

شبیه‌سازی هم‌زمان لایه انتشار گاز و کانال هوا در پیل سوختی مبادله پروتون: بررسی در مقیاس حفره فلودینگ آب

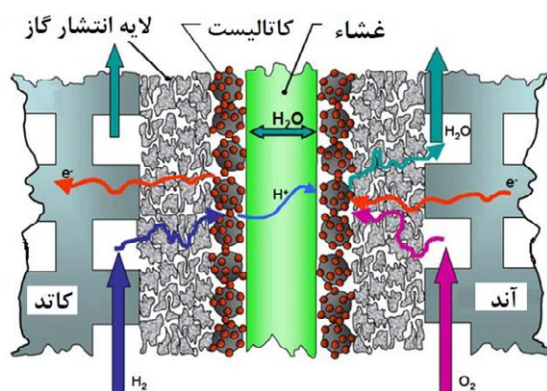
اسماعیل شاکری نژاد، محسن نظری*، محمدحسن کیهانی

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

خلاصه: در این مطالعه، از روش شبکه بولتزمن برای بررسی انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز و کانال گاز قسمت کاند پیل سوختی غشای مبادله پروتون استفاده شده است. در این مطالعه اثرات قابلیت خیسی لایه انتشار گاز بر روی فرایند حذف و توزیع آب مایع مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این به مطالعه رفتار دینامیکی و اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز در دو حالت پایا و غیر پایا پرداخته شده است. همچنین تعداد خوشه های مؤثر، عمل اتصال بین خوشه ها و زمان رسیدن به حالت پایا بررسی شده است. نتایج نشان می دهد که خیسی سطح بر روی اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز اثر می گذارد که در ناحیه $100 < \gamma < 160$ این اثر بیشترین مقدار است. همچنین زمان رسیدن به حالت پایا برای زاویه تماس 115° به میزان ۶ درصد از حالت 145° بیشتر می باشد. بنابراین هر چه زاویه تماس سطوح لایه انتشار گاز بیشتر شود، زمان رسیدن به توزیع اشباع آب در حالت پایا و همچنین زمان رسیدن آب به کانال گاز کاهش خواهد یافت، به همین دلیل سطوح جامد آب گریزتر، باعث بهبود مدیریت آب مایع در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون خواهد بود.

تاریخچه داوری:
دریافت: ۱۳۹۵/۰۵/۲۲
بازنگری: ۱۳۹۵/۰۹/۰۱
پذیرش: ۱۳۹۵/۰۹/۰۷
ارائه آنلاین: ۱۳۹۵/۰۹/۲۱

کلمات کلیدی:
آب مایع
لایه انتشار گاز
کانال هوا
قابلیت خیس شوندگی
اشباع آب مایع



شکل ۱: اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون [۵].

Fig. 1: The components of a PEMFC [5].

آند از میان الکترولیت به سمت کاتد پراکنده شده و در کاتد با اکسیژن واکنش داده و هیچ جریانی تولید نمی‌کند) که این به این معنی است که این نوع از پیل‌های سوختی مخصوصاً برای استفاده در وسایل نقلیه و کاربردهای حمل‌ونقلی مناسب هستند [۴].

اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون در شکل ۱ نشان داده

۱- مقدمه

پیل‌های سوختی وسایل تبدیل‌کننده مؤثر و کارآمدی هستند که به‌طور مستقیم انرژی شیمیایی نهفته در سوخت را توسط واکنش‌های الکتروشیمیایی به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کنند [۱]. به همین دلیل پیل‌های سوختی پاک بوده و اغلب بسیار کارآمدتر از موتورهای حرارتی مرسوم هستند. از بین فناوری‌های زیاد پیل سوختی، نوع غشای مبادله پروتون دارای بازده و چگالی انرژی بالاتری است [۲ و ۳]. این نوع پیل سوختی در دماهای پایین کار می‌کند که مزیت اصلی این ویژگی این است که پیل سوختی می‌تواند به‌سرعت شروع به کار کند. مزیت دیگر این نوع پیل سوختی ضخامت کم آن است و می‌تواند فشرده ساخته شود. همچنین این نوع پیل سوختی در معرض تقابل سوخت قرار نمی‌گیرد و در هر موقعیتی می‌تواند کار کند (عبور سوخت از طریق الکترولیت از آند به کاتد را تقابل سوخت گویند که عامل اصلی اختلال در عملکرد، کاهش راندمان و افزایش مصرف سوخت است. سوخت از

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: mnazari@shahroodut.ac.ir

شده است. پیل سوختی غشای مبادله پروتون از سه قسمت تشکیل شده است که شامل آند، کاتد و الکترولیت است. قسمت کاتد و آند خود به سه ناحیه تقسیم می‌شوند: کانال گاز^۱، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست.

مدیریت ضعیف آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون می‌تواند باعث ایجاد پدیده طغیان^۲ شود [۶]. اگر آب مایع اضافی در اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون (کانال گاز، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست) جمع شود، پدیده طغیان اتفاق می‌افتد [۷]؛ بنابراین وقتی پدیده طغیان اتفاق می‌افتد آب مایع حفره‌های موجود در لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست قسمت کاتد را پر کرده و اکسیژن نمی‌تواند به‌طور مؤثر به لایه کاتالیست انتقال یابد که در نهایت منجر به کمبود واکنش‌دهنده و کاهش بازده می‌شود [۶].

از طرف دیگر غشای خشک یا کم آب باعث افزایش مقاومت در برابر عبور پروتون می‌شود. این امر باعث افزایش تلفات اهمی در میان غشاء شده و بنابراین بازده پیل سوختی کاهش پیدا می‌کند [۷]. یکی از مهم‌ترین موضوعات مدیریت آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون، انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز است [۷]. این لایه نقش بحرانی و مهمی در مدیریت آب دارد که باید تعادل بین حذف آب مایع و غشای آبدار را حفظ نماید [۸]. لایه انتشار گاز از فیبرهای کربن ساخته می‌شود و دارای ساختار متخلخل است. بیشترین و متداول‌ترین مواد مورد استفاده برای لایه انتشار گاز، کاغذ کربن یا پارچه کربن است.

لایه انتشار گاز به‌طور طبیعی آبدوست است و برای سهولت در حذف آب مایع معمولاً با یک لایه‌ای از پلیمر غیر خیس‌کننده مانند پلی‌تترافلورواتیلن^۳ پوشانده می‌شود تا آب‌گریز شود [۷]. انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز به این صورت است که آب که غیر خیس‌کننده است، هوای خیس‌کننده را جابه‌جا می‌کند. در این جابه‌جایی نیروی موئینگی به دلیل دبی کم آب مایع و فضاهای خالی تنگ و باریک در لایه انتشار گاز حاکم است [۷]. عدد موئینگی نسبت نیروی ویسکوز به کشش سطحی است که با $Ca = \mu u / \sigma$ نمایش داده شده و به صورت $Ca = \mu u / \sigma$ تعریف می‌شود. در این رابطه μ ویسکوزیته دینامیکی آب مایع، u سرعت آب مایع و σ کشش سطحی بین آب و هوا است.

-
- 1 Gas Channel (GC)
 - 2 Flooding
 - 3 PolyTetraFluoroEthylene (PTFE)

در شرایط کاری پیل سوختی غشای مبادله پروتون عدد موئینگی از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} است. همچنین نسبت ویسکوزیته $(M = \mu_{water} / \mu_{air})$ تقریباً برابر ۱۷/۵ است. بر اساس دیاگرام فاز ی پیشنهاد شده توسط لنورمند^۴ [۹] و با توجه به مقادیر اعداد موئینگی و نسبت ویسکوزیته، رژیم حاکم بر حرکت سیال انگشتی موئینگی^۵ است. به‌طور کلی رابطه بین نیروی کشش سطحی، نیروی ویسکوز، نیروی اینرسی و نیروی گرانش توسط سه عدد بدون بعد توصیف می‌شود که این اعداد شامل عدد موئینگی، عدد وبر (نسبت نیروی اینرسی به نیروی کشش سطحی، $We = \rho u^2 d / \sigma$) و عدد باند (نسبت نیروی گرانش به کشش سطحی، $Bo = (\Delta \rho) d^2 g / \sigma$) می‌باشد. در این روابط μ ویسکوزیته دینامیکی آب مایع، u سرعت آب مایع، σ کشش سطحی بین آب و هوا، d مشخصه طول، $\Delta \rho$ اختلاف چگالی بین آب و هوا و g شتاب گرانش است. در کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون، آب مایع تولید شده در کاتالیست به درون لایه انتشار گاز نفوذ کرده سپس وارد کانال گاز می‌شود [۷]. در شرایط کاری پیل سوختی غشای مبادله پروتون، در لایه انتشار گاز، عدد موئینگی از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} ، عدد باند حدود 10^{-6} و عدد وبر از مرتبه 10^{-10} است [۱۰]. این اعداد نشان‌دهنده حاکم بودن اثر نیروی کشش سطحی در مقایسه با بقیه نیروها بر روی رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز است. در لایه انتشار گاز نیروی کشش سطحی یک نقش حاکم و تعیین‌کننده بر روی رفتار آب مایع را دارد و بقیه نیروها شامل نیروی ویسکوز، نیروی گرانش و نیروی اینرسی قابل صرف‌نظر کردن هستند [۱۰]. پس اثرات نسبت ویسکوزیته و نسبت چگالی بر روی انتقال دو فاز در لایه انتشار گاز می‌توانند با اطمینان صرف‌نظر شوند [۱۱].

