

第三章 理論模式

近年來，計算流體力學的技術已經被廣泛應用在燃料電池的分析上，基本上都是利用包括有限體積、有限差分、及有限元素等數值方法，求解質量、動量、能量、及各反應物成分之守恆方程式。

用於燃料電池分析的計算流體力學程式需具有以下之能力，包括：流體於多孔性材質的傳輸現象、多孔性材質中的多方向電化學反應；程式需整合質量、化學反應及電流傳遞的分析；並能夠處理高電流密度操作時，所產生水的管理問題等。本研究是採用 CFDRC 商業軟體中的 CFD-ACE 程式^[39]來模擬質子交換膜燃料電池。

3.1 軟體簡介

CFDRC (CFD Research Corporation)^[40-41]是由美國CFD研究公司所發展出的計算流體力學軟體，可同時可分析流力、熱傳、化學反應與質傳、電滲透之多種複雜現象。此軟體可用來模擬 PEMFC實際操作情形，已獲得與實驗相似的結果，CFD-ACE程式有多樣化的工業應用。此套裝軟體，主要可分為三部分。

CFDRC軟體可先以CFD-GEOM 建立幾何形狀模式和製作格點系統做為CFD分析的範圍，針對某些特殊幾何形狀，可提供多區塊之結構與非結構網格。CFD-ACE 實際執行數值計算時，需設定物理性質、邊界條件、初始條件、和數值求解運算方式。CFD-ACE利用有限體積法將此統御方程式離散化。CFD-VIEW是所謂的後處理部分。將分析結果以圖像和曲線呈現，協助使用者了解並評估分析結果是否正確。

3.2 基本假設

PEMFC是非常複雜的系統，含有微觀與巨觀的特性和傳輸過程。進行數值模擬時必須作適當之簡化，本分析的模擬假設為：

- (1)燃料電池在穩態下操作；
- (2)為非等溫系統；

- (3)由於流域小、壓力梯度低、及流速很小，故假設內部的氣體流動為層流和不可壓縮流；
- (4)氣體混合物視為理想氣體；
- (5)擴散層、觸媒層和薄膜皆為等向性和均質性之多孔材質；
- (6)流體的黏滯係數與密度均為常數；
- (7)忽略各層結構物間的接觸阻抗；
- (8)只考慮生成反應物為氣態(未考慮Saturation)，分析中不考慮相變化。

3.3 統御方程式

燃料電池數值模式中以質量、動量、能量以及成份守恆方程式來描述計算區域中之流場，在陽極與陰極之觸媒層中會有電化學反應發生，進而產生電流來達成發電之目的，以下列出計算流場所需的方程式^[42]如下：

3.3.1 多孔性材質內傳輸之統御方程式

流體流經多孔性材質的質量守恆方程式為

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho) + \nabla \cdot (\varepsilon\rho U) = 0 \quad (1)$$

式中 ρ 為流體密度， U 為流速， ε 為材質的孔洞率(Porosity)即材質中孔洞所佔的體積比上材質的總體積。

動量守恆方程式為

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\rho U) + \nabla \cdot (\varepsilon\rho UU) = -\varepsilon\nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon\tau) + \varepsilon B + \frac{\varepsilon^2 \mu U}{\kappa} \quad (2)$$

式中 p 為壓力， μ 為流體的黏滯力， τ 為剪應力， B 為流體所受的重力， κ 為可滲透率(Permeability: 其值為在多孔性材質中有效體積比上面積的平方)。方程式(2)中的最後一項為施加在多孔性材質壁上的 Dracy's drag force，通常表示流體流過多孔性材質後所造成的壓力降。一般而言，其是非等向性的，也就是不同方向上的壓降可以是不同的。當在純流體的流道時， $\varepsilon \rightarrow 1$ 及 $\kappa \rightarrow \infty$ ，此時方程式(1)和

(2)，即恢復至 Navier-Stokes equation。

能量守恆方程式為

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\varepsilon)\rho_s h_s + \varepsilon \rho h) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho U h) = \nabla \cdot q + (\varepsilon \tau : \nabla U) + \varepsilon \frac{dp}{dt} - j_T \eta + \frac{|i \cdot i|}{\sigma} + \dot{S}_h \quad (3)$$

其中 h 為混合氣體的焓， h_s 及 ρ_s 分別為固體的焓及密度，至於熱通量 q 則和熱傳導及各成份氣體的擴散性有關，可寫成

$$q = \lambda \nabla T + \sum_{i=1}^{N_G} J_i h_i \quad (4)$$

式中 N_G 為氣體分子的總數， h_i 為各成份氣體的焓， J_i 為擴散通量， T 為溶液溫度。至於熱傳導係數 λ 則和材質孔洞率及其固體特性有關^{[43][44]}，可表示為

$$\lambda = -2\lambda_s + \frac{1}{\frac{\varepsilon}{2\lambda_s + \lambda_F} + \frac{1-\varepsilon}{3\lambda_s}} \quad (5)$$

