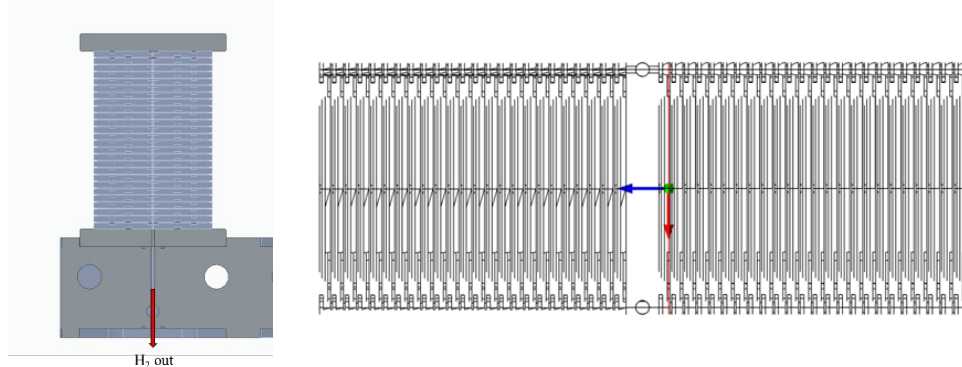


一、計畫目標

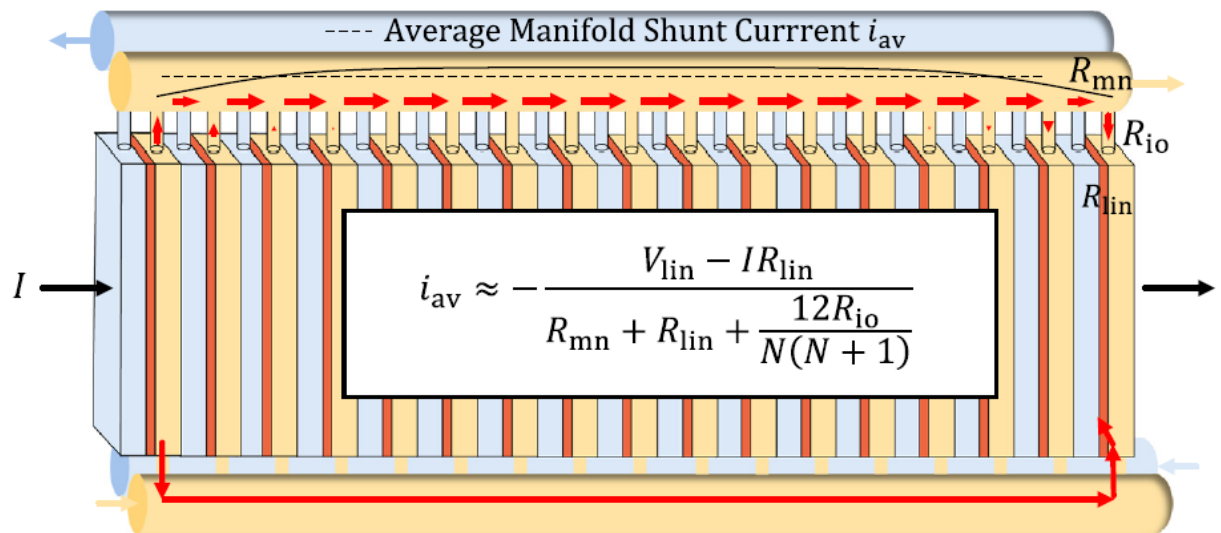
透過本計畫之執行，依據工業技術研究院提供之 50 kW 級陰離子交換膜電解槽（Anion Exchange Membrane Electrolyzer Cell, AEMEC）電解電堆幾何尺寸、流道配置及操作條件，建立三維熱流場分析模型，以評估大型電堆內部流量分布、壓力損失、溫度分布及熱流均勻性等特性。透過數值模擬分析不同操作條件與結構參數變動對電堆流場與熱管理之影響，提供工研院作為電堆設計評估與操作條件優化之參考依據。此外，本計畫將蒐集國內外電解電堆中 Shunt Currents 相關研究文獻，建立電堆分流電流之初步數值分析模型，評估電堆內部歧管、流道及操作條件對分流電流形成之影響，作為後續電堆設計與模型發展之基礎。