تا به حال مطالعات زیادی با روش مدل‌سازی عددی ماکروسکوپی انجام شده است. یکی از اشکالات این روش این است که نمی‌تواند اثر ساختار واقعی و مشخصات غیر همگن مربوط به لایه انتشار گاز را مدل کند [۱۲]. علاوه بر این برای استفاده از مدل‌های ماکروسکوپی نیاز به استفاده از روابط تجربی زیادی وجود دارد که دقت برخی از این روابط قابل تردید و سؤال‌برانگیز است. همچنین این روش‌ها در برخی مواقع نتایج غیرمعقول [۱۳] و در برخی مواقع نتایج با اختلاف زیادی را به ما می‌دهند [۱۴]. همچنین فرض همگن بودن انتقال آب در لایه انتشار گاز، که در مدل‌های ماکروسکوپی مورد استفاده قرار می‌گیرد

4 Lenormand
5 Capillary fingering

در مقایسه با روش‌های رایج برای جریان چند فازی این است که مرز مشترک بین دو فاز را دنبال نمی‌کند و حتی مرزهای تیز بین دو فاز را به‌طور خودکار نگه داشته و نمایش می‌دهد [۲۰].

ملایه‌منش و اکبری رفتار دینامیکی قطره آب مایع در حین حذف از لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون را مورد بررسی قرار دادند. مطالعه آن‌ها به صورت دوبعدی و به روش شبکه بولتزن انجام شده است [۱]. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که اگر قطره اولیه به لایه متخلخل میکرو چسبیده باشد و بخواهد از میان لایه انتشار گاز آب‌دوست حرکت کند، به چند قطره کوچک‌تر تفکیک شده و به‌شدت به فیبرهای کربن می‌چسبد. از طرف دیگر وقتی لایه انتشار گاز آب‌گریز باشد، حرکت قطره به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای آسان خواهد شد. رفتارهای دینامیکی آب مایع و توزیع آن در لایه‌های انتشار گاز و کانال گاز به صورت عددی توسط چن و همکاران^۱ در حالت‌های با مانع در کانال و بدون آن مورد بررسی قرار گرفته است [۶]. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که زمان مورد نیاز برای انتقال آب مایع از ورودی به کانال گاز در حالتی که مانع کانال گاز آب‌دوست باشد کمتر از حالتی است که مانع کانال نباشد یا مانع کانال آب‌گریز باشد. اثرات قابلیت خیسی سطح بر روی انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز توسط هاوو^۲ و چن مورد بررسی قرار گرفته است [۱۱]. شبیه‌سازی به روش شبکه بولتزن چند فازی و با استفاده از مدل انرژی آزاد صورت گرفته است. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که خیسی سطح نقش مهمی بر روی توزیع اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز (در حالتی که خیسی سطح در لایه انتشار گاز یکنواخت باشد) دارد. ماخرجی و همکاران^۳ به گسترش مدل‌سازی مزسکویی در ساختار میکرو پرداختند و اثرات ساختار حفره‌ها و قابلیت خیسی سطح را روی انتقال آب مایع در لایه کاتالیست و لایه انتشار گاز مورد بررسی قرار دادند [۱۰].

توزیع و انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز توسط چن و همکاران مورد بررسی قرار گرفته است [۷]. لایه انتشار گاز دارای ساختار متخلخل میکروسکوپی بوده و به روش تصادفی ساخته شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که فرایند انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز به صورت انگشتی مویبندی بوده و محل‌های عبور آب مایع

توسط مدل‌های آزمایشگاهی مورد تأیید قرار نمی‌گیرد [۱۵ و ۱۶]. روش شبکه بولتزن می‌تواند انتقال جریان و جرم را بر اساس ساختار واقعی لایه انتشار گاز شبیه‌سازی کند [۱۷]. در طول دو دهه اخیر روش شبکه بولتزن به صورت یک روش عددی قدرتمند برای تنوعی از پدیده‌های انتقال مورد استفاده قرار گرفته است [۱۷]. همچنین در سال‌های اخیر این روش به دلیل پایداری عددی عالی و تطبیق‌پذیری (تنوع‌پذیری برای مسائل مختلف) ساختاری، ابزاری قوی برای شبیه‌سازی جریان سیال مخصوصاً در هندسه‌های پیچیده بوده است [۱۸].

برخلاف روش‌های مرسوم دینامیک سیالات محاسباتی که فرم‌های گسسته شده معادلات بقای جرم، مومنتوم و انرژی را برحسب کمیت‌های ماکروسکوپی مانند سرعت و چگالی حل می‌کنند، روش شبکه بولتزن ذرات سیال را روی یک شبکه مزسکویی، بر اساس معادلات بولتزن و با استفاده از تعداد محدودی سرعت در یک شبکه منظم شبیه‌سازی می‌کند [۱۲].

در این روش، جریان به صورت مجموعه‌ای از ذرات ساختگی در نظر گرفته شده که روی گره‌های ساختار شبکه قرار دارند و بین آن‌ها برخوردهایی بر اساس تابع توزیع سرعت صورت می‌گیرد [۱۹]. در این روش از مدل‌های سنتیک ساده شده‌ای برای شبیه‌سازی فیزیک‌های جریان مزسکویی و میکروسکوپی استفاده می‌شود [۱۸]. همچنین به دلیل ماهیت آن به‌خصوص در کاربردهای شامل مرزهای پیچیده، جریان‌های چند فاز، جریان‌های چند مؤلفه و جریان در محیط متخلخل مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۹]. همچنین به دلیل دقت در توصیفات فیزیکی فرایندهای جریان، دارای خواهان بسیاری است [۱۹].

این روش یک ابزار امیدبخش برای شبیه‌سازی جریان چند فاز در محیط متخلخل است که می‌تواند شبیه‌سازی‌های دینامیکی انتقال آب در لایه انتشار گاز با ساختار واقعی‌تر و امکان طراحی حفره‌ها به صورت دقیق‌تر را انجام دهد [۱۱]. توجه شود که ساختار متخلخل لایه انتشار گاز تأثیر زیادی بر روی انتقال جرم، جریان، توزیع اجزاء غلظت و چگالی جریان محلی دارد [۱۲]. همچنین توجه شود که در فرایند انتقال آب در لایه انتشار گاز در صورتی که فیبرهای کربن دارای خاصیت آب‌گریزی بالا باشند دینامیک‌های پیچیده‌ای بین دو فاز شکل می‌گیرد [۱۹]. یکی دیگر از مزیت‌های روش شبکه بولتزن

1 Chen et al

2 Hao

3 Mukherjee et al

فاز) k ام که با $f_{\alpha}^k(x, t)$ نمایش داده می‌شود، در نقطه x ، زمان t و جهت سرعت α توسط رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۳]:

$$f_{\alpha}^k(x + e_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}^k(x, t) - \frac{\delta t}{\tau_k} [f_{\alpha}^k(x, t) - f_{\alpha}^{k(eq)}(x, t)] \quad (1)$$

هر تابع توزیع نشان‌دهنده یک مؤلفه سیال است. در رابطه بالا τ_k زمان آسایش برای سیال k ام است که با ویسکوزیته سینماتیکی آن به صورت زیر مرتبط است [۲۳]:

$$\nu_k = c_s^2 (\tau_k - 0.5 \delta t) \quad (2)$$

در روابط بالا $f_{\alpha}^{k(eq)}(x, t)$ تابع توزیع تعادلی ذرات محلی، بردار سرعت ذرات $\alpha = 1, 2, \dots, 9$ و نشان‌دهنده جهت سرعت است، k نشان‌دهنده مؤلفه‌های مختلف سیال یا فاز ($k = 1, 2$) و δt مرحله زمانی است که یک در نظر گرفته شده است. توابع توزیع ذرات تعادلی برای هر مؤلفه یا فاز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f_{\alpha}^{k(eq)} = w_{\alpha} \rho_k \left[1 + \frac{e_{\alpha} u_k^{eq}}{c_s^2} + \frac{(e_{\alpha} u_k^{eq})^2}{2c_s^4} - \frac{u_k^{eq} u_k^{eq}}{2c_s^2} \right] \quad (3)$$

در رابطه بالا ρ_k چگالی مؤلفه k ام است که از رابطه $\rho_k = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^k$ محاسبه می‌شود. همچنین w_{α} ضریب وزنی است که برای مدل D_2Q_9 در جهت نهم برابر $\frac{4}{9}$ ، در جهت یک تا چهار برابر $\frac{1}{9}$ و در جهت پنج تا هشت برابر $\frac{1}{36}$ است. همچنین $c = c_s / \sqrt{3}$ سرعت صوت شبکه می‌باشد که $c = \delta x / \delta t$ نسبت فاصله شبکه (δx) به مرحله زمانی (δt) است که در اینجا هر دو یک در نظر گرفته شده‌اند. نیروی کل وارد شده بر سیال (k ام یا فاز) k با F_k نشان داده می‌شود و شامل نیروی بین مؤلفه‌های مختلف سیال (یا فاز)، $F_{c,k}$ ، و نیروی بین فاز سیال و فاز جامد، $F_{ads,k}$ ، است. با استفاده از نیروی کل می‌توان سرعت ماکروسکوپی (u_k^{eq}) را با استفاده از رابطه زیر تعیین کرد [۲۴]:

$$u_k^{eq} = u' + \frac{\tau_k F_k}{\rho_k} \quad (4)$$

در رابطه بالا u' سرعت متوسط همه مؤلفه‌های سیال در غیاب هر نیروی اضافی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