式中 λ_s 及 λ_F 分別為固體區域及流體區域(孔洞區)的熱傳係數。流體區域的熱傳係數 λ_F 則和混合氣體的成份有關，可由 Chapman-Enskog 理論^[48] 表示為

$$\lambda_F = \sum_{i=1}^N \frac{x_i k_i}{\sum_{j=1}^N x_j \Theta_{ij}} \quad (6)$$

$$\text{其中} \quad \Theta_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (7)$$

方程式(3)的最後三項分別代表了電能所做的功、焦耳熱(Joule heating)、以及能量交互作用。

對於化學反應中各成份氣體的成份守恆方程式^[45]為

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon \rho Y_i) + \nabla \cdot (\varepsilon \rho U Y_i) = \nabla \cdot J_i + \dot{\omega}_i \quad (i=1,2,\dots,N_G) \quad (8)$$

其中 Y_i 為第 i 種類氣體所佔的質量分率， $\dot{\omega}$ 為在氣相中各成份氣體產物的生成率，各成份氣體分子的擴散通量^[45] 定義為

$$J_i = \rho D_i \nabla Y_i + \frac{\rho Y_i}{M} D_i \nabla M - \rho M \sum_j D_j \nabla Y_j - \rho \nabla M \sum_j D_j Y_j \quad (9)$$

式中 M 為混合物的分子量，右邊第一項表示由於濃度不同所造成的 Fickian Diffusion (Fick's Law)，至於後三項則是為了滿足多成份分子的 Stefan-Maxwell 方程式。在此 D_i 為第 i 種氣體分子在多孔性介質中的有效質量擴散係數，其和介質的孔洞率與 Tortuosity 有關，表示為

$$D_i = D_{i,FS} \bullet \varepsilon^\tau \quad (10)$$

方程式(10)為 Bruggeman 關係式^[46-47]，通常 τ (Tortuosity=1.5)，其中 $D_{i,FS}$ 是分子在自由環境中的擴散係數，表示為

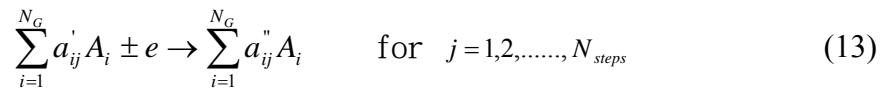
$$D_{i,FS} = \frac{1 - x_i}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{x_j}{D_{ij}}} \quad (11)$$

兩種(Binary)成份擴散係數，可由 Chapman-Enskog 理論^[48-49]表示為

$$D_{ij} = 0.018829 \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{10^3 \cdot M_i} + \frac{1}{10^3 \cdot M_j} \right)}}{P \varpi_{ij}^2 \Omega_{D,ij}} \quad (12)$$

3.3.2 電化學反應以及質量和電流傳輸之統御方程式

電化學反應發生在觸媒層中孔洞的表面，也就是當流體流至與觸媒層接觸時。將發生在觸媒層表面的多步驟反應式表示為



其中 N_G 為氣體成份總數， a'_{ij} 和 a''_{ij} 為標準化之後反應物及產物的 Stoichiometric coefficient。所謂標準化指反應以一個電子的產生或是消耗為基準。

當反應物從孔洞流經多孔性物質時，會利用擴散效應到達觸媒層，在觸媒的表面堆積或消耗，其平衡方程式為

$$\sum_{j=1}^{N_{steps}} M_i (a''_{ij} - a'_{ij}) \frac{j_{T,j}}{F} = \rho D_i \nabla Y_i \quad (14)$$

其中 $j_{T,j}$ 是產生的電流密度(A/m²)，F 為法拉第常數， M_i 為第 i 種氣體成份的分子
子量，經過數值差分後，得到反應平衡方程式為

$$\sum_{j=1}^{N_{steps}} M_i (a_{ij}'' - a_{ij}') \frac{j_{T,j}}{F} = \rho D_i \frac{Y_i - Y_{P,i}}{\delta} \quad (15)$$

式中 $Y_{P,i}$ 代表第 i 種氣體成份的分子在孔洞中所佔的質量分率， Y_i 為在孔洞中
流體與觸媒界面上的質量分率， δ 為擴散長度，假設其和孔洞的平均大小相等。

