



1-1- Two Phase Simulation of Droplets Motion in Cathode Channels and Manifolds of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell

S. H. Masrouri Saadat^{1*}, M. Rahimi-Esbo¹, M. Shams², M. Ghassemi²

¹ Malek Ashtar University of Technology, Tehran, Iran.

² Faculty of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

ABSTRACT: Polymer electrolyte membrane fuel cell with a combination of oxygen and hydrogen and production of water converts the chemical energy of the fuel directly and through an electrochemical reaction to electrical energy. One of the most crucial issues for commercializing this technology is water management. In the present study, the motion of liquid droplets that emerged in the gas flow channels with inlet and outlet manifolds is investigated. Due to the small dimensions of these channels, the balance of surface adhesion and other dynamic forces influence the flow of fluid, therefore, the semi-empirical Hoffman model with a two-phase flow method for simulating physics in an applied geometry including gas flow manifolds are used. The effect of tapering the manifold cross-section on the liquid water droplets is also investigated. The physical model used for the dynamic contact angle is validated with data from an experimental study. Simulation results show that by changing the geometry of the input and output manifolds, the problem created in conventional geometry, which causes the obstruction of the last channel due to the accumulation of liquid water, will be resolved, thereby improving the geometry will improve the water management in the channels.

Review History:

Received: 1 Oct. 2018

Revised: 20 Nov. 2018

Accepted: 4 Feb. 2019

Available Online: 28 Feb. 2019

Keywords:

PEM fuel cell

Water management

Two-phase flow

Droplet motion

Dynamic contact angle

1- Introduction

Fuel cell technology in which hydrogen and oxygen during a chemical reaction convert into electricity and heat is one of the best options for generating electrical energy in the future. But similar to all growing technologies, there are some challenges toward development of its social penetration. One of the most important issues that many researchers are engaged with is the management of liquid water in the fuel cell [1]. Some researchers [2] have proposed efficient techniques for preventing liquid water to be emerged in the fuel cell entrance manifold and consequently to fuel cell gas channels. However, since the appearance of liquid water in the gas flow field is unavoidable, it is necessary to examine the dynamics and behavior of water and the effects of this movement in the fuel cell [3]. Therefore, in the present work, after validating the applied model with related experimental data, the dynamic behavior of liquid droplets in a common gas flow field is investigated. The dynamic contact angle of droplets is considered using the Huffman function model, which considers physical and fluid flow characteristics and was neglected in previous studies. Also, the motion of the droplet dynamics in applied geometry, which includes manifolds of gas flow field in Polymer Electrolyte Membrane (PEM) fuel cell, has been studied. Finally, a novel design for improving liquid water management in the manifolds of gas flow field is introduced.

2- Numerical Methodology

Because of the nature of the two-phase flow that concerned

with this problem, the volume of fluid method has been used to solve the governing equations [3]. This method is used to simulate the flow regime with unmixable fluids in an unsteady state flow. The key feature of this technique is its ability to take into account the effects of surface tension. Huffman function [5] is used as the model of the contact angle or the hysteresis of the contact angle. First, the value of capillary number is calculated using the liquid phase properties and the contact line speed of this phase from Eq. (1).

$$Ca = \frac{\mu V}{\sigma} \quad (1)$$

Then the dynamic contact angle is obtained as an indicator of the dynamic effects of flow based on the capillary number and static contact angle as an index of surface adhesion effects as follows:

$$\theta_D = f_{Hoff} [Ca + f_{Hoff}^{-1}(\theta_e)] \quad (2)$$

where Hoffman function is defined as Eq. (2):

$$f_{Hoff}(x) = \arccos \left\{ 1 - 2 \tanh \left[5.16 \left(\frac{x}{1 + 1.31x^{0.99}} \right)^{0.706} \right] \right\} \quad (3)$$

The written code estimates the numerical value of the inverse Huffman function by using the value of the static contact

*Corresponding author's email: hsaadat@mut.ac.ir



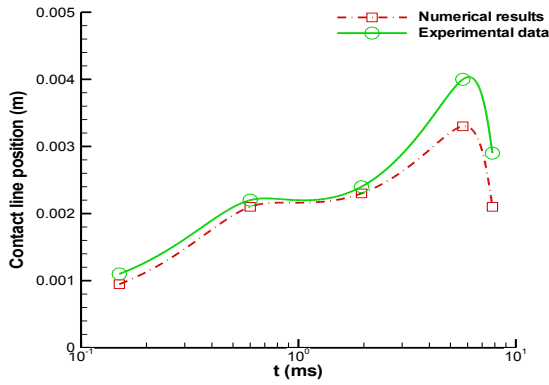


Fig. 1. Validation with experimental data

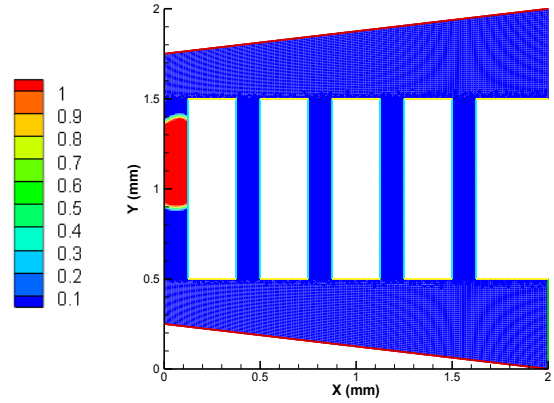


Fig. 3. Moving of droplets in the corrected flow field

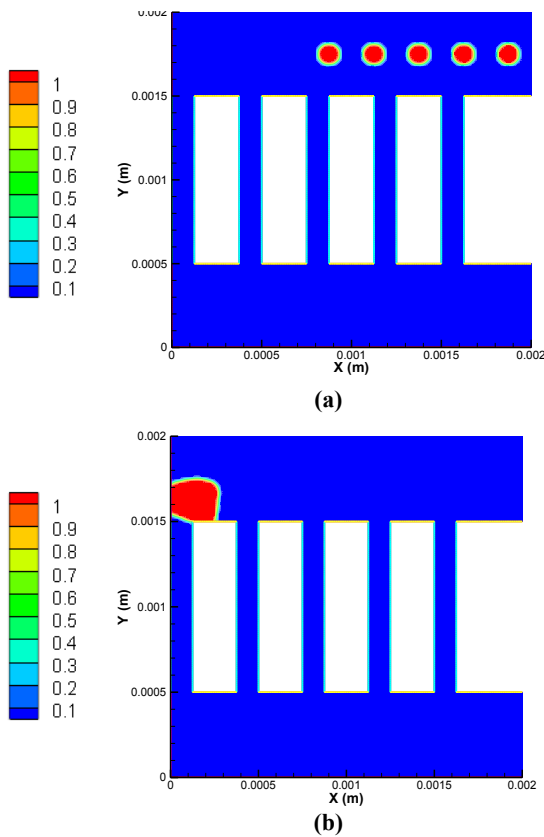


Fig. 2. Moving of five droplets in the initial flow field

angle, then it sums obtained amount with the value of capillary number so the dynamic contact angle is estimated and the boundary condition of the wall in the code will be applied. Of course, regarding the transient nature of the problem, the above-mentioned process must be iterated at each step to update the new value of dynamic contact angle.

3- Results and Discussion

First, according to the work carried out in reference [4] and the preliminary speculation of the limits of suitable grid density, the dependency of the numerical grid was

investigated. Then, in order to ensure the correctness of the simulation and the applied model, the results were validated with the results presented in Ref. [5]. In Fig. 1, the result of this process is presented in the form of a comparison of the position of the contact line position for the experimental data and simulation performed by implementing the Hoffman function for the effect of the contact angle hysteresis as the boundary condition of walls and the volume of fluid method for the two-phase model. As can be seen, the results initially are in good agreement with experimental data, but in continue a limited difference emerges. The most important factor makes this difference caused is the difference between the two-dimensional simulation and the actual three-dimensional conditions in the experiment.

