

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک
رشته مهندسی مکانیک گرایش تبدیل انرژی

رساله دکتری

بررسی عددی جریان دوفازی در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای
مبادله پروتون

نگارنده: اسماعیل شاکری نژاد

استاد راهنما

دکتر محمدحسن کیهانی

استاد مشاور

دکتر محسن نظری

بهمن ۱۳۹۶



باسمه تعالی

شماره:

تاریخ:

ویرایش:

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده:

گروه:

رساله دکتری آقای اسماعیل شاکری نژاد به شماره دانشجویی ۹۰۲۳۳۲۵

تحت عنوان: بررسی عددی جریان دوفازی در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک دکتری ارزیابی گردید و با درجه مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	استاد مشاور	امضاء	استاد راهنما
	نام و نام خانوادگی:		نام و نام خانوادگی:

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی:		نام و نام خانوادگی:
			نام و نام خانوادگی:
			نام و نام خانوادگی:
			نام و نام خانوادگی:



تقدیم بہ

ہمسرم: کنچینہ دلکرمی و مہربانی

پدرم: اسوہ محبت و استقامت

مادرم: اسوہ صبر و گذشت

خواہر و برادرانم: دریای سرور و شادی



بانشکر و سپاس فراوان از اساتید فرهیخته:

«آقایان دکتر محمد حسن کیهانی و دکتر محسن نظری»

که با کمک های خود، من را در انجام هر چه بهتر این پژوهش

یاری نمودند.

تعهد نامه

اینجانب اسماعیل شاکری نژاد دانشجوی دوره دکتری رشته مهندسی مکانیک دانشکده مکانیک و مکترونیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده رساله بررسی عددی جریان دوفازی در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون تحت راهنمایی دکتر محمدحسن کیهانی متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این رساله توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در رساله تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان‌نامه تأثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از رساله رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آن‌ها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در رساله بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

پیل‌های سوختی^۱ وسایلی هستند که در آن‌ها انرژی شیمیایی سوخت به‌طور مستقیم و بدون احتراق به انرژی الکتریکی تبدیل می‌شود. این وسایل آلاینده‌های کمتری تولید می‌کنند و انتظار می‌رود که نقش مهمی در افزایش بازده سوخت و کاهش وابستگی به سوخت‌های فسیلی مرسوم داشته باشند. پیل‌های سوختی و واکنش‌های الکتروشیمیایی سوخت در آن‌ها، به‌ویژه سوخت هیدروژن، یکی از چند راه‌حل ممکن است که در درازمدت باعث بهبود بهره‌وری از انرژی و کاهش گازهای گلخانه‌ای می‌شوند. همچنین مزایای زیست‌محیطی قابل توجهی از آن‌ها انتظار می‌رود. پیل‌های سوختی خیلی آرام و بی‌سروصدا کار می‌کنند که این یک ویژگی خیلی مهم برای استفاده از آن‌ها در وسایل حمل‌ونقل است. در این مطالعه پیل سوختی نوع غشای مبادله پروتون^۲ بررسی می‌شود. این نوع پیل سوختی در دماهای پایین کار می‌کند که مزیت اصلی این ویژگی این است که به سرعت شروع به کار می‌کند. مزیت دیگر این نوع پیل سوختی ضخامت کم آن است و می‌تواند فشرده ساخته شود. پیل سوختی غشای مبادله پروتون از سه قسمت آند^۳، کاتد^۴ و الکترولیت^۵ تشکیل شده است که قسمت کاتد آن خود به سه ناحیه کانال گاز^۶، لایه انتشار گاز^۷ و کاتالیزور^۸ تقسیم می‌شود. ناحیه لایه انتشار گاز یک محیط متخلخل است که برای ایجاد تخلخل، از یک سری فیبرهای کربن که به صورت تصادفی در محیط قرار گرفته‌اند، استفاده شده است. هدف از این رساله، بررسی لایه انتشار گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت دوفازی و میکروسکوپی^۹ است. منظور از بررسی میکروسکوپی، مدل‌سازی ساختار محیط متخلخل است. برای مدل‌سازی جریان دوفازی در محیط متخلخل از روش

¹ Fuel cell

² Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC)

³ Anode

⁴ Cathode

⁵ Electrolyte

⁶ Gas Channel (GC)

⁷ Gas Diffusion Layer (GDL)

⁸ Catalysts

⁹ Microscopic

شبکه بولتزمن^۱ استفاده شده است. هدف از این رساله بررسی اثر استفاده‌ی همزمان فیبرهای آب-دوست^۲ و آب‌گریز^۳ در لایه انتشار گاز است که در نهایت منجر به معرفی حالت مناسب ترکیب این فیبرها شده است. منظور از حالت مناسب، محل مناسب برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست، ضخامت فیبرهای آب‌دوست و زاویه خیسی^۴ فیبرهای آب‌گریز است. به‌طور کلی فیبرهای کربن آب‌دوست موجود در محیط بسته به ضخامتی که دارند و موقعیتی که در آن قرار می‌گیرند می‌توانند باعث بهبود یا تضعیف عملکرد پیل سوختی شوند.

نتایج این بررسی نشان می‌دهد که هر چه فیبرهای آب‌دوست موجود در محیط به کانال گاز نزدیک‌تر باشند عملکرد پیل سوختی بهتر خواهد شد. به عنوان مثال در صورتی که فیبرهای آب‌دوست با ضخامت ۵۰ میکرومتر به کانال گاز چسبیده باشند (حالت مناسب) زمان لازم برای رسیدن خوشه‌ها به کانال گاز و اشباع آب مایع نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز به ترتیب ۱۷٪ و ۱۹٪ کاهش خواهند یافت. **کلمات کلیدی:** پیل سوختی غشای مبادله پروتون، جریان دوفازی، لایه انتشار گاز، روش شبکه بولتزمن.

¹Lattice Boltzmann Method (LBM)

²Hydrophilic fibers

³Hydrophobic fibers

⁴Contact angle

لیست مقالات مستخرج از رساله

مقالات استخراج شده از رساله حاضر به شرح زیر هستند:

- 1) Shakeri E., Kayhani, M.H., Nazari, M., "Increasing the Performance of Gas Diffusion Layer by Insertion of Small Hydrophilic Layer in Proton-Exchange Membrane Fuel Cells". International Journal of Hydrogen Energy, Accepted (Impact Factor: **3.582**).
- 2) Shakeri E., Nazari, M., Kayhani, M.H., "Tailored Surface Wettability of Gas Diffusion Layer in Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells: Proposing a Pore Scale-Two Phase Design". Fuel Cells, Under Revision (Impact Factor: **3.149**).
- 3) Shakeri E., Nazari, M., Kayhani, M.H., A. tamayol, Movement pattern of two immiscible fluids within porous media using a multiphase/multi-component lattice Boltzmann method, Journal of Mechanical Science and Technology, Accepted (Impact Factor: **1.128**).
- ۴) اسماعیل شاکری نژاد، محسن نظری، محمدحسن کیهانی، شبیه‌سازی همزمان لایه انتشار گاز و کانال هوا در پیل سوختی مبادله پروتون: بررسی در مقیاس حفره فلودینگ آب، مجله علمی پژوهشی دانشگاه امیرکبیر، ۲۰۱۶، ۸۷۵.۲۰۱۶/doi: 10.22060/mej.
- ۵) اسماعیل شاکری نژاد، محسن نظری، محمدحسن کیهانی، بررسی اثر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون، مجله علمی پژوهشی دانشگاه تبریز، تحت داوری.
- ۶) اسماعیل شاکری نژاد، محسن نظری، محمدحسن کیهانی، بررسی الگوی انگشتی جابجایی دو سیال غیر مخلوط شدنی در یک محیط متخلخل تصادفی به روش شبکه بولتزمن، شانزدهمین کنفرانس دینامیک شاره‌ها FD2015، کرمانشاه، دانشگاه رازی، ۲۶-۲۸ آبان ۱۳۹۴.
- ۷) اسماعیل شاکری نژاد، محسن نظری، محمدحسن کیهانی، بررسی اثر نسبت ویسکوزیته بر جابجایی دو سیال غیر مخلوط شدنی در محیط متخلخل تصادفی، بیست و چهارمین همایش سالانه بین‌المللی مهندسی مکانیک ایران، ISME2016، ایران، یزد، دانشگاه یزد، ۹-۷ اردیبهشت ۱۳۹۵.

فهرست مطالب

موضوع	صفحه
بسم ا... الرحمن الرحيم.....	ا.....
صفحه عنوان.....	ب.....
تصویب نامه.....	ج.....
اهدا نامه.....	د.....
قدردانی.....	ه.....
اقرارنامه و واگذاری حقوق.....	و.....
چکیده پایان نامه به زبان فارسی.....	ز.....
لیست مقالات.....	ط.....
فهرست مطالب.....	ی.....
فهرست شکل ها و نمودارها.....	ل.....
فهرست جدول ها.....	س.....
فهرست علامت ها و اختصارها.....	ق.....
فصل اول	
۱-۱ پیل های سوختی هیدروژنی- اصول کار.....	ا.....
۲-۱ جریان چه محدودیت هایی دارد؟.....	ب.....
۳-۱ پیل های سوختی در حالت سری- صفحه دوقطبی.....	ج.....
۴-۱ منابع گاز و خنک کاری.....	د.....
۵-۱ انواع پیل سوختی.....	ه.....
۱-۵-۱ پیل های سوختی اسیدفسفوریک (PAFC).....	و.....
۲-۵-۱ پیل سوختی اکسید جامد (SOFC).....	ز.....
۳-۵-۱ پیل سوختی کربنات ذوب شده (MCFC).....	ح.....
۶-۱ پیل های سوختی دیگر.....	ط.....
۱-۶-۱ پیل های سوختی زیستی.....	ی.....
۲-۶-۱ سلول های فلز- هوا.....	ک.....
۳-۶-۱ سلول های جریان اکسایش- کاهش یا پیل های سوختی احیاء کننده.....	ل.....
۷-۱ بخش های دیگر پیل سوختی.....	م.....
۸-۱ نحوه مقایسه پیل های سوختی.....	ن.....
۹-۱ معایب و مزیت ها.....	س.....
۱۰-۱ بررسی جزئی پیل سوختی غشای مبادله پروتون.....	ح.....
۱۱-۱ الکترولیت های پلیمری چگونه کار می کنند؟.....	ط.....

۱۲-۱	الکترودها و ساختار آن‌ها	۲۰
فصل دوم		
۱-۲	مقدمه	۲۶
۲-۲	مدل‌های تحلیلی	۲۶
۳-۲	مدل‌های عددی ماکروسکوپی	۲۷
۱-۳-۲	مدل‌های تک فاز ماکروسکوپی	۲۷
۲-۳-۲	مدل‌های دوفازی ماکروسکوپی	۳۱
۴-۲	نقاط ضعف جریان‌های ماکروسکوپی	۴۰
۱-۴-۲	بررسی تجربی	۴۰
۲-۴-۲	بررسی عددی میکروسکوپی به روش مقیاس حفره	۴۱
۱-۲-۴-۲	بررسی عددی میکروسکوپی به روش شبکه حفره	۴۲
۲-۲-۴-۲	بررسی عددی میکروسکوپی به روش شبکه بولتزن	۴۳
۵-۲	تعریف مسئله	۵۷
۶-۲	تعریف مسئله	۵۹
فصل سوم		
۱-۳	مقدمه‌ای بر شبکه بولتزن	۶۸
۲-۳	بررسی مدل‌های ارائه شده شبکه بولتزن برای شبیه‌سازی جریان دوفازی	۶۹
۳-۳	روش شبکه بولتزن برای جریان‌های تک فازی	۷۲
۴-۳	روش شبکه بولتزن برای جریان‌های چند فازی با یک مؤلفه	۷۵
۵-۳	روش شبکه بولتزن برای جریان‌های چند فازی با چند مؤلفه	۸۳
۶-۳	اعتبارسنجی برنامه	۸۷
۱-۶-۳	آزمون اول: آزمون حباب	۸۷
۲-۶-۳	آزمون دوم: آزمون قطره ساکن	۹۱
۳-۶-۳	آزمون سوم: آزمون جابه‌جایی قطره مخلوط‌نشده در اثر تغییر زاویه در کانال دوبعدی	۹۵
۴-۶-۳	آزمون چهارم: بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط‌نشده بین دو صفحه	۱۰۳
۵-۶-۳	آزمون پنجم: محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی در جریان دوفازی	۱۰۹
۶-۶-۳	آزمون ششم: شبیه‌سازی جریان سه سیال مخلوط‌نشده در کانال	۱۱۴
۷-۶-۳	آزمون هفتم: شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در فرآیند جابجایی دو سیال مخلوط‌نشده در کانال دوبعدی	۱۱۶
فصل چهارم		
۱-۴	مقدمه	۱۲۳

۲-۴	جریان سیال‌های مخلوط نشدنی در محیط متخلخل.....	۱۲۴
۳-۴	اثر عدد موینگی.....	۱۲۸
۴-۴	اثر زاویه خیزی.....	۱۳۱
۵-۴	اثر نسبت ویسکوزیته.....	۱۳۲
۶-۴	بررسی جریان دوفازی در قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون.....	۱۳۳
۷-۴	هندسه مورد بررسی.....	۱۳۶
۸-۴	محدوده ضریب تخلخل، زاویه خیزی و عدد موینگی.....	۱۴۴
۹-۴	نتایج.....	۱۴۹
۱-۹-۴	بررسی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز.....	۱۴۹
۱-۱-۹-۴	روش‌های تعیین حالت پایا.....	۱۵۵
۲-۱-۹-۴	چروکیدگی و انقباض.....	۱۶۰
۳-۱-۹-۴	فشار موینگی.....	۱۶۱
۴-۱-۹-۴	زمان عبور خوشه‌های آب مایع از لایه‌های انتشار گاز.....	۱۶۲
۲-۹-۴	اثر ترکیب زاویه خیزی.....	۱۶۵
۱-۲-۹-۴	بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور.....	۱۶۸
۲-۲-۹-۴	بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز.....	۱۶۹
۳-۲-۹-۴	جذب آب توسط فیبرهای آب‌دوست و تشکیل حوضچه‌ی آب مایع.....	۱۷۰
۴-۲-۹-۴	محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست.....	۱۷۶
۵-۲-۹-۴	ضخامت فیبرهای آب‌دوست.....	۱۷۸
۶-۲-۹-۴	زاویه خیزی فیبرهای آب‌گریز.....	۱۸۲

فصل پنجم

۱-۵	روش‌های بهبود عملکرد پیل سوختی.....	۱۸۶
۲-۵	پیشنهادها و کارهای آینده.....	۱۸۸
۳-۵	مراجع.....	۱۹۰

فهرست شکل‌ها و نمودارها

شکل ۱-۱:	شکل اولیه پیل سوختی ارائه شده توسط لایر و ویلیام گرو.....	۱
شکل ۲-۱:	نمایش بخش‌های آند، کاتد و الکترولیت پیل سوختی.....	۲
شکل ۳-۱:	واکنش‌ها در الکترودها و جریان الکتریکی در پیل سوختی با الکترولیت اسیدی.....	۳
شکل ۴-۱:	واکنش‌ها در الکترودها و جریان الکتریکی در پیل سوختی با الکترولیت قلیایی.....	۴
شکل ۵-۱:	نمایش کلاسیک انرژی برای واکنش شیمیایی گرماده.....	۵
شکل ۶-۱:	ایجاد ساختاری متخلخل برای افزایش سطح.....	۵
شکل ۷-۱:	اتصال سه پیل سوختی در حالت سری.....	۶

- شکل ۸-۱: نمایش سلول تکی دارای صفحات دوقطبی در دو طرف..... ۷
- شکل ۹-۱: نمایش صفحات دوقطبی..... ۷
- شکل ۱۰-۱: سه سلول در حالت سری، که از صفحات دوقطبی برای اتصال آند و کاتد استفاده شده است.. ۷
- شکل ۱۱-۱: نمایش آند، کاتد، الکترولیت و درزبند..... ۸
- شکل ۱۲-۱: سه سلول در حالت سری با مانیفولد خارجی..... ۸
- شکل ۱۳-۱: دسته پیل با مانیفولد خارجی..... ۸
- شکل ۱۴-۱: دسته پیل با مانیفولد داخلی..... ۹
- شکل ۱۵-۱: شماتیک پیل سوختی احیاء کننده..... ۱۳
- شکل ۱۶-۱: شماتیک پیل سوختی احیاء کننده در کمبریج انگلستان..... ۱۳
- شکل ۱۷-۱: کاربرد و مزیت‌های پیل سوختی بسته به نوع آن..... ۱۵
- شکل ۱۸-۱: مجموعه آند، الکترولیت و کاتد به صورت خیلی نازک..... ۱۶
- شکل ۱۹-۱: ساختمان پلیمر پلی اتیلن..... ۱۸
- شکل ۲۰-۱: پلیمر سولفونات شده..... ۱۸
- شکل ۲۱-۲: آب جمع شده در نواحی آب‌دوست در اطراف شاخه‌های زنجیرهای جانبی سولفونات شده.. ۱۹
- شکل ۲۲-۱: نمایش ایده آل کاتالیزور پلاتین که به صورت ذرات بسیار ریز روی سطحی از کربن پودر شده قرار گرفته‌اند که ذرات سیاه‌رنگ کربن پودر شده و ذرات سفیدرنگ پلاتین می- باشند..... ۲۰
- شکل ۲۳-۱: نمایش واقعی کاتالیزور پیل سوختی (نقاط سیاه ذرات کاتالیزور هستند)..... ۲۱
- شکل ۲۴-۱: نمایش ایده آل الکتروکاتالیزور پیل سوختی غشای مبادله پروتون..... ۲۲
- شکل ۲۵-۱: ماده الکترولیت روی سطح کاتالیزور پخش شده تا باعث افزایش نقاط تماس سه فاز (الکترولیت، گاز واکنش‌دهنده و کاتالیزور) شود..... ۲۲
- شکل ۲۶-۱: لایه انتشار گاز از جنس a: کاغذ کربنی b: پارچه کربنی..... ۲۳
- شکل ۱-۲: هندسه مربوط به مطالعه کارستن کان و همکارانش..... ۳۴
- شکل ۲-۲: هندسه مربوط به مطالعه سونگ و همکارانش..... ۳۵
- شکل ۳-۲: هندسه مربوط به مطالعه چانگ و همکارانش..... ۳۶
- شکل ۴-۲: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش..... ۳۷
- شکل ۵-۲: هندسه مربوط به مطالعه لیو و همکارانش..... ۳۸
- شکل ۶-۲: هندسه مربوط به مطالعه اختر و کرخوف..... ۳۹
- شکل ۷-۲: هندسه مربوط به مطالعه زنگ و همکارانش..... ۴۵
- شکل ۸-۲: هندسه مربوط به مطالعه هانگ و همکارانش..... ۴۵
- شکل ۹-۲: هندسه مربوط به مطالعه تاب و همکارانش..... ۴۶
- شکل ۱۰-۲: هندسه مربوط به مطالعه ماخرجی و همکارانش..... ۴۷

- شکل ۲-۱۱: هندسه مربوط به مطالعه هاوو و چن..... ۴۸
- شکل ۲-۱۲: هندسه مربوط به مطالعه هاوو و چن..... ۴۸
- شکل ۲-۱۳: هندسه مربوط به مطالعه هانگ و همکارانش..... ۴۹
- شکل ۲-۱۴: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش..... ۴۹
- شکل ۲-۱۵: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش..... ۵۰
- شکل ۲-۱۶: هندسه مربوط به مطالعه ليو و همکارانش..... ۵۰
- شکل ۲-۱۷: هندسه مربوط به مطالعه مديسی و آلن..... ۵۱
- شکل ۲-۱۸: هندسه مربوط به مطالعه وو و همکارانش..... ۵۲
- شکل ۲-۱۹: هندسه مربوط به مطالعه لانگ و همکارانش..... ۵۲
- شکل ۲-۲۰: هندسه مربوط به مطالعه کوپانیدیس و همکارانش..... ۵۳
- شکل ۲-۲۱: هندسه مربوط به مطالعه ساراسانی و همکارانش..... ۵۴
- شکل ۲-۲۲: هندسه مربوط به مطالعه ملایی منش و اکبری..... ۵۵
- شکل ۲-۲۳: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش..... ۵۵
- شکل ۲-۲۴: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش..... ۵۶
- شکل ۲-۲۵: هندسه مربوط به مطالعه ملایی منش و ناظمیان..... ۵۶
- شکل ۲-۲۶: روش‌های مختلف تولید و انتقال آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون..... ۵۸
- شکل ۲-۲۷: الگوی جابجایی سیال..... ۶۲
- شکل ۲-۲۸: نمایش لایه انتشار گاز در مقیاس‌های مختلف..... ۶۳
- شکل ۲-۲۹: نمایش لایه انتشار گاز با اعمال فشارهای مختلف..... ۶۳
- شکل ۲-۳۰: نمایش افزایش آب‌گریزی از چپ به راست..... ۶۴
- شکل ۲-۳۱: نمایش افزایش آب‌دوستی از راست به چپ..... ۶۴
- شکل ۳-۱: نمایش مدل D_2Q_9 ۷۳
- شکل ۳-۲: نمایش مدل‌های سه‌بعدی..... ۷۳
- شکل ۳-۳: حالت پایای حباب ساکن تشکیل شده برای شعاع‌های اولیه مختلف (شکل چپ فاز یک و شکل وسط فاز دو) و نمودار چگالی هر دو فاز در امتداد خط گذرنده از مرکز ($y=31$) برحسب x (شکل راست)..... ۸۹
- شکل ۳-۴: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب برحسب $1/R$ ۹۰
- شکل ۳-۵: شکل قطره در آزمون قطره ساکن..... ۹۲
- شکل ۳-۶: شکل قطره در آزمون قطره ساکن..... ۹۲
- شکل ۳-۷: روش اول برای محاسبه زاویه خیسگی..... ۹۳
- شکل ۳-۸: روش دوم برای محاسبه زاویه خیسگی..... ۹۴

- شکل ۳-۹: هندسه مربوط به آزمون جابه‌جایی قطره مخلوط نشدنی در اثر تغییر زاویه در کانال دوبعدی..... ۹۵
- شکل ۳-۱۰: حالت پایای حباب ساکن تشکیل شده برای شعاع‌های اولیه مختلف (شکل چپ فاز یک و شکل وسط فاز دو) و نمودار چگالی هر دو فاز در امتداد خط گذرنده از مرکز ($y=51$) بر حسب x (شکل راست)..... ۹۶
- شکل ۳-۱۱: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب بر حسب $1/R$ ۹۷
- شکل ۳-۱۲: مقایسه بین زاویه خیسی محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی در حالت اول با رابطه ۳-۵۹..... ۹۹
- شکل ۳-۱۳: مقادیر زاویه محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی در حالت دوم..... ۱۰۰
- شکل ۳-۱۴: مقایسه بین زاویه خیسی محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی در حالت دوم با رابطه ۳-۵۱ و قانون لاپلاس..... ۱۰۱
- شکل ۳-۱۵: مقایسه حل تحلیلی و نتایج شبیه‌سازی عددی برای موقعیت مرکز جرم قطره بر حسب زمان..... ۱۰۲
- شکل ۳-۱۶: مقایسه حل تحلیلی و نتایج شبیه‌سازی عددی برای موقعیت مرکز جرم قطره بر حسب زمان..... ۱۰۳
- شکل ۳-۱۷: هندسه بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط نشدنی بین دو صفحه موازی..... ۱۰۳
- شکل ۳-۱۸: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$)..... ۱۰۶
- شکل ۳-۱۹: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$)..... ۱۰۶
- شکل ۳-۲۰: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=40$)..... ۱۰۶
- شکل ۳-۲۱: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$)..... ۱۰۸
- شکل ۳-۲۲: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده و نتایج تحلیلی در حالت تک فازی و $G=10^{-8}$ ۱۱۳
- شکل ۳-۲۳: مقایسه نتایج ضریب نفوذپذیری و نتایج تحلیلی..... ۱۱۴
- شکل ۳-۲۴: المانی از سیال برای شبیه‌سازی جریان سه سیال مخلوط نشدنی در کانال..... ۱۱۴
- شکل ۳-۲۵: مقایسه بین توزیع سرعت اندازه‌گیری شده و نتایج تحلیلی ($b=40, a=30$)..... ۱۱۵
- شکل ۳-۲۶: شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در پروسه جابه‌جایی دو سیال غیرقابل مخلوط شدنی در یک کانال دوبعدی..... ۱۱۸
- شکل ۳-۲۷: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب بر حسب $1/R$ ۱۱۹
- شکل ۳-۲۸: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.0303$ ۱۲۰
- شکل ۳-۲۹: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.1212$ ۱۲۰

- شکل ۳-۳۰: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.1818$ ۱۲۱
- شکل ۴-۱: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب برحسب $1/R$ ۱۲۵
- شکل ۴-۲: محیط متخلخل مورد بررسی ۱۲۷
- شکل ۴-۳: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای $M=1$ ۱۲۹
- شکل ۴-۴: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای $u_0 = 0.009, Ca = 0.0102, M = 3$ ۱۳۰
- شکل ۴-۵: زمان رسوخ برحسب زاویه خیزی برای دو حالت $M=1, 3$ ۱۳۰
- شکل ۴-۶: اشباع سیال جابجا کننده برحسب زاویه خیزی ۱۳۰
- شکل ۴-۷: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای نسبت‌های ویسکوزیته مختلف و $Ca = 0.0102, \theta = 119$ ۱۳۳
- شکل ۴-۸: اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون ۱۳۳
- شکل ۴-۹: لایه انتشار گاز واقعی ۱۳۷
- شکل ۴-۱۰: لایه انتشار گاز مصنوعی ۱۳۸
- شکل ۴-۱۱: لایه انتشار گاز مصنوعی ۱۳۸
- شکل ۴-۱۲: هندسه مورد بررسی: قسمت (الف) نمای کلی محیط مورد بررسی و قسمت (ب) بزرگ‌نمایی شده آن است ۱۳۹
- شکل ۴-۱۳: رابطه بین ΔP و $1/R$ ۱۴۷
- شکل ۴-۱۴: زاویه خیزی به صورت تابعی از قدرت اثر متقابل سیال - جامد ۱۴۸
- شکل ۴-۱۵: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه خیزی 145° ۱۵۰
- شکل ۴-۱۶: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه خیزی 115° ۱۵۱
- شکل ۴-۱۷: نمایش حرکت رو به عقب خوشه‌ها در مرحله زمانی ۱۲۴۶۶۹۴ (سمت چپ) و تشکیل حلقه در مرحله زمانی ۱۳۲۰۰۰۰ (سمت راست) در لایه انتشار گاز با زاویه خیزی 145° ۱۵۲
- شکل ۴-۱۸: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه خیزی 145° ۱۵۴
- شکل ۴-۱۹: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه خیزی 115° ۱۵۵
- شکل ۴-۲۰: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (a) زاویه خیزی 115° (b) زاویه خیزی 145° ۱۵۶
- شکل ۴-۲۱: رفتار دینامیکی آب مایع برای زاویه خیزی 115° ۱۵۶
- شکل ۴-۲۲: مقایسه اشباع محلی آب مایع برای زاویه‌های خیزی 115° و 145° ۱۵۷
- شکل ۴-۲۳: حجم آب مایع برحسب زمان در کانال گاز برای زاویه‌های خیزی 115° و 145° ۱۵۸
- شکل ۴-۲۴: اشباع کلی آب مایع برای زاویه‌های خیزی 115° و 145° ۱۵۹
- شکل ۴-۲۵: رفتار دینامیکی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز برای زاویه خیزی 145° ۱۶۰

شکل ۴-۲۶: چروکیدگی و انقباض برای خوشه آب مایع شماره ۷ در زاویه خیسی 145° : (a) در لحظه رسیدن خوشه به انتهای لایه انتشار گاز و (b) بعد از ورود خوشه به کانال گاز.....۱۶۱

شکل ۴-۲۷: توزیع اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز: (a) زاویه خیسی 115° و (b) زاویه خیسی 145°۱۶۲

شکل ۴-۲۸: مقایسه توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز.....۱۶۴

شکل ۴-۲۹: توزیع آب مایع در حالت سوم: سمت چپ و حالت چهارم: سمت راست.....۱۶۷

شکل ۴-۳۰: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (a) حالت سوم (b) حالت چهارم.....۱۶۸

شکل ۴-۳۱: حجم آب مایع برحسب زمان در کانال گاز (a) حالت سوم (b) حالت چهارم.....۱۶۸

شکل ۴-۳۲: اشباع آب مایع در نواحی نزدیک کاتالیزور برای حالت‌های مختلف.....۱۶۹

شکل ۴-۳۳: اشباع کلی آب مایع برای حالت‌های مختلف.....۱۷۰

شکل ۴-۳۴: توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز (a) و (b): حالت پنجم، (c) و (d): حالت ششم، (e): حالت هفتم، (f) و (g): حالت هشتم و (h) حالت نهم، که محل آب‌دوست با پیکان نشان داده شده است.....۱۷۱

شکل ۴-۳۵: توزیع آب مایع در حالت‌های ۱، ۳ و ۵. بخش (a) مربوط به حالت اول است که سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا را نشان می‌دهد. بخش (b) مربوط به حالت سوم است و سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا است. بخش (c) حالت پنجم است که سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=376$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا است.....۱۷۲

شکل ۴-۳۶: تشکیل حوضچه آب مایع در حالت پایا برای حالت‌های (a) سوم و (b) چهارم.....۱۷۴

شکل ۴-۳۷: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی.....۱۷۵

شکل ۴-۳۸: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب محل شروع ناحیه آب‌دوست در لایه انتشار گاز (Y).....۱۷۸

شکل ۴-۳۹: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب ضخامت ناحیه آب‌دوست در لایه انتشار گاز (Y).....۱۷۹

شکل ۴-۴۰: اشباع محلی آب مایع در حالت‌های مختلف شبیه‌سازی.....۱۷۹

شکل ۴-۴۱: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب زاویه خیسی ناحیه آب‌گریز.....۱۸۲

شکل ۴-۴۲: اشباع محلی آب مایع بر حسب ضخامت لایه انتشار گاز برای دو چیدمان متفاوت.....۱۸۴

فهرست جدول‌ها

جدول ۱-۱: انواع پیل سوختی.....۹

جدول ۱-۳: خلاصه روابط محاسبه فشار و نیروی اثر متقابل بین مولکول‌های سیال- سیال در جریان چند فازي.....۸۶

- جدول ۳-۲: خلاصه نتایج مربوط به شبیه‌سازی آزمون حباب..... ۹۱
- جدول ۳-۳: مقایسه نتایج مربوط به آزمون قطره ساکن در حالت‌های مختلف..... ۹۵
- جدول ۳-۴: خلاصه نتایج مربوط به شبیه‌سازی آزمون حباب..... ۹۷
- جدول ۳-۵: نحوه محاسبه زاویه خیزی در حالت اول..... ۹۸
- جدول ۳-۶: نحوه محاسبه زاویه خیزی در حالت دوم..... ۱۰۰
- جدول ۳-۷: محاسبه دبی‌های عبوری در حالت‌های مختلف..... ۱۱۳
- جدول ۳-۸: مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی با نتایج رابطه تجربی..... ۱۲۱
- جدول ۴-۱: مقادیر کشش سطحی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی..... ۱۲۵
- جدول ۴-۲: مقادیر زاویه خیزی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی..... ۱۲۶
- جدول ۴-۳: مقادیر زاویه خیزی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی..... ۱۳۱
- جدول ۴-۴: مقادیر ضریب نفوذپذیری..... ۱۴۰
- جدول ۴-۵: محدوده ضریب تخلخل در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون در مطالعات میکروسکوپی..... ۱۴۵
- جدول ۴-۶: محدوده زاویه خیزی در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون در مطالعات میکروسکوپی..... ۱۴۶
- جدول ۴-۷: اعداد بی‌بعد و سرعت آب ورودی به لایه انتشار گاز در مطالعات میکروسکوپی..... ۱۴۶
- جدول ۴-۸: ضریب تخلخل و زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی..... ۱۶۳
- جدول ۴-۹: تأثیر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز بر زمان انتقال آب مایع..... ۱۸۰
- جدول ۴-۱۰: تأثیر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز بر زمان انتقال آب مایع..... ۱۸۱

فهرست علامتها و اختصارها

a	پارامتر جذب یا بعد کانال
A	مساحت (m^2)
a_0	ارتفاع قطره
b	تعداد ذرات موجود در هر مکان مشخص، پارامتر دفع یا بعد کانال
b_0	طول قسمت خیس‌کنندگی قطره
Bo	عدد باند
c	سرعت شبکه یا بعد کانال
c_0	مربوط به ساختار شبکه
Ca	عدد موینگی
C_K	کسر حجمی سیال
C_s	سرعت صوت
d	قطر
d_p	قطر حفره
e_a	سرعت گسسته شده
f	تابع توزیع ذرات
F	عبارت چشمه
f^{eq}	تابع توزیع تعادلی
$F_{\alpha,\alpha}$	اثر متقابل بین مولکول‌های مؤلفه‌های یکسان
$F_{\alpha,\hat{\alpha}}$	اثر متقابل بین مولکول‌های مؤلفه‌های مختلف
g	شتاب جاذبه (m/s^2)
G_{ads}^α	ضریب جذب برای فاز α
G_C	قدرت اثر متقابل سیال - سیال
$G_{\alpha,\alpha}$	قدرت اثر متقابل بین ذرات فاز α و α
$G_{\alpha,\hat{\alpha}}$	قدرت اثر متقابل بین ذرات فاز α و $\hat{\alpha}$
H, h	ارتفاع کانال
k	تعداد فاز، ضریب نفوذپذیری نسبی
K	ضریب نفوذپذیری

k_{ij}	ضریب نفوذپذیری (اتصال بین سیال i و نیروی f_j)
L	طول کانال
\dot{m}	دبی جرمی
M	نسبت ویسکوزیته دینامیکی یا جرم
n	گرادیان کسر حجمی
n_x	طول در جهت x
n_y	طول در جهت y
p	فشار
ΔP	اختلاف فشار
Q	دبی حجمی
Q_{10}	دبی کانال، وقتی کانال با فاز ۱ پر شده و نیروی G_1 به سیال اعمال می شود
r	شعاع
R	شعاع قطره در حالت نهایی یا ثابت گازها
Re	عدد رینولدز
S	اشباع آب مایع
t	زمان
T	دما ($^{\circ}C$)
u	سرعت یا مؤلفه افقی سرعت (m/s)
u_0	سرعت ورودی (m/s)
V	حجم
W	ضریب خارج از مرکز یا عرض انگشتی
W_a	ضریب وزنی
We	عدد وبر
x	جابجایی
X	بردار مختصات افقی بدون بعد
Y	بردار مختصات عمودی و ضخامت ناحیه آب دوست
	علائم یونانی
Δt	فاصله بین دو مرحله زمانی
Δx	فاصله بین دو گره متوالی
Ψ	جرم مؤثر
φ	ضریب تخلخل

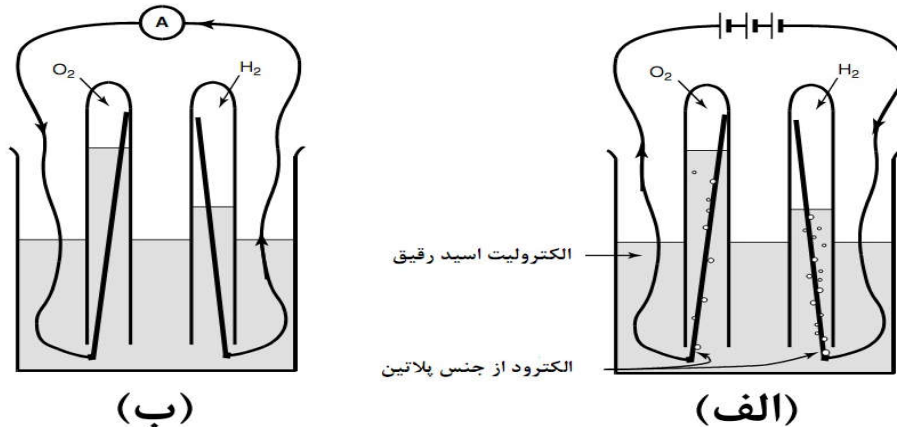
ϕ	نسبت ابعاد
μ	ویسکوزیته دینامیکی
ν	ویسکوزیته سینماتیکی
θ	زاویه خیزی
ρ	چگالی
τ	زمان آسایش
σ	کشش سطحی
	زیر نویس ها
a	هوا
crit	بحرانی
W	آب مایع
c	بحرانی
eff	مقدار مؤثر
in	داخل
out	بیرون
min	مینیمم
total	کل
S	جامد
ext	نیروی گرانشی
int	بین ذرات سیال
ads	بین ذرات سیال و جامد
	بالا نویس ها
$m, m - 1$	مرحله زمانی

فصل اول: پیل سوختی

۱-۱ پیل‌های سوختی هیدروژنی^۱ - اصول کار

عملکرد و نحوه کار یک پیل سوختی هیدروژنی بسیار ساده است. در سال ۱۸۳۹ لایر و ویلیام گرو^۲ با

استفاده از آزمایش‌ها توانستند شکل ابتدایی از یک پیل سوختی به صورت زیر ارائه دهند [۱]:



شکل ۱-۱: شکل اولیه پیل سوختی ارائه شده توسط لایر و ویلیام گرو [۱].

که در شکل ۱-۱ (الف)، آب با عبور جریان الکتریکی از میان آن الکترولیز شده و به هیدروژن و اکسیژن تبدیل می‌شود. اگر در شکل ۱-۱ (الف) منبع تولید جریان الکتریکی حذف شود، الکترولیز برعکس می‌شود یعنی اکسیژن و هیدروژن با هم واکنش داده و جریان الکتریکی تولید می‌کند که با آمپرسنج قابل اندازه‌گیری است. جهت پیکان در شکل ۱-۱ (ب)، جهت جریان الکترون‌ها از - به + را نشان می‌دهد.

برای توصیف ساده‌تر یک پیل سوختی می‌توان گفت هیدروژن واکنش ساده زیر را انجام می‌دهد و به جای تولید و آزادسازی انرژی گرمایی، انرژی الکتریکی تولید می‌کند [۱].



نتایج آزمایش‌ها که به صورت شکل‌های ۱-۱ (الف) و (ب) در بالا رسم شده است اصول کار یک پیل سوختی را نشان می‌دهد ولی جریان تولید شده، خیلی کوچک است که دلایل عمده آن به صورت زیر است [۱]:

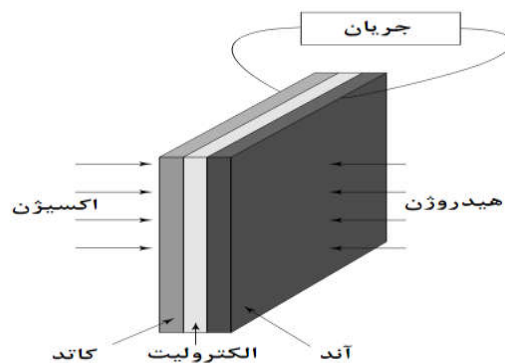
¹ Hydrogen Fuel Cells

² Lawyer and William Grove

۱- کوچک بودن سطح مقطع بین گاز، الکتروود (کاتد و یا آند) و الکترولیت.

۲- فاصله زیاد بین الکتروودها که باعث افزایش مقاومت الکترولیت در برابر عبور جریان الکتریکی می‌شود.

برای حل این مشکل‌ها، الکتروودها به صورت تخت ساخته می‌شوند و الکترولیت به صورت یک لایه نازک قرار می‌گیرد (مانند شکل ۱-۲).



شکل ۱-۲: نمایش بخش‌های آند، کاتد و الکترولیت پیل سوختی [۱].

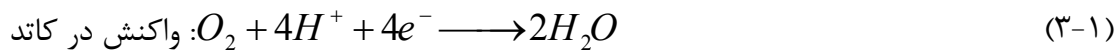
برای این که الکترولیت و گاز بتوانند به الکتروود تماس یابند، ساختار الکتروودها متخلخل ساخته می‌شود چون با این کار بیشترین امکان تماس بین الکتروود، الکترولیت و گاز فراهم می‌شود. برای پی بردن به چگونگی حرکت الکترون‌ها و تولید جریان الکتریکی در اثر واکنش بین هیدروژن و اکسیژن، باید واکنش‌هایی که جداگانه در هر الکتروود اتفاق می‌افتد بررسی شود. این واکنش‌ها برای انواع مختلف پیل‌های سوختی متفاوت است.

پیل سوختی ویلیام گرو (شکل ۱-۱) ساده‌ترین و عمومی‌ترین نوع پیل سوختی است که در آند آن گاز هیدروژن به یون‌های H^+ (پروتون) و الکترون‌های آزاد شده تبدیل می‌شود (نیم‌واکنش الکتروشیمیایی آند) [۱]:



این واکنش انرژی تولید می‌کند.

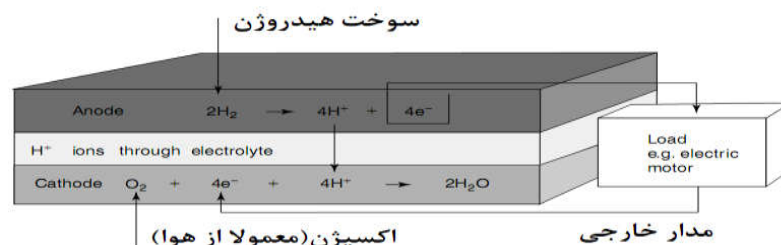
در کاتد، اکسیژن با الکترون‌های جدا شده از الکتروود و با یون‌های H^+ که از الکترولیت آمده است تشکیل آب می‌دهد (نیم‌واکنش الکتروشیمیایی کاتد):



با توجه به واکنش‌های بالا الکترون‌های تولید شده به‌طور پیوسته از میان یک مدار الکتریکی از آند به سمت کاتد حرکت می‌کنند و هم‌زمان یون‌های H^+ از میان الکترولیت عبور می‌کنند. در پیل سوختی ویلیام گرو، الکترولیت به صورت اسید است و از آنجایی که اسید یک سیال با یون‌های H^+ آزاد است، حرکت یون‌های H^+ در آن به خوبی صورت می‌گیرد. پلیمرها نیز می‌توانند یون‌های H^+ متحرک ایجاد کنند پس می‌توانند به عنوان الکترولیت به کار روند به همین دلیل، این مواد غشای مبادله پروتون (PEM) نامیده می‌شوند [۱].

پیل‌های سوختی با غشای الکترولیت پلیمری^۱ (PEMFCs) در دماهای پایین کار می‌کنند و با استفاده از سوخت هیدروژن و اکسیژن و با توجه به دو نیم‌واکنش الکتروشیمیایی، انرژی الکتریکی تولید می‌کنند [۲].

با مقایسه معادلات ۱-۲ و ۱-۳ می‌توان پی برد که در حالت تعادل دو مولکول هیدروژن به ازای هر مولکول اکسیژن لازم است که این موضوع را می‌توان در شکل ۱-۳ نیز مشاهده کرد [۱].



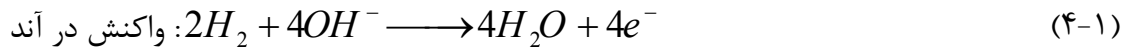
شکل ۱-۳: واکنش‌ها در الکترودها و جریان الکتریکی در پیل سوختی با الکترولیت اسیدی [۱].

توجه شود که الکترولیت اجازه عبور الکترون‌ها را نمی‌دهد (فقط اجازه عبور یون‌های H^+ را می‌دهد) چون در غیر این صورت الکترون‌ها تمایل دارند از الکترولیت عبور کنند و جریان الکتریکی به وجود نمی‌آید. شکل ۱-۳ (الکترولیت اسیدی) و ۱-۴ (الکترولیت قلیایی^۲) کاتد، آند و حرکت الکترون‌ها از آند به کاتد را نشان می‌دهد. چون حرکت الکترون‌ها از منفی به مثبت است پس کاتد ترمینال مثبت یک پیل سوختی است. در مقایسه پیل‌های سوختی با الکترولیت قلیایی و اسیدی، واکنش کلی هر دو

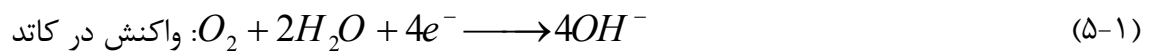
¹ Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells

² Alkaline electrolyte fuel cell

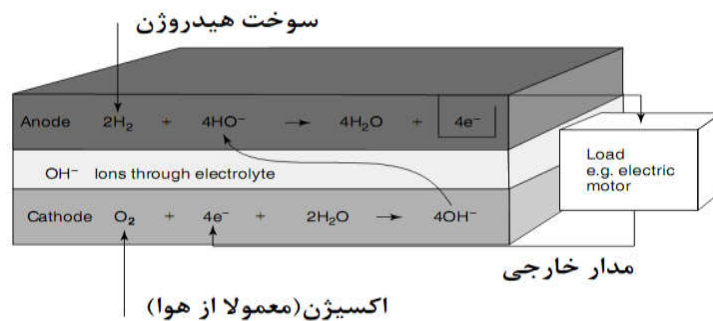
یکسان است ولی نیم‌واکنش‌های هر الکتروود متفاوت است. یک ماده قلیا شامل یون‌های هیدروکسید^۱ (OH⁻) است که این یون‌ها در حال حرکت‌اند. در آند، این یون‌ها با هیدروژن واکنش داده که منجر به تولید انرژی، الکترون‌های آزاد و آب می‌شود [۱].



برای حرکت الکترون‌های آزاد شده از آند به کاتد به یک مدار الکتریکی نیاز است که در شکل ۴-۱ نشان داده شده است. در کاتد اکسیژن با الکترون‌های جدا شده از الکتروود و آب موجود در الکتروولیت، واکنش داده و یون‌های OH⁻ تولید می‌کند [۱]:



برخلاف پیل‌های سوختی با الکتروولیت اسیدی که اجازه عبور یون‌های H⁺ را می‌دادند، پیل‌های سوختی با الکتروولیت قلیایی اجازه عبور یون‌های OH⁻ را می‌دهند. توجه شود که اگرچه آب در کاتد مصرف می‌شود ولی دوباره در آند تولید می‌شود.

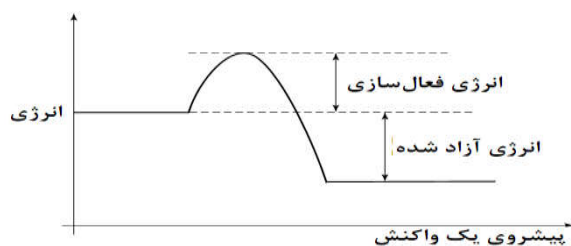


شکل ۴-۱: واکنش‌ها در الکتروودها و جریان الکتریکی در پیل سوختی با الکتروولیت قلیایی [۱].

۲-۱ جریان چه محدودیت‌هایی دارد؟

در نیم‌واکنش آند انرژی آزاد می‌شود که پیشروی واکنش مربوط به آن بر حسب انرژی به صورت کلاسیک در شکل ۵-۱ نشان داده شده است.

¹ Hydroxyl ions



شکل ۱-۵: نمایش کلاسیک انرژی برای واکنش شیمیایی گرماده [۱].

اگرچه انرژی آزاد می‌شود ولی باید انرژی فعال‌سازی^۱ برای بالا رفتن از تپه انرژی^۲ فراهم شود. در صورتی که احتمال داشتن انرژی کافی برای یک مولکول کم باشد واکنش به‌کندی پیش می‌رود. واکنش‌های پیل سوختی از این دسته‌اند (به غیر از دماهای خیلی بالا). سه‌راه عمده برای افزایش نرخ انجام واکنش [۱] استفاده از کاتالیزور، افزایش دما و افزایش مساحت الکترودها است. عامل اول و دوم مربوط به واکنش است ولی عامل سوم مربوط به ساختار پیل سوختی است. اگر واکنش مانند رابطه ۴-۱ باشد OH^- و H_2 باید روی سطح الکترودها واکنش داده و الکترون تولید کنند. این واکنش در محل تماس سوخت، الکترولیت (جامد یا مایع) و الکترودها انجام می‌شود و به نقاط تماس سه فاز^۳ معروف است. این نقطه در طراحی پیل‌های سوختی بسیار مهم است. همان‌طوری که مشخص است نرخ انجام واکنش با مساحت الکترودها متناسب است به همین دلیل الکترودها به صورت متخلخل ساخته می‌شوند تا مساحت سطح مؤثر افزایش یابد. در پیل‌های سوختی پیشرفته، الکترودها ساختار میکرو^۴ دارند که با این کار مساحت سطح آن‌ها ۱۰۰ یا ۱۰۰۰ برابر حالتی است که الکترودها به صورت متخلخل نباشد (شکل ۱-۶) [۱].

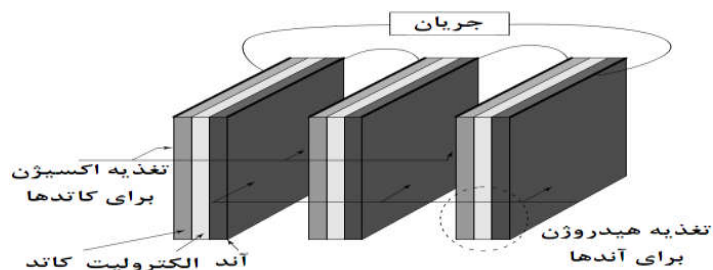


شکل ۱-۶: ایجاد ساختاری متخلخل برای افزایش سطح [۱].

¹Activation energy
²Energy hill
³Three phase contact
⁴Microstructure

۳-۱ پیل‌های سوختی در حالت سری - صفحه دوقطبی^۱

ولتاژ یک پیل سوختی بسیار کوچک است (حدود ۰/۷۷). برای اینکه ولتاژ مفیدی تولید شود باید تعدادی پیل سوختی در حالت سری به هم متصل شوند. مجموعه‌ای از پیل‌های سوختی در حالت سری را دسته پیل^۲ گویند. ساده‌ترین راه برای این کار این است که لبه هر آند به کاتد بعدی وصل شود و همه در یک امتداد باشند (شکل ۷-۱) [۱].