به صورت به هم پیوسته است که این موضوع نتایج تجربی گذشته را تأیید می‌کند. علاوه بر این، اثر خیسی سطح کانال گاز را مورد بررسی قرار دادند و به این نتیجه رسیدند که در کانال گاز آب‌دوست آب مایع کمتری در لایه انتشار گاز نسبت به کانال گاز آب‌گریز جمع می‌شود. رفتار انتقال جرم و جریان در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون توسط چن و همکاران مورد بررسی قرار گرفته است [۱۲]. لایه انتشار گاز مورد بررسی محیط متخلخل میکروسکوپی است که از روش تصادفی ساخته شده است. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که ساختار حفره‌ها در لایه انتشار گاز اثرات زیادی بر روی جریان سیال، انتقال جرم، توزیع چگالی محلی و رفتار آب مایع دارد. همچنین وقتی قابلیت خیسی سطوح بیشتر شود، اشباع آب مایع باقیمانده در محیط کاهش می‌یابد.

در مطالعه حاضر، رفتار دینامیکی انتقال آب مایع در لایه انتشار و کانال گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون به روش شبکه بولتزمن بررسی شده است. از آنجایی که یکی از پارامترهای اصلی و مؤثر بر پدیده انتقال آب و همچنین کنترل‌کننده پدیده طغیان، قابلیت خیسی سطوح لایه انتشار گاز است، به همین دلیل به بررسی اثر قابلیت خیسی بر روی حذف آب مایع پرداخته شده است. توجه شود که استفاده از موادی با آب‌گریزی بالا مثل پلی‌تترافلورواتیلن یک روش مرسوم برای جلوگیری از پدیده طغیان در لایه انتشار گاز است [۲۱]. از ویژگی‌های بررسی حاضر، میکروسکوپی بودن مطالعه، بررسی تشکیل خوشه‌های آب مایع و عمل اتصال بین آن‌ها، زمان رسیدن به حالت پایا، بررسی محلی و کلی اشباع آب مایع و بررسی رفتار خوشه‌های آب مایع می‌باشد. از جنبه‌های نوآوری این مطالعه بررسی در مقیاس حفره خوشه‌های آب مایع و دینامیک آن‌ها است. همچنین در این مطالعه برای اولین بار به بررسی هم‌زمان لایه انتشار گاز و کانال گاز در مقیاس حفره و با استفاده از روش شبکه بولتزمن پرداخته شده است.

۲- روش شبکه بولتزمن دوفازی

در این قسمت مدل شان و جن [۲۲] برای یک محیط دوفازی، در یک مختصات دوبعدی و برای حالت D_2Q_9 ارائه شده است که D_2 نشان‌دهنده مختصات دوبعدی و Q_9 نشان‌دهنده نه جهت سرعت در هر نقطه است. تابع توزیع ذرات (یا تابع توزیع چگالی) برای سیال (یا

همچنین فشار کل سیال می‌تواند از رابطه زیر محاسبه شود:

$$P(x) = \frac{\rho_1(x) + \rho_2(x)}{3} + G_c \frac{\rho_1(x)\rho_2(x)}{3} \quad (9)$$

$$u' = \frac{\sum_k (\sum_\alpha \frac{f_\alpha^k e_\alpha}{\tau_k}) \sum_k \frac{\rho_k u_k}{\tau_k}}{\sum_k \frac{\rho_k}{\tau_k} \sum_k \frac{\rho_k}{\tau_k}} \quad (5)$$

۳- هندسه مورد بررسی

در این مطالعه اثرات قابلیت خیزی سطوح لایه انتشار گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون بر روی رفتار دینامیکی آب مایع مورد بررسی قرار گرفته است. یک سطح مقطع از لایه انتشار گاز سه‌بعدی برای بررسی دوبعدی انتقال آب مایع به صورت شکل ۲ در نظر گرفته شده است.

در این شکل قسمت (الف) نمای کلی محیط مورد بررسی و قسمت (ب) نمای بزرگ‌نمایی شده آن را نشان می‌دهد. نواحی آبی‌رنگ نشان‌دهنده فضای خالی و نواحی قرمز رنگ نشان‌دهنده سطوح جامد است. لایه انتشار گاز مورد بررسی بر اساس روش تولید تصادفی ساخته شده است. در این روش از یک تابع توزیع فاز دوتایی صفر و یک استفاده شده است که صفر نشان‌دهنده فاز سیال و یک نشان‌دهنده فاز جامد است. این روش باعث می‌شود که فیبرهای کربن به صورت تصادفی در محیط قرار گیرند. ضخامت لایه انتشار گاز $400 \mu m$ [۲۶] و یک کانال گاز به ارتفاع $300 \mu m$ به قسمت بالای لایه انتشار گاز اضافه شده است. ناحیه محاسباتی مستطیلی به ابعاد $2000 \Delta x \times 700 \Delta x$ است. در اینجا طول شبکه (گام شبکه)

توجه شود که در رابطه (۴)، $F_k = F_{c,k} + F_{ads,k}$ نیروی کل وارد بر مؤلفه k ام سیال است. هر گره در ناحیه محاسباتی توسط هر دو مؤلفه سیال اشغال می‌شود که یک مؤلفه، مؤلفه اصلی و حاکم و دیگری دارای مقدار جزئی و ناچیز است. مؤلفه کوچک‌تر یا جزئی می‌تواند به صورت یک مؤلفه حل شده در مؤلفه اصلی یا حاکم در نظر گرفته شود [۲۵]. با توجه به روش مورد استفاده در این بررسی، چگالی کلی سیال ($\rho = \sum_k \rho_k$) در ناحیه مورد بررسی تقریباً یکنواخت است، چون چگالی‌های دو سیال مکمل همدیگرند (چگالی‌های اولیه ثابت‌اند) [۲۵]. نیروی وارد شده بر روی مؤلفه k ام به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۳]:

$$F_{c,k}(x,t) = -\rho_k(x,t) G_c \sum_\alpha w_\alpha \rho_k(x + e_\alpha \Delta t, t) e_\alpha \quad (6)$$

در این رابطه مؤلفه‌های مختلف سیال با k و \bar{k} نمایش داده شده‌اند [۲۳]. همچنین عدد ثابتی است که قدرت اثر متقابل دو سیال را کنترل می‌کند. در اثر حضور فاز جامد و سیال در کنار هم، بین فاز سیال و جامد نیروی اثر متقابل ایجاد می‌شود که از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۳]:

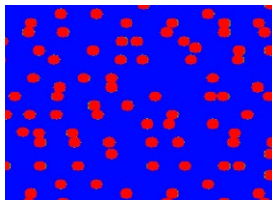
$$F_{ads,k}(x,t) = -\rho_k(x,t) G_{ads,k} \sum_\alpha w_\alpha S(x + e_\alpha \Delta t, t) e_\alpha \quad (7)$$

که S یک تابع فاز دوتایی است که می‌تواند مقادیر صفر و یک داشته باشد. مقدار صفر نشان‌دهنده فضای خالی و مقدار یک نشان‌دهنده ماده جامد است. همچنین $G_{ads,k}$ یک عدد ثابت است که قدرت اثر متقابل بین سیال و جامد را کنترل می‌کند. این عدد می‌تواند مثبت یا منفی باشد که مقدار مثبت نشان‌دهنده سیال غیر خیس‌کننده و مقدار منفی نشان‌دهنده سیال خیس‌کننده است. کمیت‌های ماکروسکوپی جریان مانند چگالی و سرعت هر مؤلفه سیال از روابط زیر به دست می‌آید:

$$\rho_k = \sum_\alpha f_\alpha^k, u_k = \frac{1}{\rho_k} \sum_\alpha f_\alpha^k e_\alpha \quad (8)$$



(الف)



(ب)

شکل ۲: ناحیه محاسباتی مورد بررسی: قسمت (الف) نمای کلی محیط مورد بررسی و قسمت (ب) نمای بزرگ‌نمایی شده آن را نشان می‌دهد.

Fig. 2: Schematic diagram of the computational domain. (a) a cross-sectional view of the 3D GDL (b) a magnified part of the micromodel.

اگر اختلاف چگالی یا اختلاف ویسکوزیته بین دو فاز خیلی زیاد باشد، شبیه‌سازی عددی ممکن است ناپایدار شود [۲۸]. بنابراین، یکسان بودن چگالی دو فاز و همچنین ویسکوزیته آن‌ها باعث جلوگیری از ناپایداری‌های عددی می‌شود.

در این بررسی زمان آسایش برای هر دو فاز یک در نظر گرفته شده است. همچنین برای سادگی محاسبات، چگالی هر دو فاز نیز برابر mu/lu^3 در نظر گرفته شده است. توجه شود که فرض مقادیر دلخواه برای نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته در مطالعه حاضر، در شبیه‌سازی‌های دوفازی پیشین نیز انجام شده است [۳۱].