Figures 2 and 3 show the initial and modified geometries of the problem, respectively. Figure 2a shows the initial arrangement and Fig. 2b shows the final state of droplets. After moving a little towards the end of entrance manifold, single droplets stick to each other and form a larger one. This larger droplet moves toward the last channel by encountering the wall opposite the manifold. As a result, this large droplet does not have the ability to pass through the channels. That is, the last channel is blocked. Naturally, this problem will exacerbate flooding if water continues to flow into the structure. This led to the idea of a new design of the flow field.

The flow of five drops in the modified geometry is shown in Fig. 3. The expansion and contraction ratio is considered 0.5 in both input and output manifolds. It can be seen that the geometric modification changes the behavior of the formed droplet. It should be noted that the modification of geometry in both the inlet and outlet manifolds causes this function, and if the geometry of each of them is changed lonely, the problem of channel obstruction will remain. On the other hand, the slope created in the manifold should be in the direction of the movement of the fluid.

4- Conclusions

The gas-liquid two-phase flow of five pre-embedded droplets in parallel straight channels with the inlet and outlet manifolds is simulated. For this purpose, the mass and momentum conservation equations are solved using the volume of fluid method and considering the Hoffman function

for modeling the dynamic contact angle. The results show that in the moving of five drops in the flow field of parallel channels and common geometry of manifolds, with merging of droplets and increasing the diameter of them, the dynamic of their motion in the flow field is changed and due to the effects of surface tension, the last channel gets blocked. But by changing the geometry of the input and output manifolds, the problem will resolve. As a result, improving geometry improves water management in the flow field.

References

- [1] Ali Bozorgnezhad, Mehrzad Shams, Homayoon Kanani, Mohammadreza Hasheminasab, Goodarz Ahmadi, Two-phase flow and droplet behavior in micro channels of PEM fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(42),2016, pp 19164-19181.
- [2] Tommy Skiba, Christopher John Carnevale, Fuel Cell Gas Inlet Manifold Drain, US 20155/0099201.
- [3] Ashrafi, M., Shams, M., Bozorgnezhad, A., & Ahmadi, G. (2016). Simulation and experimental validation of droplet dynamics in micro channels of PEM fuel cells. *Heat and Mass Transfer*, 52(12), 2671– 2686.
- [4] E. Shirani, S. Masoomi, Deformation of a droplet in a channel flow. *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 5 (2008) 041008.
- [5] S. Sikalo, E. Ganic, “Phenomena of droplet–surface interactions”, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 31 (2006) 97–110.



شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی دوفازی از حرکت قطره در میدان جریان و منی‌فولد سمت کاتد پیل سوختی پلیمری

سید حسین مسروری سعادت^{۱*}، مظاهر رحیمی اسبویی^۱، مهرزاد شمس^۲، مجید قاسمی^۲

^۱ دانشگاه صنعتی مالک اشتر، تهران، ایران.

^۲ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۷/۰۷/۰۹

بازنگری: ۱۳۹۷/۰۸/۲۹

پذیرش: ۱۳۹۷/۱۱/۱۵

ارائه آنلاین: ۱۳۹۷/۱۲/۰۹

کلمات کلیدی:

پیل سوختی پلیمری

مدیریت آب

جریان دوفاز

حرکت قطره

زاویه تماس دینامیک

خلاصه: پیل سوختی پلیمری با ترکیب اکسیژن و هیدروژن و تولید آب، انرژی شیمیایی سوخت را بطور مستقیم و طی یک واکنش الکتروشیمیایی به انرژی الکتریکی تبدیل می‌کند. از مهم‌ترین موانع تجاری‌سازی این فناوری، مشکلات مربوط به مدیریت آب می‌باشد. در کار حاضر به بررسی فرایند حرکت قطرات شکل گرفته در کانال‌های جریان گاز به همراه منی‌فولدهای ورودی و خروجی پرداخته شده است. با توجه به ابعاد کوچک این کانال‌ها، توازن نیروهای موثر بر حرکت جریان مایع به سمت چسبندگی سطحی می‌باشد، بنابراین از مدل نیمه‌تجربی هافمن به همراه روش عددی دوفاز حجم سیال برای شبیه‌سازی فیزیک مساله در یک هندسه کاربردی شامل منی‌فولدهای توزیع‌کننده جریان گاز استفاده شده است. اثر شیب‌دار کردن مقطع منی‌فولد بر دفع قطرات آب مایع نسبت به حالت مستقیم نیز مورد بررسی قرار گرفته است. مدل فیزیکی بکارگرفته شده برای زاویه تماس دینامیک با داده‌های حاصل از یک مطالعه آزمایشگاهی اعتبارسنجی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که با تغییر هندسه منی‌فولدهای ورودی و خروجی مشکل ایجاد شده در هندسه متداول که موجب انسداد کانال انتهایی ناشی از تجمع آب مایع می‌شود برطرف شده و در نتیجه، اصلاح هندسه سبب بهبود مدیریت آب در کانال‌ها خواهد شد.

۱- مقدمه

فناوری پیل سوختی که در آن هیدروژن طی واکنش شیمیایی با اکسیژن به الکتریسیته و حرارت تبدیل می‌شود، یکی از بهترین گزینه‌های تولید انرژی الکتریکی در آینده محسوب می‌گردد. پیل‌های سوختی پلیمری دارای پتانسیل مناسب برای جایگزینی یا اتصال هیبریدی به توربین‌های گازی، موتورهای احتراق داخلی و تکنولوژی باتری هستند.

لزوم جهت‌دهی فعالیت‌های مدل‌سازی و شبیه‌سازی، به سوی پاسخگویی به نیازهای جاری توسعه پیل سوختی پلیمری و حل موانع علمی و صنعتی موجود کاملاً احساس می‌گردد. این نیازها بطور نسبتاً جامعی مستندسازی شده و در دسترس می‌باشند [۱]. بطور خلاصه، چهار حوزه اصلی در باب نیازهای توسعه‌ای پیل‌های سوختی پلیمری به شرح زیر می‌باشد:

- کاهش قیمت مواد و هزینه تولید اجزاء (سوخت، کاتالیست‌ها، لایه نفوذ گاز، غشاء تبادل پروتون، صفحات دوقطبی)
- بهبود نرخ افت بازده در زمان بکارگیری

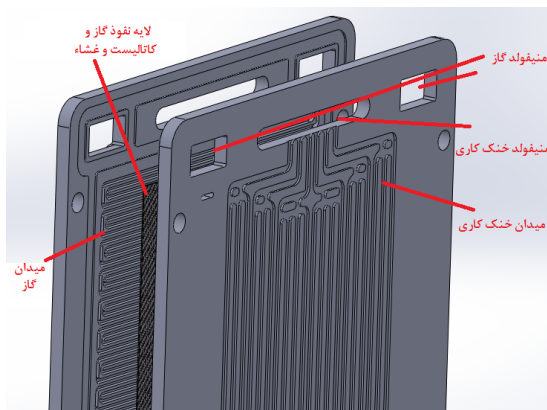
* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: hsaadat@mut.ac.ir

- قابلیت تحمل انجماد در زمان راه‌اندازی
 - بهینه‌سازی مدیریت آب و گرما درون الکترودهای پخش گاز و کانال‌های جریان
- در سه حوزه از چهار حوزه ذکر شده در بالا، مدل‌سازی ریاضی می‌تواند نقش بسیار موثری را بر کاهش هزینه‌های پژوهشی ایفا نماید و کار شبیه‌سازی حاضر در حوزه مدیریت آب درون کانال‌های جریان، جای می‌گیرد. اجزای تشکیل دهنده پیل سوختی پلیمری به قرار زیر می‌باشد:

- غشاء (الکترولیت)
- لایه کاتالیستی (الکتروود)
- لایه نفوذ گاز
- صفحات دوقطبی

الگوی میدان‌های جریان، عرض و عمق کانال‌ها و نیز طول و فاصله میان آن‌ها، که بر روی صفحات دوقطبی قرار دارند، تأثیر زیادی بر کارایی پیل سوختی، توزیع یکنواخت گازهای واکنش‌دهنده در سطح فعال غشاء و همچنین نحوه تأمین آب لازم برای مرطوب نگه داشتن غشاء و تخلیه آب





شکل ۱: نمای شماتیک یک سلول پیل سوختی پلیمری

Fig. 1. Schematic of a single PEM fuel cell

هوا، نوع خمیدگی کانال در محل دورزدن جریان، شیب دادن مسیر عبور قطره و همچنین تغییرات مکانی و شکل قطرات با گذشت زمان در کار آن‌ها مشاهده شده است. آن‌ها اثر زاویه تماس دینامیک و منی فولد توزیع‌کننده جریان را بر دفع قطرات مورد مطالعه قرار نداده‌اند.