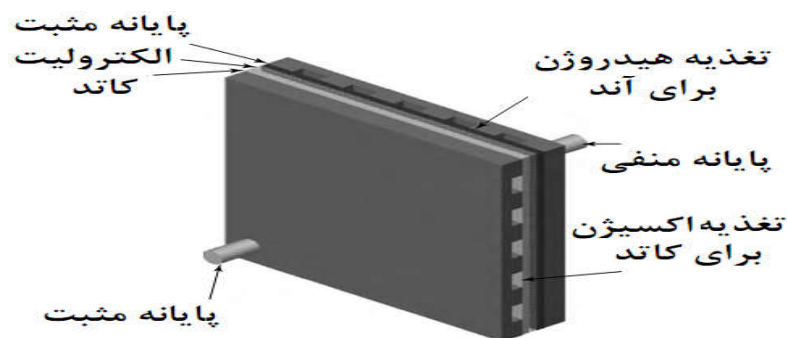
شکل ۷-۱: اتصال سه پیل سوختی در حالت سری [۱].

در این حالت الکترون‌ها مجبور به حرکت از میان مقطع هر الکتروود هستند، به همین دلیل الکتروودها باید کاملاً رسانا باشند. روش مناسب‌تر برای اتصال سلول‌ها استفاده از صفحه دوقطبی است که صفحات اتصال‌دهنده سلول‌ها نیز نامیده می‌شوند. در این روش از یک سری اتصالات سرتاسری استفاده می‌شود که سطح هر کاتد را به آند سلول بعدی متصل می‌کند. همچنین صفحه دوقطبی به عنوان وسیله‌ای برای ورود اکسیژن به کاتد و سوخت گاز به آند به کار می‌رود. توجه شود که مخازن گازهای هیدروژن و اکسیژن به صورت مجزا از هم بوده و به صورت جداگانه وارد پیل سوختی می‌شوند. در یک پیل سوختی تکی^۳ به صورت هم‌زمان هیدروژن به سمت آند و اکسیژن به سمت کاتد فرستاده می‌شود. صفحات دوقطبی (تغذیه‌کننده هیدروژن و اکسیژن) به صورت شیاردار و از جنس گرافیت یا فولاد ضدزنگ هستند (شکل ۸-۱) [۱]. در صفحات دوقطبی کانال‌هایی وجود دارد که جریان‌های گاز را به سطوح الکتروود می‌فرستند (شکل ۹-۱) [۱].

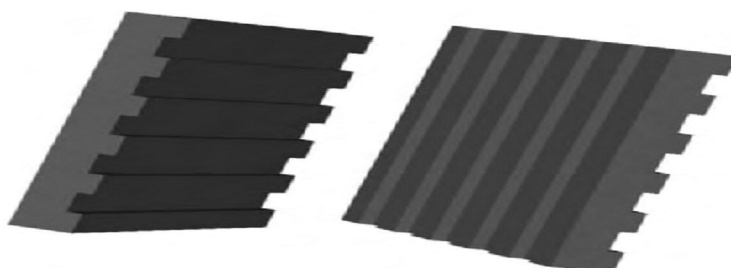
^۱Bipolar Plate

^۲Stack

^۳Single cell

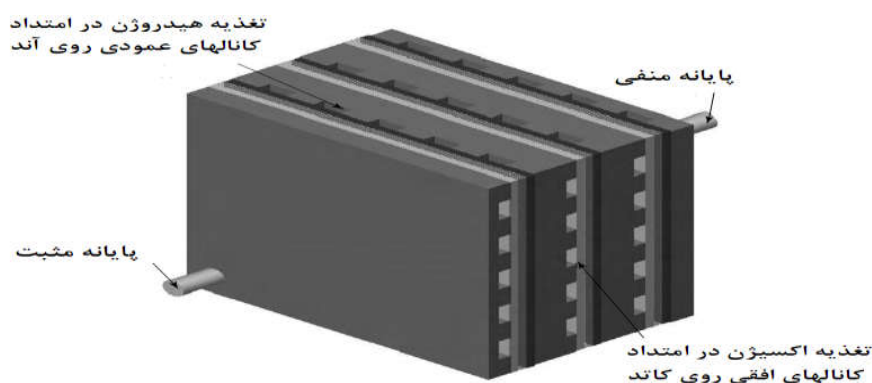


شکل ۱-۸: نمایش سلول تکی که در دو طرف دارای صفحات دوقطبی است [۱].



شکل ۱-۹: نمایش صفحات دوقطبی [۱].

دو طرف این صفحات، شیاردار است که در یک طرف، شیارها به صورت افقی و در طرف دیگر به صورت عمودی است. شکل ۱-۱۰ یک دسته پیل را نشان می‌دهد که کانال‌های عمودی برای تغذیه هیدروژن روی آن‌ها و کانال‌های افقی برای تغذیه اکسیژن یا هوا روی کاتدها ایجاد شده‌اند [۱].



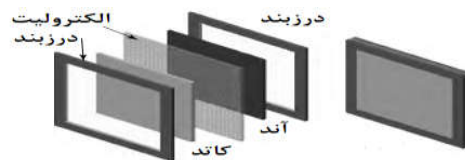
شکل ۱-۱۰: سه سلول در حالت سری، که از صفحات دوقطبی برای اتصال آند و کاتد استفاده شده است [۱].

حالت ایده‌آل برای صفحات دوقطبی این است که نازک باشند تا مقاومت الکتریکی کم شود و دسته پیل‌ها فضای کمتری اشغال کنند. البته این کار باعث می‌شود که کانال‌های جریان گاز باریک‌تر شده و پمپ کردن گاز به درون پیل سوختی مشکل‌تر شود. همچنین اگر به جای اکسیژن خالص از هوا برای

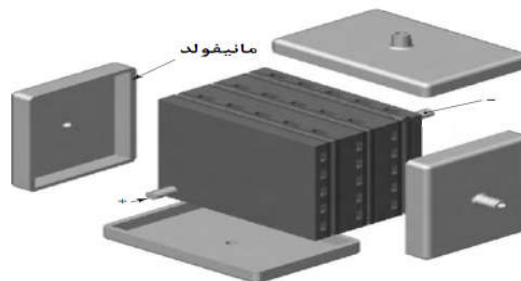
قسمت کاتد استفاده شود باید هوا با نرخ بیشتری وارد شود. در حالتی که پیل‌های سوختی در دمای پایین کار کنند هوا مجبور است که آب تولید شده را نیز با خود عبور دهد [۱].

۴-۱ منابع گاز و خنک‌کاری

طراحی صفحات دوقطبی در دسته پیل بسیار پیچیده است و نصب آن‌ها به دلیل متخلخل بودن الکترودها و امکان نشت گاز از لبه‌ها باید به دقت انجام شود. در طراحی صفحات دوقطبی، الکترولیت را تا حدی بزرگ‌تر از الکترودها در نظر می‌گیرند و از یک درزبند^۱ (واشر) در اطراف لبه‌های هر الکترودها استفاده می‌کنند (شکل ۱-۱۱). سوخت و اکسیژن برای ورود به الکترودها از محفظه‌ای به نام مانیفولد (شکل‌های ۱-۱۲ و ۱-۱۳) وارد می‌شوند. به این‌گونه سلول‌ها، سلول با مانیفولد خارجی^۲ گویند [۱].



شکل ۱-۱۱: نمایش آند، کاتد، الکترولیت و درزبند.



شکل ۱-۱۲: سه سلول در حالت سری با مانیفولد خارجی [۱].



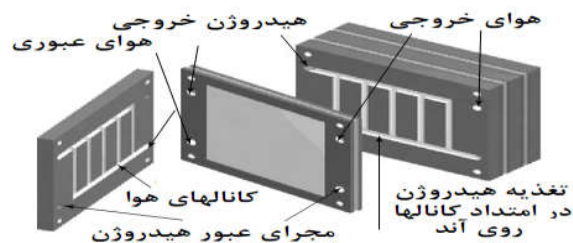
شکل ۱-۱۳: یک دسته پیل با مانیفولد خارجی [۱].

این‌گونه سلول‌ها دو مشکل اساسی دارند. مشکل اول پیچیده بودن خنک‌کاری این‌گونه سیستم‌ها است زیرا با استفاده از هوای عبوری روی کاتد انجام می‌شود. از آنجایی که هوا خود واکنش‌دهنده است پس

^۱ Sealing gasket

^۲ External manifolding

به نرخ بیشتری از مقدار لازم برای انجام واکنش نیاز است. مشکل دوم مسئله نشت گاز است که با وجود درزگیر باز هم نشتی وجود دارد. شکل ۱-۱۴ نوع دیگری از چیدمان یک سلول سوختی را نشان می‌دهد که در آن از کانال‌های اضافی برای رساندن سوخت و اکسیژن به الکترودها استفاده می‌شود. این نوع چیدمان را مانیفولد داخلی^۱ گویند [۱].



شکل ۱-۱۴: یک دسته پیل با مانیفولد داخلی [۱].

در حالت صفحه با مانیفولد داخلی خنک کاری می‌تواند به روش‌های مختلفی انجام گیرد که ساده‌ترین آن‌ها ایجاد کانال‌های باریک از میان صفحه و عبور هوا یا آب خنک از میان آن است. توجه شود که صفحات دوقطبی سهم عمده‌ای را در قیمت یک پیل سوختی دارند و در دماهای خیلی بالا از جنس سفال ساخته می‌شوند [۱].

۱-۵ انواع پیل سوختی

پیل‌های سوختی بر اساس الکترولیتشان دسته‌بندی می‌شوند. در حال حاضر شش نوع پیل سوختی مناسب وجود دارد که اطلاعات مربوط به آن‌ها در جدول ۱-۱ آورده شده است [۱].

جدول ۱-۱: انواع پیل سوختی [۱].

نوع پیل سوختی	یون‌های متحرک	دمای کار	کاربردها
قلیایی (AFC)	OH^-	$50 - 200^\circ C$	وسایل حمل‌ونقل فضایی (آپولو-شاتل)
غشای مبادله پروتون (PEMFC)	H^+	$30 - 100^\circ C$	وسایل نقلیه
متیل الکل مستقیم (DMFC)	H^+	$20 - 90^\circ C$	سیستم‌های با قدرت کم و زمان طولانی
اسیدفسفوریک (PAFC)	H^+	$220^\circ C$	برای سیستم‌های تا 200KW
کربنات ذوب شده (MCFC)	CO_3^{2-}	$650^\circ C$	برای ظرفیت‌های متوسط و بالا تا MW
اکسید جامد (SOFC)	O^{2-}	$500 - 1000^\circ C$	برای سیستم‌های از 2KW تا چند MW

¹Internal manifolding

در پیل سوختی با غشای مبادله پروتون، الکترولیت به صورت پلیمر جامد با پروتون‌های متحرک است. این سلول‌ها در دمای پایین کار می‌کنند؛ بنابراین مشکل نرخ پایین واکنش در آن‌ها با استفاده از کاتالیزور قابل‌حل است که کاتالیزور آن پلاتین است. در این پیل‌های سوختی هیدروژن به صورت خالص یا به صورت ترکیب شده با ماده دیگر استفاده می‌شود. یک نظریه جالب برای تهیه هیدروژن استفاده از متانول (CH_3OH) به جای سوخت هیدروژن در پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون است که پیل سوختی متیل الکل مستقیم^۱ نامیده می‌شود. علت کلمه مستقیم این است که هیدروژن مستقیم از این ماده استخراج می‌شود. متأسفانه این سلول‌ها قدرت خیلی کمی دارند اما با این وجود در قدرت کم هم کاربردهای زیادی در تجهیزات الکتریکی قابل‌حمل دارند (این سوخت مایع است). قابل‌ذکر است که پیل سوختی غشای مبادله پروتون در اولین فضایی‌های دارای خدمه استفاده شد. نوع دیگر پیل سوختی، پیل سوختی قلیایی است که مسئله پایین بودن سرعت واکنش را حل کرده است (استفاده از الکترودهای با تخلخل بالا، استفاده از کاتالیزور و فشار بالا). این پیل سوختی بین محدوده دمایی 100°C تا 200°C عمل می‌کند [۱].

۱-۵-۱ پیل‌های سوختی اسید فسفوریک^۲ (PAFC)

الکتروود متخلخل، کاتالیزورهای پلاتین، دمای نسبتاً پایین و بهبود نرخ واکنش از دلایل منطقی استفاده از این نوع پیل سوختی است ولی در عوض قیمت بالا، پیچیدگی و ابعاد بزرگ از مشکلات مربوط به آن است [۱].

۱-۵-۲ پیل سوختی اکسید جامد^۳ (SOFC)

این نوع پیل سوختی در محدوده دمایی 600°C تا 1000°C کار می‌کند. نرخ واکنش بالایی دارد و می‌تواند بدون کاتالیزورهای گران‌قیمت کار کند. همچنین همه مشکلات پیل سوختی اسید فسفوریک

¹ Direct methanol fuel cells

² Phosphoric acid fuel cell

³ Solid oxide fuel cell

را حل کرده، بسیار ساده است و می‌تواند به‌طور مستقیم از گاز طبیعی استفاده کند ولی ساخت آن هزینه بالایی دارد [۱].

۱-۵-۳ پیل سوختی کربنات ذوب‌شده^۱ (MCFC)

این نوع پیل سوختی به دی‌اکسید کربن موجود در هوا برای کار نیاز دارد. دمای بالای آن، نرخ واکنش بالا را فراهم می‌آورد. کاتالیزور آن نیکل است که ماده ارزانی است. می‌تواند از گازهایی همچون متان و گاز زغال‌سنگ (CO, H_2) به‌طور مستقیم استفاده کند [۱].

۱-۶-۱ پیل‌های سوختی دیگر

علاوه بر پیل‌های سوختی عمده و اساسی که در بالا توضیح داده شد پیل‌های سوختی دیگری نیز وجود دارند که در مجلات علمی به آن‌ها اشاره شده است که در زیر برخی از آن‌ها بیان می‌شود. همچنین سلول‌هایی وجود دارند که به صورت یک پیل سوختی توضیح داده شده‌اند اما در حقیقت پیل سوختی نیستند. یک پیل سوختی معمولاً به صورت یک وسیله الکتریکی تعریف می‌شود که منبعی از سوخت را به‌طور پیوسته به انرژی الکتریکی و گرما تبدیل کند و ضمن تولید انرژی، الکترودها و الکترولیت مصرف نشوند البته مقداری فرسوده شده و حالت گسیختگی پیدا می‌کنند [۱].

۱-۶-۱ پیل‌های سوختی زیستی^۲

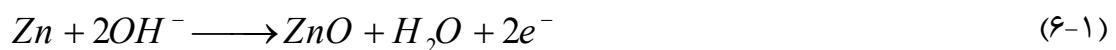
یکی دیگر از انواع پیل‌های سوختی، پیل‌های سوختی زیستی‌اند که از یک سوخت ارگانیک مانند متیل الکل یا اتیل الکل استفاده می‌کنند. البته این نوع سلول‌ها به صورت تجاری استفاده نمی‌شوند و جزییات آن‌ها به صورت کاربردی مورد بررسی قرار نگرفته است. در پیل‌های سوختی شیمیایی، کاتالیزور باعث افزایش نرخ واکنش در الکترودها می‌شود که در پیل‌های سوختی زیستی آنزیم‌ها نقش کاتالیزور را ایفا می‌کنند [۱].

۱-۶-۲ سلول‌های فلز - هوا

¹Molten carbonate fuel cell

² Biological fuel cells

از این دسته می‌توان به سلول هوا-روی، هوا - آلومینیوم و هوا-منیزیم اشاره کرد. نحوه عملکرد هر سه یکسان است که سلول‌های هوا - آلومینیوم و هوا-منیزیم به صورت تجاری تولید می‌شوند. این نوع پیل‌ها به پیل‌های سوختی روی^۱ معروفاند. در الکتروود منفی این نوع پیل‌ها واکنش فلز با الکتروولیت قلیایی تشکیل هیدروکسید^۲ یا اکسید فلز می‌دهد. برای مثال در حالت روی، واکنش به صورت زیر است [۱]:



بنابراین الکترون‌های آزاد شده پس از عبور از یک مدار الکتریکی خارجی به قسمت کاتد (هوا) رفته و با اکسیژن و آب واکنش داده و یون‌های هیدروکسیل تشکیل می‌دهند. واکنش کاتد کاملاً شبیه پیل سوختی قلیایی است [۱]:



توجه شود که اکسید فلز یا هیدروکسیل به صورت حل شده در الکتروولیت باقی می‌ماند. باتری‌های هوا-روی در حالت‌هایی که نیاز به جریان کم و مدت زمان طولانی کارکرد داشته باشند دارای گستره فراوانی است مانند سمک [۱].

۱-۶-۳ سلول‌های جریان اکسایش-کاهش^۳ یا پیل‌های سوختی احیاء کننده^۴

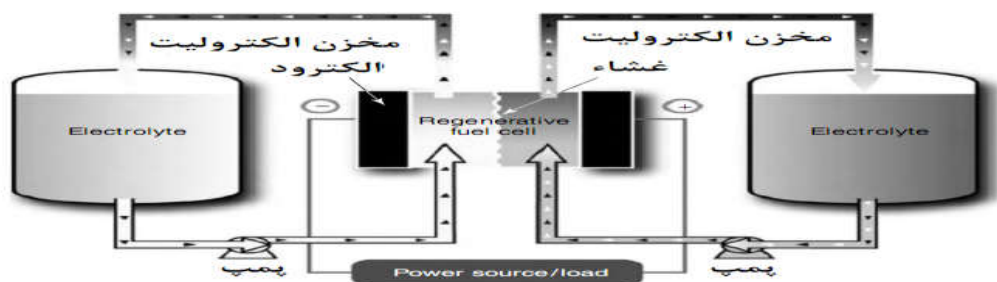
نوع دیگری از سلول‌ها که برخی مواقع به اشتباه پیل سوختی نامیده می‌شوند، سلول‌های جریان اکسایش-کاهش هستند. ظرفیت این نوع سلول‌ها می‌تواند خیلی زیاد باشد. اصول کلی کار این سیستم‌ها در شکل ۱-۱۵ نشان داده شده است که شامل دو سیال (سوخت) است. یک محلول سولفید سدیم (Na₂S₂) در آب به سمت الکتروود منفی و یک محلول تری برمید سدیم به سمت الکتروود مثبت فرستاده می‌شود [۱].

¹Zinc fuel cells

²Hydroxide

³Redox flow cells

⁴Regenerative fuel cells



شکل ۱-۱۵: شماتیک یک پیل سوختی احیاء کننده [۱].

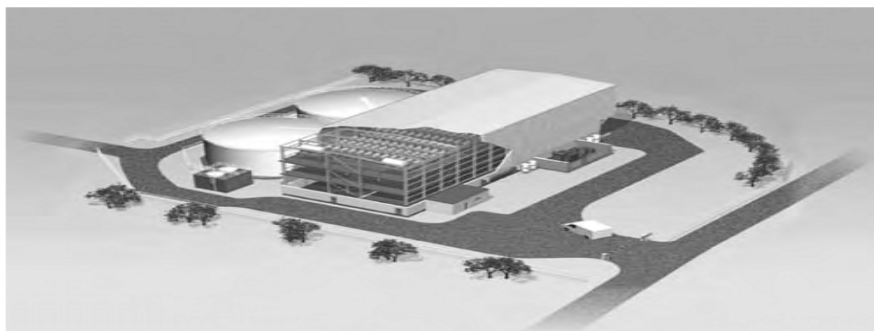
واکنش در الکترود منفی به صورت زیر است:



الکترودها در مدار خارجی جریان یافته و یون‌های سدیم از میان غشاء به سمت الکترولیت مثبت حرکت می‌کنند.



در این سیستم محلول سولفید سدیم به تدریج به پلی‌سولفید سدیم و محلول تری‌برمید سدیم به برمید سدیم تبدیل می‌شود. شکل ۱-۱۶ شماتیک یک پیل سوختی احیاء کننده را در کمبریج انگلستان نشان می‌دهد که در آن از دو تانک برای نگهداری محلول استفاده شده است.



شکل ۱-۱۶: شماتیک یک پیل سوختی احیاء کننده در کمبریج انگلستان [۱].

۷-۱ بخش‌های دیگر پیل سوختی

بخش‌هایی از پیل سوختی که تاکنون مورد بررسی قرار گرفت شامل: الکترودها، الکترولیت و صفحه دوقطبی است. قسمت‌های دیگر پیل سوختی اغلب به تعادل دستگاه^۱ (BOP) معروف‌اند. این قسمت‌ها شدیداً وابسته به نوع پیل سوختی و سوخت مورد استفاده است. در همه پیل‌های سوختی، هوا و

^۱ Balance of plant

سوخت می‌بایست از میان مجموعه سلول‌ها عبور کند که این کار با استفاده از پمپ‌ها، دمنده‌ها و کمپرسورها صورت می‌گیرد. جریان مستقیم (DC) خروجی یک دسته پیل سوختی به‌ندرت برای اتصال مستقیم به یک وسیله الکتریکی مناسب است به همین دلیل به یک دستگاه مناسب‌سازی قدرت^۱ در نزدیک آن نیاز است که می‌تواند توسط یک تنظیم‌کننده ولتاژ انجام شود. منبع تغذیه و مخزن ذخیره سوخت نیز از اجزاء اصلی پیل‌های سوختی هستند. پس به‌طور خلاصه پمپ، دمنده، کمپرسور، منبع تغذیه، مخزن ذخیره، شیرهای کنترل و تنظیم‌کننده‌های ولتاژ از دیگر اجزاء یک پیل سوختی هستند [۱].

۱-۸ نحوه مقایسه پیل‌های سوختی

برای مقایسه پیل‌های سوختی با دیگر سیستم‌های تولیدکننده قدرت به معیارهایی برای مقایسه نیاز است. معیار مقایسه الکتروود و الکتروولیت پیل‌های سوختی، جریان بر واحد سطح (چگالی جریان)^۲ است که واحد آن معمولاً به صورت mA/cm^2 یا واحد آمریکایی A/ft^2 بیان می‌شود. البته چگالی جریان باید در یک ولتاژ کار مخصوص که معمولاً حدود $0/6$ تا $0/7$ ولت است اندازه‌گیری شود. از ضرب این دو عدد توان در واحد سطح (mW/cm^2) حاصل می‌شود.

$$\text{توان چگالی}^3 = \frac{\text{توان}}{\text{حجم}} \quad \text{kW/m}^3 \quad (10-1)$$

$$\text{توان مخصوص}^4 = \frac{\text{توان}}{\text{جرم}} \quad \text{W/kg} \quad (11-1)$$

قیمت پیل سوختی پارامتر مهمی است که برای مقایسه از واحد دلار بر کیلووات^۵ استفاده می‌شود. تعیین عمر پیل سوختی نسبتاً مشکل است و هنوز به صورت واقعی تعیین نشده است چون استهلاک

¹ Power conditioning

² Current density

³ Power Density

⁴ Specific Power

⁵ Dollars per kilowatt

آن‌ها به صورت تدریجی و با گذشت زمان است. برای عملکرد مطلوب پیل سوختی قدرت مجاز تعریف می‌شود که اگر پیل با قدرتی پایین‌تر از حد مجاز کار کند عمر بالایی دارد [۱].

۹-۱ معایب و مزیت‌ها

کاربرد، معایب و مزیت‌های یک پیل سوختی بسته به نوع آن متفاوت است که در شکل ۱-۱۷ به‌طور خلاصه توضیح داده شده است که بعضی از پارامترهای مورد بررسی بدین گونه است [۱]:

بازده: پیل‌های سوختی بازده و کارآمدی بیشتری نسبت به موتورهای احتراقی با مبنای پیستونی یا توربینی دارند.

نشستی کم: اگر سوخت پیل هیدروژن باشد محصول اصلی پیل سوختی آب خالص است که در این حالت پیل سوختی نشستی ندارد که این بهترین مزیت استفاده پیل سوختی در وسایل نقلیه است.

سروصدا: پیل‌های سوختی خیلی آرام و بی سروصدا کار می‌کنند. این یک ویژگی خیلی مهم در استفاده آن‌ها در وسایل حمل‌ونقل است.

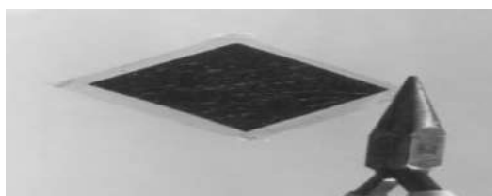
کاربردها	تجهیزات الکتریکی متحرک			ماشین و قایق‌ها		اتوبوس‌ها		
	1	10	100	1k	10k	100k	1M	10M
توان (وات)	1	10	100	1k	10k	100k	1M	10M
مزیت عمده	چگالی انرژی بالاتر از باتری سریع بودن شارژ			بازده بالا		بازده بالا-بی سر و صدا بدون آلودگی		
رنج کاربرد پیل سوختی	DMFC			AFC		MCFC		
	PEMFC					SOFC		
						PAFC		

شکل ۱-۱۷: کاربرد و مزیت‌های یک پیل سوختی بسته به نوع آن [۱].

یکی از اساسی‌ترین اشکالات پیل‌های سوختی این است که بهترین سوخت برای آن‌ها هیدروژن است چون هیدروژن آماده و در دسترس نیست؛ بنابراین می‌بایست از وسیله‌ای به نام مبدل استفاده کرد که سوخت هیدروکربنی یا الکلی را به هیدروژن تبدیل کند.

۱۰-۱ بررسی جزئی پیل سوختی غشای مبادله پروتون

نام دیگر پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون، پیل سوختی پلیمر جامد^۱ (SPFC) است که اولین بار توسط جنرال الکتریک^۲ در سال ۱۹۶۰ در امریکا برای استفاده ناسا^۳ در وسایل نقلیه فضایی دارای سرنشین مورد استفاده قرار گرفت. الکترولیت یک هدایت‌کننده یون از جنس پلیمر است که در دو طرف آن الکتروود قرار گرفته است. مجموعه آند، الکترولیت (غشاء) و کاتد به صورت خیلی نازک در شکل ۱-۱۸ آورده شده است. هر الکتروود دارای سه قسمت کانال گاز، کاتالیزور و لایه انتشار گاز^۴ است. ضخامت غشاء ۰/۰۵ تا ۰/۱ میلی‌متر، ضخامت الکتروود ۰/۰۳ میلی‌متر و ضخامت لایه انتشار گاز بین ۰/۲ تا ۰/۵ میلی‌متر است [۱].



شکل ۱-۱۸: مجموعه آند، الکترولیت و کاتد به صورت خیلی نازک [۱].

مجموعه الکتروود- غشاء^۵ (MEA) به‌طور سری با استفاده از صفحات دوقطبی به هم متصل می‌شوند. دسته پیل‌ها به‌طور معمول از ۵۰ تا ۱۰۰ پیل سوختی سری ساخته می‌شوند که هر سلول خود شامل چندین ناحیه و زیر ناحیه است. این سلول‌ها با استفاده از صفحات دوقطبی به همدیگر متصل شده و محیطی را برای انتقال الکترون‌ها و گازهای واکنش‌دهنده فراهم می‌کنند. نیم‌واکنش‌ها در آند و کاتد اتفاق می‌افتد که این دو ناحیه توسط غشاء از هم جدا می‌شوند [۲]. یون متحرک در پلیمرها H^+ یا پروتون است. الکترولیت‌های پلیمری در دماهای پایین کار می‌کنند که مزیت اصلی این ویژگی این است که پیل سوختی می‌تواند به سرعت شروع به کار کند. مزیت دیگر این نوع پیل سوختی ضخامت کم آن است که می‌تواند به صورت فشرده ساخته شود.

¹ Solid Polymer Fuel Cell

² General Electric

³ NASA

⁴ GDL

⁵ Membrane electrode assembly

همچنین این نوع پیل سوختی در معرض تقابل سوخت قرار نمی‌گیرد و در هر موقعیتی می‌تواند کار کند (در معرض سیال خورده نمی‌شود) که این بدین معنی است که برای استفاده در وسایل نقلیه و کاربردهای حمل‌ونقلی مناسب است. این نوع پیل سوختی برای اولین بار در فضایی‌های ناسا استفاده شد که طول عمر آن تقریباً ۵۰۰ ساعت بود که البته برای مأموریت اولیه کافی بود. سپس با استفاده از یک غشای پلیمر جدید در سال ۱۹۶۷ به نام نافیون^۱ گسترش پیدا کرد و غشاء با نام تجاری دوپونت^۲ ثبت شد. این نوع پیل سوختی در اتوبوس، اتومبیل و محدوده بسیار وسیعی از کاربردهای حمل‌ونقل و ترکیب دستگاه‌های حرارتی و برق (CHP) مورد استفاده قرار می‌گیرد. یک دلیل برای ترجیح این نوع پیل سوختی، استفاده مجدد ناسا در مدارگردهای فضایی جدید می‌باشد. می‌توان استدلال کرد که دامنه کاربرد این نوع پیل سوختی نسبت به فناوری‌های تولید انرژی الکتریکی از همه بیشتر است. در یک پیل سوختی غشای مبادله پروتون جنبه‌های زیر مهم است [۱]: الکترولیت، ساختار الکتروود، کاتالیزور، رفتار آب، خنک کردن سلول سوختی، اتصال سلول‌ها در حالت سری (طراحی صفحات دوقطبی روش‌های متفاوتی دارد و همچنین با روش‌های متفاوتی به صورت سری قرار می‌گیرند)، فشار کل سلول و واکنش‌دهنده‌های مورد استفاده (اکسیژن می‌تواند به صورت هوا استفاده شود و هیدروژن خالص تنها روش ممکن نیست).

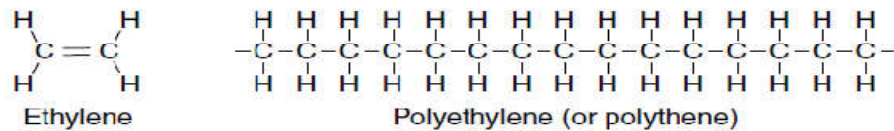
۱-۱۱ الکترولیت‌های پلیمری چگونه کار می‌کنند؟

برای غشای الکترولیت پلیمری می‌توان از پلیمرهای سولفونات شده فلئور (که معمولاً فلئورواتیلن است) استفاده کرد. معروف‌ترین و مورد تأیید قرار گرفته‌ترین آن‌ها نافیون (دوپونت) است که از طریق روش‌های مختلفی از سال ۱۹۶۰ توسعه یافته است. ساختمان مواد الکترولیت به شرح زیر است [۱]:
در ابتدا به پلیمر پلی‌اتیلن^۳ اشاره می‌شود که ساختار مولکولی آن در شکل ۱-۱۹ آورده شده است.

¹ Nafion

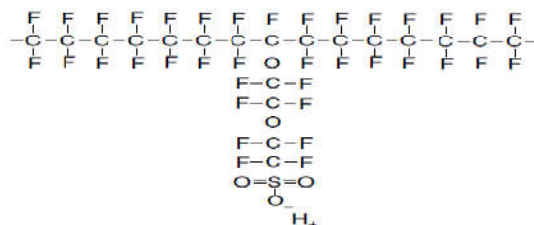
² Dupont

³ Polyethylene



شکل ۱-۱۹: ساختمان پلیمر پلی اتیلن [۱].

مرحله اول ساخت الکترولیت، اصلاح پلیمر پایه توسط جانشینی فلئوئور^۱ با هیدروژن است. این پروسه برای خیلی دیگر از ترکیبات هم به کار برده شده و فلئوئور دار شدن^۲ نام دارد که البته اتیلن دارای ۴ فلئوئور^۳ هم نامیده می شود. پلیمر نشان داده شده در شکل ۱-۲۰ مربوط به حالتی است که از تعداد زیادی اتیلن دارای ۴ فلئوئور استفاده می شود که PTFE نامیده می شود. علامت تجاری آن ICI است و به صورت تفلون^۴ فروخته می شود. این مواد در گسترش پیل های سوختی بسیار مهم اند. پیوندهای قوی بین فلئوئور و کربن باعث دوام و مقاومت در برابر واکنش های شیمیایی می شود. یکی دیگر از خواص مهم آن این است که به شدت آب گریز است و در الکترودهای پیل سوختی برای حرکت آب تولیدی به خارج الکتروود و جلوگیری از انباشته شدن سیال استفاده می شود. به همین دلیل حتی در پیل های سوختی اسید فسفریک^۵ و قلیایی^۶ هم استفاده می شود. مرحله دوم ساخت الکترولیت سولفونات کردن پلیمر PTFE است یعنی به آن یک زنجیر که در انتهای آن اسید سولفونیک (HSO₃) است اضافه شود. این مرحله در شکل ۱-۲۰ نشان داده شده است که برای انواع نافیون متفاوت است [۱]. سولفودار کردن تکنیکی است که به طور گسترده در فرآیندهای شیمیایی مورد استفاده قرار می گیرد (ساخت مواد شوینده).



شکل ۱-۲۰: پلیمر سولفونات شده [۱].

-
- ¹Fluorine
 - ²Perfluorination
 - ³Tetrafluoroethylene
 - ⁴Teflon
 - ⁵Phosphoric acid
 - ⁶Alkali

گروه HSO_3^- به صورت یونی پیوند انجام می‌دهد بنابراین در انتهای زنجیر جانبی یون SO_3^- قرار می‌گیرد به همین دلیل ساختار نتیجه شده یونبار نامیده می‌شود. در نتیجه‌ی حضور یون‌های H^+ و SO_3^- جاذبه متقابل قوی بین یون‌های مثبت و منفی حاصل از هر مولکول ایجاد شده و باعث می‌شود که مولکول‌های زنجیر جانبی تمایل به خوشه‌ای شدن داشته باشند. در حال حاضر یک ویژگی کلیدی اسید سولفونیک این است که بسیار آب‌دوست است و آب را جذب می‌کند به همین دلیل در مواد شوینده مورد استفاده قرار می‌گیرد چون یک طرف مولکول به راحتی با آب مخلوط شده و طرف دیگر متصل به آلودگی است. در نافیون این بدین معنی است که ناحیه‌های آب‌دوستی درون یک ماده‌ی کاملاً آب‌گریز ایجاد شده است. نواحی آب‌دوست اطراف خوشه‌های زنجیرهای جانبی سولفونات شده می‌توانند منجر به جذب مقدار زیادی آب شوند و وزن خشک ماده تا ۵۰٪ افزایش یابد [۱]. در نواحی آبدار یون‌های H^+ برای جذب SO_3^- نسبتاً ضعیف‌اند و می‌توانند حرکت کنند که این باعث به وجود آمدن اسید رقیق می‌شود. ماده حاصل دارای نواحی اسید رقیق در یک ساختار آب‌گریز قوی است که در شکل ۱-۲۱ نشان داده شده است [۱].



شکل ۱-۲۱: آب جمع شده در نواحی آب‌دوست در اطراف شاخه‌های زنجیرهای جانبی سولفونات شده [۱].
 نواحی آبدار تا حدی مجزا از یکدیگرند ولی یون‌های H^+ هنوز می‌توانند از میان ساختار مولکولی بلند حرکت کنند. در یک الکترولیت که به خوبی آبدار باشد تقریباً ۲۰ مولکول آب به ازای هر زنجیر جانبی SO_3^- می‌تواند وجود داشته باشد. استفاده از نافیون و دیگر یونبارهای سولفات در پیل سوختی دارای مزیت‌های زیر است [۱]:

از لحاظ شیمیایی مقاومت بالایی دارند، از لحاظ مکانیکی قوی‌اند و حتی در ضخامت‌های خیلی کم هم می‌توانند ساخته شوند (حتی کمتر از ۵۰ میکرومتر)، اسیدی هستند، می‌توانند مقدار زیادی آب را

جذب کنند و اگر به خوبی آبدار شوند یون های H^+ می توانند کاملاً به طور آزادانه در ماده حرکت کنند و یک هدایت کننده خوب پروتون باشند. پس به طور خلاصه برای ایجاد الکترولیت به انتهای زنجیر پلیمر، اسید سولفونیک (HSO_3) به صورت یونی اضافه می شود به همین دلیل ساختار به دست آمده اینومر^۱ یا یونبار نامیده می شود که در نتیجه ی حضور اسید سولفونیک، الکترولیت پلیمری رفتار آب دوست از خود نشان می دهد.

۱-۱۲ الکترودها و ساختار آن ها

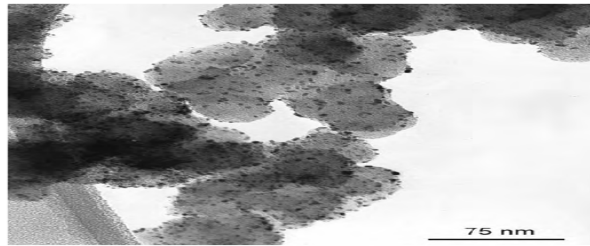
بهترین کاتالیزور برای هر دو قسمت آند و کاتد پلاتین است. در روزهای اولیه ی توسعه پیل سوختی غشای مبادله پروتون، این کاتالیزور به میزان ۲۸ میلی گرم بر سانتی متر مربع مورد استفاده قرار می گرفت. نرخ بالای مصرف این ماده باعث شد که پلاتین یک عامل عمده در هزینه این نوع پیل سوختی باشد. در سال های اخیر استفاده این کاتالیزور به میزان ۰/۲ میلی گرم بر سانتی متر مربع کاهش یافته و این کار باعث افزایش توان شده است. در چنین حالتی قیمت مواد خام اولیه فلز پلاتین برای تولید ۱ کیلوولت، حدود ۱۰ دلار است (مقدار کمی از هزینه کل). ساختار پایه ای الکتروود در طراحی های مختلف پیل سوختی غشای مبادله پروتون شبیه به هم هستند ولی در جزئیات متفاوت اند. آند و کاتد در اصل خیلی شبیه به هم هستند و در بسیاری از پیل های سوختی یکسان اند [۱]. کاتالیزور پلاتین از ذرات خیلی کوچک پلاتین روی سطحی از کربن پودر شده تشکیل می شود که ذرات کربن پودر شده بزرگ تر از ذرات پلاتین است. ذرات کربن پودر شده XC72 یا کابوت^۲ هستند که به صورت ایده آل در شکل ۱-۲۲ نشان داده شده است [۱].



شکل ۱-۲۲: نمایش ایده آل کاتالیزور پلاتین که به صورت ذرات بسیار ریز روی سطحی از کربن پودر شده قرار گرفته اند که ذرات سیاه رنگ کربن پودر شده و ذرات سفید رنگ پلاتین می باشند [۱].

¹Ionomer
²Cabot

تصویر واقعی از کاتالیزور در شکل ۱-۲۳ آورده شده است:



شکل ۱-۲۳: نمایش واقعی کاتالیزور پیل سوختی (نقاط سیاه ذرات کاتالیزور هستند) [۱].

در شکل بالا پلاتین به مقدار زیادی روی سطح گسترش یافته است به طوری که سطح تماس بسیار بالایی با واکنش دهنده‌ها دارد. برای ساخت الکتروود دو روش زیر استفاده می‌شود که نتیجه نهایی اساساً یکی است:

روش الکتروود مجزا^۱: در این روش به کربنی که به آن پلاتین اضافه شده است (لایه کاتالیزور) لایه‌ای دیگر اضافه می‌شود که این لایه با تکنیک‌های خاصی به مواد متخلخل و رسانایی همچون کاغذ کربنی و یا پارچه کربنی تبدیل می‌شود. برای آب‌گریز کردن لایه اضافه شده و سهولت در خروج آب تولید شده در محیط، اغلب تفلون به آن اضافه می‌کنند. چون ساختار الکتروودها به گونه‌ای است که گاز می‌تواند درون آن نفوذ کند اغلب به لایه انتشار گاز معروف است. در هر طرف غشای الکتروولیت پلیمری یک الکتروود قرار گرفته است که به مجموعه حاصل، مجموعه الکتروود - غشاء گویند [۱].

روش الکتروود مستقیم: این روش مانند روش قبلی نیست که ابتدا الکتروود ساخته شود سپس به الکتروولیت متصل شود بلکه به طور مستقیم روی الکتروولیت ساخته می‌شود. در این روش روی الکتروولیت کاتالیزور ساخته می‌شود (پلاتین به ذرات کربن اضافه می‌شود). سپس لایه انتشار گاز که از جنس پارچه کربن یا کاغذ کربن بوده و ضخامت آن حدود ۰/۲ تا ۰/۵ میلی‌متر است روی کاتالیزور ساخته می‌شود. لایه انتشار گاز اتصال الکتریکی بین کاتالیزور و صفحات دوقطبی ایجاد می‌کند. علاوه بر این آب تولیدی را به دور از سطح الکتروود منتقل کرده و لایه‌ای محافظ برای کاتالیزور است [۱].

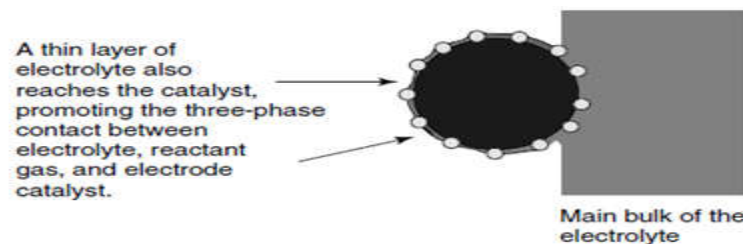
¹Separate electrode method

هر کدام از این دو روش انتخاب شود ساختاری مانند شکل ۱-۲۴ به دست می‌آید که به صورت ایده-آل رسم شده است [۱].



شکل ۱-۲۴: نمایش ایده‌آل الکتروود پیل سوختی غشای مبادله پروتون [۱].

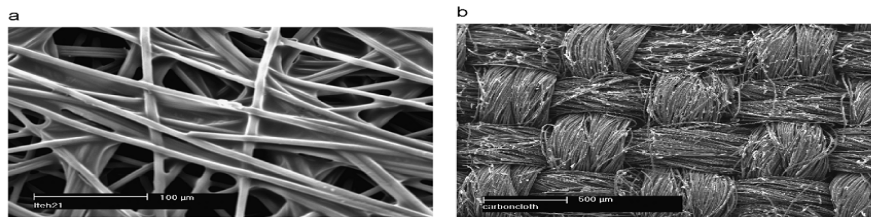
ذرات کاتالیزور به یک سمت الکتروولیت چسبیده و سمت دیگر لایه انتشار گاز قرار گرفته است. وظیفه لایه انتشار گاز جمع‌آوری جریان، حذف آب و حمایت فیزیکی کاتالیزور است. در شکل ۱-۲۵ کاتالیزور و الکتروولیت نمایش داده شده است:



شکل ۱-۲۵: ماده الکتروولیت روی سطح کاتالیزور پخش شده تا باعث افزایش نقاط تماس سه فاز (الکتروولیت، گاز واکنش‌دهنده و کاتالیزور) شود [۱].

با توجه به شکل می‌توان مشاهده کرد که ماده الکتروولیت روی سطح کاتالیزور پخش شده است. این کار باعث افزایش سطح تماس مستقیم بین کاتالیزور و الکتروولیت شده، نقاط تماس سه فاز (الکتروولیت، گاز واکنش‌دهنده و کاتالیزور) افزایش یافته و عملکرد پیل سوختی به‌طور محسوسی بهتر می‌شود.

همان‌طوری که بیان شد لایه انتشار گاز از کاغذ کربنی یا پارچه کربنی ساخته می‌شود (شکل ۱-۲۶). کاغذ کربنی زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد که سلول بخواهد تا حد ممکن فشرده ساخته شود. پارچه کربنی ضخیم‌تر است پس مونتاژ مکانیکی آن به سادگی صورت گرفته و آب بیشتری جذب می‌کند [۱].



شکل ۱-۲۶: لایه انتشار گاز از جنس a: کاغذ کربنی b: پارچه کربنی [۴].

بعد از اولین استفاده‌ی پیل سوختی غشای مبادله پروتون توسط جنرال الکتریک^۱ در سفرهای فضایی ناسا^۲ در سال ۱۹۶۰، بیش از ۲۰ سال دیگر از آن استفاده نشد که علت، هزینه‌های بالا و توان خروجی کم آن بود [۳]. در تحقیقاتی که به تازگی در مورد این پیل سوختی انجام گرفته، مشاهده شده است که این نوع پیل سوختی می‌تواند یکی از امیدوارکننده‌ترین منبع قدرت در وسایل حمل‌ونقل برای نسل‌های آینده باشد [۵ و ۶]. در دو دهه گذشته تحقیقات زیادی به منظور بهبود عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون انجام شده و نتایج نشان می‌دهد که این وسیله قابل‌رقابت با موتورهای خودرو است [۳]. بهبود قابل‌توجه در دوام، هزینه و رفتار الکتروشیمیایی منجر به تجاری شدن این فناوری شده است. علاوه بر این، بهبود عملکرد این سیستم به دلیل واکنش شیمیایی و ساختار میکرو آن بسیار پیچیده است. برای بررسی اثرات مختلف (مانند شرایط کارکرد، جنس و خواص مربوط به ساختار) بر کارایی پیل سوختی از مدل‌های ریاضی استفاده می‌شود. بنابراین ضروری است که مدل‌های ریاضی مورد استفاده دقیق و قابل‌اعتماد باشند [۲].

این رساله شامل پنج فصل است. در فصل اول ابتدا مقدمه‌ای بر پیل سوختی و دسته‌بندی آن ذکر شده است. سپس پیل سوختی غشای مبادله پروتون بیان شده و اجزای مختلف آن شرح داده شده است. فصل دوم شامل مروری بر کارهای گذشته است که به حالت‌های تک‌فازی، دوفازی، عددی، تحلیلی، آزمایشگاهی، ماکروسکوپی و میکروسکوپی دسته‌بندی شده و هر حالت به‌طور جزئی توصیف شده است. در انتهای این فصل به ارائه تعریف مسئله، هدف از این مطالعه، نوآوری‌های مطالعه حاضر، فرضیات، پارامترها و معادلات حاکم بر محیط پرداخته شده است. فصل سوم به بیان روش شبکه

¹General electric

²NASA

بولتزمن، انواع مدل‌های آن، مزایا و معایب هر مدل، معادلات حاکم به شکل بولتزمن، معادلات حالت و نحوه شبیه‌سازی به کمک این روش می‌پردازد. همچنین در انتهای این فصل به منظور اعتبارسنجی و نشان دادن درستی برنامه مورد استفاده، هفت آزمون مختلف انجام شده و نتایج آن‌ها با نتایج روابط تجربی و تحلیلی مقایسه شده است. توجه شود که هدف از این رساله مطالعه رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز است و از آنجایی که محیط مورد بررسی یک محیط ساختگی است و رفتار آب مایع به شدت تابع قرارگیری فیبرهای کربن موجود در محیط است نمی‌توان نتایج را به صورت کمی مورد اعتبارسنجی قرار داد. به همین دلیل قبل از شروع بررسی، با مطالعه هفت آزمون مختلف نشان داده شده که برنامه مورد استفاده برای شبیه‌سازی جریان آب مایع در لایه انتشار گاز معتبر است. در فصل چهارم ابتدا جابجایی دو سیال مخلوط‌نشده در محیط متخلخل تصادفی مطالعه شده و اثرات عدد موینگی، زاویه خیزی و نسبت ویسکوزیته روی زمان رسوخ، اشباع آب مایع، طول انگشتی‌ها، تعداد انگشتی‌ها و ضخامت آن‌ها بررسی شده است. همچنین محدوده ضریب تخلخل، عدد موینگی و زاویه خیزی در لایه انتشار گاز بیان شده و مراحل تولید هندسه برای شبیه‌سازی دوبعدی لایه انتشار گاز شرح داده شده است. سپس با بیان شرایط مرزی مسئله به بررسی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز و لایه انتشار گاز آب‌گریز-آب‌دوست پرداخته شده و محل و ضخامت مناسب برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست تعیین شده است. در نهایت زوایای مختلف در حالت لایه انتشار گاز آب‌گریز-آب‌دوست بررسی شده و زاویه مناسب معرفی شده است. فصل پنجم شامل نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهادها برای ادامه کار است.

فصل دوم:

مروری بر کارهای گذشته

گاز هیدروژن تغذیه شده به آند در محل‌های کاتالیزور به یون هیدروژن (پروتون) و الکترون تبدیل می‌شود. در کاتد گاز اکسیژن و الکترون‌ها با پروتون‌هایی که از میان غشاء عبور کرده‌اند واکنش داده و آب تولید می‌کنند. غشایی که آند و کاتد را از هم جدا کرده از ماده‌ای پلیمری است که وقتی با آب اشباع می‌شود خاصیت هدایت‌کنندگی یونی آن زیاد شده و نفوذپذیری گازهای اکسیژن و هیدروژن در آن کم می‌شود [۲]. فازهای جامد در پیل سوختی عبارت‌اند از کربن در صفحات دوقطبی، لایه انتشار گاز، لایه کاتالیزور و ماده پلیمر الکترولیت [۳]. آب مایع در کانال‌های جریان گاز، الکتروود و لایه کاتالیزور وجود دارد. همچنین یک مخلوط مایع شامل آب و یون‌های هیدروژن در الکترولیت پلیمر و لایه کاتالیزور وجود دارد. مدل‌سازی ریاضی و شبیه‌سازی عددی پیل سوختی غشای مبادله پروتون وسیله‌ای برای پیش‌بینی عملکرد سلول است که تنها ابزار برای مطالعه فرایندهای الکتروشیمیایی و انتقال در لایه‌های مختلف این نوع پیل سوختی محسوب می‌شود. در مدل‌سازی ریاضی و شبیه‌سازی عددی فرضیات مختلفی شامل یک‌بعدی و چندبعدی، حالت پایا و گذرا، هم‌دما و غیر هم‌دما، تک فاز و چند فاز و ماکروسکوپی و میکروسکوپی مشاهده می‌شود. علاوه بر این مدل‌سازی می‌تواند شامل یک جزء از پیل سوختی یا شامل یک مجموعه پیل سوختی (دسته پیل) باشد. در این قسمت کارهای گذشته در مورد پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون که شامل مدل‌سازی و بهینه‌سازی عملکرد آن است مورد بررسی قرار می‌گیرد که این بررسی‌ها می‌تواند شامل تجربی، تحلیلی و شبیه‌سازی‌های عددی باشد [۳].

