



ارزیابی مشخصه‌های لایه نفوذ گاز کاتد بر انتقال آب در پیل سوختی پلیمری با استفاده از روش لیتس بولتزمن

محمد حبیب اللهی¹، حسن حسن‌زاده^{2*}، محمد رهنما³، سید علی میربزرگی²، ابراهیم جهانشاهی جواران⁴

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

2- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

3- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان

4- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان

* بیرجند، صندوق پستی 97175/615، h.hassanzadeh@birjand.ac.ir

چکیده

در تحقیق حاضر انتقال آب مایع در میان لایه نفوذ گاز پیل سوختی پلیمری به کمک روش لیتس بولتزمن مدل‌سازی شده است. شرایط شبیه‌سازی جریان دوفازی در هندسه مورد نظر، مشابه با انتقال آب در لایه نفوذ گاز کاتد پیل سوختی پلیمری است. ابتدا کد نوشته شده در سه حالت اعتبار سنجی شده و پس از اطمینان از صحت آن، تأثیر سه مشخصه لایه نفوذ گاز شامل قطر ذرات تشکیل دهنده، تخلخل و آبگریزی بر انتقال آب مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که فرایند نفوذ آب مایع در طول لایه نفوذ کاتد بشدت متأثر از نیروی موئینگی است و با گذشت زمان مقدار اشباع در طول لایه نفوذ گاز افزایش یافته و نهایتاً به مقدار ثابتی می‌رسد. علاوه بر این با افزایش آبگریزی، مقدار آب مایع در لایه نفوذ گاز کاهش می‌یابد. همچنین با کاهش اندازه قطر ذرات، مقدار اشباع و تعداد میان‌گذرهای انتقال آب کاهش می‌یابد که این می‌تواند باعث افزایش نفوذ اکسیژن به سمت کاتالیست کاتد شود.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 30 بهمن 1396

پذیرش: 01 اردیبهشت 1397

ارائه در سایت: 27 اردیبهشت 1397

کلید واژگان:

پیل سوختی پلیمری

روش شبکه بولتزمن

لایه نفوذ گاز کاتد

جریان دوفازی

Investigation characteristics of gas diffusion layers on liquid water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells using the lattice Boltzmann method

Mohammad Habibollahi¹, Hassan Hassanzadeh^{1*}, Mohammad Rahnema², Seyed Ali Mirbozorgi¹, Ebrahim Jahanshahi Javaran³

1- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran

3- Department of Energy, Institute of Science and High Technology and Environmental Sciences, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

* P.O.B. 97175/615 Birjand, Iran, h.hassanzadeh@birjand.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 19 February 2018

Accepted 21 April 2018

Available Online 17 May 2018

Keywords:

Proton Exchange Membrane Fuel Cell

Lattice Boltzmann Method

Gas Diffusion Layer

Two Phase Flow

ABSTRACT

In this paper the liquid water transport through the gas diffusion layer (GDL) of PEMFCs is modeled using the lattice Boltzmann method. The conditions for the simulation of the two-phase flow in the desired geometry are similar to the transfer of water in the gas diffusion layer of polymer electrolyte member fuel cell. First, the code is validated in three conditions and after ensuring its accuracy, the effect of three characteristics of the gas diffusion layer including the particle diameter, porosity and hydrophobicity on water transfer has been investigated. The results show that the diffusion process of liquid water through gas diffusion layer is strongly influenced by capillary force and over time, the amount of saturation in the gas diffusion layer increases and ultimately reaches to a constant value. In addition, by increasing hydrophobicity, the amount of liquid water in the gas diffusion layer decreases. In addition to, the amount of liquid water inside the gas diffusion layer decreases with increasing hydrophobicity. Also, by decreasing the size of the particle diameter, the amount of saturation and the number of transfer passes of the water decreases, which can increase the oxygen diffusion into the cathode catalyst.

آن‌ها نسبتاً کم است از این رو لازم است با مدل‌سازی موانع پیش روی توسعه آنها جهت تجاری‌سازی حل شود. یکی از چالش‌های اصلی پیل‌های سوختی پلیمری مدیریت آب¹ بخصوص در سمت کاتد است. چرا که قابلیت هدایت پروتون‌ها این نوع پیل سوختی وابسته به محتوای آب الکترولیت پلیمری آن

1- مقدمه

پیل‌های سوختی پلیمری به دلیل ویژگی‌هایی از قبیل بازده بالا، آلاینده‌گی و سروصدای کم، شدت توان بالا، تنوع منابع سوخت و غیره گزینه مناسبی بجای موتورهای احتراق داخلی و وسایل قابل حمل مطرح هستند. ولی در حال حاضر هزینه تولید آنها در قیاس با موتورهای احتراق داخلی بالا و عمر

¹ Water management

مؤثر می‌شود که این امر به علت مسدود شدن مسیرهای عبور گاز توسط آب موجود در سیستم است. خیاط و مهنما [12] تأثیر اضافه نمودن لایه میکرومتخلخل³ را در سمت کاتد به صورت سه بعدی و غیر هم‌دم‌مورد بررسی قرار دادند و نتایج آنها نشان می‌دهند که با افزایش این لایه بین لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست به دلیل تفاوت در خواص رطوبتی این لایه‌ها یک ناپوستگی در اشباع آب و غلظت اجزاء واکنش‌گر در سطح تماس آنها بوجود می‌آورد. همچنین افزایش تخلخل لایه میکرومتخلخل باعث کاهش اشباع آب مایع و در نتیجه بهبود عملکرد پیل سوختی می‌شود. افشاری و بهارلو [13] با قرار دادن یک یا چند مانع مسدود کننده در کانال کاتد پیل سوختی پلیمری تأثیر ضریب تخلخل لایه نفوذ گاز بر انتقال اکسیژن در داخل لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست و همچنین افت فشار در سمت کاتد را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان می‌دهند که با قرار دادن یک مانع مستطیلی بزرگ، بیشترین افزایش سرعت در لایه نفوذ گاز و در نتیجه بیشترین غلظت اکسیژن در فصل مشترک لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست با وجود بیشترین افت فشار اتفاق می‌افتد.

کنگ و همکاران [14,15] به صورت آزمایشگاهی انتقال آب در یک لایه نفوذ گاز را بررسی کردند. این محققان با استفاده از شبیه‌سازی‌های آزمایشگاهی و مدل شبکه حفره نشان دادند که در پروسه نفوذ، فشار موئینگی مهمترین عامل انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز است.

این مطالعات کمک زیادی به شناخت پارامترهای مؤثر بر انتقال آب در لایه نفوذ گاز می‌کند ولی مدل‌سازی محیط‌های پیچیده به طریق محیط پیوسته دشوار است از این رو محققان در دهه اخیر گرایش به استفاده از دیگر روش‌ها مانند شبکه بولتزمن پیدا کرده‌اند. معادله پایه روش شبکه بولتزمن بر خلاف معادلات روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی که دیفرانسیلی پاره‌ای غیر خطی هستند، یک معادله دیفرانسیل پاره‌ای خطی مرتبه اول است. طبیعتاً این تفاوت در ماهیت دو معادله حاکم، در نحوه گسسته‌سازی آن‌ها و سهولت برنامه‌نویسی برای هریک از این دو روش هم تأثیرگذار است به طوری که این روش به سادگی جریان سیال در ساختار پیچیده محیط متخلخل را مدل‌سازی می‌کند، که برای شبیه‌سازی در مقیاس حفره روشی مناسب است. از این رو، این روش به دلیل توانایی‌های که عنوان شد در چند سال اخیر جهت شبیه‌سازی‌های مختلفی در پیل‌های سوختی پلیمری از جمله شبیه‌سازی رفتار آب در پیل‌های سوختی پلیمری بشدت مورد استقبال قرار گرفته است [16]. از معایب روش شبکه بولتزمن می‌توان به ضعف در مدل‌سازی جریان‌های چند فازی گاز-مایع با اختلاف چگالی و یا اختلاف گرانشی بالا بین فازها و شبیه‌سازی جریان‌هایی با اعداد ماخ بالا بیان کرد.

در این راستا وانگ و افشار پویا [17] برای اولین بار با استفاده از روش شبکه بولتزمن به مدل‌سازی جریان سیال تک فاز در یک کانال مارپیچ سه بعدی حاوی مواد متخلخل و در مقیاس ماکروسکوپیک پرداختند و نشان دادند که شکل جریان و توزیع فشار بشدت به عدد رینولدز وابسته است. همچنین پارک و همکاران [18] در مقیاس حفره جریان سیال تک فاز را در لایه نفوذ گاز مدل‌سازی کردند. نتایج آنها نشان می‌دهند که وقتی جهت الیاف در محیط متخلخل موازی جریان باشد نفوذپذیری مؤثر دو برابر حالتی هست که جهت الیاف عمود بر جریان باشد. هائو و چنگ [19] با استفاده از روش شبکه بولتزمن فشار موئینگی در لایه نفوذ گاز از نوع کاغذ کربنی را به صورت تابعی از درجه اشباع آب⁴ بررسی کرده و با داده‌های آزمایشگاهی

است که با خشک شدن الکترولیت، مقاومت آن در برابر انتقال پروتون افزایش یافته و کارایی پیل سوختی کاهش می‌یابد. بخشی از آب موجود در پیل سوختی بدلیل رطوبت‌زنی گازهای ورودی به پیل سوختی جهت مرطوب نگه داشتن الکترولیت است و بخش دیگر آن، آب تولیدی ناشی از واکنش الکترو-شیمیایی در کاتالیست کاتد است. بررسی‌های انجام شده نشان می‌دهند که در محدوده چگالی جریان‌های عملی، $i \approx 0.7A/cm^2$ ، جهت جریان آب از آند بطرف کاتد است. از آنجا که انتقال آب از آند به کاتد و تولید آب در کاتالیست کاتد شرایط برای دوفازی شدن جریان در لایه نفوذ گاز کاتد را فراهم می‌آورد. عدم خروج مناسب آب در کاتد پیل باعث پرشدن خلل و فرج لایه نفوذ گاز شده و پدیده غرقاب‌شدگی¹ واقع می‌شود. با وقوع غرقاب شدگی سرعت نفوذ اکسیژن به کاتالیست کاتد کاهش یافته و واکنش کند احیای اکسیژن کندتر صورت می‌گیرد که این کاهش کارایی پیل سوختی را به همراه دارد [1].