至於傳播電流 $j_{T,j}$ 則由 Butler-Volmer 方程式^[50]得到，方程式寫為(21)

$$j_{T,j} = \frac{j_{0,j}}{\prod_{k=1}^N [\Lambda_{k,ref}]^{\alpha_{k,j}}} \left[\exp\left(\frac{\alpha_{a,j} F}{RT} \eta\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{c,j} F}{RT} \eta\right) \right] \prod_{k=1}^N [\Lambda_k]^{\alpha_{k,j}} \quad (16)$$

式中 $j_{0,j}$ 為第 j 步驟反應中的交換電流密度(Exchange current density)， $\alpha_{a,j}$ 及 $\alpha_{c,j}$ 為
利用實驗所產生的 Tafel Plots 所決定的常數。 $[\Lambda_k]$ 為第 k 種氣體在平均界面上的
莫耳濃度，由於 $[\Lambda_k] = pY_k/M_k$ ， $\alpha_{k,j}$ 是由 k 到 j 成份的濃度指數(Concentration
exponent)，代入到方程式(16)變成一組非線性方程式，經由數值解後可得所有
成份的 Y_i ，而在觸媒層中的產物生成率表示為

$$\dot{w}_i = \rho D_i \frac{Y_i - Y_{P,i}}{\delta} \left(\frac{S}{V} \right)_{eff} V \quad (17)$$

$(S/V)_{eff}$ 為有效面積對體積的比值，代表觸媒的性質。從上式可以明顯看出
流體在孔洞中的擴散係數，以及觸媒層中有效面積對體積的比值，兩個參數對電
化學反應都有直接且明顯的影響。方程式(16)中的電池電位 η ，則代表在固體與
流體間的電位差。電化學反應中的電流連續方程式為

$$\nabla \bullet i = 0 \quad (18)$$

當材質為多孔性材質時，電流將可細分成兩種，一為經由固體流出，一為經由孔
洞流出，分別表示為 i_S 及 i_F ，方程式(18)可改寫成

$$\nabla \bullet i_F + \nabla \bullet i_S = 0 \quad (19)$$

由於電化學反應所產生的電子會經由孔洞傳至固體中，因此可以將方程式(19)改寫成

$$-\nabla \bullet i_F = \nabla \bullet i_S = j_T = \sum_{j=1}^{N_{steps}} j_{T,j} \quad (20)$$

由歐姆定律 (Ohm's Law) 可以得到

$$\nabla \bullet (\sigma_F \nabla \Phi_F) = -\nabla \bullet (\sigma_S \nabla \Phi_S) = j_T \quad (21)$$

其中 Φ_F 及 Φ_S 為在流體及固體中的電位能。

3.3.3 薄膜內水傳輸之統御方程式

將 PEMFC 的電解質保持在最佳的濕潤狀態，是維持 PEMFC 在最佳性能的重要的關鍵技術。由於電池所產生的水，包含氣態與液態，其來源包括陰極電化學反應生成的水與增濕反應氣體所帶入的水。電池中水過多或過少均會對電池性能有負面的影響，有效管理反應所產生的水及考慮其傳輸平衡的問題，將對 PEMFC 的效能有極大的幫助。若能有效的將水在電池中的生成及傳輸現象加入數值模式，將有效提升電池效能分析模擬的真實性。目前 CFD-ACE，已經將水的傳輸問題納入數值模式中^[6]。

PEMFC 中， H^+ 會藉由水的作用由陽極滲透移動過質子交換膜至陰極，質子交換膜中液態水的輸送主要靠對流、擴散、壓力梯度、表面張力、重力以及移動中的質子所造成的電滲透力(Electro Osmotic Drag)。對於水管理的模式，主要參照 Wang and Cheng(1997)^[51] 及 Wang et al(2001)^[52] 所提出的”多相混合模式”傳播方程式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_d \rho_l s) + \nabla \bullet (\varepsilon_d \rho U \lambda_l) + \nabla \bullet \left(\frac{\alpha M_l}{F} i_F \right) = \nabla \bullet (\varepsilon_d \rho_l D_c \nabla s) \\ - \nabla \bullet \left(\frac{\lambda_l (1 - \lambda_l) \kappa (\rho_l - \rho_g)}{\nu} g \right) + \dot{m}_l \end{aligned} \quad (22)$$

式中 s 為液態水的飽和量(Saturation)，定義為水的體積比上孔洞的總體積， ε_d 為孔洞在全部乾燥時的孔洞率， ρ_l 為水的密度， ρ 為氣液兩相的混合密度， U 為氣

液兩相的混合流速。式中第一項代表水的儲藏量，第二項代表由壓力差所造成的水傳輸現象，至於氣液間的滑移條件則考慮兩相之間的相對移動性，定義

$$\lambda_l = \frac{\kappa_{rl}}{\nu_l} / \left[\frac{\kappa_{rl}}{\nu_l} + \frac{\kappa_{rg}}{\nu_g} \right] \quad (23)$$