بسیاری از محققین نیز [۸-۱۰] روش‌هایی را برای جلوگیری از ورود آب مایع به منی فولد ورودی پیل سوختی و در نتیجه به کانال‌های گاز پیل سوختی ارائه داده‌اند.

از آنجایی که ایجاد، تشکیل و ظهور آب مایع در کانال‌های انتقال گاز اجتناب‌ناپذیر است، بررسی دینامیک و رفتار آن طی عبور از کانال و اثراتی که این حرکت ایجاد می‌کند، ضروری می‌باشد، همچنین، فهم دینامیک حرکت آب مایع در کانال‌های جریان گاز، برای دستیابی به مدیریت موثر آب در پیل سوختی پلیمری، ضروری است، به ویژه این که در چگالی‌های جریان بالا یا نسبت‌های استوکیومتری پایین، آب به صورت مایع بر روی سطح لایه نفوذ گاز ظاهر می‌شود.

با توجه به ابعاد کانال‌های گاز و به علت تاثیر غالب نیروهای کشش و چسبندگی سطحی بر رفتار جریان دوفاز گاز-مایع، در کانال‌های انتقال جریان گاز، و در نتیجه وجود زاویه تماس بین دیوار و سیال مایع، موفق‌ترین روش در شبیه‌سازی این پدیده، روش حجم سیال است، لذا محققین، نسبت به روش‌های دیگر، بیشتر متمایل به استفاده از آن هستند. در مرجع [۱۱] اثر دما بر جدایش قطره از سطح بررسی شده است، اثر سرعت جریان گاز، قابلیت ترشدگی سطح و کانال‌های جریان بردفع قطره، با تزریق آب مایع از ورودی هوا در کار انجام شده در مرجع [۱۲]، و اثر قابلیت ترشدگی بر دفع

تولید شده در کاند دارد. به عنوان مثال باید توجه نمود برای این که قطرات آب درون کانال تشکیل نشده و به دیواره کانال نچسبند، میدان جریان باید طوری طراحی شود که افت فشار در طول هر کانال، بیشتر از تنش سطحی نگه‌دارنده قطره آب در محل باشد و از طرف دیگر می‌بایست از افت فشار بیش از اندازه در مسیر جریان جلوگیری شود تا این امر موجب افزایش کار سیستم‌های جانبی پیل سوختی نشده و در نتیجه بازده آن کاهش نیابد.

همان‌گونه که در شکل ۱ نمایش داده شده است، ناحیه کانال گاز و میدان جریان با دو جزء اصلی پیل سوختی پلیمری در تماس است، صفحات دوقطبی و محیط متخلخل نفوذ گاز.

بزرگ‌نژاد و همکاران [۲] حرکت قطرات آب در سمت کاند پیل سوختی پلیمری را با استفاده از مشاهده مستقیم و پردازش تصویر مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها تمامی انواع الگوهای حرکت قطره شامل قطرات مجزای ریز تا بزرگ، جریان فیلمی، انسداد موضعی و انسداد کامل را مشاهده کردند. توزیع قطرات مایع در تمامی نواحی شامل نواحی میانی، زانویی‌ها و کانال‌های جریان ارزیابی شدند. علیزاده و همکاران [۳] طرحی نو برای دفع موثر آب تولیدی در کانال‌های پیل سوختی پلیمری ارائه دادند. همچنین رحیمی و همکاران [۴] رژیم‌های مختلف تشکیل آب مایع در هر دو سمت آند و کاند پیل سوختی با استفاده از تصویربرداری مستقیم مورد ارزیابی قرار دادند. آن‌ها میزان اختلاف فشار لازم برای دفع انسداد ناشی از آب مایع را گزارش کردند. آمارا و نصرالله [۵] با استفاده از روش شبکه بولتزمن رفتار یک قطره را در یک تک میکروکانال مورد مطالعه قرار دادند. بررسی حرکت قطره در اعداد کاپیلاری و هیستریسیس مختلف انجام گرفته بود. آن‌ها گزارش کردند سطح آب‌گریز برای دفع آب مناسب‌تر از سطح آب‌دوست می‌باشد. همانند کارهای قبلی منی فولد توزیع‌کننده جریان بین سل‌ها و اثر زاویه تماس دینامیک و رهاسازی چندین قطره در داخل میکروکانال در این مطالعه نیز بررسی نشده است.

ملک‌زاده و روحی [۶] رژیم‌های مختلف تشکیل و حرکت قطره را در یک اتصال سه راهی مورد بررسی قرار دادند. فاز پیوسته از یک مسیر و فاز مایع از مسیر دیگر وارد اتصال شده و به حرکت ادامه می‌دادند. آن‌ها تاثیر عددی کاپیلاری، دبی جریان، عدد رینولدز و زاویه تماس را مورد بررسی قرار دادند آن‌ها، زاویه تماس دینامیکی، کانال‌های جریان پیل سوختی و منی فولد توزیع‌کننده جریان را در کارشان در نظر نگرفتند.

اشرفی و همکاران [۷] به صورت عددی و تجربی حرکت قطره را در یک میدان جریان مستقیم و سرپنتاینی مورد مطالعه قرار دادند. اثر سرعت جریان

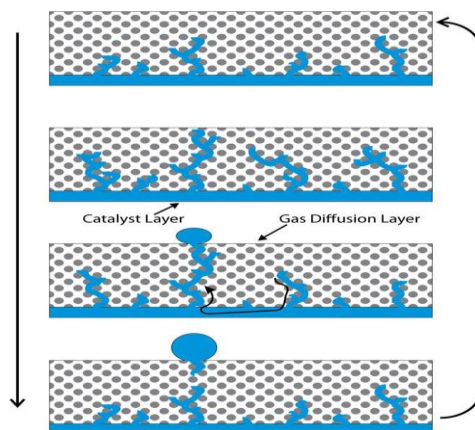
۲- توصیف مسئله

در میان عوامل موثر بر عملکرد پیل سوختی پلیمری، هندسه کانال‌های جریان، تاثیر مستقیم در توزیع یکنواخت گازهای واکنش‌دهنده و مدیریت مناسب آب تولیدی و خارج ساختن آن از کانال جریان خواهد داشت. برای بررسی این پدیده و عوامل موثر بر فرایند حرکت جریان درون کانال، در ابتدا قطرات ساکن روی سطح محیط متخلخل قرار داده شده و جریان ورودی گاز روی آن‌ها برقرار شده است تا الگوی حرکت آن‌ها بعد از پیدایش در کانال بررسی شود، اعتبار این فرض در بررسی رفتار قطرات با توضیحات زیر توجیه می‌شود.

شکل ۲ فرایند ظهور قطرات مایع را با مکانیزمی که توسط لیستستر و همکاران [۱۹] پیشنهاد شده است نمایش می‌دهد، آب مایع خود را با مکانیزم انگشتی و کانالی شدن به سطح کانال می‌رساند، سپس تشکیل قطره شروع می‌شود، هنگامی که قطره به اندازه مشخصی رسید، از مکان مشخص روی سطح محیط نفوذ گاز که از آن خارج شد، حرکت کرده و طی یک فرایند تکرارشونده، قطره بعدی شروع به رشد بر روی مکان مورد نظر می‌کند. در واقع با حرکت قطرات مجزا در کانال مواجه‌ایم، در کار حاضر نیز با قرار دادن قطرات با اندازه‌های مختلف بر روی سطحی با مشخصات فصل مشترک لایه نفوذ گاز و کانال انتقال گاز به بررسی دینامیک آن می‌پردازیم.