چگونگی رفتار آب مایع در پیل سوختی پلیمری بخصوص در لایه نفوذ گاز کاتد در کارایی پیل بسیار مهم است، از این رو در چند دهه اخیر مقالات متعدد عددی و آزمایشگاهی برای بررسی رفتار جریان دو فازی در لایه نفوذ گاز کاتد منتشر شده است. در مدل‌های یک بعدی، علی‌رغم استفاده از فرض‌های ساده کننده زیاد، کمک قابل توجهی به درک رفتار جریان دو فازی در پیل سوختی پلیمری داشته‌اند. جهت درک جزئیات بیشتر جریان دوفازی در پیل‌های سوختی پلیمری مدل‌های پیچیده چند بعدی دو فازی توسعه پیدا کردند [2,3]. علاوه بر مدل‌سازی عددی، تحقیقات آزمایشگاهی هم توسط تعدادی از محققان انجام شده است. در این راستا توبر [4] و یانگ [5] نیز به صورت آزمایشگاهی انتقال آب مایع در کانال گاز پیل سوختی را مورد ارزیابی قرار داده و نشان دادند که کشش سطحی آب و قابلیت آبگریزی لایه نفوذ گاز نقشی اساسی در انتقال آب مایع دارد.

گرتیشن و همکاران [6]، با استفاده از لیزر حفره‌های عمودی را در لایه نفوذ گاز ایجاد نموده و نشان دادند که این حفره‌ها باعث کاهش غرقاب‌شدگی و افزایش چگالی جریان حدی² پیل می‌شود. ناینگ و همکاران [7] نیز به تأثیر جهت‌دهی الیاف در ساختار لایه نفوذ گاز پرداختند و نشان دادند که بهترین بازدهی پیل سوختی به دلیل تخلیه آب مایع زمانی که الیاف به صورت عمود بر جریان کانال است، اتفاق می‌افتد.

مطالعات انجام شده بر اساس مدل شبکه حفره نشان می‌دهد که موئینگی مهمترین مکانیزم‌های انتقال آب در محیط‌های متخلخل است. در این راستا، لین و همکاران [8] نشان دادند که درجه اشباع در لایه نفوذ گاز متاثر از مقدار شار جریان آب به لایه نفوذ از کاتالیست نیست بلکه توسط شرایط آب (فشار و یکنواخت بودن جریان) ورودی به لایه نفوذ گاز کنترل می‌شود. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که نحوه ورود آب مایع از لایه کاتالیست به لایه نفوذ گاز، شبیه به پاشش آب از تعداد زیادی نازل است. نم و همکاران [9] بر اساس نتایج لی و همکاران [10] پیشنهاد کردند که با کاهش اندازه قطرات آب مایع در لایه کاتالیست می‌توان درجه اشباع آب در لایه نفوذ گاز (با کاهش تعداد محل‌های ورودی به لایه نفوذ گاز) را کاهش داد که نتیجه آن افزایش فعالیت‌های الکتروشیمیایی در لایه کاتالیست و بهبود کارایی پیل سوختی می‌باشد. فتحی و همکاران [11] یک مدل میکروسکوپی به منظور شبیه‌سازی فرآیندهای انتقال در لایه کاتالیزی کاتد ارائه داده و نتیجه گرفتند که افزایش حد اشباع باعث کاهش ضریب نفوذ

³ Microporous layer⁴ Water saturation¹ Flooding² Limit current density

در این تحقیق، مطابق شکل 1، از طرح D_2Q_9 شبکه بولتزمن جهت مدل‌سازی هندسه مورد نظر استفاده می‌شود. تابع توزیع احتمال مرحله جاری شدن (معادله (1)) و مرحله برخورد (معادله (2)) برای جزء σ در جهت a ، f_a^σ بر اساس معادلات شبکه بولتزمن به صورت روابط (2,1) می‌باشند.

$$f_a^{\sigma,*}(\vec{x} + \vec{e}_a \Delta t, t) = f_a^\sigma(\vec{x}, t) \quad (1)$$

$$f_a^\sigma(\vec{x}, t + \Delta t) = f_a^{\sigma,*}(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau_\sigma} [f_a^{\sigma,*}(\vec{x}, t) - f_a^{\sigma,eq}(\vec{x}, t)] \quad (2)$$

در معادلات فوق $f_a^{\sigma,*}$ تابع توزیع بعد از مرحله جاری شدن، Δt واحد زمانی شبکه، τ_σ زمان آرامش جزء σ می‌باشند. v_σ نیز ویسکوزیته جزء σ است که به صورت $c_s^2(\tau_\sigma - 0.5)$ بیان می‌شود. همچنین بر اساس شکل 1 سرعت‌های گسسته $\vec{e}_a$ به صورت معادله (3) بیان می‌شوند.

$$\vec{e}_a = \begin{cases} (0,0) & a = 0 \\ (1,0), (0,1), (-1,0), (0,-1) & a = 1,2,3,4 \\ (1,1), (-1,1), (-1,-1), (1,-1) & a = 5,6,7,8 \end{cases} \quad (3)$$

$$f_a^{\sigma,eq} = w_a \rho_\sigma \left[1 + \frac{\vec{e}_a \cdot \vec{u}_\sigma^{eq}}{c_s^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{(\vec{e}_a \cdot \vec{u}_\sigma^{eq})^2}{c_s^4} - \frac{\vec{u}_\sigma^{eq} \cdot \vec{u}_\sigma^{eq}}{c_s^2} \right) \right] \quad (4)$$

همچنین تابع توزیع تعادلی، $f_a^{\sigma,eq}$ بر اساس فرم BGK معادله بولتزمن طبق رابطه (4) بیان می‌شود. سرعت صوت c_s برای مدل D_2Q_9 برابر با $1/\sqrt{3}$ است. ضرایب گسسته سازی تابع توزیع تعادلی ماکسول-بولتزمن هستند که به صورت روابط (5) می‌باشند.

$$w_a = \begin{cases} 4/9 & a = 0 \\ 1/9 & a = 1 - 4 \\ 1/36 & a = 5 - 8 \end{cases} \quad (5)$$

چگالی ρ_σ و سرعت $\vec{u}_\sigma$ برای هر جزء، چگالی مخلوط ρ و سرعت مخلوط $\vec{u}$ نیز از روابط (6-9) محاسبه می‌شوند.

$$\rho_\sigma = \sum_a f_a^\sigma \quad (6)$$

$$\vec{u}_\sigma = \frac{1}{\rho_\sigma} \sum_a f_a^\sigma \vec{e}_a \quad (7)$$

$$\rho = \sum_\sigma \rho_\sigma \quad (8)$$

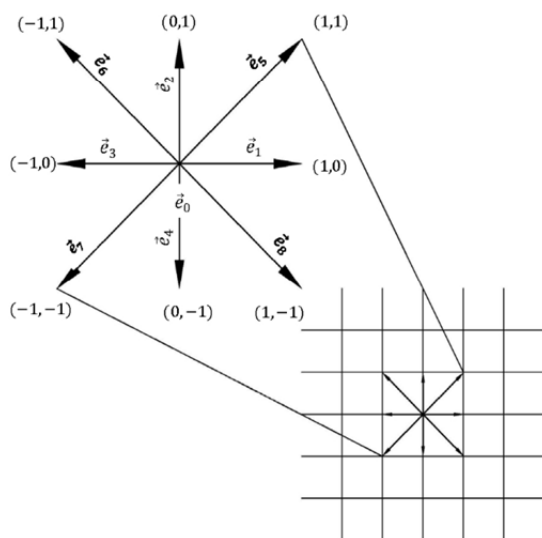


Fig. 1 The two-dimensional, nine-velocity (D_2Q_9) lattice model used in this study

شکل 1 مدل شبکه نه سرعتی دوبعدی (D_2Q_9) مورد استفاده در مطالعه حاضر

اعتبار سنجی نمودند. نم و همکاران [20] لایه نفوذ گاز کاند همراه با یک لایه میکرو متخلخل را با استفاده از روش شبکه بولتزمن شبیه‌سازی نمودند. نتایج آنها نشان می‌دهند که استفاده از لایه میکرومتخلخل باعث کاهش تعداد میان‌گذرها¹ و بهبود مدیریت آب می‌شود.

همچنین موخری و همکاران [21] چگونگی انتقال آب مایع در لایه نفوذ آبگریز را با استفاده از روش شبکه بولتزمن مورد بررسی قرار داده‌اند. نتایج شبیه‌سازی آنها نشان می‌دهند که انتقال آب مایع به شدت وابسته به فشار موئینگی و قابلیت آبگریزی لایه نفوذ گاز و کانال است. علاوه بر این، نتایج محققان دیگر که رفتار آب مایع در لایه نفوذ گاز را با استفاده از روش شبکه بولتزمن مورد بررسی قرار داده‌اند، نشان می‌دهد که انتقال آب مایع در این لایه بیشتر متأثر از فشار موئینگی و قابلیت آبگریزی لایه نفوذ و کانال گاز می‌باشد و با افزایش آبگریزی لایه نفوذ گاز، میزان اشباع آب کاهش می‌یابد [24-22].

اگر چه به کمک روش شبکه بولتزمن می‌توان با موفقیت مدل‌هایی جهت بررسی رفتار آب در لایه نفوذ گاز ارائه کرد، اما تعداد کمی از این مدل‌ها به بررسی پارامترهای لایه متخلخل از جمله ضریب تخلخل، تأثیر قطر ذرات² و اثرات آبگریزی بر انتقال آب مایع و نقش این پارامترها بر مدیریت آب در پیل‌های سوختی پلیمری پرداخته‌اند. لذا هدف از انجام این تحقیق بررسی رفتار دینامیکی آب مایع در لایه نفوذ گاز پیل سوختی پلیمری با استفاده از روش شبکه بولتزمن و مدل چند جزئی‌شان-چن در مقیاس حفره و بررسی این پارامترها بر انتقال آب است.

2- شبیه‌سازی عددی

جهت شبیه‌سازی جریان آب در محیط متخلخل لایه نفوذ گاز کاند از روش شبکه بولتزمن استفاده می‌شود که روشی قدرتمند در شبیه‌سازی جریان دوفازی در مقیاس حفره است. از مزیت‌های این روش در مقایسه با روش‌های رایج دینامیک سیالات محاسباتی می‌توان به استفاده از معادله خطی بولتزمن بجای معادلات غیر خطی ناویر استوکس و عدم نیاز به دنبال کردن فصل مشترک دوفاز در جریان دوفازی و قابلیت پردازش موازی اشاره کرد.

روش شبکه بولتزمن یک روش ساده جهت شبیه‌سازی طیف وسیعی از پدیده‌های فیزیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. از آنجا که این روش بر اساس معادلات جنبشی بنا شده است، یکی از روش‌های عددی قدرتمند برای شبیه‌سازی جریان سیال در محیط‌های با هندسه پیچیده از جمله محیط‌های متخلخل در مقیاس حفره می‌باشد.

از آنجا که روش شبکه بولتزمن به صورت ساده مسائل محیط چندگانه³ را حل می‌کند تعداد زیادی از محققان چندین مدل جهت مدل‌سازی جریان چند فازی ارائه کردند [29-25].

در تحقیق حاضر از مدل شان-چن جهت شبیه‌سازی انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز کاند پیل سوختی پلیمری استفاده شده است، که این مدل جریان چند جزئی تغییر شکل و افزایش حباب‌ها و شکسته شدن شدن قطره را به خوبی شبیه‌سازی می‌کند [29].

