

بررسی اثر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون

اسماعیل شاکری نژاد

دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

محسن نظری*

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

محمدحسن کیهانی

استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

چکیده

در این مطالعه، از روش شبکه بولتزمن جهت بررسی انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز (GDL) و کانال گاز (GC) قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون استفاده شده است. هدف از این مطالعه، بررسی رفتار خوشه‌های آب مایع به صورت میکروسکوپی از مرز مشترک کاتالیست-لایه انتشار گاز تا کانال گاز است. همچنین رفتار دینامیکی آب مایع در مدت زمان حذف از لایه انتشار گاز الکتروکود کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون شبیه‌سازی شده و اثرات ترکیب زاویه خسی سطح بر روی توزیع رفتار دینامیکی و اشباع آب مایع در دو حالت پایا و غیرپایا بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که پیل سوختی زمانی بهترین عملکرد را دارد که فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز قرار گیرند.

واژه‌های کلیدی: لایه انتشار گاز، کانال گاز، پیل سوختی غشای مبادله پروتون، فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز.

Investigation of the Effect Mixed Hydrophilic and Hydrophobic Fibers in the Gas Diffusion Layer of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell

E. ShakeriNejad

Faculty of Mechanical Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

M. Nazari

Faculty of Mechanical Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

M. H. Kayhani

Mechanical Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

Abstract

In this study, Lattice Boltzmann method (LBM) is used to investigate liquid water transport in a gas diffusion layer (GDL) and gas channel (GC) of polymer electrolyte membrane of cathode fuel cells. In this paper, behavior of liquid water clusters from catalyst layer / GDL interface to gas channel is studied and the dynamic behavior of liquid water during removal from gas diffusion layer (GDL) of a PEMFC cathode electrode is simulated. Also, the effects of mixed wettability on the liquid water dynamic behavior distribution in the GDL and liquid water saturation within the GDL in steady state and transient are investigated. The results show that the best performance is obtained when the hydrophilic pores are placed closer to GDL-GC interface.

Keywords: Gas diffusion layer, Gas channel, Polymer electrolyte membrane fuel cell, Mixed wettability.

پدیده طغیان^۱شود[۵]. 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[۶] که باعث می‌شود آب مایع حفره‌های موجود در لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست قسمت کاتد را اشغال کرده و اکسیژن نتواند به‌طور مؤثر به لایه کاتالیست انتقال یابد که در نهایت منجر به کمبود واکنش‌دهنده و کاهش بازده می‌شود[۵]. 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 می‌یابد[۶]. یکی از مهم‌ترین موضوعات مدیریت آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون، انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز است[۶]. این لایه نقش بحرانی و مهمی در مدیریت آب دارد که باید تعادل بین حذف آب مایع و غشای آبدار را حفظ نماید[۷]. لایه انتشار گاز از فیبرهای کربن ساخته می‌شود و دارای ساختار متخلخل است. بیشترین و متداول‌ترین مواد مورد

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 ده‌های 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[۴]. پیل سوختی غشای مبادله پروتون از سه قسمت آند، کاتد و الکترولیت تشکیل شده است. قسمت کاتد و آند خود به سه ناحیه تقسیم می‌شوند: کانال گاز، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیست. مدیریت ضعیف آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون می‌تواند باعث ایجاد

¹ Flooding

می‌شود یعنی در هر ارتفاعی از محیط، نسبت آب مایع به فضاهای خالی محاسبه شده و به صورت نمودار $S-Y$ بیان می‌شود.

چن و همکارانش [۱۱] با استفاده از روش شبکه بولتزمن به بررسی رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز و کانال گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون پرداختند. آن‌ها اثرات مانع قرار گرفته در کانال را بر روی رفتارهای دینامیکی آب مایع و توزیع آن مورد بررسی قرار دادند و به این نتیجه رسیدند که در حالتی که دیواره‌های مانع آب‌گریز باشند آب مایع تمایل به تشکیل قطره‌ای دور از دیواره‌های مانع دارد. همچنین در این حالت مانع اثر کمی بر روی توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز و کانال گاز دارد. همچنین به این نتیجه رسیدند که اگر سطوح مانع آبدوست باشد باعث کاهش زمان موردنیاز برای رسیدن آب مایع از مرز مشترک لایه کاتالیست- لایه انتشار گاز به مرز مشترک لایه انتشار گاز - کانال گاز می‌شود. هاوو و چن [۱۲] به بررسی لایه انتشار گاز با توزیع خیسی غیریکنواخت پرداختند. برای این منظور ستونی در جهت ضخامت لایه انتشار گاز به طول ۲۰ گره و در وسط محیط قرار دادند. در بررسی آن‌ها زاویه تماس فیبرهای آبدوست 80° و زاویه تماس بقیه محیط 115° در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد که آب مایع برای هجوم خود از مسیرهای آبدوست استفاده می‌کند در حالی که بقیه مسیرها برای انتقال گازهای واکنش‌دهنده مورد استفاده قرار می‌گیرد. همچنین این مسیرهای آبدوست باعث کاهش اشباع آب مایع در نزدیکی لایه انتشار گاز می‌شود. سینها و وانگ [۱۳] از مدل شبکه حفره برای بررسی اثر توزیع زاویه خیسی بر روی رفتار انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز استفاده کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که در لایه انتشار گاز با خیسی سطح ترکیبی، آب مایع ترجیح می‌دهد که از میان حفره‌های آبدوست متصل به هم جریان یابد و فرم و ساختار حرکات انگشتی مربوط به لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز، متوقف می‌شود. کیم^۵ و همکارانش [۱۴] به بررسی انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز و لایه متخلخل میکرو پیل سوختی غشای مبادله پروتون پرداختند. روش مورد استفاده آن‌ها روش شبکه بولتزمن بوده و نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که محتوای آب مایع می‌تواند با آب‌گریزتر کردن سطوح یا استفاده از لایه متخلخل میکرو با ضخامت بیشتر کاهش یابد. جون^۶ و کیم [۱۵] اثر فشردگی لایه انتشار گاز را بر روی رفتار دینامیکی آب مایع به صورت عددی و آزمایشگاهی بررسی کردند. بررسی عددی با استفاده از روش شبکه بولتزمن انجام شده و نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که فشردگی لایه انتشار گاز به‌طور شدیدی بر روی انتقال آب مایع اثر می‌گذارد (در فشردگی کمتر، اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز کاهش می‌یابد).