式中 κ_{rl} 及 κ_{rg} 代表液體及氣體的相對透率，至於 ν_l 、 ν_g 及 ν 分別代表液體、氣體及其混合的 Dynamic viscosity。一般而言，滲透率會和水的飽和率有關，依據^[51]的資料，CFD-ACE 為了簡化數值計算，利用一二次多項式逼近多次曲線，方程式為

$$\lambda_l = s(2 - s) \quad (24)$$

此逼近方程式在 $s=0$ 及 $s=1$ 時會符合原來的多次曲線。利用二次方程式逼近，除可以簡化問題外，並且不會脫離實際情形太遠。

重寫方程式(22)中的第二項

$$\nabla \cdot [\varepsilon_d \rho U \lambda_l] = \nabla \cdot [2\varepsilon_d \rho U_s] - \nabla \cdot [\varepsilon_d \rho U_s^2] \quad (25)$$

代入方程式(22)之後，整理得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_d \rho_l s) + \nabla \cdot (2\varepsilon_d \rho U_s) + \nabla \cdot \left(\frac{\alpha M_l}{F} i_F \right) = \nabla \cdot (\varepsilon_d \rho_l D_c \nabla s) + \nabla \cdot (\varepsilon_d \rho U_s^2) \\ - \nabla \cdot \left(\frac{\lambda_l (1 - \lambda_l) \kappa (\rho_l - \rho_g)}{\nu} g \right) + \dot{m}_l \end{aligned} \quad (26)$$

方程式(26)為一標準的對流擴散方程式，以下針對水傳輸時所需使用的理論模式，包括電滲透力、表面張力及相變化等部份提出說明。

(a) 電滲透阻力：

質子移動要通過薄膜時，會挾帶著水分子一起移動，此種現象稱為電滲透力。假設水流過薄膜的通量和質子數量成正比，而薄膜內的質子通率又和電流密度有關，因此由電滲透力所造成的水通量定義為

$$J_{w,EOD} = \frac{\alpha M_l}{F} i_F \quad (27)$$

其中 M_l 為水分子量， F 為法拉第常數， α 為電滲透阻力係數，其明顯的和質子所帶的水分子數有關。當薄膜完全充滿水時，由實驗室^[23]測得 Nafion 117 薄膜的 α 值介於 2.3~2.7 之間；當完全乾燥時， α 值為零。本模式利用

$$\alpha = 2.5s \quad (28)$$

代表電滲透阻力係數和水飽和度之間的關係。

(b)表面張力：

燃料電池使用多孔性材質的氣體擴散層，由於其內部孔洞的尺寸均很小，表面張力成為主要的作用力。一般而言，電極板的材質均為親水性材質，因此水會因為表面張力的關係，很快的充滿整個薄膜的孔洞，而且很難移除，造成質子交換膜燃料電池中的阻塞現象(Clogging phenomenon)，會嚴重影響電池效率。要完整模擬多孔性材質中的表面張力是很困難的，主要是因為無法求得正確的液氣界面形狀，也就無法得到正確的表面張力值。目前在計算多孔性材質中的表面張力，通常是利用擴散差的假設，也就是假設表面張力的大小和水的飽和係數有關，定義表面張力擴散係數為

$$D_c = -\frac{\kappa_l}{\mu_l} \frac{dp_c}{ds} \quad (29)$$

其中 p_c 為毛細壓力頭， κ_l 為水的滲透率， μ 為黏滯係數。

(c)相變化：

在 PEMFC 中液態水的生成主要是由反應所產生的蒸汽水凝結而來。在 CFD-ACE 中主要假設相平衡來進行相變化之模擬，允許進行自然有限速度的相變化，根據文獻^[52]得到方程式(26)中水的生成速率

$$\dot{m}_l = \begin{cases} M_l k_c \frac{\mathcal{E}_w}{RT} (x_w P - P_{sat}) & \text{if } x_w P > P_{sat} \\ M_l k_e \frac{\mathcal{E}_l}{M_l} (x_w P - P_{sat}) & \text{if } x_w P < P_{sat} \end{cases} \quad (30)$$