۲-۲ مدل‌های تحلیلی

معادلات یک پیل سوختی در حالت کلی شامل انتقال جرم، مومنتوم، گونه و انرژی در لایه‌های مختلف است که همه را می‌توان با قانون بقا به شکل ریاضی بیان کرد. با این حال، حل تحلیلی این معادلات بدون در نظر گرفتن ساده‌سازی غیرممکن است [۳]. مدل‌های تحلیلی در پیش‌بینی عملکرد

یک سلول سوختی غشای مبادله پروتون مؤثرند [۷]. با این حال این مدل‌ها به دلیل پیچیدگی معادلات پیل سوختی نمی‌توانند روند انتقال را در پیل‌ها بیان کنند. برای مشخص شدن روند انتقال و حل‌های پیچیده از شبیه‌سازی‌های عددی استفاده می‌شود [۳].

۲-۳ مدل‌های عددی ماکروسکوپی

برای بررسی مطالعات انجام شده با شبیه‌سازی عددی، مدل‌ها به دو دسته تقسیم می‌شوند: مدل‌های تک فاز و مدل‌های دو فاز.

۲-۳-۱ مدل‌های تک فاز ماکروسکوپی

برجسته‌ترین مدل‌سازی‌های ریاضی و شبیه‌سازی‌های عددی برای سلول سوختی غشای مبادله پروتون از اوایل سال ۱۹۹۰ شروع شد [۳]. برای مثال برناردی و وربراگ^۱ [۸] مدلی ریاضی برای الکتروود مربوط به اکسیژن بیان کردند و بعدها همین دو محقق به بررسی واکنش اکسیداسیون هیدروژن و کاهش اکسیژن در لایه کاتالیزور با فرض غشای کاملاً اشباع شده پرداختند [۹]. هر دوی این مدل‌ها با فرض یک‌بعدی و در حالت پیل سوختی هم‌دما و حالت‌پایا بود. با توجه به فرضیات غشای به‌طور کامل هیدراته و ثابت بودن محتوای آب در غشاء، جهت جریان آب از میان سیستم توسط نیروی الکترواسموتیک^۲ اداره می‌شود. فرآیند حرکت پروتون در لایه غشاء توسط وربراگ و هیل^۳ [۱۰] در امتداد حرکت آب در حفره‌های یک پیل سوختی غشای مبادله پروتون کاملاً مرطوب مورد بررسی قرار گرفته است. از آنجا که آب به‌طور مداوم از واکنش‌های الکتروشیمیایی تولید می‌شود مقدار آن در غشاء نمی‌تواند ثابت باشد؛ بنابراین هدایت پروتونی با تغییر محتوای آب غشاء تغییر می‌کند از این‌رو اسپرینگر و همکارانش^۴ [۱۱ و ۱۲] یک مدل پیل سوختی غشای مبادله پروتون را بیان کردند که در آن هدایت پروتونی به صورت تابعی از تولید آب در نظر گرفته شده است که این مدل نیز یک‌بعدی

¹ Bernardi and Verbrugge

² Electroosmotic

³ Hill

⁴ Springer et al.

است. در مدل‌های ذکر شده در بالا جریان درون کانال‌های جریان گاز و لایه‌های الکتروود به صورت جداگانه حل شده‌اند. بنابراین اثر متقابل بین جریان در کانال گاز و لایه‌های الکتروود مدل نشده است. فولر و نیومن^۱ [۱۳] یک مدل ریاضی انتقال آب، حرارت و سوخت را در پیل سوختی غشای مبادله پروتون به صورت دوبعدی بیان کردند. در بررسی آن‌ها از فرض لایه انتشار گاز بسیار نازک استفاده شده و فاز مایع در آن در نظر گرفته نشده است. مدل نگوین و وایت^۲ [۱۴] به بررسی انتقال حرارت و آب می‌پردازد که مشابه مدل فولر و نیومن [۱۳] است فقط لایه غشاء به صورت مدل تولید آب متغیر اسپرینگر و همکارانش [۱۱ و ۱۲] می‌باشد و لایه کاتالیزور به صورت یک لایه میانی در نظر گرفته شده است. در این مدل‌ها فرض شده است که جریان گاز در کانال هیچ‌گونه افت فشاری ندارد و انتقال اجزاء در لایه‌های الکتروود و کاتالیزور فقط در اثر نفوذ انجام می‌شود. همچنین عبارات‌های عمده تولید گرما و حرارت‌های مربوط به برگشت‌ناپذیری و آنتروپی در مطالعه آن‌ها مدل نشده است. بعداً تیرومالای^۳ و وایت [۱۵] تغییرات فشار در کانال جریان گاز را در حالت آرایه پیل سوختی در نظر گرفتند. همچنین وای^۴ و نگوین [۱۶] به بسط مدل [۱۴] پرداختند و گرمای واکنش مربوط به برگشت‌ناپذیری همراه با گرمای تغییر فاز و آنتروپی را اضافه کردند. وهر^۵ و همکارانش [۱۷] مدل یک‌بعدی به‌منظور انتقال آب و حرارت در یک آرایه پیل سوختی غشای مبادله پروتون را بیان کردند. در این مدل گرماهای واکنش ناشی از برگشت‌ناپذیری و آنتروپی نیز منظور شده است. همچنین توزیع دما در غشاء و ماکزیمم دما به صورت تابعی از تعداد سلول‌های آرایه پیل پیشگویی شده است. روو و لی^۶ [۱۸] نیز مدلی یک‌بعدی ارائه کردند که شامل گرماهای آنتروپی، برگشت‌ناپذیری، تغییر فاز و غشاء در لایه‌های کاتالیزور بود. ماگیو و همکارانش^۷ [۱۹] شبیه‌سازی شبه سه‌بعدی انجام دادند که در آن از گرادیان دما در جهت جریان صرف‌نظر کردند. علاوه بر این مدل‌ها، چندین مدل دو و

¹ Fuller and Newman

² Nguyen and White

³ Thirumalai

⁴ Yi

⁵ Wohr

⁶ Rowe and Li

⁷ Maggio et al.

سه‌بعدی دیگر نیز ارائه شده که گرماهای تولیدی مختلف در آن‌ها در نظر گرفته شده است [۲۰-۲۳]. گورا و همکارانش^۱ [۲۴] یک مدل تک فازی دوبعدی ارائه کردند که شامل کانال‌های گاز، لایه‌های الکتروود، کاتالیزور و غشاء است. مدل ریاضی شامل معادلات بقای جرم، مومنتوم، گونه و انرژی در هر لایه است که عبارت‌های تولید در این معادلات و در لایه‌های مختلف، متفاوت است. شبیه‌سازی دوبعدی آم و همکارانش^۲ [۲۵] فرایندهای انتقال و سینتیک الکتروشیمیایی را در نظر گرفته و از جذب آب و انرژی در لایه کاتالیزور صرف‌نظر کرده‌اند. این مدل‌ها بعداً به حالت سه‌بعدی برای مطالعه جریان گاز، همچنین طراحی بهتر کانال‌های جریان [۲۶] و انتقال آب در پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون [۲۷] بسط داده شد. علاوه بر این، روند انتقال آب در پیل سوختی توسط نویسندگان مختلفی [۲۹-۳۲] بررسی شده است. در سال ۲۰۰۶ هاوانگ و چن^۳ [۳۳] به بررسی انتقال حرارت و جرم در الکتروودهای متخلخل پیل سوختی به صورت تک فاز پرداختند. آن‌ها قبل از مدل‌سازی مسئله، یک تحلیل اولیه با استفاده از بزرگی رتبه^۴ برای تشخیص اعتبار فرض تعادل حرارتی محلی در الکتروودهای متخلخل پیل سوختی انجام دادند. معادلات مربوطه شامل معادله مومنتوم، انرژی، گونه و معادله انتقال بار است. در این مطالعه فرض شده است که ترکیبات گاز کامل باشد، جریان سیال پایا، آرام و تراکم ناپذیر است، خواص فیزیکی حرارتی ثابت‌اند، الکتروود متخلخل به صورت همگن و ایزوتروپ است، خواص مربوط به ساختار (ضریب تخلخل^۵، ضریب نفوذپذیری^۶ و...) یکنواخت است، آب در خروجی الکتروودها فقط به صورت بخار است، لایه کاتالیزور به صورت خیلی نازک در نظر گرفته شده و واکنش کاهش اکسیژن تنها در سطح آن اتفاق می‌افتد. همچنین دمای سیال ورودی یکنواخت

¹Gurau et al.

²Um et al.

³Chen

⁴Order-of-magnitude

⁵Porosity

⁶Permeability

است. نتایج به صورت توزیع دمای محلی، عدد ناسلت^۱، گونه و چگالی جریان الکتریکی در الکتروود متخلخل پیل سوختی بیان شده است. در ضمن، مسئله با روش المان محدود حل شده است.

در سال ۲۰۰۶ چاوو^۲ و هوانگ^۳ [۳۴] با فرض جریان تک فاز به بررسی دماهای فاز سیال و جامد در کاتد پیل سوختی پلیمری پرداختند. در این بررسی کاتد محیط متخلخل دوبعدی در نظر گرفته شده و از کانال‌های چسبیده به کاتد برای ورود و خروج گاز به محیط استفاده شده است. بخش کاتد پیل سوختی شامل دو لایه کاتالیزور و لایه انتشار گاز است. انتقال حرارت در لایه کاتالیزور متناسب با انتقال گونه است که برای بیان این رابطه از یک مدل الکتروشیمیایی میکروسکوپی استفاده شده است. از طرف دیگر در لایه انتشار گاز، معادلات انرژی بر پایه عدم تعادل حرارتی برای محاسبه اختلاف دمای بین فازها بیان شده است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ضریب انتقال حرارت بین سیال و جامد، عدم تعادل حرارتی به تعادل حرارتی بین فازها تبدیل می‌شود. تحت شرایط افزایش ضریب انتقال حرارت، اختلاف دمای بین دو فاز ناچیز می‌شود. مخلوط اکسیژن و بخار آب از بخش ورودی کانال وارد کاتد متخلخل شده سپس از لایه انتشار گاز به لایه کاتالیزور منتقل می‌شود. واکنش الکتروشیمیایی که در لایه کاتالیزور اتفاق می‌افتد، اکسیژن مصرف کرده و ضمن انجام این کار بخار آب تولید می‌کند. همچنین در اثر برگشت‌ناپذیری و ولتاژ اضافی، مقداری گرما تولید می‌شود. در این مطالعه فرض می‌شود که مخلوط گازها ایده‌آل هستند، جریان پایا، آرام و تراکم‌ناپذیر است، خواص فیزیکی حرارتی ثابت می‌باشند، الکتروود متخلخل ایزوتروپ و همگن است، آب خروجی فقط به صورت بخار است و دمای سیال ورودی یکنواخت است. ضمناً مسئله به صورت عددی و با روش المان محدود حل شده است. کواس و کیم^۴ [۳۵] در سال ۲۰۰۸ جریان گاز در یک پیل سوختی غشای مبادله پروتون را به صورت عددی و با استفاده از روش المان محدود بررسی کردند. مطالعه آن‌ها به صورت دوبعدی و تک فاز بوده و معادلات حاکم شامل معادله مومنتوم، جریان و غلظت است. هندسه شامل

¹ Nusselt number

²Chao

³ Hwang

⁴Kwac and kim

سه ناحیه آند، غشای مبادله پروتون و کاتد است و هر الکترومدتخلخل در تماس با یک توزیع‌کننده گاز است که این توزیع‌کننده خود شامل یک کانال ورودی، جمع‌کننده جریان و کانال خروجی است. هیدروژن و هوای مرطوب به ترتیب از کانال‌های آند و کاتد وارد می‌شوند. نتایج به صورت توزیع سرعت گاز، کسر جرمی واکنش‌دهنده‌ها، کسر جرمی آب و توزیع چگالی جریان در پیل سوختی است. در همه مطالعات انجام شده در بالا به جزء کار آم و همکارانش [۲۷ و ۲۵] به بررسی سلول در حالت-پایا پرداخته شده است. علاوه بر این می‌توان به مدل‌سازی غیر پایای ون باسل و همکارانش^۱ [۳۶] که مربوط به حالت دوبعدی است اشاره کرد که در آن انتقال آب در پیل سوختی بر اساس مدل یک‌بعدی اسپرینگر و همکارانش [۱۲ و ۱۱] بیان شده است. در مقابل چن و همکارانش [۳۷] مدل ارائه شده توسط اوگادا و همکارانش^۲ [۲۸] را به حالت غیر پایا بسط دادند و اثر رفتار غیر پایای انتقال آب در میان غشاء و تأثیر پارامترهای مختلف فیزیکی روی زمان مشخصه و زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا را بررسی کردند. همچنین اخیراً وو و همکارانش [۳۸] یک مدل غیر پایا، تک فاز و غیر هم‌دم‌ارائه دادند و به بررسی پاسخ غیر پایای آن پرداختند.

۲-۳-۲ مدل‌های دوفازی ماکروسکوپی

تعداد قابل‌توجهی از مدل‌های پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت تک‌فازی و ماکروسکوپی در بخش قبلی بررسی شدند. این مدل‌ها بر اساس جریان تک‌فاز و فرض کامل بودن گاز در پیل سوختی استوار است. در جریان تک‌فاز اثر حضور آب مایع در سلول در نظر گرفته نمی‌شود و رطوبت ورودی باید به‌گونه‌ای باشد که میعان اتفاق نیفتد [۳۹]. پس بررسی انتقال آب خود می‌تواند به صورت دو فاز باشد که در برخی از قسمت‌ها غشاء خشک و در برخی قسمت‌ها به صورت کاملاً آب‌گرفته^۳ باشد. پدیده آب‌گرفتگی یک پدیده معروف و محدودکننده عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون است. بنابراین درک ویژگی‌های انتقال دو فاز در کاتد پیل سوختی و تأثیر آن‌ها بر عملکرد پیل

¹Van Bussel et al.

²Okada et al.

³Flooding

سوختی ضروری است [۳]. در طول دو دهه گذشته، جریان دوفازی و پدیده آب‌گرفتگی در پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون بسیار زیاد مورد بررسی قرار گرفته است. تا به حال چندین مدل دینامیک سیال محاسباتی برای جریان دوفازی در این نوع پیل سوختی بیان شده است که همه بر اساس قانون دوفازی داریسی^۱ هستند [۴۰]. مراجع [۴۱-۴۶] به بررسی مدل‌های دوفازی پرداخته‌اند. جریان‌های دوفازی می‌توانند با استفاده از روش مخلوط چند فاز^۲ مدل شوند. وانگ و چن [۴۱] مدلی برای مخلوط چند فاز ارائه کردند که در نوع خود پیش‌تاز است. این مدل به مدل M^2 معروف است که به‌طور گسترده توسط محققان سلول سوختی به کار گرفته شده است. این مدل بر اساس قانون داریسی دو فاز است. در این مدل فشار فاز مایع برابر اختلاف بین فشار فاز گاز و فشار مویینگی است. هی و همکارانش^۳ [۴۲] مدلی برای بررسی اثر آب مایع و اثر انتقال آن روی عملکرد کاتد پیل سوختی ارائه کردند که در آن انتقال آب مایع از میان لایه انتشار گاز توسط نیروی برشی جریان گاز و نیروی مویینگی انجام می‌شود. همچنین در این بررسی لایه کاتالیزور به صورت یک شرط مرزی اعمال شده است. پس تولید آب در مرز مشترک لایه کاتالیزور کاتد^۴ (CCL) و لایه انتشار گاز انجام می‌شود. مدل آن‌ها دوبعدی، دو فاز، هم‌دما و در حالت پایا بوده و برای بررسی اثر انتقال آب مایع روی عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون پیشنهاد شده است. بعد از آن‌ها برنینگ و دجیلالی [۴۳] یک مدل سه‌بعدی و شامل چند گونه برای توصیف جریان دو فاز در آند و کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون ارائه کردند. سپس برنینگ و همکارانش [۴۵] از مدل چند سیالی^۵ برای مطالعه انتقال آب مایع در لایه متخلخل کاتد استفاده کردند. از آنجایی که این مدل به یک حل‌کننده چند فاز نیاز دارد و باید قادر به اتصال انتقال گونه، تغییر فاز و واکنش‌های شیمیایی به‌طور هم‌زمان باشد. به همین دلیل مستلزم مقدار زیادی تلاش‌های محاسباتی بوده و ممکن است به ناپایداری عددی دچار شود. مدل M^2

¹Darcy's law

²Multi-phase mixture

³He et al.

⁴Cathode catalyst layer

⁵Multi-fluid model

اخیراً به‌طور گسترده برای بررسی انتقال چند جزء و چند فاز در لایه انتشار گاز کاتد [۴۸-۵۴] استفاده شده است.

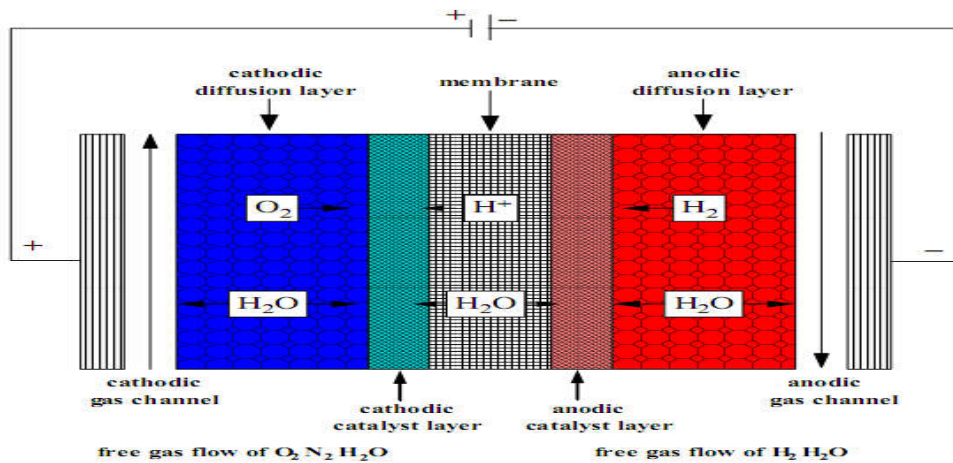
کان^۱ و همکارانش [۵۵] در سال ۲۰۰۳ به بررسی جریان دوفازی در یک پیل سوختی غشای مبادله پروتون پرداختند. هندسه موردنظر دوبعدی بوده و جریان به صورت دو فازی (گاز و مایع) و غیر پایا مدل شده است همچنین انتقال گونه در فاز گاز در نظر گرفته شده است. در این شبیه‌سازی هوا شامل اکسیژن، نیتروژن و بخار آب است که در بخش کاتد از قسمت پایین وجه سمت چپ وارد و از قسمت بالای آن خارج می‌شود (شکل ۱). در قسمت آند، گاز هیدروژن و بخار آب از قسمت بالای وجه سمت راست وارد و از قسمت پایین آن خارج می‌شوند (شکل ۲-۱). علاوه بر این انتقال آب و پروتون در غشاء و واکنش اکسیژن و هیدروژن در لایه کاتالیزور در نظر گرفته شده است. معادلات جریان سیال و انتقال بار در پیل سوختی (معادله پواسون) توسط المان محدود ترکیبی^۲ و معادلات انتقال اجزاء با روش حجم محدود^۳ گسسته‌سازی شده‌اند و برای هر فاز از یک معادله مومنتوم استفاده شده است. در ابتدا هیچ آب مایعی وجود ندارد و در گازهای ورودی، اشباع آب مایع (حجم آب مایع به فضای خالی) صفر است. معادله انتقال اجزاء شامل عبارات نفوذ، جابجایی و عبارت چشمه بوده که عبارت چشمه برای اجزاء هیدروژن و اکسیژن فقط ناشی از مصرف آن‌ها ولی برای جزء بخار آب هم ناشی از تولید آن در لایه کاتالیزور کاتد و هم ناشی از تغییر فاز (فقط میعان) است. معادلات شامل معادله بقای جرم برای هر دو فاز، معادله مومنتوم برای هر دو فاز، معادله انتقال اجزاء و معادلات پتانسیل برای پروتون و الکترون است که معادلات پتانسیل برای پروتون و الکترون توسط عبارات چشمه آن‌ها به بقیه معادلات متصل می‌شوند. عبارت چشمه در معادلات پتانسیل توسط تقریب تافل و عبارات چشمه در معادلات انتقال اجزاء توسط قانون فارادی بیان می‌شود. در این بررسی فرض شده است که آب تولیدی در نتیجه واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد به صورت فاز گاز است پس بیشترین مقدار کسر جرمی

¹Karsten Kuhn

²Mixed finite element

³Finite volume

بخار آب در قسمت کاتد است و مقدار کمی از بخار آب به سمت آند نفوذ می‌کند. همچنین فشار بخار آب بیشتر از فشار آب اشباع است پس در قسمت کاتد به دلیل میعان، آب مایع تولید می‌شود ولی در قسمت آند هیچ آب مایعی تشکیل نمی‌شود. نتایج نشان می‌دهد که پس از چهار ثانیه نرخ تبدیل بخار آب به مایع به مقدار تعادل می‌رسد که در این حالت بیشتر بخار تولیدی ناشی از واکنش الکتروشیمیایی، به مایع تبدیل می‌شود.

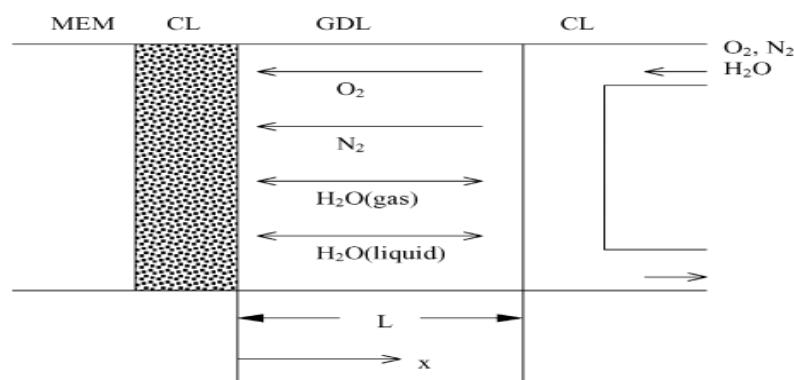


شکل ۲-۱: هندسه مربوط به مطالعه کان و همکارانش [۵۵].

در سال ۲۰۰۶ سونگ^۱ و همکارانش [۵۶] رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون را مطالعه کردند. مدل آن‌ها به صورت دوفازی (آب مایع و بخار آب)، غیر پایا، غیرهمدم و یک‌بعدی است. در مقاله آن‌ها اثر چهار پارامتر اشباع آب مایع در مرز مشترک لایه انتشار گاز و کانال‌های جریان، نسبت تولید آب مایع به کل آب در مرز مشترک لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور، چگالی جریان و زاویه تماس یا خیسی روی توزیع غیر پایای اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز بررسی شده است. همچنین اشباع آب مایع در مرز مشترک بین لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور و زمان لازم برای رسیدن اشباع آب مایع به حالت پایا به صورت تابعی از چهار پارامتر مذکور رسم شده است. ضخامت لایه انتشار گاز ۰/۰۰۰۳ متر و معادلات شامل معادله بقای جرم برای هر دو فاز، معادله مومنوم برای هر دو فاز، معادله بقای اجزاء و معادله انرژی است. در این شبیه‌سازی هوا شامل

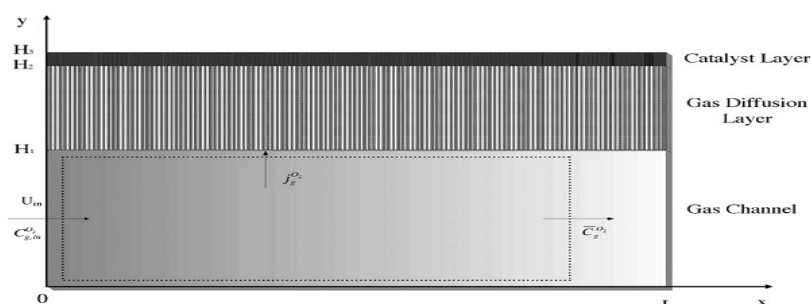
¹ Song

اکسیژن، نیتروژن و بخار آب است و تغییر فاز نیز در نظر گرفته شده است (تبخیر/ میعان). همان طوری که می‌دانیم قابلیت حل شدن اکسیژن در فاز مایع کم است. معادله انتقال اجزاء شامل عبارت‌های نفوذ، جابجایی و عبارات چشمه بوده که عبارت چشمه برای جزء اکسیژن صفر (لایه کاتالیزور بررسی نشده) ولی برای جزء بخار آب ناشی از تغییر فاز (تبخیر/ میعان) است. نتیجه به دست آمده از این بررسی این است که افزایش هر یک از سه پارامتر اول باعث افزایش اشباع آب در مرز مشترک بین لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور و کاهش زمان لازم برای رسیدن اشباع آب مایع به حالت پایا می‌شود. همچنین در چگالی‌های جریان پایین، تبخیر در ناحیه بزرگی از لایه انتشار گاز در نزدیکی مرز مشترک کانال و لایه انتشار گاز اتفاق می‌افتد در صورتی که عمل میعان در بخش کوچکی در نزدیکی مرز کاتالیزور و لایه انتشار گاز صورت می‌گیرد. علت این است که در چگالی جریان کم، بخار آب از سمت کاتالیزور وارد لایه انتشار گاز شده و در ناحیه کوچکی نزدیک مرز کاتالیزور و لایه انتشار گاز، فشار جزئی بخار آب بیشتر از فشار بخار آب است پس میعان صورت می‌گیرد. در حالی که در بخش بزرگی از لایه انتشار گاز در نزدیکی مرز کانال گاز و لایه انتشار گاز، فشار جزئی بخار آب کمتر از فشار بخار آب است بنابراین تبخیر صورت می‌گیرد. هر چه چگالی جریان افزایش یابد به دلیل اینکه در بیشتر نقاط لایه انتشار گاز فشار جزئی بخار آب بیشتر از فشار بخار آب است میعان صورت می‌گیرد و آب مایع بیشتری وارد لایه انتشار گاز می‌شود و به تدریج میعان جایگزین تبخیر می‌شود. پس در این حالت فرآیند اصلی تغییر فاز، میعان است.



شکل ۲-۲: هندسه مربوط به مطالعه سونگ و همکارانش [۵۶].

در سال ۲۰۰۶ چانگ^۱ و همکارانش [۵۷] به بررسی پدیده انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون و اثر آن روی عملکرد پیل سوختی در حالت جریان دو فازی پرداختند. مدل مورد بررسی برای جریان دوفازی، مدل مخلوط چند فازی است و فقط لایه انتشار گاز بررسی شده است. مسئله در حالت یک‌بعدی، پایا و هم‌دما مورد بررسی قرار گرفته و مخلوط گازها به صورت گاز ایده‌آل در نظر گرفته شده است. سرعت گازهای ورودی به کانال گاز 0.4 m/s و ضخامت لایه انتشار گاز 0.003 m متر است. نتایج نشان می‌دهد که آب مایع تولیدی توسط واکنش الکتروشیمیایی می‌تواند باعث کاهش قابل‌توجهی در ضریب تخلخل لایه انتشار گاز تحت شرایط چگالی جریان بالا شود و در نتیجه مانع انتقال اکسیژن در لایه انتشار گاز گردد. با افزایش آب‌گریزی، نرخ حذف آب مایع تولیدی به‌طور آشکاری زیاد می‌شود. در این مطالعه اثر تخلخل، ضخامت لایه انتشار گاز، سرعت ورودی گاز و واکنش‌دهنده و طول کانال گاز روی عملکرد پیل سوختی بررسی شده است.



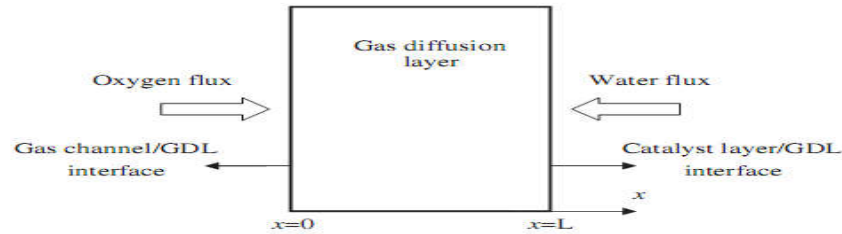
شکل ۲-۳: هندسه مربوط به مطالعه چانگ و همکارانش [۵۷].

در سال ۲۰۰۸ چن^۲ و همکارانش [۵۸] در حالت دوفازی و یک‌بعدی به بررسی لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون با وجود یک گرادیان ضریب تخلخل پرداختند. این گرادیان ضریب تخلخل، نتیجه‌ی مقادیر مختلف کربن در طرفین لایه انتشار گاز است که به صورت خطی مدل شده است. روش مخلوط چند فاز برای بررسی مسئله استفاده شده و مخلوط گازها به صورت گاز ایده‌آل و غیرقابل‌حل در فاز مایع در نظر گرفته شده است. مسئله یک‌بعدی، پایا و هم‌دما و ضخامت لایه انتشار گاز 0.003 m متر است. نتایج نشان می‌دهد که گرادیان ضریب تخلخل در نرخ از بین بردن آب مایع

¹ Chang

² Chen

مؤثر بوده و باعث افزایش انتقال اکسیژن در میان لایه انتشار گاز کاتد می‌شود. مطالعه انجام شده از نظر تئوری بیان می‌کند که لایه انتشار گاز با گرادیان ضریب تخلخل عملکرد سلول را بهبود می‌بخشد.



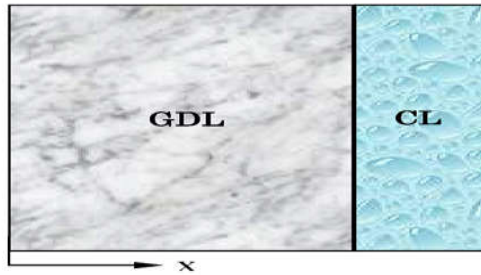
شکل ۲-۴: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش [۵۸].

در سال ۲۰۱۰ لیو^۱ و همکارانش [۵۹] پدیده انتقال آب مایع در لایه کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون را بررسی کردند. مسئله به صورت دوفازی، یک‌بعدی، هم‌دما و پایا مورد بررسی قرار گرفته است. کاتد مورد بررسی شامل دو ناحیه کاتالیزور و لایه انتشار گاز است که لایه کاتالیزور یک لایه محاسباتی مجزا با ضخامت محدود در نظر گرفته شده است. در این بررسی فرض شده است که آب تولیدی در اثر واکنش الکتروشیمیایی به صورت مایع بوده و فاز گاز از قانون گاز کامل پیروی می‌کند. گاز ورودی به کاتد، اکسیژن خالص و بدون رطوبت است. ضخامت لایه انتشار گاز ۳ میکرومتر و معادلات حاکم شامل سه معادله است: معادله اول معادله بقای جرم برای گاز اکسیژن است که شامل عبارتهای چشمه و نفوذ بوده و بر اساس قانون فیک^۲ (عامل انتقال گرادیان غلظت است) بیان می‌شود. معادلات دوم و سوم به ترتیب معادله بقای جرم و معادله مومنتوم برای فاز مایع است. شرایط مرزی مسئله به این صورت است که در ورودی لایه انتشار گاز، غلظت مولی اکسیژن مشخص است. در مرز مشترک لایه انتشار گاز و کاتالیزور پیوستگی (بقای) غلظت اکسیژن و شار آن وجود دارد. در مرز مشترک کاتالیزور و غشای مبادله پروتون هیچ اکسیژنی از کاتالیزور وارد لایه غشای مبادله پروتون نمی‌شود یعنی گرادیان غلظت اکسیژن صفر است. در ورودی لایه انتشار گاز مقدار اشباع آب مایع مشخص است. در مرز مشترک لایه انتشار گاز و کاتالیزور فشار مویینگی ثابت است. فشار مویینگی به ضریب تخلخل، تابع لوورت، کشش سطحی، ضریب نفوذپذیری مطلق و زاویه خستگی بستگی دارد که

¹ Liu

² Fick's law

به دلیل ثابت بودن همه کمیت‌های نام برده شده، تابع لوورت باید ثابت باشد که خود تابعی از اشباع آب مایع است. در مرز مشترک کاتالیزور و غشای مبادله پروتون، آب مایعی از کاتالیزور وارد لایه غشای مبادله پروتون نمی‌شود یعنی گرادیان اشباع آب مایع صفر است. نتایج نشان می‌دهد که پدیده طغیان اثر مهمی روی انتقال جرم واکنش‌دهنده‌ها دارد.



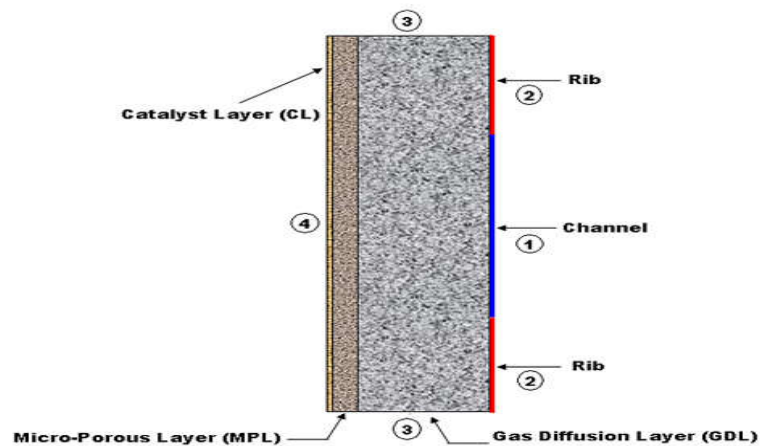
شکل ۲-۵: هندسه مربوط به مطالعه لیو و همکارانش [۵۹].

در سال ۲۰۱۱ ضخامت کانال و مانع روی پدیده انتقال حرارت در کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون توسط اختر^۱ و کرخوف^۲ [۶۰] بررسی شد. آن‌ها از مدل غیر هم‌دما، دوبعدی، پایا و دوفازی استفاده کردند. در مطالعه آن‌ها آب تولیدی در اثر واکنش الکتروشیمیایی به صورت مایع و گاز ورودی اشباع (رطوبت نسبی گاز ورودی ۱۰۰ درصد است) در نظر گرفته شده است. هندسه‌ی مدل شامل لایه انتشار گاز، لایه متخلخل میکرو، لایه کاتالیزور، کانال و مانع است. در این مدل معادلات حاکم شامل معادله انتقال جرم و مومنتوم برای فاز گاز و آب مایع، معادله انتقال اجزاء و معادله انرژی است. معادلات انتقال جرم شامل عبارت چشمه نیز هستند که این عبارت چشمه مربوط به تغییر فاز (کندانس/ تبخیر) و واکنش الکتروشیمیایی (مصرف اکسیژن و تولید آب مایع) است. ماده واکنش‌دهنده در سمت کاتد به صورت هوای اشباع بوده و از قانون گاز کامل پیروی می‌کند. ضخامت لایه انتشار گاز ۳۰۰ میکرومتر است. معادله انتقال حرارت نیز شامل عبارات هدایت، جابجایی و چشمه است. شرایط مرزی مسئله به این صورت است که در ورودی کانال گاز، اشباع آب مایع و سرعت گاز مشخص است و کسر جرمی بخار آب قابل محاسبه است (رطوبت نسبی ورودی معلوم است). همچنین

¹Akhtar

²Kerkhof

گرادیان دما صفر است. روی موانع جامد سرعت صفر، دما ثابت، گرادیان اشباع آب مایع و گرادیان اجزاء غلظت صفر است. در مرز مشترک بین لایه انتشار گاز و لایه متخلخل میکرو^۱ و در مرز مشترک بین لایه متخلخل میکرو و لایه کاتالیزور پیوستگی دما، غلظت و جریان وجود دارد. در مرز مشترک بین لایه کاتالیزور و غشاء، گرادیان اشباع آب مایع (به دلیل صفر بودن گرادیان فشار مویبندی)، سرعت و گرادیان اجزاء غلظت (هیچ شار جرمی گازی عبور نمی‌کند) صفر است و پیوستگی شار حرارت وجود دارد. سرعت، گرادیان اشباع آب مایع، گرادیان دما و گرادیان اجزاء غلظت در مرز بالا و پایین صفر است. نتایج نشان می‌دهد که مکانیزم انتقال آب مایع در کاتد وابستگی زیادی به رطوبت نسبی، اشباع مایع و توزیع دمای محلی دارد. این مطالعه با نرم‌افزار کامسول^۲ و به روش المان محدود حل شده است.



شکل ۲-۶: هندسه مربوط به مطالعه اختر و کرخوف [۶۰].

در دو دهه اخیر جریان دوفازی و پدیده آب‌گرفتنی در پیل‌های سوختی غشای مبادله پروتون مورد توجه قرار گرفته و به صورت مدل‌های تجربی و عددی بررسی شده است. همچنین اخیراً جریان آب در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون به روش‌های عددی و آزمایشگاهی^۳ (تجربی)

¹ Microporous layer

² COMSOL

³ Experimental

توسط محققان زیادی مطالعه شده است [۶۱]. بررسی‌های عددی خود بر اساس دو مدل انجام می‌گیرند: الف) مدل‌های ماکروسکوپی^۱ و ب) مدل‌های میکروسکوپی و مزوسکوپی^۲ (بین میکرو و ماکرو).

۲-۴ نقاط ضعف جریان‌های ماکروسکوپی

در بخش قبل مطالعات بررسی شده به صورت ماکروسکوپی بودند. تا به حال مطالعات زیادی به روش مدل‌سازی عددی ماکروسکوپی انجام شده است. یکی از اشکالات این روش این است که نمی‌تواند اثر ساختارهای واقعی و مشخصات غیر همگن لایه انتشار گاز را مدل کند [۶۲]. برای مثال می‌توان به تقریب مخلوط چند فاز^۳ اشاره کرد که مدلی ماکروسکوپی برای بررسی انتقال دو فاز در لایه انتشار گاز است و به‌طور وسیعی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مدل مخلوط دو فاز به عنوان یک‌فاز و لایه انتشار گاز به صورت یک محیط متخلخل همگن و بر اساس تئوری متوسط حجمی^۴ در نظر گرفته می‌شود [۶۳ و ۶۴]. استفاده از مدل‌های پیوسته ماکروسکوپی نیازمند روابط تجربی زیادی (مثل فشار موینگی اشباع^۵ و ضریب نفوذپذیری نسبی اشباع^۶) است که دقت برخی از آن‌ها قابل تردید و سؤال‌برانگیز است. همچنین برخی مواقع توزیع‌های غیرمعقول [۶۵] و با اختلاف زیادی [۶۶] را در لایه انتشار گاز پیشگویی می‌کند. همچنین فرض همگن بودن انتقال آب در لایه انتشار گاز که در مدل‌های ماکروسکوپی استفاده می‌شوند، توسط مدل‌های آزمایشگاهی مورد تأیید قرار نمی‌گیرد [۷۳-۶۷]. بنابراین نتیجه می‌شود که مدل‌های ماکروسکوپی برای بررسی انتقال آب در لایه انتشار گاز مناسب نیستند.

۲-۴-۱ بررسی تجربی

در زیر به بررسی چند مطالعه آزمایشگاهی در این زمینه پرداخته می‌شود:

¹Macroscopic

²Mesosopic

³Multi-phasemixture

⁴Volumetric averaging theory

⁵Capillary pressure-saturation

⁶Relative permeability-saturation

یانگ و همکارانش^۱ [۶۷] و زانگ و همکارانش^۲ [۶۸] با بررسی پیل سوختی شفاف مشاهده کردند که آب خارج شده از لایه انتشار گاز به صورت قطره‌های مجزا بوده و در محل‌های خاصی از سطح لایه انتشار گاز قرار می‌گیرند. همچنین لیستر و همکارانش^۳ [۶۹] روش جدیدی (استفاده از فلئوئورسانس میکروسکوپی) برای دیدن جریان آب در ساختار لایه انتشار گاز به کار بردند. تکنیک‌های پرتونگاری پیشرفته‌تر نیز برای بررسی رفتار انتقال آب در پیل سوختی به کار برده شده است.

سینها و همکارانش^۴ [۷۰] با استفاده از پرتونگاری با اشعه ایکس^۵ توزیع آب در لایه انتشار گاز را در هنگام خروج آب بررسی کردند و نشان دادند که توزیع آب در لایه انتشار گاز به صورت غیریکنواخت و شامل خوشه‌های بی‌نظم است. با استفاده از عکس‌برداری با نوترون^۶، پکلا و همکارانش^۷ [۷۱] توزیع آب و تغییرات حرکتی آن را در کانال جریان گاز و لایه انتشار گاز مشاهده کردند و به این نتیجه رسیدند که آب در محل‌های خاصی از لایه انتشار گاز انباشته می‌شود.

اخیراً هیچنر و همکارانش^۸ [۷۲] و هارتنیگ و همکارانش^۹ [۷۳] به ترتیب با عکس‌برداری با نوترون با وضوح بالا و عکس‌برداری با اشعه ایکس به این نتیجه رسیدند که توزیع محتوای آب در سطح مقطع سلول سوختی پیچیده بوده و تفاوت زیادی با نتایج مدل‌های ماکروسکوپی دارد. اگرچه این مطالعات برای مشاهده توزیع آب در پیل سوختی موفق بوده است و اطلاعات مفیدی برای فهم انتقال آب در لایه انتشار گاز به ما می‌دهد ولی این روش‌ها وقتی برای انتقال آب در لایه انتشار گاز مورد استفاده قرار می‌گیرند دارای محدودیت‌هایی هستند. برای مثال بررسی جریان آب توسط روش‌های نوری [۶۷-۶۹] کار مشکلی است [۶۱] زیرا نمی‌توانند در تمام ضخامت لایه انتشار گاز نفوذ کنند.

۲-۴-۲ بررسی عددی میکروسکوپی به روش مقیاس حفره

¹Yang et al.

²Zhanget al.

³Litster etal.

⁴Sinha et al.

⁵X-ray micro-tomography

⁶Neutronimaging technique

⁷Pekula et al.

⁸Hickner et al.

⁹Hartnig et al.

به دلیل نقاط ضعف روش‌های آزمایشگاهی (تجربی) و روش‌های ماکروسکوپی، از روش‌های مقیاس حفره^۱ استفاده می‌شود که ابزار مکمل و لازمی برای مطالعات آزمایشگاهی محدود شده هستند [۶۱] و دیدگاه میکروسکوپی از انتقال آب در لایه انتشار گاز به ما می‌دهند. بیشتر مدل‌های پایه‌ای و شبیه‌سازی‌های مورد استفاده برای بررسی ساختارهای واقعی لایه انتشار گاز، معمولاً نیاز به فهمی کامل از انتقال جریان و جرم دارد که روش شبکه حفره^۲ و روش شبکه بولتزمن^۳ ابزار عددی مفیدی برای این هدف هستند [۶۲].

۲-۴-۲-۱ بررسی عددی میکروسکوپی به روش شبکه حفره

در این روش تا حدی به مطالعه فرم و ساختار پیچیده محیط متخلخل واقعی لایه انتشار گاز پرداخته می‌شود و محیط متخلخل به صورت یک شبکه منظم از حفره‌های مکعبی یا کره‌ای مدل شده و این حفره‌ها توسط گلوگاه‌هایی^۴ ستون مانند به هم متصل می‌شوند [۶۲ و ۶۱]. مطالعات متعددی با این روش برای بررسی لایه انتشار گاز انجام شده است که می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

سینها و وانگ^۵ [۷۴ و ۷۵] با استفاده از روش شبکه حفره، رفتار حرکتی انتقال آب مایع و سیر تغییرات آن را در لایه انتشار گاز بررسی کردند و قابلیت خیسی ثابت و قابلیت خیسی متغیر^۶ حفره‌ها را روی انتقال آب مورد مطالعه قرار دادند. همچنین لی و همکارانش^۷ [۷۶ و ۷۷] با استفاده از این مدل به بررسی انتقال آب در لایه انتشار گاز آب‌گریز^۸ پرداختند و اثرات هندسی و خواص مویینگی را بررسی کردند. مدل شبکه حفره نسبت به مدل‌های ماکروسکوپی فهم بنیادی‌تری را برای انتقال آب و توزیع آن در لایه انتشار گاز ارائه می‌دهد ولی به دلیل ساختار منظم آن نمی‌تواند یک لایه انتشار گاز

¹Pore-scale modes

²Pore-network model

³Lattice Boltzmann method (LBM)

⁴Throats

⁵Wang

⁶mixed wettability

⁷Lee et al.

⁸Hydrophobic

با ساختار میکروسکوپی واقعی را مدل کند (لایه انتشار گاز واقعی محیطی از جنس فیبرهای کربنی است که به طور تصادفی در کنار همدیگر قرار گرفته‌اند).

۲-۴-۲-۲ بررسی عددی میکروسکوپی به روش شبکه بولتزمن

یکی دیگر از روش‌های مقیاس حفره، روش شبکه بولتزمن است که می‌تواند انتقال جریان و جرم را بر اساس ساختار واقعی لایه انتشار گاز شبیه‌سازی کند [۷۸]. در طول دو دهه اخیر روش شبکه بولتزمن به عنوان یک روش عددی قدرتمند برای بسیاری از پدیده‌های انتقال مورد استفاده قرار گرفته است [۷۸]. همچنین در سال‌های اخیر این روش به دلیل پایداری عددی عالی و تطبیق‌پذیری (تنوع‌پذیری برای مسائل مختلف) ساختاری، ابزاری قوی برای شبیه‌سازی جریان سیال به خصوص در هندسه‌های پیچیده بوده است [۷۹]. برخلاف روش‌های مرسوم دینامیک سیال محاسباتی که معادلات گسسته شده‌ی بقای جرم، مومنتوم و انرژی را برحسب کمیت‌های میکروسکوپیکی مانند سرعت و چگالی حل می‌کنند، روش شبکه بولتزمن ذرات سیال را روی یک شبکه مزوسکوپی و بر اساس معادلات بولتزمن و با استفاده از تعداد محدودی سرعت در یک شبکه منظم شبیه‌سازی می‌کند [۶۲]. در این روش، جریان به صورت مجموعه‌ای از ذرات ساختگی در نظر گرفته شده که روی گره‌های ساختار شبکه قرار دارند و بین آن‌ها برخوردهایی بر اساس یک تابع توزیع سرعت صورت می‌گیرد [۸۰]. در این روش از مدل‌های سینتیک ساده شده‌ای برای شبیه‌سازی فیزیک‌های جریان مزوسکوپی و میکروسکوپی استفاده می‌شود [۷۹]. همچنین به دلیل ماهیت سینتیک آن در کاربردهایی با مرزهای پیچیده، جریان‌های چند فاز، جریان‌های چند مؤلفه و جریان در محیط متخلخل به کار گرفته می‌شوند [۸۰]. این روش یک ابزار امیدبخش برای شبیه‌سازی جریان چند فازی در محیط متخلخل است که می‌تواند شبیه‌سازی‌های دینامیکی انتقال آب در لایه انتشار گاز را با ساختار واقعی تر و امکان طراحی دقیق تر حفره‌ها را انجام دهد [۶۱]. توجه شود که ساختار متخلخل لایه انتشار گاز تأثیر زیادی روی انتقال جرم، جریان، توزیع اجزاء غلظت و چگالی جریان محلی دارد [۶۲]. لایه انتشار گاز دارای ساختار پیچیده و مشخصات غیرهمگنی شامل قابلیت خیسی، ضریب نفوذپذیری و ضریب پخش مؤثر است

[۶۲]. علت غیریکنواخت بودن قابلیت خیسی سطح در لایه انتشار گاز امکان توزیع غیریکنواخت پلی تترافلورواتیلن^۱ است [۸۱] که منجر به حضور همزمان حفره‌های آب‌دوست و آب‌گریز می‌شود. همچنین لایه‌های انتشار گاز نو^۲ (تازه شروع به کار کرده- جوان) عمدتاً آب‌گریزند که پس از مدت طولانی کارکرد^۳ (پیر شوند) برخی از فیبرهای کربن خاصیت آب‌دوستی پیدا کرده و در نتیجه قابلیت خیسی غیریکنواخت می‌شود (شامل فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز می‌شود) [۸۳ و ۸۲]. از طرف دیگر علت غیرهمگن بودن ضریب نفوذپذیری و ضریب پخش مؤثر، متفاوت بودن جهت قرارگیری فیبرهای کربن است [۸۴-۸۷]. همچنین توجه شود که در پروسه انتقال آب در لایه انتشار گاز در صورتی که فیبرهای کربن دارای خاصیت آب‌گریزی بالا باشند دینامیک پیچیده‌ای بین دو فاز شکل می‌گیرد که شامل اثرات متقابل قطره‌ها، تشکیل و گسترش جبهه‌های طغیان کننده است [۸۰]. مزیت دیگر روش شبکه بولتزن این است که مرز مشترک بین دو فاز را دنبال نمی‌کند و حتی مرزهای تیز بین دو فاز را نگه داشته و نمایش می‌دهد.

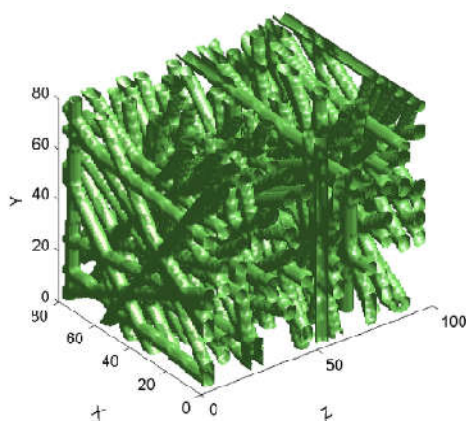
زنگ^۴ و همکارانش به بررسی انتقال آب مایع و نفوذ اکسیژن در لایه انتشار گاز سه بعدی به روش شبکه بولتزن پرداختند. در بررسی آنها لایه کاتالیزور و واکنش الکتروشیمیایی نیز مدل شده است. هدف آنها مطالعه اثر لایه متخلخل میکرو بر چگالی جریان است. مطالعه آنها نشان می‌دهد که تجمع آب مایع باعث کاهش عملکرد پیل سوختی خواهد شد و همچنین حضور لایه متخلخل میکرو عملکرد پیل سوختی را افزایش می‌دهد [۸۸].