مطالعات پیل سوختی به دو دسته ماکروسکوپی و میکروسکوپی تقسیم می‌شود. در بررسی ماکروسکوپی محیط به صورت همگن در نظر گرفته شده و فیبرهای کربن موجود در محیط مدل نمی‌شوند. از ویژگی‌های بررسی حاضر، میکروسکوپی بودن مطالعه است که اثرات غیرهمگن بودن محیط در آن در نظر گرفته شده و فیبرهای کربن مدل

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 پلی‌تترا-فلوئورواتیلن (PTFE) پوشانده می‌شود تا آب‌گریز شود [۶]. انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز به این صورت است که آب که غیر خیس‌کننده است، هوای خیس‌کننده را جابجا می‌کند. در این جابجایی نیروی موئینگی به دلیل دبی کم آب مایع و فضاهای خالی تنگ و باریک در لایه انتشار گاز حاکم است [۶]. عدد موئینگی نسبت نیروی لزجت 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 لزجت دینامیکی آب مایع، u سرعت آب مایع و σ کشش سطحی بین آب و هوا است. در شرایط کاری پیل سوختی غشای مبادله پروتون عدد موئینگی از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} است. همچنین نسبت لزجت $(M = \mu_{water} / \mu_{air})$ تقریباً برابر $17/5$ است. بر اساس دیاگرام فازی پیشنهاد شده توسط لنورمند^۱ [۸] و با توجه به مقادیر اعداد موئینگی و نسبت لزجت، رژیم حاکم بر حرکت سیال انگشتی موئینگی^۲ است. به‌طور کلی رابطه بین نیروی کشش سطحی، نیروی لزجت، 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 لزجت 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 [۶]. 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^{-9} و عدد وبر از مرتبه 10^{-11} است [۹]. 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 رفتار آب مایع را دارد و بقیه نیروها شامل نیروی لزجت، نیروی گرانش و نیروی اینرسی قابل صرف‌نظر کردن هستند [۹]. پس اثرات نسبت لزجت و نسبت چگالی بر روی انتقال دو فاز در لایه انتشار گاز می‌توانند با اطمینان صرف‌نظر شوند [۱۰].

یکی از پارامترهای بسیار مهم در شبیه‌سازی پیل سوختی، اشباع آب مایع است که به صورت نسبت حجم آب مایع به حجم فضای خالی تعریف می‌شود. این پارامتر بی‌بعد می‌تواند به دو صورت اشباع محلی و اشباع کلی بیان شود. منظور از اشباع کلی، محاسبه اشباع آب مایع در کل محیط مورد بررسی است یعنی نسبت حجم آب مایع در کل محیط به حجم فضای خالی کل؛ بنابراین نتایج اشباع آب مایع در حالت کلی می‌تواند به صورت نمودار $S-t$ بیان شود (در زمان‌های مختلف، اشباع کلی آب مایع را محاسبه کرده و به صورت یک نمودار برحسب زمان رسم کنیم). در حالت محلی اشباع آب مایع در Y ‌های مختلف محاسبه

³Hao and Cheng

⁴Sinha and Wang

⁵Kim

⁶Jeon

¹Lenormand

²Capillary fingering

شده‌اند. همچنین در این مطالعه اثر حضور هم‌زمان فیبرهای آبدوست و آب‌گریز بررسی شده و الگوی مناسب برای ترکیب این فیبرها بیان شده است. نتایج این مقاله شامل مطالعه تشکیل خوشه‌های آب مایع، زمان رسیدن به حالت پایا، بررسی محلی و کلی اشباع آب مایع و بررسی رفتار خوشه‌های آب مایع است. از جنبه‌های نوآوری این مقاله، بررسی اثر هم‌زمان استفاده از فیبرهای آبدوست و آب‌گریز در بهبود عملکرد پیل سوختی است که این کار با ارائه الگوی مناسب برای ترکیب فیبرهای آبدوست و آب‌گریز انجام شده است.

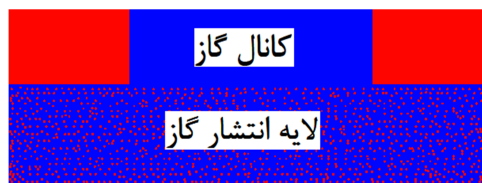
۲- هندسه مورد بررسی

در این مطالعه اثرات قابلیت خیسی 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 ۱ در نظر گرفته شده است.

شکل ۱- ناحیه محاسباتی مورد بررسی.

شکل ۱ بیانگر نمای کلی محیط مورد بررسی است. نواحی آبی‌رنگ نشان‌دهنده فضای خالی و نواحی قرمز رنگ نشان‌دهنده سطوح جامد است. بالای لایه انتشار گاز کانال گاز و صفحه دوقطبی قرار دارد. توجه شود که شکل سه بعدی مربوط به این ساختار به این صورت است که امتداد کانال گاز در جهت عمود بر صفحه کاغذ است یعنی آب مایع از پایین به بالا و هوا در جهت عمود بر صفحه جریان دارد. 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 $400 \mu\text{m}$ [۱۶] و یک کانال گاز به ارتفاع $300 \mu\text{m}$ به قسمت بالای لایه انتشار گاز اضافه شده است یعنی ضخامت کل محیط $700 \mu\text{m}$ است. ناحیه محاسباتی مستطیلی به ابعاد $700 \Delta x \times 2000 \Delta x$ است. در اینجا طول شبکه (گام شبکه) 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 $400 \Delta x$ ایجاد شده است. ذرات جامد دایره‌ای دارای قطر $10 \mu\text{m}$ [۱۶] در واحد شبکه بولتزمن بوده و ضریب تخلخل لایه انتشار گاز ایجاد شده برابر $0/88$ [۱۶] است. توجه شود که در روش شبکه بولتزمن واحدهای طول، زمان و جرم با μs ، lu و μm نشان داده می‌شود. زاویه