۳- روش عددی و شرایط مرزی

با توجه به طبیعت دوفازی مسئله از روش حجم سیال برای حل معادلات حاکم در حالت دوفاز استفاده می‌شود [۲۰]. این روش برای شبیه‌سازی جریان دوفاز سیالات ترکیب‌ناپذیر در حالت گذرا بکار می‌رود. در این روش مکان سطح مشترک دوفاز در یک ساختار شبکه‌بندی اولیری ثابت با بکارگیری یک تکنیک دنبال‌کننده سطح مشخص می‌شود. یک نمایشگر حجم سیال به همراه یک روش بازسازی سطح به منظور تعیین شکل سطح مشترک استفاده می‌شود. مشخصه کلیدی این روش دوفاز، قابلیت آن در به حساب‌آوری اثرات کشش سطحی است که نیرویی مهم و در بعضی مواقع نیروی غالب در جریان مینی و میکروکانال‌ها است، این کار با استفاده از روش نیروی سطح پیوسته انجام می‌شود. در روش حجم سیال، یک مجموعه از معادلات مومنتوم برای هر دوفاز سیال بکارگرفته می‌شود و سطح مشترک میان فازها با محاسبه کسر حجمی سیال k ام در هر سلول محاسباتی در دامنه حل ردیابی می‌شود.



شکل ۲: نمای شماتیک یک سلول پیل سوختی پلیمری

Fig. 2. The mechanism of emergence of liquid droplets in the channel [19, 24]

قطرات آب قرار داده شده بر روی سطح لایه نفوذ گاز در مرجع [۱۳] بررسی شده است، رفتار آب مایع در کانال گاز با زانویی کامل [۱۴]، در یک کانال موازی-ماریچ [۱۵] و در میدان میکروکانال‌های موازی [۱۶]، برای قطرات قرار داده شده بر روی سطح، مطالعه شده‌اند، اهمیت تغییر زاویه تماس نیز در کار انجام شده در مرجع [۱۷] بررسی شده است.

در هیچ یک از کارهای انجام شده در زمینه مورد بحث، مکانیزم‌های حرکت قطره در کانال‌های نشان داده شده در شکل ۱، مورد مطالعه قرار نگرفته است، همچنین با توجه به ابعاد کانال مذکور، پدیده کشش و چسبندگی سطحی منجر به ایجاد اثرات دیوار قابل توجه بر سیال مایع می‌شود که در تحقیقات گذشته به طور عمده از آن غفلت شده است، لذا در کار حاضر بعد از اعتبارسنجی مدل مورد بحث با نتایج آزمایشگاهی نزدیک به مساله موردنظر در مرجع [۱۸] به بررسی رفتار جریان قطرات مایع در این دسته کانال‌ها پرداخته می‌شود. در مدل‌سازی دینامیکی حاضر زاویه تماس دینامیک حرکت قطره با استفاده از مدل تابع هافمن که خصوصیات فیزیکی سیال و سرعت سیال را در نظر می‌گیرد، و در مطالعات گذشته از آن غفلت شده بود در نظر گرفته شده است. همچنین حرکت دینامیک قطره در یک هندسه کاربردی که شامل منیفولدهای توزیع‌کننده جریان گاز در پیل سوختی پلیمری می‌باشد مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته است. همچنین یک طرح پیشنهادی نو برای بهبود مدیریت آب مایع در منیفولدهای گاز پیل سوختی پلیمری ارائه شده است.

$$\bar{F}_{vol} = \sigma k_k \frac{\rho \nabla C_k}{0.5(\rho_1 + \rho_2)} \quad (۸)$$

منحنی k_k از گرادیان محلی بردار عمود بر سطح مشترک محاسبه می‌شود.

$$k_k = \nabla \cdot \left(\frac{n}{|n|} \right) \quad (۹)$$

و بردار عمود بر سطح n به عنوان گرادیان تابع کسر حجمی تعریف شده است.

$$n = \nabla C_k \quad (۱۰)$$

در مجموعه شبیه‌سازی‌های حاضر، برای ورودی جریان هوا از شرط مرزی سرعت ورودی^۱ و برای خروجی از شرط جریان خروجی^۲ استفاده شده است. قطره‌ها به کمک قابلیت جانبی تابع تعریف شده توسط کاربر^۳ نرم‌افزار فلونت در موقعیت‌های مطلوب، به عنوان شرایط اولیه جانشانی شده‌اند. از مطالعات گذشته برمی‌آید که جاسازی قطره در ورودی شرط معقولی است و در شرایط عملکردی واقعی نیز مشاهده می‌شود، پدیده هیستریزس زاویه تماس اثر قابل توجهی بر رفتار جریان در کانال‌های با ابعاد مینی و کمتر از آن دارد، بنابراین برای دیواره‌ها از مدل تابع هافمن [۱۸] به عنوان مدل زاویه تماس دینامیک یا هیستریزس زاویه تماس به صورت زیر بکار رفته است. ابتدا عدد بی‌بعد مویینگی با استفاده از خواص فاز مایع و سرعت خط تماس این فاز به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$Ca = \frac{\mu V}{\sigma} \quad (۱۱)$$

سپس زاویه تماس دینامیک بر پایه عدد مویینگی، به عنوان شاخص اثرات دینامیکی در نقطه تماس و زاویه تماس استاتیک به عنوان شاخص اثرات چسبندگی سطح به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\theta_D = f_{Hoff} [Ca + f_{Hoff}^{-1}(\theta_e)] \quad (۱۲)$$

$$C_k(x, y, z, t) = \begin{cases} 0 & (\text{outside } k' \text{th fluid}) \\ 1 & (\text{inside } k' \text{th fluid}) \\ 0 \sim 1 & (\text{at the } k' \text{th fluid interface}) \end{cases} \quad (۱)$$

و مجموع مقادیر کسر حجمی برابر واحد است:

$$\sum_{k=1}^n C_k = 1 \quad (۲)$$

مقادیر تابع کسر حجمی سیال هرسلول به وسیله معادله کسر حجمی که در هرسلول حل می‌شود، بدست می‌آید.

$$\frac{\partial}{\partial t} (C_k \rho_k) + \nabla \cdot (C_k \rho_k \bar{u}_k) = 0 \quad (۳)$$

در میدان سیال مخلوط دوفاز در میکروکانال، معادله ناویراستوکس حاکم است.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] + \rho \bar{g} + \bar{F} \quad (۴)$$

که کشش سطحی از طریق جمله چشمه F وارد معادله می‌شود و مقادیر چگالی و لزجت دینامیک به صورت متوسط حجمی وارد معادلات می‌شوند، که بر اساس کسر حجمی متغیر در میدان حل به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

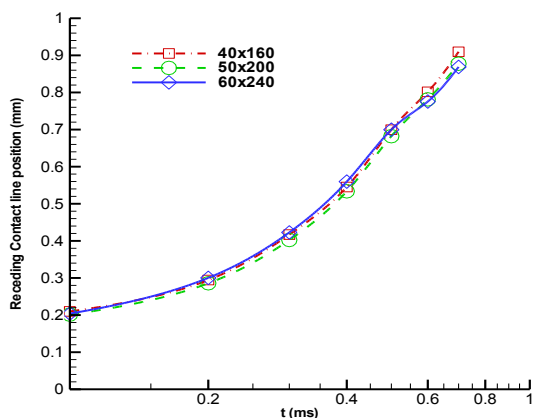
$$\rho = \rho_1 + C_2 (\rho_2 - \rho_1) \quad (۵)$$

$$\mu = \mu_1 + C_2 (\mu_2 - \mu_1) \quad (۶)$$

زیرنویس‌های ۱ و ۲ به ترتیب مربوط به هوا و آب هستند. کشش سطحی به وسیله روش نیروی سطحی پیوسته حساب می‌شود که به صورت جمله‌های پرش فشاری در عرض سطح مشترک بیان شده است و به ضریب کشش سطحی وابسته بوده و در معادله مومنتوم به عنوان نیروی حجمی F اعمال می‌شود.

