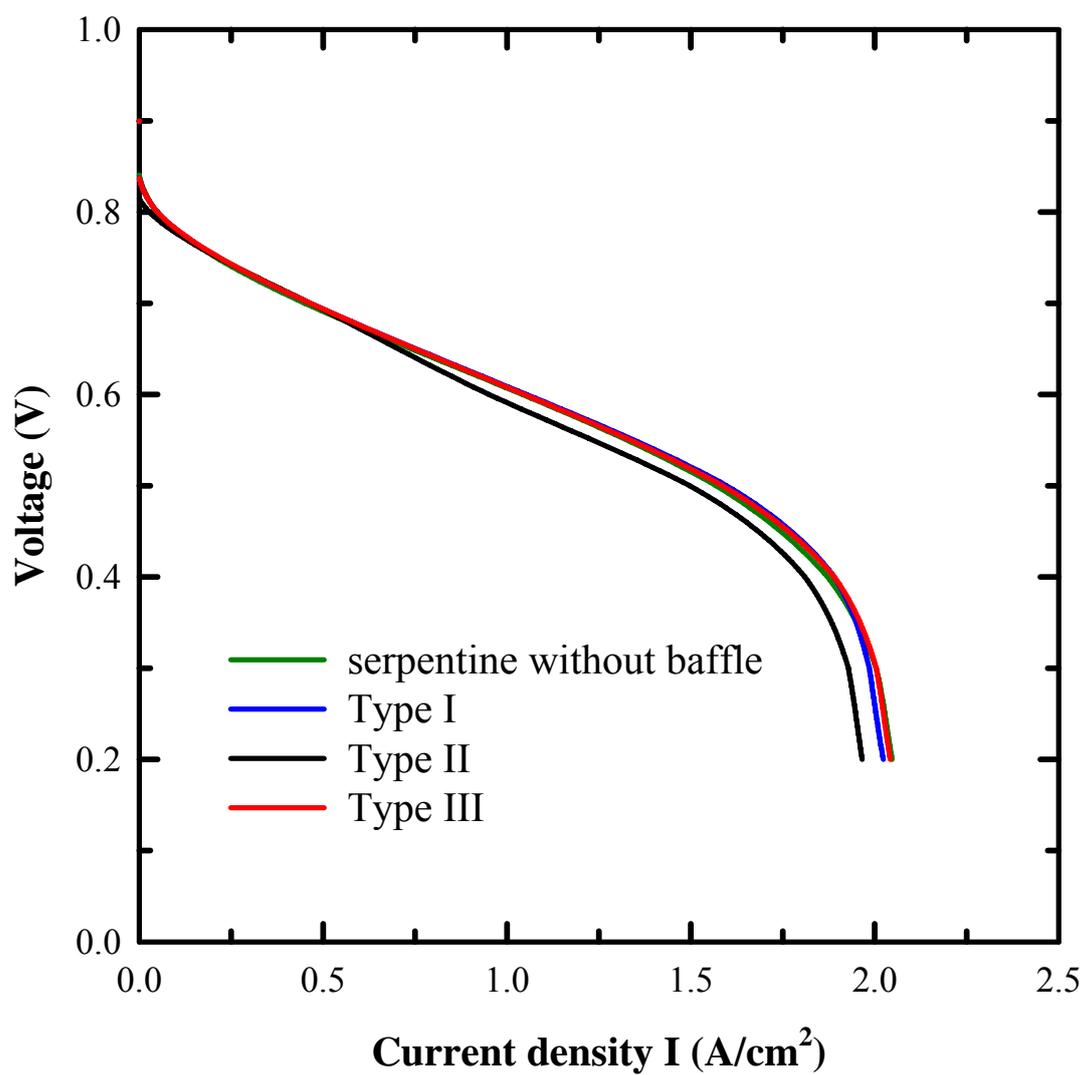


圖 4-20 蛇形流道與在不同位置加入擋板在流率 375.3576 ml/min 下之極化曲線分佈圖

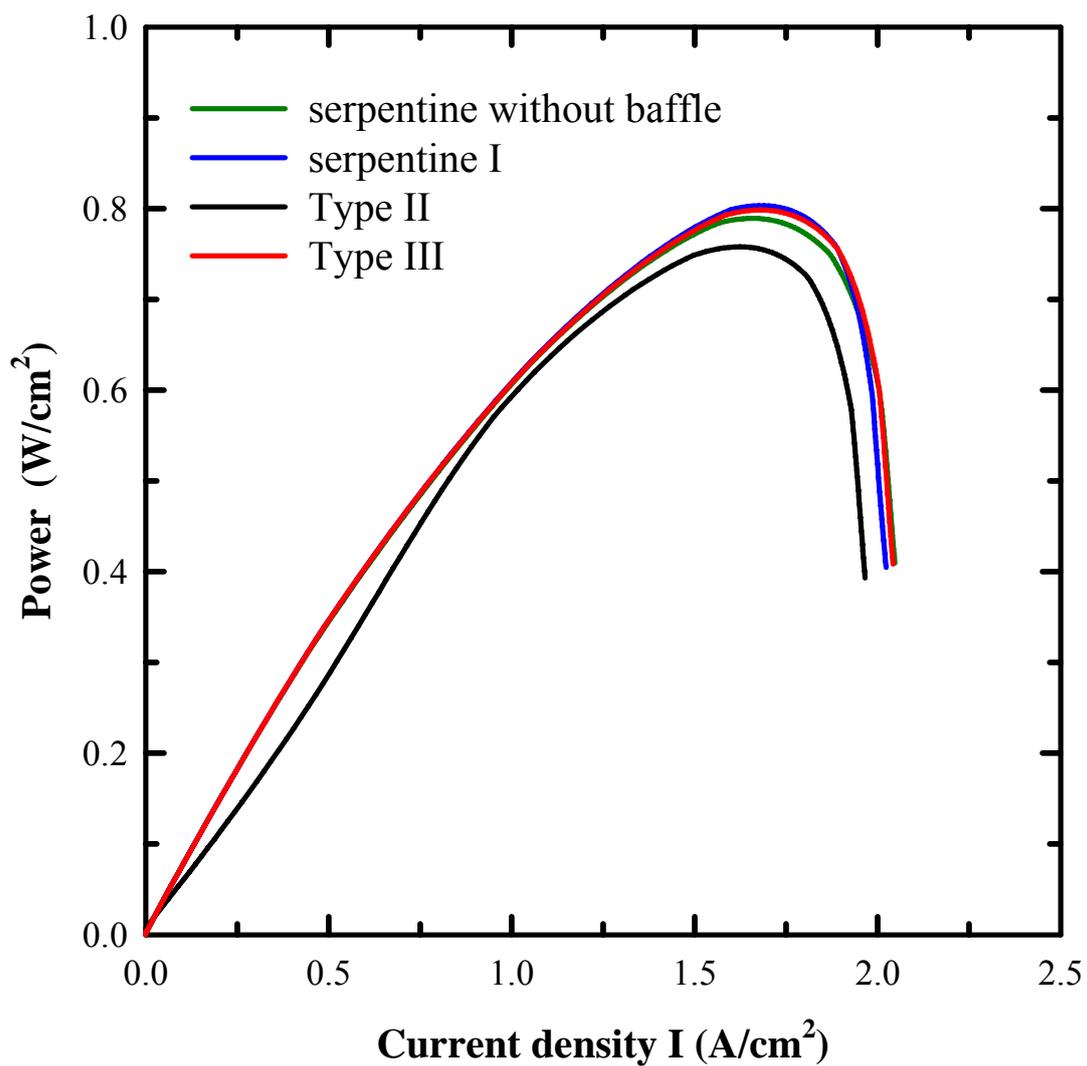


圖 4-21 單蛇形流道(未加擋板設計)與在不同位置加入擋板在新流率 375.3576 ml/min 下之功率比較圖