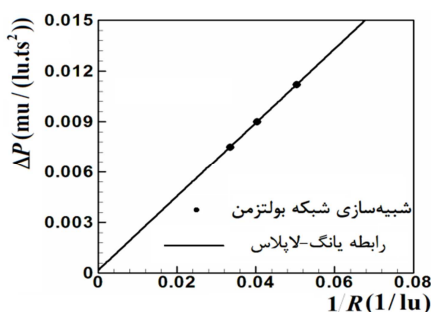
تماس سطوح جامد در لایه انتشار گاز برابر 145° [۱۰] و زاویه تماس سطوح کانال برابر 110° در نظر گرفته شده است. در مرز پایین ناحیه محاسباتی آب مایع با سرعت 10^{-5} lu/ts $7/877$ در واحد شبکه بولتزمن به درون لایه انتشار گاز تزریق می‌شود. عدد رینولدز در لایه انتشار گاز برابر $0/04725$ در واحد شبکه بولتزمن است. 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 لزجت صرف‌نظر کرد. طرح زو و هی^۱ [۱۷] 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 لزجت سینماتیکی است. همچنین مقدار عدد مویینگی در شبیه‌سازی حاضر برابر $10^{-5} \times 6$ است که برای اطمینان از حاکم بودن نیروی مویینگی 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. شبیه‌سازی انجام شده در این مقاله به صورت عددی و با استفاده از روش شبکه بولتزمن است. در این روش برای مدل‌سازی جریان‌های دوفازی مدل‌های مختلفی ارائه شده است. مدل مورد استفاده در این مطالعه، مدل شان و چن دو جزئی^۲ (SC) است. در این مدل دو فاز مختلف در اثر تقابل بین مولکول‌های سیال ایجاد شده و برای بیان هر فاز از یک تابع توزیع چگالی استفاده می‌شود. تقابل بین مولکول‌های سیال دارای ضریبی به نام قدرت اثر متقابل سیال-سیال است که با تغییر آن می‌توان کشش سطحی بین دو فاز را تغییر داد. همچنین در این روش برای بیان مرز جامد، کنترل قابلیت خیسی سطح (زاویه تماس سطح) و شبیه‌سازی مرز مشترک سیال-جامد، نیروی اثر متقابل بین مولکول‌های سیال و جامد مدل می‌شود. این نیرو دارای ضریبی به نام قدرت اثر متقابل سیال-جامد است که با تغییر آن می‌توان زاویه تماس سطح را تغییر داد. از ویژگی‌های این روش سادگی و اعمال آسان آن است. همچنین بیشتر شبیه‌سازی‌های انجام شده با روش شبکه بولتزمن بر اساس این مدل است. در این روش، جریان به صورت مجموعه‌ای از ذرات ساختگی در نظر گرفته شده که روی گره‌های ساختار شبکه قرار دارند. برای شبیه‌سازی



شکل ۱- ناحیه محاسباتی مورد بررسی.

^۱Zou and He
^۲Shan-and-Chen

فشار داخل و P_2 فشار خارج قطره است [۲۱]. همچنین R شعاع قطره در حالت نهایی است که جایی در نظر گرفته می‌شود که چگالی سیال یک و دو با هم برابر باشند. ناحیه محاسباتی 101×101 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 ρ_1 چگالی گاز و ρ_2 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 $1/R$ در شکل ۲ رسم شده است.



شکل ۲- تغییرات برحسب ΔP و $1/R$.

نقاط جامد نشان داده شده در 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 ۲ برابر کشش سطحی است که مقدار $0.718849 \mu / (ts^2)$ در واحد شبکه بولتزمن است. تطابق خوب بین نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمن و معادله لاپلاس درستی برنامه مورد استفاده را تأیید می‌کند.

۳-۲- آزمون قطره ساکن

آزمون زاویه تماس قطره ساکن مربوط به پارامتر قدرت اثر متقابل سیال - جامد است. برای این منظور یک نیم قطره از مایع در غیاب هرگونه نیروی حجمی در مرکز هندسی دیوار پایین قرار گرفته شده است. 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 پارامترهای شعاع قطره R ، ارتفاع آن a_0 و طول خیس‌کنندگی آن b_0 ، زاویه تماس را می‌توان با استفاده از رابطه زیر تعیین کرد [۲۲]:

$$\tan(\theta) = \frac{b_0}{2(R - a_0)}, R = \frac{a_0}{2} + \frac{b_0^2}{8a_0} \quad (1)$$

رابطه بین زاویه تماس اندازه‌گیری شده و $G_{ads,1}$ در شکل ۳ نشان داده شده است.