2-1- مدل چند جزئی⁴ شان-چن

¹ Breakthrough

² Particles

³ Multi-physics

⁴ Multi component

محیط متخلخل به صورت تصادفی به کمک دایری به قطر متوسط 14، 16 و 12 میکرومتر و با سه ضریب تخلخل مختلف 0.72، 0.8 و 0.64 به صورت تصادفی ساخته شده است که در شکل 3 ملاحظه می‌شود.

شرایط مرزی در طرفین جهت کاهش اثرات اندازه، متناوب در نظر گرفته شده است. با فرض اینکه ضریب تخلخل لایه کاتالیست 0.2 باشد از 100 منفذ به اندازه 2 μm که به صورت تصادفی توزیع شده‌اند آب از قسمت پایین شکل یعنی جایی که کاتالیست در آن قسمت قرار گرفته وارد لایه نفوذ گاز می‌شود، که با استفاده از شرط مرزی زو و هی برای ورود آب مدل‌سازی صورت گرفته است [31].

زمان حل برای 600000 گره محاسباتی و 100000 تکرار توسط سیستمی با پردازنده مرکزی Intel® core i7-7700K، پردازنده گرافیکی GTX 1060 6GB و حافظه سیستم 32، 190 دقیقه است. بدیهی است که در صورت استفاده از پردازش موازی این زمان می‌تواند چندین برابر کاهش پیدا کند.

از آنجا که انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز تحت تأثیر نیروی موئینگی است و سایر نیروها از جمله نیروی وزن، اینرسی و لزجت ناچیز می‌باشد، بنابراین تأثیر چگالی و لزجت بر انتقال جریان دو فاز ناچیز بوده و می‌توان از آنها صرف‌نظر کرد. بر این اساس می‌توان مقدار چگالی و لزجت آب و هوا را، هر مقدار دلخواهی انتخاب کرد. از این رو می‌توان برای هر دو فاز آب و هوا مقدار مساوی قرار داد [32]. با توجه به مطالب فوق چگالی برای هر دو فاز آب و گاز برابر با 2 و زمان آرامش آنها که مقدار لزجت را مشخص می‌کند روی 1 تنظیم شده است.

شرایط شبیه‌سازی به وسیله اعداد بی‌بعد مشابه کارکرد پیل سوختی پلیمری تنظیم شده است. در این شبیه‌سازی عدد رینولدز که به صورت $Re = \bar{u}d_p/\theta$ (θ ویسکوزیته سینماتیکی سیال، d_p قطر متوسط ذرات هستند که لایه متخلخل از آن ساخته شده است و $\bar{u}$ سرعت ظاهری سیال در محیط متخلخل است) تعریف شده است و مقدار آن در لایه نفوذ گاز برابر با 1.42×10^{-1} است. کوچک بودن این عدد نشان می‌دهد که اثرات لزجت در لایه نفوذ گاز ناچیز است. عدد بدون بعد دیگر، عدد موئینگی است که به صورت نسبت نیروی ناشی از لزجت به نیروی کشش سطحی $Ca = \bar{u}\mu/\sigma$ تعریف می‌شود، (σ کشش سطحی است.) و مقدار آن در لایه نفوذ گاز برابر با 1.61×10^{-3} است. کوچک بودن این عدد نشان می‌دهد که عامل انتقال آب در این شبیه‌سازی، نیروی ناشی از موئینگی است بنابراین می‌توان از اثرات اختلاف چگالی بالای آب و هوا صرف‌نظر کرد [33].

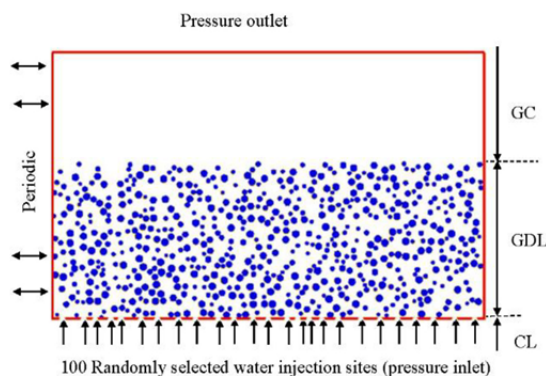


Fig. 3 Schematic geometry studied

شکل 3 شماتیک هندسه مورد مطالعه

$$\vec{u} = \frac{\sum_{\sigma} \rho_{\sigma} \vec{u}_{\sigma} / \tau_{\sigma}}{\sum_{\sigma} \rho_{\sigma} / \tau_{\sigma}} \quad (9)$$

سرعت تعادلی $\vec{u}_{\sigma}^{eq}$ در معادله (4) نیز با فرض نرخ تبادل ممنتوم بین سیال-سیال و سیال-جامد از رابطه (10) محاسبه می‌شود.

$$\rho_{\sigma} \vec{u}_{\sigma}^{eq} = \rho_{\sigma} \vec{u} + \tau_{\sigma} \sum \vec{F}^{\sigma} \quad (10)$$

نیروی $\vec{F}^{\sigma}$ شامل نیروی چسبندگی بین دو سیال $\vec{F}_{coh}^{\sigma}(\vec{X})$ ، نیروی چسبندگی بین سیال و سطح جامد $\vec{F}_{ads}^{\sigma}(\vec{X})$ و نیروی خارجی $\vec{F}_{ext}^{\sigma}(\vec{X})$ می‌باشند. نیروی چسبندگی و نیروی بین ذره‌ای نیز از روابط (12، 11) محاسبه می‌شوند:

$$\vec{F}_{coh}^{\sigma}(\vec{X}) = -\psi_{\sigma}(\vec{X}) \sum_{\bar{\sigma}} G_{c\sigma\bar{\sigma}} \sum_a w_a \psi_{\bar{\sigma}}(\vec{X} + \vec{e}_a \Delta t) \vec{e}_a \quad (11)$$

$$\vec{F}_{adh}^{\sigma}(\vec{X}) = -\psi_{\sigma}(\vec{X}) \sum_a G_{adh}^{\sigma} w_a S(\vec{X} + \vec{e}_a \Delta t) \vec{e}_a \quad (12)$$

در معادله (11)، $\psi_{\sigma}(\vec{X})$ بیان‌کننده چگالی مؤثر جزء σ است که به صورت ساده می‌توان آن را به صورت $\psi_{\sigma} = \rho_{\sigma}$ بیان کرد. همچنین $G_{c\sigma\bar{\sigma}}$ پارامتر کنترل کشش سطحی بیان‌کننده اثرات متقابل بین دو سیال است. در معادله (12)، G_{adh}^{σ} ضریب قدرت جاذبه برای مؤلفه σ است که آگریزی و یا آبدوستی سیال در مقابل دیواره را کنترل می‌کند به طوری که برای مقادیر منفی G_{adh}^{σ} جزء σ در مقابل سطح آبدوست و برای مقادیر مثبت G_{adh}^{σ} جزء σ در مقابل سطح آگریز می‌باشد. $S(\vec{X} + \vec{e}_a \Delta t)$ نیز یک شاخص برای حضور مانع جامد در اطراف گره مورد محاسبه است و در صورت وجود یا عدم وجود مانع در گره‌های همسایه به ترتیب مقادیر یک یا صفر به آن نسبت داده می‌شود. الگوریتم حل در شکل 2 نمایش داده شده است.

همچنین فشار P سیال را می‌توان با استفاده از معادله (11) به صورت رابطه (13) بیان کرد [30].

$$P = \sum \rho_{\sigma} c_s^2 + \frac{c_s^2}{2} \sum G_{c\sigma\bar{\sigma}} \psi_{\sigma}(\vec{X}) \psi_{\bar{\sigma}}(\vec{X}) \quad (13)$$

2-2- هندسه حل و شرایط مرزی

شماتیک از هندسه مورد نظر به همراه شرایط مرزی و نواحی مورد مطالعه جهت شبیه‌سازی انتقال آب به صورت دو بعدی در یک لایه متخلخل آگریز پیل سوختی پلیمری به همراه شرایط مرزی در شکل 3 نشان داده شده است. ناحیه حل یک شبکه $1000\Delta x \times 600\Delta x$ است که ضخامت لایه نفوذ گاز $360\Delta x$ است و هر واحد از شبکه برابر با یک میکرومتر است ($\Delta x = 1\mu\text{m}$).

1	• Initialize $\rho_{\sigma}, \vec{u}_{\sigma}, \vec{u}_{\sigma}^{eq}$ and $f_a^{\sigma,eq}$
2	• Initialize f_a^{σ} from $f_a^{\sigma,eq}$
3	• Compute $\rho_{\sigma}, \vec{u}_{\sigma}$ and $\vec{u}$ from f_a^{σ}
4	• Compute $\psi_{\sigma}(\vec{X})$
5	• Compute $\vec{F}_{coh}^{\sigma}, \vec{F}_{adh}^{\sigma}$ and $\vec{u}$ from f_a^{σ}
6	• Collide $f_a^{\sigma} = f_a^{\sigma,*} - \frac{1}{\tau_{\sigma}}(f_a^{\sigma,*} - f_a^{\sigma,eq})$
7	• Stream $f_a^{\sigma,*}$ from f_a^{σ}
8	• Apply Boundary Condition

Fig. 2 Two-phase flow simulation algorithm using lattice Boltzmann method and shan and chen model

شکل 2 الگوریتم شبیه‌سازی جریان دو فازی با استفاده از روش لیتس بولتزمن و مدل شان و چن

3- اعتبار سنجی

قبل از ارائه نتایج برای هندسه مورد نظر، اعتبار سنجی کد نوشته شده در چندین مورد از مسائلی که در حل تحلیلی دارند انجام می‌شود:

الف- محاسبه نفوذپذیری¹ جریان تک فاز در محیط متخلخل با استفاده روش شبکه بولتزمن و مقایسه آن با تقریب کازنی-کارمن²

ب- محاسبه کشش سطحی جریان دو فازی با استفاده از شبکه بولتزمن به استناد قانون لاپلاس³

ج- مدل سازی فرآیندهای آگریزی و آبدوستی حباب در تماس با سطح جامد و محاسبه زاویه تماس به ازای G_{adh} های مختلف.