[۳۰، ۲۹، ۲۸، ۱۲، ۲۶، ۱۱، ۱۰، ۷، ۶، ۱]

در این قسمت برای تأیید درستی برنامه فرترن مورد استفاده، دو حالت صحت‌سنجی انجام شده است. این دو حالت شامل تعیین برخی پارامترهای فیزیکی موردنیاز در شبیه‌سازی جریان دوفازی است. این دو پارامتر شامل قدرت اثر متقابل سیال - سیال (G_c) و قدرت اثر متقابل سیال - جامد ($G_{ads,k}$) در مدل شان و چن است. برای این منظور دو آزمایش عددی انجام شده است که این دو آزمایش شامل آزمون قطره برای محاسبه G_c و آزمون زاویه تماس قطره ساکن برای ارزیابی G_{ads} می‌باشد.

۴- اعتبارسنجی

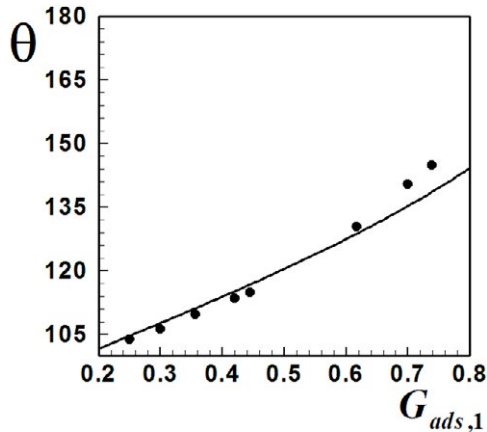
۴-۱- آزمون قطره

برای ارزیابی دقت برنامه عددی مورد استفاده یک قطره از سیال، درون سیال دیگر قرار داده شده. در حالت پایا، طبق رابطه لاپلاس، رابطه بین شعاع نهایی قطره و اختلاف فشار ایجاد شده به صورت $P_1 - P_2 = \sigma/R$ است. در این رابطه، σ کشش سطحی، P_1 فشار داخل و P_2 فشار خارج قطره است [۲۴]. همچنین شعاع قطره در حالت نهایی است که جایی در نظر گرفته می‌شود که چگالی سیال یک و دو با هم برابر باشند. ناحیه محاسباتی 1.01×1.01 است. چگالی‌های اولیه درون قطره به صورت $\rho_1 = 1$ و $\rho_2 = 0$ و خارج آن به صورت $\rho_1 = 0$ و $\rho_2 = 1$ است که چگالی گاز و چگالی مایع است. شرط مرزی تقارن بر روی هر چهار مرز اعمال شده است. همچنین زمان آسایش به صورت $\tau_1 = \tau_2 = 1$ و قدرت اثر متقابل سیال - سیال (G_c) برابر ۴ در نظر گرفته شده‌اند. تغییرات اختلاف فشار بین مرز مشترک دو سیال برحسب R/I در شکل ۳ رسم شده است.

که همان Δx است برابر یک میکرومتر در نظر گرفته شده است. بنابراین شبکه مورد استفاده در این بررسی 701×2001 است. لایه انتشار گاز با قرار دادن ذرات جامد دایره‌ای شکل به‌طور تصادفی در ناحیه‌ای به ضخامت $\Delta x = 400$ ایجاد شده است. ذرات جامد دایره‌ای دارای قطر $lu = 10$ [۲۶] در واحد شبکه بولتزمان بوده و ضریب تخلخل لایه انتشار گاز ایجاد شده برابر $0.88/26$ است. توجه شود که در روش شبکه بولتزمان واحدهای طول، زمان و جرم با ts ، lu و mu نشان داده می‌شود. زاویه تماس سطوح جامد در لایه انتشار گاز برابر 115° یا 145° [۱۱] و زاویه تماس سطوح کانال برابر 110° در نظر گرفته شده است. در مرز پایین ناحیه محاسباتی آب مایع با سرعت $lu/ts = 10^{-5} \times 7/877$ در واحد شبکه بولتزمان به درون لایه انتشار گاز تزریق می‌شود. عدد رینولدز در لایه انتشار گاز برابر 0.04725 در واحد شبکه بولتزمان است. این مقدار تا حدی بزرگ‌تر از عدد رینولدز واقعی (از مرتبه 10^{-5}) در شرایط کارکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون است. ولی این مقدار هنوز به اندازه کافی کوچک است که بتوان از اثرات ویسکوز صرف‌نظر کرد. طرح زو و هی [۲۷] برای اعمال شرط مرزی در ورودی استفاده شده است. شرایط شبیه‌سازی با توجه به اعداد بی‌بعد مربوط به انتقال آب مایع در پیل سوختی غشای مبادله پروتون انتخاب شده‌اند. عدد رینولدز در مقیاس میکرو به صورت $Re = ud/v$ تعریف می‌شود که u سرعت، d قطر ذرات و v ویسکوزیته سینماتیکی است. همچنین مقدار عدد موینگی در شبیه‌سازی حاضر برابر 6×10^{-5} است که برای اطمینان از حاکم بودن نیروی موینگی در انتقال آب مایع به اندازه کافی کوچک است. در این بررسی نیروی گرانش در نظر گرفته نشده است. برای مرزهای سمت چپ و راست از شرط مرزی تقارن استفاده شده است (برای کاهش ناحیه محاسباتی). در مرز بالا (دیوار بالای کانال گاز) و روی سطوح جامد از شرط مرزی عدم لغزش استفاده شده است. اعمال شرط مرزی عدم لغزش با استفاده از برگشت به عقب انجام شده است. شرط برگشت به عقب یعنی اینکه توابع توزیع ورودی با توابع توزیع خروجی (در جهت مخالف) برابر گرفته شود. بر اساس توضیحات بیان شده در بخش مقدمه، چگالی آب و هوا و همچنین ویسکوزیته آن‌ها به‌طور دلخواه و برابر در نظر گرفته شده‌اند. روش مورد استفاده در این بررسی، روش شبکه بولتزمان و مدل شان و چن^۲ است. در این روش

1 Zou and He

2 Shan-and-Chen

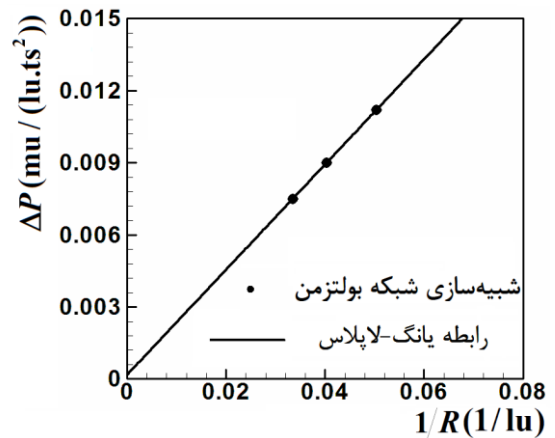


شکل ۴: زاویه تماس به صورت تابعی از قدرت اثر متقابل سیال - جامد
Fig. 4: Contact angle as a function for fluid/solid interaction parameter.

بولتزمین چند فازي و چند مؤلفه‌ای شان و چن رابطه‌ای ارائه دادند. در شکل ۴ زاویه‌های تماس به دست آمده از شبیه‌سازی عددی (نقاط دایره‌ای) با نتایج به دست آمده از رابطه ارائه شده (خط رسم شده) در مرجع [۲۳] با یکدیگر مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمین تطابق بسیار خوبی با این رابطه دارند. پس روش شبکه بولتزمین می‌تواند به‌درستی انتقال دوفازی آب مایع در لایه انتشار گاز را شبیه‌سازی کند. توجه شود که با تغییر $G_{ads,1}$ می‌توان زاویه‌های تماس مختلفی را ایجاد کرد.

حرکت سیال را می‌توان بر اساس نسبت بین مسافت آزاد میانگین مولکولی سیال و مقیاس طول فیزیکی در مقیاس‌های مختلف بیان کرد. مسافت آزاد میانگین طولی است که یک مولکول قبل از مرحله برخورد با مولکول‌های دیگر طی می‌کند. همچنین مقیاس طول فیزیکی، مشخصه اندازه سامانه است. این نسبت به‌عنوان عدد نادسن در نظریه جنبشی شناخته شده است [۳۳]. اگر عدد نادسن به‌اندازه کافی کوچک باشد، سیال می‌تواند به صورت پیوسته فرض شود که در آن حرکت سیال را می‌توان با استفاده از متغیرهای ماکروسکوپی مانند سرعت و چگالی توصیف کرد. اگر عدد نادسن بزرگ باشد، رفتار سیال به صورت یک محیط پیوسته نیست و از روش‌های جایگزینی باید برای شبیه‌سازی حرکت آن استفاده کرد.

از آنجایی که عدد نادسن برای هوا در لایه متخلخل میکرو در شرایط کارکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون از مرتبه ۰/۰۱ است، هوا می‌تواند به صورت یک محیط پیوسته در نظر گرفته شود. بنابراین اعمال شرط مرزی عدم لغزش با استفاده از برگشت به عقب توجیه می‌شود [۳۴].



شکل ۳: رابطه بین ΔP و $R/1$.

Fig. 3: Relationship between ΔP and $1/R$.