¹Polytetrafluoroethylene (PTFE)

²Beginning-of-life GDL

³Ageing GD

⁴Zhang



شکل ۲-۷: هندسه مربوط به مطالعه زنگ و همکارانش [۸۸].

هانگ^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۸ با استفاده از مستطیل‌های نامنظم و غیر هم‌اندازه جریان دوفازی، دوبعدی، پایا و هم‌دما را به روش شبکه بولتزمن مدل کردند [۸۹]. محیط موردنظر متخلخل بوده و دو فاز مخلوط‌نشده هستند. در جریان چند فاز در محیط متخلخل، فاز خیس‌کننده سطح جامد را پوشش داده و در امتداد آن حرکت می‌کند. درحالی‌که فاز غیر خیس‌کننده در مرکز حفره حرکت کرده و توسط فاز خیس‌کننده احاطه می‌شود. از این‌رو یک اتصال چسبندگی قوی^۲ بین فازهای خیس‌کننده و غیر خیس‌کننده وجود دارد. در این مطالعه به بررسی این اثر (که ناشی از نسبت‌های ویسکوزیته، عدد موئینگی و قابلیت خیس‌کنندگی است) روی جریان دو فازی در محیط متخلخل پرداخته شده است. شرط اولیه این است که فازهای خیس‌کننده و غیر خیس‌کننده به‌طور تصادفی در میان حفره‌ها قرار گیرند. همچنین شرایط مرزی متناوب بر همه مرزها اعمال شده است. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که ضریب نفوذپذیری فاز خیس‌کننده به نسبت ویسکوزیته وابسته نیست و در نسبت‌های ویسکوزیته بالا فاز غیر خیس‌کننده به هم متصل‌تر هستند.



شکل ۲-۸: هندسه مربوط به مطالعه هانگ و همکارانش [۸۹].

¹Huang

²Strong viscous coupling

تاب^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۹ با استفاده از مستطیل‌های نامنظم و غیر هم‌اندازه کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون (لایه انتشار گاز و کانال گاز) را در حالت دوفازی، دوبعدی، غیر پایا و هم‌دما روش شبکه بولتزن بررسی کردند. هدف آن‌ها بررسی اثر عدد موینگی، ارتفاع محیط، زمان، سرعت ورودی و قابلیت خیسی کانال بر رفتار آب مایع است [۹۰]. مطالعه آن‌ها به سه حالت دسته‌بندی می‌شود:

الف: بررسی آب مایع در لایه انتشار گاز بدون کانال: آب مایع با سرعت ورودی و از نقطه‌ای در وسط محیط وارد لایه انتشار گاز می‌شود. دیوار سمت چپ و راست دارای شرط عدم لغزش بوده و از شرط مرزی خروجی آزاد در مرز بالا استفاده شده است. ارتفاع محیط ۱ mm است.

ب: بررسی جریان گاز روی رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز و کانال: هوا از دیوار سمت چپ با سرعت 0.05 m/s و آب از دیوار پایین با سرعت 0.02 m/s وارد می‌شود. شرط مرزی دیوار سمت راست، خروجی آزاد است. ارتفاع محیط ۱ mm و طول آن $2/9 \text{ mm}$ است.

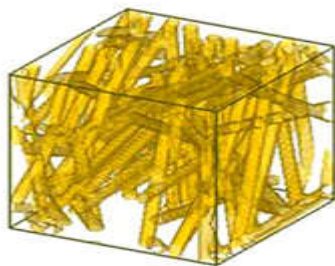
ج: رفتار آب مایع و جریان گاز در لایه انتشار گاز بدون کانال: در این حالت سرعت آب ورودی m/s 0.02 و سرعت هوای ورودی 0.05 m/s است. همچنین ارتفاع محیط 1 mm و طول آن 0.2 mm در نظر گرفته شده است. شرط مرزی خروجی آزاد برای دیوار بالا و سمت راست استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که قابلیت خیسی کانال گاز در انتقال دو فاز در پیل سوختی نقش مهمی دارد و همچنین در حالت‌هایی که آب ورودی سرعت پایینی دارد، رژیم حرکت آب انگشتی موینگی است.



شکل ۲-۹: هندسه مربوط به مطالعه تاب و همکارانش [۹۰].

¹ Tabe

ماخرجی^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۹ با استفاده از شبکه بولتزمن کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون (لایه انتشار گاز و کاتالیزور بررسی شده) را در حالت دوفازی، سه‌بعدی، پایا و هم‌دما بررسی کردند [۹۱]. لایه انتشار گاز با استوانه‌هایی با جهت و موقعیت تصادفی و بر مبنای کربن کاغذ ساخته شده است. شرایط مرزی فشار برای ورود و خروج و شرایط مرزی عدم لغزش و متناوب برای وجوه دیگر استفاده شده است. همچنین از توزیع تصادفی در لحظه اول برای دو فاز استفاده شده است. هدف آن‌ها بررسی رفتار دینامیکی آب مایع، اثر ساختار حفره‌ها، قابلیت خیسی سطح، اثر افزایش فشار موینگی و اثر حالت زیر اشباع بر انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز در دو حالت کاملاً آب‌گریز و ترکیب آب‌دوست و آب‌گریز است. نتایج نشان می‌دهد که در فشار موینگی بسیار کم، جبهه هجوم آورنده آب مایع تنها موفق به غلبه برافت فشار در برخی نقاط می‌شود. در حالی که با افزایش فشار موینگی چندین جبهه آب مایع شروع به نفوذ کردن در ناحیه اشغال شده توسط هوا می‌کنند. توزیع فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز به صورت تصادفی انجام شده است.



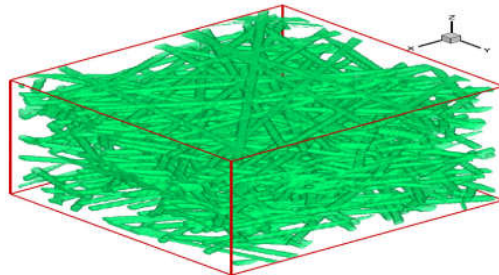
شکل ۲-۱۰: هندسه مربوط به مطالعه ماخرجی و همکارانش [۹۱].

هاوو و چن^۲ در سال ۲۰۱۰ به بررسی کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت دوفازی، سه‌بعدی، غیر پایا و هم‌دما پرداختند و از روش شبکه بولتزمن برای این بررسی استفاده کردند [۶۱]. لایه انتشار گاز با استوانه‌هایی با جهت و موقعیت تصادفی و بر مبنای کربن کاغذ ساخته شده است. شرط مرزی آب مایع در ورودی سرعت ثابت (۰/۰۰۰۰۷۵ m/s) و در خروجی فشار ثابت است. اثر توزیع قابلیت خیسی و زمان روی انتقال آب مایع بررسی شده است. مشاهده می‌شود که زمان لازم برای

¹ Mukherjee

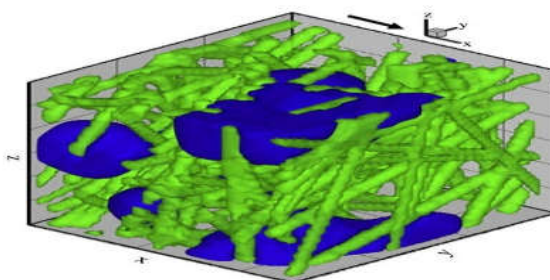
² Hao and Cheng

رسیدن سیال به خروجی با افزایش زاویه خیزی کاهش می‌یابد. همچنین اختصاص مسیرهای آب-دوست در لایه انتشار گاز با قابلیت خیزی غیریکنواخت (ترکیب آب‌دوست و آب‌گریز) باعث کاهش اشباع آب مایع می‌شود. برای بررسی اثر ترکیب آب‌دوست و آب‌گریز، از یک ستون آب‌دوست (به طول ۲۰ در واحد شبکه بولتزمن) در وسط و در جهت ضخامت لایه انتشار گاز استفاده شده است.



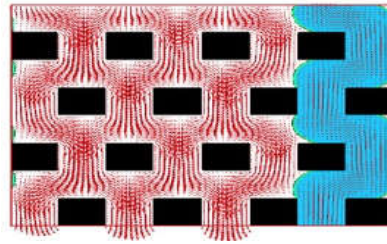
شکل ۲-۱۱: هندسه مربوط به مطالعه هاوو و چن [۶۱].

در سال ۲۰۱۰، هاوو و چن ضریب نفوذپذیری نسبی لایه انتشار گاز را در حالت سه‌بعدی، پایا، دوفازی و هم‌دما بررسی کردند (روش شبکه بولتزمن). برای مدل‌سازی لایه انتشار گاز از استوانه‌هایی با جهت و موقعیت تصادفی استفاده شده است [۹۲]. شرط اولیه به صورت توزیع تصادفی و شرط مرزی روی تمام سطوح به صورت تناوبی است. نتایج برای لایه انتشار گاز نشان می‌دهد که قابلیت خیزی تنها روی ضریب نفوذپذیری نسبی فاز غیر خیس‌کننده اثر می‌گذارد.



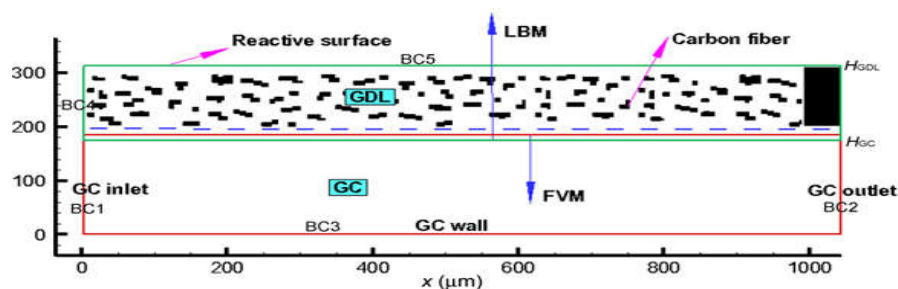
شکل ۲-۱۲: هندسه مربوط به مطالعه هاوو و چن [۹۲].

هانگ و همکارانش در سال ۲۰۱۱ جریان دوبعدی، دوفازی، پایا و هم‌دما (روش شبکه بولتزمن) در محیط متخلخل را بررسی کردند [۹۳]. برای ساخت محیط متخلخل از مستطیل‌هایی به صورت منظم استفاده شده و شرایط مرزی اعمال شده روی تمام وجوه به صورت متناوب است. آن‌ها جریان در لایه متخلخل را با استفاده از سه مدل مختلف شبکه بولتزمن ارزیابی و مقایسه کردند.



شکل ۲-۱۳: هندسه مربوط به مطالعه هانگ و همکارانش [۹۳].

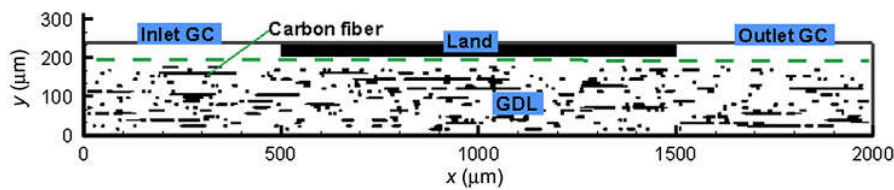
چن و همکارانش در سال ۲۰۱۲ به بررسی کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون (هندسه شامل لایه انتشار گاز، کانال گاز و کاتالیزور است که کاتالیزور به صورت یک مرز مدل شده است) در حالت تک فازی، پایا، همدمما و دوبعدی پرداختند [۹۴]. برای ساخت لایه انتشار گاز از مستطیل‌هایی به صورت نامنظم استفاده شده است. ورودی کانال گاز دارای شرط مرزی سرعت و غلظت مشخص و خروجی آن دارای شرط مرزی توسعه‌یافته (گرادیان سرعت و غلظت صفر) است. قسمت‌های سمت چپ لایه انتشار گاز و پایین کانال دارای شرط مرزی سرعت و گرادیان غلظت صفر هستند و مرز بالا دارای سرعت صفر و گرادیان غلظت مشخص (به صورت یک تابع) است. طول لایه انتشار گاز ۱۰۴۰ میکرومتر، ارتفاع آن ۲۰۰ میکرومتر و سرعت ورودی $1/\delta m/s$ است. هدف از این مقاله تعیین توزیع سرعت، غلظت اکسیژن، بخار آب و معرفی روش ترکیبی حجم محدود - شبکه بولتزمان است. لازم به ذکر است که روش حجم محدود برای شبیه‌سازی جریان و جرم در کانال و شبکه بولتزمان برای بررسی لایه انتشار گاز استفاده شده است.



شکل ۲-۱۴: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش [۹۴].

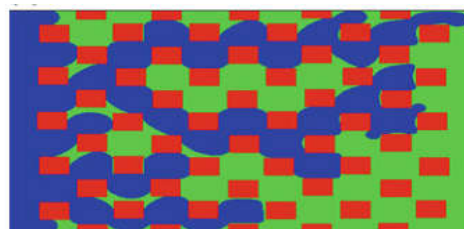
چن و همکارانش در سال ۲۰۱۲ لایه انتشار گاز و کاتالیزور کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون (کاتالیزور به صورت یک مرز در پایین لایه انتشار گاز در نظر گرفته شده است) را در دو حالت تک فاز (همدمما، دوبعدی، پایا و با انتقال جزء غلظت) و دو فاز (همدمما، دوبعدی، غیر پایا بدون انتقال جزء

غلظت) بررسی کردند [۶۲]. برای ساخت لایه انتشار گاز از فیبرهای کربن افقی استفاده شده است. شرایط مرزی روی موانع به صورت عدم لغزش، در ورودی برای سرعت و اجزاء غلظت مشخص و در خروجی توسعه یافته است. سرعت ورودی $1/5 \text{ m/s}$ ، طول لایه انتشار گاز 2000 میکرومتر و ارتفاع آن 200 میکرومتر است. نتایج این شبیه‌سازی نشان می‌دهد که ساختار مقیاس حفره تأثیر زیادی روی جریان سیال، توزیع انتقال جرم، چگالی جریان و رفتار آب مایع دارد.



شکل ۲-۱۵: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش [۶۲].

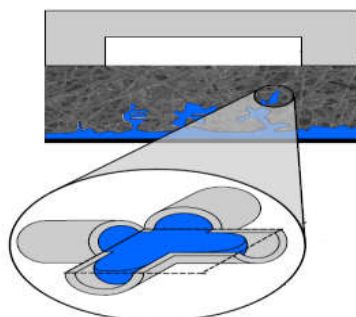
در سال 2013 لیو^۱ و همکارانش به بررسی جریان آب مایع در یک محیط متخلخل دوبعدی، دوفازی و هم‌دما به روش شبکه بولتزمان پرداختند [۹۵]. آن‌ها برای ایجاد محیط متخلخل از مربع‌های منظم و هم‌اندازه استفاده کردند. هندسه دارای شرایط مرزی از نوع ورودی، خروجی و دیوار است. در لحظه اول محیط با مایع پر شده و گاز روی آن جریان می‌یابد. در این مطالعه اثرات عدد موینگی، نسبت ویسکوزیته سیال‌ها و قابلیت خیسی سطح بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که رژیم‌های مختلف جریان به وضوح قابل مشاهده بوده و وابستگی زیادی به نسبت ویسکوزیته، عدد موینگی و عدد باند دارند. در نسبت‌های ویسکوزیته کم، ضخامت انگشتی نازک و بخش کمی از فضای حفره‌ها را اشغال می‌کند. در حالی که با افزایش نسبت ویسکوزیته الگوهای انگشتی تقریباً کل فضای حفره را اشغال می‌کنند. همچنین با افزایش عدد باند ضخامت الگوهای انگشتی کم می‌شود.



شکل ۲-۱۶: هندسه مربوط به مطالعه لیو و همکارانش [۹۵].

¹ Liu

مدیسی و آلن^۱ در سال ۲۰۱۳ رفتار آب مایع، غلظت بخار و انتقال حرارت را در لایه متخلخل پیل سوختی غشای مبادله پروتون به روش شبکه حفره مورد مطالعه قرار دادند و اثرات دما، رطوبت نسبی و ضریب تخلخل را بر انتقال آب بررسی کردند. مسئله دوبعدی و غیر پایا بوده و برای مدل کردن غلظت بخار از قانون فیک (نفوذ) استفاده شده است. انتقال حرارت فقط از طریق هدایت صورت می-گیرد که معادله آن شامل عبارت گذرا، هدایت و گرمای تولیدی است. شرط مرزی دما، سرعت و غلظت در مرزهای جانبی، متناوب است. در مرز پایین برای جرم و حرارت از شرط مرزی نیومن (بر اساس شرایط کاری پیل سوختی) و در مرز بالا در زیر کانال گاز از شرط مرزی دیریکله برای فشار، دما و غلظت استفاده شده است. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که اگر در کانال‌های گاز، دما پایین و رطوبت نسبی بالا باشد آب رسیده به کانال به شکل مایع است و وقتی دما بالا و رطوبت نسبی کم باشد مقداری از آب خروجی به شکل بخار و بقیه به صورت مایع است.

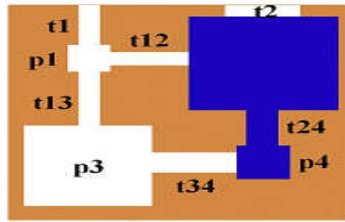


شکل ۲-۱۷: هندسه مربوط به مطالعه مدیسی و آلن [۹۶].

در سال ۲۰۱۴ وو^۲ و همکارانش به بررسی مدل سه‌بعدی، هم‌دما و دوفازی در محیط متخلخل به روش شبکه حفره پرداختند [۹۷]. اثرات بزرگی حفره‌ها، باریک بودن گلوگاه‌ها روی توزیع آب و نرخ تبخیر و اشباع آب مایع روی تعداد خوشه‌ها بررسی شده است. حفره‌ها به صورت مکعبی مدل شده و توسط گلوگاه‌هایی با مقطع مربعی و کوچک به هم وصل شده‌اند. در این مدل فشار فاز گاز ثابت بوده و از نیروهای ویسکوز صرف‌نظر شده است. نتیجه این است که اگر نسبت گلوگاه به حفره بزرگ باشد جابجایی دو فاز به صورت تصادفی است و تعداد زیادی از خوشه‌های مجزای مایع قابل مشاهده است.

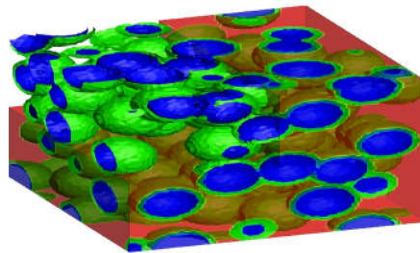
¹ Mediciand Allen

² Wu



شکل ۲-۱۸: هندسه مربوط به مطالعه وو و همکارانش [۹۷].

مطالعه بعدی کار لانگ^۱ و همکارانش است که در آن انتقال گونه، واکنش الکتروشیمیایی و انتقال حرارت در لایه کاتالیزور پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت سه‌بعدی و پایا بررسی شده است [۹۸]. این بررسی به صورت تک فازی بوده و برای ساخت محیط میکروسکوپی از کره استفاده شده است. در انتقال گونه فقط عبارات نفوذ و مصرف در نظر گرفته شده و عبارت جابجایی (در اثر سرعت) در نظر گرفته نشده است پس به حل معادله مومنتوم نیازی نیست و معادله انرژی فقط شامل عبارات هدایت و چشمه است. شرایط مرزی در دو وجه مقابل شرط دیریکله و در چهار وجه دیگر شرط مرزی متناوب است. در این مطالعه به محاسبه مصرف اکسیژن، ضریب نفوذپذیری اکسیژن و بخار آب در شرایط مختلف کاری پرداخته شده و نتایج حاصل با داده‌های تجربی مقایسه شده است. بررسی آن‌ها نشان می‌دهد با افزایش اندازه کره‌ها، ضریب نفوذپذیری افزایش می‌یابد.



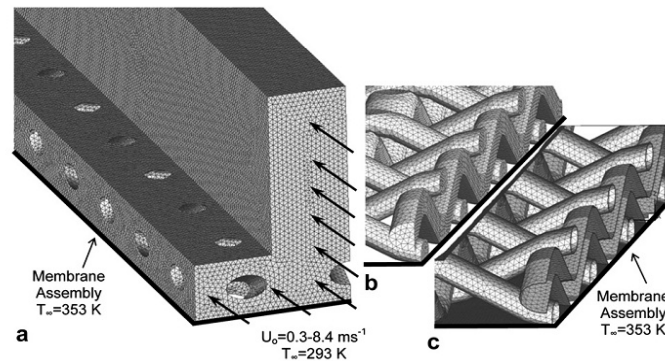
شکل ۲-۱۹: هندسه مربوط به مطالعه لانگ و همکارانش [۹۸].

کوپانیدیس^۲ و همکارانش در سال ۲۰۱۱ جریان سیال و حرارت را در کانال گاز و لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت سه‌بعدی و تک فازی مدل کردند [۹۹]. جنس فیبرهای کربن از پارچه کربنی بوده که برای اولین بار پارچه کربنی به صورت مقیاس حفره مدل شده است. معادلات مومنتوم، پیوستگی، انرژی و انتقال بخار آب در حالت پایا با استفاده از نرم‌افزار حل شده و پارامترهای

¹Lange

²Kopanidis

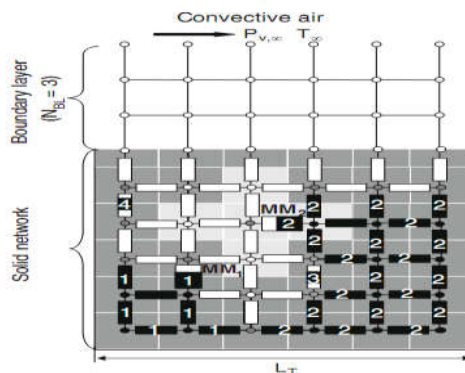
توزیع سرعت، دما و رطوبت نسبی بررسی شده است. فرض شده در اثر واکنش الکتروشیمیایی در کاتالیزور، بخار آب تولید می‌شود (نه آب مایع). نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که فرض هم‌دمایی (نادیده گرفتن دما) اثر مهمی روی پیشگویی در مورد میعان و محل وقوع آن دارد.



شکل ۲۰-۲: هندسه مربوط به مطالعه کوپانیدیس و همکارانش [۹۹].

ساراسانی^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۹ با استفاده از مدل شبکه حفره خشک کردن محیطی متخلخل را در حالت غیرپایا بررسی کردند [۱۰۰]. مدل شبکه حفره از تعدادی حفره تشکیل شده که توسط گلوگاه‌هایی به هم متصل‌اند. در مرز فازها جریان مایع، تبخیر و نفوذ بخار که ناشی از نیروهای موینگی و گرانش است، شبیه‌سازی شده است. در گلوگاه‌هایی که بخشی از آن‌ها با آب پر شده باشد حرکت مرز مشترک دو فاز توسط نفوذ آب بخار شده به درون هوا صورت می‌گیرد و آب بسته به فشار مرز مایع می‌تواند در هر جهتی جریان یابد. در این فرآیند انتقال بخار فقط در اثر نفوذ مولکولی است و نیروی ویسکوز در نتیجه جریان مایع ناچیز است. هندسه محیطی دوبعدی است که در حالت اولیه به‌طور کامل با آب ۲۰ درجه سانتی‌گراد اشباع شده و جریان هوای خشک‌کننده بدون رطوبت نسبی روی وجه بالایی آن جریان دارد (فشار فاز گاز ثابت است). فرض شده که انتقال حرارت در اثر هدایت بوده و تغییر فاز (تبخیر/ مایع شدن) نیز مدل شده است. نتایج نشان می‌دهد که در صورت در نظر گرفتن اثر گرانش نرخ خشک شدن کاهش می‌یابد.

^۱ Surasani



شکل ۲- ۲۱: هندسه مربوط به مطالعه ساراسانی و همکارانش [۱۰۰].

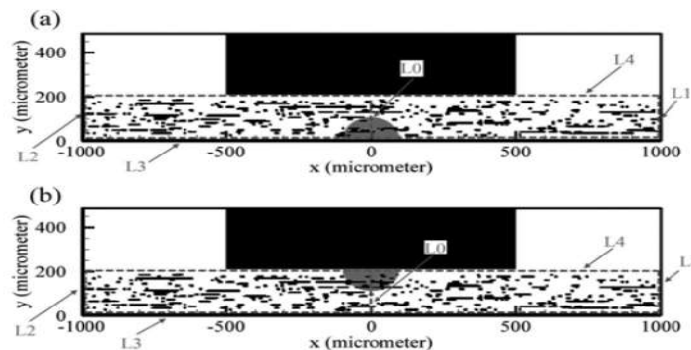
ملایی منش و اکبری^۱ [۱۰۱] بیان کردند که در قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون قطره آب مایع در دو موقعیت می تواند تشکیل شود. موقعیت اول مرز مشترک لایه انتشار گاز- لایه متخلخل میکرو است چون آب مایع تولید شده در کاتالیزور از طریق لایه متخلخل میکرو وارد لایه انتشار گاز می شود. پس در حالت اول قطره‌ای از آب مایع را در مرز مشترک لایه انتشار گاز- لایه متخلخل میکرو قرار دادند و رفتار دینامیکی آن را در حین حذف از لایه انتشار گاز بررسی کردند.

چون سردترین مکان در طول شرایط کاری پیل سوختی در زیر مانع است و میعان در سردترین مکان کاتد اتفاق می افتد بنابراین موقعیت دوم، مرز مشترک مانع- لایه انتشار گاز است. به همین دلیل قطره‌ای از آب مایع را در مرز مشترک مانع- لایه انتشار گاز قرار دادند و رفتار دینامیکی آن را در حین حذف از لایه انتشار گاز مطالعه کردند. نتایج این بررسی نشان می دهد که اگر قطره اولیه به لایه متخلخل میکرو چسبیده باشد و بخواهد از میان لایه انتشار گاز آب دوست حرکت کند، به چند قطره کوچک تر تفکیک شده و به شدت به فیبرهای کربن می چسبد. اگر لایه انتشار گاز آب گریز باشد حرکت قطره نسبت به حالت قبل به طور قابل ملاحظه‌ای آسان تر خواهد بود.

در حالتی که قطره چسبیده به مانع باشد و لایه انتشار گاز آب دوست باشد قطره تمایل به حرکت روی مانع را دارد و در حین حرکت به بخش‌های کوچک تری تقسیم شده و به فیبرهای کربن می چسبد. قطره‌های کوچک آب مایع چنان به فیبرهای کربن چسبیده‌اند که جریان گاز قادر به حذف آن از لایه انتشار گاز نیست. اگر لایه انتشار گاز آب گریز باشد فقط بخش کوچکی از قطره اولیه در ساختار لایه

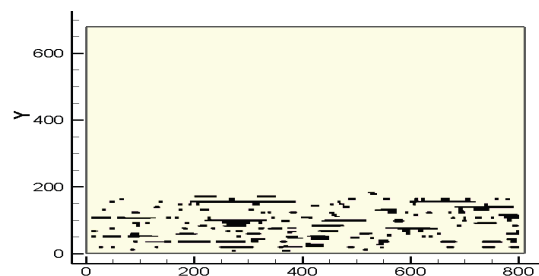
¹ Molaemanesh and Akbari

انتشار گاز و در قسمت زیر مانع به دام می‌افتد و بقیه از محیط خارج می‌شوند. با بررسی اثر گرادیان زاویه خیزی در لایه انتشار گاز (در جهت X و Y) به این نتیجه رسیدند که گرادیان زاویه در جهت X به حذف آب مایع کمک می‌کند اگر قطره آب مایع به مانع چسبیده باشد.



شکل ۲-۲۲: هندسه مربوط به مطالعه ملایی منش و اکبری [۱۰۱].

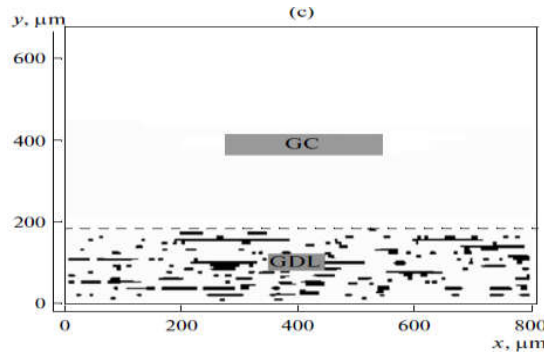
رفتارهای دینامیکی آب مایع و توزیع آن در لایه انتشار گاز و کانال گاز به صورت عددی توسط چن و همکارانش^۱ در حالت‌های با مانع در کانال و بدون آن مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰۲]. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که زمان مورد نیاز برای انتقال آب مایع از ورودی به کانال گاز در حالتی که مانع کانال گاز آب‌دوست باشد کمتر از حالتی است که مانع کانال آب‌گریز باشد و یا وجود نداشته باشد.



شکل ۲-۲۳: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش [۱۰۲].

چن و همکارانش در مطالعه بعدی خود، توزیع و انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز میکروسکوپی را به روش شبکه بولتزن بررسی کردند [۱۰۳]. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که فرآیند انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز به صورت انگشتی مویینیگی بوده و مکان‌های عبور آن به صورت به هم پیوسته است که این موضوع نتایج تجربی گذشته را تأیید می‌کند. همچنین به این نتیجه رسیدند که در کانال گاز آب‌دوست آب مایع کمتری در لایه انتشار گاز نسبت به کانال گاز آب‌گریز جمع می‌شود.

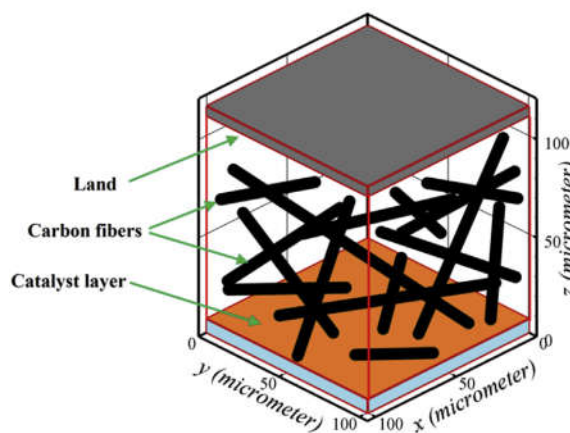
¹ Chen et al



شکل ۲-۲۴: هندسه مربوط به مطالعه چن و همکارانش [۱۰۳].

ساکایدا^۱ و همکارانش جریان دوفازی در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادل پروتون به روش تجربی و عددی (شبکه بولتزن) را به صورت سه بعدی بررسی کردند. هدف آن‌ها بدست آوردن مقداری قابل قبول برای عدد موینگی جریان ورودی است که با استفاده از آن زمان محاسباتی کاهش یابد. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که این عدد ۰/۰۰۳ است [۱۰۴].

ملایی‌منش و ناظمیان به بررسی لایه انتشار گاز با ساختار میکروسکوپی و به روش شبکه بولتزن پرداختند و اثرات نسبت تراکم و تغییر قطر فیبرهای کربن را مورد بررسی قرار دادند. همچنین توزیع کسر مولی اکسیژن، کسر مولی بخار آب و چگالی جریان تحلیل شده است. بررسی به صورت سه بعدی انجام شده و برای ایجاد محیط متخلخل از فیبرهای کربن استوانه‌ای استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که وقتی قطر فیبرهای کربن برابر ۹ میکرومتر باشد با بیشتر شدن نسبت تراکم، چگالی متوسط جریان کم می‌شود [۱۰۵].



شکل ۲-۲۵: هندسه مربوط به مطالعه ملایی‌منش و ناظمیان [۱۰۵].

¹ Sakaida

۲-۵ تعریف مسئله

در این رساله پیل سوختی نوع غشای مبادله پروتون مطالعه می‌شود. این نوع پیل سوختی در دمای پایین کار می‌کند که مزیت اصلی این ویژگی این است که به سرعت شروع به کار می‌کند. مزیت دیگر این نوع پیل سوختی ضخامت کم آن است که می‌تواند به صورت فشرده ساخته شود. این نوع پیل سوختی در معرض تقابل سوخت قرار نمی‌گیرد و در هر موقعیتی می‌تواند کار کند (عبور سوخت از طریق الکترولیت از آند به کاتد که عامل اصلی اختلال در عملکرد، کاهش راندمان و افزایش مصرف سوخت است تقابل سوخت نام دارد) به این معنا که این نوع پیل سوختی برای استفاده در وسایل نقلیه و کاربردهای حمل‌ونقلی مناسب است. یکی از مسائل مهم در بررسی و مدل‌سازی پیل سوختی نوع غشای مبادله پروتون تعادل یا مدیریت آب است. از توضیحاتی که در مورد این نوع پیل سوختی داده شد، واضح است که مقدار آب کافی باید در الکترولیت پلیمری وجود داشته باشد چون ضریب هدایت پروتونی آن متناسب با محتوای آب است [۱]. با این حال نباید مقدار آب زیاد باشد چون مقدار اضافی آن باعث مسدود شدن حفره‌ها در الکتروود یا لایه انتشار گاز شده و در نتیجه پدیده طغیان^۱ در کاتد رخ خواهد داد. در این صورت ضریب تخلخل در الکتروود و لایه انتشار گاز کاهش یافته و افت توان خروجی را در پی خواهد داشت. از طرف دیگر اگر مقدار آب کم باشد پدیده خشکی^۲ در آند رخ می‌دهد که این مسئله باعث افزایش مقاومت یونی غشاء، کاهش ولتاژ کارکردی پیل و در نتیجه کاهش توان تولیدی خواهد شد. پس مقدار آب باید به صورت متعادل باشد.

هوایی که بر کاتد دمیده می‌شود علاوه بر تهیه اکسیژن لازم می‌تواند باعث خشک شدن آب اضافی شود. از آنجایی که غشای الکترولیت بسیار نازک است آب می‌تواند از کاتد به سمت آند انتشار یابد و در سراسر الکترولیت آب به اندازه کافی جذب شود که این یک وضعیت مناسب و راضی‌کننده است که می‌توان با طراحی مناسب به این مهم رسید (البته پیچیدگی‌هایی هم وجود دارد). در طول کار سلول،

¹ Flooding

² Dehydration

یون‌های H^+ از آند به سمت کاتد حرکت می‌کنند و مولکول‌های آب با آن‌ها کشیده می‌شوند. این فرآیند را کشیدن الکترو اسمزی^۱ گویند که معمولاً به ازای هر پروتون بین یک تا پنج مولکول آب همراه آن کشیده می‌شوند. به بیان دیگر حتی اگر کاتد به‌طور کامل هیدراته (آبدار) شده باشد قسمت آند الکتروولیت به‌ویژه در چگالی جریان‌های بالا می‌تواند به‌طور کامل خشک شود. یکی از راه‌های معمول برای حل مشکل خشکی این است که هوا، هیدروژن و یا هر دو، قبل از ورود به سلول مرطوب شوند. پس به‌طور کلی آب به روش‌های زیر منتقل می‌شود [۱]:

تولید آب در کاتد به دلیل واکنش الکتروشیمیایی.

انتقال آب از آند به کاتد با حرکت پروتون‌ها از میان الکتروولیت (electro-osmotic drag).

نفوذ آب از کاتد به سمت آند به دلیل اختلاف غلظت آب در دو طرف غشاء (back-diffuse) [۴۹].

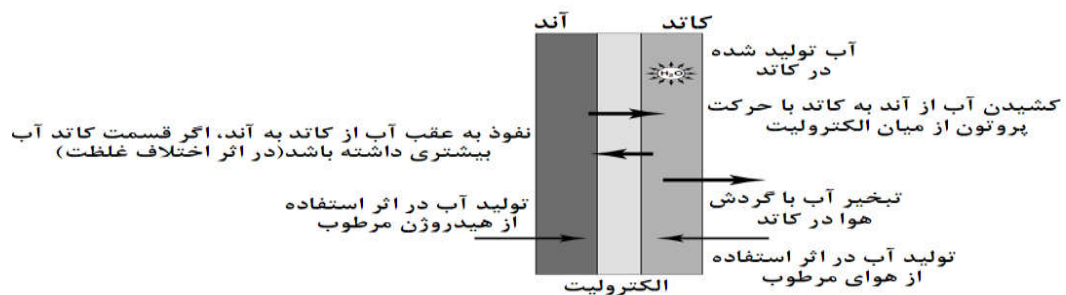
تبخیر آب با حرکت هوا درون کاتد.

میعان آب درون آند اگر منبع هیدروژن دارای رطوبت باشد.

تولید آب درون کاتد اگر منبع هوا دارای رطوبت باشد (اگر فشار جزئی بخار آب بیشتر از فشار بخار

اشباع باشد آب مایع تشکیل می‌شود).

نفوذ آب در اثر گرادیان فشار بین کاتد و آند [۴۹].



۲-۲۶: روش‌های مختلف تولید و انتقال آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون [۱].

نیم‌واکنش کاتد کندتر از دو واکنش دیگر است پس کارکرد پیل سوختی در شرایط عملی توسط کاتد محدود می‌شود. علاوه بر این در کاتد می‌تواند تجمع آب اتفاق بیفتد که خود باعث گرفتگی منافذ شده

¹ Electro-osmotic drag

و مانع از انتقال اکسیژن به کاتالیزور می‌شود. به همین دلیل تحقیقات زیادی روی کاتد پیل سوختی انجام شده است. البته بقیه اجزاء پیل سوختی هم برای بررسی مهم هستند [۲]. لایه انتشار گاز کار جمع‌آوری جریان، حذف آب و حمایت‌کننده فیزیکی کاتالیزور را بر عهده دارد [۱]. اگرچه مقداری از آب تولید شده در کاتد می‌تواند در غشاء نفوذ کند اما بیشتر این آب از میان منافذ موجود در لایه انتشار گاز متخلخل که در مجاورت لایه کاتالیزور است خارج می‌شود [۲]. پس با توجه به مطالب بالا مدیریت آب در کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون به خصوص در قسمت لایه انتشار گاز آن امری حیاتی است. بنابراین در این رساله لایه انتشار گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون بررسی می‌شود. در جریان تک فاز اثر حضور آب مایع در سلول در نظر گرفته نشده و رطوبت ورودی باید به گونه‌ای باشد که چگالش اتفاق نیفتد [۳۹]. مدیریت آب یکی از موضوعات مهم و قابل توجه در پیل سوختی است و مدل‌هایی که آب مایع در آن در نظر گرفته می‌شود، دیدگاه بهتری از رفتار واقعی را ارائه می‌دهند [۳۹]. پس بررسی انتقال آب خود می‌تواند به صورت دو فاز باشد که در برخی از قسمت‌ها غشاء خشک و در برخی قسمت‌ها به صورت کاملاً آب‌گرفته باشد. آب‌گرفتنی پدیده‌ای معروف و محدودکننده‌ی عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون است بنابراین درک ویژگی‌های انتقال دو فاز در کاتد پیل سوختی و تأثیر آن‌ها بر عملکرد پیل سوختی ضروری است [۳].

مطالعات انجام شده برای بررسی لایه انتشار گاز به دو صورت ماکروسکوپی و میکروسکوپی است و از آنجایی که مدل‌های ماکروسکوپی نمی‌توانند اثر ساختار واقعی و مشخصات غیرهمگن لایه انتشار گاز را مدل کنند نیاز به بررسی میکروسکوپی لایه انتشار گاز ضروری است [۶۲].

۲-۶ هدف رساله

هدف از این رساله، بررسی لایه انتشار گاز در قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون در حالت دوبعدی، هم‌دما، دوفازی و به صورت میکروسکوپی است. منظور از بررسی میکروسکوپی مدل‌سازی فیبرهای کربن موجود در محیط است. در بررسی‌های مختلف برای مدل کردن تخلخل محیط از موانع جامد مستطیلی، دایره‌ای، کروی، استوانه‌ای یا صفحات افقی استفاده می‌شود که در مطالعه حاضر موانع

دایره‌ای به کار گرفته شده است. در جریان‌های دوفازی در میان لایه کاتالیزور متخلخل و لایه انتشار گاز فیبری، به دلیل ساختار پیچیده و اندازه کوچک حفره‌ها، نیروهای سطحی نسبت به نیروی گرانش، ویسکوز و اینرسی از اهمیت بیشتری برخوردار بوده و بر محیط حکم‌فرما هستند. در لایه انتشار گاز اعداد بدون بعد به همراه بزرگی رتبه^۱ آن‌ها به صورت زیر تعریف می‌شوند [۸۰]:

$$\text{Re} = \frac{\rho_2 U_2 D}{\mu_2} \approx O(10^{-4}) \quad (1-2)$$

$$\text{Ca} = \frac{U_2 \mu_2}{\sigma} \approx O(10^{-6}) \quad (2-2)$$

$$\text{Bo} = \frac{g(\rho_2 - \rho_1) D^2}{\sigma} \approx O(10^{-10}) \quad (3-2)$$

$$\text{We} = \frac{\rho_2 U_2^2 D}{\sigma} \approx O(10^{-10}) \quad (4-2)$$

روابط ۱-۲ تا ۴-۲ به ترتیب اعداد بی‌بعد رینولدز، موینگی، باند و وبر را نشان می‌دهند. U_2, μ_2 به ترتیب ویسکوزیته دینامیکی و سرعت فاز غیر خیس‌کننده است. σ کشش سطحی، D قطر ذرات، ρ چگالی سیال و g شتاب گرانش است. با مقایسه مرتبه بزرگی، U_2 دارای مقدار کمی در لایه انتشار گاز است. توجه شود که برای کاتالیزور و لایه انتشار گاز آب‌گریز در پیل سوختی، آب فاز غیر خیس‌کننده^۲ و هوا فاز خیس‌کننده^۳ است که در روابط بالا به ترتیب با اندیس ۲ و ۱ نمایش داده شده‌اند. با توجه به تعریف عدد باند که برابر نسبت نیروی گرانش به نیروی کشش سطح است بدیهی است که اثر گرانش نسبت به نیروی کشش سطح قابل صرف‌نظر کردن است؛ بنابراین نیروی موینگی قوی بر محیط حکم‌فرما است. عدد رینولدز نشان‌دهنده نسبت نیروی اینرسی به نیروی ویسکوز است و واضح است که اثر اینرسی در مقایسه با نیروی ویسکوز، ناچیز است. با توجه به پایین بودن اعداد باند و رینولدز می‌توان نتیجه گرفت که اختلاف (یا نسبت) چگالی (برای جریان دوفازی آب-هوا در پیل سوختی تقریباً ۱۰۰۰ است) اثر ناچیزی روی انتقال در کاتالیزور و لایه انتشار گاز دارد [۸۰]. عدد

¹The order of magnitude

²Non-wetting phase (NWP)

³Wetting phase (WP)

مویبگی نشان‌دهنده نسبت نیروی ویسکوز به نیروی کشش سطح است و با توجه به مرتبه آن اثر نیروی ویسکوز در مقایسه با نیروی کشش سطح قابل صرف‌نظر کردن است [۸۰]. عدد وبر نیز به صورت نسبت نیروی اینرسی به نیروی کشش سطحی تعریف می‌شود که برابر حاصل‌ضرب عدد رینولدز و عدد مویبگی است. مرتبه این عدد بیانگر ناچیز بودن نیروی ویسکوز و اینرسی در مقایسه با نیروی کشش سطحی است. بنابراین نیروی کشش سطح بیانگر انتقال دوفازی در لایه کاتالیزور و لایه انتشار گاز است.

لنورمند و همکارانش^۱ [۱۰۶] تغییر مکان فاز خیس‌کننده توسط فاز غیر خیس‌کننده (که هر دو فاز مخلوط نشدنی هستند) در یک محیط متخلخل افقی و مسطح را بدون در نظر گرفتن اثر نیروی گرانش بررسی کردند [۸۰]. نتایج آزمایش آن‌ها نشان می‌دهد که جابجایی دو سیال مخلوط‌نشدنی در محیط متخلخل به سه رژیم انگشتی مویبگی^۲، انگشتی ویسکوز^۳ و رژیم پایدار^۴ دسته‌بندی می‌شود. نمایش این سه رژیم را دیاگرام فازی^۵ گویند که در شکل زیر ارائه شده است. محورهای عمودی و افقی این دیاگرام به ترتیب لگاریتم عدد مویبگی (Ca) و نسبت ویسکوزیته (M) است.

در لایه انتشار گاز پیل سوختی نسبت ویسکوزیته $(M = \mu_2/\mu_1)$ ۱۸ است. بر اساس دیاگرام فازی و مقادیر نسبت ویسکوزیته و عدد مویبگی، رژیم دوفازی در لایه انتشار گاز و کاتالیزور در ناحیه انگشتی مویبگی قرار می‌گیرد. دیاگرام فازی فرضیات ذکر شده را برای جریان دوفازی آب- هوا در لایه انتشار گاز و کاتالیزور تأیید می‌کند (منظور از فرضیات ناچیز بودن نیروی ویسکوز و حاکم بودن نیروی مویبگی است که منجر به الگوی جابجایی انگشتی مویبگی می‌شود).

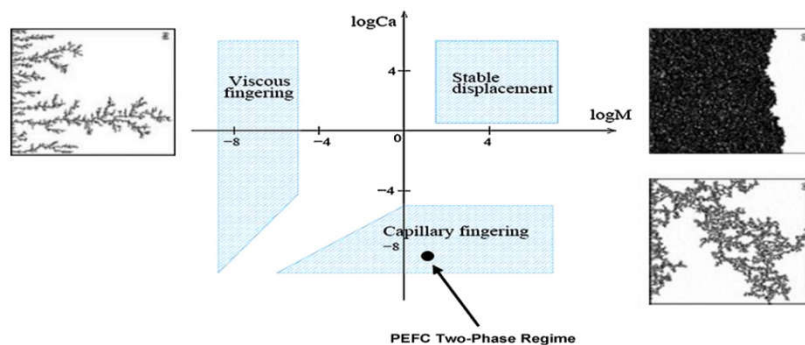
¹Lenormand et al.

²Capillary fingering zone

³Viscous fingering

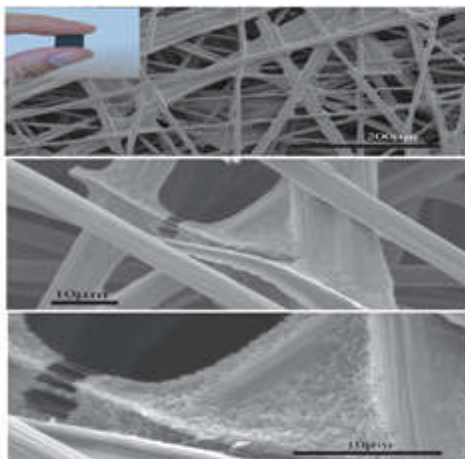
⁴Stable displacement

⁵Phase diagram



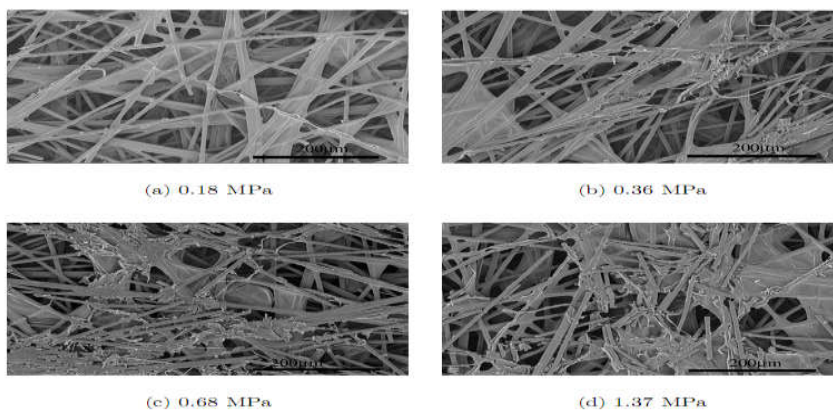
۲-۲۷: الگوی جابجایی سیال [۱۰۶ و ۱۰۷].

در رژیم انگشتی ویسکوز که در نسبت ویسکوزیته‌های کم قابل مشاهده است، نیروی ویسکوزیته سیال مقیم (ساکن) حاکم است و نیروی موینگی و افت فشار در سیال جابجا کننده قابل صرف نظر کردن هستند. در رژیم جابجایی پایدار، M و Ca هر دو مقادیر بالایی دارند بنابراین نیروی اصلی ویسکوزیته سیال جابجا کننده است و اثرات موینگی در سیال مقیم (ساکن) قابل صرف نظر کردن است. به‌طور کلی اثر نیروی گرانش در سیستم پیل سوختی ناچیز است (در لایه کاتالیزور و لایه انتشار گاز) [۶۷]. همچنین بر اساس دیاگرام فازی می‌توان گفت که برای مدل‌سازی جریان دو فاز هوا-آب در لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور پیل سوختی غشای مبادله پروتون اثرات وابستگی به نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته (در حالتی که عدد موینگی به‌طور قابل توجهی کم باشد) قابل صرف نظر کردن است. برای ساخت لایه انتشار گاز از فیبرهای کربن استفاده می‌شود که به صورت تصادفی در محیط قرار می‌گیرند. همان‌طوری که بیان شد کار این لایه حذف آب مایع است و از آنجایی که سطح آب‌گریز به حذف آب مایع کمک می‌کند، بنابراین بعد از ساخت این لایه به آن تفلون اضافه می‌کنند تا آب‌گریز شود. شکل زیر این لایه را در مقیاس‌های مختلف نشان می‌دهد:



۲-۲۸: نمایش لایه انتشار گاز در مقیاس‌های مختلف [۱۰۸].