1-3- حل جریان تک فاز در محیط متخلخل و محاسبه نفوذپذیری

مقاومت محیط متخلخل در برابر جریان سیال به وسیله خاصیتی بنام نفوذپذیری بیان می‌شود که بصورت یک ضریب تناسب در رابطه داری ظاهر می‌شود:

$$\bar{U} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (14)$$

در رابطه فوق μ ویسکوزیته مطلق سیال، $\bar{U}$ سرعت ظاهری سیال در محیط متخلخل، K نفوذپذیری و ∇p گرادیان فشار است. معادله داری برای جریان در محیط‌های متخلخل و اعداد رینولدز کم دقیق است [34]. با استفاده از تقریب کازنی-کارمن می‌توان ضریب نفوذپذیری را در محیط متخلخل محاسبه نمود. محاسبه ضریب نفوذپذیری K در یک محیط متخلخل با ضریب تخلخل ε و قطر ذرات d_p با استفاده از تقریب کازنی-کارمن به صورت رابطه (15) است.

$$K = \frac{\varepsilon^3}{180(1-\varepsilon)^2} d_p^2 \quad (15)$$

برای محاسبه ضریب نفوذپذیری جریان تک فاز، با استفاده از روش شبکه بولتزمن، یک شبکه با ابعاد $1000\Delta x \times 250\Delta x$ در نظر گرفته شده است. هر واحد از شبکه برابر با یک میکرومتر انتخاب شده است ($\Delta x = 1\mu m$). محیط متخلخل به صورت تصادفی به صورت دویاری به قطر $16\mu m$ و با سه ضریب تخلخل مختلف 0.8، 0.72 و 0.64 ساخته شده است. یک جریان یکنواخت از پایین با عدد رینولدز 0.06 وارد محیط متخلخل می‌شود ($Re = \bar{U} d_p / \theta$). شرایط مرزی در بالا دست محیط متخلخل فشار ثابت و در طرفین حضور دیواره با شرط عدم لغزش بکار برده شده است. چگالی سیال ρ و زمان آرامش τ هر کدام روی یک تنظیم شده است.

نتایج حل برای ضرایب تخلخل مختلف با استفاده از روش شبکه بولتزمن در جدول 1 ارائه و با تقریب کازنی-کارمن مقایسه شده است. همخوانی قابل قبول مقادیر به دست آمده با تقریب کازنی-کارمن به خصوص در ضریب

جدول 1 ضریب نفوذپذیری محاسبه شده از طریق شبکه بولتزمن و مقایسه آن با تقریب کازنی-کارمن

Table 1 Comparison of the LB simulation results for GDL permeability and the Kozeny-Carman correlation.

ضریب تخلخل	تقریب کازنی-کارمن	ضریب نفوذپذیری در محیط متخلخل (قطر ذرات $16\mu m$)	درصد خطا
0.8	$18.20 \times 10^{-12} m^2$	$17.73 \times 10^{-12} m^2$	2.6%
0.72	$6.771 \times 10^{-12} m^2$	$6.544 \times 10^{-12} m^2$	3.4%
0.6	$1.920 \times 10^{-12} m^2$	$1.678 \times 10^{-12} m^2$	12.6%

¹ Permeability

² Kozeny-Carman

³ Laplace low

تخلخل‌های بالا گویای صحت مدل سازی در محیط متخلخل است. مقدار نفوذپذیری حاصل از مدل‌سازی با نفوذپذیری کاغذ کربنی که بعنوان لایه نفوذ گاز در پیل‌های سوختی پلیمری مورد استفاده قرار می‌گیرد برابر است [36,35]. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که روش شبکه بولتزمن به خوبی می‌تواند نفوذپذیری و رفتار آب مایع را در محیط متخلخل لایه نفوذ پیل‌های سوختی پلیمری را مدل کند. با افزایش ضریب تخلخل مقدار خطا افزایش می‌یابد زیرا مدل موجود مدلی دوبعدی است در حالیکه نتایج کازنی-کارمن برای حالت سه بعدی استخراج شده است

2-3- تست حباب⁴ و بررسی قانون لاپلاس

هنگامی که یک حباب در یک سیال دیگر قرار می‌گیرد نیروی کشش سطحی که نتیجه نیروهای بین مولکولی در فصل مشترک دو فاز مایع و گاز هستند تمایل به حفظ حالت پایداری حباب و تمایل به حداقل کردن سطح حباب را دارند. عدد موئینگی ($Ca = \bar{U}\mu/\sigma$) که به صورت نسبت نیروی لزجت به نیروی کشش سطحی تعریف می‌شود، در جریان دو فاز و در محیط متخلخل بسیار با اهمیت است. با استفاده از قانون لاپلاس می‌توان رابطه بین کشش سطحی σ و اختلاف فشار Δp داخل و خارج حباب دایره‌ای شکل را که با شعاع حباب R نسبت عکس دارد، بدست آورد.

$$\Delta p = \frac{\sigma}{R} \quad (16)$$

بر اساس رابطه (11) مقدار کشش سطحی در جریان دو فاز در روش شبکه بولتزمن تابعی از پارامتر کنترل کشش سطح ($G_{c\theta}$) است که در این تحقیق مقدار این پارامتر 1.5 در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در شکل 4 ملاحظه می‌شود، نتایج بدست آمده تطابق خوبی با قانون لاپلاس دارد. با استفاده از شکل 4 می‌توان مقدار کشش سطحی حباب یا همان شیب خط را براساس پارامتر کنترل کشش (در اینجا $\sigma = 0.358$) بدست آورد.

3-3- بررسی زاویه تماس⁵

مطابق شکل 5 زاویه بین سطح جامد و دو سطح مایع و گاز در فصل مشترک سیستم سه فازی را زاویه تماس می‌گویند. آگریزی و یا آبدوستی سطوح نسبت به هر سیال با استفاده از زاویه تماس بیان می‌شود، به‌طوری‌که اگر زاویه تماس کمتر از 90° باشد سطح را آبدوست و اگر زاویه تماس بیشتر از 90° باشد سطح را آگریز است.

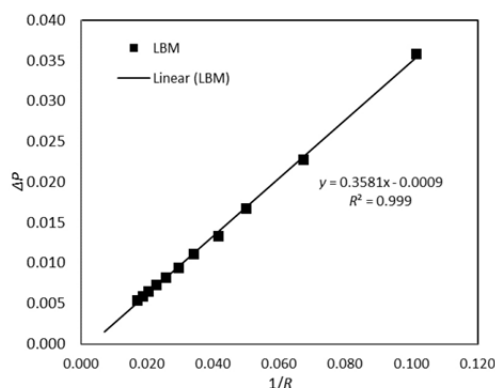


Fig. 4 Laplace's law and the results of the SC model for surface tension

شکل 4 قانون لاپلاس و نتایج مدل شان-چن در مورد کشش سطحی

⁴ Bubble test

⁵ Contact angle

واکنش احیاء اکسیژن خارج می‌شوند. قطرات آب از 100 منفذ از لایه کاتالیست به لایه نفوذ گاز وارد شده تا پس از عبور از آن از طریق کانال کاتد خارج شوند (شکل‌های 7- ب و ه). همان طور که اشاره شد انتقال آب از لایه نفوذ گاز عمدتاً به دلیل فشار موئینگی است و نیروهای مقاوم ناشی از جاذبه و لزجت ناچیز هستند.

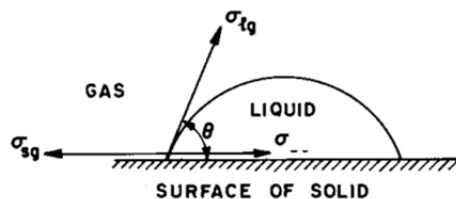


Fig. 5 Definition of contact angle

شکل 5 تعریف زاویه تماس

زاویه تماس در واقع از مقدار تنش بین دو سیال σ و تنش بین هر کدام از فازها و سطح جامد (σ_{sg}, σ_{sl}) بدست می‌آید که بر اساس معادله یانگ¹ به صورت رابطه (17) بیان می‌شود.

$$\cos \theta_c = \frac{\sigma_{sg} - \sigma_{sl}}{\sigma} \quad (17)$$

با فرض خطی بودن رابطه بین کشش‌های سطحی، معادله یانگ را می‌توان به شکل رابطه (18) بیان کرد [33]. در این تحقیق $G_{adh}^2 = -G_{adh}^1$ در نظر گرفته شده است.

$$\cos \theta_c = \frac{G_{adh}^2 - G_{adh}^1}{G_{c\sigma\bar{\sigma}}} \quad (18)$$

در شکل 6، زاویه تماس به ازای مقادیر مختلف G_{adh}^2 محاسبه و انطباق خوب آن با معادله یانگ نشان داده شده است. همان‌طور که در این شکل ملاحظه می‌شود به ازای مقادیر منفی G_{adh}^2 زاویه تماس کوچکتر از 90° است که نشان دهنده آبدوست بودن جزء دوم در مقابل سطح جامد است و به ازای مقادیر مثبت G_{adh}^2 زاویه تماس بزرگتر از 90° است، که نشان دهنده آبگریز بودن جزء دوم در مقابل سطح جامد است (همین‌طور برای G_{adh}^1).

4- نتایج مدل‌سازی

4-1- انتقال آب از لایه نفوذ گاز

انتقال آب در لایه نفوذ گاز با ضخامت $360\mu\text{m}$ ، ضریب تخلخل و قطر ذرات به ترتیب 0.72 و $14\mu\text{m}$ (قطر متوسط دایره‌هایی که محیط متخلخل را تشکیل داده‌اند) و زاویه تماس 108° در زمان‌های مختلف را می‌توان در شکل 7 ملاحظه کرد. مطابق شکل 7- الف نفوذ آب از فصل مشترک لایه نفوذ گاز کاتد و کاتالیست صورت می‌گیرد، جایی که منفذهای لایه کاتالیست کاند وجود دارند و در آن‌ها آب انتقال یافته از آند به کاتد و آب تولیدی ناشی از

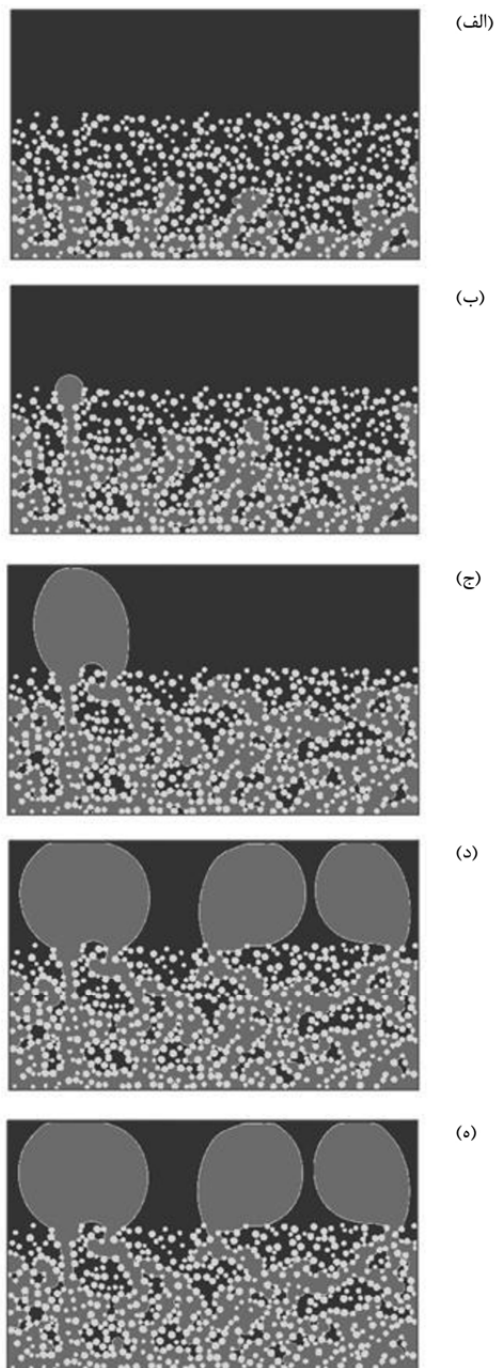


Fig. 7 The Water distribution through the GDL at different times: (a) 50000 lu time, (b) 102000 lu time, (c) 200000 lu time, (d) 506000 lu time, and (e) 705000 lu time.