نقاط جامد نشان داده شده بر روی شکل، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی عددی و خط رسم شده از بین این نتایج، مربوط به قانون لاپلاس است. شیب خط رسم شده در شکل ۳ برابر کشش سطحی است که مقدار $0/218849 \text{ mu/ts}^2$ در واحد شبکه بولتزمین است. تطابق خوب بین نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمین و معادله لاپلاس درستی برنامه مورد استفاده را تأیید می‌کند.

۲-۴- آزمون قطره ساکن

آزمون زاویه تماس قطره ساکن مربوط به پارامتر قدرت اثر متقابل سیال - جامد است که در معادله (۷) توضیح داده شد. برای این منظور یک نیم قطره از مایع در غیاب هرگونه نیروی حجمی در مرکز هندسی دیوار پایین دیگر قرار داده شده. شبکه مورد استفاده 101×101 است. شرط مرزی تقارن بر روی مرز چپ و راست و شرط مرزی عدم لغزش بر روی مرز بالا و پایین اعمال شده است. همچنین قدرت اثر متقابل سیال - جامد به صورت $G_{ads,1} = -G_{ads,2}$ در نظر گرفته شده است. وقتی قطره ساکن در مرز پایین به حالت پایا رسید با اندازه‌گیری شعاع قطره R ، ارتفاع آن a_0 و طول خیس‌کنندگی آن b_0 می‌توان با استفاده از رابطه زیر زاویه تماس آن را تعیین کرد [۳۲]:

$$\tan(\theta) = \frac{b_0}{2(R - a_0)}, R = \frac{a_0}{2} + \frac{b_0^2}{8a_0} \quad (10)$$

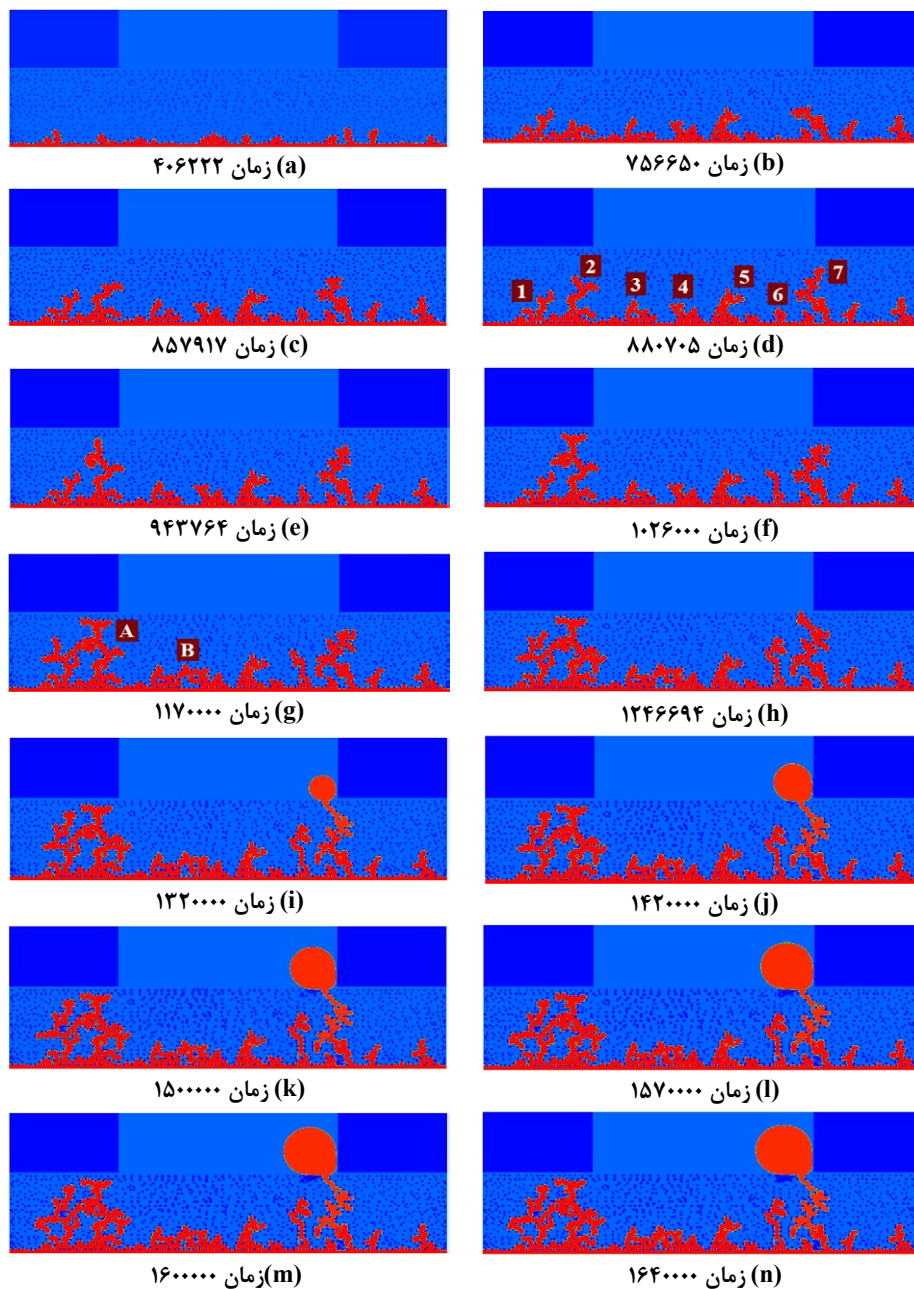
رابطه بین زاویه تماس اندازه‌گیری شده و $G_{ads,1}$ در شکل ۴ نشان داده شده است.

هانگ و همکاران [۲۳] برای محاسبه زاویه تماس در مدل شبکه

۵- نتایج

مؤثر نامیده می‌شوند) گسترش می‌یابند. این خوشه‌ها به ترتیب با اندیس‌های ۱ تا ۷ در شکل ۵ (د) نام‌گذاری شده‌اند. علاوه بر این خوشه‌ها، چهار خوشه آب مایع دیگر در لایه انتشار گاز وجود دارد که رشد آن‌ها در همان مراحل اولیه متوقف شده است به همین دلیل از آن‌ها صرف‌نظر شده است. همان‌طوری که از شکل ۵ (ز) مشخص است خوشه‌های آب مایع ۱ و ۲ در لایه انتشار گاز به هم متصل شده و با هم خوشه جدیدی

شکل‌های ۵ و ۶ توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز و در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. شکل ۵ مربوط به زاویه تماس 145° و شکل ۶ مربوط به زاویه تماس 115° است. با توجه به شکل ۵ (الف) خوشه‌های آب مایع بسیار کوچکی به دلیل هجوم آب مایع از لایه کاتالیست در لایه انتشار گاز شکل گرفته‌اند. این خوشه‌ها به هفت خوشه بزرگ (که خوشه‌های



شکل ۵: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس 145° .

Fig. 5: Evolution of liquid water clusters in a GDL with a contact angle of 145° .

خوشه‌های ۵، ۶ و ۷ متوقف شده است (به ترتیب شکل‌های ۵ (b)، ۵ (h) و ۵ (i)).