本計畫主要協助工業技術研究院針對 AEMEC 進行多耦合場分析，並且評估流道對於電池性能與流場的影響，相關預期執行目標如下：

1. 依據工研院提供之 50 kW 級 AEMEC 電解電堆幾何尺寸、歧管配置、流道結構及操作條件，建立三維熱流場分析模型。
2. 分析電堆內部各單電池之流量分布、壓力損失、速度場及溫度分布，評估流量不均、壓降變化及局部熱集中等現象對電堆運轉之影響。
3. 依據工研院提供之操作條件與結構尺寸變動案例，進行多組數值分析，評估不同參數變化對流量均勻性、壓降特性及熱流分布之影響，並提供改善趨勢之預判結果。
4. 蒐集 AEMEC 及相關水電解電堆 Shunt Currents 之國內外文獻，整理其形成機制、影響因素及分析方法，建立研究基礎。
5. 建立 AEMEC 電解電堆 Shunt Currents 之初步數值分析模型，結合文獻案例進行模型初步驗證，分析歧管結構及操作條件對分流電流分布之影響，作為後續完整電堆電化學模型與設計優化之基礎。



圖一、工業技術研究院之 AEMEC 流場結構示意圖



圖二、以數值法分析 Shunt Currents 對於產氫能力的影響

二、實施方法

以CFD法建立AEMEC多物理場耦合模型

本計畫採用 CFD 法建立 AEMEC 單元電池之多重耦合分析模型，並且針對電解流場內部之相對濕度的方式進行評估，並且結合過去本團隊所建立之 AEMEC 電化學分析模型進行整合，相關計算過程將參考文獻：

質量守恆

本計畫執行初期，需要針對流體流量的質量守恆進行計算，相關公式如下所示：

$$\nabla(\varepsilon \rho \mathbf{u}) = 0, \mathbf{u} = [U, V, W]^T \quad (1)$$

其中，其中 ε 是每個區域的孔隙率，對於雙極板為 0，對於流道為 1。

動量方程式

假設電池內部氣體的熱性質是恆定的，流動區域的氣體不可壓縮、穩定且無黏性耗散，則動量方程可以表示為

$$\nabla(\varepsilon \rho \mathbf{u}) = -\varepsilon \nabla P + \nabla(\varepsilon \mu \nabla \mathbf{u}) + S_p \quad (2)$$

上式 S_p 是動量方程式的源項，等式左邊的項，並且與對流動量通量有關。等式右邊的兩項分別與壓力和黏度的動量通量有關。第三項是源項，由於陽極和陰極通道的高磁導率，該項為零。對於催化劑層和擴散層，考慮多孔介質和低速度，Darcy law 寫成如下

$$S_p = -\frac{\mu}{K_p} \varepsilon^2 \mathbf{u} \quad (3)$$

其中 K_p 是多孔介質的滲透率。

能量方程式

$$\nabla(\varepsilon \rho C_p \mathbf{u} T) = \nabla(k_{eff} \nabla T) + S_h \quad (4)$$

上式中， S_h 為能量方程式的源項，而該源項考慮由歐姆電阻、電化學反應的不可逆性和反應熱引起的歐姆熱，如下所示

$$S_h = R_{ohm} I^2 + R_{a,c} h_{act} + h_{reaction} \quad (5)$$

上式方程式中，第一項是由於電流的歐姆電阻以及離子穿過膜層、催化劑層和氣體擴散層而產生的歐姆熱。第二項與反應的不可逆性有關，第三項是電化學反應產生的熱。第二項和第三項僅在催化劑層中考慮。

電化學模型

氫氣在陽極中發生氧化反應，並且釋放電子並產生氫質子，氫質子穿過質子交換膜到陰極，氫質子在陰極發生還原反應，得到電子並產生水。由於此電化學反應可在燃料電池中自發進行，因此不需外部施加電壓即可進行發電。AEMEC之輸出電壓 V 可視為由四個電壓項所構成，分別反映理想可逆電壓與實際運轉過程中所產生之各類電壓損失。如以下公式

$$V = E_{OCV} + \eta_{act} + \eta_{ohm} + \eta_{diff} \quad (6)$$

其中 E_{OCV} 是開路電壓， η_{act} 是活化過電位， η_{ohm} 是歐姆過電位， η_{diff} 是擴散過電位。

- (1) E_{OCV} 是開路電壓由 Nernst 方程式計算，右式第一項是標準電極電位，是標準狀態及平衡態時的電位。第二項是反應物活性度與開路電壓關係式，對於理想氣體，活性度可以用氣體分壓與標準壓力之比表示。

$$E_{OCV} = \frac{-\Delta G_0}{2F} + \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{P_{H_2} P_{O_2}^{0.5}}{P_{H_2O}}\right) \quad (7)$$