شکل 7 توزیع آب در لایه نفوذ گاز در زمان‌های مختلف: (الف) 50000 lu time، (ب) 102000 lu time، (ج) 200000 lu time، (د) 506000 lu time، (ه) 705000 lu time

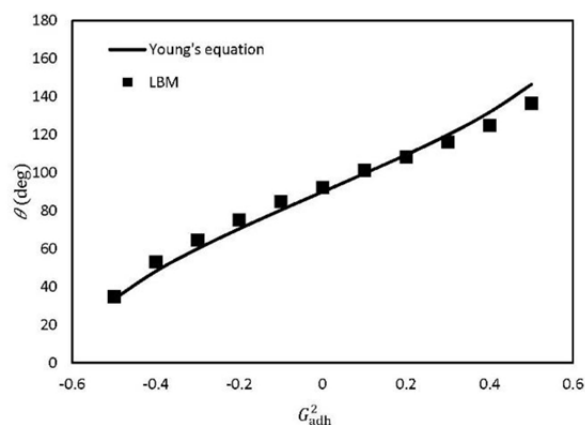


Fig. 6 The curve of the contact angle θ for different values of G_{adh}^2 .

شکل 6 منحنی تغییرات زاویه تماس θ به ازای مقادیر مختلف G_{adh}^2

¹ Young's equation

$$P_c = P_{air} - P_{water} = \frac{2\sigma \cos \theta_c}{r} \quad (19)$$

در معادله فوق σ کشش سطحی و θ_c زاویه تماس و r شعاع ذرات تشکیل دهنده محیط متخلخل است. از آنجا که فشار موئینگی برابر با اختلاف فشار بین هوا و آب مایع بوده، $(P_c = P_{air} - P_{water})$ و فشار هوا در مقایسه با فشار مایع در منفذهای محیط متخلخل ناچیز است لذا فشار آب مایع برای ناحیه جریان موئینگی^۵ را می‌توان به تقریب به صورت رابطه (20) بیان کرد.

$$P_{water} = -\frac{2\sigma \cos \theta_c}{r} \quad (20)$$

بنابراین بر اساس رابطه (19) نیروی موئینگی با شعاع ذرات نسبت عکس دارد، بر این اساس، با افزایش شعاع ذرات تشکیل دهنده لایه نفوذ گاز فشار آب کاهش و با کاهش آن فشار آب افزایش می‌یابد.

به منظور بررسی اثرات قطر ذرات، در شکل 9 توزیع آب مایع در یک لایه متخلخل با ضریب تخلخل 0.72 و ذرات لایه نفوذ با قطر متوسط $12\mu m$ ، $14\mu m$ و $16\mu m$ نشان داده شده است.

از آنجا که طبق رابطه (20)، فشار آب مایع در لایه متخلخل را می‌توان بدون توجه به اثرات لزجت تخمین زد، لذا فشار آب مایع در لایه متخلخل با ذرات با قطر متوسط $12\mu m$ نسبت به لایه نفوذ گاز با ذرات با قطر $14\mu m$ و $16\mu m$ بیشتر است و این نشان می‌دهد که با افزایش قطر ذرات جریان آب زودتر به حالت یکنواخت می‌رسد. به طوری که برای لایه نفوذ گاز با قطر

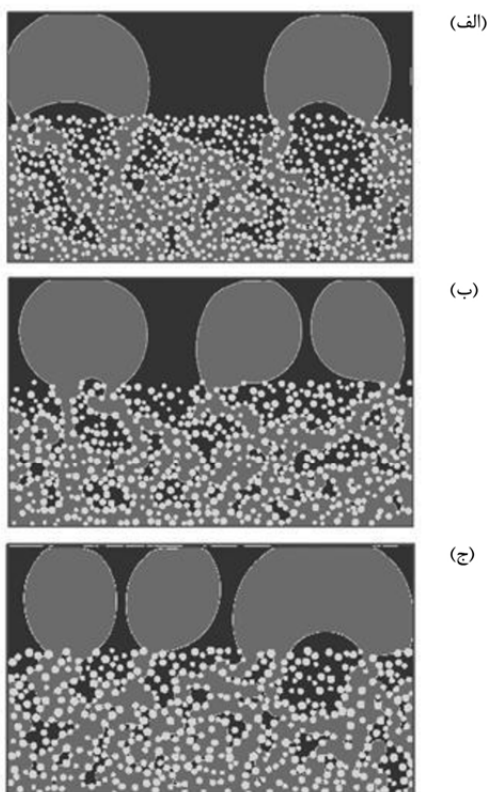


Fig. 9 The water distribution through of GDL at the porosity of 0.72 and contact angle 108° at different particle diameter and times: (a) $12\mu m$ (at 705000 lu time), (b) $14\mu m$ (at 506000 lu time), and (c) $16\mu m$ (at 405000 lu time).

شکل 9 توزیع آب در لایه نفوذ گاز با تخلخل 0.72، زاویه تماس 108° در قطر ذرات و زمان‌های مختلف (الف) $12\mu m$ 705000 lu time، (ب) $14\mu m$ 506000 lu time، (ج) $16\mu m$ 405000 lu time

شکل 8 منحنی توزیع اشباع در طول لایه نفوذ گاز کاند را در زمان‌های مختلف نشان می‌دهد. اشباع بصورت نسبت حجم آب مایع به حجم فضای خالی در محیط متخلخل تعریف شده و می‌تواند بصورت محلی و یا کلی تعریف شود. در این شکل ملاحظه می‌شود که اولاً در یک زمان مشخص اشباع، بدلیل ساختار لایه نفوذ گاز، در هر مقطع از طول لایه نفوذ گاز دارای تغییراتی نوسانی است ثانیاً با افزایش زمان، مقدار اشباع در طول لایه نفوذ گاز افزایش می‌یابد که این نشان دهنده پرشدن تدریجی لایه متخلخل از آب مایع است. از طرفی، افزایش اشباع تا زمان 200000 lu یعنی زمانی که اولین میان‌گذر^۱ اتفاق می‌افتد (شکل 7-ج) طول می‌کشد ولی پس از این مدت از زمان آهنگ تغییر اشباع کاهش یافته و نهایتاً انتقال آب در زمان 506000 lu به حالت دائمی^۲ می‌رسد.

اکسیژن در مسیر انتقال به کاتالیست کاند دارای ضریب نفوذ متغیری است، و از طرفی ضریب نفوذ وابسته به مقدار اشباع بوده و که این مقدار در طول لایه نفوذ گاز متغیر است لذا با افزایش مقدار اشباع ضریب نفوذ اکسیژن کاهش می‌یابد. در صورتیکه منفذهای لایه نفوذ گاز از آب پر شده باشند (غرقاب شدگی) اکسیژن بایستی جهت رسیدن به کاتالیست لازم است در آب حل شوند که این امر غلظت اکسیژن در لایه کاتالیست را بشدت کاهش می‌دهد. از این رو پارامتر اشباع آب، پارامتر مهمی است که مقدار آب مایع را در حفره‌ها را مشخص می‌کند. لذا بر اساس آن می‌توان، سرعت نفوذ اکسیژن در لایه نفوذ گاز با خواص مختلف محیط متخلخل را مقایسه نمود. این خواص شامل قطر ذرات، ضریب تخلخل و مقدار آبریزی محیط متخلخل است که در ادامه به تأثیر این پارامترها بر انتقال آب پرداخته می‌شود.

4-2- اثر قطر ذرات^۳

یکی از خواص محیط متخلخل که بر روی انتقال آب تأثیرگذار است قطر ذراتی لایه نفوذ گاز است که در این قسمت به تأثیر آن بر روی رفتار انتقال آب مایع پرداخته می‌شود.

بر اساس معادله یانگ فشار موئینگی^۴ (P_c) برای جریان دو فاز آب و هوا یعنی همان اختلاف فشار بین آب و هوا برای لایه نفوذ پیل سوختی پلیمری به صورت رابطه (19) می‌باشد.

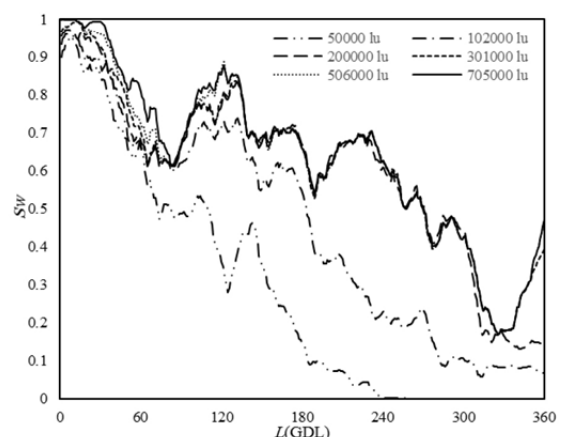


Fig. 8 The saturation distribution curve along of GDL at different times
شکل 8 منحنی توزیع اشباع در طول لایه نفوذ گاز در زمان‌های مختلف

^۱ Breakthrough

^۲ Steady-state

^۳ Grain size

^۴ Capillary pressure

^۵ Capillary-dominant flow

نتایج فوق نشان می‌دهند که کاهش قطر ذرات باعث کاهش اشباع آب مایع می‌شود که این کاهش اشباع آب افزایش نفوذ اکسیژن و بهبود مدیریت آب را در پی دارد که نتیجه آن افزایش کارایی پیل سوختی پلیمری به همراه دارد. از طرف دیگر کاهش قطر ذرات عامل افزایش مقاومت در مقابل انتقال آب است که زمان رسیدن به حالت پایدار را افزایش داده و باعث کاهش سرعت خروج آب مایع از لایه نفوذ گاز شده و منجر به کاهش کارایی پیل سوختی پلیمری می‌شود. با توجه به موارد ذکر شده می‌توان نتیجه گرفت در انتخاب قطر ذرات در لایه نفوذ گاز کاتد باید هر دو مورد فوق را در نظر گرفت تا بهترین راندمان حاصل شود.