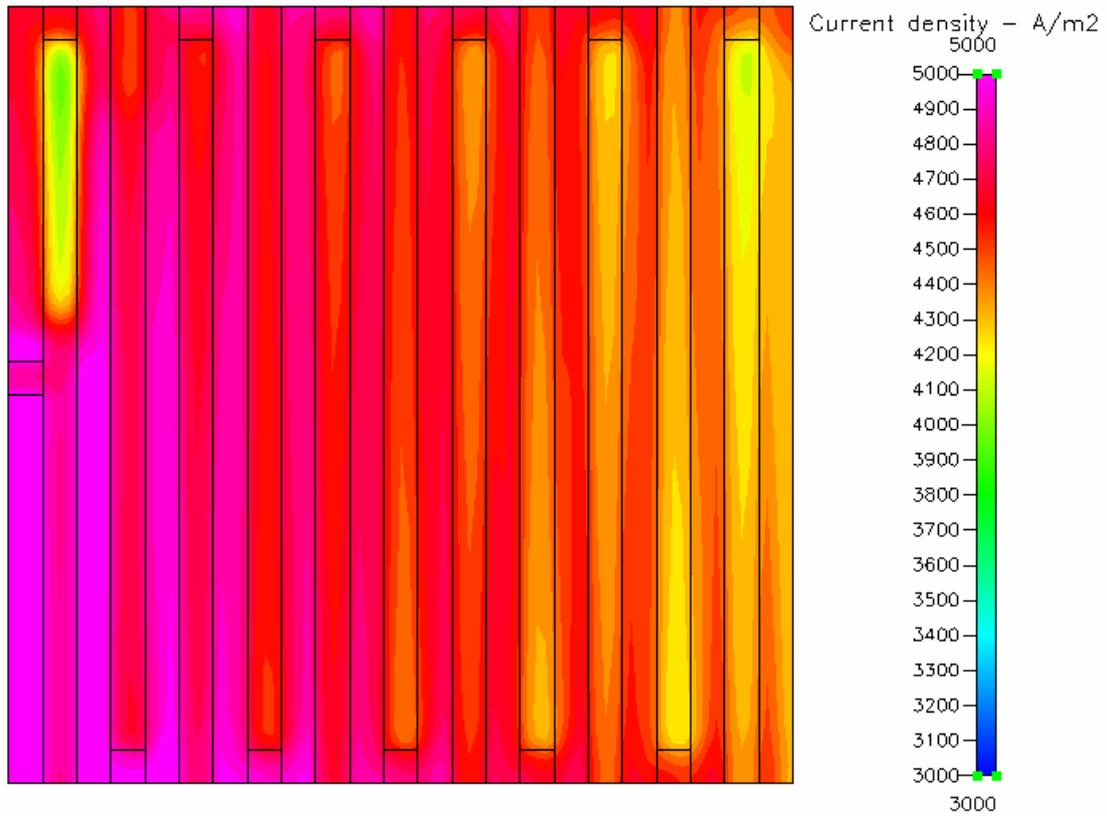


圖 4-22 操作電壓 0.7V 下 Type I 在流率 375.3576 ml/min 質子交換膜之電流密度分佈圖

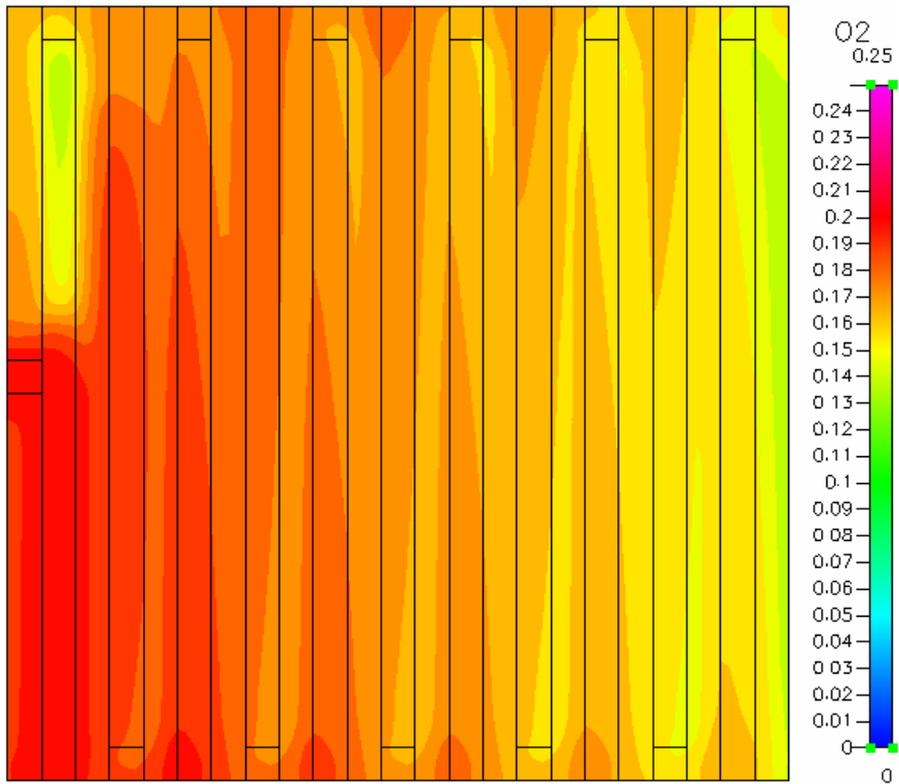


圖 4-23 操作電壓 0.7V 下 Type I 在流率 375.3576 ml/min 下  