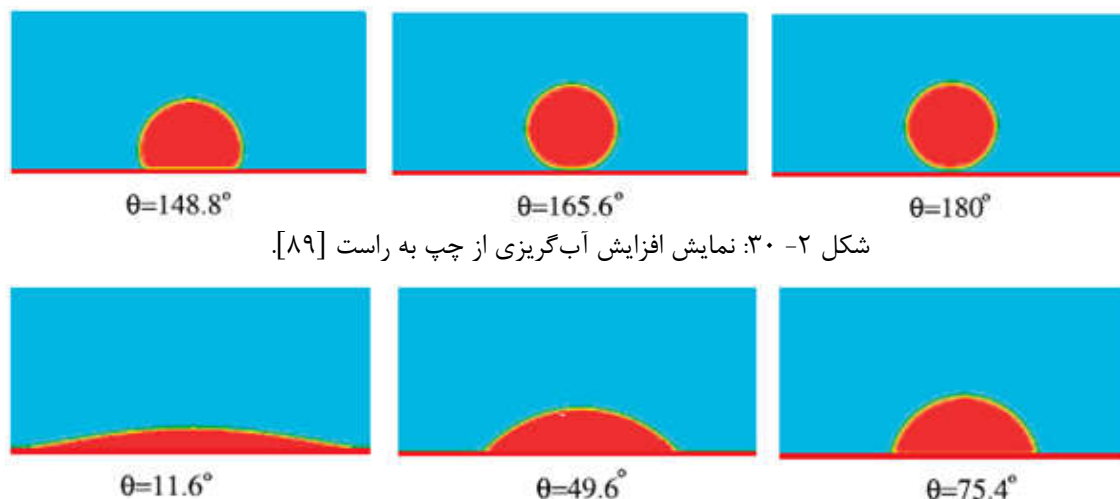
پس از ساخت لایه انتشار گاز، برای جلوگیری از نشستی قطعات مختلف پیل سوختی را با فشار به هم وصل می‌کنند که این فشار باعث ایجاد خسارت در لایه انتشار گاز می‌شود. هر چه فشار بیشتر باشد خسارت بیشتری وارد می‌شود که این خسارات شامل شکستگی و جدا شدن روکش تفلون برخی از فیبرها است. وقتی فیبری از کربن روکش خود را از دست دهد آب‌دوست می‌شود بنابراین در اثر این فشار لایه انتشار گاز به‌طور هم‌زمان شامل فیبرهای کربن آب‌دوست و آب‌گریز است. در شکل ۲-۲۹ خسارت وارد شده با اعمال فشار را می‌توان مشاهده نمود.



۲-۲۹: نمایش لایه انتشار گاز با اعمال فشارهای مختلف [۱۰۸].

در این رساله پس از مدل کردن جریان دوفازی و موانع جامد حضور هم‌زمان فیبرهای کربنی آب‌گریز و آب‌دوست را بررسی می‌شود.

هاوو و چن^۱ در سال ۲۰۱۰ به این نتیجه رسیدند که اثر استفاده همزمان فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز، از افزایش آب‌گریزی هم مفیدتر است ولی این تکنیک برای حذف آب مایع به‌طور جامع هنوز مورد مطالعه قرار نگرفته است و از موضوعات مهم و قابل‌بررسی در لایه انتشار گاز است. از نوآوری‌های این رساله بررسی اثر استفاده همزمان فیبرهای آب‌گریز و آب‌دوست (شکل ۲-۳۰ و ۲-۳۱) و معرفی الگوی مناسب برای ترکیب این دو نوع فیبر برای حذف بهتر آب مایع است. در مرحله بعد، اثر حضور فیبرهای آب‌دوست در نزدیکی محل خروج آب مایع، نواحی وسط و نزدیک مرز لایه انتشار گاز-کاتالیزور روی حذف آب مایع بررسی می‌شود. همچنین در حالت استفاده همزمان از فیبرهای کربنی آب‌گریز و آب‌دوست، افزایش درجه آب‌گریزی و تأثیر آن بر حذف آب مایع مورد مطالعه قرار می‌گیرد.



شکل ۲-۳۰: نمایش افزایش آب‌گریزی از چپ به راست [۸۹].

شکل ۲-۳۱: نمایش افزایش آب‌دوستی از راست به چپ [۸۹].

به دلیل پارامترهای زیادی که در مسئله وجود دارد (تعداد فیبرهای کربن، شکل فیبرهای کربن، محل قرارگیری آن‌ها، زاویه خیسی، نحوه ترکیب آب‌گریز و آب‌دوست، ضریب تخلخل و چیدمان آن‌ها و ...) رسیدن به الگوی مناسب بسیار سخت است به همین دلیل در این رساله چندین الگو مورد بررسی قرار گرفته و حالت مناسب از بین آن‌ها انتخاب شد. فرضیات مورد استفاده در این رساله به صورت زیر است:

¹ Hao and Cheng

برای ایجاد تخلخل از فیبرهای دایره‌ای شکل استفاده شده که نفوذناپذیرند. مسئله به صورت هم‌دما فرض شده و اثر عبور جریان الکتریکی بر میدان سرعت در نظر گرفته نشده است. همچنین بزرگی رتبه اعداد بدون بعد بر اساس مقادیر بیان شده در روابط ۱-۲ تا ۴-۲ است.

معادلات حاکم شامل معادلات پیوستگی (۵-۲) و مومنوم (۶-۲) است که به صورت زیر بیان می‌شوند [۱۰۹]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(C_k \rho_k) + \nabla \cdot (C_k \rho_k \vec{u}_k) = 0 \quad (۵-۲)$$

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \vec{F} \quad (۶-۲)$$

که در رابطه بالا اندیس k نشان‌دهنده تعداد فازها و C_k کسر حجمی سیال k ام است که در خارج سیال k ام برابر صفر، در داخل سیال k ام برابر یک و در مرز مشترک دو فاز بین صفر و یک است و در هر نقطه، رابطه $\sum_{k=1} C_k = 1$ برقرار است [۱۰۹]. ρ, μ متوسط حجمی چگالی و ویسکوزیته دینامیکی هستند که به صورت زیر بیان می‌شوند [۱۰۹]:

$$\rho = \rho_1 + C_2(\rho_2 - \rho_1) \quad (۷-۲)$$

$$\mu = \mu_1 + C_2(\mu_2 - \mu_1) \quad (۸-۲)$$

که اندیس ۱ و ۲ نشان‌دهنده دو فاز است. در رابطه مومنوم F (عبارت چشمه) مربوط به کشش سطحی است و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰۹]:

$$\vec{F} = \sigma K_k \frac{\rho \nabla C_k}{0.5(\rho_2 + \rho_1)} \quad (۹-۲)$$

$$K_k = \nabla \cdot \left(\frac{n}{|n|} \right), n = \nabla C_k \quad (۱۰-۲)$$

که k_k از گرادیان محلی در جهت عمود بر سطح مشترک محاسبه می‌شود و n گرادیان کسر حجمی سیال k ام است.

البته ذکر شود که در این مطالعه، مجموع معادلات بالا به روش شبکه بولتزمن حل شده و در فصل -
های بعد به تفصیل شرح داده می‌شوند.

فصل سوم:

شبکه بولتزمان و اعتبارسنجی آن

در این فصل روش شبکه بولتزمن، انواع مدل‌های آن، مزایا و معایب هر مدل، معادلات حاکم به شکل بولتزمن، معادلات حالت و نحوه شبیه‌سازی به کمک این روش شرح داده می‌شود. از آنجایی که نتایج شبیه‌سازی جریان آب در لایه انتشار گاز به صورت کمی قابل اعتبارسنجی نیست بنابراین پیش از شروع شبیه‌سازی جهت اعتبارسنجی و نشان دادن درستی برنامه مورد استفاده، هفت آزمون مختلف انجام شده و نتایج آن‌ها با نتایج روابط تجربی و تحلیلی مقایسه شده است. این هفت آزمون به ترتیب آزمون حباب^۱، قطره ساکن^۲، جابه‌جایی قطره مخلوط‌نشده در اثر تغییر زاویه در کانال دوبعدی، بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط‌نشده بین دو صفحه، محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی در جریان دوفازی، شبیه‌سازی جریان سه سیال مخلوط‌نشده در کانال و شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در فرآیند جابه‌جایی دو سیال مخلوط‌نشده در کانال دوبعدی هستند. در این رساله از مدل شان و چن^۳ شبکه بولتزمن استفاده شده است که در این مدل کشش سطح و زاویه خیزی به‌طور مستقل تعیین نمی‌شوند بلکه محاسبه آن‌ها توسط آزمون‌های حباب و قطره ساکن صورت می‌گیرد. بنابراین به کارگیری این دو آزمون برای هر شبیه‌سازی الزامی است اما پنج آزمون دیگر فقط جهت اعتبارسنجی استفاده می‌شوند.

۳-۱ مقدمه‌ای بر شبکه بولتزمن

همان‌طوری که پیش‌تر ذکر شد یکی از روش‌های مقیاس حفره، روش شبکه بولتزمن است که انتقال جریان و جرم را بر اساس ساختار واقعی لایه انتشار گاز شبیه‌سازی می‌کند [۷۸]. در طول دو دهه اخیر این روش به عنوان روش عددی قدرتمند برای بسیاری از پدیده‌های انتقال مورد استفاده قرار گرفته [۷۸] و به دلیل پایداری عددی عالی و تطبیق‌پذیری ساختاری، ابزاری قوی برای شبیه‌سازی جریان سیال به‌ویژه در هندسه‌های پیچیده بوده است [۷۹]. در این روش، جریان به صورت مجموعه‌ای از ذرات ساختگی در نظر گرفته شده که روی گره‌های ساختار شبکه قرار دارند و بین آن‌ها

¹ Bubble test

² Static droplet test

³ Original Shan–Chen (SC)

برخوردهایی بر اساس تابع توزیع سرعت انجام می‌شود [۸۰]. به دلیل ماهیت سینتیک آن در کاربردهای شامل مرزهای پیچیده، جریان‌های چند فاز، جریان‌های چند مؤلفه و جریان در محیط متخلخل مورد استفاده قرار می‌گیرد [۸۰]. این روش می‌تواند شبیه‌سازی‌های دینامیکی انتقال آب در لایه انتشار گاز را با ساختار واقعی تر و امکان طراحی حفره‌ها به صورت دقیق تر انجام دهد [۶۱]. از مزیت‌های روش شبکه بولتزمن در مقایسه با روش‌های رایج برای جریان چند فاز، این است که مرز مشترک بین دو فاز را دنبال نمی‌کند و حتی مرزهای تیز بین دو فاز را نگه‌داشته و نمایش می‌دهد [۸۸].

۲-۳ بررسی مدل‌های ارائه شده شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان دوفازی

در این قسمت مدل‌های ارائه شده روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی جریان دوفازی در محیط متخلخل بررسی شده و نقاط ضعف و قوت آن‌ها بیان می‌شود:

مدل اول توسط گانستن سن و همکارانش^۱ [۱۱۰] در سال ۱۹۹۱ بر اساس مدل شبکه گاز روسمن-کلر^۲ ارائه شد [۱۱۱]. این روش به R-K معروف است و از روش‌های محبوب دوفازی است [۹۳]. مزیت این مدل این است که کشش سطحی، نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته می‌توانند به‌طور مستقل انتخاب شوند و تغییر کنند [۱۱۲]. چون این روش در نسبت چگالی‌های بالا ناپایدار است، بنابراین برای نسبت چگالی‌های کمتر از ۱۰ استفاده می‌شود [۸۹]. هانگ و همکارانش^۳ [۹۳] این روش را بررسی و نتایج آن را با نتایج تحلیلی مقایسه کردند و به این نتیجه رسیدند که اگر نسبت چگالی دو فاز یک نباشد این نتایج تطابق خوبی ندارند و هر چه نسبت چگالی بزرگ‌تر شود این اختلاف نیز بیشتر می‌شود.

مدل دوم در سال ۱۹۹۳ توسط شان و چن [۱۱۳] ارائه شد و به مدل S-C معروف است که این نیز مدل‌های محبوب دوفازی است [۹۳]. این مدل مشابه R-k محدود به نسبت چگالی کمتر از ۱۰ است

¹ Gunstensen et al.

² Rothman-Keller (R-K)

³ Huang et al.

[۸۹]. در این روش کشش سطح و نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته نمی‌توانند به‌طور مستقل انتخاب شوند و تغییر کنند [۱۱۲].

مدل سوم مدل اصلی انرژی آزاد^۱ است که با FE نمایش داده می‌شود و توسط سويفت و همکارانش^۲ در سال ۱۹۹۵ ارائه شد [۱۱۴]. از عیب‌های این روش این است که نمی‌تواند فازها را (یا اجزاء سیال) با ویسکوزیته‌های مختلف مدل کند [۱۱۵] و محدود به نسبت‌های چگالی کمتر از ۱۰ است [۸۹]. مدل چهارم توسط هی و همکارانش^۳ در سال ۱۹۹۹ ارائه شد [۱۱۶]. از معایب این مدل می‌توان به محدود بودن به نسبت چگالی کمتر از ۱۰، محاسبه کشش سطحی به روش اختلاف محدود و استفاده از روش ویژه برای مدل کردن مرز جامد اشاره کرد [۸۹].

مدل پنجم گسترش مدل انرژی آزاد (FE) است که توسط اینامورو و همکارانش^۴ در سال ۲۰۰۴ ارائه شد که هر دو عیب مدل FE در آن برطرف شده است یعنی برای نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته بالا قابل‌استفاده است [۸۸]. تنها عیب این مدل نیاز به حل معادله پواسون^۵ و استفاده از دو تابع توزیع ذرات^۶ (PDF) است که از سادگی مرسوم روش شبکه بولتزمن می‌کاهد [۹۳ و ۸۹].

مدل ششم توسط لی و لین^۷ [۱۱۷] در سال ۲۰۰۵ و بر اساس روش هی و همکارانش [۱۱۶] ارائه شد و توانست یکی از معایب آن را (محدود بودن به نسبت‌های چگالی کمتر از ۱۰) برطرف کند. از عیب‌های این مدل استفاده از دو تابع توزیع ذرات است که منجر به پیچیده‌تر شدن محاسبات می‌شود [۸۹].

مدل هفتم توسط زنگ و همکارانش^۸ [۱۱۸] در سال ۲۰۰۶ و بر اساس روش FE ارائه شد که توانست یکی از عیب‌های روش FE را که برابری ویسکوزیته‌های فازها (یا اجزاء سیال) بود برطرف کند.

¹ Original free energy

² Swift et al.

³ He et al.

⁴ Inamuro et al.

⁵ Poisson equation

⁶ Particle distribution functions

⁷ Lee and Lin

⁸ Zheng et al.

این مدل ساده‌تر از مدل ارائه شده توسط اینامورو و همکارانش است [۹۳]. آن‌ها ادعا کرده‌اند که مدلشان برای جریان‌های مخلوط نشدنی با نسبت‌های چگالی بالا مناسب است ولی فخری و رحیمیان^۱ [۱۱۹] اخیراً به این نتیجه رسیده‌اند که این موضوع نادرست بوده و مدل زنگ و همکارانش فقط برای فازها (یا اجزاء) با چگالی‌های نزدیک به هم مناسب است [۹۳].

مدل هشتم مدل شان و چن دو جزء و چند فاز^۲ است که توسط پن و همکارانش^۳ [۱۲۰] و لی و همکارانش^۴ [۱۲۱] ارائه شد که نسبت چگالی و ویسکوزیته دو فاز باید نزدیک به یک باشد تا ناپایداری عددی رخ ندهد [۹۳ و ۸۹]. در این مدل مخلوط فازها شامل دو جزء است که برای هر کدام از یک تابع توزیع و یک سرعت ماکروسکوپی^۵ (سرعت تعادلی^۶) استفاده می‌شود که سرعت ماکروسکوپی با u یا u^{eq} نمایش داده می‌شود.

مدل نهم توسط یانگ و اسچفر^۷ [۱۲۲] در سال ۲۰۰۶ بیان شد. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که می‌توان به جای استفاده از دو تابع توزیع ذرات، از یک تابع توزیع استفاده کرد (در روش اینامورو و همکارانش [۸۸] و همچنین روش لی و لین [۱۱۷] از دو تابع توزیع ذرات استفاده شده است) که با این کار به یک معادله حالت^۸ (EOS) نیاز است. با قرار دادن این معادله حالت در روش شان و چن (S-C) [۱۱۳]، مدل شان و چن اصلاح شده به صورت چند فاز^۹ [۱۲۲] حاصل می‌شود که برای جریان دوفازی در نسبت چگالی بالا قابل استفاده است [۸۹]. در این مدل کشش سطح و نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته نمی‌توانند به‌طور مستقل انتخاب شوند و تغییر کنند [۹۳]. این مدل به علت سادگی اعمال شرط مرزی در ساختارهای متخلخل پیچیده و قابل استفاده بودن در حالت‌هایی

¹ Fakhari and Rahimian

² SC two-component multiphase

³ Pan et al.

⁴ Li et al.

⁵ Macroscopic velocity

⁶ Equilibrium velocity

⁷ Yuan and Schaefer

⁸ Equations of state

⁹ Single-component multiphase S-C

که فازهای سیال دارای اختلاف چگالی و ویسکوزیته‌اند به‌طور گسترده مورد استفاده قرار می‌گیرد [۸۰].

از معادلات حالت پیشنهاد شده برای استفاده در مدل‌های شبکه بولتزمن می‌توان به معادلات حالت شان و چن [۱۱۳]، یانگ و ایچفر [۱۲۲]، وندر والس^۱، ردلیچ-کونگ^۲، ردلیچ-کونگ سواو^۳، پنگ-رابینسون^۴ و کارنهان-استرلینگ^۵ اشاره کرد [۸۹]. لازم به ذکر است که در مدل نهم کشش سطح از روش اختلاف محدود محاسبه نمی‌شود بلکه برای هر معادله حالت پیشنهاد شده از روابط تحلیلی به دست می‌آید [۱۲۳ و ۱۲۴].

۳-۳ روش شبکه بولتزمن برای جریان‌های تک فازی

روش شبکه بولتزمن از معادله بولتزمن نتیجه شده و توصیفی از تابع توزیع ذره بر حسب زمان و مکان است $(f(\vec{x}, \vec{\xi}, t))$. به دلیل پیچیدگی حل انتگرال معادله برخورد و زیاد بودن توزیع‌ها، حل مستقیم معادله بولتزمن برای روش‌های تحلیلی و عددی کاری بسیار سخت است [۱۲۵]. در سال ۱۹۵۴، باتناگار^۶، گروس^۷ و کروک^۸ به بیان ساده‌ای از معادله اصلی بولتزمن پرداختند که به معادله بولتزمن BGK معروف است [۱۲۶] و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۲۷]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = -\frac{1}{\lambda} [f - f^0] \quad (۱-۳)$$

برای محاسبه f به روش عددی، معادله بولتزمن BGK با استفاده از تعداد محدودی سرعت گسسته می‌شود $(\vec{\xi}_\alpha)$.

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \xi_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\lambda} [f_\alpha - f_\alpha^{(eq)}] \quad (۲-۳)$$

¹ Van der Waals

² Redlich-Kwong

³ Redlich-Kwong Soave

⁴ Peng-Robinson

⁵ Carnahan-Starling

⁶ Bhatnagar

⁷ Gross

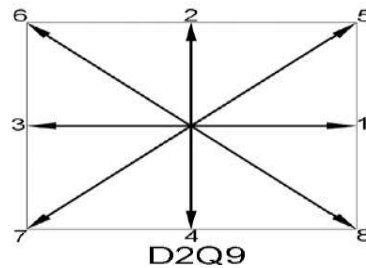
⁸ Krook

که $f_\alpha(\vec{x}, t) \equiv f(\vec{x}, \xi_\alpha, t)$ و $f_\alpha^{(eq)}(\vec{x}, t) \equiv f^{(0)}(\vec{x}, \xi_\alpha, t)$ تابع توزیع ذرات و تابع توزیع تعادلی سرعت گسسته شده α ام (ξ_α) هستند. تابع توزیع تعادلی می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$f_\alpha^{eq} = \rho w_\alpha \left[1 + \frac{3}{c^2} \vec{e}_\alpha \vec{u} + \frac{3}{2c^4} (\vec{e}_\alpha \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \vec{u} \vec{u} \right] \quad (3-3)$$

که w_α ضریب وزنی، $c = \Delta x / \Delta t$ سرعت شبکه، \vec{e}_α سرعت گسسته شده و u و ρ سرعت و چگالی ماکروسکوپی است [۱۲۸].

بعد از گسسته‌سازی معادله تابع توزیع ذرات، در هر مکان تعداد ذرات موجود برای یک مسئله دوبعدی ۹ در نظر گرفته می‌شود. به همین دلیل به مدل D_2Q_9 معروف است که D نشان‌دهنده تعداد ابعاد و Q نشان‌دهنده تعداد جهت‌های سرعت است. نمایش این مدل به صورت زیر است [۱۲۷]:



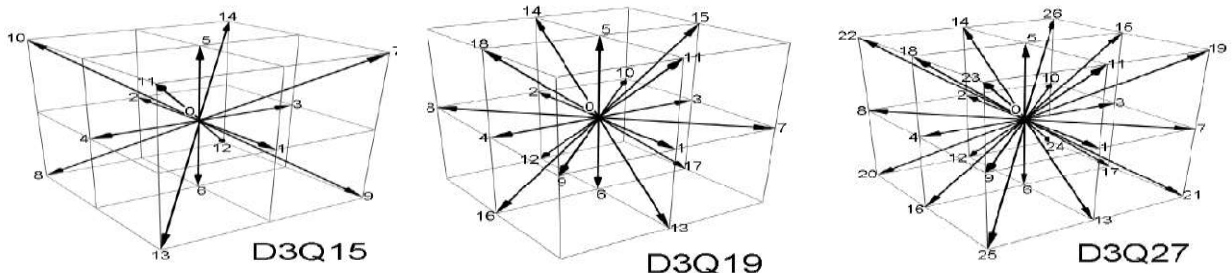
شکل ۳-۱: نمایش مدل D_2Q_9 .

ضرایب وزنی و سرعت‌های گسسته شده برای مدل D_2Q_9 به صورت زیر است [۱۲۷]:

$$w_\alpha = \begin{cases} 4/9 & \alpha = 0 \\ 1/9 & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad \vec{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0) & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0)c, (0, \pm 1)c & \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ (\pm 1, \pm 1)c & \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases} \quad (4-3)$$

برای مدل‌های سه‌بعدی چندین مدل مکعبی وجود دارد که شامل D_3Q_{15} , D_3Q_{19} و D_3Q_{27} است که

نمایش آن‌ها به صورت زیر است [۱۲۷]:



شکل ۳-۲: نمایش مدل‌های سه‌بعدی.

برای یک مدل شبکه بولتزمن سه بعدی که از مدل D_3Q_{19} پیروی می کند، ضرایب وزنی و سرعت های

گسسته شده به صورت زیر است [۱۲۷]:

$$w_\alpha = \begin{cases} 1/3 & \alpha = 0 \\ 1/18 & \alpha = 1, \dots, 6 \\ 1/36 & \alpha = 7, \dots, 18 \end{cases} \quad \vec{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0, 0) & \alpha = 0 \\ (\pm 1, 0, 0)c, (0, \pm 1, 0)c, (0, 0, \pm 1)c & \alpha = 1, \dots, 6 \\ (\pm 1, \pm 1, 0)c, (\pm 1, 0, \pm 1)c, (0, \pm 1, \pm 1)c & \alpha = 7, \dots, 18 \end{cases} \quad (5-3)$$

برای تمامی این مدل ها چگالی و سرعت به صورت زیر تعریف می شود [۱۲۷]:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^b f_\alpha, \quad \vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha=0}^b f_\alpha \vec{e}_\alpha \quad (6-3)$$

که b نشان دهنده تعداد ذرات موجود در هر مکان مشخص است. برای حل معادله ۲ و محاسبه

$f_\alpha(\vec{x}, t)$ به گسسته سازی بیشتر در فضای مکان و زمان نیاز است که شکل کامل گسسته سازی

معادله بولتزمن BGK به صورت زیر است [۱۲۷]:

$$f_\alpha(\vec{x} + \vec{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = f_\alpha(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(\vec{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\vec{x}, t)] \quad (7-3)$$

در رابطه ۳-۷، τ زمان آسایش بدون بعد است. برای حل معادله بالا دو مرحله زیر انجام می شود

[۱۲۹]:

- مرحله برخورد^۱: $\tilde{f}_\alpha(\vec{x}, t) = f_\alpha(\vec{x}, t) - (1/\tau) \times [f_\alpha(\vec{x}, t) - f_\alpha^{eq}(\vec{x}, t)]$

- مرحله جاری شدن^۲: $f_\alpha(\vec{x} + \vec{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t) = \tilde{f}_\alpha(\vec{x}, t)$

پس مراحل حل یک مسئله به روش شبکه بولتزمن به این صورت است که:

۱- اعمال شرایط اولیه

۲- مرحله برخورد

۳- مرحله جاری شدن

۴- اعمال شرایط مرزی و محاسبه پارامترهای ماکروسکوپی و خطا

¹ Collision

² Streaming

۵- بررسی شرط توقف

۶- مقایسه خطا (اگر خطا به مقدار مطلوب نرسیده باشد توابع توزیع جدید محاسبه شده از مرحله ۳ در مرحله ۲ قرار گرفته و دوباره مراحل بالا تکرار می‌شود. هر بار انجام مراحل بالا یک مرحله زمانی محسوب می‌شود)

۳-۴ روش شبکه بولتزمن برای جریان‌های چند فازی با یک گونه

معادله حالت بیان‌کننده رابطه بین دما، فشار و حجم (یا چگالی) سیال می‌باشد که ساده‌ترین آن مربوط به گاز ایده‌آل است [۱۳۰]:

$$p = \rho RT \quad (۸-۳)$$

در رابطه بالا R ثابت گازها^۱ است. اگر دما ثابت نگه داشته شود رابطه بین فشار و چگالی خطی خواهد بود. توجه شود که غیر ایده‌آل بودن گاز در صورتی رخ می‌دهد که حجم مولکول‌ها یا اثر متقابل بین مولکول‌های گاز ناچیز نباشد [۱۳۰].

معادله حالت برای روش شبکه بولتزمن به صورت $p = \rho RT$ است [۱۳۱] که $RT = C_s^2$ و C_s سرعت صوت^۲ است [۱۳۲] که در مدل‌های D2Q9 و D3Q19 به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳۳]:

$$C_s^2 = \Delta x^2 / (3\Delta t^2) \quad (۹-۳)$$

نسبت $\Delta x / \Delta t$ را سرعت شبکه گویند که Δx فاصله شبکه و Δt گام زمانی است. در شبیه‌سازی به روش شبکه بولتزمن معمولاً فاصله شبکه و گام زمانی برابر یک تعریف می‌شود پس در مدل‌های D2Q9 و D3Q19، $C_s^2 = 1/3$ است [۱۳۳]. همان‌طوری که گفته شد جدایی فازها و گونه‌های مختلف در اثر تقابل زیاد بین مولکول‌های سیال ایجاد می‌شود [۱۳۴] که برای اعمال این اثر تقابل در شبکه بولتزمن روش‌های مختلفی وجود دارد که در جدول ۳-۱ به تفصیل بیان شده است. در مدل‌های شان و چن چند فازی با یک گونه، نیرو در هر گره به همه پارامترهای گره‌های همسایه وابسته است و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳۵]:

¹ Gas constant

² Speed of the sound

$$F = G\psi \sum_i \psi_i e_i w_i \quad (10-3)$$

برای مدل D2Q9 رابطه بالا با استفاده از بسط تیلور به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۳۵]:

$$\begin{aligned} F = G\psi(x, y) [e_1 w_1 \psi(x + c\Delta t, y) + e_2 w_2 \psi(x, y + c\Delta t) + \\ e_3 w_3 \psi(x - c\Delta t, y) + e_4 w_4 \psi(x, y - c\Delta t) + e_5 w_5 \psi(x + c\Delta t, y + c\Delta t) \\ + e_6 w_6 \psi(x - c\Delta t, y + c\Delta t) + e_7 w_7 \psi(x - c\Delta t, y - c\Delta t) + \\ e_8 w_8 \psi(x + c\Delta t, y - c\Delta t)] = G\psi [(1/3)\nabla\psi + (1/18)\nabla\Delta\psi] \end{aligned} \quad (11-3)$$

که بعد از جایگذاری و عملیات ریاضی به صورت زیر ساده می‌شود:

$$P = \rho C_s^2 + \frac{G}{6}\psi^2 + \frac{G}{36}|\nabla\psi|^2 + \frac{G}{18}\psi\Delta\psi \quad (12-3)$$

در رابطه بالا جملات سوم و چهارم در مقایسه با دو جمله اول قابل صرف نظر کردن است بنابراین [۱۳۵]:

$$P = \rho C_s^2 + \frac{G}{6}\psi^2 \quad (13-3)$$

در روش شبکه بولتزمن فشار در هر نقطه وابسته به چگالی آن نقطه است که بیان این وابستگی توسط معادله حالت صورت می‌گیرد [۱۳۲]. در غیاب هرگونه اثر تقابل، سیال رفتاری همانند یک گاز ایده‌آل از خود نشان می‌دهد و معادله حالت به صورت $p = \rho C_s^2$ است [۱۳۲]. در جریان‌های چندفازی جدا شدن فازها در اثر تقابل زیاد بین مولکول‌های سیال ایجاد می‌شود بنابراین نمی‌توان سیال را مانند گاز ایده‌آل در نظر گرفت که منجر به اضافه شدن یک عبارت غیرایده‌آل به معادله حالت می‌شود [۱۳۵]:

$$p = \rho C_s^2 \longrightarrow P = \rho C_s^2 + \frac{G}{6}\psi^2 \quad (14-3)$$

در برخی مراجع رابطه ۱۴-۳ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$p = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g\psi^2 \quad (15-3)$$

که c_0 مربوط به ساختار شبکه بوده و در مدل‌های D2Q9 و D3Q19 برابر ۶ است [۱۳۳]. نحوه محاسبه c_0 در ساختار D2Q9 به این صورت است که در این ساختار چهار محل در فاصله یک (در

واحد شبکه بولتزمن) و چهار محل دیگر در فاصله $\sqrt{2}$ (در واحد شبکه بولتزمن) نسبت به مرکز وجود دارد. پس مقدار c_0 به صورت $c_0 = (4 \times 1^2)/2 + (4 \times \sqrt{2}^2)/2 = 6$ محاسبه می‌شود [۱۳۶]. با برابر قرار دادن معادلات ۱۴-۳ و ۱۵-۳ رابطه ۱۶-۳ به صورت زیر بدست می‌آید [۱۳۶]:

$$P = \rho C_s^2 + \frac{G}{6} \psi^2$$

$$p = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g \psi^2 \quad (۱۶-۳)$$

$$\rho C_s^2 + \frac{G}{6} \psi^2 = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g \psi^2 \xrightarrow{C_s^2 = \frac{1}{3}}$$

$$\frac{G}{6} = \frac{c_0}{2} g \xrightarrow{c_0=6} \frac{G}{6} = \frac{6}{2} g \longrightarrow G = 18g$$

در این قسمت به بررسی معادلات حالت برای گازهای غیر ایده‌آل پرداخته می‌شود:

۱- معادله حالت شان و چن (S-C)

این معادله حالت به صورت زیر است [۱۳۳]:

$$p = \frac{\rho}{3} + \frac{c_0}{2} g \rho_0^2 [1 - \exp(-\rho / \rho_0)]^2 \quad (۱۷-۳)$$

رابطه ۱۷-۳ در ابتدا توسط شان و چن ارائه و مقدار ۱ برای ρ_0 در نظر گرفته شد [۱۳۳]. اگر از رابطه بالا مشتق اول و دوم نسبت به چگالی گرفته و برابر صفر قرار داده شود نقطه بحرانی این معادله حالت به دست می‌آید [۱۳۳]:

$$\frac{dp}{d\rho} = 0 \rightarrow \frac{1}{3} + C_0 g \rho_0 [1 - \exp(-\rho / \rho_0)] \exp(-\rho / \rho_0) = 0 \quad (۱۸-۳)$$

$$\frac{d^2 p}{d\rho^2} = 0 \rightarrow C_0 g [\exp(-\rho / \rho_0)]^2 - C_0 g [1 - \exp(-\rho / \rho_0)] \exp(-\rho / \rho_0) = 0 \quad (۱۹-۳)$$

از حل معادلات ۱۸-۳ و ۱۹-۳ مقادیر زیر بدست می‌آید:

$$\rho_{crit} = \rho_0 \ln 2, g_{crit} = -2/9 \rho_0 \quad (۲۰-۳)$$

که اندیس crit مربوط به شرایط نقطه بحرانی است. برخلاف دیگر معادلات حالت، پارامتر دما در معادله حالت شان و چن وجود ندارد و دما را می‌توان به صورت $T = -1/g$ تعریف کرد. با جایگذاری

معادله g_{crit} در این رابطه می‌توان دمای بحرانی را نیز تعیین کرد که برابر است با $T_{crit} = 4.5\rho_0$ [۱۳۳]. طبق تعریف نقطه بحرانی برای دماهای کمتر از دمای بحرانی یا برای $g < g_{crit}$ جدایی فاز به وجود می‌آید. توجه شود که این معادله حالت به صورت $p = (\rho/3) + (G/6) \times \rho_0^2 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)]^2$ بیان می‌شود که در این صورت $\rho_{crit} = \rho_0 \ln 2, G_{crit} = -4/\rho_0$ [۱۳۵].

۲- بیان دیگر از معادله حالت شان و چن (S-C)

یکی دیگر از معادلات ارائه شده توسط شان و چن به صورت $p = (\rho/3) + (G/6) \times [\psi_0 \exp(-\rho_0/\rho)]^2$ که در این رابطه ρ_0, ψ_0 ثابت‌های دلخواهی هستند. اگر از رابطه بالا مشتق اول و دوم نسبت به چگالی گرفته و برابر صفر قرار گیرد نقطه بحرانی این معادله به دست می‌آید [۱۳۳]:

$$\frac{dp}{d\rho} = 0 \longrightarrow \frac{d}{d\rho} \left[\frac{\rho}{3} + \frac{G}{6} (\psi_0 \exp(-\rho_0/\rho))^2 \right] = 0 \quad (۲۱-۳)$$

$$\frac{d^2p}{d\rho^2} = 0 \longrightarrow \frac{d^2}{d\rho^2} \left[\frac{\rho}{3} + \frac{G}{6} (\psi_0 \exp(-\rho_0/\rho))^2 \right] = 0 \quad (۲۲-۳)$$

از حل این دو معادله داریم $g_{crit} = (-\rho_0/\psi_0^2) e^2$ که با انتخاب مقادیر $\rho_{crit} = \rho_0, \psi_0 = 4, \rho_0 = 200$ مقادیر بحرانی برای این معادله حالت به صورت $\rho_{crit} = 200, g_{crit} = -92.4$ [۱۳۶]. پس برای مقادیر $g < g_{crit}$ جدایی فاز به وجود می‌آید.

۳- معادله حالت وندروالس^۱ (vdW)

این معادله حالت به صورت‌های زیر بیان می‌شود [۱۳۳]:

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (۲۳-۳)$$

$$\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V - b) = RT \quad (۲۴-۳)$$

^۱ Van der Waals (vdW)

این معادله که معروفترین معادله حالت برای گازهای واقعی است در سال ۱۸۷۳ ارائه شد [۱۳۳]. در این رابطه a پارامتر جذب است که برای در نظر گرفتن نیروی کشش بین مولکول‌ها به کار می‌رود. همچنین b پارامتر دفع است و به دلیل غیرقابل صرف‌نظر بودن حجم مولکول‌ها به کار می‌رود [۱۳۳]. حال پارامترهای بحرانی این معادله حالت با استفاده از روابط ۲۵-۳ تا ۲۷-۳ تعیین می‌شود [۱۳۷]:

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - a\rho^2 \longrightarrow p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2} \frac{\times(V-b)V^2}{P} \longrightarrow$$

$$V^3 - bV^2 - \frac{RTV^2}{P} + \frac{aV}{P} - \frac{ab}{P} = 0 \quad (25-3)$$

$$\left. \frac{\partial P}{\partial V} \right|_T = 0 \longrightarrow 3V^2P^2 - 2bVP^2 - 2VPRT + aP = 0 \quad (26-3)$$

$$\left. \frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right|_T = 0 \longrightarrow 6VP^2 - 2bP^2 - 2PRT = 0 \quad (27-3)$$

از حل هم‌زمان معادلات ۲۶-۳ و ۲۷-۳ رابطه ۲۸-۳ بدست می‌آید:

$$\frac{a}{P_c} = 3V_c^2 \quad (28-3)$$

با جایگذاری معادله بالا در رابطه ۲۶-۳ خواهیم داشت:

$$b = 3V_c - (RT_c/P_c) \quad (29-3)$$

حال اگر این دو معادله بدست آمده را در رابطه ۲۳-۳ جایگزین کنیم نتیجه می‌شود:

$$(ab/P_c) = V_c^3 \quad (30-3)$$

از حل هم‌زمان سه معادله ایجاد شده مقادیر حجم، دما و فشار نقطه بحرانی تعیین می‌شود [۱۳۷]:

$$V_c = 3b \longrightarrow \rho_c = \frac{1}{3b}, P_c = \frac{a}{27b^2}, T_c = \frac{8a}{27bR} \quad (31-3)$$

ثابت‌های a ، b و R را به صورت دلخواه $a = 9/49$, $b = 2/21$, $R = 1$ انتخاب می‌شود با این مقادیر

می‌توان چگالی و دما را در نقطه بحرانی به صورت $\rho_c = 3.5$, $T_c = 4/7$ تعیین کرد [۱۳۳].

۴-معادله حالت پنگ رابینسون^۱ (P-R)

این معادله حالت به صورت زیر بیان می‌شود [۱۳۳]:

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - \frac{a\rho^2\alpha(T)}{1+2b\rho-b^2\rho^2} \quad (۳۲-۳)$$

$$\alpha(T) = [1 + (0.37464 + 1.54226w - 0.26992w^2)(1 - \sqrt{T/T_c})]^2 \quad (۳۳-۳)$$

T_c دمای بحرانی است و w ضریب خارج از مرکز است که به ساختار مولکولی سیال وابسته است و مقادیر آن در جداول ترمودینامیکی برای سیال‌های مختلف موجود است [۱۳۷]. این معادله حالت چگالی‌های اشباع اکثر نمودارهای مایع-بخار را به صورت دقیق بیان می‌کند [۱۳۷]. برای آب و بخار مقدار ضریب خارج از مرکز 0.3443 است که این مقدار، تطابق بسیار خوبی برای چگالی‌های اشباع آب و بخار با نتایج تجربی ایجاد می‌کند [۱۳۷]. این مدل توانایی روش شبکه بولتزمن برای شبیه‌سازی نسبت چگالی‌های بالا را به‌شدت افزایش می‌دهد [۱۳۴]. ضرایب a و b در این معادله به صورت $a = 0.45724(R^2 T_c^2 / P_c)$, $b = 0.0778(R T_c / P_c)$ تعریف شده و مقادیر a , b و R به صورت $a = 2/49$, $b = 2/21$, $R = 1$ انتخاب می‌شوند [۱۳۳]. این معادله پیچیدگی و دقت بیشتری نسبت به معادله وندروالس دارد به‌ویژه برای آب و آمونیاک [۱۳۳].

۵-معادله حالت ادلیچ کونگ^۲ (R-K)

این معادله حالت به صورت زیر بیان می‌شود [۸۹]:

$$p = \frac{\rho RT}{1-b\rho} - \frac{a\rho^2}{(1+b\rho)\sqrt{T}} \quad (۳۴-۳)$$

در این معادله ضرایب به صورت $a = 1$, $b = 4$, $T_c = 0.0943$ هستند [۸۹].

۶-معادله حالت کارانهان استرلینگ^۳ (C-S)

این معادله حالت به صورت زیر تعریف می‌شود [۸۹]:

^۱ Peng-Robinson (P-R)

^۲ Edlich-Kwong (R-K) EOS

^۳ Carnahan-Starling (C-S) EOS

$$p = \rho RT \frac{1 + \frac{b\rho}{4} + \left(\frac{b\rho}{4}\right)^2 - \left(\frac{b\rho}{4}\right)^3}{\left(1 - \frac{b\rho}{4}\right)^3} - a\rho^2 \quad (35-3)$$

ضرایب این معادله به صورت $a=1, b=4, T_c=0.0943$ است [۸۹]. در شبکه‌های D_2Q_9 و D_3Q_{19} با توجه به ضرایب وزنی بیان شده، نسبت ضرایب وزنی در جهات اصلی به جهات قطری به صورت زیر است [۱۳۸]:

$$D_2Q_9 \longrightarrow \frac{1/9}{1/36} = 4 \qquad D_3Q_{19} \longrightarrow \frac{1/18}{1/36} = 2 \quad (36-3)$$

با توجه به مقادیر بالا ضرایب وزنی جهات اصلی در شبکه‌های D_2Q_9, D_3Q_{19} به ترتیب ۴ و ۲ برابر جهات قطری است. طبق این نکته اثر متقابل بین مولکول‌ها می‌تواند به دو شکل زیر بیان شود [۱۳۹]:

$$D_2Q_9 \rightarrow \begin{cases} \vec{F}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) \sum_i G_i \psi(\vec{x} + C_i \Delta t, t) C_i \rightarrow \begin{cases} G_1 & |x - x'| = 1 \\ G_1/4 & |x - x'| = \sqrt{2} \end{cases} \\ \vec{F}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) G \sum_i w_i \psi(\vec{x} + C_i \Delta t, t) C_i \end{cases} \quad (37-3)$$

$$D_3Q_{19} \rightarrow \begin{cases} \vec{F}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) \sum_i G_i \psi(\vec{x} + C_i \Delta t, t) C_i \rightarrow \begin{cases} G_1 & |x - x'| = 1 \\ G_1/2 & |x - x'| = \sqrt{2} \end{cases} \\ \vec{F}(\vec{x}, t) = \psi(\vec{x}, t) G \sum_i w_i \psi(\vec{x} + C_i \Delta t, t) C_i \end{cases} \quad (38-3)$$

توجه شود که همه معادلات حالت به‌راحتی روی مدل شبکه بولتزمن قابل‌اعمال هستند [۱۲۷] البته روند اعمال معادله شان و چن با دیگر معادلات متفاوت است به همین منظور دو حالت زیر در نظر گرفته می‌شود:

الف- استفاده از معادله حالت شان و چن:

۱. اعمال شرایط اولیه

۲. جایگزینی مقادیر چگالی در رابطه $\psi = \psi_0 \exp(-\rho_0 / \rho)$ یا $\psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho / \rho_0)]$ و محاسبه جرم مؤثر^۱

۳. محاسبه نیروهای اثر متقابل سیال-سیال و سیال-جامد با استفاده از روابط ۳-۳۹ و ۳-۴۰ و در نهایت تعیین نیروی کل از رابطه ۳-۴۱

$$F_{int}(x, t) = -\psi(\vec{x}, t) G \sum_i w_i \psi(\vec{x} + e_i \Delta t, t) e_i \quad (3-39)$$

$$F_{ads}(x, t) = -\psi(\vec{x}, t) G_{ads} \sum_i w_i S(\vec{x} + e_i \Delta t, t) e_i \quad (3-40)$$

$$F_{total} = F_{int}(x, t) + F_{ads}(x, t) \quad (3-41)$$

۴. محاسبه سرعت تغییر یافته^۲ یا تعادلی^۳ [۱۲۷ و ۱۴۰]

$$u^{eq} = u' + \tau F_{total} / \rho, u' = \sum_i f_i e_i / \rho \quad (3-42)$$

۵. تعیین تابع توزیع تعادلی [۱۲۷]

$$f_{\alpha}^{eq} = \rho w_{\alpha} \left[1 + \frac{3}{c^2} \bar{e}_{\alpha} u_{eq} + \frac{3}{2c^4} (\bar{e}_{\alpha} u_{eq})^2 - \frac{3}{2c^2} u_{eq} u_{eq} \right] \quad (3-43)$$

۶. مرحله برخورد

۷. مرحله جاری شدن

۸. اعمال شرایط مرزی و محاسبه پارامترهای ماکروسکوپی و خطا

۹. بررسی شرط توقف

۱۰. اگر خطا به مقدار مطلوب نرسیده باشد توابع توزیع جدید محاسبه شده از مرحله ۷ در مرحله

۲ قرار گرفته و دوباره مراحل بالا تکرار شود. هر بار انجام مراحل بالا یک مرحله زمانی به

حساب می‌آید.

ب- استفاده از بقیه معادلات حالت:

¹ Effective mass

² Shifted velocity

³ Equilibrium velocity

این حالت مشابه حالت الف است با این تفاوت که در مرحله دوم آن ابتدا مقادیر چگالی در معادله حالت جایگزین شده و فشار محاسبه می‌شود سپس از رابطه ۳-۴۴ جرم مؤثر به دست می‌آید [۸۹ و ۱۳۲]:

$$\psi(\rho) = \sqrt{\frac{2(p - c_s^2 \rho)}{c_s^2 G}} \quad (۳-۴۴)$$

۳-۵ روش شبکه بولتزمن برای جریان‌های چند فازی با چند گونه^۱

جریان‌های چند فازی با چند مؤلفه در علوم مهندسی و مسائل مربوط به صنعت و طبیعت به‌طور فراگیر وجود دارد [۱۲۷]. از آنجایی که معادلات شبکه بولتزمن^۲ (LBE) بر اساس معادلات سینتیک میکروسکوپی و مزوسکوپی هستند، اغلب مزیت‌های زیادی برای مسائل مربوط به جریان‌های چند فازی با چند مؤلفه دارند [۱۲۷]. روش شبکه بولتزمن مدل‌های مختلفی برای شبیه‌سازی جریان چند فازی دارد. یکی از این مدل‌ها، مدل شان و چن است. در مطالعه حاضر از مدل شان و چن در حالت چند فازی با چند مؤلفه استفاده شده است [۱۳۸]. در این مدل، جدایی مؤلفه‌های مختلف در اثر تقابل زیاد بین مولکول‌های سیال ایجاد می‌شود [۱۲۷]. که این تقابل شامل دو بخش است: بخش اول مربوط به اثر متقابل بین مولکول‌های مؤلفه‌های یکسان و بخش دوم مربوط به اثر متقابل بین مولکول‌های مؤلفه‌های مختلف است. پس نیروی اثر متقابل به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳۸]:

$$\vec{F}_{\alpha,\alpha}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha,\alpha} \sum_i w_i \psi_{\alpha}(\vec{x} + e_i \Delta t, t) e_i \quad (۳-۴۵)$$

$$\vec{F}_{\alpha,\hat{\alpha}}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha,\hat{\alpha}} \sum_i w_i \psi_{\hat{\alpha}}(\vec{x} + e_i \Delta t, t) e_i \quad (۳-۴۶)$$

روابط ۳-۴۵ و ۳-۴۶ به ترتیب اثر متقابل بین مولکول‌های مؤلفه‌های یکسان و مؤلفه‌های مختلف را بیان می‌کنند که $\vec{F}_{\alpha,\alpha}(\vec{x}, t)$ نیروی بین ذرات مختلف مؤلفه α ام و $\vec{F}_{\alpha,\hat{\alpha}}(\vec{x}, t)$ نیروی بین ذرات مؤلفه α ام و مؤلفه $\hat{\alpha}$ ام است که این نیروها باعث جداسازی فازهای سیال می‌شوند [۱۴۱]. $G_{\alpha,\hat{\alpha}}$ قدرت اثر متقابل بین دو فاز α و $\hat{\alpha}$ و $G_{\alpha,\alpha}$ قدرت اثر متقابل بین ذرات مختلف فاز α ام است. برای

¹ Multi-component multi-phase flow

² Lattice Boltzmann equation

افزایش نسبت چگالی بین مؤلفه‌های مختلف، می‌بایست در حالت تک مؤلفه نسبت چگالی بین فازهای مختلف زیاد شود [۱۲۷]. تلاش‌هایی تاکنون برای رسیدن به نسبت‌های چگالی بالا در حالت چند فازی و تک مؤلفه صورت گرفته است. برای مثال سويفت^۱ و همکارانش [۱۴۲] با استفاده از روش اصلی انرژی آزاد^۲ توانستند به نسبت چگالی ۱۰ برسند همچنین بزرگ‌ترین نسبت چگالی به کار رفته توسط هی، چن و زنگ (HCZ)^۳ تقریباً ۴۰ است [۱۴۳] با این حال این مقادیر هنوز برای بیشتر مسائل کاربردی مناسب نیستند. استفاده از معادله حالت گاز ایده‌آل و مدل اصلی شان و چن علت محدود بودن نسبت چگالی است زیرا در معادله حالت گاز ایده‌آل رابطه بین فشار و چگالی به صورت غیرواقعی بوده و تراکم‌پذیری زیادی برای فاز مایع در نظر می‌گیرد که حتی از فاز بخار هم بیشتر است [۱۲۷].

مراحل حل مسئله با استفاده از روش چند فازی و چند مؤلفه به صورت زیر است:

۱. اعمال شرایط اولیه

۲. جایگزینی مقادیر چگالی در رابطه $\psi = \rho$ یا $\psi = \psi_0 \exp(-\rho_0 / \rho)$ و محاسبه جرم مؤثر $(\psi = \rho_0 [1 - \exp(-\rho / \rho_0)])$

۳. محاسبه نیروهای اثر متقابل سیال-سیال با مؤلفه‌های یکسان و مؤلفه‌های مختلف از روابط ۳-۴۷ و ۳-۴۸ و نیروی اثر متقابل سیال-جامد با استفاده از رابطه ۳-۴۹ و در نهایت تعیین نیروی کل از رابطه ۳-۵۰ [۱۳۸]

$$F_{\alpha,\alpha}(x,t) = -\psi_{\alpha}(x,t)G_{\alpha,\alpha} \sum_i w_i \psi_{\alpha}(x + e_i \Delta t, t) e_i \quad (۴۷-۳)$$

$$F_{\alpha,\hat{\alpha}}(x,t) = -\psi_{\alpha}(x,t)G_{\alpha,\hat{\alpha}} \sum_i w_i \psi_{\hat{\alpha}}(x + e_i \Delta t, t) e_i \quad (۴۸-۳)$$

$$F_{ads}^{\alpha}(x,t) = -\psi_{\alpha}(x,t)G_{ads}^{\alpha} \sum_i w_i S(x + e_i \Delta t, t) e_i \quad (۴۹-۳)$$

$$F_{total,\alpha} = F_{\alpha,\alpha}(x,t) + F_{\alpha,\hat{\alpha}}(x,t) + F_{ads}^{\alpha}(x,t) \quad (۵۰-۳)$$

۴. محاسبه سرعت تغییر یافته یا تعادلی [۱۱۸ و ۱۲۷]

¹ Swift

² Free-energy-based

³ He, Chen and Zhang (HCZ)

$$u_{\alpha}^{eq} = u' + \tau_{\alpha} F_{\alpha} / \rho_{\alpha}, u' = \sum_{\alpha} \left(\sum_i \frac{f_i^{\alpha} e_i}{\tau_{\alpha}} \right) / \sum_{\alpha} \frac{\rho_{\alpha}}{\tau_{\alpha}} \quad (51-3)$$

۵. تعیین تابع توزیع تعادلی که در این رابطه اندیس i نشان‌دهنده جهت‌های مختلف سرعت و

α مؤلفه‌های مختلف سیال است [۱۱۸]

$$f_i^{\alpha,eq} = \rho_{\alpha} w_i \left[1 + \frac{3}{c^2} \vec{e}_i u_{\alpha}^{eq} + \frac{3}{2c^4} (\vec{e}_i u_{\alpha}^{eq})^2 - \frac{3}{2c^2} u_{\alpha}^{eq} u_{\alpha}^{eq} \right] \quad (52-3)$$

۶. مرحله برخورد

۷. مرحله جاری شدن

۸. اعمال شرایط مرزی و محاسبه پارامترهای ماکروسکوپی و خطا

۹. بررسی شرط توقف

۱۰. اگر خطا به مقدار مطلوب نرسیده باشد توابع توزیع جدید محاسبه شده از مرحله ۷ در مرحله

۲ قرار گرفته و دوباره مراحل بالا تکرار شود.