式中 k_c 及 k_e 分別為凝結與蒸發的速率常數， $x_w P$ 代表水蒸汽分壓， x_w 為水蒸汽的莫耳分率， P_{sat} 為飽和蒸汽壓。軟體中凝結及蒸發速率常數，與參考資料^[53]及^[54]所使用的相同。至於能量守恆方程式(3)中的最後一項，也就是由相變化所造成的能量變化寫成

$$\dot{S}_h = \dot{m}_l h_{fg} \quad (31)$$

其中 h_{fg} 為蒸氣的潛熱(latent heat)。液態水的形成會減低氣體分子的擴散速率，當多孔性介質的孔洞由於毛細現象而被水所佔據後，所有的氣體分子將無法擴散至觸媒層參與反應，因此將有效孔洞率寫成

$$\varepsilon = \varepsilon_d(1-s) \quad (32)$$

並代入方程式(10)中(Bruggeman model)。式(32)說明了，當 s 增加時，濕孔洞率 ε 會減小，也就是說氣體的有效擴散係數也會跟著減小。

以上說明了商業軟體 CFD-ACE 中模擬質子交換膜燃料電池的理論基礎，為了驗證相關理論基礎，本文選擇模擬三維有限體積的幾何形狀，進行計算，確認軟體的適用性及正確性。



3.4 邊界條件

(1) 壁面邊界條件：

流體流經壁面時為無滑移邊界 (No-slip condition) 即 $U=V=W=0$ 。雖然在微小尺寸的流場中，在固體邊界可能會出現滑移邊界現象，但是就一般黏滯性流體而言，因為其平均自由路徑與裝置之特徵長度相較之下仍非常小，所以可以假設為無滑移邊界條件。陽極與陰極集電板的兩端為固定電位，其餘壁面為固定電流，並將電流設為零。

(2) 出入口邊界條件：

在氣體流道設定入口邊界條件為固定速度，而出口邊界條件為固定壓力，且速度及濃度場是假設為完全發展流(Fully developed)。入口流體溫度，假設為 80°C ，流體電流為零。流入燃料之成份的質量分率為定值。陽極出入口壓力為

3atm，陰極則為 5atm。

(a)入口邊界條件包括速度、壓力、溫度、混合氣體濃度 (Dirichlet邊界條件)

$$u|_{z=0}=0, \quad v|_{z=0}=0, \quad w|_{z=0}=w_{in}, \quad C^{H_2O}|_{z=0}=\frac{\rho_{g,sat}^{H_2O} RH_{in}}{\rho_g}, \quad C^{O_2}|_{z=0}=C_{in}^{O_2}$$

(b)出口邊界條件只須描述壓力；其他所有參數，假設在流道方向(z方向)的梯度為零(Newman邊界條件)，為完全發展流或零通量情形(No-flux condition)

$$u|_{z=L}=0, \quad v|_{z=L}=0, \quad \frac{\partial w}{\partial z}|_{z=L}=0, \quad \frac{\partial C^{H_2O}}{\partial z}|_{z=L}=0, \quad \frac{\partial C^{O_2}}{\partial z}|_{z=L}=0$$

(3) 對稱邊界條件：

指的是零梯度情形(Zero-gradient condition)，流體不允許穿越對稱邊界條件，由於電池的幾何對稱，將假設y方向為對稱邊界條件，即在y=0處且x-z平面邊界區域。

3.5 數值方法

為了求解之前所描述的質量、動量、能量及多成份方程式，CFD-ACE是使用有限體積法(Finite-volume method)將計算區域切割成許多控制體積之計算格點，再將各統御方程式離散化，成為計算格點的代數方程式，再利用CFD-ACE軟體來執行計算求解。

在CFD-ACE燃料電池模式中，數值解的演算流程如圖3-1所示^[41]。計算時利用SIMPLEC (Semi-implicit method for pressure-linked equations consistent)演算法以及 AMG (Algebraic multigrid solver) 修正壓力項，詳細數值求解過程可參考S. V. Patankar,1980^[55]。計算時採用 First order upwind scheme 來獲得初始數值解，收斂條件為相對改變量必須小於 10^{-5} 。採用 Block iterative technique 技術中的 Under-Relaxation方法，來強迫修正方程式中的相依變數，防止在求解的過程中產生發散現象。

PEMFC的模擬非常複雜，分析不同案例時常無法收斂，所以必須調整數值方法中的計算參數，例如各重要參數之 Relaxation Factor，附錄中將討論本研究使用CFDRC軟體之經驗。

3.6 模式描述

本文主要是利用CFD-ACE軟體，建立一個穩態之三維PEM燃料電池模式，進行數值模擬分析。圖3-2是三維燃料電池的模型示意圖，詳細的幾何形狀尺寸如表3-1所示；燃料電池以中間的薄膜將電池分隔為陽極與陰極兩部分，依序為觸媒層、擴散層、氣體流道以及最外層的集電板。