氣體擴散層與觸媒層介面的氧氣濃度分佈圖

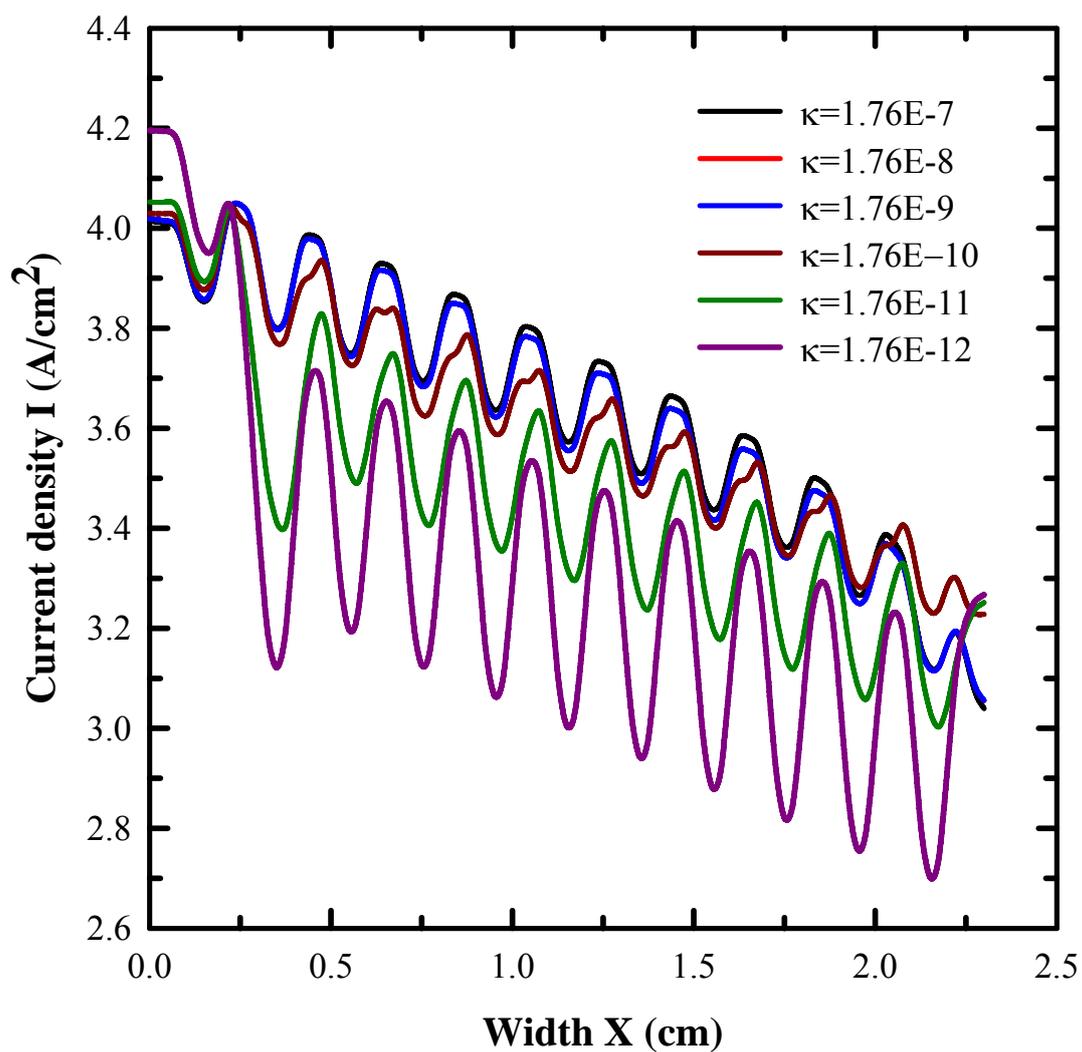


圖 4-24 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向之電流密度分佈圖

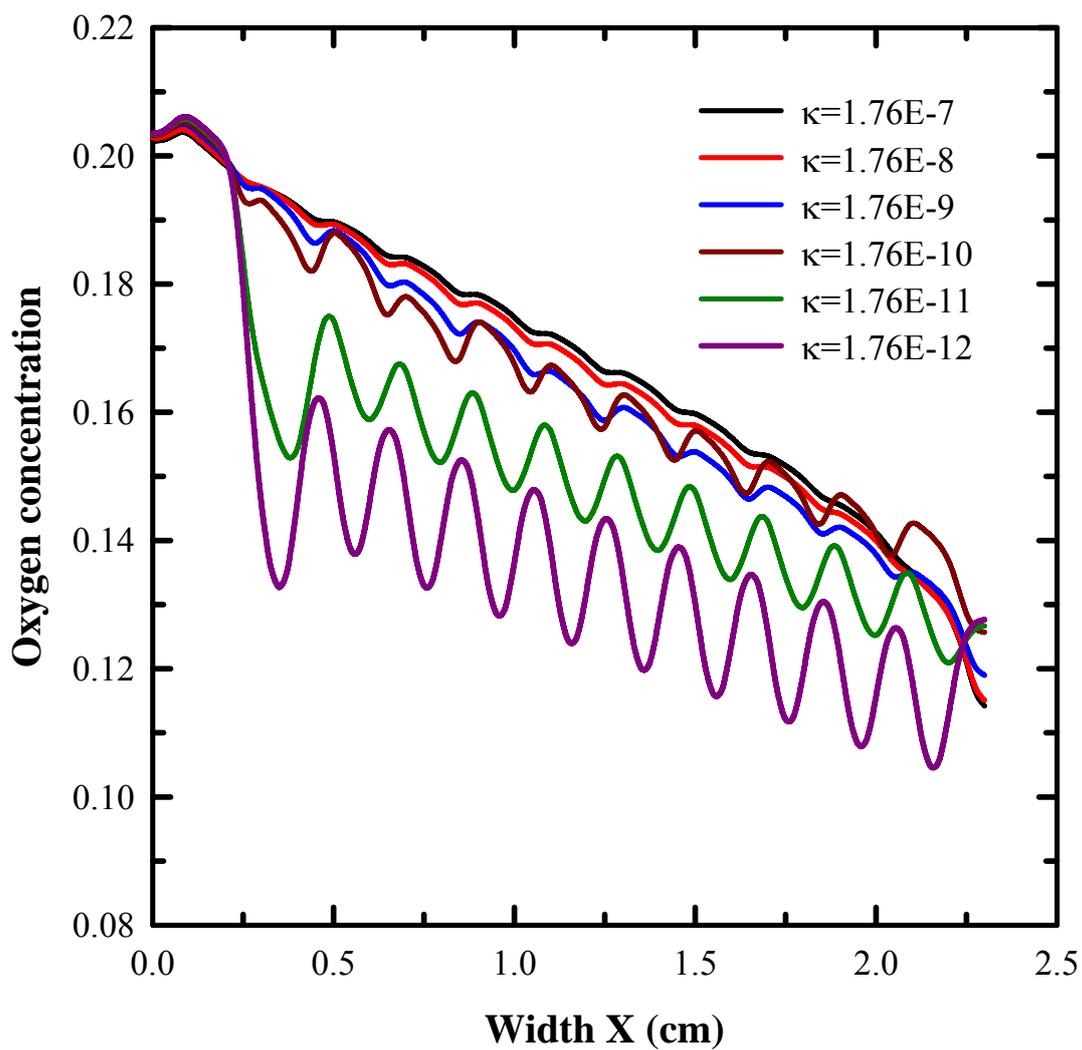