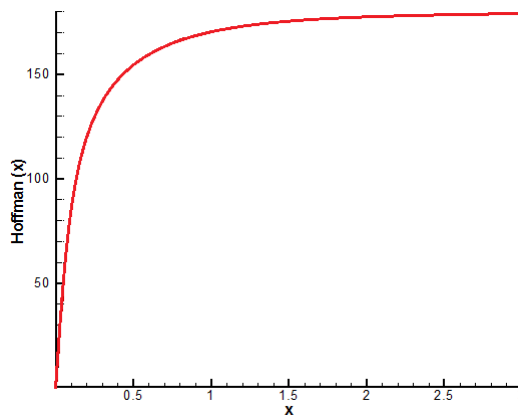
$$\Delta p = \sigma \frac{1}{R} \quad (۷)$$

-
- 1 Velocity Inlet
 - 2 Out Flow
 - 3 User Defined Function



شکل ۴: مطالعه استقلال حل از شبکه

Fig. 4. The result of the grid study



شکل ۳: رفتار تابع هافمن

Fig. 3. Behavior of the Huffman function

همان طور که مشخص است، نتایج حاصل از شبکه‌ها انطباق مناسبی با هم دارند. بر همین اساس نتایج حاصل از شبکه با 50×200 گره به عنوان حل مستقل از شبکه برای هندسه مینا در نظر گرفته شده است. درضمن اگر مدت زمان خروج کامل سیال از محیط کانال را به عنوان معیار مورد بررسی قرار دهیم، با ریزش شبکه از گره‌های 40×160 به 50×200 ، زمان انتقال $1/3$ درصد و با ریزش شبکه از گره‌های 50×200 به 60×240 ، زمان انتقال $9/1$ درصد تغییر می‌کند، لذا با توجه به افزایش بسیار زیاد هزینه محاسباتی و تغییر بسیار اندک نتایج با دو معیار بالا از خطای حاصل می‌توان به طور منطقی صرف نظر کرد.

در شکل ۵ نیز نمایی از حالت کانال مستقیم ساده و شبکه تولید شده برای شبیه‌سازی حالت پایه به عنوان کانال انتقال گاز کاتد پیل سوختی پلیمری ارائه شده است. لازم به ذکر است بر خلاف رویه معمول در تولید

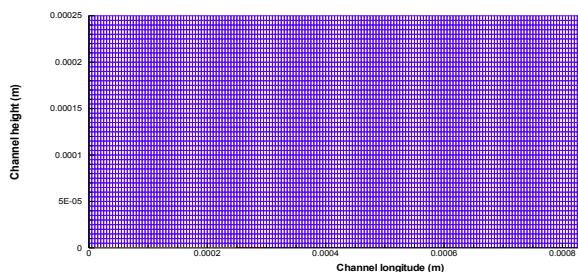
از طرفی تابع هافمن به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$f_{Hoff}(x) = \arccos \left\{ 1 - 2 \tanh \left[5.16 \left(\frac{x}{1 + 1.31x^{0.99}} \right)^{0.706} \right] \right\} \quad (13)$$

کد تابع کاربردی نوشته شده با استفاده از مقدار زاویه تماس استاتیک، مقدار عددی تابع هافمن معکوس را تخمین می‌زند، سپس با جمع آن با مقدار عدد موینگی و محاسبه مقدار تابع، زاویه تماس دینامیک تخمین زده شده و به صورت شرط مرزی زاویه تماس دیوار در نرم‌افزار به کار می‌رود، البته با توجه به گذرابودن طبیعت مسئله فرایند بالا در هر گام زمانی برای به روزآوری مقادیر زاویه تماس تکرار می‌شود. شکل ۳، رفتار تابع هافمن را نشان می‌دهد.

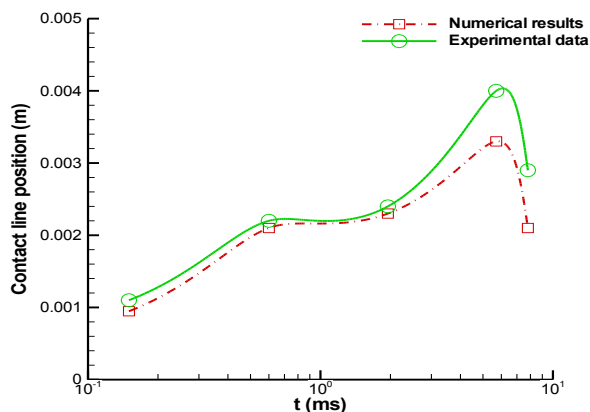
۴- نتایج و بحث‌ها

به منظور بررسی این موضوع، با توجه به کار مشابه انجام شده در مرجع [۱۸]، و حدس اولیه از حدود تراکم شبکه مناسب، از سه شبکه با تعداد گره‌های 40×160 ، 50×200 و 60×240 برای تعیین همگرایی به حل مستقل از شبکه استفاده شده است. با توجه به گذرا بودن مسئله و تاثیر گام زمانی برای وحدت رویه در حل از کمیتی به نام عدد جابجایی (عدد کورانت) استفاده می‌شود که برای تمام موارد مقدار ثابت $25/0$ در نظر گرفته شده است. نمودارهای موقعیت خط تماس پسر و قطر برحسب زمان در طول کانال حاصل از هر یک از شبکه‌ها در شکل ۴ نمایش داده شده است.



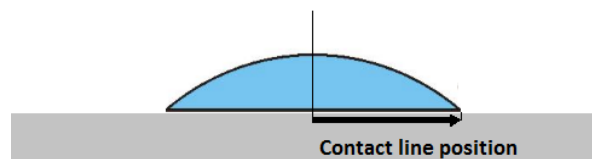
شکل ۵: مطالعه استقلال حل از شبکه

Fig. 5. The result of the grid study



شکل ۷: نتایج اعتبارسنجی با نتایج تجربی [۱۸]

Fig. 7. Results of validation with experimental data [18]



شکل ۶: نقطه تماس قطره با سطح

Fig. 6. Contact point of the droplet and the surface

به همین شیوه درباره جریان در مجموعه کانال‌ها همراه با منیفولد، رفتار شده است، یعنی حدوداً از همان تراکم شبکه استفاده شده است. مشخصه‌های مهم شبیه‌سازی در جدول ۱ آمده است. همچنین شبکه‌بندی هندسه در شکل ۸ نمایش داده شده است.

در مجموعه شکل‌های ۹ حرکت پنج قطره در دامنه مذکور نشان داده شده است.

در شکل ۹ با نشان دادن ۵ قطره منفرد در منیفولد توزیع‌کننده گاز، نحوه حرکت آن‌ها و فیزیک حاکم بر مساله بررسی شده است. شکل ۹-الف آرایش ابتدایی و شکل ۹-د وضعیت نهایی آن‌ها را نشان می‌دهد. بعد از اندکی حرکت به سمت انتهای کانال قطرات منفرد به هم چسبیده و قطرات بزرگ‌تر را تشکیل می‌دهند. این قطره بزرگ‌تر با برخورد به دیواره روبرویی منیفولد به سمت کانال آخر حرکت می‌کند. نتیجه جالب آن این است که، قطره بزرگ‌تر تشکیل شده از مجموعه قطرات به هم آمیخته، توانایی گذر از کانال‌های جریان را ندارد، یعنی باعث انسداد کانال انتهایی شده است، طبیعتاً این مشکل، در صورت ادامه تزریق آب به ساختار مذکور باعث تشدید آب گرفتگی خواهد شد. این مساله منجر به ایده طراحی جدید از قسمت‌های مختلف میدان جریان می‌شود.