می‌توان از شبکه‌های مختلفی استفاده کرد. در این بررسی از شبکه D_2Q_9 استفاده شده، یعنی وقتی بین ذرات ساختگی برخورد رخ می‌دهد، ذرات در نه جهت می‌توانند جاری شوند. مراحل شبیه‌سازی شبکه بولتزمن شامل: اعمال شرایط اولیه، اعمال مرحله برخورد، اعمال مرحله جاری شدن و اعمال شرایط مرزی است که تا رسیدن به حالت پایا ادامه می‌یابد. بر اساس توضیحات بیان شده در بخش مقدمه، چگالی آب و هوا و همچنین لزجت آن‌ها به‌طور دلخواه و برابر در نظر گرفته شده‌اند. در روش شان و چن اگر اختلاف چگالی یا اختلاف لزجت بین دوفاز خیلی زیاد باشد، شبیه‌سازی عددی ممکن است ناپایدار شود [۱۸]. کوزمین^۱ و همکارانش [۱۹] نشان دادند که در غیاب هرگونه مرز جامد، وقتی آزمون قطره ساکن انجام شود، نسبت‌های چگالی به مقادیر کمتر از ۶۰ - ۸۰ محدود است. همچنین نبوتی^۲ [۲۰] به این نتیجه رسید که در حضور جریان سیال و مرزهای جامد، محدوده پایداری نسبت چگالی به‌طور چشمگیری به مقدار کمتر از ۱۰ کاهش می‌یابد. نسبت چگالی عمدتاً به دلیل بالا بودن عدد ماخ جریان کاذب (سرعت‌های کاذب) در مرز مشترک دو فاز محدود است. این عامل باعث ایجاد ناپایداری‌های عددی در روش شان و چن می‌شود؛ بنابراین، یکسان بودن چگالی دوفاز و همچنین لزجت 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 $1 \mu / (lu^3)$ در نظر گرفته شده است. توجه شود که فرض مقادیر دلخواه برای نسبت‌های چگالی و لزجت در مطالعه حاضر، در شبیه‌سازی‌های دوفازی پیشین نیز انجام شده است [۱، ۵، ۶، ۹، ۱۰، ۱۶ و ۱۸].

برای تأیید درستی برنامه نوشته شده برای این مطالعه، 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.

۳- اعتبارسنجی

۳-۱- آزمون قطره

برای ارزیابی دقت برنامه عددی مورد استفاده یک قطره از سیال، درون سیال دیگر قرار گرفته شده است. 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

^۱Kuzmin

^۲Nabovati

ج- حرکت رو به عقب برخی از خوشه‌ها

با مقایسه بین شکل‌های ۴(ح) و ۴(خ) مشخص است که رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده است درحالی‌که برخی شاخه‌های این خوشه در جهت عقب در حال پیشروی هستند.

د- رسیدن برخی از خوشه‌ها به کانال گاز

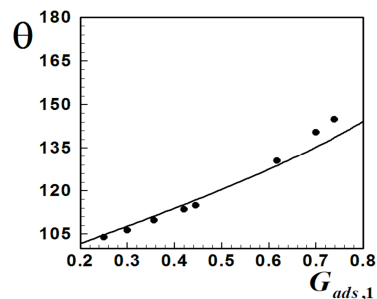
در زمان ۱۱۷۰۰۰۰ رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده است. به علت توقف رشد خوشه B در همین زمان، آب مایع مسیر خوشه B را برای حرکت خود به سمت کانال انتخاب نکرده و از میان خوشه ۷ به حرکت خود ادامه می‌دهد. این موضوع باعث رشد مجدد خوشه ۷ به سمت کانال گاز شده و باعث می‌شود آب مایع از میان این خوشه خود را به کانال گاز برساند.

ه- تشکیل حلقه‌های بسته

خوشه‌های آب مایع متصل شده تشکیل حلقه می‌دهند. هر چه عمل اتصال بین خوشه‌ها دیرتر صورت گیرد، حلقه تشکیل شده بزرگ‌تر خواهد بود. همچنین سیال جابجا شده (هوا) بین حلقه‌های ایجاد شده در اثر رشد خوشه‌ها به دام می‌افتد (شکل ۴(خ)) 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.

در شکل ۵ تغییرات توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز با استفاده از نمودار اشباع آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی مورد بررسی قرار گرفته شده است. توجه شود که برای رسم نمودار ۵ 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 ۵ توزیع اشباع محلی آب مایع در لایه انتشار گاز برای زاویه ۱۴۵° در زمان ۱۵۰۰۰۰۰ به حالت پایای خود رسیده است (تغییرات اشباع آب مایع محلی در لایه انتشار گاز با گذشت زمان ناچیز است) و 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 در حال افزایش است.

در این قسمت به مطالعه ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز پرداخته شده و اثر آن بر روی زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا، زمان لازم برای رسیدن خوشه‌های آب مایع به کانال گاز و اشباع آب مایع بررسی می‌شود. حالتی که کل لایه انتشار گاز دارای زاویه تماس ۱۴۵° است را حالت یک در نظر می‌گیریم. برای ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز دو الگو در نظر گرفته شده است (حالت دو و سه). در الگوی اول (حالت دوم) اثر آب‌دوست شدن فیبرهایی که نزدیک مرز لایه انتشار گاز- کانال گاز ($351 < y < 401$) هستند بررسی شده و در الگوی دوم (حالت سوم) اثر آب‌دوست شدن فیبرهایی که نزدیک مرز لایه کاتالیست- لایه انتشار گاز ($101 < y < 151$) قرار دارند مورد مطالعه قرار گرفته است. شکل‌های ۶ و ۷ توزیع آب مایع مربوط به این دو الگو را نشان می‌دهد. با توجه به این دو شکل، تعداد خوشه‌های مؤثر آب مایع ۷ تا است یعنی آب‌دوست کردن قسمتی از محیط تعداد خوشه‌های مؤثر را تغییر نداده است.



شکل ۳- زاویه تماس به صورت تابعی از قدرت اثر متقابل سیال جامد

هانگ و همکارانش^۱ [۲۳] برای محاسبه زاویه تماس در مدل شبکه بولتزمن چندفازی و چند مؤلفه‌ای شان و چن رابطه‌ای ارائه دادند. در شکل ۳ 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] مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل ۳ نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمن تطابق بسیار خوبی با این رابطه دارند. پس روش شبکه بولتزمن 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.