3-4- اثر ضریب تخلخل

یکی دیگر از خواص مورد بحث محیط متخلخل ضریب تخلخل است که در ادامه به بررسی اثر آن بر انتقال آب در لایه نفوذ گاز کاتد پرداخته می‌شود. در شکل 11، توزیع آب را در لایه نفوذ گاز با ضرایب تخلخل 0.64، 0.72 و 0.8 و قطر متوسط ذرات 14 μm مورد بررسی قرار می‌گیرد.

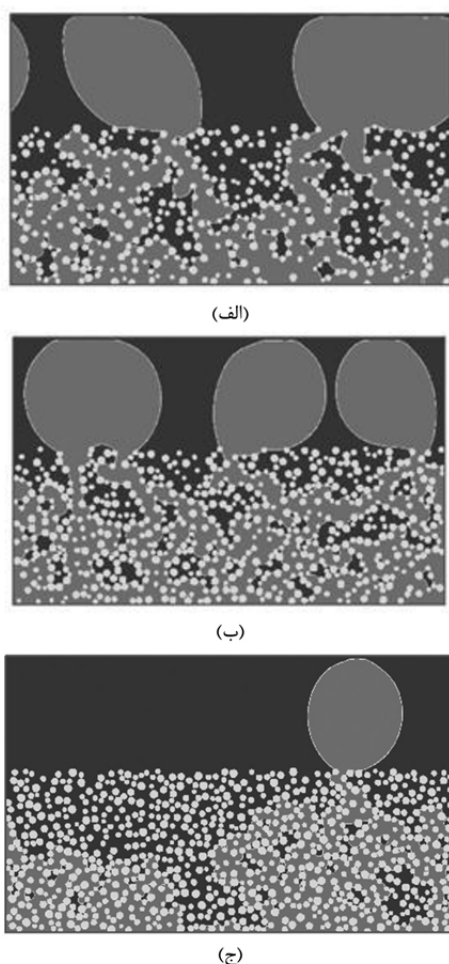


Fig. 11 The water transport through of GDL with particle diameter of 14 μm , contact angle 108° at different porosity and times: (a) 0.8 (at 200000 lu time), (b) 0.72 (at 506000 lu time), and (c) 0.64 (at 1617000 lu time)

شکل 11 انتقال آب در لایه نفوذ گاز با قطر ذرات 14 μm ، زاویه تماس 108° در تخلخل و زمان‌های مختلف: (الف) 0.8، 200000 lu time (ب) 0.72، 506000 lu time (ج) 0.64، 1617000 lu time

متوسط ذرات 12 μm جریان آب در زمان 705000 lu اما لایه نفوذ گاز با قطر متوسط ذرات 14 μm و 16 μm جریان به ترتیب در زمان‌های 506000 lu و 405000 lu یکنواخت می‌شوند.

همان‌طور که در شکل 9 ملاحظه می‌شود، با کاهش قطر ذرات تعداد و اندازه میان‌گذر آب افزایش یافته که این منجر به سهولت انتقال آب می‌شود. از طرف دیگر، همان‌طور که در شکل 10 ملاحظه می‌شود میزان اشباع آب در لایه متخلخل با افزایش قطر ذرات افزایش می‌یابد، به طوری که در زمان 705000 lu متوسط میزان اشباع آب برای ذراتی با قطر متوسط 12 μm ، 14 μm و 16 μm افزایش یافته و به ترتیب برابر با 0.6، 0.638 و 0.702 می‌باشند.

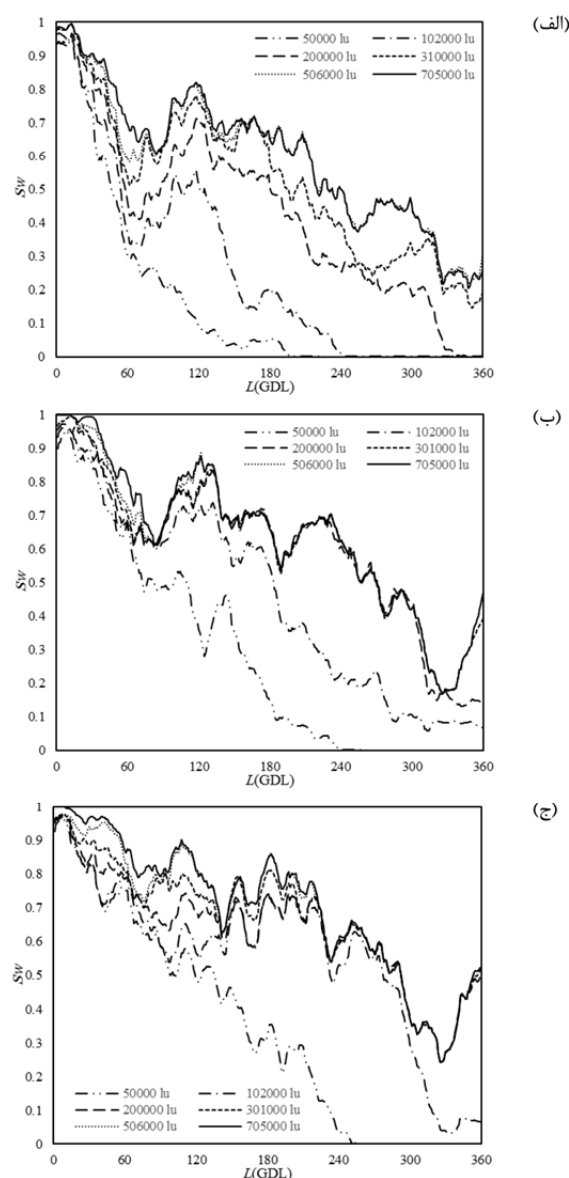


Fig. 10 The saturation distribution curves along of GDL at the porosity of 0.72, contact angle 108° at different times and particles diameter: (a) 12 μm (b) 14 μm and (c) 16 μm .

شکل 10 منحنی‌های توزیع میزان اشباع در طول لایه نفوذ گاز با تخلخل 0.72 و زاویه تماس 108° در زمان‌های مختلف و قطر ذرات (الف) 12 μm ، (ب) 14 μm ، (ج) 16 μm

پیل سوختی می‌شود. از طرف دیگر در ضریب تخلخل 0.64 زمان رسیدن به حالت پایدار طولانی‌تر شده و خروج آب با سرعت کمتری صورت می‌گیرد، در نتیجه انتقال آب با کندی صورت گرفته که منجر به کاهش کارایی پیل سوختی می‌شود.

در شکل 12 نیز منحنی میزان اشباع آب برای ضرایب تخلخل 0.8، 0.72 و 0.64 در زمان‌های مختلف نشان داده شده است. به طوری که متوسط اشباع آب مایع برای ضرایب تخلخل 0.8، 0.72 و 0.64 در حالت جریان یکنواخت به ترتیب برابر با 0.631، 0.638 و 0.469 می‌باشند با توجه به مواردی که مورد بحث و بررسی قرار گرفت استفاده از لایه نفوذ گاز با ضرایب تخلخل 0.72 و 0.8 جهت سهولت انتقال آب از ضریب تخلخل 0.64 بهتر است. همچنین متوسط اشباع لایه نفوذ گاز در 100 μ m نزدیک به لایه کاتالیست برای ضرایب تخلخل 0.72 و 0.8، به ترتیب برابر با 0.817 و 0.850 هستند. از آنجا که آب مایع در نزدیکی فصل مشترک لایه نفوذ گاز و لایه کاتالیست (100 μ m نزدیک به لایه کاتالیست) تقریباً تمام حفره‌های لایه نفوذ گاز را پر می‌کند، لذا اکسیژن جهت رسیدن به لایه کاتالیست بایستی لازم است در آب حل شود که این امر بشدت غلظت اکسیژن در لایه کاتالیست را کاهش می‌دهد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که هرچند که مقدار اشباع متوسط کل برای این دو ضریب تخلخل تقریباً برابر است، اما ضریب تخلخل 0.72 از ضریب تخلخل 0.8 جهت بهبود مدیریت آب به دلیل مقدار اشباع کمتر بخصوص در نزدیک لایه کاتالیست اندکی بهتر است.

4- اثرات آبریزی

یکی از روشهای تسریع کردن انتقال آب لایه نفوذ گاز آبریز کردن لایه نفوذ گاز در پیل‌های سوختی است، چرا که میزان اشباع با افزایش آبریزی کاهش می‌یابد [38,32,21]. در ادامه تأثیر آبریزی لایه نفوذ گاز بر انتقال آب مورد بررسی قرار می‌گیرد.

طبق رابطه (20)، فشار آب مایع در جریان موئینگی تابعی از $\cos\theta_c$ است. زاویه تماس (θ_c) در شبکه بولتزمن توسط پارامتر ضریب قدرت جاذبه (G_{adh}^σ) تعیین می‌شود. جهت بدست آوردن زاویای تماس 101° ، 108° و 116° برای آب، مقدار ضریب قدرت جاذبه به ترتیب روی مقادیر 0.1، 0.2 و 0.3 تنظیم شده است. مقدار این پارامتر برای هوا به ترتیب روی مقادیر 0.1، -0.2 و -0.3 تنظیم شده است.

در شکل 13، توزیع و انتقال آب برای زاویای تماس مختلف 101° ، 108° و 116° نشان داده شده است. جریان آب برای زاویه تماس 101° در زمان 405000 lu مطابق شکل 13-الف، برای زاویه تماس 108° در زمان 506000 lu مطابق شکل 13-ب و زاویه تماس 116° در زمان 611000 lu به حالت یکنواخت خود می‌رسد. برای زاویه تماس 101° لایه نفوذ گاز کمی آبریز است، بنابراین آب مدت زمان بیشتری می‌تواند حضور داشته و میزان اشباع آب نیز در این زاویه تماس بیشتر است (اشکال 13_الف_14_الف). با افزایش زاویه تماس به 108° و 116° مقدار آبریزی سطح جامد لایه نفوذ گاز افزایش می‌یابد به طوری که مقدار آب مایع در محیط متخلخل محدود شده و میزان اشباع آن نیز کاهش می‌یابد (اشکال 13_الف و ب و شکل‌های 14-الف و ب).

چندین دلیل برای توصیف این پدیده وجود دارد که با افزایش آبریزی (افزایش زاویه تماس) مقدار آب مایع در لایه متخلخل کاهش می‌یابد. اول اینکه آب مایع بایستی مینیمم تماس خود را با سطح جامد آبریز داشته باشد، که این تمایل به حداقل تماس، با افزایش زاویه تماس افزایش می‌یابد.

طبق روابط (14) و (15) با افزایش ضریب تخلخل مقاومت در مقابل انتقال آب در لایه نفوذ گاز کاهش یافته و در نتیجه آب زودتر به حالت یکنواخت خود می‌رسد، به طوری که در ضریب تخلخل 0.8 جریان در زمان 200000 lu یکنواخت می‌شود، در صورتی که برای ضرایب تخلخل 0.72 و 0.64 جریان به ترتیب در زمان‌های 506000 lu و 1617000 lu یکنواخت می‌شوند.