وضعیت جریان متشکل از پنج قطره در هندسه اصلاح شده در شکل ۱۰ نشان داده شده است. نسبت انبساط و انقباض در هر دو منیفولد ورودی و خروجی ۰/۵ در نظر گرفته شده است. ملاحظه می‌شود که اصلاح هندسی مذکور باعث عوض شدن رفتار قطره شکل گرفته، شده است، لازم به ذکر است که اصلاح هندسه در هر دو منیفولد ورودی و خروجی باعث این عملکرد

شبکه ریزتر نزدیک دیواره برای جریان در مجاری بسته، به علت وجود فاز دوم سیال غیرقابل ترکیب با فاز گاز و حرکت آن در دامنه حل و هدف اساسی کار برای شبیه‌سازی رفتار آن در دامنه مورد بررسی، نمی‌توان از الگوی ذکر شده برای تولید شبکه استفاده کرد. برای شبیه‌سازی این گونه موارد دو راه پیش روی ماست، یا از روش‌های خودکار ریز و درشت‌سازی شبکه (شبکه پویا) استفاده کنیم، که روشی پردردسر، پرهزینه و در بعضی مواقع دارای خطاهای فاحش برای سیستم‌های دوفاز است، یا از شبکه با تراکم منطقی و نسبتاً یکنواخت، که در کار حاضر از الگوی دوم برای تمام موارد استفاده شده است.

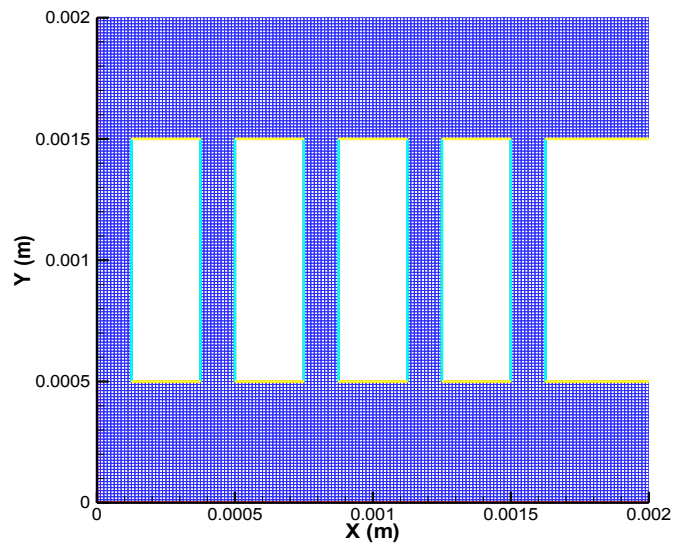
به منظور اطمینان از درستی شبیه‌سازی و مدل بکار گرفته شده، نتایج حاصل از آن با نتایج ارائه شده در مرجع [۱۸] مورد اعتبارسنجی قرار گرفته است. کمیت مورد بررسی نقطه تماس قطره با سطح بوده که در شکل ۶ نشان داده شده است. شکل ۷ حاصل این بررسی را در قالب مقایسه نمودار موقعیت خط تماس نسبت به زمان، برای داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی انجام شده به کمک نرم‌افزار فلوئنت با اعمال تابع هافمن برای اثر هیستریزس زاویه تماس به عنوان شرط مرزی دیواره و روش حجم سیال برای مدل دوفاز نشان می‌دهد.

همان‌گونه که از شکل ۷ برمی‌آید، نمودارها در ابتدا انطباق خوبی با یکدیگر دارند اما در ادامه اختلاف ایجاد می‌شود. لازم به ذکر است که شبیه‌سازی و شرایط آزمایش صورت گرفته در مرجع [۱۸] سه‌بعدی بوده درحالی‌که شبیه‌سازی حاضر دوبعدی می‌باشد. بنابراین می‌توان اختلاف ایجاد شده را به علت همین موضوع دانست. ضمن این‌که مدل به کار رفته رفتار مورد بحث را به خوبی پیش‌بینی می‌کند. سیکالو و گانیک [۱۸] به بررسی رفتار و حرکت قطره پس از سقوط روی یک سطح خشک پرداختند. آن‌ها همچنین اثر شیب‌دار کردن سطح را بر روی حرکت قطره بررسی کردند.

Table 1. Important parameters that implemented in the simulation

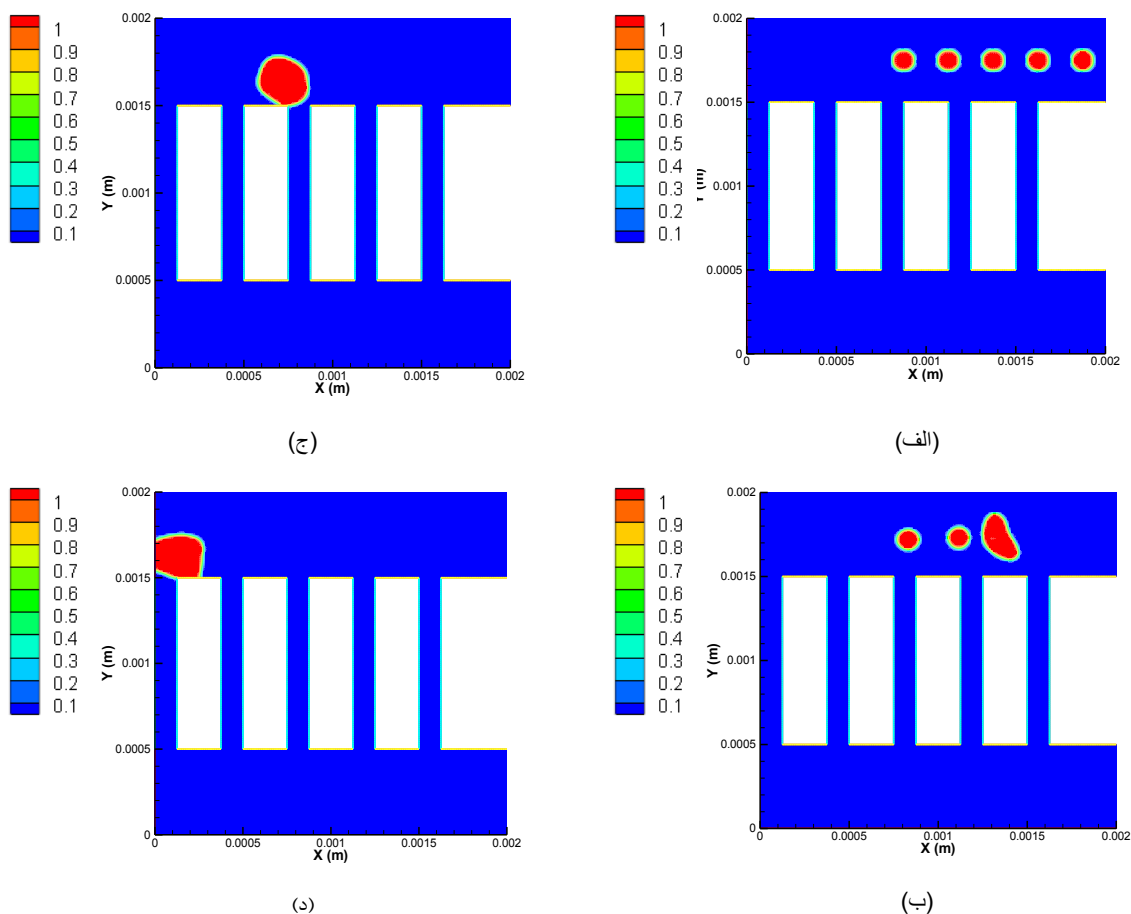
جدول ۱: مشخصه های مهم مورد استفاده برای شبیه سازی