在基本模式中，操作溫度(集電板外側)設定為353K，流道方向為同向流(Co-flow)，即陽極出入口方向與陰極同向，陽極流道的出口壓力為3大氣壓，陰極流道的出口壓力為5大氣壓，陽極流體的入口流速為0.2m/sec，陰極流體的入口流速為0.3m/sec。表3-2為陽極及陰極流道入口氣體的組成成份，在陽極入口燃料成分有氫氣、水蒸汽(RHa=100%)，陰極入口為增濕空氣(RHc=100%)。表3-3與表3-4所列相關的計算物理參數，大部分的數據都是參閱文獻^[5]，由於擴散層與薄膜都是屬於多孔性結構，因此在模擬上幾何形狀變得相當複雜，所以將它假設為等向性(Isotropic)，以便進行分析。本研究進行時，花了不少的時間進行參數資料蒐集與調整，以期待有參考文獻^[5]中的模擬結果。

圖3-3 所示為所劃分的網格計算區域，其中將幾何形狀細分成 $50 \times 96 \times 20$ (96000) 的格點，格點的多寡會影響模擬結果的準確性和花費時間，甚至計算是否能夠收斂。通常網格數越多，所模擬的結果也越精確但計算時間變長。各區間網格為非均勻分佈，以中間較疏越往邊界處越密，主要是因燃料電池的擴散層、觸媒層、薄膜層與流道相比均非常狹小，以及主要產生反應的地方在觸媒層，故必須在此區的網格要分的比較細微，以便得到較精確結果。