در روش شان و چن چگالی کل مخلوط سیال‌ها یا فازها از رابطه $\rho = \sum_k \rho_k = \rho_1 + \rho_2$ تعیین می‌-

شود که ρ_1, ρ_2 چگالی هر فاز است و از روابط $\rho_1 = \sum_k f_k^1, \rho_2 = \sum_k f_k^2$ بدست می‌آیند. همچنین

سرعت کل مخلوط فازها از رابطه ۳-۵۳ محاسبه می‌شود [۱۴۴ و ۱۴۵]:

$$\rho u = \sum_k \rho_k u_k + \frac{1}{2} \sum_k F_k, F_k = F_{int,k} + F_{ads,k} + F_{ext,k} \quad (53-3)$$

رابطه بالا برداری است و در جهات مختلف نوشته می‌شود. در این رابطه u_k سرعت فازهای مختلف

است که از روابط $\rho_1 u_1 = \sum_i e_i f_i^1$ و $\rho_2 u_2 = \sum_i e_i f_i^2$ به دست می‌آید [۱۴۴ و ۱۴۵]. فشار کل

مخلوط فازها از رابطه ۳-۵۴ [۱۳۲] و فشار هر فاز از روابط $p_1 = \rho_1/3$ و $p_2 = \rho_2/3$ حاصل می‌شود

[۱۴۶]:

$$p(x, t) = c_s^2 \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(x, t) + \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \hat{\alpha}} G_{\alpha, \hat{\alpha}} \psi_{\alpha}(x, t) \psi_{\hat{\alpha}}(x, t) \quad (54-3)$$

رابطه ۳-۵۵ ویسکوزیته کل مخلوط سیال‌ها را بیان می‌کند [۱۴۴، ۱۴۵ و ۱۴۷]:

$$v = \frac{\frac{\rho_1 \tau_1}{\rho_1 + \rho_2} + \frac{\rho_2 \tau_2}{\rho_1 + \rho_2} - 1/2}{3} = \frac{1}{3} \frac{\rho_1}{\rho_1 + \rho_2} (\tau_1 - 1/2) + \frac{1}{3} \frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2} (\tau_2 - 1/2) \quad (۵۵-۳)$$

که ویسکوزیته هر فاز سیال از روابط $v_1 = (\tau_1 - 1/2)/3$ و $v_2 = (\tau_2 - 1/2)/3$ تعیین می‌شود [۱۱۶].

جدول ۳-۱: خلاصه روابط محاسبه فشار و نیروی اثر متقابل بین مولکول‌های سیال-سیال در جریان چند فاز.

$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\psi(\vec{x}, t) \sum_i G_i \psi(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \rightarrow \begin{cases} G_1 & x - x' = 1 \\ G_1/4 & x - x' = \sqrt{2} \end{cases} \quad [139]$	فرم اول	تک مؤلفه	$D_2 Q_9$
	$p(x, t) = \rho/3 + (3/2) \times G_1 \psi^2 \quad [40]$		
$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\psi(\vec{x}, t) G \sum_i w_i \psi(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \quad [89]$	فرم دوم	چند مؤلفه	
$p(x, t) = \rho/3 + (1/6) \times G \psi^2 \quad [89]$			
$\vec{F}_{\alpha, \hat{\alpha}}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha, \hat{\alpha}} \sum_i \psi_{\hat{\alpha}}(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \rightarrow \begin{cases} G_{\alpha, \hat{\alpha}} & x - x' = 1 \\ G_{\alpha, \hat{\alpha}}/4 & x - x' = \sqrt{2} \end{cases}$	فرم اول	چند مؤلفه	
$p(x, t) = c_s^2 \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(x, t) + \frac{3}{2} \sum_{\alpha, \hat{\alpha}} G_{\alpha, \hat{\alpha}} \psi_{\alpha}(x, t) \psi_{\hat{\alpha}}(x, t)$			
$\vec{F}_{\alpha, \hat{\alpha}}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha, \hat{\alpha}} \sum_i w_i \psi_{\hat{\alpha}}(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \quad [132, 138]$	فرم دوم	تک مؤلفه	$D_3 Q_{19}$
$p(x, t) = c_s^2 \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(x, t) + \frac{1}{6} \sum_{\alpha, \hat{\alpha}} G_{\alpha, \hat{\alpha}} \psi_{\alpha}(x, t) \psi_{\hat{\alpha}}(x, t) \quad [132]$			
$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\psi(\vec{x}, t) \sum_i G_i \psi(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \rightarrow \begin{cases} G_1 & x - x' = 1 \\ G_1/2 & x - x' = \sqrt{2} \end{cases} \quad [139]$	فرم اول	تک مؤلفه	
$p(x, t) = \frac{\rho}{3} + 3G_1 \psi^2 \quad [139]$			
$\vec{F}(\vec{x}, t) = -\psi(\vec{x}, t) G \sum_i w_i \psi(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i$	فرم دوم	چند مؤلفه	
$p(x, t) = \rho/3 + (1/6) \times G \psi^2$			
$\vec{F}_{\alpha, \hat{\alpha}}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha, \hat{\alpha}} \sum_i \psi_{\hat{\alpha}}(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \rightarrow \begin{cases} G_{\alpha, \hat{\alpha}} & x - x' = 1 \\ G_{\alpha, \hat{\alpha}}/2 & x - x' = \sqrt{2} \end{cases} \quad [80]$	فرم اول	چند مؤلفه	
$P(x, t) = C_s^2 \sum_i \rho_{\alpha}(x, t) + 3 \sum_{\alpha, \hat{\alpha}} G_{\alpha, \hat{\alpha}} \psi_{\alpha}(x, t) \psi_{\hat{\alpha}}(x, t) \quad [80]$			
$\vec{F}_{\alpha, \hat{\alpha}}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{\alpha, \hat{\alpha}} \sum_i w_i \psi_{\hat{\alpha}}(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i \quad [138]$	فرم دوم	تک مؤلفه	
$p(x, t) = c_s^2 \sum_{\alpha} \rho_{\alpha}(x, t) + \frac{c_s^2}{2} \sum_{\alpha, \hat{\alpha}} G_{\alpha, \hat{\alpha}} \psi_{\alpha}(x, t) \psi_{\hat{\alpha}}(x, t)$			

جدول ۳-۱ خلاصه روابط محاسبه فشار و نیروی اثر متقابل بین مولکول‌های سیال-سیال برای شبکه‌های D_2Q_9, D_3Q_{19} در جریان چند فازی برای حالت‌های تک مؤلفه‌ای و چند مؤلفه‌ای را نشان می‌دهد.

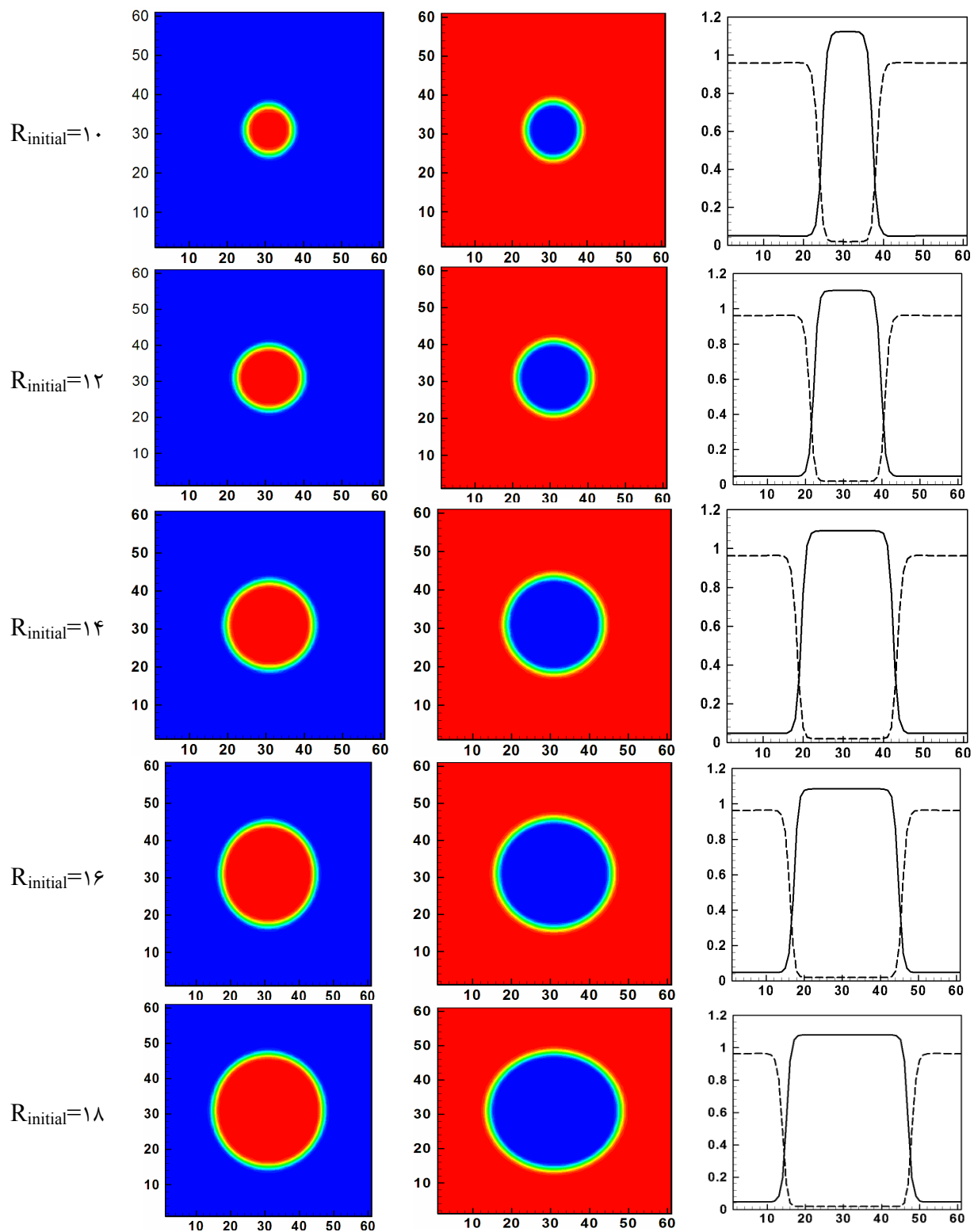
۳-۶ اعتبارسنجی برنامه

به‌طور کلی در این رساله هفت آزمون برای اعتبارسنجی برنامه، به کار گرفته شده است که به شرح زیر هستند:

۳-۶-۱ آزمون اول: آزمون حباب

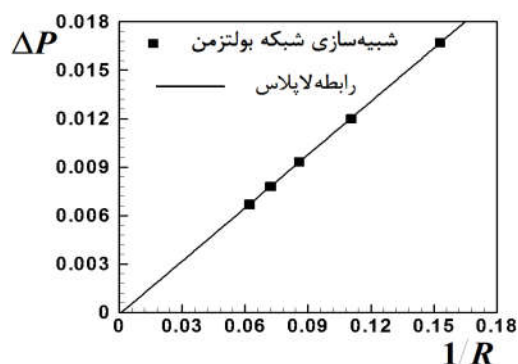
در مدل شان و چن پارامترهای فیزیکی مسئله از جمله پارامترهای مربوط به نیروی عکس‌العمل سیال-سیال و نیروی عکس‌العمل سیال-جامد با استفاده از آزمایش‌های عددی مورد ارزیابی قرار گیرند. بدین منظور آزمون حباب برای ارزیابی نیروی عکس‌العمل سیال-سیال در غیاب فاز جامد استفاده می‌شود. برای انجام این آزمون یک حباب دایره‌ای ساکن به شعاع دلخواه از یک سیال درون سیال دیگر قرار می‌دهند به گونه‌ای که مرکز دایره در مرکز ناحیه محاسباتی قرار گیرد. در حالت تعادل و بدون در نظر گرفتن هرگونه نیروی حجمی و فاز جامد، هر سیال چگالی و فشار ثابت و سرعت صفر دارد [۱۴۸]. در میان مرز مشترک دو سیال تغییر فشار وجود دارد که تابع شعاع حباب و کشش سطحی است و این تغییر فشار را می‌توان از قانون لاپلاس تعیین کرد $(P_i - P_0 = \sigma/R)$ [۱۴۸] که P_0 و P_i به ترتیب فشار داخل و خارج قطره، σ کشش سطحی بین سیال ۱ و ۲ و R شعاع قطره در حالت نهایی است. همان‌طوری که می‌دانیم شکل حباب، اندازه و چگالی آن در حالت نهایی برای ما مشخص نیست بنابراین می‌خواهیم در حالت پایا شکل حباب، اندازه، چگالی، کشش سطحی و قانون لاپلاس را مورد ارزیابی قرار دهیم. شبکه مورد استفاده 61×61 و مرکز حباب در مختصات (31,31) قرار دارد. شرایط مرزی روی همه مرزها به صورت متقارن است. توجه شود که شکل اولیه حباب (ناحیه با چگالی بالا) مهم نیست و می‌تواند مربع، مثلث یا هر شکل دلخواهی باشد زیرا بر نتیجه نهایی

اثری ندارد. شکل اولیه می‌خواهد به گونه‌ای تبدیل شود که کمترین سطح را داشته باشد به همین دلیل در حالت دوبعدی شکل نهایی دایره خواهد شد [۱۲۷]. اگر شکل اولیه دایره باشد سرعت همگرایی مسئله افزایش می‌یابد چون هر چه اختلاف بین شرایط اولیه و نتیجه نهایی کمتر باشد همگرایی مدل سریع‌تر خواهد بود [۱۲۷]. در شبیه‌سازی حباب اگر اختلاف نسبی سرعت کلی سیال در مرحله زمانی t و $t-1000$ کمتر از 10^{-6} باشد به حالت پایا رسیده‌ایم [۸۰]. اگر نتوانیم به حالت پایا برسیم زمان شبیه‌سازی حداکثر ۴۰۰۰۰ مرحله زمانی خواهد بود [۸۰]. حباب را با فاز یک و محدوده خارج حباب را با فاز دو نمایش می‌دهیم که فاز یک، مایع و فاز دو بخار است. در این شبیه‌سازی زمان آسایش برای هر دو فاز به صورت $\tau_1=1.2, \tau_2=1$ و ضرایب $G_{\alpha,\dot{\alpha}}$ به صورت $G_{11}=-1, G_{22}=-1, G_{12}=2.85, G_{21}=2.85$ در نظر گرفته شده‌اند. چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج حباب به‌طور یکنواخت و به ترتیب ۱ و ۰ درحالی که چگالی فاز دو ۰ و ۱ انتخاب می‌شوند. در این آزمون از معادله حالت $\psi = \rho_0(1 - \exp(-\rho/\rho_0))$ با مقدار $\rho_0 = 1$ استفاده شده است. واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولتزمن هستند. شکل ۳-۳ حالت پایای حباب ساکن تشکیل شده را برای شعاع‌های اولیه مختلف نشان می‌دهد. همچنین در این نمودار چگالی هر دو فاز در امتداد خط گذرنده از مرکز ($y=31$) برحسب x رسم شده است. چگالی فاز یک با خط و چگالی فاز دو با خط چین نمایش داده شده‌اند. با توجه به شکل مشخص است که چگالی فاز یک دارای مقدار ماکزیمم داخل حباب و دارای مقدار مینیمم در بیرون آن است اما چگالی فاز دو دارای مقدار مینیمم داخل حباب و دارای مقدار ماکزیمم در بیرون آن است. صفر بودن چگالی فاز یک در بیرون حباب و صفر بودن چگالی فاز دو در داخل حباب نشان‌دهنده این است که مدل شان و چن مدلی مناسب برای فازهای مخلوط نشدنی است. برای محاسبه کشش سطحی با استفاده از قانون لاپلاس، به شعاع حباب در حالت نهایی نیاز است که برای محاسبه آن از رابطه $\bar{\rho}L^2 = \rho_{mas}\pi R^2 + (L^2 - \pi R^2)\rho_{min}$ استفاده می‌شود. در این رابطه $L^2 = n_x \times n_y$ و برابر مساحت کل ناحیه محاسباتی در صفحه $x-y$ است [۱۴۸].



شکل ۳-۳: حالت پایای حباب ساکن تشکیل شده برای شعاع‌های اولیه مختلف (شکل چپ فاز یک و شکل وسط فاز دو) و نمودار چگالی هر دو فاز در امتداد خط گذرنده از مرکز ($y=31$) برحسب x (شکل راست).

همچنین $\bar{\rho} = \sum \rho_r / (n_x \times n_y \times n_z)$ چگالی متوسط فاز یک یا حباب تشکیل شده روی کل ناحیه محاسباتی است [۱۴۸]. ρ_{max} ، ρ_{min} ماکزیمم و مینیمم مقدار چگالی فاز یک روی کل ناحیه محاسباتی است و همان طوری که ذکر شد ρ_{max} در درون حباب و ρ_{min} در بیرون حباب است. این رابطه برای محاسبه شعاع نهایی حباب وقتی برقرار است که چگالی حباب تشکیل شده یا همان فاز یک به طور یکنواخت در داخل حباب مقدار ρ_{max} و به طور یکنواخت در بیرون حباب دارای مقدار ρ_{min} باشد [۱۴۸]. در حالت نهایی با محاسبه شعاع حباب و فشار داخل و بیرون آن می توان کشش سطحی را از قانون لاپلاس تعیین کرد. مقادیر فشار از نظر تئوری در داخل و بیرون حباب باید ثابت باشند ولی چون در مدل شان و چن ضخامت مرز مشترک بین دو فاز محدود است و هر دو فاز در نزدیک مرز مشترک وجود دارند مقدار فشار در این مکان تغییر می کند پس برای محاسبه فشار داخل و خارج حباب، باید به اندازه کافی از مرز مشترک دور شد [۱۴۸]. حال می توان تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب را محاسبه کرده و نمودار اختلاف فشار بر حسب $1/R$ را رسم کرد (شکل ۳-۴).



شکل ۳-۴: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب بر حسب $1/R$.

نشانه های مربع روی شکل نتایج شبیه سازی شان و چن و خط رسم شده مربوط به قانون لاپلاس است. با توجه به شکل از آنجایی که همه نقاط روی خط مستقیم قرار گرفته اند، قانون لاپلاس در شبیه سازی انجام شده برقرار است. شیب خط رسم شده برابر با کشش سطحی است که مقدار 0.10941 در واحد شبکه بولتزمن به دست آمده است. از آنجایی که نتایج شبیه سازی با نتایج تئوری مطابقت دارد روش شان و چن می تواند برای شبیه سازی سیستم های سیال با دو مؤلفه به درستی مورد استفاده قرار گیرد. خلاصه نتایج مربوط به این شبیه سازی در جدول ۳-۲ آورده شده است.

جدول ۳-۲: خلاصه نتایج مربوط به شبیه‌سازی آزمون حباب.

حالت‌ها	حالت ۱	حالت ۲	حالت ۳	حالت ۴	حالت ۵
شعاع نهایی R	۶/۵۳۴۸۹	۹/۰۳۹۰۵۳	۱۱/۶۴۶۰	۱۳/۸۹۹۳۸	۱۶/۱۱۴۳۵۸
فشار داخل P_{in}	۰/۳۱۶۴	۰/۳۱۱۶	۰/۳۰۸۸	۰/۳۰۷۲	۰/۳۰۵۹
فشار خارج P_{out}	۰/۲۹۹۷	۰/۲۹۹۶	۰/۲۹۹۵	۰/۲۹۹۴	۰/۲۹۹۲
$\Delta P = P_{in} - P_{out}$	۰/۰۱۶۷	۰/۰۱۲۰	۰/۰۰۹۳	۰/۰۰۷۸	۰/۰۰۶۷
$\sigma = \Delta P \times R$	۰/۱۰۹۱۳	۰/۱۰۸۴۶۸	۰/۱۰۸۳۰	۰/۱۰۸۴۱۵	۰/۱۰۷۹۶۶

۳-۶-۲ آزمون دوم: آزمون قطره ساکن

برای ارزیابی نیروی اثر متقابل بین سیال و جامد از آزمایش قطره ساکن استفاده می‌شود که این آزمون در غیاب نیروی حجمی و در حضور دیوار جامد صورت می‌گیرد [۸۰]. این اثر متقابل بین سیال و جامد، قابلیت خیسی دیوار را کنترل می‌کند و بر زاویه خیسی در مرز مشترک جامد-سیال اثر می‌گذارد [۸۰]. در حالتی که اثر متقابل بین سیال و جامد وجود داشته باشد نیروی جداگانه‌ای برای هر فاز باید لحاظ شود که به صورت عبارت چشمه در معادلات ظاهر می‌شود و رابطه آن به صورت

$$\vec{F}_{ads}^{\alpha}(\vec{x}, t) = -\psi_{\alpha}(\vec{x}, t) G_{ads}^{\alpha} \sum_i w_i S(\vec{x} + c_i \Delta t, t) c_i$$

جذب^۱ برای فاز α و w ضریب وزنی است [۱۳۸]. S دارای مقادیر صفر یا یک است که اگر مکان $\vec{x} + c_i \Delta t$ گره جامد باشد مقدار یک و اگر سیال باشد مقدار صفر را دارد [۱۳۸]. همان‌طوری که گفته شد اثر متقابل بین سیال و جامد زاویه خیسی بین مایع و سطح جامد را تعیین می‌کند و از طرفی ضریب جذب (G_{ads}^{α}) مقدار این اثر متقابل را کنترل می‌کند یعنی زاویه خیسی با تغییر ضریب G_{ads}^{α} تغییر می‌کند. بر اساس مقدار این ضریب سه سطح مختلف وجود دارد: سطح آب‌گریز^۲، خنثی^۳ و آب‌دوست^۴ [۱۳۸]. ضریب جذب برای سیال غیر خیس‌کننده مثبت و برای سیال خیس‌کننده منفی است [۱۴۶]. در این شبیه‌سازی مرز بالا و پایین، دیوار و مرز چپ و راست به صورت متقارن است. در لحظه ابتدایی یک قطره به صورت نیم‌دایره به شعاع ۱۶ در واحد شبکه بولتزمن در مرکز دیوار جامد

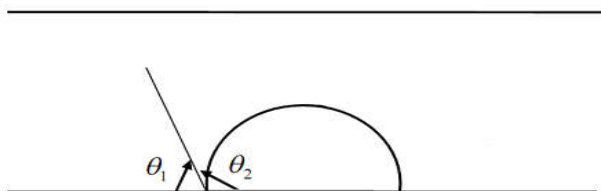
^۱ Adsorption coefficient

^۲ Hydrophobic

^۳ Neutral

^۴ Hydrophilic

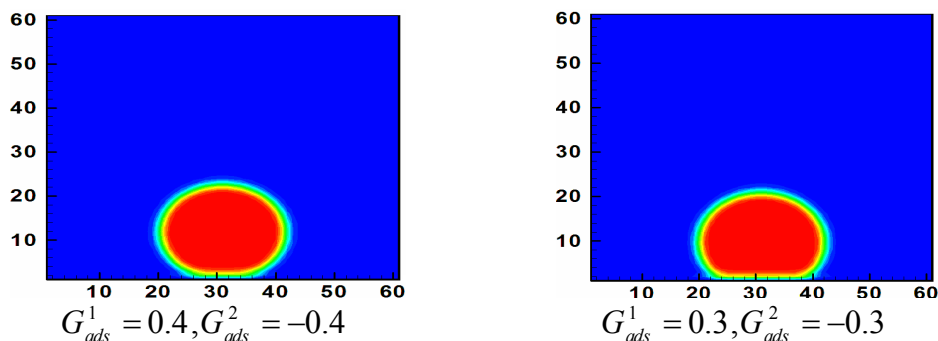
پایین قرار گرفته است. شرط توقف مانند آزمون حباب است. وقتی قطره ساکن به حالت پایا برسد زاویه خیزی آن محاسبه می‌شود. شکل قطره در حالت نهایی به صورت زیر است:



شکل ۳-۵: شکل قطره در آزمون قطره ساکن.

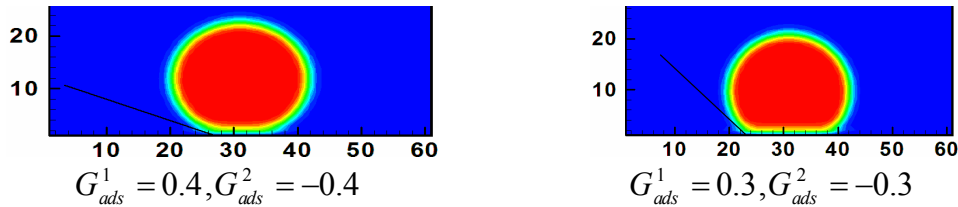
از اینجا به بعد برای سادگی، زاویه خیزی را که در شکل ۳-۵ با θ_2 نشان داده شده است با θ بیان می‌کنیم. تفاوت آزمون قطره ساکن با آزمون حباب در موارد زیر است: شرایط مرزی (مرز بالا و پایین در آزمون حباب به صورت متقارن ولی در آزمون قطره ساکن به صورت شرط عدم لغزش است)، اضافه شدن نیروی اثر متقابل بین سیال و جامد در آزمون قطره ساکن و محل قرار گرفتن قطره اولیه. چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به‌طور یکنواخت و به ترتیب ۲ و ۰/۰۶ و چگالی فاز دو ۰/۰۶ و ۲ در نظر گرفته شده است. در این شبیه‌سازی واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولتزمن و معادلات حالت به کار رفته $\psi_1(x,t) = \rho_1(x,t), \psi_2(x,t) = \rho_2(x,t)$ هستند.

آزمون قطره ساکن را برای دو مقدار اثر متقابل سیال - جامد بررسی می‌کنیم. در این دو حالت پارامترها به صورت $G_{11} = 0, G_{22} = 0, G_{12} = 0.9, G_{21} = 0.9, R_{initial} = 16, \tau_1 = \tau_2 = 1$ هستند. شکل قطره در حالت نهایی برای این دو حالت به صورت زیر است (شکل ۳-۶):



شکل ۳-۶: شکل قطره در آزمون قطره ساکن.

برای محاسبه زاویه خیزی سه روش وجود دارد. در روش اول خط مماسی بر قطره در حالت نهایی رسم کرده و شیب آن را محاسبه می‌کنیم (شکل ۳-۷).



شکل ۳-۷: روش اول برای محاسبه زاویه خیزی.

شیب این خط با در نظر گرفتن دو نقطه روی آن توسط روابط ۳-۵۶ و ۳-۵۷ محاسبه می‌شود:

$$G_{ads}^1 = 0.4 \quad \tan(\theta_1) = \frac{|y_2 - y_1|}{|x_2 - x_1|} = \frac{|9.69717 - 3.14556|}{|5.718 - 21.803|} = 0.4073 \quad (3-56)$$

$$G_{ads}^2 = -0.4 \quad \rightarrow \theta_1 = 22.1616 \rightarrow \theta_2 = 180 - \theta_1 = 157.8384$$

$$G_{ads}^1 = 0.3 \quad \tan(\theta_1) = \frac{|y_2 - y_1|}{|x_2 - x_1|} = \frac{|16.3561 - 2.7159|}{|7.97 - 21.48|} = 1.0096 \quad (3-57)$$

$$G_{ads}^2 = -0.3 \quad \rightarrow \theta_1 = 45.274 \rightarrow \theta_2 = 180 - \theta_1 = 134.726$$

این شیب همان زاویه خیزی است.

در روش دوم زاویه خیزی با استفاده از رابطه ۳-۵۸ محاسبه می‌شود [۸۰ و ۱۴۹]. در این روش با محاسبه ارتفاع قطره a_0 و طول قسمت خیس‌کنندگی آن b_0 ، شعاع نهایی (R) و زاویه خیزی قطره بدست می‌آیند.

$$R = \frac{a_0}{2} + \frac{b_0^2}{8a_0}, \quad \tan(\theta_2) = \frac{b_0}{2(R - a_0)} \quad (3-58)$$

با توجه به اینکه در این روش مرز مشترک دوفاز دارای ضخامت است، مشکل اصلی در اندازه‌گیری ارتفاع و طول خیس‌کنندگی قطره، تعیین محل دقیق مرز مشترک بین قطره و سیال محیط اطراف آن است [۱۴۹]. برای حل این مشکل چگالی قطع (چگالی انتهای قطره) تعریف می‌شود که نصف چگالی سیالی است که قطره با آن شکل گرفته است [۱۴۹]. روند محاسبه زاویه خیزی با روش دوم در شکل ۳-۸ بیان شده است.

روش سوم برای محاسبه زاویه خیسی، رابطه پیشنهاد شده توسط هانگ و همکارانش^۱ [۱۴۹] است که مقایسه نتایج شبیه‌سازی عددی با نتایج این رابطه، درستی مدل‌سازی نیروی اثر متقابل بین سیال و جامد را نشان می‌دهد.

$$\cos(\theta_2) = \frac{G_{ads}^2 - G_{ads}^1}{2G(\rho_1 - \rho_2)} \quad (۵۹-۳)$$

برای استفاده از این رابطه باید معادلات زیر لحاظ شوند:

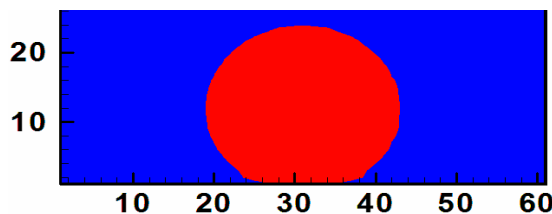
$$\psi_n(x, t) = \rho_n(x, t) \longrightarrow \begin{cases} \psi_1(x, t) = \rho_1(x, t) \\ \psi_2(x, t) = \rho_2(x, t) \end{cases} \quad (۶۰-۳)$$

$$G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} \quad (۶۱-۳)$$

که در این صورت رابطه فشار به صورت زیر ساده می‌شود [۱۴۹]:

$$P(x, t) = C_s^2 \sum_n \rho_n(x, t) + \frac{C_s^2}{2} \sum_{n\bar{n}} G_{n\bar{n}} \psi_n(x, t) \psi_{\bar{n}}(x, t) = \frac{\rho_1}{3} + \frac{\rho_2}{3} + \frac{1}{6} [G_{11} \psi_1^2(x, t) + G_{22} \psi_2^2(x, t) + G_{12} \psi_1(x, t) \psi_2(x, t) + G_{21} \psi_2(x, t) \psi_1(x, t)] \quad (۶۲-۳)$$

$$\xrightarrow{\text{if } G_{12}=G_{21}=G} \frac{\rho_1}{3} + \frac{\rho_2}{3} + \frac{1}{3} G \psi_1(x, t) \psi_2(x, t)$$



$$G_{ads}^1 = 0.4, G_{ads}^2 = -0.4$$

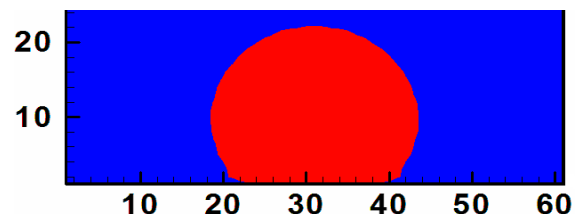
$$a_0 = 23.9107 - 1 = 22.9107$$

$$b_0 = 35.45 - 26.51 = 8.9400$$

$$R = a_0/2 + b_0^2/8a_0 = 11.8914$$

$$\tan(\theta_2) = b_0/(2(R - a_0)) = -0.4057$$

$$\theta_2 = 157.92$$



$$G_{ads}^1 = 0.3, G_{ads}^2 = -0.3$$

$$a_0 = 22.1559 - 1 = 21.1559$$

$$b_0 = 39.175 - 22.768 = 16.4070$$

$$R = a_0/2 + b_0^2/8a_0 = 12.1685$$

$$\tan(\theta_2) = b_0/(2(R - a_0)) = -0.9128$$

$$\theta_2 = 137.6110$$

شکل ۳-۸: روش دوم برای محاسبه زاویه خیسی.

جدول ۳-۳ مقایسه زاویه خیسی محاسبه شده به سه روش را نشان می‌دهد که با هم مطابقت دارند.

¹ Huang et al.

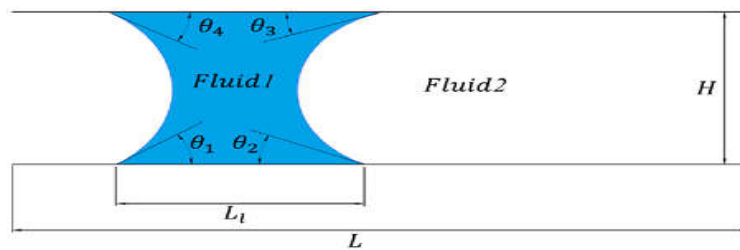
جدول ۳-۳: مقایسه نتایج مربوط به آزمون قطره ساکن در حالت‌های مختلف.

حالت‌ها	روش اول	روش دوم	روش سوم
$G_{ads}^1 = 0.4, G_{ads}^2 = -0.4$	$\theta = 157.8384$	$\theta = 157.92$	$\theta = 156.4$
$G_{ads}^1 = 0.3, G_{ads}^2 = -0.3$	$\theta = 134.726$	$\theta = 137.6110$	$\theta = 133.4$

۳-۶-۳ آزمون سوم: آزمون جابه‌جایی قطره مخلوط نشدنی در اثر تغییر زاویه در کانال

دو بعدی

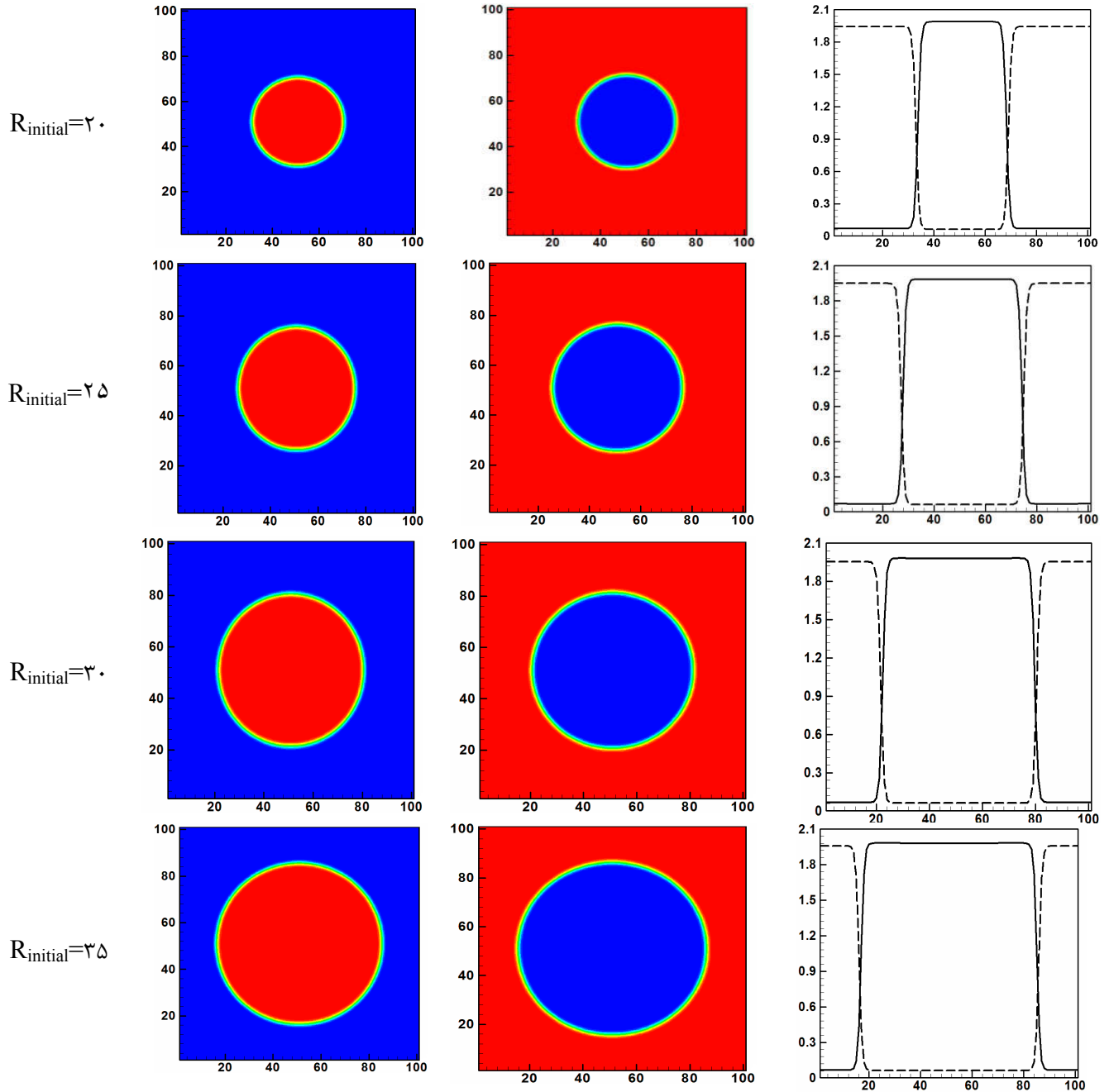
هندسه مسئله به صورت زیر است [۱۴۱]:



شکل ۳-۹: هندسه مربوط به آزمون جابه‌جایی قطره مخلوط نشدنی در اثر تغییر زاویه در کانال دو بعدی.

در شکل ۳-۹ قطره مخلوط نشدنی در کانالی دو بعدی قرار گرفته است. قطره سیال یا فاز ۱ در نظر گرفته شده و کل کانال با سیال یا فاز ۲ پر شده است. طول و عرض کانال به ترتیب L و H و طول خیس‌کنندگی بین قطره و دیوار کانال برابر L_1 است. $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ به ترتیب زاویه‌های خیزی سمت چپ و راست قطره با دیوار بالا و سمت راست و چپ قطره با دیوار پایین است. زاویه خیزی به صورت زاویه بین مرز مشترک دو سیال و صفحه جامد تعریف می‌شود. سیال خیس‌کننده سیالی است که تمایل به خیس کردن صفحه دارد و زاویه خیزی آن با صفحه کمتر از 90° درجه است اما سیال غیر خیس‌کننده تمایل به همسایگی کمتری با صفحه دارد و زاویه خیزی آن بزرگ‌تر از 90° درجه است [۱۴۶]. در شکل ۳-۹ مبدأ مختصات در گوشه پایین سمت چپ قرار گرفته است. در این هندسه مرز چپ و راست به صورت متناوب و مرز بالا و پایین به صورت دیوار در نظر گرفته شده است. برای ایجاد

شرط مرزی عدم لغزش در دیوار، از طرح تابع توزیع ذرات برگشت به عقب با دیوار میانی^۱ استفاده شده است.



شکل ۳-۱۰: حالت پایای حباب ساکن تشکیل شده برای شعاع‌های اولیه مختلف (شکل چپ فاز یک و شکل وسط فاز دو) و نمودار چگالی هر دو فاز در امتداد خط گذرنده از مرکز ($y=51$) برحسب x (شکل راست).

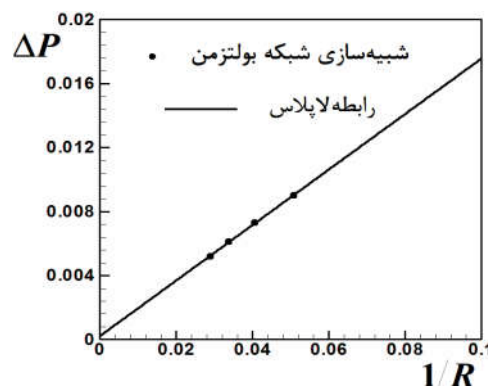
¹ Particle distribution function halfway bounce-back condition(HWBBC)

همان‌طور که پیش‌تر بیان شد در روش چند فازی و چند مؤلفه مدل شان و چن کشش سطحی و زاویه خیزی باید به‌طور جداگانه محاسبه شوند.

مقدار کشش سطحی توسط آزمون حباب و اعمال پارامترهای $G_{11} = 0, G_{22} = 0, G_{12} = 0.9, G_{21} = 0.9, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = 0.1667, \nu_2 = 0.1667$ در واحد شبکه بولتزمن است. در این آزمون، قطره فاز یک و در وسط ناحیه محاسباتی قرار دارد. ناحیه به صورت یک شبکه 101×101 با شرایط مرزی متناوب است. در این شبیه‌سازی چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به‌طور یکنواخت و به ترتیب ۲ و 0.06 و چگالی فاز دو 0.06 و در نظر گرفته شده و از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است. نتایج این آزمون در جدول ۳-۴ و شکل ۳-۱۱ بیان شده است. نشانه‌های دایره روی شکل نتایج شبیه‌سازی شان و چن و خط رسم شده مربوط به قانون لاپلاس است. از آنجایی که همه نقاط با توجه به شکل روی خط مستقیم قرار گرفته‌اند، قانون لاپلاس در شبیه‌سازی ما برقرار است. همچنین مرجع [۶۲] همین شبیه‌سازی را انجام داده و مقدار 0.1786 را برای کشش سطحی محاسبه کرده که خطای این دو مقدار برابر $2/69$ درصد است.

جدول ۳-۴: خلاصه نتایج مربوط به شبیه‌سازی آزمون حباب.

$R_{initial}$	۲۰	۲۵	۳۰	۳۵
شعاع نهایی R	۱۹/۷۰۰۸	۲۴/۶۶۷۵	۲۹/۶۱۰۵	۳۴/۶۰۷۱
فشار داخل p_{in}	۰/۳۸۲	۰/۷۳۷۴	۰/۷۳۷۲	۰/۷۳۷۳
فشار خارج P_{out}	۰/۷۲۹۲	۰/۷۳۰۱	۰/۷۳۱۱	۰/۷۳۲۱
$\Delta P = p_{in} - P_{out}$	۰/۰۰۹۰	۰/۰۰۷۳	۰/۰۰۶۱	۰/۰۰۵۲
$\sigma = \Delta P \times R$	۰/۱۷۷۳	۰/۱۸۰۱	۰/۱۸۰۶	۰/۱۸۰۰



شکل ۳-۱۱: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب برحسب $1/R$.

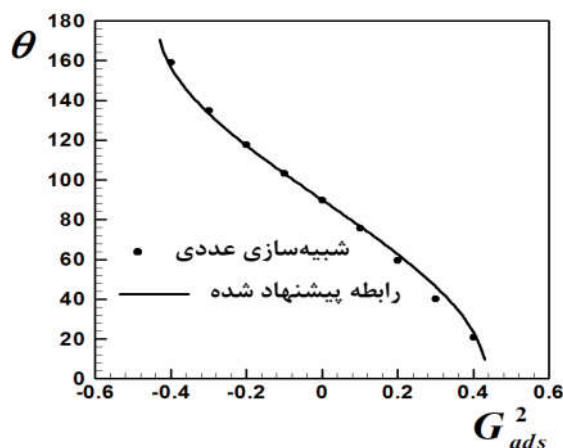
زاویه خیسی قطره با به کار گیری آزمون قطره ساکن بدست آمده است که چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به طور یکنواخت و به ترتیب ۲ و ۰/۰۶ و چگالی فاز دو ۰/۰۶ و ۲ در نظر گرفته شده و از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است. این آزمون در دو حالت زیر بررسی شده است:

حالت اول: قطره به صورت نیم‌دایره روی مرز پایین یک ناحیه 101×101 قرار دارد. شرایط مرزی چپ و راست به صورت متناوب و شرایط مرزی بالا و پایین به صورت دیوار است. با تغییر مقادیر G_{ads} می‌توان سطح با زاویه خیسی مختلف ایجاد کرد.

جدول ۳-۵: نحوه محاسبه زاویه خیسی در حالت اول.

θ	$\tan(\theta) = \frac{b_0}{2(R - a_0)}$	$R = \frac{a_0}{2} + \frac{b_0^2}{8a_0}$	b_0	a_0	G_{ads}^1, G_{ads}^2
۱۵۹/۱۷۷۲	-۰/۳۸۰۳	۱۷/۰۹۸۶	۱۲/۱۵۶۴	۳۳/۰۸۰۳۹۷۴۷۰۶	$G_{ads}^1 = 0.4, G_{ads}^2 = -0.4$
۱۳۵/۱۱۵۵	-۰/۹۹۶	۱۷/۸۱۹۶	۲۵/۱۴۹۹	۳۰/۴۴۵۳۵۹۵۱۸۵	$G_{ads}^1 = 0.3, G_{ads}^2 = -0.3$
۱۱۷/۸۹۱۰	-۱/۸۸۹۴	۱۹/۱۴۶۴	۳۳/۸۴۴۸	۲۸/۱۰۲۹۸۱۰۲۹۸	$G_{ads}^1 = 0.2, G_{ads}^2 = -0.2$
۱۰۳/۴۸۵۳	-۴/۱۷۰۰	۲۱/۰۸۹۵	۴۱/۰۱۶۱	۲۶/۰۰۷۵۱۵۸۰۸۵	$G_{ads}^1 = 0.1, G_{ads}^2 = -0.1$
۸۹/۹۴۲۳	-۹۹۲/۴۵۷۱	۲۳/۹۸۰۲	۴۷/۹۶۰۳	۲۴/۰۰۴۳۳۶۰۴۳۴	$G_{ads}^1 = 0.0, G_{ads}^2 = 0.0$
۷۵/۷۳۶۷	۳/۹۳۳۷	۲۸/۷۹۰۹	۵۵/۸۰۶۷	۲۱/۶۹۷۴۱۶۴۴۰۸	$G_{ads}^1 = -0.1, G_{ads}^2 = 0.1$
۵۹/۵۷۴۸	۱/۷۰۲۷	۳۸/۴۵۶۲	۶۶/۳۲۰۹	۱۸/۹۸۱۴۶۳۴۱۴۶	$G_{ads}^1 = -0.2, G_{ads}^2 = 0.2$
۴۰/۴۴۶۰	۰/۸۵۲۵	۶۴/۳۷۶۳	۸۳/۵۲۵۹	۱۵/۳۸۴۸۲۳۸۴۸۲	$G_{ads}^1 = -0.3, G_{ads}^2 = 0.3$
۲۱/۱۱۴۴	۰/۳۸۶۲	۵۱/۸۵۸۵	۳۷/۳۶۲۱	۳/۴۸۱۶۲۷۲۴۸۱	$G_{ads}^1 = -0.4, G_{ads}^2 = 0.4$

سپس برای اثبات درستی زاویه محاسبه شده از رابطه پیشنهادی هانگ و همکارانش [۱۴۹] (رابطه ۳-۳) استفاده می‌کنیم. مقایسه بین زاویه خیسی محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی و رابطه ۳-۵۹ در شکل ۳-۱۲ نشان داده شده است. در این شکل نتایج شبیه‌سازی عددی با دایره و نتایج رابطه ۳-۵۹ با خط نشان داده شده است که با توجه به شکل تطابق بسیار خوبی با هم دارند.



شکل ۳-۱۲: مقایسه بین زاویه خیزی محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی در حالت اول با رابطه ۳-۵۹.

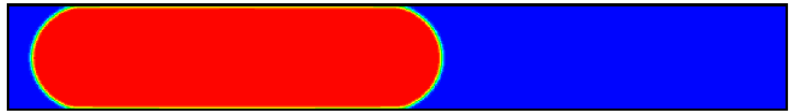
حالت دوم: قطره روی مرز پایین یک ناحیه 401×62 قرار دارد. شرایط مرزی چپ و راست به صورت متناوب و شرایط مرزی بالا و پایین به صورت دیوار است. در حالت ابتدایی قطره به صورت یک مستطیل است که ابتدا، انتها و مرکز آن روی گره‌های ۲۰، ۲۱۸ و ۱۱۹ قرار دارد. با تغییر مقادیر G_{ads} می‌توان سطح با زاویه خیزی مختلف ایجاد کرد. در این شبیه‌سازی چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به‌طور یکنواخت و برابر ۲ و $0/06$ و چگالی فاز دو $0/06$ و ۲ در نظر گرفته شده است. شکل ۳-۱۳ حالت پایای قطره در کانال را نشان می‌دهد.

در این حالت نیز برای اثبات درستی زاویه محاسبه شده می‌توان از رابطه پیشنهادی هانگ و همکارانش استفاده کرد [۱۴۹]. علاوه بر این می‌توان از قانون لاپلاس (رابطه ۳-۶۳) برای اعتبارسنجی زاویه محاسبه شده استفاده کرد [۱۴۱] (مقادیر مربوط به زاویه خیزی به دست آمده از قانون لاپلاس در جدول ۳-۶ آورده شده است).