مرجع	مقدار	واحد	کمیت
-	۰/۰۰۱	m	طول کانال
-	۰/۰۰۰۲۵	m	ارتفاع کانال
-	۳۰۰	K	دمای عملکرد
-	۱۰۰	kPa	فشار ورودی
-	۹/۸۱	m ² /s	شتاب گرانش
[۱۸]	۰/۰۷۲۸	N/m	کشش سطحی آب-هوا
[۱۸]	۰/۰۰۱۰۰۳	Pa.s	لزجت آب
[۱۸]	$1/7894 \times 10^{-5}$	Pa.s	لزجت هوا
[۱۸]	۹۹۸/۲	kg/m ³	چگالی آب
[۱۸]	۱/۲۲۵	kg/m ³	چگالی هوا
[۱۸]	۱۴۰	deg	زاویه تماس تعادلی سطح آب گریز
[۱۸]	۴۰	deg	زاویه تماس تعادلی سطح آب دوست
-	۱۵،۱۰،۵	m/s	سرعت های ورودی گاز
-	۲۰۰×۵۰	-	تراکم شبکه حل



شکل ۸: هندسه مساله و شبکه تولید شده

Fig. 8. Geometry of the problem and the generated grid



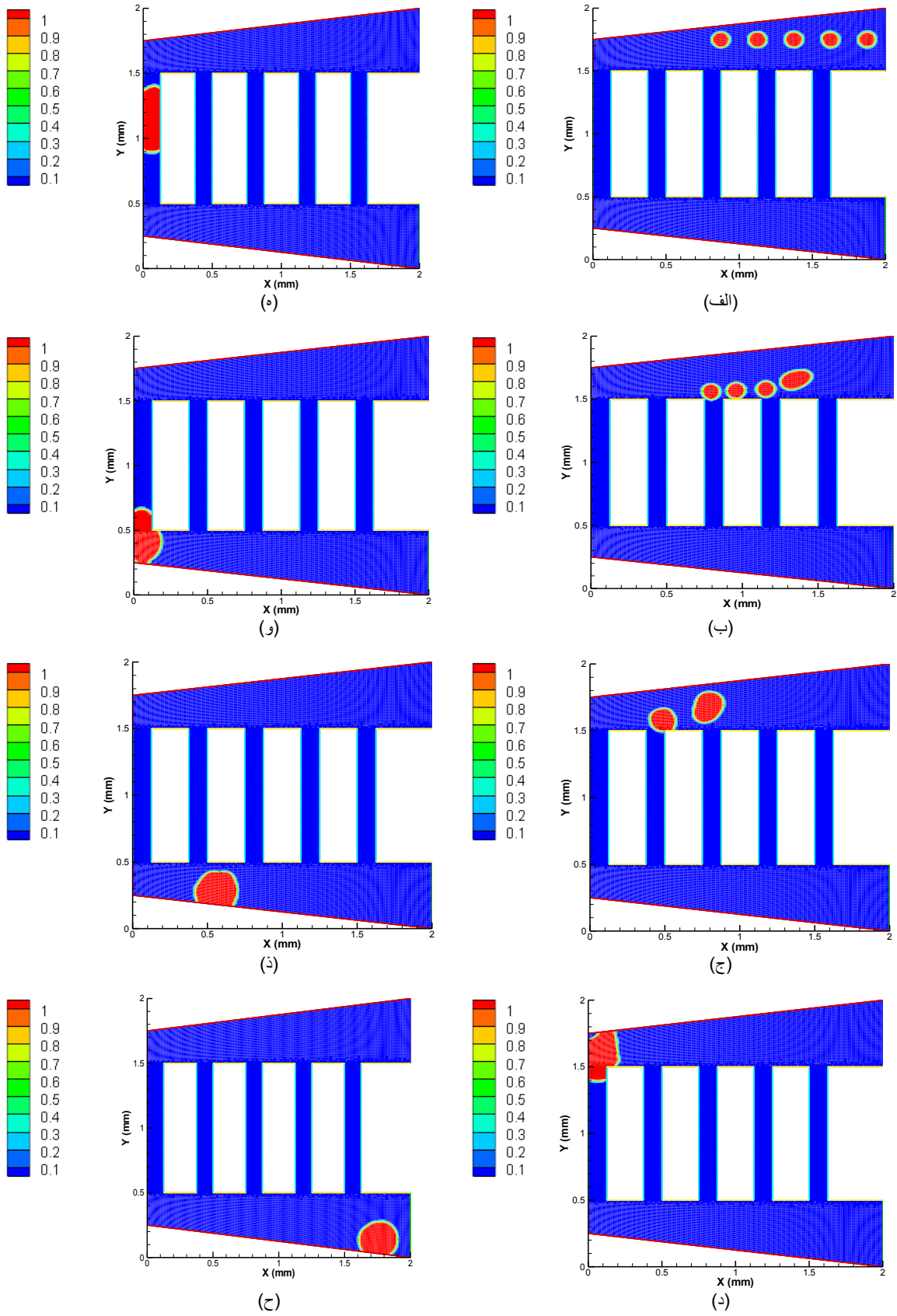
شکل ۹: حرکت پنج قطره در میدان اولیه

Fig. 9. Moving of five droplets in the initial flow field

کشش سطحی قطرات آب تشکیل شده و جلوگیری از انسداد کانال لازم می‌باشد. بنابراین شیب‌دار شدن کانال، با وجود افزایش اندک افت فشار به طور نسبی سبب بهبود مدیریت آب خواهد شد. در شکل ۱۱ نمودار افت فشار با زمان برای حالت‌های منیفولد با کانال مستقیم و شیب‌دار در سرعت‌های گاز ورودی مختلف نشان داده شده است. مقادیر افت فشار برای کانال‌های خالی از جریان مایع، در کانال‌های مشابه، همان‌طور که انتظار می‌رود، یکسان است. مقادیر کلی افت فشار و نوسان‌های آن با کوچک شدن اندازه قطرات کاهش می‌یابد. مقادیر افت فشار و نوسان‌های آن در کانال‌های شیب‌دار بیش از کانال‌های مستقیم هستند. با گذشت زمان افت‌ها و نوسان‌های فشار در کانال‌ها افزایش یافته است که ناشی از افزایش آب در

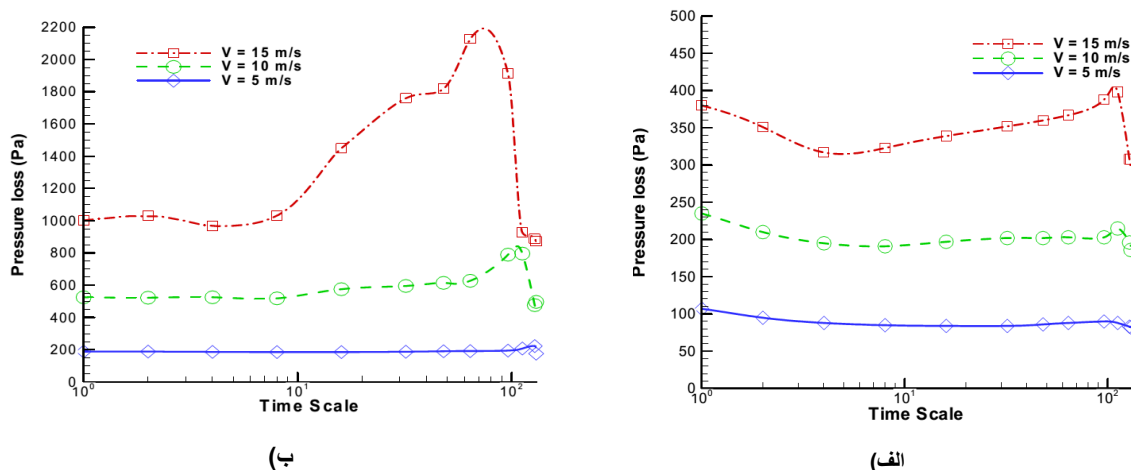
می‌شود و در صورتی که هندسه هر یک از آن‌ها به تنهایی تغییر کند مشکل انسداد کانال‌ها به قوت خود باقی خواهد ماند. از طرفی باید در نظر داشت که شیب ایجاد شده در منیفولد باید در جهت حرکت سیال باشد.