۴- نتایج

شکل ۴ توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس ۱۴۵° و در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی را نشان می‌دهد. با توجه به شکل ۴(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 مؤثر نامیده می‌شوند) گسترش می‌یابند. این خوشه‌ها به ترتیب با اندیس‌های ۱ تا ۷ در شکل ۴(ث) 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 ۴(خ) مشخص است خوشه‌های آب مایع ۱ و ۲ در لایه انتشار گاز به هم متصل شده و خوشه جدیدی تشکیل می‌دهند که با A نمایش داده شده است. همچنین خوشه‌های ۳ و ۴ به هم متصل شده و خوشه B را تشکیل می‌دهند (شکل ۴(ح)). با توجه به شکل ۴ نکات زیر را می‌توان استخراج کرد (زمان‌های ارائه شده در واحد شبکه بولتزمن است):

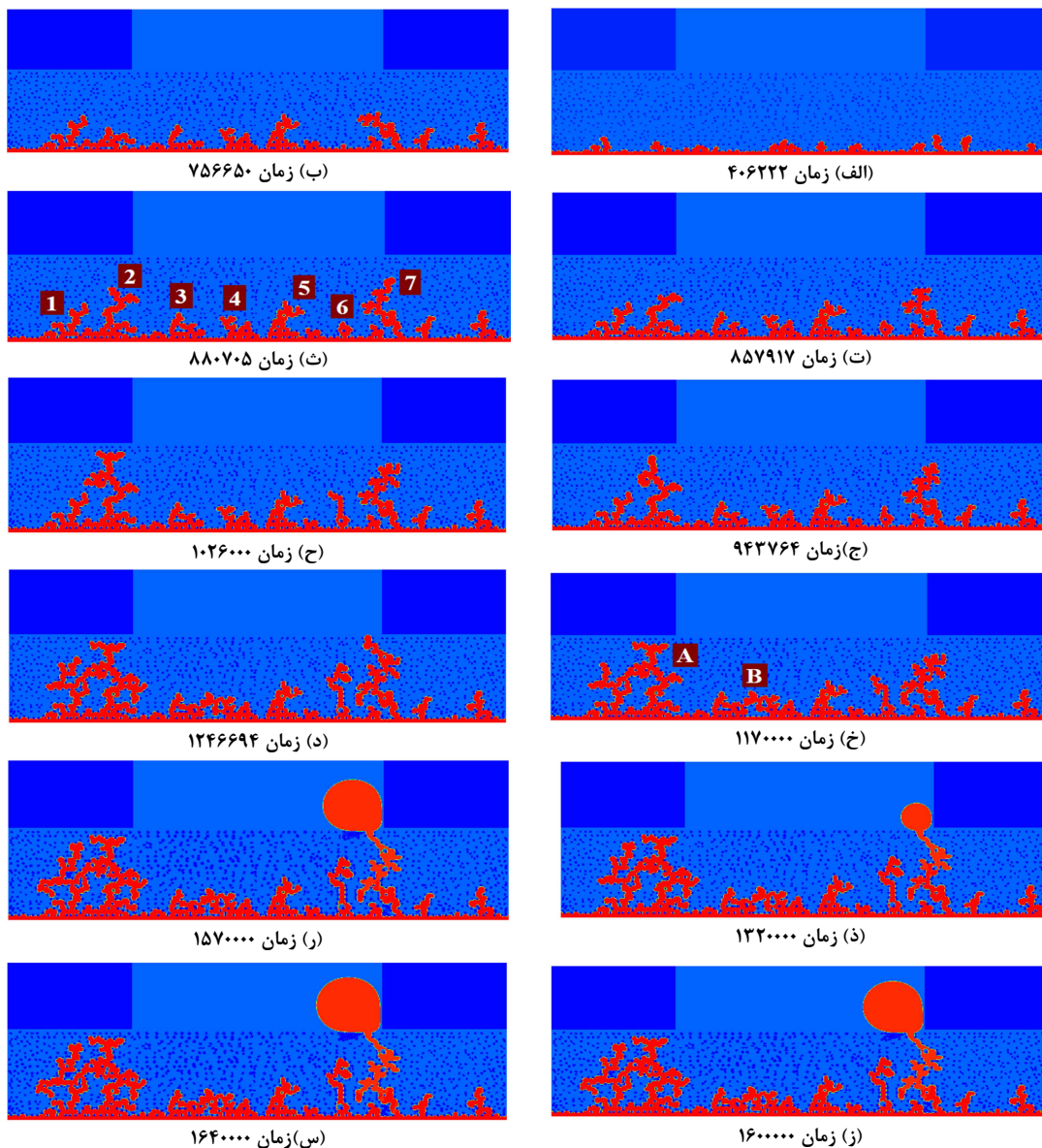
الف- توقف رشد برخی از خوشه‌ها

در زمان‌های ۱۲۴۶۶۹۴، ۷۵۶۶۵۰ و ۱۳۲۰۰۰۰ رشد خوشه‌های ۵، ۶ و ۷ متوقف شده است (به ترتیب شکل‌های ۴(ب)، ۴(د) و ۴(ذ)).

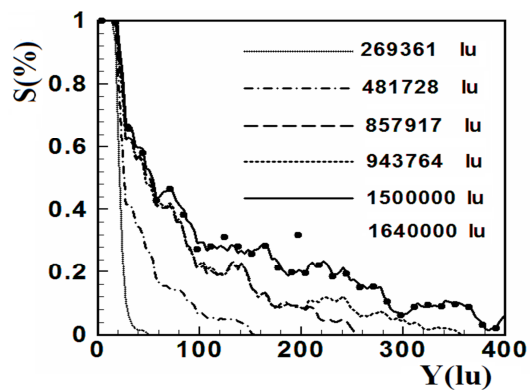
ب- اتصال برخی از خوشه‌ها

خوشه‌های ۳ و ۴ در زمان 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 ۴(ح)).