圖 4-25 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著 x 方向之氧氣濃度分佈圖

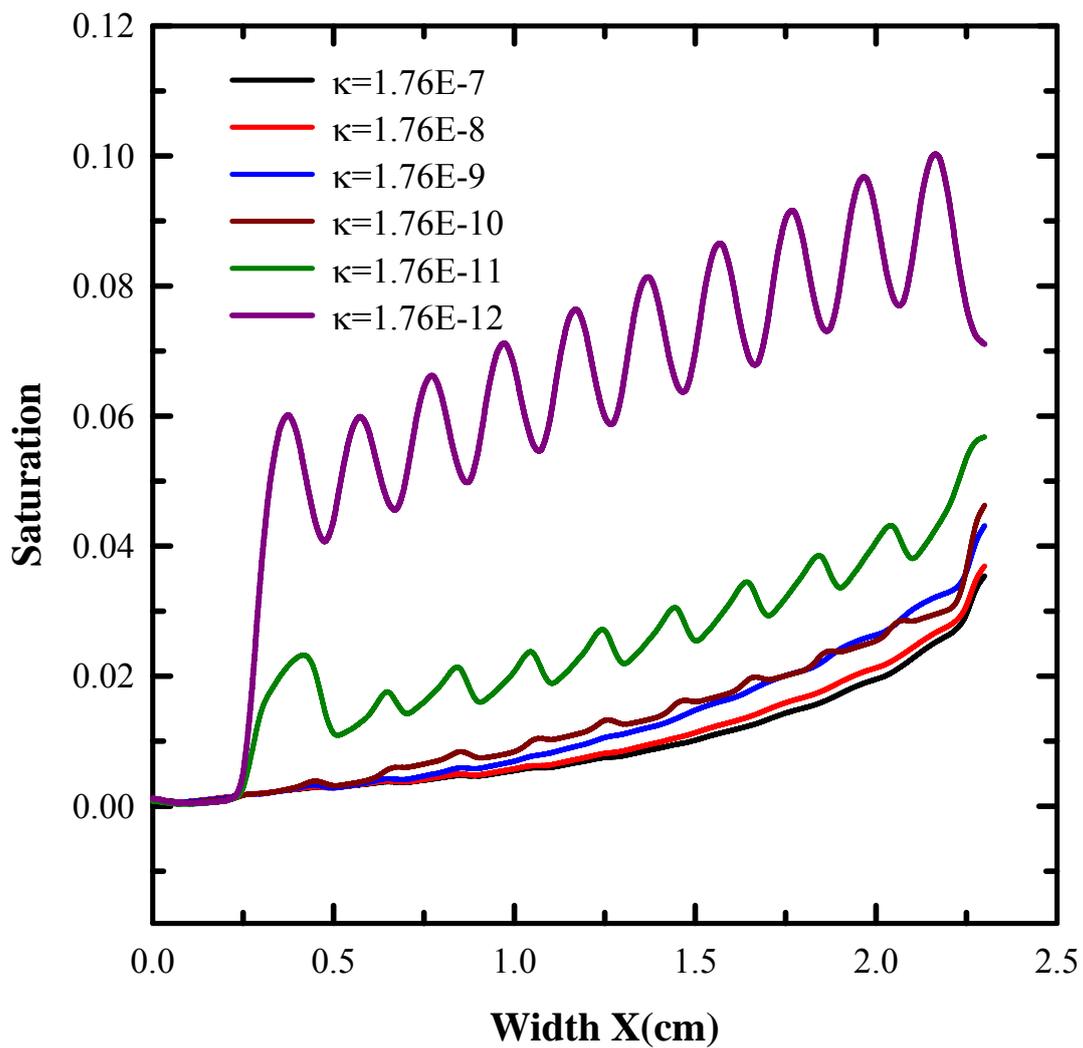


圖 4-26 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著 x 方向之水分佈圖