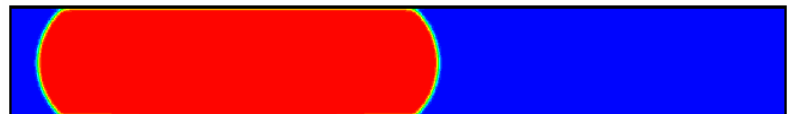
$$\cos \theta = H \Delta P / (2\sigma) \quad (۳-۶۳)$$

شکل ۳-۱۴ مقایسه بین نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی عددی، رابطه هانگ و همکارانش و قانون لاپلاس را نشان می‌دهد که با توجه به شکل تطابق بسیار خوبی با هم دارند. نقاط دایره شکل نتایج قانون لاپلاس، نقاط مربع شکل نتایج شبیه‌سازی عددی و خط رسم شده نتایج رابطه هانگ و همکارانش است.

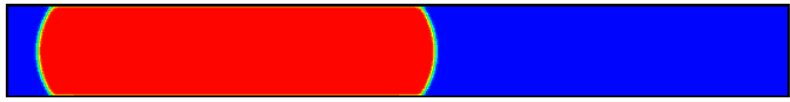
$$G_{ads}^1 = 0.4, G_{ads}^2 = -0.4 \rightarrow \theta = 160.7172$$



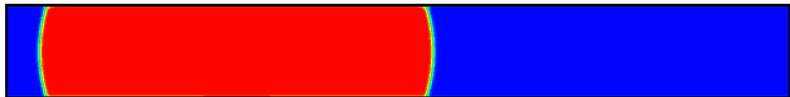
$$G_{ads}^1 = 0.3, G_{ads}^2 = -0.3 \rightarrow \theta = 136.2999$$



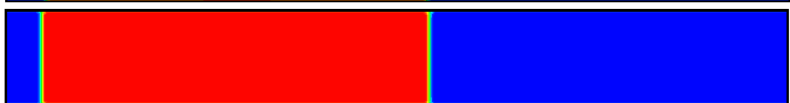
$$G_{ads}^1 = 0.2, G_{ads}^2 = -0.2 \rightarrow \theta = 118.0165$$



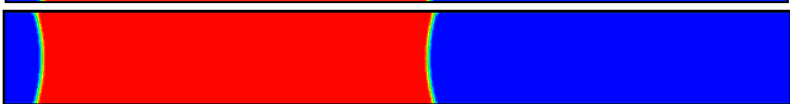
$$G_{ads}^1 = 0.1, G_{ads}^2 = -0.1 \rightarrow \theta = 103.4118$$



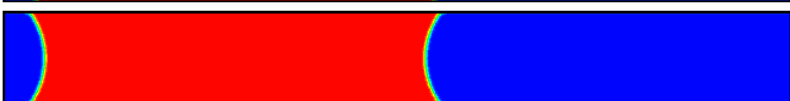
$$G_{ads}^1 = 0.0, G_{ads}^2 = 0.0 \rightarrow \theta = 90.4096$$



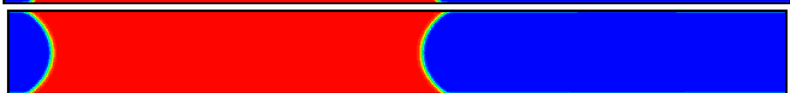
$$G_{ads}^1 = -0.1, G_{ads}^2 = 0.1 \rightarrow \theta = 76.1648$$



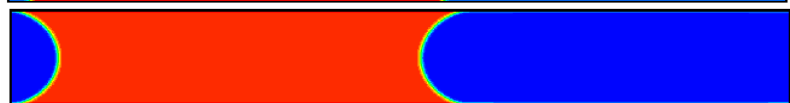
$$G_{ads}^1 = -0.2, G_{ads}^2 = 0.2 \rightarrow \theta = 61.8226$$



$$G_{ads}^1 = -0.3, G_{ads}^2 = 0.3 \rightarrow \theta = 44.7015$$



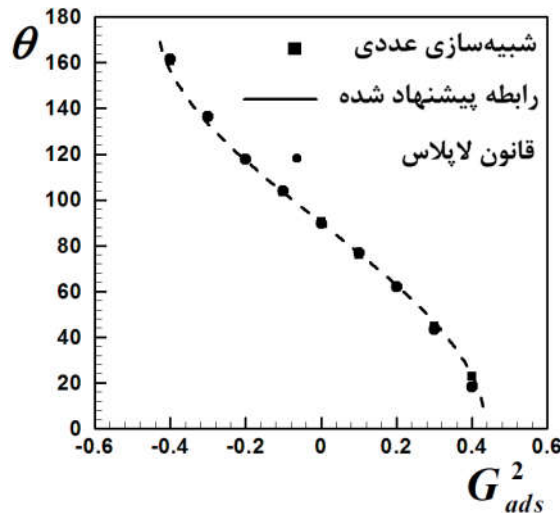
$$G_{ads}^1 = -0.4, G_{ads}^2 = 0.4 \rightarrow \theta = 22.8671$$



شکل ۳-۱۳: مقادیر زاویه محاسبه شده از شبیه‌سازی عددی در حالت دوم.

جدول ۳-۶: نحوه محاسبه زاویه خیزی در حالت دوم.

ΔP	θ	G_{ads}^1, G_{ads}^2
۰/۰۰۵۵	۱۶۱/۶۸۹۳	$G_{ads}^1 = 0.4, G_{ads}^2 = -0.4$
۰/۰۰۴۲	۱۳۶/۴۶۶۵	$G_{ads}^1 = 0.3, G_{ads}^2 = -0.3$
۰/۰۰۲۷	۱۱۷/۷۷۸۴	$G_{ads}^1 = 0.2, G_{ads}^2 = -0.2$
۰/۰۰۱۴	۱۰۳/۹۸۴۴	$G_{ads}^1 = 0.1, G_{ads}^2 = -0.1$
.	۹۰	$G_{ads}^1 = 0.0, G_{ads}^2 = 0.0$
-۰/۰۰۱۳	۷۷/۰۳۲۶	$G_{ads}^1 = -0.1, G_{ads}^2 = 0.1$
-۰/۰۰۲۷	۶۲/۲۲۱۶	$G_{ads}^1 = -0.2, G_{ads}^2 = 0.2$
-۰/۰۰۴۲	۴۳/۵۳۳۵	$G_{ads}^1 = -0.3, G_{ads}^2 = 0.3$
-۰/۰۰۵۵	۱۸/۳۱۰۷	$G_{ads}^1 = -0.4, G_{ads}^2 = 0.4$



شکل ۳-۱۴: مقایسه بین زاویه خیسی محاسبه شده از شبیه سازی عددی در حالت دوم با رابطه ۳-۵۱ و قانون لاپلاس.

حال به مطالعه دینامیک قطره دوبعدی در کانال تحت یک عملیات شیمیایی می پردازیم و نتایج عددی را با نتایج تحلیلی مقایسه می کنیم. در ابتدا قطره ای مستطیل شکل در کانال قرار می گیرد که ابتدای آن روی گره ۲۰، انتهای آن گره ۲۱۸ و مرکز آن گره ۱۱۹ است. تعداد ۴۰۱ گره در جهت افقی و ۶۲ گره در جهت عمودی در نظر گرفته شده است. در این شبیه سازی چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به طور یکنواخت و به ترتیب ۲ و ۰/۰۶ و چگالی فاز دو ۰/۰۶ و ۲ در نظر گرفته شده است. همچنین از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است و واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولتزمن هستند. پارامترهای مورد استفاده در این بررسی به صورت

$$G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} = 0.9, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 0.1667$$

است.

حالت اول: مقدار ضریب اثر متقابل سیال- جامد برای دیوار بالا و پایین برابر $G_{ads}^2 = 0.2, G_{ads}^1 = -0.2$ است. پس از گذشت ۳۰۰۰۰ مرحله زمانی تمام زاویه های خیسی به مقدار تعادلی خود رسیده و برابر θ_1 می شوند. حال ضریب اثر متقابل دیوار کانال در سمت راست را به $G_{ads}^2 = 0.3, G_{ads}^1 = -0.3$ تغییر می دهیم. توجه شود که زمان صفر در نمودار مربوط به زمانی است که قطره به حالت تعادل رسیده باشد (پس از گذشت ۳۰۰۰۰ مرحله زمانی). تغییر در زاویه خیسی

دیوارهای کانال (در اثر عملیات شیمیایی) باعث ایجاد نیرویی برای حرکت قطره می‌شود [۱۴۱]. حل

تحلیلی برای موقعیت مرکز جرم قطره بر حسب زمان در اثر اعمال نیرو به صورت زیر است [۱۴۱]:

$$x_1(t) = \frac{\sigma H (\Delta \cos \theta_{21} + \Delta \cos \theta_{34})}{12(\rho_1 v_1 L_1 + \rho_2 v_2 (L - L_1))} t_s \left(e^{-t/t_s} + \frac{t}{t_s} - 1 \right) \quad (۶۴-۳)$$

$$t_s = H^2 a / 12b \quad (۶۵-۳)$$

$$a = \rho_1 L_1 + \rho_2 (L - L_1) \quad (۶۶-۳)$$

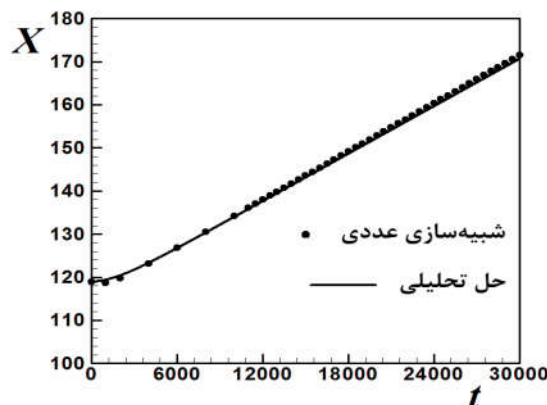
$$b = \rho_1 v_1 L_1 + \rho_2 v_2 (L - L_1) \quad (۶۷-۳)$$

$$\Delta \cos \theta_{21} = \cos \theta_2 - \cos \theta_1 \quad (۶۸-۳)$$

$$\Delta \cos \theta_{34} = \cos \theta_3 - \cos \theta_4 \quad (۶۹-۳)$$

نمودار نتایج محاسبه شده از حل عددی و نتایج تحلیلی در شکل ۳-۱۵ رسم شده است که حل

تحلیلی با خط و مقادیر شبیه‌سازی عددی با دایره نشان داده شده است.



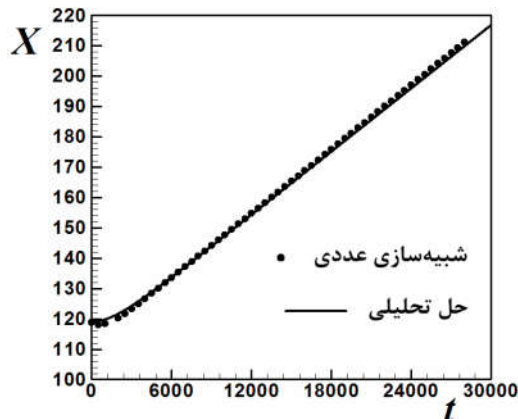
شکل ۳-۱۵: مقایسه حل تحلیلی و نتایج شبیه‌سازی عددی برای موقعیت مرکز جرم قطره بر حسب زمان.

حالت دوم: مقدار ضریب اثر متقابل سیال- جامد برای دیوار بالا و پایین $G_{ads}^2 = 0.2, G_{ads}^1 = -0.2$

است. حال مقدار ضریب اثر متقابل دیواره کانال در سمت راست را به $G_{ads}^2 = 0.4, G_{ads}^1 = -0.4$

تغییر می‌دهیم. نتایج محاسبه شده از حل عددی و نتایج تحلیلی در شکل ۳-۱۶ ترسیم شده که

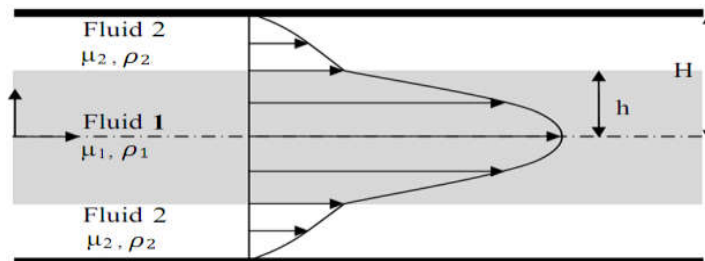
مقادیر حل تحلیلی با خط و مقادیر شبیه‌سازی عددی با دایره نشان داده شده است.



شکل ۳-۱۶: مقایسه حل تحلیلی و نتایج شبهه‌سازی عددی برای موقعیت مرکز جرم قطره برحسب زمان. تا به اینجا برای اینکه نشان دهیم شبهه‌سازی جریان دوفازی درست صورت گرفته است آزمون حباب، آزمون قطره ساکن و جابجایی قطره مخلوط نشدنی در اثر تغییر زاویه در کانال دوبعدی را بررسی کردیم.

۳-۶-۴ آزمون چهارم: بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط‌نشدنی بین دو صفحه

در ادامه به منظور صحت سنجی جریان دو فاز و اتصال درست آن‌ها به بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط‌نشدنی بین دو صفحه موازی می‌پردازیم و توزیع سرعت و ضرایب نفوذپذیری هر فاز را تعیین کرده و با حل تحلیلی مقایسه می‌کنیم. از شرط مرزی تناوب روی مرز چپ و راست و از شرط مرزی عدم لغزش برای مرز بالا و پایین استفاده می‌کنیم. هندسه به صورت زیر است:



شکل ۳-۱۷: هندسه بررسی جریان دو سیال به صورت لایه‌های مخلوط‌نشدنی بین دو صفحه موازی [۱۵۰]. ویسکوزیته سینماتیکی هر دو سیال به صورت $v_1 = c_s^2(\tau_1 - 0.5)$ ، $v_2 = c_s^2(\tau_2 - 0.5)$ است. امتداد کانال را جهت x و جهت عمود بر آن را y در نظر می‌گیریم. در این شبهه‌سازی در لحظه ابتدایی سیال یک در ناحیه $0 \leq |y| \leq h$ (وسط) و سیال دو در ناحیه $h \leq |y| \leq H$ قرار دارد. ناحیه محاسباتی به

صورت 10×101 است. به دلیل استفاده از شرط مرزی متناوب در مرز چپ و راست، تعداد گره به کار رفته در جهت x می‌تواند خیلی کم باشد [۹۳]. نتایج سرعت به دست آمده مربوط به مقطع $x=5$ است. با توجه به اینکه تعداد ۱۰۱ گره در جهت y در نظر گرفته شده پس عرض کانال (در جهت y) برابر ۱۰۰ است که طبق هندسه مسئله $H=50$ خواهد بود. در این شبیه‌سازی مقادیر پارامترهای به کار برده شده به صورت $G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} = 1.8, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 1$ است. چگالی سیال یک در لحظه ابتدایی در ناحیه میانی و کناری به‌طور یکنواخت و به ترتیب ۱ و ۰/۰۶ و چگالی سیال دو ۰/۰۶ و ۱ در نظر گرفته شده است. همچنین سرعت اولیه هر دو سیال صفر بوده و از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است. واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولتزمن هستند. این مسئله به دو صورت مدل شده است. در مدل اول از یک نیروی گرانشی [۱۴۷] و در مدل دوم از گرادیان فشار [۸۹ و ۱۳۸] در جهت x برای حرکت سیال استفاده شده است. شرایط مرزی روی دیوار جامد به دو دسته‌ی گره‌های خشک و خیس تقسیم می‌شوند. در اینجا گره‌های مرزی از نوع گره‌های خیس است که بخشی از ناحیه سیال در نظر گرفته شده و توابع توزیع برای آن‌ها برحسب خواص ماکروسکوپی (چگالی و سرعت) محاسبه می‌شوند. همچنین این گره‌ها در شبیه‌سازی جریان سیال شرکت می‌کنند و روی آن‌ها برخورد صورت می‌گیرد. بعد از مرحله برخورد و جاری شدن، روی گره‌های مرزی توابع توزیعی که در جهت ورود به سیال هستند از شرط مرزی تعیین می‌شوند. همان‌طوری که می‌دانیم برای بیان اثر متقابل سیال-سیال در هر گره، به چگالی گره‌های همسایه نیاز داریم. در گره‌های که روی مرز سمت چپ قرار گرفته‌اند، برای بیان اثر متقابل سیال-سیال به چگالی گره‌های قبل از مرز سمت چپ نیاز پیدا می‌کنیم که به دلیل وجود شرط مرزی تناوب روی این مرز، چگالی گره‌های قبل از این مرز با چگالی مرز سمت راست برابر است. در گره‌های که روی مرز سمت راست قرار گرفته‌اند، برای بیان اثر متقابل سیال-سیال، به چگالی گره‌های بعد از آن نیاز پیدا می‌کنیم که به دلیل وجود تناوب، چگالی گره‌های بعد از این مرز با چگالی مرز سمت چپ برابر است. برای بیان اثر متقابل سیال-سیال در گره‌های روی مرز بالا به چگالی گره‌های بالای آن نیاز است که چگالی آن‌ها با چگالی مرز

برابر است. علت این است که عملیات جاری شدن و اعمال شرط مرزی متناظر با این است که گره‌های سیال فرضی در خارج ناحیه محاسباتی قرار دارند و در گره‌های مرزی جاری می‌شوند و شرایط مرزی هیدرودینامیکی درستی را در مرز ایجاد می‌کنند. در گره‌هایی که روی مرز پایین قرار گرفته‌اند، برای بیان این اثر به چگالی گره‌های پایین آن نیاز است که با چگالی مرز برابر در نظر گرفته می‌شوند که علت آن مشابه دلیل ذکر شده برای گره‌های مرز بالا است. شرط همگرایی در این بررسی به صورت زیر است:

$$\sqrt{\sum_{i,j} (u_{i,j}^m - u_{i,j}^{m-1})^2} / \sqrt{\sum_{i,j} (u_{i,j}^m)^2} \leq 10^{-12} \quad (70-3)$$

که u نشان‌دهنده مؤلفه افقی سرعت است که از رابطه ۳-۷۱ محاسبه می‌شود:

$$\rho u = \sum_k \rho_k u_k + (1/2) \sum_k F_k, F_k = F_{int,k} + F_{ads,k} + F_{ext,k} \quad (71-3)$$

همچنین بالانویس $m-1, m$ نشان‌دهنده دو مرحله زمانی متوالی است.

مدل اول: برای حرکت سیال از یک نیروی گرانشی در جهت x استفاده می‌شود. نیروی گرانشی به صورت $\vec{F}_{ext}^\alpha(\vec{x}, t) = G \rho^\alpha \vec{x}$ [۱۴۷] و نیروی کل $(\vec{F}_{total}^\alpha = F_{int}^\alpha + F_{ads}^\alpha + F_{ext}^\alpha)$ وارد بر ذرات سیال شامل نیروی بین ذرات سیال، نیروی بین ذرات سیال و جامد و نیروی خارجی است [۸۹] که نیروی خارجی باعث ایجاد گرادیان فشار در جهت x و در نتیجه جریان سیال در این جهت می‌شود. حل تحلیلی سرعت در کانال به صورت زیر است [۱۴۴]:

$$u_1(x) = -A_1 y^2 + D_1 \quad 0 \leq y \leq h \quad (72-3)$$

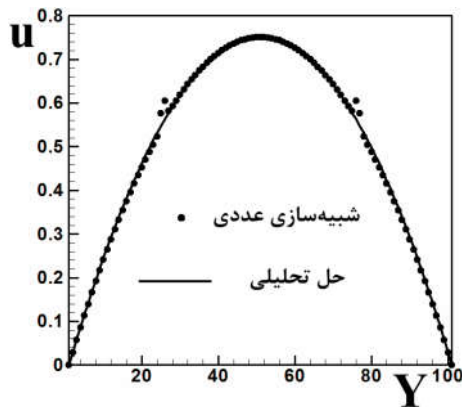
$$u_2(x) = -A_2 y^2 + C_2 y + D_2 \quad h \leq y \leq H \quad (73-3)$$

$$A_1 = G_1 / 2\nu_1, A_2 = G_2 / 2\nu_2, C_2 = 2(A_2 - MA_1)h \quad (74-3)$$

$$D_2 = A_2 H^2 - C_2 H, M = \mu_1 / \mu_2 \quad (75-3)$$

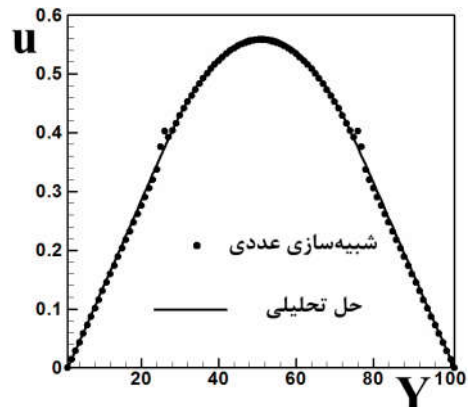
$$D_1 = (A_1 - A_2)h^2 + C_2 h + D_2 \quad (76-3)$$

نتایج شبیه‌سازی عددی و مقایسه آن‌ها با نتایج تحلیلی در شکل ۳-۱۸ تا ۳-۲۰ ترسیم شده است.

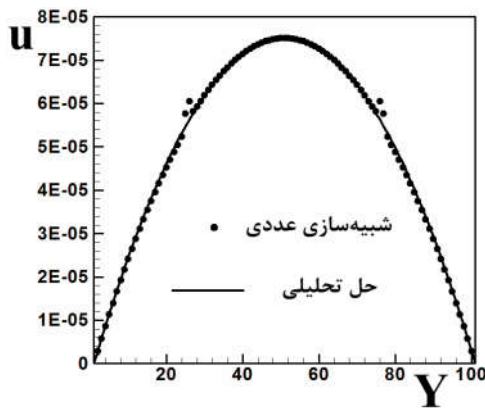


نیروی گرانشی به هر دو سیال وارد شده است
 $G_1 = G_2 = 10^{-4}$

شکل ۳-۱۸: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$).

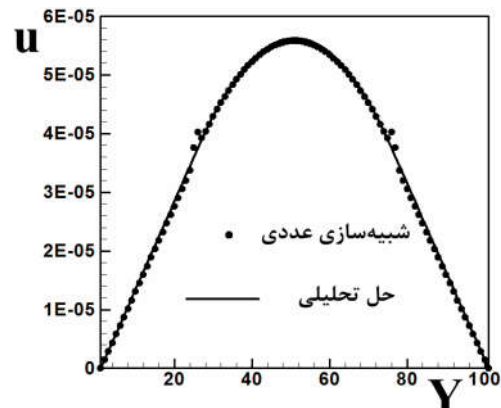


نیروی گرانشی به سیال یک وارد شده است
 $G_1 = 10^{-4}, G_2 = 0$

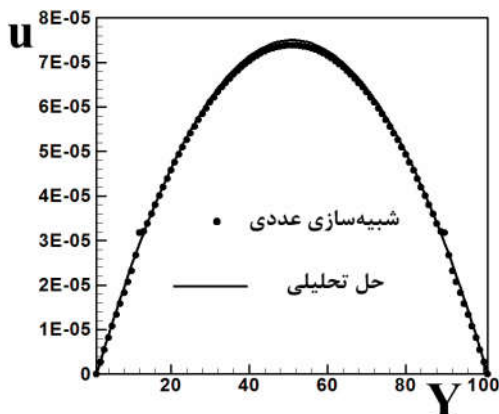


نیروی گرانشی به هر دو سیال وارد شده است
 $G_1 = G_2 = 10^{-8}$

شکل ۳-۱۹: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$).

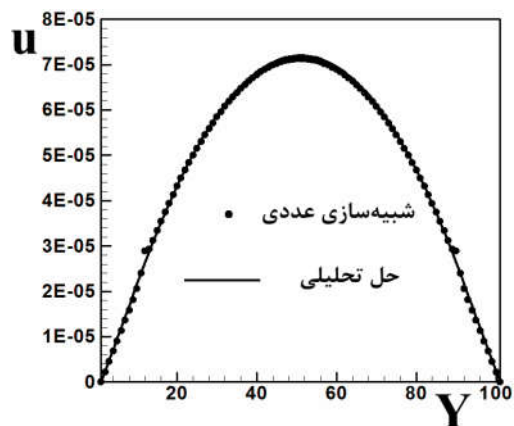


نیروی گرانشی به سیال یک وارد شده است
 $G_1 = 10^{-8}, G_2 = 0$



نیروی گرانشی به هر دو سیال وارد شده است
 $G_1 = G_2 = 10^{-8}$

شکل ۳-۲۰: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=40$).



نیروی گرانشی به سیال یک وارد شده است
 $G_1 = 10^{-8}, G_2 = 0$

حضور نیروی گرانشی در مسئله به‌منظور اعمال گرادیان فشار باعث ایجاد دو تغییر زیر می‌شود:

۱- سرعت تعادلی به صورت $F_{total}^\alpha = F_{int}^\alpha + F_{ads}^\alpha + F_{ext}^\alpha$, $u^{eq} = u' + \tau^\alpha F_{total}^\alpha / \rho^\alpha(\bar{x})$ اصلاح گردد.

۲- برای محاسبه سرعت شبیه‌سازی شده که سرعت کل مخلوط دو سیال است از رابطه

$$\rho u = \sum_k \rho_k u_k + (1/2) \sum_k F_k, F_k = F_{int}^k + F_{ads}^k + F_{ext}^k \quad [144].$$

مدل دوم: برای حرکت سیال از گرادیان فشار در جهت x استفاده می‌شود که مقدار آن برابر G است.

نیروی گرانشی به صورت زیر مدل می‌شود [138]:

$$f_i^k(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i^k(x, t) = -\frac{f_i^k(x, t) - f_i^{k(eq)}(x, t)}{\tau_k} + g_i \quad (3-77)$$

که در این رابطه g_i به صورت $g_i = (w_i \Delta t / C_s^2) G e_i$ تعریف می‌شود [138]. در این مدل‌سازی

تغییراتی که باید صورت گیرد به صورت زیر است:

۱- برای محاسبه سرعت شبیه‌سازی شده که سرعت کل مخلوط دو سیال است از رابطه

$$\rho u = \sum_k \rho_k u_k + (1/2) \sum_k F_k, F_k = F_{int}^k + F_{ads}^k \quad [144].$$

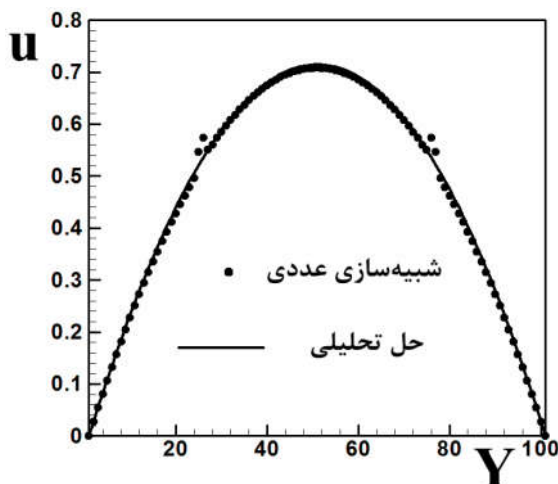
۲- در مرحله برخورد باید تغییرات معادله ۷۷ لحاظ شود [138] و توجه شود که سرعت تعادلی

برخلاف مدل اول تغییری نمی‌کند و با رابطه $F_{total}^\alpha = F_{int}^\alpha + F_{ads}^\alpha$, $u^{eq} = u' + (\tau^\alpha F_{total}^\alpha / \rho^\alpha(x))$ محاسبه می‌شود.

مقایسه می‌شود.

بعد از حل مسئله و رسیدن به جواب حالت پایا، توزیع سرعت اندازه‌گیری شده و با نتایج تحلیلی

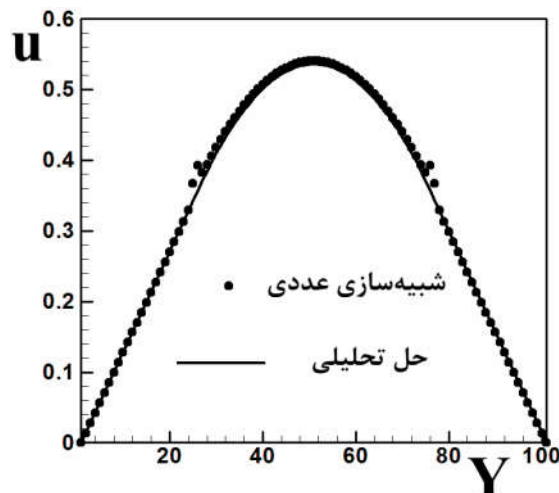
مقایسه می‌شود که در شکل ۳-۲۱ نشان داده شده است.



گرادیان فشار به هر دو سیال وارد شده است

$$G_1 = G_2 = 10^{-4}$$

شکل ۳-۲۱: مقایسه توزیع سرعت اندازه گیری شده با نتایج تحلیلی ($h=25$).



گرادیان فشار به سیال یک وارد شده است

$$G_1 = 10^{-4}, G_2 = 0$$

همان طوری که می دانیم مدل شبکه بولتزمن مورد استفاده مدل چندفازی و چند مؤلفه است. در این آزمون دو مؤلفه وجود دارد که مؤلفه یک سیال وسط و مؤلفه دو سیال کناری است. این دو مؤلفه در کل ناحیه حضور دارند بدین معنی که مؤلفه یک در کل ناحیه محاسباتی مقدار دارد که مقدار اصلی آن مربوط به ناحیه وسط و دارای مقدار ناچیزی در ناحیه کناری است. مؤلفه دو دارای مقدار اصلی در ناحیه کناری و مقدار ناچیزی در ناحیه وسط است. توجه شود که در روش شان و چن مرز مشترک دو سیال دارای ضخامت است [۱۵۰].

در این بررسی ضخامت مرز مشترک دو سیال دو گره است که روی دو ردیف گره افقی قرار گرفته اند. همچنین مرز مشترک دو سیال به دلیل نیروهای وارده به آن حرکت می کند [۱۵۰]. نتایج نشان می دهد که تطابق خوبی بین نتایج عددی و تحلیلی در نقاط دور از مرز مشترک وجود دارد. از دلایل عدم تطابق در مرز مشترک این است که در حل تحلیلی مرز مشترک تیز بوده و ضخامتش صفر است ولی در شبهه سازی عددی مرز مشترک دارای ضخامت است [۱۴۴].

در روش شان و چن چند گونه، یک سیال در توده سیال دیگر قرار دارد که سهم هر سیال به قدرت اثر متقابل بین دو سیال وابسته است [۱۴۴]. در این مطالعه مقداری که برای قدرت اثر متقابل بین دو

سیال انتخاب شده باعث می‌شود که در توده یک سیال، سهم سیال دیگر کمتر از ۳ درصد چگالی کل باشد. این بدین معنی است که در مرز مشترک دو سیال، سهم سیال یک از ۹۷ درصد به ۳ درصد کاهش و سهم سیال دو از ۳ درصد به ۹۷ درصد افزایش می‌یابد. البته این رفتار به دلیل غیر قابل مخلوط بودن دو سیال منطقی است. همچنین تغییرات ذکر شده تقریباً در شش گره یا پنج شبکه صورت می‌گیرد. توجه شود که مرز مشترک دو سیال مکانی است که چگالی‌های برابر داشته باشند [۱۴۴].

۳-۶-۵ آزمون پنجم: محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی در جریان دوفازی

در این قسمت به محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی هر سیال به صورت تابعی از اشباع سیال یک (نسبت سیال یک به کل) می‌پردازیم. در این آزمون برای اعمال شرط عدم لغزش از گره‌های مرزی نوع خیس استفاده شده و حرکت ناشی از نیروی گرانشی به صورت $F_{ext}^{\alpha}(x,t) = G\rho^{\alpha}x$ است [۱۴۷]. مشابه آزمون قبل تعداد گره در جهت y ، ۱۰۱ است بنابراین طول کانال در این جهت ۱۰۰ خواهد بود. با توجه به شکل ۳-۱۷، $H=50$ ، اشباع سیال یک برابر h/H و اشباع سیال دو برابر $1-h/H$ است. در این شبیه‌سازی مقادیر پارامترهای به کار برده شده به صورت $G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} = 1.8, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 0.1667$ است. حل تحلیلی محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی هر سیال در زیر توضیح داده شده است [۱۴۴ و ۱۵۱]:

در جریانی که به اندازه کافی آرام، یک‌بعدی، پایا و تک سیال باشد قانون دارسی بیان می‌کند:

$$Q = \frac{kA}{\mu} f \quad (۷۸-۳)$$

که Q دبی حجمی جریان سیال، A مساحت سطح مقطع عمود بر مسیر، μ ویسکوزیته دینامیکی سیال و f نیرو است. ضریب تناسب k در رابطه بالا ضریب نفوذپذیری است. بسط درست قانون دارسی برای شبیه‌سازی جریان دو سیال مخلوط‌نشده در محیط متخلخل به صورت زیر است:

$$Q_i = \frac{k_i k A}{\mu_i} f_i \quad (79-3)$$

k_i ضریب نفوذپذیری نسبی سیال آم است که فقط توسط ساختار حفره محیط متخلخل تعیین نمی-شود بلکه به مجموعه مواد جامد، سیال یک و سیال دو وابسته است. در این رابطه فرض شده که هیچ اتصالی بین دو سیال در مرز مشترک وجود ندارد. مطالعات اخیر نشان می‌دهد شکل اصلاح‌شده قانون دارسی که شامل عبارت اتصال بین دو سیال است جریان را بهتر توصیف می‌کند که در معادله ۸۰ و ۸۱ بیان شده است:

$$Q_1 = \frac{k_{11} k A}{\mu_1} f_1 + \frac{k_{12} k A}{\mu_2} f_2 \quad (80-3)$$

$$Q_2 = \frac{k_{21} k A}{\mu_1} f_1 + \frac{k_{22} k A}{\mu_2} f_2 \quad (81-3)$$

که k_{ij} اتصال بین سیال i و نیروی f_j است. در این آزمون، سیال داخلی یک و سیال بیرونی دو در نظر گرفته می‌شود. اگر حالتی را در نظر بگیریم که $G_1 \neq 0, G_2 = 0$ ، رابطه بالا به صورت زیر ساده می-شود:

$$Q_1|_{G_2=0} = \frac{k_{11} k A}{\mu_1} f_1 + \frac{k_{12} k A}{\mu_2} f_2 \xrightarrow{G_2=f_2=0} Q_1|_{G_2=0} = \frac{k_{11} k A}{\mu_1} f_1 \rightarrow k_{11} = \frac{Q_1|_{G_2=0}}{k A / \mu_1} \quad (82-3)$$

$$Q_2|_{G_2=0} = \frac{k_{21} k A}{\mu_1} f_1 + \frac{k_{22} k A}{\mu_2} f_2 \xrightarrow{G_2=f_2=0} Q_2|_{G_2=0} = \frac{k_{21} k A}{\mu_1} f_1 \rightarrow k_{21} = \frac{Q_2|_{G_2=0}}{k A / \mu_1} \quad (83-3)$$

با توجه به توضیحات بالا عبارت $k A / \mu_1$ دبی جریان در حالتی است که سیال یک در کانال باشد. پس:

$$k_{11} = \frac{Q_1|_{G_2=0}}{k A / \mu_1} = \frac{Q_1|_{G_2=0}}{Q_{10}} = \frac{\int_0^h u_1 dy}{\int_0^H u_1 dy}, \quad k_{21} = \frac{Q_2|_{G_2=0}}{k A / \mu_1} = \frac{Q_2|_{G_2=0}}{Q_{10}} = \frac{\int_h^H u_2 dy}{\int_0^H u_1 dy} \quad (84-3)$$

Q_{10} نشان‌دهنده مقدار دبی عبوری از کانال است زمانی که کل کانال با سیال یک پر شده باشد و در اثر اعمال G_1 سیال در کانال حرکت کند.

در حالتی که $G_1 = 0, G_2 \neq 0$ باشد، روابط ۳-۸۰ و ۳-۸۱ به صورت زیر ساده می‌شوند:

$$Q_1|_{G_1=0} = \frac{k_{11}kA}{\mu_1}f_1 + \frac{k_{12}kA}{\mu_2}f_2 \xrightarrow{G_1=f_1=0} Q_1|_{G_1=0} = \frac{k_{12}kA}{\mu_2}f_2 \rightarrow k_{12} = \frac{Q_1|_{G_1=0}}{kA/\mu_2} \quad (۸۵-۳)$$

$$Q_2|_{G_1=0} = \frac{k_{21}kA}{\mu_1}f_1 + \frac{k_{22}kA}{\mu_2}f_2 \xrightarrow{G_1=f_1=0} Q_2|_{G_1=0} = \frac{k_{22}kA}{\mu_2}f_2 \rightarrow k_{22} = \frac{Q_2|_{G_1=0}}{kA/\mu_2} \quad (۸۶-۳)$$

که عبارت kA/μ_2 دبی جریان در حالتی است که تنها سیال دو در کانال باشد. پس:

$$k_{12} = \frac{Q_1|_{G_1=0}}{kA/\mu_2} = \frac{Q_1|_{G_1=0}}{Q_{20}} = \frac{\int_0^h u_1 dy}{\int_0^H u_2 dy}, k_{22} = \frac{Q_2|_{G_1=0}}{kA/\mu_2} = \frac{Q_2|_{G_1=0}}{Q_{20}} = \frac{\int_h^H u_2 dy}{\int_0^H u_2 dy} \quad (۸۷-۳)$$

Q_{20} نشان‌دهنده مقدار دبی عبوری از کانال است وقتی کل کانال با سیال دو پر شده باشد و در اثر اعمال G_2 سیال در کانال حرکت کند. حال با جایگذاری روابط سرعت در کانال، دبی‌های بالا محاسبه شده و ضریب نفوذپذیری نسبی هر سیال از روابط زیر تعیین می‌گردد:

$$k_{11} = Q_1|_{G_2=0} / Q_{10} = \phi^3 + 3M\phi^2 - 3M\phi^3 \quad (۸۸-۳)$$

$$k_{12} = Q_1|_{G_1=0} / Q_{20} = 1.5\phi(1-\phi)^2 \quad (۸۹-۳)$$

$$k_{21} = Q_2|_{G_2=0} / Q_{10} = 1.5M\phi(1-\phi)^2 \quad (۹۰-۳)$$

$$k_{22} = Q_2|_{G_1=0} / Q_{20} = (1-\phi)^3 \quad (۹۱-۳)$$

در این روابط $\phi = h/H$, $M = \mu_1/\mu_2$ است.

برای مثال روند محاسبه k_{11} در زیر آورده شده است:

$$\begin{aligned}
Q_1|_{G_2=0} &= \int_0^h u_1 dy = \int_0^h (-A_1 y^2 + D_1) dy = \\
&\int_0^h (-A_1 y^2 + (A_1 - A_2)h^2 + C_2 h + D_2) dy = \\
&\frac{-A_1 h^3}{3} + (A_1 - A_2)h^3 + 2(A_2 - MA_1)h^3 + A_2 H^2 h - 2(A_2 - MA_1)Hh^2 = \\
&\left[\frac{2}{3}A_1 h^3 - A_2 h^3 + 2(A_2 - MA_1)h^3 + A_2 H^2 h - 2(A_2 - MA_1)Hh^2 \right] \Big|_{G_2=0} \quad (92-3) \\
&= \frac{2}{3}A_1 h^3 - 2MA_1 h^3 + 2MA_1 Hh^2
\end{aligned}$$

$$Q_{10} = \int_0^H u_1 dy = \int_0^H (-A_1 y^2 + A_1 H^2) dy = \frac{-1}{3}A_1 H^3 + A_1 H^3 = \frac{2}{3}A_1 H^3$$

$$k_{11} = Q_1|_{G_2=0} / Q_{10} = \frac{(2/3)A_1 h^3 - 2MA_1 h^3 + 2MA_1 Hh^2}{(2/3)A_1 H^3} =$$

$$h^3/H^3 - 3M(h^3/H^3) + 3M(h^2/H^2) = \phi^3 - 3M\phi^3 + 3M\phi^2$$

روابط بالا روابط تحلیلی برای محاسبه ضریب نفوذپذیری نسبی هر سیال است. اگر بخواهیم مقادیر

همین ضرایب را به روش شبیه‌سازی عددی تعیین کنیم به صورت زیر عمل می‌شود:

ابتدا کل کانال با سیال یک پر شده و نیروی G_1 به آن اعمال می‌شود. حال با انتگرال‌گیری از توزیع

سرعت تعیین‌شده روی نصف کانال، دبی عبوری از نصف کانال تعیین می‌شود. عملیات بالا باید برای

سیال دو نیز صورت گیرد؛ یعنی کل کانال با سیال دو پر شده، نیروی G_2 به آن اعمال و سپس دبی

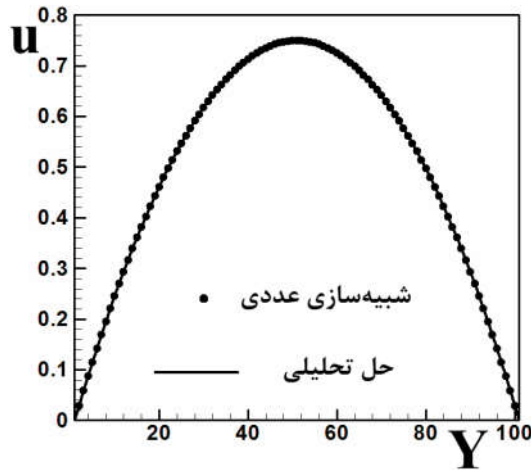
عبوری از نصف کانال بدست آید. در بررسی جریان دوفازی در کانال، حالتی مورد بررسی قرار گرفته

که چگالی، زمان آسایش و نیروی وارد شده برای حرکت سیال برای هر دو سیال برابر است بنابراین

نتایج دبی و توزیع سرعت برای جریان تک فازی هرکدام از سیال‌های یک و دو یکسان به دست می‌-

آید. توزیع سرعت هر سیال در کانال به صورت $u_1 = -A_1 y^2 + A_1 H^2$ است که در شکل ۳-۲۲ رسم

شده است.



شکل ۳-۲۲: مقایسه توزیع سرعت اندازه گیری شده و نتایج تحلیلی در حالت تک فازی و $G=10^{-8}$.
 در مرحله بعد برای تعیین ضرایب نفوذپذیری، جریان دوفازی را در حالت های $G_1 = 10^{-8}, G_2 = 0$ و
 $G_1 = 0, G_2 = 10^{-8}$ حل کرده و در هر حالت دبی های عبوری از ناحیه وسط ($0 \leq y \leq h$) و ناحیه
 کناری ($h \leq y \leq H$) را تعیین و در روابط زیر جایگذاری می کنیم.

$$k_{11} = Q_1|_{G_2=0} / Q_{10} \quad (93-3)$$

$$k_{12} = Q_1|_{G_1=0} / Q_{20} \quad (94-3)$$

$$k_{21} = Q_2|_{G_2=0} / Q_{10} \quad (95-3)$$

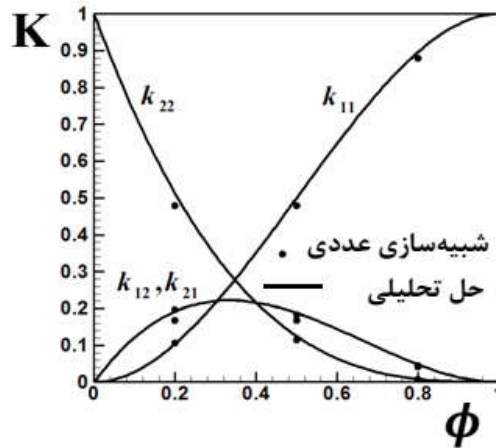
$$k_{22} = Q_2|_{G_1=0} / Q_{20} \quad (96-3)$$

روند بیان شده در بالا برای محاسبه ضرایب نفوذپذیری هر سیال در سه حالت $h=10, 25, 40$ به طور
 خلاصه در جدول ۳-۷ آورده شده است.

جدول ۳-۷: محاسبه دبی های عبوری در حالت های مختلف.

$Q_2 _{G_1=0} = \int_a^b u_2 dy$	$Q_2 _{G_2=0} = \int_a^b u_2 dy$	$Q_1 _{G_1=0} = \int_0^a u_1 dy$	$Q_1 _{G_2=0} = \int_0^a u_1 dy$	$Q_{20} = \int_0^b u_2 dy$	$Q_{10} = \int_0^b u_1 dy$	
۰/۰۰۱۲	۰/۰۰۰۴۹۰۱۷	۰/۰۰۰۴۲۰۲۷	۰/۰۰۰۲۶۶۵۴	۰/۰۰۲۵	۰/۰۰۲۵	$h=10$
۰/۰۰۰۲۸۷۰۷	۰/۰۰۰۴۵۹۳۴	۰۰۰۴۲۰۴۳	۰/۰۰۱۲	۰/۰۰۲۵	۰/۰۰۲۵	$h=25$
۰/۰۰۰۰۱۷۸۰۸	۰/۰۰۰۱۱۴۳۱	۰/۰۰۰۱۰۴۲۷	۰/۰۰۲۲	۰/۰۰۲۵	۰/۰۰۲۵	$h=40$

همچنین نمودار ضریب نفوذپذیری برای این سه حالت به صورت زیر است.

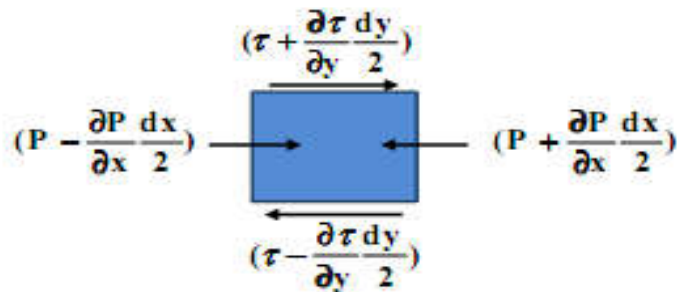


شکل ۳-۲۳: مقایسه نتایج ضریب نفوذپذیری عددی و تحلیلی.

۳-۶-۶ آزمون ششم: شبیه‌سازی جریان سه سیال مخلوط‌نشده در کانال

در این قسمت می‌خواهیم جریان سه سیال مخلوط‌نشده در کانال را شبیه‌سازی کنیم. سیال یک در ناحیه وسط، سیال سه کنار مرز و سیال دو بین سیال یک و سه قرار دارد. ضخامت سیال یک 2a، ضخامت سیال دو 2b و ضخامت سیال سه 2c انتخاب شده است.

المانی از سیال به صورت زیر در نظر می‌گیریم:



شکل ۳-۲۴: المانی از سیال برای شبیه‌سازی جریان سه سیال مخلوط‌نشده در کانال.

$$\sum f_x = 0 \rightarrow \left(\tau + \frac{\partial \tau}{\partial y} \frac{dy}{2}\right) dx - \left(\tau - \frac{\partial \tau}{\partial y} \frac{dy}{2}\right) dx + \left(P - \frac{\partial P}{\partial x} \frac{dx}{2}\right) dy -$$

$$\left(P + \frac{\partial P}{\partial x} \frac{dx}{2}\right) dy = 0 \rightarrow \frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial P}{\partial x} \rightarrow u_1 = \frac{\partial P}{\partial x} \frac{y^2}{2\mu_1} + \frac{c_1}{\mu_1} y + c_2, \quad (97-3)$$

$$u_2 = \frac{\partial P}{\partial x} \frac{y^2}{2\mu_2} + \frac{c_3}{\mu_2} y + c_4, u_3 = \frac{\partial P}{\partial x} \frac{y^2}{2\mu_3} + \frac{c_5}{\mu_3} y + c_6$$

شرایط مرزی برای حل معادلات بالا به صورت زیر است:

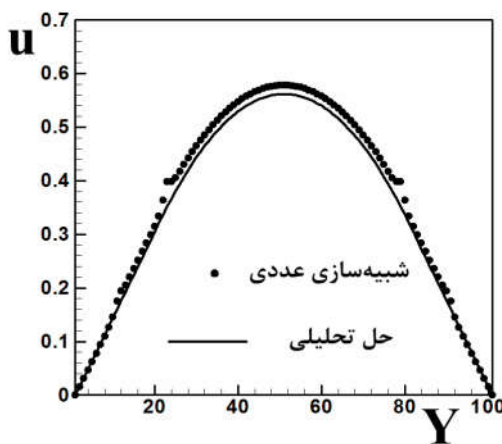
$$y = 0 \rightarrow \frac{\partial u_1}{\partial y} = 0, \quad y = a \rightarrow \mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} = \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y}, \quad u_1 = u_2 \quad (98-3)$$

$$y = b \rightarrow \mu_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} = \mu_3 \frac{\partial u_3}{\partial y}, \quad u_2 = u_3, \quad y = c \rightarrow u_3 = 0 \quad (99-3)$$

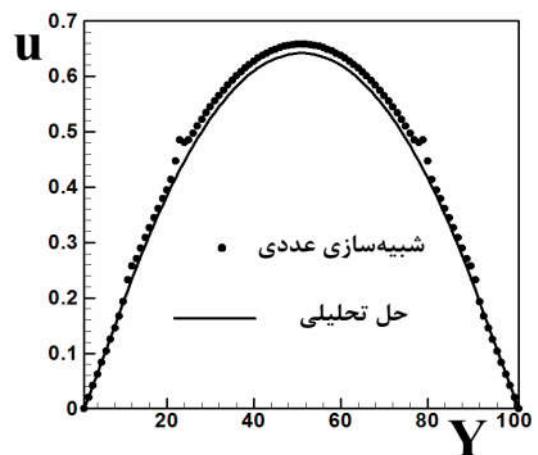
با اعمال این شرایط مرزی، ضرایب رابطه توزیع سرعت (C_1 تا C_6) به صورت زیر محاسبه می‌شوند (در روابط زیر f گرادیان فشار است):

$$\begin{aligned} A_1 &= -f_1 / (2\mu_1), \quad A_2 = -f_2 / (2\mu_2), \quad A_3 = -f_3 / (2\mu_3) \\ C_1 &= 0, \quad C_2 = (A_2 - A_1)a^2 + a(C_3 / \mu_2) + C_4, \quad C_3 = a(f_1 - f_2), \\ C_5 &= b(f_2 - f_3) + C_3, \quad C_4 = (A_3 - A_2)b^2 + b(C_5 / \mu_3) - (C_3 / \mu_2) + C_6, \\ C_6 &= -A_3 C^2 - C_5(C / \mu_3) \end{aligned} \quad (100-3)$$

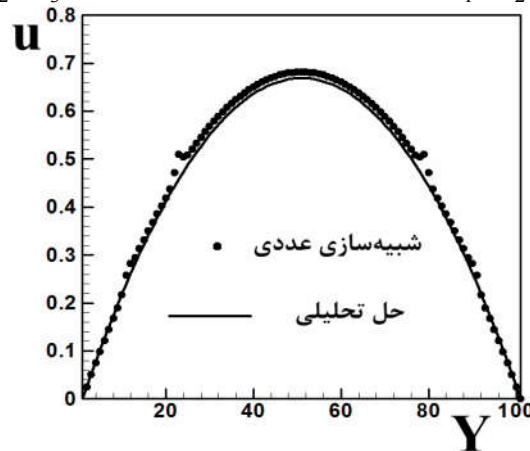
در این آزمون شبکه 101×101 بوده و نتایج مربوط به سرعت مقطع $x=5$ به صورت زیر است:



گرادیان فشار به سیال یک وارد شده است
 $G_1=10^{-4}, G_2=G_3=0$



گرادیان فشار به سیال یک و دو وارد شده است
 $G_1=G_2=10^{-4}, G_3=0$



گرادیان فشار به هر سه سیال وارد شده است
 $G_1=G_2=G_3=10^{-4}$

شکل ۳-۲۵: مقایسه توزیع سرعت اندازه‌گیری شده و نتایج تحلیلی ($b=40, a=30$).