افت فشار در پیل سوختی از آن جهت حائز اهمیت می‌باشد که بر بازده آن تاثیرگذار است، زیرا با افزایش بیش از اندازه افت فشار، کار لازم برای انتقال گازهای واکنش‌دهنده از میان کانال‌های پیل سوختی نیز افزایش یافته که این موضوع نیز به نوبه خود منجر به مصرف بخش بیشتری از توان تولیدی در پیل سوختی از طریق به کار بردن کمپرسورهای قوی‌تر می‌گردد که در نتیجه سبب افت بازده در پیل سوختی می‌شود. از طرف دیگر باید توجه نمود که میزان کافی از افت فشار در پیل سوختی برای غلبه بر



شکل ۱۰: حرکت پنج قطره در میدان جریان اصلاح شده

Fig. 10. Moving of five droplets in the corrected flow field



شکل ۱۱: نمودار افت فشار نسبت به سرعت و زمان الف) کانال مستقیم ب) کانال شیب‌دار

Fig. 11. Diagram of the pressure loss against velocity and time a) Direct channel b) Inclined channel

هندسه سبب بهبود مدیریت آب در کانال‌ها می‌شود.

- مقادیر کلی افت فشار و نوسان‌های آن در منی‌فولدها با کاهش سرعت گاز ورودی کاهش می‌یابد. مقادیر افت فشار و نوسان‌های آن در کانال‌های شیب‌دار بیش از کانال‌های مستقیم هستند. با گذشت زمان افت‌ها و نوسان‌های فشار در کانال‌ها افزایش یافته است که ناشی از افزایش آب در کانال‌های گاز کاتد می‌باشد.

منابع

- [1] F. Barbir, PEM fuel cells, in: Fuel Cell Technology, Springer, 2006, pp. 27-51.
- [2] A. Bozorgnezhad, M. Shams, H. Kanani, M. Hasheminasab, G. Ahmadi, Two-phase flow and droplet behavior in microchannels of PEM fuel cell, International Journal of Hydrogen Energy, 41(42) (2016) 19164-19181.
- [3] E. Alizadeh, M. Rahimi-Esbo, S. Rahgoshay, S. Saadat, M. Khorshidian, Numerical and experimental investigation of cascade type serpentine flow field of reactant gases for improving performance of PEM fuel cell, International Journal of Hydrogen Energy, 42(21) (2017) 14708-14724.

کانال‌های گاز کاتد می‌باشد.

۵- نتیجه‌گیری

در مقاله حاضر با در نظر گرفتن کانال‌های انتقال گاز کاتد پیل سوختی پلیمری، جریان دو فاز گاز-مایع، به صورت قطرات از پیش جاسازی شده در محیط جریان با اندازه‌ها و سرعت جریان ورودی هوای مختلف، به عنوان شرایط متفاوت کاری پیل سوختی، با استفاده از روش حجم سیال، و حل معادلات انتقال حاکم شامل معادلات بقای جرم، مومنتوم، و در نظر گرفتن تابع هافمن برای مدل‌سازی زاویه تماس دینامیک به صورت تک‌ناحیه‌ای، در هندسه میدان جریان کانال‌های مستقیم موازی به همراه منی‌فولدهای ورودی و خروجی، شبیه‌سازی شده است. به طور کلی دو مکانیزم شبه غلتش و شبه لغزش برای حرکت قطرات بر روی سطح مشاهده شد.

خلاصه‌ای از نتایج حاصل از این شبیه‌سازی به شرح زیر می‌باشد:

- حرکت مجموعه پنج قطره در میدان جریان کانال‌های موازی با هندسه متداول منی‌فولدها: در این حالت با یکی شدن و افزایش قطر مجموعه قطرات، وضعیت حرکت آن‌ها در میدان جریان تغییر کرده و مشاهده شد که به علت اثرات کشش سطحی، جریان مایع کانال انتهایی را مسدود می‌کند و این هندسه برای منی‌فولدها توزیع کننده گازهای واکنشگر توصیه نمی‌شود.
- حرکت مجموعه پنج قطره در میدان جریان موازی و هندسه اصلاح شده منی‌فولدها: با تغییر هندسه منی‌فولدهای ورودی و خروجی مشکل ایجاد شده در هندسه متداول آن‌ها در انسداد کانال بر طرف می‌شود، در نتیجه اصلاح

- hydrophilic/hydrophobic properties on the water behavior in the micro-channels of a proton exchange membrane fuel cell, *Journal of Power Sources*, 161(2) (2006) 843-848.
- [13] E. Shirani, S. Masoomi, Deformation of a droplet in a channel flow, *Journal of fuel cell science and technology*, 5(4) (2008) 041008.
- [14] K. Jiao, B. Zhou, P. Quan, Liquid water transport in parallel serpentine channels with manifolds on cathode side of a PEM fuel cell stack, *Journal of Power Sources*, 154(1) (2006) 124-137.
- [15] K. Jiao, B. Zhou, P. Quan, Liquid water transport in straight micro-parallel-channels with manifolds for PEM fuel cell cathode, *Journal of Power Sources*, 157(1) (2006) 226-243.
- [16] P. Quan, M.-C. Lai, Numerical study of water management in the air flow channel of a PEM fuel cell cathode, *Journal of Power Sources*, 164(1) (2007) 222-237.
- [17] A.D. Le, B. Zhou, A general model of proton exchange membrane fuel cell, *Journal of power sources*, 182(1) (2008) 197-222.
- [18] Š. Šikalo, E. Ganić, Phenomena of droplet–surface interactions, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 31(2) (2006) 97-110.
- [19] S. Litster, D. Sinton, N. Djilali, Ex situ visualization of liquid water transport in PEM fuel cell gas diffusion layers, *Journal of Power Sources*, 154(1) (2006) 95-105.
- [20] I. Fluent, *FLUENT 6.3 user's guide*, Fluent documentation, (2006).
- [4] M. Rahimi-Esbo, A. Ranjbar, A. Ramiar, E. Alizadeh, M. Aghaee, Improving PEM fuel cell performance and effective water removal by using a novel gas flow field, *international journal of hydrogen energy*, 41(4) (2016) 3023-3037.
- [5] M.E.A.B. Amara, S.B. Nasrallah, Numerical simulation of droplet dynamics in a proton exchange membrane (PEMFC) fuel cell micro-channel, *International journal of hydrogen energy*, 40(2) (2015) 1333-1342.
- [6] S. Malekzadeh, E. Roohi, Investigation of different droplet formation regimes in a T-junction microchannel using the VOF technique in OpenFOAM, *Microgravity Science and Technology*, 27(3) (2015) 231-243.
- [7] M. Ashrafi, M. Shams, A. Bozorgnezhad, G. Ahmadi, Simulation and experimental validation of droplet dynamics in microchannels of PEM fuel cells, *Heat and Mass Transfer*, 52(12) (2016) 2671-2686.
- [8] T. Skiba, C.J. Carnevale, Fuel cell gas inlet manifold drain, in, *Google Patents*, 2015.
- [9] J.P. Owejan, T.A. Trabold, W.H. Pettit, T.W. Tighe, J.M. Keogan, E.J. Connor, S.G. Goebel, Pem fuel cell stack inlet water regulation system, in, *Google Patents*, 2015.
- [10] J.P. Owejan, Fuel cell assembly manifold heater for improved water removal and freeze start, in, *Google Patents*, 2013.
- [11] E. Kumbur, K. Sharp, M. Mench, Liquid droplet behavior and instability in a polymer electrolyte fuel cell flow channel, *Journal of Power Sources*, 161(1) (2006) 333-345.
- [12] Y. Cai, J. Hu, H. Ma, B. Yi, H. Zhang, Effects of