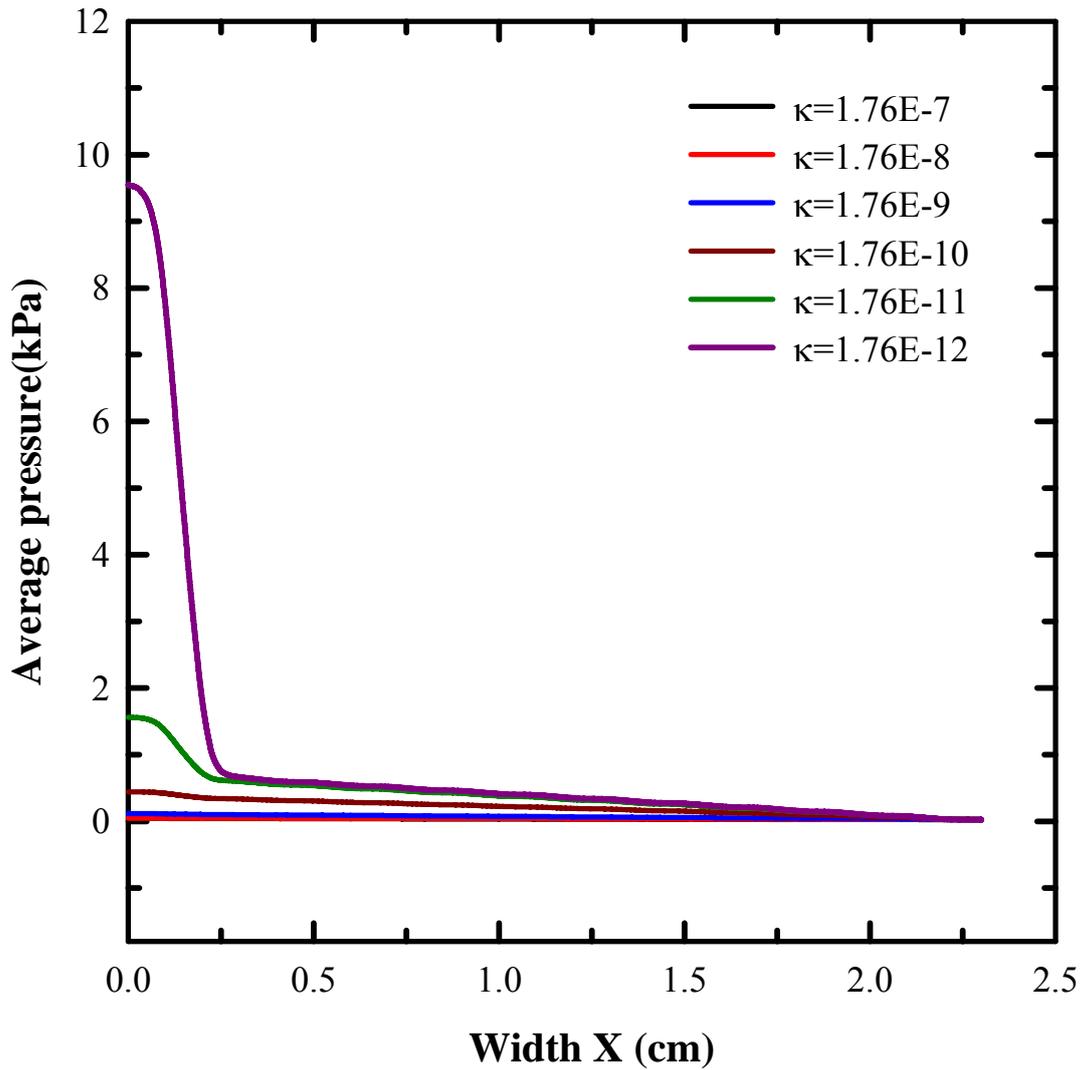


圖 4-27 操作電壓 0.7V 下 Type I 蛇形流道在氣體擴散層與觸媒層界面  $y=1.15\text{cm}$  的位置沿著  $x$  方向之不同滲透率對壓力的影響圖

## 五、結論與建議

本文欲探討在的蛇形流道在加入了擋板的效應是否能有效的提升電池性能，根據 Soong et al.[34]與 Yan et al [35, 36]的文章知道擋板能提升直通形流道的電池性能，所以藉由不同位置加入擋板以及不同的滲透率來探討蛇形流道的電池性能與分佈。

本文係以有限體積法建立燃料電池之三為全模組計算模型並使用 CFDRC 作為我分析所使用的工具，針對未加入擋板單蛇形流道設計與加入擋板的單蛇形流道設計之質子交換膜燃料電池進行模擬分析，希望針對分析的結果能對提供往後的研究有更進一步認識