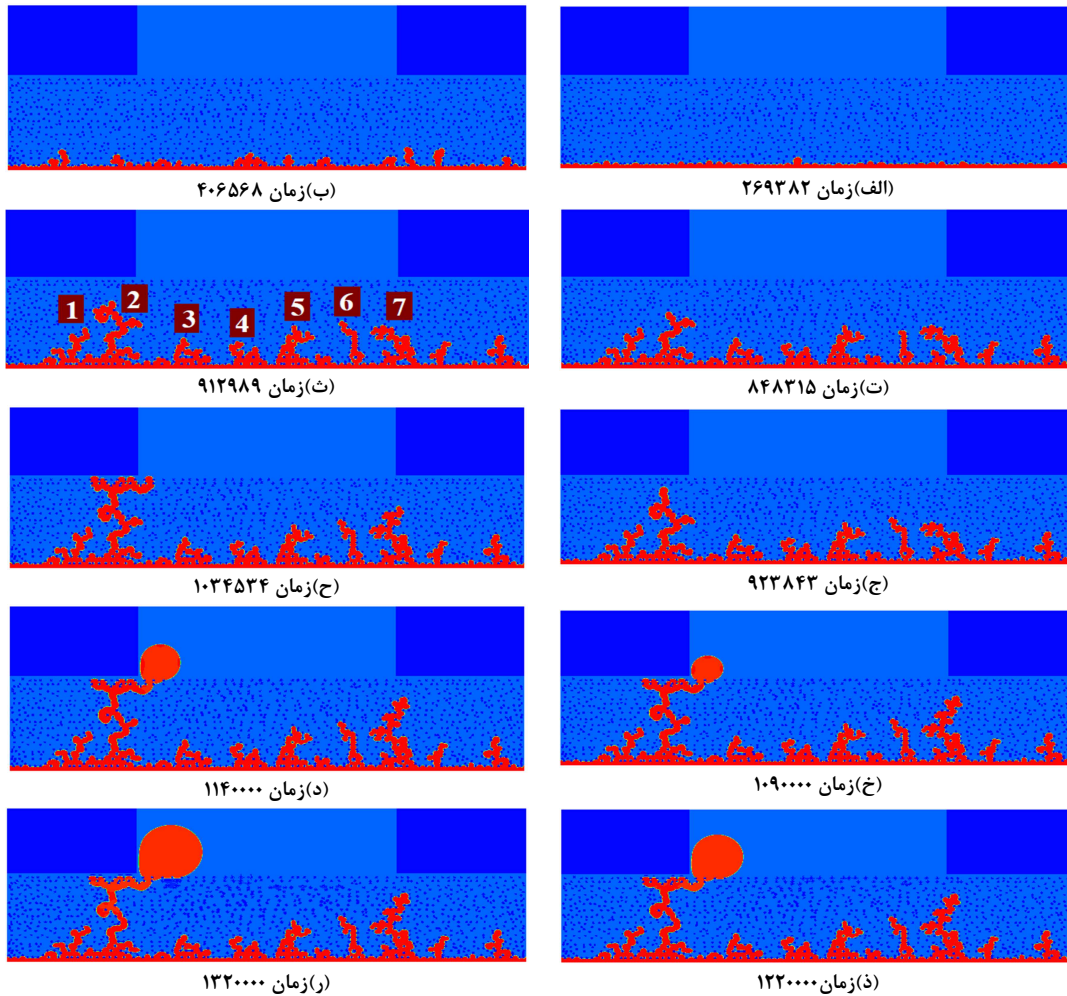
¹ Huang et al



شکل ۴- بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس 145°



شکل ۵- اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی در زاویه تماس 145°