مطابق شکل 11-الف در ضریب تخلخل 0.64 تعداد میان‌گذرهای آب و همچنین اندازه آن نسبت به ضرایب تخلخل 0.72 و 0.8 کمتر است که این امر منجر به کاهش میزان اشباع و در نتیجه سهولت انتقال آب در لایه نفوذ

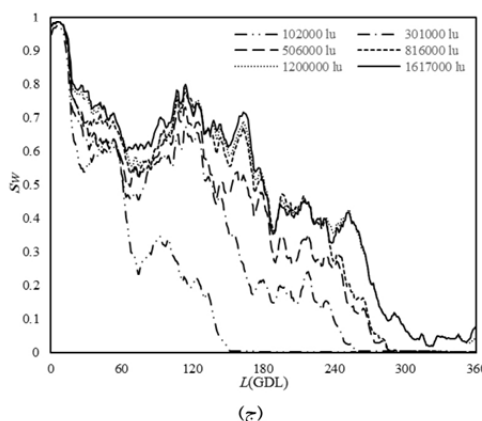
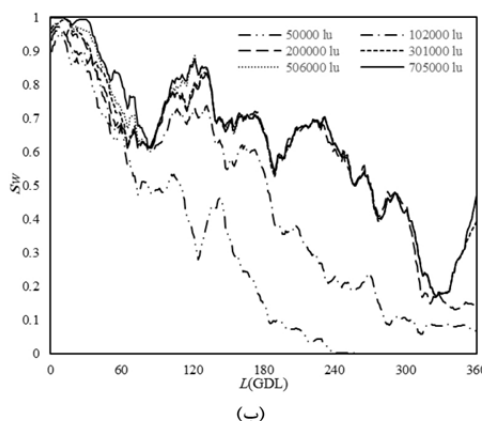
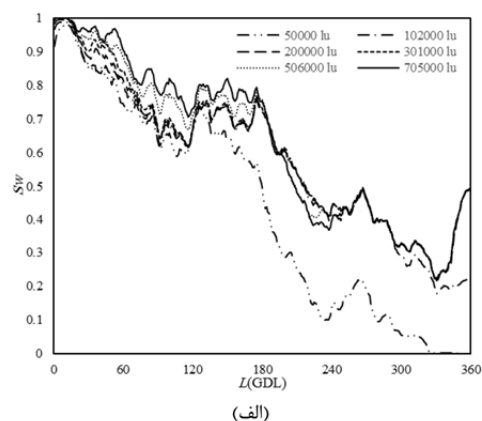


Fig. 12 The saturation distribution curves through of GDL at different times with particle diameter of 14 μ m, contact angle 108° at different times with the porosity: (a) 0.8, (b) 0.72, and (c) 0.64

شکل 12 منحنی‌های توزیع میزان اشباع در طول لایه نفوذ گاز با قطر ذرات 14 μ m، زاویه تماس 108° در زمان‌های مختلف در تخلخل‌های: (الف) 0.8، (ب) 0.72، (ج) 0.64

منجر به بهبود انتقال آب و نهایتاً افزایش کارایی پیل سوختی پلیمری می‌شود.

5- نتیجه‌گیری

در این تحقیق از شبکه بولتزمن و مدل شان-چن [29] جهت شبیه‌سازی انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز کاتد پیل سوختی پلیمری استفاده شده است. ابتدا کد نوشته شده برای سه حالت محاسبه نفوذپذیری جریان در لایه نفوذ گاز و مقایسه آن با تقریب کازنی-کارمن، محاسبه اختلاف فشار یک

بنابراین آب مایع با افزایش آبگریزی لایه متخلخل حجم کمتری از خلخل و فرج را پر می‌کند. دلیل دوم این است که با افزایش آبگریزی (افزایش زاویه تماس) آب به تعداد حفره کمتری هجوم می‌آورد، که این موضوع در شکل‌های 12 مشاهده می‌شود. با توجه به اشکال 13، زمانی که زاویه تماس کوچک است فشار موئینگی کمتری جهت نفوذ آب مایع به حفره مورد نیاز است، بنابراین حفره‌هایی که توسط آب مایع در زاویه تماس 101° پر می‌شوند نسبت به زاویه تماس 108° و 116° درجه به مراتب بیشتر است. علاوه بر این مطابق شکل 13 تعداد و اندازه میان‌گذر آب با افزایش زاویه تماس کاهش می‌یابند.

در شکل‌های 14 منحنی‌های میزان اشباع آب مایع در زمان و زاویه تماس مختلف ترسیم شده است. بعد از یکنواخت شدن جریان، متوسط درجه اشباع آب در زوایای تماس 101° ، 108° و 116° به ترتیب برابر با 0.682، 0.638 و 0.583 می‌باشند.

لذا بر اساس شکل‌های 13 و 14 می‌توان نتیجه گرفت که انتقال آب مایع از لایه نفوذ گاز با آبگریزی کمتر نسبت به لایه نفوذ گاز با آبگریزی بیشتر از اهمیت چندانی در پیل‌های سوختی پلیمری برخوردار نیست چرا که با افزایش آبگریزی میزان اشباع آب و همچنین تعداد میان‌گذر کاهش می‌یابد که این

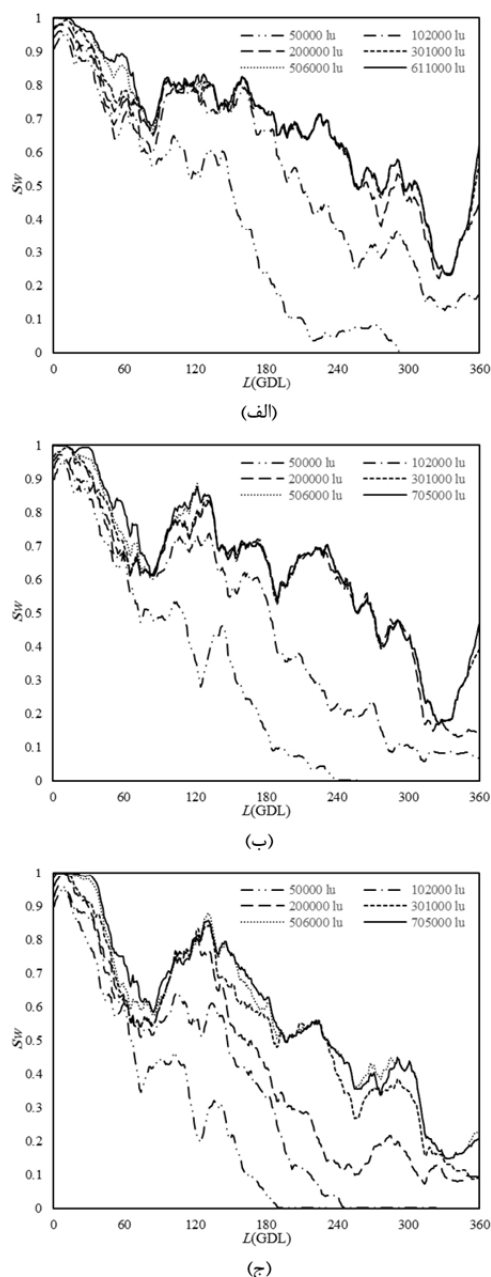


Fig. 14 The saturation distribution curves along of GDL at different times with the porosity and particle diameter $0.72, 14\mu\text{m}$ respectively at different contact angle: (a) 101° , (b) 108° , and (c) 116°

شکل 14 منحنی‌های توزیع اشباع در طول لایه نفوذ گاز با ضریب تخلخل و قطر ذرات به ترتیب 0.72 ، $14\mu\text{m}$ در زمان‌های مختلف و زاویه تماس: (الف) 101° ، (ب) 108° ، (ج) 116°

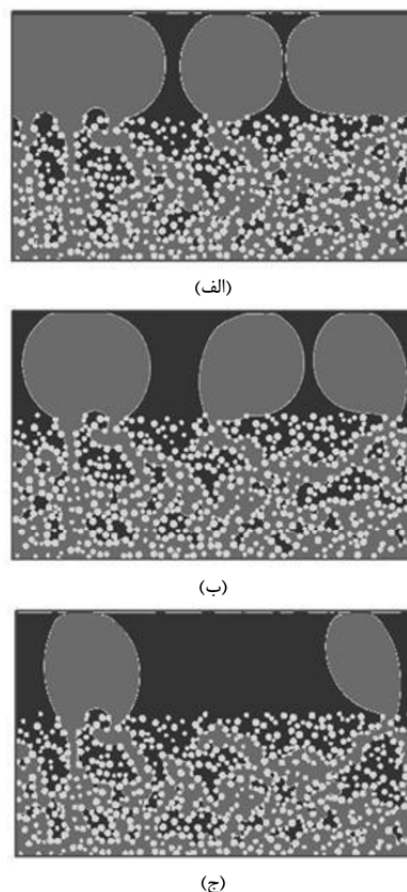


Fig. 13 Water transport through of GDL at porosity and particle diameter $0.72, 14\mu\text{m}$ respectively and different contact angle: (a) 101° (at 405000 lu time), (b) 108° (at 506000 lu time), and (c) 116° (at 611000 lu time).