其中 G 是吉布斯能， F 是法拉第常數， R 是通用理想氣體常數， P_i 是物質 i 的分壓。

- (2) η_{act} 是活化過電位由 Butler-Volmer 方程式定義活化過電位跟電流密度的關係，在此方程式中可以將淨電流密度分解成兩個方向相反的還原電流密度跟氧化電流密度，活化過電位會改變還原反應跟氧化反應所需的能階大小，以此得到淨電流密度。

$$\eta_{act} = \frac{RT}{\alpha_a F} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{i}{2i_{0,a}}\right) + \frac{RT}{\alpha_c F} \operatorname{arcsinh}\left(\frac{i}{2i_{0,c}}\right) \quad (8)$$

其中 i 是電流密度， i_0 是交換電流密度， α 是電荷轉移係數，下標 a 、 c 分別代表陽極極和陰極。

- (3) η_{ohm} 是歐姆過電位，電解電池組件所造成的損失，主要被分為對於電子流或離子流的阻力，其數值由歐姆定律計算。

$$\eta_{ohm} = IR_{tot} = I(R_E + R_I) \quad (9)$$

其中 R_E 代表電子流的電阻、 R_I 代表離子流的電阻。

- (4) η_{diff} 是擴散過電位，是由於濃度分佈所造成的電壓損失。

$$\eta_{diff} = \frac{RT}{4F} \ln \frac{C_{O_2,mem}}{C_{O_2,mem,0}} + \frac{RT}{2F} \ln \frac{C_{H_2,mem}}{C_{H_2,mem,0}} \quad (10)$$

其中 $C_{i,mem}$ 是 i 物質在薄膜與電極介面上的濃度， $C_{i,mem,0}$ 是物質 i 在薄膜與電極介面上的參考濃度。

三、預期成果

(一)預期完成之工作項目：

1. 完成 50 kW 級 AEMEC 電解電堆熱流場分析模型建立。
2. 完成不同操作條件下之流量分布、壓降與熱分布分析。
3. 完成 AEMEC 電堆 Shunt Currents 數值計算模型建立與文獻資料蒐集。

(一)預期完成之具體成果：

1. 完成 50 kW 級 AEMEC 電解電堆熱流場分析模型建立，並依據工研院提供之電堆結構與操作條件完成三維數值建模。
2. 完成不同操作條件下之流量分布、壓降與熱分布分析，評估流場均勻性及局部熱集中等現象。
3. 完成 AEMEC 電堆 Shunt Currents 數值計算模型建立與文獻資料蒐集。
4. 根據 Shunt Currents 數值計算模型，提出後續電堆流場配置、熱管理與材料耐久性研究方向之建議。

三、計畫預期交付項目：

交付項目	交付時程	驗收方式及標準
期末報告 1 式 3 份	115 年 11 月 30 日	期末報告須配合工研院進行 AEMEC 之多重耦合場模型建立，並且根據院內提供之相關操作條件與電池材料，進行電池性能分析。報告之驗收規格如下： 1. 完成 50 kW 級 AEMEC 電解電堆熱流場分析模型建立。 2. 完成不同操作條件下之流量分布、壓降與熱分布分析。 3. 完成 AEMEC 電堆 Shunt Currents 數值計算模型建立與文獻資料蒐集。

四、預定進度及查核點

(一)預定甘梯圖（Gantt Chart）

月 份 工作項目	六 月	七 月	八 月	九 月	十 月	十一 月	十二 月	備 註
建立 AEMEC 之 3-D 多耦合場分析模型			1*					*1 完成模擬參數設定
完成不同操作條件下，AEMEC 電解內部熱流場分析				2*				*2 完成初始模擬結果數據，於 9/30 前繳交期中報告
完成 AEMEC 電堆 Shunt Currents 數值計算模型建立與文獻資料蒐集								
完成期末報告						3*		*3 完成數值模型建立，於 11/30 前繳交期末報告
預定進度(累計數)	20%	35%	50%	65%	80%	95%	100%	
說明：(1)工作項目請視計畫性質及需要自行訂定。預定進度以粗線標示其起迄月份，如因農業或其他受季節性限制之計畫必需配合一定之月份者，請在月次欄下註明實際月份，以利審查，工作項目需有查核點與查核點說明。 (2)預定進度百分比一欄係為配合追蹤考核作業所需，累計百分比請視工作性質就以下因素擇一估計訂定：1)工作天數、2)經費之分配、3)工作之比重、4)擬達成目標之具體數字。								

(二) 查核點說明

編號	查核點內容概述	預定完成時間
1	完成 50 kW 級 AEMEC 電解電堆熱流場分析模型建立。	115 年 08 月
2	完成不同操作條件下之流量分布、壓降與熱分布分析。	115 年 09 月
3	完成 AEMEC 電堆 Shunt Currents 數值計算模型建立與文獻資料蒐集，完成期末報告	115 年 11 月
4		