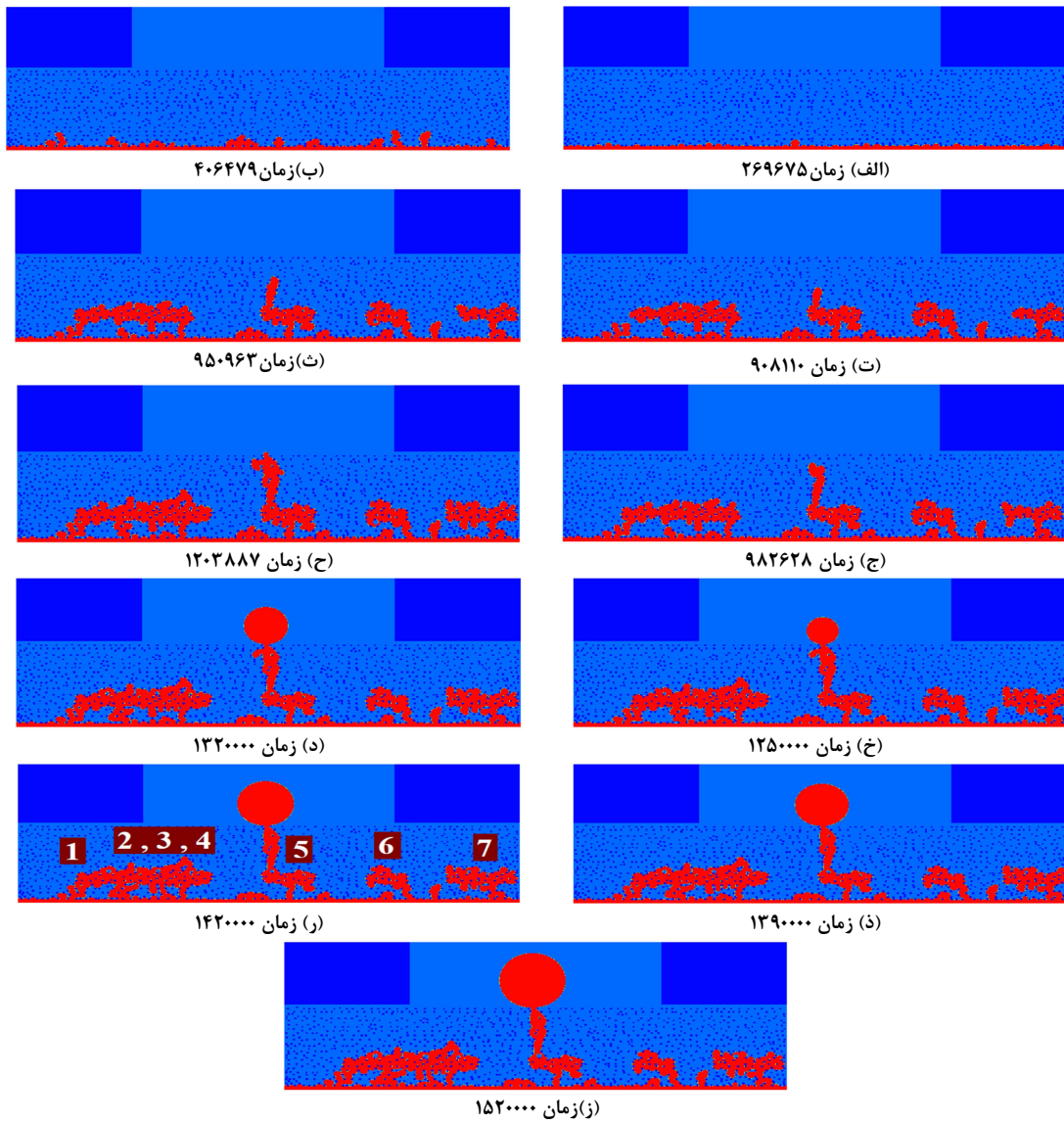


شکل ۶- بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس 145° که ناحیه $(351 < y < 401)$ آب‌دوست شده است

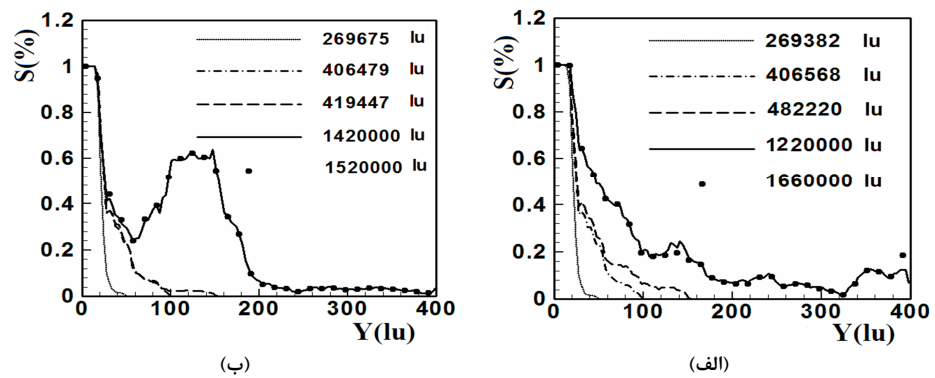
می‌دهد که در حالتی که فیبرهای آب‌دوست در مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال قرار بگیرند، اشباع کلی آب مایع $18/7$ درصد نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه 145° کاهش می‌یابد. وقتی اولین خوشه آب مایع به ناحیه آب‌دوست می‌رسد (بخش (f)) از نمودارهای ۶ و ۷، فیبرهای آب‌دوست از طریق این خوشه شروع به جذب آب مایع کرده و باعث ایجاد یک حوضچه در این محل می‌شوند. با توجه به توزیع حالت پایایی آب مایع (شکل ۶(ذ) و ۷(ر)) در لایه انتشار گاز مشخص است که آب مایع موجود در ناحیه آب‌دوست در حالت سوم بیشتر است یا به عبارتی در حالتی که فیبرهای آب‌دوست در فاصله بیشتری از کانال گاز قرار بگیرند حوضچه آب مایع پر آب‌تر شده، حجم بیشتری را اشغال کرده و اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز افزایش می‌یابد. علت این است که در حالتی فیبرهای آب‌دوست در فاصله بیشتری از کانال گاز قرار بگیرند، ممکن است خوشه‌های آب مایع بیشتری خود را به حوضچه برسانند و حوضچه آب مایع حجم زیادی از لایه انتشار گاز را اشغال کند. پس هر چه ناحیه آب‌دوست نزدیک کانال گاز باشد بهتر است.

نمودار اشباع آب مایع برای این دو حالت در شکل ۸ رسم شده است که با توجه به شکل زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا برای حالتی که ناحیه $(351 < y < 401)$ آب‌دوست شده برابر $1220000 (18/67)$ درصد کاهش نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه 145° و برای حالتی که ناحیه $(101 < y < 151)$ آب‌دوست شده برابر $1420000 (5/3)$ درصد کاهش نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه 145° است. همچنین در حالت دوم زمان رسیدن آب مایع به کانال گاز $1034534 (17)$ درصد کاهش زمان نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه 145° و در حالت سوم برابر $1203887 (3/5)$ درصد کاهش زمان نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه 145° است.

حال در این قسمت به بررسی اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز می‌پردازیم (شکل ۹). در این شکل حالت اول یعنی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه 145° و حالت دوم و سوم به ترتیب حالت‌هایی است که ناحیه $(351 < y < 401)$ و $(101 < y < 151)$ آب‌دوست شده است. مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا برای این سه حالت به ترتیب برابر $0/2703$ ، $0/2197$ و $0/2508$ است. نتایج نشان

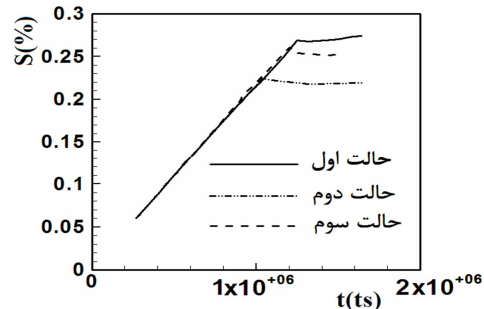


شکل ۷- بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه تماس 145° که ناحیه $(101 < y < 151)$ آبدوست شده است



شکل ۸- اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (الف: ناحیه $(351 < y < 401)$ از محیط آبدوست شده و ب: ناحیه $(101 < y < 151)$ آبدوست شده است)