شکل 13 انتقال آب در لایه نفوذ گاز با ضریب تخلخل و قطر ذره به ترتیب 0.72 ، $14\mu\text{m}$ در زاویه تماس و زمان‌های: (الف) 101° ، 405000 lu time، (ب) 108° ، 506000 lu time، (ج) 116° ، 611000 lu time

- [3] G. Luo, H. Ju, C.-Y. Wang, Prediction of dry-wet-dry transition in polymer electrolyte fuel cells, *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 154, No. 3, pp. B316-B321, 2007.
- [4] K. Tüber, D. Póca, C. Hebling, Visualization of water buildup in the cathode of a transparent PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 124, No. 2, pp. 403-414, 2003.
- [5] X. Yang, F. Zhang, A. Lubawy, C. Wang, Visualization of liquid water transport in a PEFC, *Electrochemical and Solid-State Letters*, Vol. 7, No. 11, pp. A408-A411, 2004.
- [6] D. Gerteisen, T. Heilmann, C. Ziegler, Enhancing liquid water transport by laser perforation of a GDL in a PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 177, No. 2, pp. 348-354, 2008.
- [7] K. S. S. Naing, Y. Tabe, T. Chikahisa, Performance and liquid water distribution in PEFCs with different anisotropic fiber directions of the GDL, *Journal of Power Sources*, Vol. 196, No. 5, pp. 2584-2594, 2011.
- [8] G. Lin, T. Van Nguyen, Effect of thickness and hydrophobic polymer content of the gas diffusion layer on electrode flooding level in a PEMFC, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 152, No. 10, pp. A1942-A1948, 2005.
- [9] J. H. Nam, K. J. Lee, G. S. Hwang, C. J. Kim, M. Kaviani, Microporous layer for water morphology control in PEMFC, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 52, No. 11, pp. 2779-2791, 2009.
- [10] K. J. Lee, J. H. Nam, C.-J. Kim, Pore-network analysis of two-phase water transport in gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 54, No. 4, pp. 1166-1176, 2009.
- [11] H. Fathi, S. H. Mansouri, A. Raoof, Pore Scale Modelling of Cathode Catalyst Layer of PEM Fuel Cell to Investigate the Tortuosity and Effective Diffusivity, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 2, pp. 10-18, 2017. (in Persian)
- [12] S. M. Mahnama, M. Khayat, Three dimensional analysis of adding a hydrophobic porous layer on water saturation at the cathode of a PEM fuel cell, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 11, pp. 357-368, 2016. (in Persian)
- [13] E. Afshari, H. Baharloo Hooreh, Analysis of oxygen transport and pressure drop in a PEM fuel cell cathode with partially blocked flow, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 12, No. 5, pp. 43-58, 2012. (in Persian)
- [14] J. H. Kang, K. N. Kim, J. H. Nam, C.-J. Kim, Visualization experiments and pore network simulations for invasion-percolation transport of a non-wetting fluid through multiple porous layers, *International journal of hydrogen energy*, Vol. 37, No. 2, pp. 1642-1652, 2012.
- [15] J. H. Kang, K. J. Lee, J. H. Nam, C. J. Kim, H. S. Park, S. Lee, I. Kwang, Visualization of invasion-percolation drainage process in porous media using density-matched immiscible fluids and refractive-index-matched solid structures, *Journal of Power Sources*, Vol. 195, No. 9, pp. 2608-2612, 2010.
- [16] Y. B. Salah, Y. Tabe, T. Chikahisa, Gas channel optimisation for PEM fuel cell using the lattice Boltzmann method, *Energy Procedia*, Vol. 28, pp. 125-133, 2012.
- [17] L.-P. Wang, B. Afsharpooya, Modeling fluid flow in fuel cells using the lattice-Boltzmann approach, *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 72, No. 2, pp. 242-248, 2006.
- [18] J. Park, M. Matsubara, X. Li, Application of lattice Boltzmann method to a micro-scale flow simulation in the porous electrode of a PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 173, No. 1, pp. 404-414, 2007.
- [19] L. Hao, P. Cheng, Capillary pressures in carbon paper gas diffusion layers having hydrophilic and hydrophobic pores, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 55, No. 1, pp. 133-139, 2012.
- [20] K. N. Kim, J. H. Kang, S. G. Lee, J. H. Nam, C. J. Kim, Lattice Boltzmann simulation of liquid water transport in microporous and gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 278, pp. 703-717, 2015.
- [21] S. Mukherjee, J. V. Cole, K. Jain, A. Gidwani, Lattice-Boltzmann simulations of multiphase Flows in Gas-Diffusion-Layer (GDL) of a PEM fuel cell, *Proceeding of 100th Annual Meeting of AIChE*, United States, 2008.
- [22] M. A. Khan, B. Sundén, J. Yuan, Analysis of multi-phase transport phenomena with catalyst reactions in polymer electrolyte membrane fuel cells—a review, *Journal of Power Sources*, Vol. 196, No. 19, pp. 7899-7916, 2011.
- [23] L. Chen, Y. L. Feng, C. X. Song, L. Chen, Y. L. He, W. Q. Tao, Multi-scale modeling of proton exchange membrane fuel cell by coupling finite volume method and lattice Boltzmann method, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 63, pp. 268-283, 2013.
- [24] G. Molaeimanesh, M. Akbari, A three-dimensional pore-scale model of the cathode electrode in polymer-electrolyte membrane fuel cell by lattice Boltzmann method, *Journal of Power Sources*, Vol. 258, pp. 89-97, 2014.
- [25] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, G. Zanetti, Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, *Physical Review A*, Vol. 43, No. 8, pp. 4320, 1991.
- [26] E. Orlandini, M. R. Swift, J. Yeomans, A lattice Boltzmann model of binary-fluid mixtures, *EPL (Europhysics Letters)*, Vol. 32, No. 6, pp. 463, 1995.
- [27] L.-S. Luo, S. S. Girimaji, Theory of the lattice Boltzmann method: two-fluid model for binary mixtures, *Physical Review E*, Vol. 67, No. 3, pp. 036302, 2003.
- [28] M. R. Swift, W. Osborn, J. Yeomans, Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids, *Physical review letters*, Vol. 75, No. 5, pp. 830, 1995.

حباب ساکن و مقایسه آن با قانون لاپلاس در مورد کشش سطحی و محاسبه زاویه تماس در یک سیستم سه فازی متشکل از یک محیط جامد و دو فاز سیال به اثبات توانمندی این روش در نزدیکی مرز جامد پرداخته و اعتبارسنجی شده است. پس از آن تأثیر قطر ذرات، ضریب تخلخل و مقدار آبریزی لایه نفوذ گاز کاند پیل سوختی پلیمری بر انتقال آب مورد بررسی قرار گرفته اند. لایه متخلخل نفوذ گاز کاند پیل سوختی پلیمری توسط دوایری با قطرهای مختلف و به صورت تصادفی ساخته شده است به طوری که اندازه هندسه ناحیه حل، شرایط مرزی و اعداد بی بعد حاکم بر جریان از جمله عدد رینولدز، عدد موئینگی در این شبیه‌سازی چند جزئی‌شان-چن شبکه بولتزمن مشابه پیل‌های سوختی پلیمری تنظیم شده است.

نتایج این شبیه‌سازی نشان می‌دهد که نیروی موئینگی نقش مهمی در انتقال آب مایع در لایه نفوذ گاز بر عهده دارد، به طوری که جریان‌های کوچک آب پس از خروج از لایه کاتالیست در مسیر حرکت خود ادغام شده و جریانهای بزرگتری را تشکیل می‌دهند. دیگر نتایج این شبیه‌سازی بطور خلاصه بصورت زیر می‌باشند:

- کاهش قطر ذرات تشکیل دهنده لایه نفوذ باعث کاهش مقدار اشباع و کاهش تعداد میان‌گذرها شده و این دو عامل باعث افزایش نفوذ اکسیژن و در نتیجه افزایش راندمان پیل سوختی می‌شود. با گذشت زمان مقدار اشباع متوسط افزایش یافته و نهایتاً به مقدار ثابتی می‌رسد. مقدار اشباع محلی در نواحی نزدیک به فصل مشترک کاتالیست و لایه نفوذ گاز بسمت مقدار واحدی میل می‌کند که این نشان می‌دهد در این نواحی مولکولهای اکسیژن به ناچار بایستی فقط از طریق حل شدن در آب به لایه کاتالیست برسند. از طرف دیگر کاهش تخلخل و فرج باعث افزایش مقاومت در مقابل انتقال آب به سمت کانال کاند می‌شود که نتیجه آن کاهش سرعت خروج آب و کاهش کارایی پیل سوختی است. لذا بایستی مقدار بهینه ای برای آنها انتخاب کرد.

- میزان اشباع لایه نفوذ گاز کاند برای ضریب تخلخل 0.64 نسبت به ضرایب تخلخل 0.72 و 0.8 کمتر است، اما در عوض زمان لازم برای خروج آب در ضریب تخلخل 0.64 بسیار بیشتر است. میزان اشباع لایه نفوذ گاز در 100µm نزدیک به لایه کاتالیست (0.721) نسبت مقدار اشباع برای دو ضریب تخلخل دیگر تفاوت چندانی ندارد، در نتیجه بهبود مدیریت آب در لایه نفوذ گاز کاند با ضریب تخلخل 72 و 0.8 بهتر از ضریب تخلخل 0.64 است (سطح اشباع لایه نفوذ گاز کاند در 100µm نزدیک به لایه کاتالیست برای ضرایب تخلخل 0.72 و 0.8 به ترتیب برابر با 0.817 و 0.85 می‌باشند).

- در لایه نفوذ گاز با مقدار آبریزی بالا، آب مایع از مسیرهایی با اندازه حفرات بزرگتر انتقال می‌یابند. علاوه بر این با افزایش آبریزی، تعداد میان‌گذر و میزان اشباع آب مایع کمتر می‌شود که نتیجه آن بهبود مدیریت آب افزایش نفوذ اکسیژن و کارایی پیل سوختی پلیمری می‌شود.

6- سپاسگزاری

نویسندگان مقاله بر خود لازم می‌دانند که بدین وسیله از راهنمای‌های ارزشمند آقای دکتر سعید جعفری عضو هیات علمی بخش نفت و گاز دانشگاه شهید باهنر کرمان، تشکر و قدردانی نمایند.

7- مراجع

- [1] M. M. Mench, *Fuel Cell Engines*, pp. 385-398, John Wiley & Sons, 2008.
- [2] T. Berning, N. Djilali, A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell, *Journal of the Electrochemical Society*, Vol. 150, No. 12, pp. A1589-A1598, 2003.

- [34] M. Kaviani, *Fluid Mechanics: Principles of Heat Transfer in Porous Media*, Eds., pp. 15-113: Springer, 1991.
- [35] J. T. Gostick, M. W. Fowler, M. D. Pritzker, M. A. Ioannidis, L. M. Behra, In-plane and through-plane gas permeability of carbon fiber electrode backing layers, *Journal of Power Sources*, Vol. 162, No. 1, pp. 228-238, 2006.
- [36] J. Feser, A. Prasad, S. Advani, Experimental characterization of in-plane permeability of gas diffusion layers, *Journal of power sources*, Vol. 162, No. 2, pp. 1226-1231, 2006.
- [37] D. T. Thorne, C. Michael, *Lattice Boltzmann Modeling: an Introduction for Geoscientists and Engineers*, 2nd. ed., 2006.
- [38] K. Moriyama, T. Inamuro, Lattice Boltzmann simulations of water transport from the gas diffusion layer to the gas channel in PEFC, *Communications in Computational Physics*, Vol. 9, No. 5, pp. 1206-1218, 2011.
- [29] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Physical Review E*, Vol. 47, No. 3, pp. 1815, 1993.
- [30] H. Huang, M. Sukop, X. Lu, *Multiphase lattice Boltzmann Methods: Theory and Application*: John Wiley & Sons, 2015.
- [31] Q. Zou, X. He, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Physics of Fluids*, Vol. 9, No. 6, pp. 1591-1598, 1997.
- [32] L. Hao, P. Cheng, Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 195, No. 12, pp. 3870-3881, 2010.
- [33] P. P. Mukherjee, C. Y. Wang, Q. Kang, Mesoscopic modeling of two-phase behavior and flooding phenomena in polymer electrolyte fuel cells, *Electrochimica Acta*, Vol. 54, No. 27, pp. 6861-6875, 2009.