### 5.1 結論：

1. 適當位置加入擋板可以提升電池性能
2. 不同位置擋板對電池性能有所不同，Type I 在 0.7 V 下功率會比單蛇形流道(未加擋板設計) 高出  $1.214 \text{ W/cm}^2$ ，為四種流道中最佳的設計，因此在第一條流道位置加入擋板可以有效的提高性能
3. 提高氣體流率 (375.3576 ml/min) 下，Type I 所呈現性能最佳，在 0.7 V 下功率會比流率 260 ml/min 提高  $1.242 \text{ W/cm}^2$
4. Type I 較高的氣體擴散層滲透率( $1.76 \times 10^{-7} \text{ m}^2$ ) 對電池性能較佳，並且排水率、氧氣分佈與壓力梯度較為平緩

## 5.2 建議：

1. 將現有模擬結果應用於實驗以探討最佳電池性能
2. 將溫度變化納入考量以探討熱管理問題
3. 將現有小尺寸(2.3cm x 2.3 cm)的電池擴展到大尺寸(10cm x 10cm)  
的電池



## 參考文獻

1. BP Statistical Review of World Energy 2007 [cited 2007];  
Available from:  
[http://www.bp.com/multipleimagesection.do?categoryId=9017892  
&contentId=7033503](http://www.bp.com/multipleimagesection.do?categoryId=9017892&contentId=7033503).
2. Weber A. Z., Darling R. M., and Newman J., “Modeling two-phase behavior in PEFCs,” Journal of the Electrochemical Society. Vol. 151, No. 10, pp. A1715-A1727, 2004.
3. Marr C. and Li X., “Composition and performance modelling of catalyst layer in a proton exchange membrane fuel cell,” Journal of Power Sources. Vol. 77, No. 1, pp. 17-27, 1999.
4. Baschuk J. J. and Li X., “Modelling of polymer electrolyte membrane fuel cells with variable degrees of water flooding,” Journal of Power Sources. Vol. 86, No. 1-2, pp. 181-196, 2000.
5. Bernardi D. M. and Verbrugge M. W., “Mathematical-Model of a Gas-Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte,” AIChE Journal. Vol. 37, No. 8, pp. 1151-1163, 1991.
6. Bernardi D. M. and Verbrugge M. W., “A Mathematical-Model of the Solid-Polymer-Electrolyte Fuel-Cell,” Journal of the Electrochemical Society. Vol. 139, No. 9, pp. 2477-2491, 1992.
7. Springer T. E., Zawodzinski T. A., and Gottesfeld S., “Polymer Electrolyte Fuel-Cell Model,” Journal of the Electrochemical Society. Vol. 138, No. 8, pp. 2334-2342, 1991.

8. Fuller T. F. and Newman J., "Water and Thermal Management in Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cells," *Journal of The Electrochemical Society*. Vol. 140, No. 5, pp. 1218-1225, 1993.
9. Gurau V., Liu H. T., and Kakac S., "Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells," *AIChE Journal*. Vol. 44, No. 11, pp. 2410-2422, 1998.
10. You L. and Liu H., "A two-phase flow and transport model for the cathode of PEM fuel cells," *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol. 45, No. 11, pp. 2277-2287, 2002.
11. Chen F., Wen Y.-Z., Chu H.-S., Yan W.-M., and Soong C.-Y., "Convenient two-dimensional model for design of fuel channels for proton exchange membrane fuel cells," *Journal of Power Sources*. Vol. 128, No. 2, pp. 125-134, 2004.
12. Shimpalee S. and Dutta S., "Numerical prediction of temperature distribution in PEM fuel cells," *Numerical Heat Transfer Part a-Applications*. Vol. 38, No. 2, pp. 111-128, 2000.
13. Lee W. K., Shimpalee S., and Van Zee J. W., "Verifying predictions of water and current distributions in a serpentine flow field polymer electrolyte membrane fuel cell," *Journal of the Electrochemical Society*. Vol. 150, No. 3, pp. A341-A348, 2003.
14. Natarajan D. and Van Nguyen T., "Three-dimensional effects of liquid water flooding in the cathode of a PEM fuel cell," *Journal of Power Sources*. Vol. 115, No. 1, pp. 66-80, 2003.
15. He W. S., Yi J. S., and Van Nguyen T., "Two-phase flow model of

- the cathode of PEM fuel cells using interdigitated flow fields,”  
AIChE Journal. Vol. 46, No. 10, pp. 2053-2064, 2000.
16. Wang Z. H., Wang C. Y., and Chen K. S., “Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells,” Journal of Power Sources. Vol. 94, No. 1, pp. 40-50, 2001.
  17. Yi J. S. and Van Nguyen T., “Multicomponent transport in porous electrodes of proton exchange membrane fuel cells using the interdigitated gas distributors,” Journal of the Electrochemical Society. Vol. 146, No. 1, pp. 38-45, 1999.
  18. Um S. and Wang C. Y., “Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells,” Journal of Power Sources. Vol. 125, No. 1, pp. 40-51, 2004.
  19. Hu G., Fan J., Chen S., Liu Y., and Cen K., “Three-dimensional numerical analysis of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) with conventional and interdigitated flow fields,” Journal of Power Sources. Vol. 136, No. 1, pp. 1-9, 2004.
  20. Um S., Wang C. Y., and Chen C. S., “Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells,” Journal of the Electrochemical Society. Vol. 147, No. 12, pp. 4485-4493, 2000.
  21. Berning T., Lu D. M., and Djilali N., “Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell,” Journal of Power Sources. Vol. 106, No. 1-2, pp. 284-294, 2002.