- [7] Li H., Tang Y., Wang Z., Shi Z., Wu S., Song D., Zhang J., Fatih K., Zhang J., Wang H., Liu Z., Abouattallah R. and Mazza A., A review of water flooding issues in the proton exchange membrane fuel cell. *Journal of Power Sources*, vol.178(1), PP. 103-117, 2008.
- [8] Lenormand R., Numerical Models and Experiments on Immiscible Displacements in Porous Media. *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 189, pp. 165-118, 1988.
- [9] Mukherjee P.P., Wang C.Y. and Kang Q., Mesoscopic Modeling of Two Phase Behavior and Flooding Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cells. *ElectrochimicaActa*, vol. 54, pp. 6861-6875, 2009.
- [10] Hao L. and Cheng P., Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell. *Journal of Power Sources*, 195, pp. 3870-3881, 2010.
- [11] Chen L., Luan H.B. and Tao W.Q., liquid water dynamic behaviors in the GDL and GC of PEMFCS using lattice Boltzmann method. *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)*, 1, 023002, 2010.
- [12] Hao L. and Cheng P., Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell. *J. Power Sources* 195, pp. 3870-3881, 2010.
- [13] Sinha P.K. and Wang C.Y., Liquid water transport in a mixed-wet gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell. *Chemical Engineering Science* 63, pp. 1081 - 1091, 2008.
- [14] Kim K.N., Kang J.H., Lee S.G., Nam J.H. and Kim C.J., 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.
- [15] Jeon D.H., and Kim H., Effect of compression on water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cell using lattice Boltzmann method. *Journal of Power Sources*, vol. 294, pp. 393-405, 2015.
- [16] Jeon D.H. and Kim H., 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, pp. 393-405, 2015.
- [17] Zou Q. and He X., On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model. *Physics of Fluids*, 9, pp. 1591-1598, 1997.
- [18] Puneet K., Sinha P., Mukherjee P. and Wang C.Y., Impact of GDL Structure and Wettability on Water Management in Polymer Electrolyte Fuel Cells. *J. Mater. Chem*, vol. 17, pp. 3089-3103, 2007.
- [19] Kuzmin A., Mohamad A.A. and Succi S., Multi-relaxation time lattice Boltzmann model for multiphase flows. *International Journal of Modern Physics C*, vol. 19(6), pp. 875-902, 2008.
- [20] Nabovati A., pore level simulation of single and two phase flow in porous media using lattice Boltzmann method. PhD thesis, 2009.
- [21] Dong B., Yan Y.Y., Li W.Z. and Song Y.C., Simulation of the Influence of Surface Wettability on Viscous Fingering Phenomenon in Porous Media. *Journal of Bionic Engineering*, 7 pp. 267-275, 2010.
- [22] Dullien F.A.L., *Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*. Academic Press, San Diego, CA. 1992.
- Huang H., Thorne D.T.J.r., Schaap M.G. and Sukop M.C., Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models. *PHYSICAL REVIEW E*, 76, 066701, 2007.



شکل ۹- اشباع کلی آب مایع برای حالت‌های مختلف

۵- نتیجه‌گیری

در این مطالعه به بررسی اثر ترکیب فیبرهای آبدوست و آب‌گریز بر روی مدیریت آب مایع در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون پرداخته شده است. برای این منظور لایه آبدوستی به ضخامت ۵۰ میکرومتر یک‌بار در قسمت پایین و یک‌بار در قسمت بالای محیط اضافه شده است. نتایج نشان می‌دهد که فیبرهای آبدوست تمایل به جذب آب مایع داشته و یک حوضچه آب مایع در محل قرارگیری فیبرهای آبدوست تشکیل می‌دهند. همچنین نتایج اشباع کلی آب مایع، اشباع محلی آب مایع و زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا نشان می‌دهد که هر چه ناحیه آبدوست به مرز مشترک لایه انتشار گاز - کانال گاز نزدیک‌تر باشد بهتر است چون در این صورت به دلیل اینکه خوشه‌های کمتری می‌توانند به حوضچه آب مایع برسند اشباع آب مایع کاهش می‌یابد (در حالتی که فیبرهای آبدوست در مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز باشند اشباع کلی آب مایع ۱۸/۷ درصد نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه ۱۴۵° کاهش می‌یابد). همچنین زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا نیز کاهش یافته (در حالتی که فیبرهای آبدوست در مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز باشند زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا ۱۸/۶۷ درصد نسبت به لایه انتشار گاز آب‌گریز با زاویه ۱۴۵° کاهش می‌یابد) و مدیریت آب مایع در لایه انتشار گاز بهبود می‌یابد.

۶- مراجع

- [1] Molaeimanesh G. and Akbari M.H., Water droplet dynamic behavior during removal from a proton exchange membrane fuel cell gas diffusion layer by Lattice-Boltzmann method. *Korean J. Chem. Eng*, 31(4), PP. 598-610, 2014.
- [2] O'Hayre R., Cha S.W., Colella W. and Prinz F.B., *Fuel Cell Fundamentals*. Second ed., John Wiley & Sons, 2009.
- [3] Wang C.Y., Fundamental models for fuel cell engineering. *Chem. Rev*, 104, PP. 4727-4766, 2004.
- [4] Larminie J. and Dicks A., *Fuel Cell Systems Explained*. John Wiley & Sons Ltd., New York, 2003.
- [5] Chen L., Luan H.B. and Tao W.Q., Liquid water dynamic behaviors in the GDL and GC of PEMFCS using lattice Boltzmann method. *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)*, 1, 023002, 2010.
- [6] Chen L., Luan H.B., He Y.L. and Tao W.Q., Numerical Investigation of Liquid Water Transport and Distribution in Porous Gas Diffusion Layer of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Lattice Boltzmann Method. *Published in Russian in Elektrokhimiya*, Vol. 48, No. 7, pp. 786-800, 2012.