在第四章中，將首先描述基本模式的模擬結果，再說明改變重要輸入參數後，對模擬結果的影響。

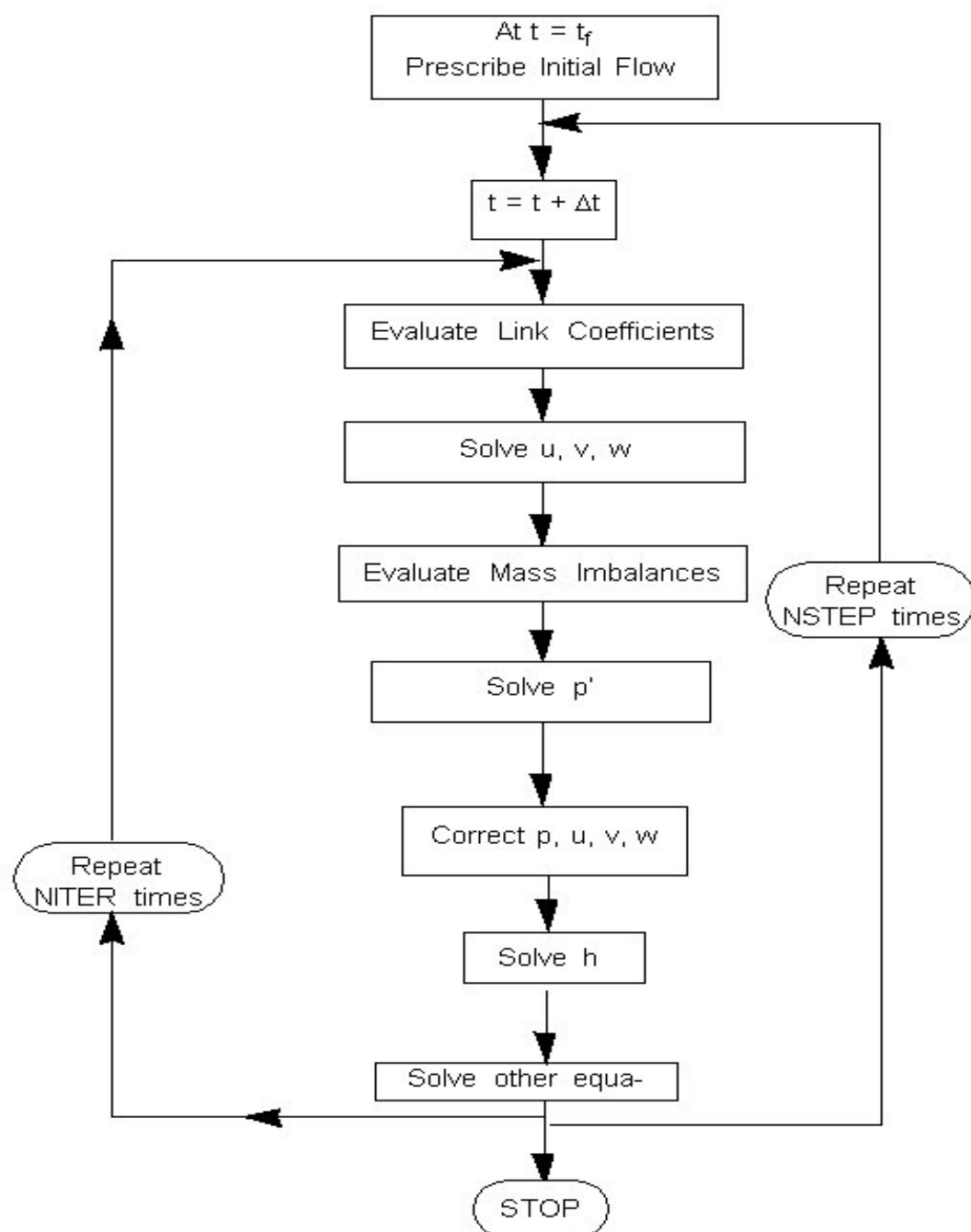


圖 3-1 CFD-ACE 數值計算的流程圖^[40]