22. Mazumder S. and Cole J. V., "Rigorous 3-d mathematical modeling of PEM fuel cells - I. Model predictions without liquid water transport," *Journal of the Electrochemical Society*. Vol. 150, No. 11, pp. A1503-A1509, 2003.
23. Mazumder S. and Cole J. V., "Rigorous 3-d mathematical modeling of PEM fuel cells - II. Model predictions with liquid water transport," *Journal of the Electrochemical Society*. Vol. 150, No. 11, pp. A1510-A1517, 2003.
24. Yan W. M., Soong C. Y., Chen F., and Chu H. S., "Effects of flow distributor geometry and diffusion layer porosity on reactant gas transport and performance of proton exchange membrane fuel cells," *Journal of Power Sources*. Vol. 125, No. 1, pp. 27-39, 2004.
25. Siegel N. P., Ellis M. W., Nelson D. J., and von Spakovsky M. R., "A two-dimensional computational model of a PEMFC with liquid water transport," *Journal of Power Sources*. Vol. 128, No. 2, pp. 173-184, 2004.
26. Oosthuizen P. H., Sun L., and McAuley K. B., "The effect of channel-to-channel gas crossover on the pressure and temperature distribution in PEM fuel cell flow plates," *Applied Thermal Engineering*. Vol. 25, No. 7, pp. 1083-1096, 2005.
27. Shimpalee S., Greenway S., and Van Zee J. W., "The impact of channel path length on PEMFC flow-field design," *Journal of Power Sources*. Vol. 160, No. 1, pp. 398-406, 2006.
28. Sun L., Oosthuizen P. H., and McAuley K. B., "A numerical study

- of channel-to-channel flow cross-over through the gas diffusion layer in a PEM-fuel-cell flow system using a serpentine channel with a trapezoidal cross-sectional shape,” *International Journal of Thermal Sciences*. Vol. 45, No. 10, pp. 1021-1026, 2006.
29. Shimpalee S. and Van Zee J. W., “Numerical studies on rib & channel dimension of flow-field on PEMFC performance,” *International Journal of Hydrogen Energy*. Vol. In Press, Corrected Proof, No.
30. Kanezaki T., Li X., and Baschuk J. J., “Cross-leakage flow between adjacent flow channels in PEM fuel cells,” *Journal of Power Sources*. Vol. 162, No. 1, pp. 415-425, 2006.
31. Dutta S., Shimpalee S., and Van Zee J. W., “Numerical prediction of mass-exchange between cathode and anode channels in a PEM fuel cell,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol. 44, No. 11, pp. 2029-2042, 2001.
32. Nguyen P. T., Berning T., and Djilali N., “Computational model of a PEM fuel cell with serpentine gas flow channels,” *Journal of Power Sources*. Vol.130, No. 1-2, pp. 149-157, 2004.
33. Park J. and Li X., “An experimental and numerical investigation on the cross flow through gas diffusion layer in a PEM fuel cell with a serpentine flow channel,” *Journal of Power Sources*. Vol. 163, No. 2, pp. 853-863, 2007.
34. Soong C. Y., Yan W. M., Tseng C. Y., Liu H. C., Chen F., and Chu H. S., “Analysis of reactant gas transport in a PEM fuel cell with

- partially blocked fuel flow channels,” *Journal of Power Sources*. Vol. 143, No. 1-2, pp. 36-47, 2005.
35. Yan W.-M., Yang C.-H., Soong C.-Y., Chen F., and Mei S.-C., “Experimental studies on optimal operating conditions for different flow field designs of PEM fuel cells,” *Journal of Power Sources*. Vol. 160, No. 1, pp. 284-292, 2006.
36. Yan W.-M., Mei S.-C., Soong C.-Y., Liu Z.-S., and Song D., “Experimental study on the performance of PEM fuel cells with interdigitated flow channels,” *Journal of Power Sources*. Vol. 160, No. 1, pp. 116-122, 2006.
37. Soong C. Y., Yan W. M., Tseng C. Y., Liu H. C., Chen F. L., and Chu H. S., “Analysis of reactant gas transport in a PEM fuel cell with partially blocked fuel flow channels,” *Journal of Power Sources*. Vol. 143, No. 1-2, pp. 36-47, 2005.
38. Wang C. Y. and Cheng P., “A multiphase mixture model for multiphase, multicomponent transport in capillary porous media .1. Model development,” *International Journal of Heat and Mass Transfer*. Vol. 39, No. 17, pp. 3607-3618, 1996.
39. Dullien F. A. L., *Porous media*, New York, 1991.