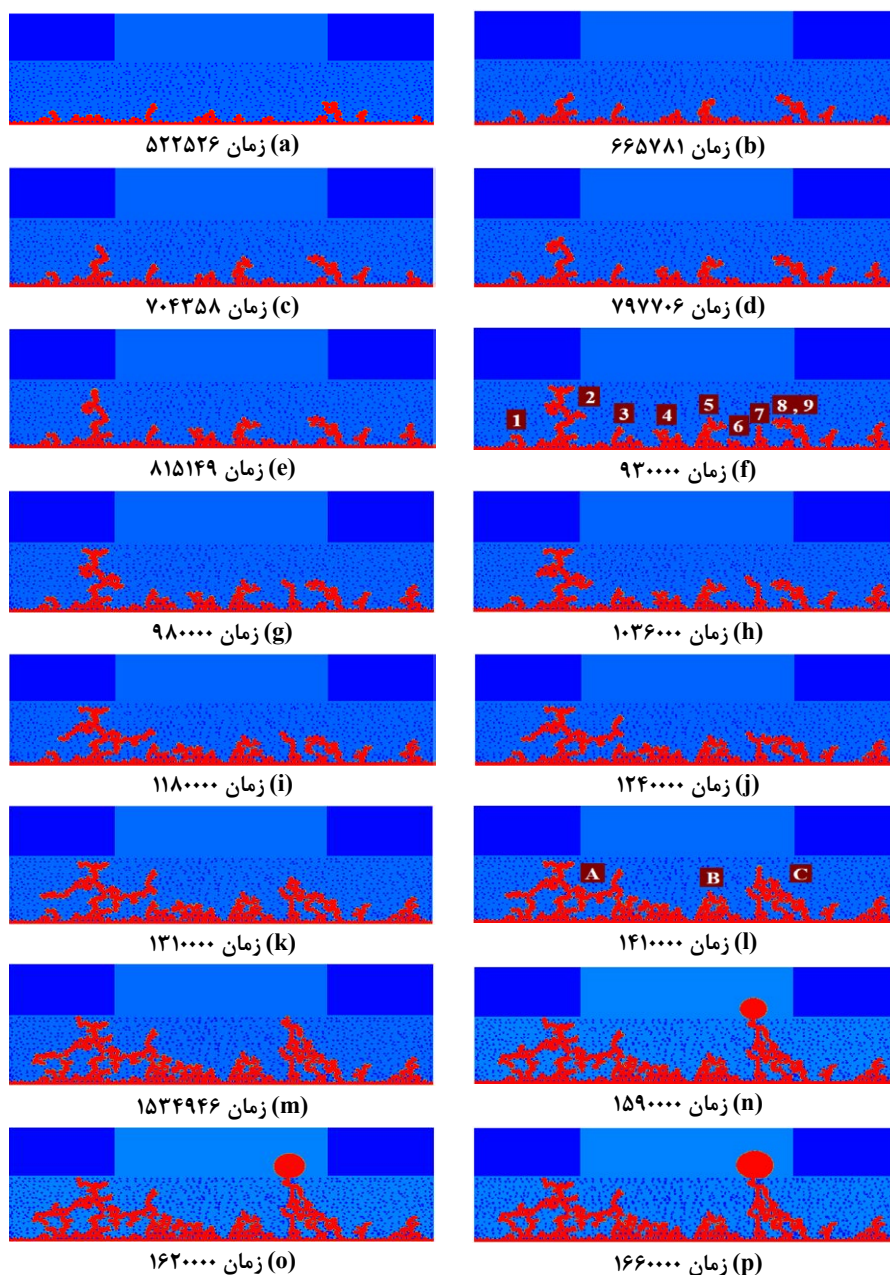
ب- اتصال برخی از خوشه‌ها

خوشه‌های ۳ و ۴ در مرحله زمانی ۱۱۷۰۰۰۰ به هم متصل شده و خوشه جدید B را ایجاد می‌کنند که در این زمان رشد خوشه جدید ایجاد شده (B) متوقف می‌شود (شکل ۵ (g)).

تشکیل می‌دهند که این خوشه جدید با A نمایش داده شده است. همچنین خوشه ۳ و ۴ به هم متصل شده و خوشه B را تشکیل می‌دهند (شکل ۵ (z)). با توجه به شکل ۵ نکات زیر را می‌توان استخراج کرد (زمان‌های ارائه شده در واحد شبکه بولتزمن است):

الف- توقف رشد برخی از خوشه‌ها

در مرحله‌های زمانی ۷۵۶۶۵۰، ۱۲۴۶۶۹۴ و ۱۳۲۰۰۰۰ رشد



شکل ۶: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس 115° .

Fig. 6: Evolution of liquid water clusters in a GDL with a contact angle of 115° .

بزرگ‌تر خواهد بود. همچنین سیال جابه‌جا شده (هوا) بین حلقه‌های ایجاد شده در اثر رشد خوشه‌ها به دام می‌افتد (شکل ۵ (g)) به همین دلیل تشکیل حلقه یک پدیده مؤثری در افزایش کارایی پیل سوختی به حساب نمی‌آید. در بین ۷ خوشه مؤثر ایجاد شده دو بار عمل اتصال بین خوشه‌ها صورت گرفته که هیچ‌کدام از خوشه‌های جدید ایجاد شده نتوانسته‌اند خود را به کانال گاز برسانند.

برای زاویه تماس 115° آب مایع به صورت ۹ خوشه بزرگ گسترش پیدا می‌کند که این خوشه‌ها با شماره‌های ۱ تا ۹ در شکل ۶ (f) نمایش داده شده‌اند. همچنین دو خوشه آب مایع وجود دارد که به دلیل توقف رشد آن‌ها در مراحل زمانی اولیه در نظر گرفته نشده‌اند. همان‌طوری که در شکل ۶ (l) مشخص است، خوشه‌های آب مایع ۱، ۲ و ۳ در لایه انتشار گاز به هم متصل شده و خوشه جدید A را تشکیل می‌دهند. علاوه بر این مطابق شکل ۶ (l) خوشه‌های ۵ و ۶ به هم متصل شده و خوشه B را تشکیل می‌دهند و خوشه‌های ۷، ۸ و ۹ به هم متصل شده و خوشه C را تشکیل می‌دهند. با توجه به شکل ۶ نکات زیر را می‌توان استخراج کرد (زمان‌های ارائه شده در واحد شبکه بولتزمان است):

الف- توقف رشد برخی از خوشه‌ها

در زمان‌های ۱۲۴۰۰۰۰، ۱۵۹۰۰۰۰ و ۱۱۸۰۰۰۰ به ترتیب رشد

ج- حرکت رو به عقب برخی از خوشه‌ها

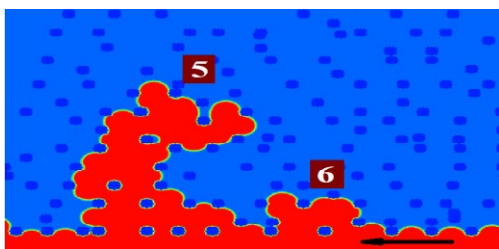
با مقایسه بین شکل‌های ۵ (f) و ۵ (g) مشخص است که رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده است در حالی که برخی شاخه‌های این خوشه در جهت عقب در حال پیشروی هستند. این خاصیت به دلیل شرایط انگشتی مویبندی است که رژیم حاکم در پیل سوختی غشای مبادله پروتون است.

د- رسیدن برخی از خوشه‌ها به کانال گاز

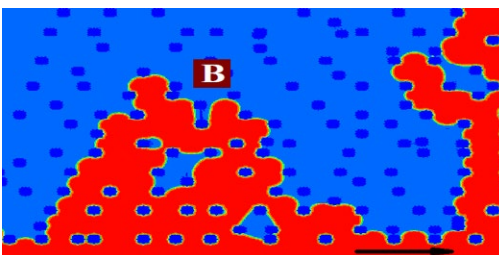
در مرحله زمانی ۱۱۷۰۰۰۰ رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده است. به علت توقف رشد خوشه B در همین زمان، آب مایع مسیر خوشه B را برای حرکت خود به سمت کانال انتخاب نکرده و از میان خوشه ۷ به حرکت خود ادامه می‌دهد. این موضوع باعث رشد مجدد خوشه ۷ به سمت کانال گاز شده و باعث می‌شود آب مایع از میان این خوشه خود را به کانال گاز برساند (این موضوع در شکل ۷ نشان داده شده است که جهت پیکان جهت حرکت سیال را نشان می‌دهد).

ه- تشکیل حلقه‌های بسته

خوشه‌های آب مایع متصل شده تشکیل حلقه می‌دهند. هر چه عمل اتصال بین خوشه‌ها دیرتر صورت گیرد، حلقه تشکیل شده



قبل از توقف



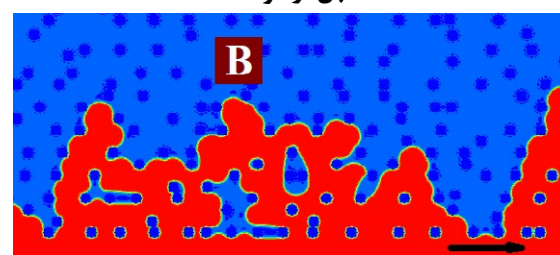
بعد از توقف

شکل ۸: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه تماس 115° .

Fig. 8: Dynamic behavior of liquid water before stopping cluster B and after of stopping cluster B in a GDL with a contact angle of 115° .



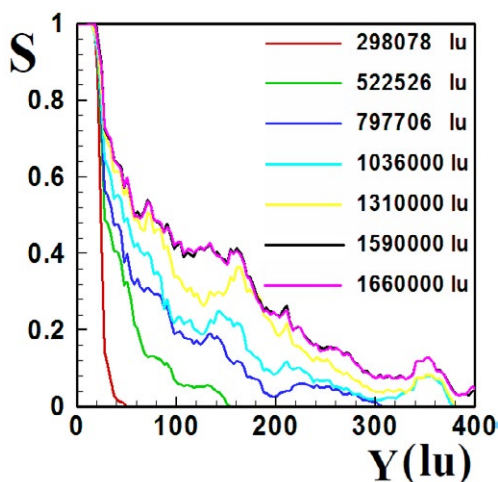
قبل از توقف



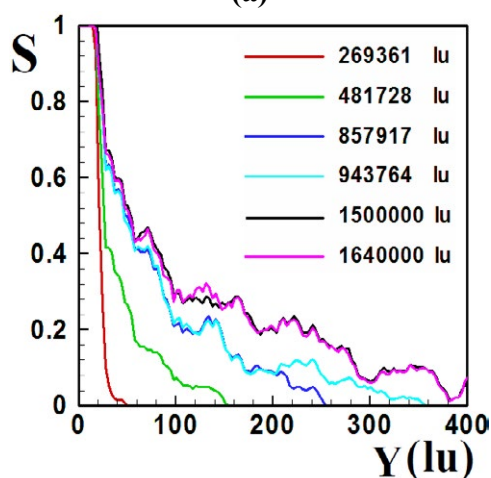
بعد از توقف

شکل ۷: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه تماس 145° .

Fig. 7: Dynamic behavior of liquid water before stopping cluster B and after of stopping cluster B in a GDL with a contact angle of 145° .



(a)



(b)

شکل ۹: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (a) زاویه تماس 115° (b) زاویه تماس 145° .

Fig. 9: The local liquid water saturation versus time (a) contact angle of 115° (b) contact angle of 145° .