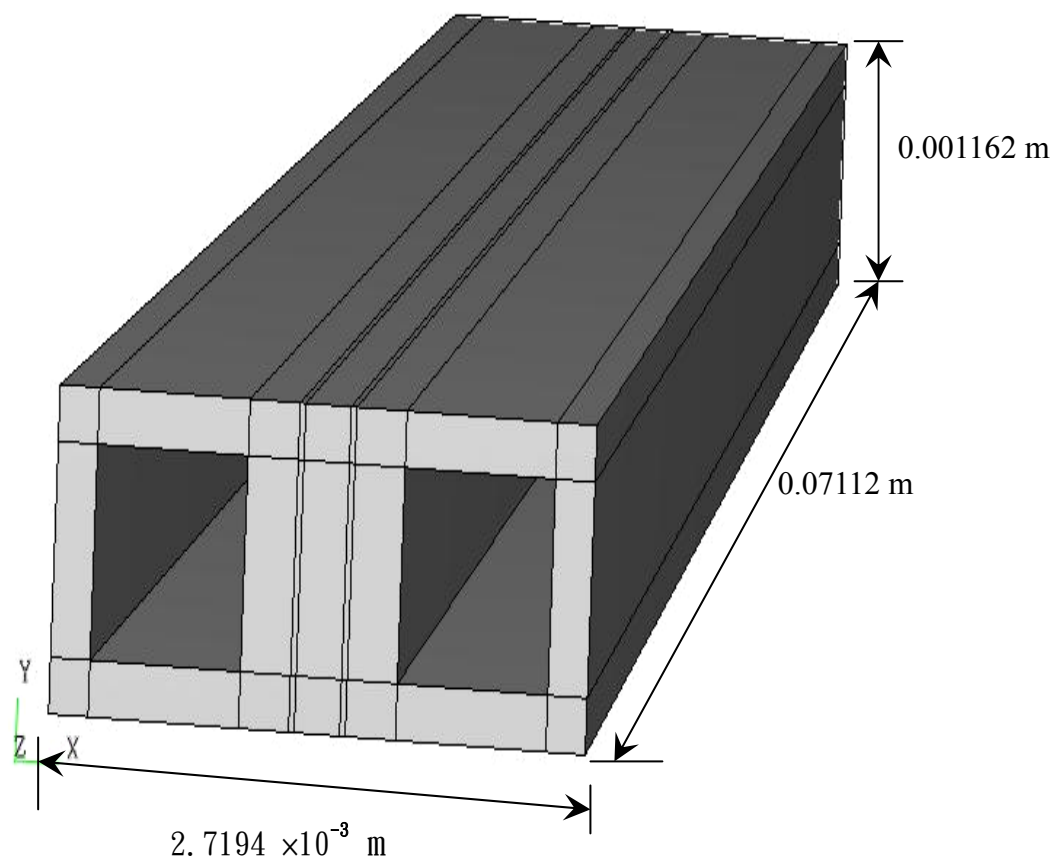


圖 3-2 三維 PEM 燃料電池模式的示意圖

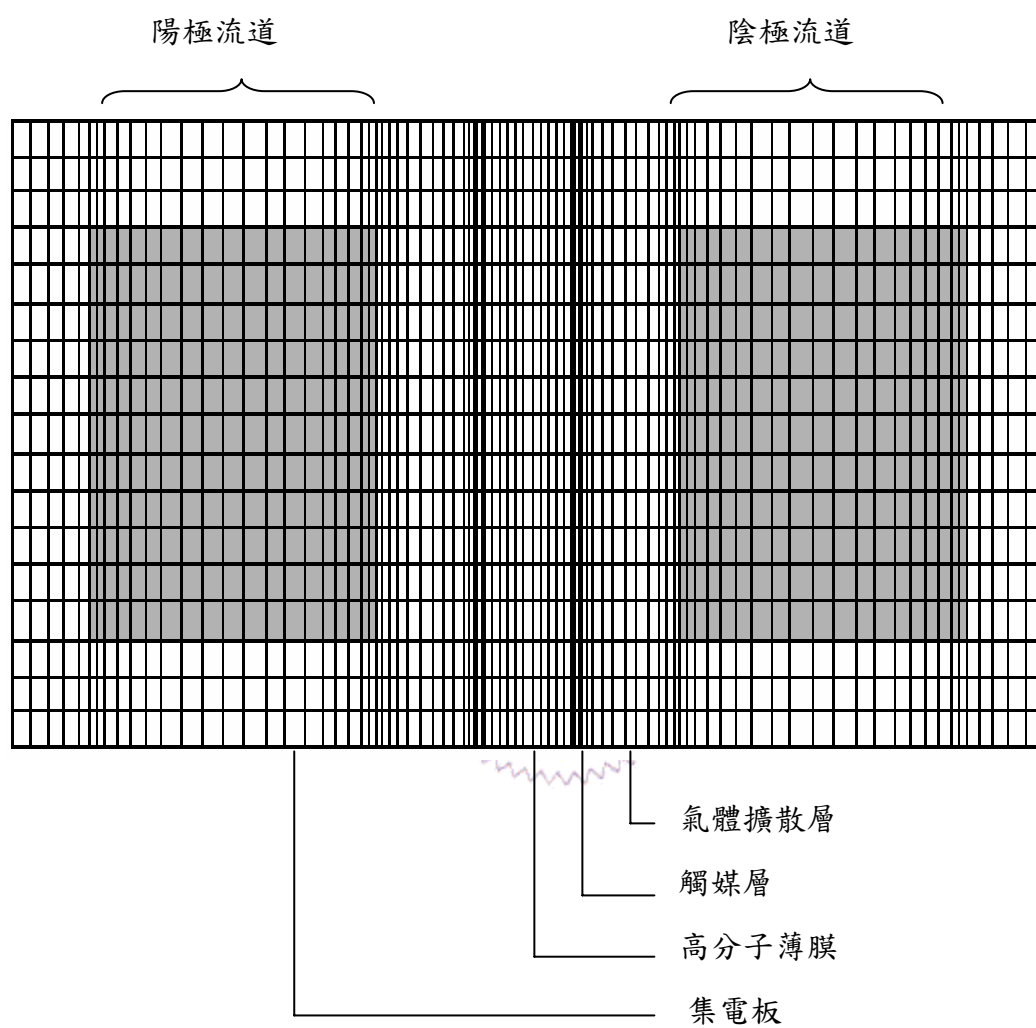


圖 3-3 計算幾何形狀與網格分佈圖

表 3-1 計算 PEM 燃料電池的幾何形狀尺寸^[5]（單位：m）

數值模式參數	計算幾何尺寸
流道長度(L)	0.07112
流道高度(h)	0.001162
流道厚度	7.62×10^{-4}
擴散層厚度	2.54×10^{-4}
觸媒層厚度	2.87×10^{-5}
薄膜厚度	2.3×10^{-4}
單電池總厚度	2.7194×10^{-3}

表 3-2 陽極與陰極流道入口氣體的混合成份（質量分率）

入口氣體的混合成份		H ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂
在 50°C 飽和狀態，入口燃料組成	陽極	0.73	0.27		
	陰極		0.015	0.75	0.235
在 80°C 飽和狀態，入口燃料組成	陽極	0.381	0.619		
	陰極		0.059	0.722	0.219

表 3-3 電極反應的參數性質^[5]

陽極反應	傳導係數(Tafel constant)	0.5
	Concentration dependence	0.5 (H ₂)
	參考電流密度	$9.23 \times 10^8 \text{ (A/m}^3\text{)(m}^3\text{/kg-mole H}_2\text{)}^{1/2}$
陰極反應	傳導係數(Tafel constant)	1.5
	Concentration dependence	1.0 (O ₂)
	參考電流密度	$1.05 \times 10^6 \text{ (A/m}^3\text{)(m}^3\text{/kg-mole H}_2\text{)}^{1/2}$

表 3-4 多孔性結構的參數性質^[5]

多孔性結構		擴散層（觸媒層）	薄膜
流體性質	孔隙率(Porosity)	0.4	0.28
	滲透係數(Permeability) (m ²)	10 ⁻¹¹	10 ⁻¹⁸
熱性質	熱傳導係數 (W/m-K)	150.6	150.6
化學性質	Tortuosity	1.5	8
	Surface to Volume Ratio (1/m)	0 (1000)	0
	Average Pore Size (m)	10 ⁻⁶	10 ⁻⁶
電性質	電傳導係數 (1/ohm-m)	53	10 ⁻²⁰