توجه شود که برای رسم نمودار ۹ کافی است در زمان موردنظر در هر ارتفاعی از لایه انتشار گاز (Y) نسبت آب مایع به فضای خالی تعیین شود. با توجه به شکل ۹ توزیع اشباع آب مایع محلی در لایه انتشار گاز برای زاویه‌های 115° و 145° در زمان‌های ۱۵۹۰۰۰۰ و ۱۵۰۰۰۰۰ به حالت توسعه‌یافته خود می‌رسد. منظور از حالت توسعه‌یافته این است که خوشه‌های آب مایع به حالت پایایی خود رسیده و تغییرات اشباع آب مایع محلی در لایه انتشار گاز با گذشت زمان ناچیز خواهد بود.

شکل ۹ نشان می‌دهد که توزیع اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز تا زمانی که قطره‌های آب مایع در کانال گاز شکل بگیرند و مقدار اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز به حالت پایا برسد، به‌طور پیوسته

خوشه‌های A, B و ۴ متوقف شده است (به ترتیب شکل‌های ۶ (j), ۶ (n) و ۶ (i)).

ب- اتصال برخی از خوشه‌ها

خوشه‌های ۱، ۲ و ۳ در زمان ۱۴۱۰۰۰۰ (شکل ۶ (l))، خوشه‌های ۷، ۸ و ۹ در زمان ۱۲۴۰۰۰۰ (شکل ۶ (j)) و خوشه‌های ۵ و ۶ در زمان ۱۱۸۰۰۰۰ (شکل ۶ (i)) به هم متصل شده‌اند.

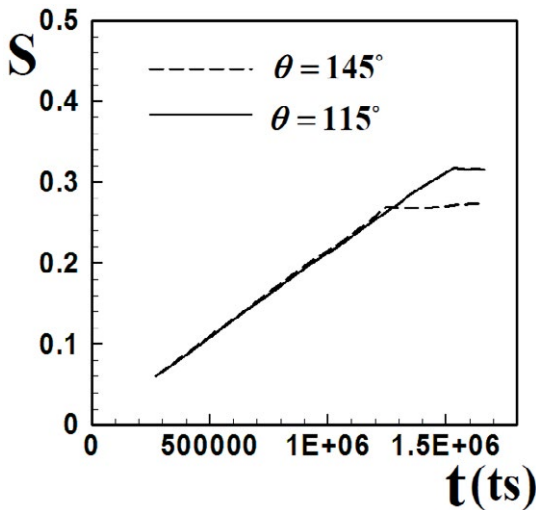
ج- رسیدن برخی از خوشه‌ها به کانال گاز

در زمان ۱۲۴۰۰۰۰ رشد خوشه B به سمت کانال گاز متوقف شده است و آب مایع مسیر خوشه B را برای حرکت به سمت کانال گاز انتخاب نمی‌کند؛ بنابراین آب مایع از میان خوشه C حرکت کرده و خود را کانال گاز می‌رساند (این موضوع در شکل ۸ نشان داده شده است که جهت پیکان نشان‌دهنده جهت حرکت سیال است).

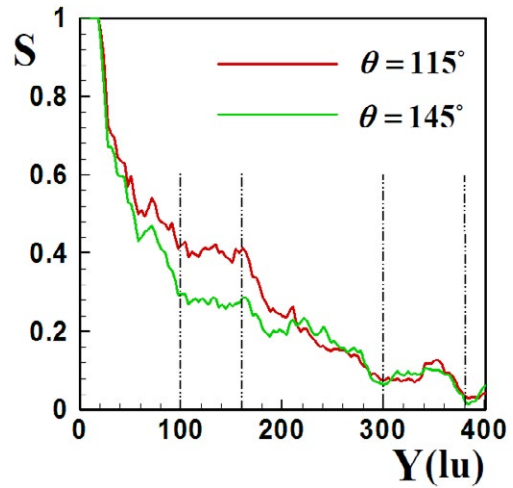
تعداد عمل اتصال بین خوشه‌ها در حالتی که زاویه تماس 115° است بیشتر از حالتی است که زاویه تماس 145° است. هیچ‌کدام از خوشه‌های آب مایع متصل شده به هم در حالتی که زاویه تماس 145° است نتوانسته‌اند خود را به کانال گاز برسانند ولی در حالتی که زاویه تماس 115° است خوشه آب مایع C توانسته است خود را به کانال گاز برساند. حجم سیال جابه‌جا شده (هوا) که به دلیل ایجاد حلقه‌ها به دام افتاده‌اند در حالتی که زاویه تماس 115° است بیشتر از حالتی است که زاویه تماس 145° است.

رفتار دینامیکی آب مایع در لایه انتشار گاز به‌طور شدیدی مربوط به فرایند نفوذ و هجوم ایجاد شده در اثر نیروی موینگی است. آب مایع ترجیح می‌دهد که برای هجوم خود گلوگاه‌های بزرگ‌تر را انتخاب نماید (یعنی جایی که کمترین فشار موینگی را برای حمله داشته باشد). در شکل ۹ تغییر توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز با نمودار اشباع آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته شده است.

اشباع آب مایع به صورت نسبت حجم آب مایع به حجم فضای خالی تعریف می‌شود که می‌تواند به صورت محلی یا کلی محاسبه شود. در حالت محلی اشباع آب مایع در Y‌های مختلف محاسبه شده و به صورت نمودار S-Y بیان می‌شود. در حالت کلی اشباع آب مایع در کل محیط محاسبه شده و به صورت نمودار S-t بیان می‌شود.



شکل ۱۱: اشباع کلی آب مایع برای زاویه‌های تماس 115° و 145° .
Fig. 11: The water liquid saturation versus for the contact angle of 115° and 145° .



شکل ۱۰: مقایسه اشباع محلی آب مایع برای زاویه‌های تماس 115° و 145° .
Fig. 10: The comparison local liquid water saturation in a GDL by a contact angle of 145° with contact angle of 115° .

حجمی آب مایع ورودی به لایه انتشار گاز بدست می‌آید. بر اساس معادله لاپلاس فشار موینگی (P_c) در جریان دوفازی آب - هوا در لایه انتشار گاز به صورت $P_c = P_{air} - P_{water} = 2\sigma \cos\theta/r$ بیان می‌شود [۳۴]. در این رابطه r شعاع حفره است. فشار موینگی به صورت اختلاف فشار در مرز مشترک بین دو فاز (هوا و آب مایع) تعریف می‌شود. با توجه به اینکه فشار نسبی فاز هوا در لایه انتشار گاز، که در آن نیروی موینگی حاکم است، تقریباً ثابت و صفر است، فشار نسبی آب مایع می‌تواند از رابطه $P_{water} = -2\sigma \cos\theta/r$ محاسبه شود [۳۴].

مقدار $\cos\theta$ برای زاویه‌های 115° و 145° به ترتیب برابر $-0/422$ و $-0/819$ است؛ بنابراین فشار بحرانی برای ورود آب مایع در لایه انتشار گاز در زاویه تماس 145° بیشتر از زاویه تماس 115° است. پس در حالتی که زاویه تماس 115° است، آب مایع بیشتری در لایه انتشار گاز نفوذ خواهد کرد.

وقتی خوشه آب مایع وارد کانال گاز می‌شود به دلیل اختلاف زیاد فشار موینگی بین لایه انتشار گاز و کانال گاز خوشه، آب مایع دچار چروکیدگی و انقباض^۱ می‌شود. این موضوع در شکل ۱۲ نشان داده شده است. در شکل ۱۲ قسمت (الف) مربوط به لحظه رسیدن آب مایع به کانال گاز (قبل از چروکیدگی و انقباض) و قسمت (ب) مربوط به ورود آب مایع به کانال گاز و رشد آن (بعد از چروکیدگی و انقباض)

در حال افزایش است. با توجه به شکل ۹ می‌توان ضخامت لایه انتشار گاز را به چهار قسمت تقسیم کرد. قسمت اول مربوط به $0 < y < 100$ است. در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز از مقدار یک در مرز لایه کاتالیست- لایه انتشار گاز تا حدود $0/4$ و $0/3$ برای زاویه‌های تماس 115° و 145° به‌طور شدیدی کاهش می‌یابد. قسمت دوم مربوط به $100 < y < 160$ است. در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز تقریباً یکنواخت است. قسمت سوم مربوط به $160 < y < 300$ است. در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا به‌طور ملایم کاهش می‌یابد. قسمت چهارم مربوط به $300 < y < 400$ است. در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا افزایش می‌یابد که علت تغییر قابل توجه در اندازه حفره‌ها، بین دو لایه انتشار گاز و کانال گاز است.

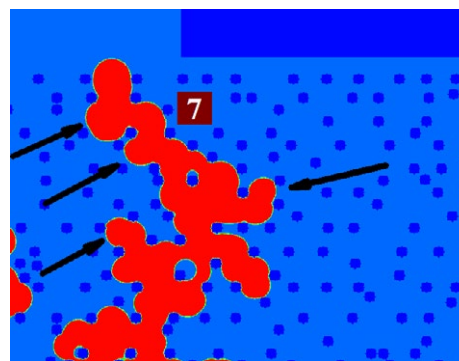
شکل ۱۰ اثر زاویه تماس را بر روی اشباع آب مایع نشان می‌دهد. با توجه به شکل بیشترین اختلاف این دو نمودار مربوط به ناحیه $100 < y < 160$ است پس بیشترین اثر زاویه تماس مربوط به این ناحیه از لایه انتشار گاز است.

در این قسمت به بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز برحسب زمان پرداخته شده است (شکل ۱۱). با توجه به شکل ۱۱ این نمودار به دو قسمت خطی و هموار تقسیم می‌شود. قسمت خطی مربوط به زمان‌هایی است که هنوز آب مایع به کانال گاز نرسیده است. اگر شیب قسمت خطی در حجم لایه انتشار گاز ضرب شود دبی

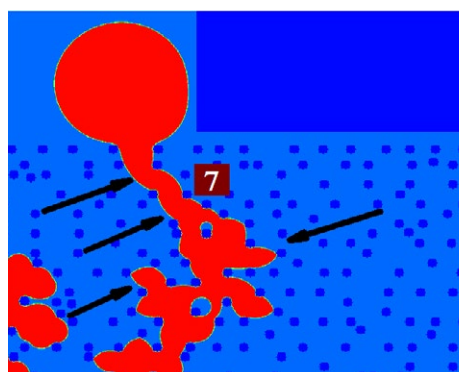
مبادله پروتون به حساب می‌آید. همچنین با افزایش زاویه تماس، مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا با توجه به شکل ۱۱ کاهش خواهد یافت. تعداد عمل اتصال بین خوشه‌ها در حالتی که زاویه تماس 115° است بیشتر از حالتی است که زاویه تماس 145° است و از آنجایی که خوشه‌های آب مایع متصل شده تشکیل حلقه می‌دهند حجم سیال جابه‌جا شده (هوا) که به دلیل ایجاد حلقه‌ها به دام افتاده‌اند در حالتی که زاویه تماس 115° باشد بیشتر است. علاوه بر این افزایش آبریزی سطوح جامد در لایه انتشار گاز باعث می‌شود زمان رسیدن به توزیع اشباع آب مایع در حالت پایا کاهش یابد. این موضوع نشان‌دهنده حذف سریع آب مایع از لایه انتشار گاز به کانال گاز و بهبود مدیریت آب مایع برای سطوح جامد با آبریزی بیشتر است.

مراجع

- [1] Molaeimanesh, G. and M. H. Akbari (2014). "Water droplet dynamic behavior during removal from a proton exchange membrane fuel cell gas diffusion layer by Lattice-Boltzmann method." *Korean journal of chemical engineering* 31(4): 598-610.
- [2] O'hayre, R., et al. (2016). *Fuel cell fundamentals*, John Wiley & Sons.
- [3] Wang, C.-Y. (2004). "Fundamental models for fuel cell engineering." *Chemical reviews* 104(10): 4727-4766.
- [4] Larminie, J., et al. (2003). *Fuel cell systems explained*, J. Wiley Chichester, UK.
- [5] Owejan, J. P., et al. (2009). "Water management studies in PEM fuel cells, Part I: Fuel cell design and in situ water distributions." *International Journal of Hydrogen Energy* 34(8): 3436-3444.
- [6] Chen, L., et al. (2010). "Liquid water dynamic behaviors in the GDL and GC of PEMFCs using lattice Boltzmann method." *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)* 1(2).
- [7] Chen, L., et al. (2012). "Numerical investigation of liquid water transport and distribution in porous gas diffusion layer of a proton exchange membrane fuel cell using lattice Boltzmann method." *Russian journal of electrochemistry* 48(7): 712-726.



(a)



(b)

شکل ۱۲: چروکیدگی و انقباض برای خوشه آب مایع شماره ۷ در زاویه تماس 145° : (a) در لحظه رسیدن خوشه به کانال گاز و (b) بعد از ورود خوشه به کانال گاز.

Fig. 12: Dynamic behavior of shrinkage process of liquid water cluster 7 for contact angle of 145° (a) when cluster 7 reach the GDL/GC interface (b) after entering gas channel.

است. محل‌هایی از خوشه که دچار چروکیدگی و انقباض شده‌اند با فلش نمایش داده شده است. توجه شود که چروکیدگی و انقباض اثر مناسبی روی عملکرد پیل سوختی دارد چون منجر به کاهش رشد شاخه‌های نهایی خوشه و حرکت مستقیم آب مایع به سمت کانال گاز می‌شود.

۶- جمع‌بندی

نتایج این بررسی نشان می‌دهد که هر چه آبریزی سطوح جامد لایه انتشار گاز بیشتر شود تعداد خوشه‌های مؤثر کاهش می‌یابد (در زاویه 115° تعداد ۹ خوشه و در زاویه 145° تعداد ۷ خوشه مؤثر شکل گرفته‌اند) چون با این کار فشار مویبندی بحرانی برای ورود آب مایع به حفره زیاد شده و تعداد خوشه‌های کمتری می‌توانند نفوذ کنند به همین دلیل عاملی مؤثر در افزایش کارایی پیل سوختی غشای

- of two-phase behavior and flooding phenomena in polymer electrolyte fuel cells." *Electrochimica Acta* 54(27): 6861-6875.
- [20] Inamuro, T., et al. (2004). "A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences." *Journal of Computational physics* 198(2): 628-644.
- [21] Daino, M. M. and S. G. Kandlikar (2012). "3D phase-differentiated GDL microstructure generation with binder and PTFE distributions." *International Journal of Hydrogen Energy* 37(6): 5180-5189..
- [22] Shan, X. and H. Chen (1993). "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components." *Physical Review E* 47(3): 1815.
- [23] Huang, H., et al. (2007). "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models." *Physical Review E* 76(6): 066701.
- [24] Dong, B., et al. (2010). "Simulation of the influence of surface wettability on viscous fingering phenomenon in porous media." *Journal of Bionic Engineering* 7(3): 267-275..
- [25] Huang, H., et al. (2011). "Evaluation of three lattice Boltzmann models for multiphase flows in porous media." *Computers & Mathematics with Applications* 61(12): 3606-3617..
- [26] Jeon, D. H. and H. Kim (2015). "Effect of compression on water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cell using lattice Boltzmann method." *Journal of Power Sources* 294: 393-405.
- [27] Zou, Q. and X. He (1997). "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model." *Physics of fluids* 9(6): 1591-1598.
- [28] Sinha, P. K., et al. (2007). "Impact of GDL structure and wettability on water management in polymer electrolyte fuel cells." *Journal of Materials Chemistry* 17(30): 3089-3103.
- [29] Pan, C., et al. (2004). "Lattice-Boltzmann simulation of two-phase flow in porous media." *Water Resources Research* 40(1).
- [8] Li, H., et al. (2008). "A review of water flooding issues in the proton exchange membrane fuel cell." *Journal of Power Sources* 178(1): 103-117.
- [9] Lenormand, R., et al. (1988). "Numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media." *Journal of fluid mechanics* 189: 165-187..
- [10] Mukherjee, P. P., et al. (2009). "Mesoscopic modeling of two-phase behavior and flooding phenomena in polymer electrolyte fuel cells." *Electrochimica Acta* 54(27): 6861-6875.
- [11] Hao, L. and P. Cheng (2010). "Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell." *Journal of Power Sources* 195(12): 3870-3881.
- [12] Chen, L., et al. (2012). "Pore-scale flow and mass transport in gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cell with interdigitated flow fields." *International Journal of Thermal Sciences* 51: 132-144.
- [13] Lee, K.-J., et al. (2009). "Pore-network analysis of two-phase water transport in gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells." *Electrochimica Acta* 54(4): 1166-1176..
- [14] Ziegler, C. and D. Gerteisen (2009). "Validity of two-phase polymer electrolyte membrane fuel cell models with respect to the gas diffusion layer." *Journal of Power Sources* 188(1): 184-191.
- [15] Yang, X., et al. (2004). "Visualization of liquid water transport in a PEFC." *Electrochemical and Solid-State Letters* 7(11): A408-A411.
- [16] Zhang, F., et al. (2006). "Liquid water removal from a polymer electrolyte fuel cell." *Journal of the Electrochemical Society* 153(2): A225-A232.
- [17] Chen, S. and G. D. Doolen (1998). "Lattice Boltzmann method for fluid flows." *Annual review of fluid mechanics* 30(1): 329-364.
- [18] Chen, S. and G. D. Doolen (1998). "Lattice Boltzmann method for fluid flows." *Annual review of fluid mechanics* 30(1): 329-364.
- [19] Mukherjee, P. P., et al. (2009). "Mesoscopic modeling

- and pore structure, Academic press.
- [33] Gao, Y. (2012). Simulate fluid transport in gas diffusion layers of PEM Fuel Cells using lattice Boltzmann method and X-ray computed tomography, Citeseer.
- [34] Kim, K. N., et al. (2015). "Lattice Boltzmann simulation of liquid water transport in microporous and gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells." *Journal of Power Sources* 278: 703-717.
- [30] Park, J. and X. Li (2008). "Multi-phase micro-scale flow simulation in the electrodes of a PEM fuel cell by lattice Boltzmann method." *Journal of Power Sources* 178(1): 248-257.
- [31] Molaeimanesh, G. and M. Akbari (2014). "Impact of PTFE distribution on the removal of liquid water from a PEMFC electrode by lattice Boltzmann method." *International Journal of Hydrogen Energy* 39(16): 8401-8409.
- [32] Dullien, F. A. (2012). *Porous media: fluid transport*