در این شبیه‌سازی در لحظه ابتدایی فاز یک در ناحیه $0 \leq |y| \leq a$ ، فاز دو در ناحیه $a < |y| < b$ و فاز سه در ناحیه $b < |y| < c$ قرار دارد. چگالی هر فاز در لحظه ابتدایی در ناحیه حضورش به‌طور یکنواخت برابر ۱ و در بقیه نقاط برابر ۰/۰۶ است. سرعت اولیه هر سه فاز صفر و از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است. همچنین واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولترمن بوده و پارامترهای مورد استفاده به صورت $G_{11} = G_{22} = G_{33} = 0$ ، $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = 1$ ، $\nu_1 = \nu_2 = \nu_3 = 0.1667$ ، $G_{12} = G_{21} = G_{13} = G_{31} = G_{23} = G_{32} = 1.8$ هستند. برای حالتی که گرادیان فشار به سیال یک و دو وارد شود مقدار خطا در مرکز کانال محاسبه شده است که برابر ۲/۶۵٪ است.

۳-۶-۷ آزمون هفتم: شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در فرآیند جابجایی دو

سیال مخلوط‌نشدنی در کانال دوبعدی

همان‌طور که می‌دانیم تغییر شکل مرز مشترک و همچنین جابجایی دو سیال مخلوط‌نشدنی توسط پارامترهایی همچون نیروی ویسکوز، کشش سطحی و گرانش توصیف می‌شود که این پارامترها، اعداد بدون بعدی را تشکیل داده که معیار سنجش جریان سیال‌های مخلوط‌نشدنی هستند [۱۴۵]. این اعداد شامل عدد موینگی، عدد باند، نسبت ویسکوزیته سیال جابجا شده به جابجا کننده می‌باشند [۱۴۵]. همچنین زاویه خیسی روی رفتار جریان سیال‌ها اثر می‌گذارد [۱۴۵]. در جابجایی سیال‌های مخلوط‌نشدنی در محیط‌های متخلخل، عدد موینگی و نسبت ویسکوزیته دینامیکی مهم‌ترین فاکتورهای مؤثر بر رفتار جابجایی سیال هستند. به‌طور کلی سه نوع الگوی جابجایی در محیط متخلخل وجود دارد: الگوی انگشتی موینگی، الگوی انگشتی ویسکوز و الگوی پایدار [۱۰۶]. جریان‌های چند فازی اهمیت زیادی در کاربردهای صنعتی شامل شیمیایی، زیست-شیمیایی^۱ و مهندسی نفت دارند [۱۵۲]. وقتی یک سیال با ویسکوزیته کمتر بخواهد سیالی با ویسکوزیته بیشتر را جابجا کند، مرز مشترک دو سیال ممکن است ناپایدار شده و منجر به نفوذ سیال اول در سیال دوم به

¹ Biochemical

صورت یک انگشت^۱ یا زبانه^۲ شود [۱۵۳]. تشکیل الگوی انگشت را پدیده انگشتی ویسکوز می‌نامند که در کاربردهای بی‌شماری از صنعت و فناوری مانند تجزیه دی‌اکسید کربن مربوط به زمین‌شناسی و اصلاح آلاینده‌های زیرزمینی اتفاق می‌افتد [۱۵۲]. فهم این فرآیند حرکتی به دلیل وابستگی به عوامل مختلف، پیچیده است که می‌توان برای نمونه به استفاده از آب برای استخراج نفت اشاره کرد [۱۵۳]. یک مدل برای مطالعه پدیده انگشتی ویسکوز استفاده از سلول هل-شاو^۳ [۱۵۴] است که ناحیه جریان سیال، شامل فاصله‌ای باریک بین دو صفحه موازی است [۱۵۳]. تحلیل ناپایداری حرکت انگشتی اولین بار توسط سافمن^۴ و تیلور^۵ [۱۵۵] ارائه شد.

در این قسمت می‌خواهیم با استفاده از مدل D_2Q_9 به شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در فرآیند جابجایی دو سیال مخلوط‌نشده در کانال دوبعدی پردازیم. به‌طور کلی چهار پارامتر عنوان شده در بالا (عدد موینگی، عدد باند، نسبت ویسکوزیته و زاویه خیزی) بر رویداد یا عدم رویداد پدیده انگشتی ویسکوز و الگوی انگشتی آن (طول انگشتی و عرض آن) اثر می‌گذارند [۱۴۵]. عدد موینگی به صورت نسبت نیروی ویسکوز به کشش سطحی ($Ca = u_0 \rho \nu / \sigma$) تعریف می‌شود که u_0 سرعت سیال جابجا کننده در ورودی، ρ و ν چگالی و ویسکوزیته سینماتیکی سیال جابجا کننده در لحظه ابتدایی و σ کشش سطحی بین دو سیال است [۱۵۲]. برای بررسی تغییرات عدد موینگی در مسئله می‌توان سرعت ورودی سیال جابجا کننده را تغییر داد. عدد باند به صورت نسبت نیروی گرانش به کشش سطحی ($Bo = \rho g H^2 / \sigma$) تعریف می‌شود [۱۴۵] که g شتاب گرانش و H طول مشخصه است که عرض کانال در نظر گرفته می‌شود [۱۱۲]. پارامتر بعدی نسبت ویسکوزیته سیال جابجا شده به سیال جابجا کننده ($M = \nu_2 / \nu_1 = (\tau_2 - 0.5) / (\tau_1 - 0.5)$) است [۱۴۴ و ۱۴۷]. شرایط اولیه مسئله به این صورت است که در زمان ابتدایی، اولین ستون از کانال شامل سیال یک و بقیه کانال

¹ Finger

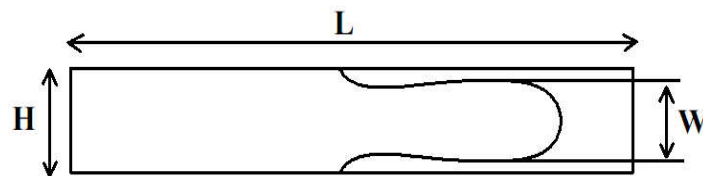
² Tongue

³ Hele-Shaw cell

⁴ Saffman

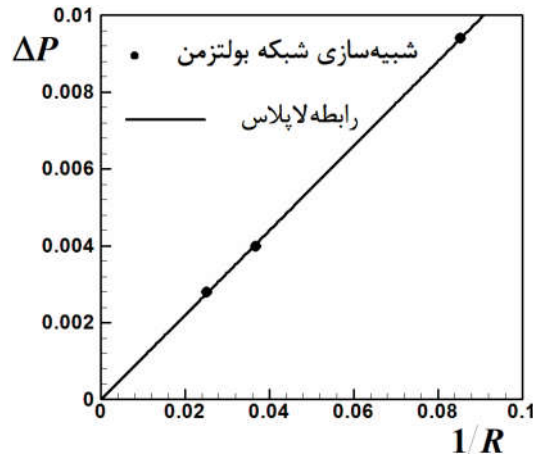
⁵ Taylor

توسط سیال دو اشغال شده است. تعداد گره‌های محاسباتی به کار رفته همانند مرجع [۱۴۴، ۱۵۲ و ۱۵۶] 66×400 است. شرایط مرزی برگشت به عقب با دیوار میانی برای ایجاد شرط عدم لغزش روی دیوار بالا و پایین، شرط مرزی در ورودی به صورت سرعت صفر برای سیال دو و سرعت ثابت u_0 (طرح زو و هی^۱ [۱۵۷]) برای سیال یک استفاده شده است. شرط مرزی در خروجی، مرز باز است [۱۴۵ و ۱۵۲] که برای اعمال آن مشتق سرعت در خروجی صفر قرار داده شده یعنی مقادیر توابع توزیع ذرات در خروجی و گره‌های قبل از آن یکسان در نظر گرفته می‌شوند [۱۳۴]. هندسه این آزمون در شکل ۳-۲۶ نشان داده شده که طول کانال L و عرض آن H است.



شکل ۳-۲۶: شبیه‌سازی پدیده حرکت انگشتی ویسکوز در فرآیند جابجایی دو سیال مخلوط‌نشده در کانال دوبعدی. برای انجام این شبیه‌سازی، اثر نیروی گرانش و زاویه خیسی را بررسی نمی‌کنیم پس پارامترهای متناظر با آن $G_{ads}^1 = G_{ads}^2 = g = 0$ است. چگالی سیال یک در لحظه ابتدایی در ستون اول برابر یک و در بقیه نقاط صفر است اما چگالی سیال دو در لحظه ابتدایی در ستون اول صفر و در بقیه نقاط به‌طور یکنواخت برابر ۱ در نظر گرفته شده است. واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولتزمن بوده و از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده است. بقیه پارامترهای مورد استفاده به صورت $G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} = 2, \tau_1 = \tau_2 = 1.5, \nu_1 = \nu_2 = 1/3$ است. با انجام آزمون حباب کشش سطحی دو سیال محاسبه می‌شود. از آنجایی که مرز مشترک دو سیال مکانی است که دو سیال دارای چگالی برابر باشند پس می‌توان نمودار چگالی آن‌ها را روی خط گذرنده از مرکز رسم و محل تلاقی دو نمودار را مشخص کرد که نصف فاصله بین آن‌ها به‌عنوان شعاع حباب تعریف می‌شود. حال تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب را محاسبه کرده و نمودار آن را برحسب $1/R$ رسم می‌کنیم (شکل ۳-۲۷).

¹ Zou and He



شکل ۳-۲۷: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب برحسب $1/R$.

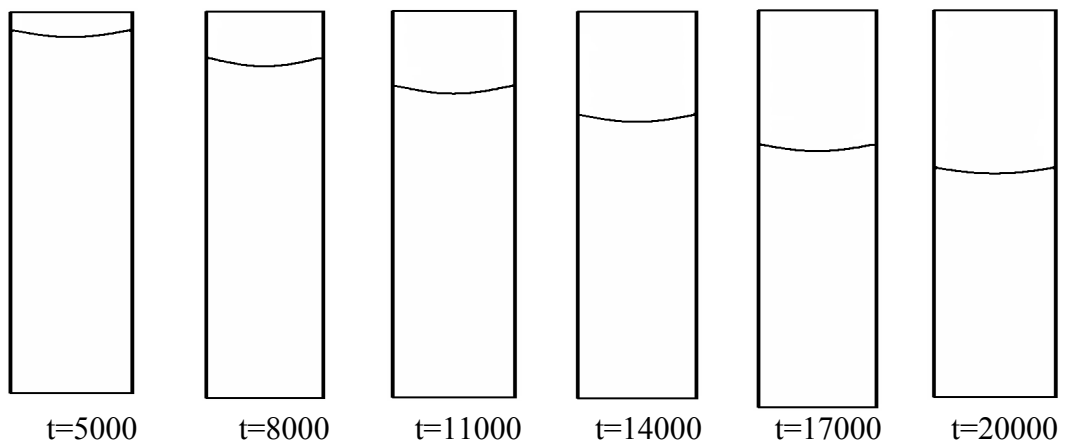
نشانه‌های دایره روی شکل نتایج شبیه‌سازی شان و چن و خط رسم شده مربوط به قانون لاپلاس است. از آنجایی که همه نقاط با توجه به شکل روی خط مستقیم قرار گرفته‌اند، قانون لاپلاس در این شبیه‌سازی برقرار است. شیب خط رسم شده برابر با کشش سطحی است که مقدار $0/11$ در واحد شبکه بولتزن برای آزمون حباب انجام شده به دست آمده است.

سرعت ورودی برای سیال یک (u_0) از $0/04$ تا $0/06$ با فاصله $0/005$ تغییر می‌کند که با این انتخاب عدد مویینگی بین $0/1212$ و $0/1818$ قرار می‌گیرد. شکل‌های $3-28$ ، $3-29$ و $3-30$ موقعیت مرز مشترک دو سیال را در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص نشان می‌دهند. وقتی عدد مویینگی نسبتاً کم باشد حرکت مرز مشترک دو سیال در زمان‌های مختلف به صورت هموار خواهد بود [۱۴۵] و کانال تقریباً توسط سیال جابجا کننده به طور کامل اشغال خواهد شد [۱۵۲]. با افزایش عدد مویینگی مرز مشترک دو سیال خمیده‌تر می‌شود [۱۴۵]. اگر عرض کانال ثابت در نظر گرفته شود، درجه خمیدگی می‌تواند برحسب فاصله بین نقاط شروع و انتهایی مرز مشترک سیال در جهت جریان، بیان شود [۱۴۵]. هر چه این فاصله بیشتر شود مرز مشترک بین دو سیال خمیده‌تر خواهد بود. وقتی عدد مویینگی و نسبت ویسکوزیته افزایش یابد، الگوی انگشتی واضح و مشخصی در کانال تولید می‌شود که در نسبت‌های ویسکوزیته بالا، الگوی انگشتی معمولاً خیلی نازک بوده و می‌تواند با عبور از قسمتی از کانال به تنهایی کانال را اشغال کند [۱۵۲] (طول انگشتی بزرگ است) اما با کاهش نسبت

ویسکوزیته، پهنای انگشتی ضخیم‌تر شده و مرز مشترک دو سیال به صورت هموار حرکت خواهد کرد [۱۵۲].

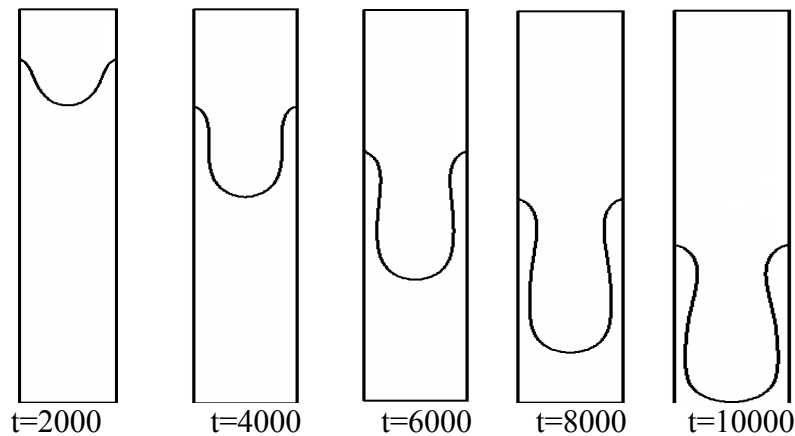
عرض انگشتی بی‌بعد (W/H) نسبت عرض انگشتی به عرض کانال تعریف می‌شود که هالپرن و گاور^۱ در سال ۱۹۹۴ رابطه‌ای تجربی بین این پارامتر و عدد مویینگی (Ca) به صورت زیر به دست آوردند [۱۵۸]:

$$\frac{W}{H} = 1 - 0.417(1 - e^{-1.96Ca^{0.5025}}) \quad (۱۰۱-۳)$$



$$M = 1, u_0 = 0.01, \Delta t = 3000, Ca = 0.0303$$

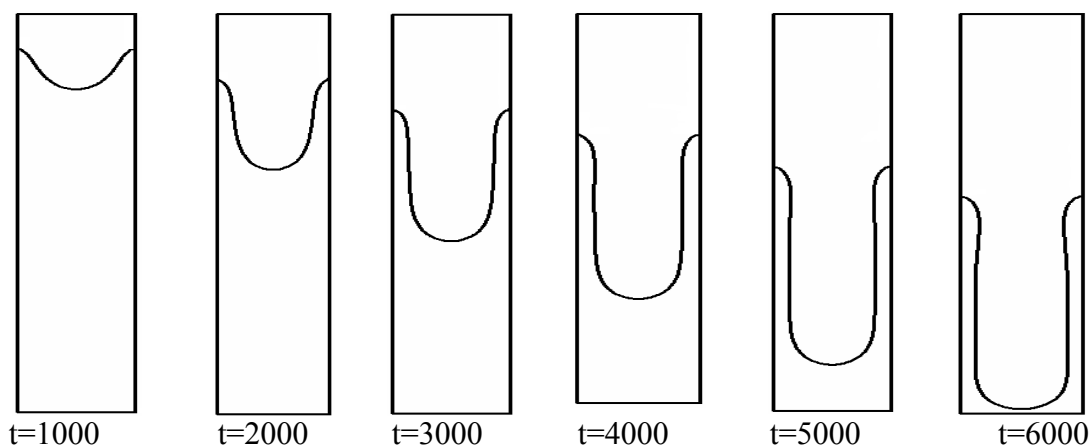
شکل ۳-۲۸: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.0303$.



$$M = 1, u_0 = 0.04, \Delta t = 2000, Ca = 0.1212$$

شکل ۳-۲۹: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.1212$.

¹ Halpern and Gaver



$$M = 1, u_0 = 0.06, \Delta t = 1000, Ca = 0.1818$$

شکل ۳-۳۰: موقعیت مرز مشترک دو سیال در لحظه‌های مختلف با فاصله زمانی مشخص و $Ca = 0.1818$.

جدول ۳-۸: مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی با نتایج رابطه تجربی.

خطای محاسباتی	نتایج رابطه تجربی (W/H)	نتایج شبیه‌سازی عددی (W/H)	Ca	u_0
٪۱/۳۹	۰/۸۱۵۳	۰/۸۲۶۷	۰/۱۲۱۲	۰/۰۴
٪۰/۱۹۸	۰/۸۰۷۱	۰/۸۰۵۵	۰/۱۳۶۴	۰/۰۴۵
٪۰/۰۶	۰/۷۹۹۷	۰/۷۹۴۹	۰/۱۵۱۵	۰/۰۵
٪۱/۰۷	۰/۷۹۲۸	۰/۷۸۴۳	۰/۱۶۶۷	۰/۰۵۵
٪۲/۹۷	۰/۷۸۶۵	۰/۷۶۳۱	۰/۱۸۱۸	۰/۰۶

جدول ۳-۱۰: نتایج حاصل از شبیه‌سازی عددی با نتایج رابطه تجربی را به ازای اعداد مویینگی مختلف

نشان می‌دهد که تأییدی بر اعتبارسنجی شبیه‌سازی انجام شده است.

فصل چهارم:

بررسی جریان در لایه انتشار گاز

پیل سوختی غشای مبادله پروتون

در این فصل جابجایی دو سیال مخلوط‌نشدنی در محیط متخلخل تصادفی بررسی می‌شود و اثرات عدد موینگی، زاویه خیسی و نسبت ویسکوزیته بر زمان رسوخ، اشباع آب مایع، طول انگشتی‌ها، تعداد انگشتی‌ها و ضخامت آن‌ها به تفصیل بیان می‌شود. همچنین محدوده ضریب تخلخل، عدد موینگی و زاویه خیسی در لایه انتشار گاز بیان شده و مراحل تولید هندسه برای شبیه‌سازی دوبعدی لایه انتشار گاز شرح داده می‌شود. سپس با بیان شرایط مرزی مسئله لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز و لایه انتشار گاز آب‌گریز- آب‌دوست مطالعه شده و مکان و ضخامت مناسب برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست تعیین می‌شود. در نهایت با ارزیابی زوایای خیسی مختلف در لایه انتشار گاز آب‌گریز- آب‌دوست، زاویه مناسب معرفی می‌شود.

۴-۱ مقدمه

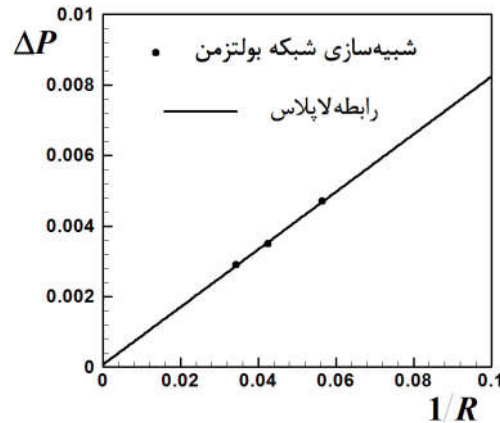
جابجایی سیال‌های مخلوط‌نشدنی در محیط متخلخل از موضوعات جالب علمی و مهندسی است که در بسیاری از زمینه‌های فنی و صنعتی کاربرد دارد [۹۵]. برای جریان سیال مخلوط‌نشدنی می‌توان بازیافت روغن در صنعت را عنوان کرد که بدین منظور در مرحله دوم و سوم بازیافت، از گاز یا آب برای جابجایی روغن باقیمانده از مرحله اول استفاده می‌شود [۱۵۹]. در این حالت چون ویسکوزیته روغن باقیمانده بیشتر از گاز تزریق شده است می‌تواند باعث ایجاد جابجایی ناپایدار و حرکت سیال به صورت انگشتی ویسکوز شود. این پدیده مشکلی جدی است که منجر به بازده جابجایی ناچیز می‌شود [۱۵۹]. از دیگر کاربردهای آن، می‌توان به مدیریت آب مایع و اهمیت جریان دوفازی در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون اشاره کرد چون این موضوع روی مقدار آب مایع در لایه کاتالیزور، غشاء و انتقال واکنش‌دهنده‌ها از کانال گاز به لایه کاتالیزور مؤثر است [۱۶۰]. فهم حرکتی این فرآیند، به‌ویژه از دیدگاه مقیاس حفره، دارای اهمیت فراوانی است اما به دلیل تعداد زیاد پارامترهای مؤثر در جریان مانند چگالی، ویسکوزیته، کشش سطحی، سرعت جریان، خیسی سطح، هندسه حفره‌ها و ناهمگنی محیط بسیار پیچیده است [۹۵]. جابجایی دو سیال در مدل‌های میکرو توسط پارامترهای بی‌بعد شامل عدد موینگی ($Ca = u_0 \rho v / \sigma$)، نسبت ویسکوزیته (

پارامترهای بیان شده، به طور تجربی مشاهده شده است که خیسی سطح نقش مهمی در فرآیند جابجایی ایفا می کند که این پارامتر با زاویه خیسی توصیف می شود [۹۵]. به طور کلی برای جابجایی سیال های مخلوط نشدنی در محیط متخلخل سه نوع رژیم جابجایی وجود دارد که شامل رژیم پایدار، رژیم انگشتی ویسکوز و رژیم انگشتی موئینگی است [۱۶۱]. در رژیم جابجایی پایدار، جبهه بین دو سیال تقریباً صاف است و بی نظمی آن در مقیاس چندین حفره است. همچنین مقدار خیلی کمی از سیال جابجا شده در پشت مرز مشترک به دام می افتد [۱۶۱]. در الگوی انگشتی ویسکوز، هیچ حلقه-ای به وجود نمی آید [۱۰۶]. در انگشتی موئینگی، انگشتی ها در تمام جهات حتی به سمت عقب (به سمت ورودی) رشد می کنند و سیال جابجا شده ممکن است به دلیل حرکت حلقه های انگشتی ها بین آن ها به دام افتد [۱۰۶]. هر سه رژیم وابستگی شدیدی به عدد موئینگی، نسبت ویسکوزیته و عدد باند دارند [۹۵]. در سال های اخیر روش شبکه بولتزنم به سرعت گسترش یافته و به صورت یک ابزار قدرتمند در شبیه سازی های عددی جریان سیال به کار رفته است. به دلیل ماهیت و اعمال آسان آن در ساختارهای پیچیده به طور وسیعی برای مطالعه پدیده انتقال در محیط متخلخل مورد استفاده قرار گرفته است [۱۶۲].

۲-۴ جریان سیال های مخلوط نشدنی در محیط متخلخل

روش مورد استفاده (روش شان و چن) به گونه ای است که قبل از حل مسئله باید کشش سطحی و زاویه خیسی با توجه به پارامترهای موجود تعیین گردند که بدین منظور از آزمون های حباب و قطره ساکن استفاده می کنیم. ناحیه در نظر گرفته شده برای آزمون حباب، شبکه 101×101 است. در این شبیه سازی چگالی سیال یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج قطره به طور یکنواخت و به ترتیب ۱ و ۰ و چگالی فاز دو ۰ و ۱ در نظر گرفته شده است. این آزمون چندین بار و به ازای شعاع های مختلف برای حباب اولیه انجام می شود. با توجه به قانون لاپلاس نمودار اختلاف فشار بر حسب $1/R$ را رسم کرده که شیب خط همان کشش سطحی است. پارامترهای مورد نیاز برای این شبیه سازی

را نتیجه می‌دهد. $G_{12} = G_{21} = 1.8, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 0.1667$ است که مقدار 0.0815 در واحد شبکه بولتزمن



شکل ۴-۱: تغییرات فشار بین داخل و خارج حباب برحسب $1/R$.

نشانه‌های دایره روی شکل ۴-۱ نتایج شبیه‌سازی شان و چن و خط رسم شده مربوط به قانون لاپلاس است. چون همه نقاط بر خط مستقیم قرار گرفته‌اند، قانون لاپلاس در شبیه‌سازی ما برقرار است. آنجایی که نتایج شبیه‌سازی شده با نتایج تئوری مطابقت دارد پس روش شان و چن توصیف شده می‌تواند برای شبیه‌سازی سیستم‌های سیال با دو مؤلفه به‌درستی مورد استفاده قرار گیرد. برای محاسبه عدد مویینگی در حالت‌های مختلف به کشش سطحی نیاز است که برای حالت‌های مورد بررسی در جدول ۴-۱ آمده است (اندیس یک و دو به ترتیب مربوط به سیال جابجا شده و جابجا کننده است):

جدول ۴-۱: مقادیر کشش سطحی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی.

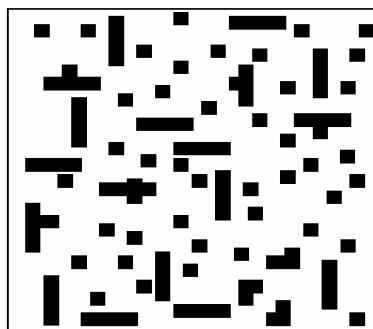
(کشش سطحی) σ	زمان آسایش و ویسکوزیته	(نسبت ویسکوزیته) M
0.0815	$\tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 0.1667$	۱
0.0932	$\tau_1 = 1.1667, \tau_2 = 1, \nu_1 = 0.2222, \nu_2 = 0.1667$	۱/۳۳۴
0.110638	$\tau_1 = 1.5, \tau_2 = 1, \nu_1 = 0.334, \nu_2 = 0.1667$	۲
0.14634	$\tau_1 = 2, \tau_2 = 1, \nu_1 = 0.5, \nu_2 = 0.1667$	۳

در این مطالعه می‌خواهیم اثر زاویه خیسی را ارزیابی کنیم بنابراین باید در هر حالت زاویه خیسی تعیین گردد. برای این منظور ابتدا سیال جابجا شده را به صورت قطره روی یک مرز جامد و درون سیال جابجا کننده قرار می‌دهیم. در حالت نهایی بسته به مقدار قدرت کشش بین سیال و جامد (

G_{ads}^1 و G_{ads}^2 ، قطره با زاویه‌های مختلف شکل می‌گیرد. برای بررسی اثر زاویه خیسی باید توجه کرد که زاویه‌های خیسی به سه دسته تقسیم می‌شوند: زاویه خیسی کمتر از ۹۰ درجه (سیال جابجا شده و سیال جابجا کننده به ترتیب سیال‌های خیس‌کننده و غیر خیس‌کننده هستند)، زاویه خیسی ۹۰ درجه (خنثی) و زاویه خیسی بیشتر از ۹۰ درجه (سیال‌های جابجا شده و جابجا کننده به ترتیب غیر خیس‌کننده و خیس‌کننده هستند). در این مطالعه منظور از زاویه خیسی، زاویه سیال جابجا شده است زیرا برای محاسبه آن، سیال جابجا شده را به صورت یک قطره در سیال جابجا کننده قرار می‌دهیم. قدرت کشش سیال-جامد در شبیه‌سازی‌ها به صورت $G_{ads}^1 = -G_{ads}^2$ در نظر گرفته شده است. در این بررسی سه زاویه خیسی ۵۸/۳، ۹۰ و ۱۱۹ مورد مطالعه قرار گرفته است. مقادیر قدرت کشش سیال-جامد که به ازای آن، این زوایا ایجاد شده‌اند در جدول ۴-۲ آمده است. در این شبیه‌سازی چگالی سیال یک در لحظه ابتدایی در داخل و خارج نیم قطره به‌طور یکنواخت و به ترتیب ۱ و ۰ و چگالی فاز دو ۰ و ۱ در نظر گرفته شده‌اند. ساختار محیط متخلخل مورد بررسی در شکل ۴-۲ نشان داده شده است. شبکه مورد استفاده 401×401 بوده و تعدادی مربع جامد به‌طور نامنظم در آن چیده شده‌اند.

جدول ۴-۲: مقادیر زاویه خیسی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی.

زاویه خیسی	قدرت کشش سیال-جامد	زمان آسایش و ویسکوزیته	نسبت ویسکوزیته
۵۸/۳	$G_{ads}^1 = -0.2, G_{ads}^2 = 0.2$	$\tau_1 = 1, \tau_2 = 1$	۱
۹۰	$G_{ads}^1 = 0, G_{ads}^2 = 0$	$\tau_1 = 1, \tau_2 = 1$	۱
۱۱۹	$G_{ads}^1 = 0.2, G_{ads}^2 = -0.2$	$\tau_1 = 1, \tau_2 = 1$	۱
۱۱۹	$G_{ads}^1 = 0.193, G_{ads}^2 = -0.193$	$\tau_1 = 1.1667, \tau_2 = 1$	۱/۳۳۴
۱۱۹	$G_{ads}^1 = 0.17, G_{ads}^2 = -0.17$	$\tau_1 = 1.5, \tau_2 = 1$	۲
۱۱۹	$G_{ads}^1 = 0.135, G_{ads}^2 = -0.135$	$\tau_1 = 2, \tau_2 = 1$	۳
۵۸/۳	$G_{ads}^1 = -0.198, G_{ads}^2 = 0.198$	$\tau_1 = 2, \tau_2 = 1$	۳
۹۰	$G_{ads}^1 = -0.033, G_{ads}^2 = 0.033$	$\tau_1 = 2, \tau_2 = 1$	۳



شکل ۴-۲: محیط متخلخل مورد بررسی.

در این شکل مربع‌های سیاه‌رنگ بیانگر مواد جامد موجود در محیط متخلخل و نواحی سفیدرنگ مسیرهایی برای حرکت سیال است. در لحظه ابتدایی در ستون اول از ناحیه مورد بررسی، سیال ۲ (سیال جابجا کننده) و در بقیه ناحیه، سیال ۱ (سیال جابجا شده) قرار گرفته است.

در این بررسی از معادله حالت $\mu = \rho$ استفاده شده و واحدهای به کار رفته در واحد شبکه بولترمن هستند. چگالی سیال دو در لحظه ابتدایی در ستون اول برابر یک و در بقیه نقاط برابر صفر است. همچنین چگالی فاز یک در لحظه ابتدایی در ستون اول برابر صفر و در بقیه نقاط به‌طور یکنواخت و برابر ۱ در نظر گرفته شده است. سرعت سیال دو در ورودی ثابت و برابر u_0 (مطابق طرح زو و هی [۱۵۷]) است. برای مرزهای بالا و پایین از شرط مرزی عدم لغزش و در خروجی از شرط مرزی باز استفاده شده است. برای اعمال شرط عدم لغزش سرعت روی جسم جامد از شرط مرزی برگشت به عقب با دیوار میانی استفاده می‌شود. با توجه به اطلاعات فوق و هندسه مورد بررسی، ضریب تخلخل محیط $\phi = 0.8214$ است. زمان موردنیاز برای رسیدن سیال دو به انتهای محیط را زمان رسوخ^۱ گویند و برابر مدت‌زمانی است که ماکزیمم کسر جرمی سیال دو در مخلوط دو سیال، در محل خروجی بیشتر از ۰/۵ باشد [۱۴۵]. توجه شود که شبیه‌سازی‌های انجام شده تا زمانی صورت می‌گیرد که سیال جابجا کننده به مرز خروجی برسد (زمان رسوخ). همان‌طور که بیان شد در ابتدا محیط مورد بررسی توسط سیال با ویسکوزیته بیشتر پر شده و سیال با ویسکوزیته کمتر به‌طور پیوسته و با سرعت ثابت از مرز سمت چپ تزریق می‌شود.

^۱ Breakthrough time

۳-۴ اثر عدد موینگی

برای بررسی اثر عدد موینگی بر رفتار سیال باید چندین شبیه‌سازی با اعداد موینگی مختلف صورت گیرد. در تعریف عدد موینگی سرعت و ویسکوزیته مربوط به سیال جابجا کننده است. اعداد موینگی مختلف با تغییر سرعت ورودی سیال جابجا کننده ایجاد می‌شوند. در این بررسی پنج عدد موینگی مختلف $0/0102$ ، $0/0204$ ، $0/0818$ ، $0/1227$ و $0/1636$ به ازای سرعت‌های ورودی سیال جابجا کننده‌ی $0/005$ ، $0/01$ ، $0/04$ ، $0/06$ و $0/08$ مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. توجه شود که اعداد بیان شده در واحد شبکه بولتزمن هستند. الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای حالتی که نسبت ویسکوزیته بین سیال جابجا شده و سیال جابجا کننده برابر ۱ و ۳ باشد به ترتیب در شکل‌های ۳-۴ و ۴-۴ آمده است. در این دو شکل زاویه خیزی برای الگوهای توزیع سمت چپ، وسط و راست به ترتیب $58/3^\circ$ ، 90° و 118° است. با توجه به شکل در اعداد موینگی کم، سیال جابجا کننده قبل از اینکه بخواهد به حفره همسایه برسد، تقریباً فضای حفره‌ها را به‌طور کامل اشغال می‌کند در حالی که به ازای اعداد موینگی بالا، سیال جابجا کننده تنها بخشی از فضای حفره‌های عبوری را در برمی‌گیرد. همچنین در اعداد موینگی بالا، الگوهای انگشتی سست^۱ (غیر قوی) بوده و تعداد و طول آن‌ها افزایش ولی ضخامت آن‌ها کاهش می‌یابد. با توجه به شکل ۳-۴ با افزایش عدد موینگی، قطره‌های جدا شده-ی بسیاری از سیال جابجا شده به مواد جامد می‌چسبند یا در ناحیه حفره‌ها به دام می‌افتند.

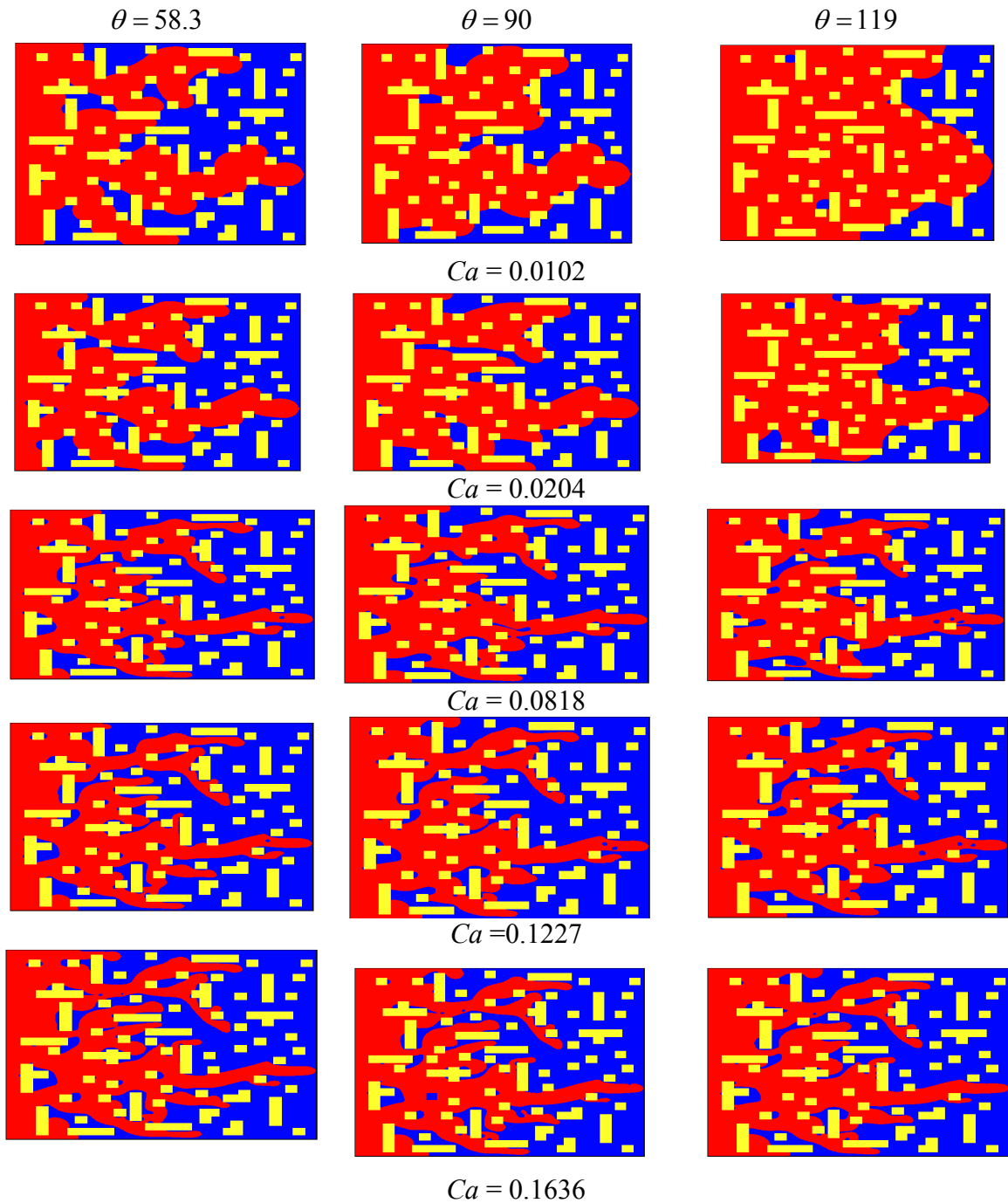
شکل ۴-۵ زمان رسوخ برحسب زاویه خیزی را برای دو حالت ۳ و $M=1$ نشان می‌دهد. با توجه به شکل با افزایش عدد موینگی، زمان رسوخ کاهش می‌یابد و سیال جابجا کننده خود را سریع‌تر به مرز خروجی می‌رساند.

برای بیان بازده جابجایی دو پارامتر زیر مورد استفاده قرار می‌گیرند:

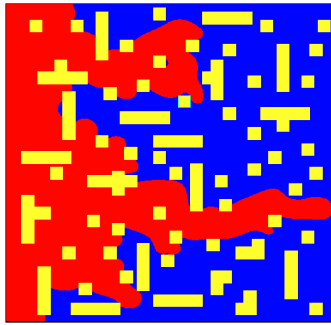
زمان رسوخ: مدت‌زمانی که طول می‌کشد تا اولین انگشتی به مرز خروجی برسد.

¹ Loosely fingers

اشباع سیال جابجا کننده: نسبت فضای اشغال شده توسط سیال جابجا کننده به فضای خالی را اشباع سیال جابجا کننده گویند و با Se نمایش می دهند که بازده جابجایی سیال را نشان می دهد. رابطه بین اشباع سیال جابجا کننده و زاویه خستگی برای دو حالت ۳ و $M=1$ در شکل ۴-۶ نشان داده شده است. با توجه به شکل با افزایش عدد موینگی اشباع سیال جابجا کننده کاهش می یابد.

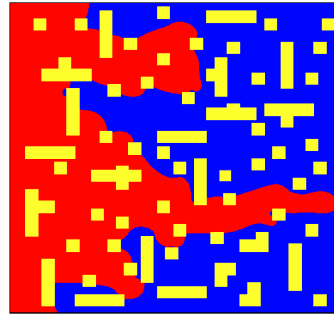


شکل ۴-۳: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای $M=1$.



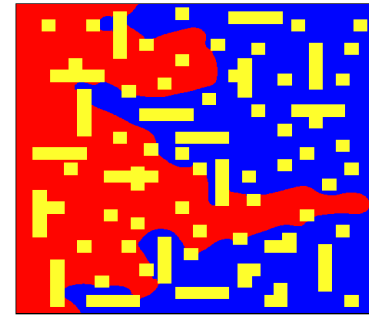
$\theta = 58.3$
 $t = 14177$

$Se = 0.4537$



$\theta = 90$
 $t = 14629$

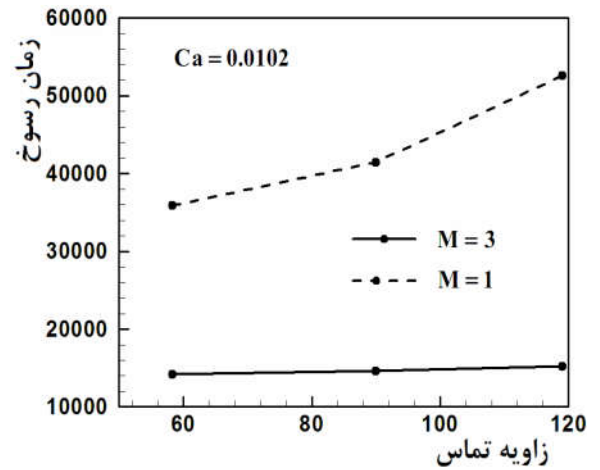
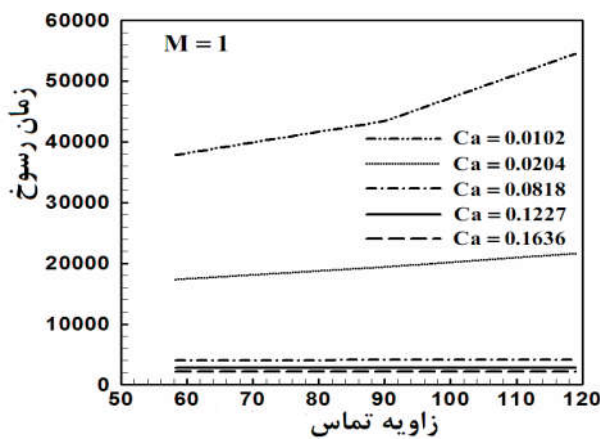
$Se = 0.4596$



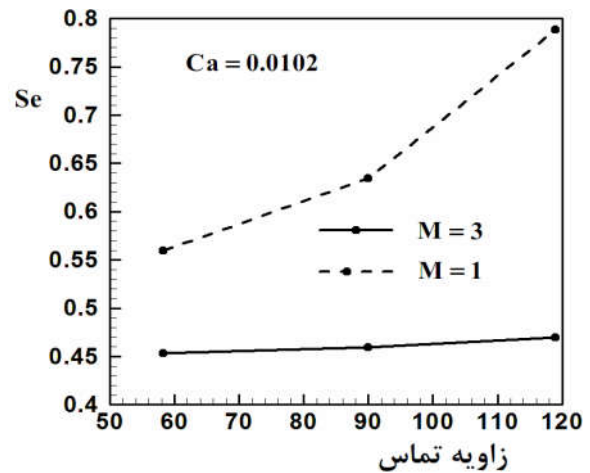
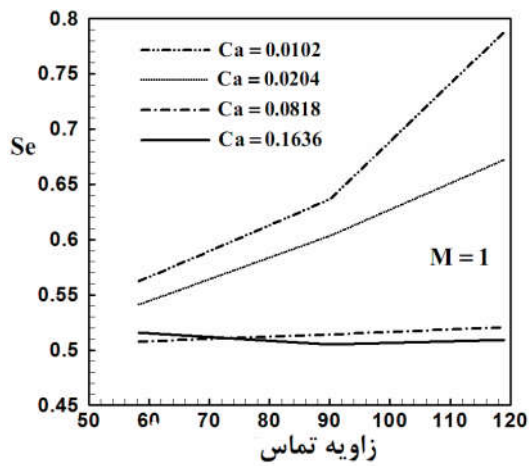
$\theta = 119$
 $t = 15195$

$Se = 0.4701$

شکل ۴-۴: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای $M = 3$, $Ca = 0.0102$, $u_0 = 0.009$.



شکل ۴-۵: زمان رسوخ بر حسب زاویه خیسی را برای دو حالت $M = 1, 3$.



شکل ۴-۶: اشباع سیال جابجا کننده بر حسب زاویه خیسی.

۴-۴ اثر زاویه خیزی

در این قسمت با اعمال تغییرات روی قدرت کشش سیال - جامد در شبیه‌سازی‌های عددی به مطالعه اثر خیزی سطح بر فرآیند جابجایی می‌پردازیم. زاویه خیزی بر فشار مویینگی حفره اثر می‌گذارد. همچنین فشار مویینگی حفره تعیین کننده نفوذ یا عدم نفوذ سیال جابجا کننده است. در این قسمت زاویه خیزی $58/3^\circ$ ، 90° و 118° بررسی شده است. با توجه به شکل ۳-۴ در زاویه‌های خیزی مختلف، قطره‌های جدا شده‌ی سیال جابجا شده به مواد جامد چسبیده‌اند. وقتی سطح برای سیال جابجا شده خیس‌کننده باشد اندازه این قطره‌ها بزرگ‌تر می‌شود. در حالی که برای سطح غیر خیس‌کننده، طول انگشتی‌ها کوتاه‌تر و بنابراین تشکیل آن‌ها محدودتر است که این موضوع در اعداد مویینگی کمتر مشهودتر است. ضخامت انگشتی‌ها برای سطوح غیر خیس‌کننده و خیس‌کننده به ترتیب بیشترین و کمترین مقدار است (این موضوع در حالت‌هایی که عدد مویینگی کمتر دارند مشهودتر است). با توجه به شکل ۴-۵ با افزایش زاویه خیزی زمان رسوخ افزایش می‌یابد. تغییرات زمان رسوخ نسبت به زاویه خیزی تابع عدد مویینگی است که در اعداد مویینگی پایین، این تغییرات بسیار زیاد ولی در اعداد مویینگی بالا ناچیز است. برای مثال مطابق جدول ۳-۴ اگر زاویه خیزی از $58/3^\circ$ به 119° تغییر کند زمان رسوخ برای اعداد مویینگی $0/0102$ ، $0/0204$ ، $0/0818$ ، $0/1227$ و $0/1636$ به ترتیب به اندازه 16680 ، 4198 ، 119 ، 50 و 13 مرحله زمانی تغییر می‌کند.

جدول ۳-۴: مقادیر زاویه خیزی برای حالت‌های مختلف شبیه‌سازی.

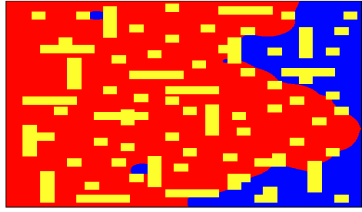
Ca	$0/0102$	$0/0204$	$0/0818$	$0/1227$	$0/1636$
$\theta = 58/3, M = 1$	$t_1 = 35889$	$t_1 = 17095$	$t_1 = 4027$	$t_1 = 2784$	$t_1 = 2144$
$\theta = 119, M = 1$	$t_2 = 52569$	$t_2 = 21293$	$t_2 = 4146$	$t_2 = 2834$	$t_2 = 2157$
Δt	$t_2 - t_1 = 16680$	$t_2 - t_1 = 4198$	$t_2 - t_1 = 119$	$t_2 - t_1 = 50$	$t_2 - t_1 = 13$

با توجه به شکل ۴-۶ برای $M=3$ با افزایش زاویه خیزی (وقتی سطح از خیس‌کننده به غیر خیس‌کننده تغییر کند) اشباع سیال جابجا کننده زیاد می‌شود. تغییرات اشباع سیال جابجا کننده

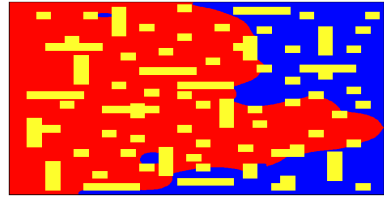
نسبت به زاویه خیزی تابع عدد موینگی است که در اعداد موینگی بالا تغییرات آن ناچیز ولی در اعداد موینگی پایین این تغییرات بسیار زیاد است.

۴-۵ اثر نسبت ویسکوزیته

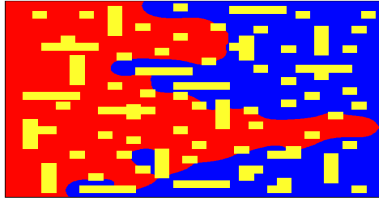
برای بررسی اثر نسبت ویسکوزیته روی رفتار سیال، شبیه‌سازی‌هایی با مقادیر ۳ و $M=1,1/3334,2$ انجام شده است. برای این منظور می‌توان با ثابت در نظر گرفتن ویسکوزیته سیال جابجا کننده، ویسکوزیته سیال جابجا شده را تغییر داد (البته با ثابت در نظر گرفتن بقیه پارامترها). به دلیل تغییر در ویسکوزیته سیال جابجا شده، کشش سطحی بین دو سیال تغییر می‌کند پس در تمام حالت‌ها سرعت اولیه به‌گونه‌ای انتخاب می‌شود که عدد موینگی ثابت بماند. برای بررسی این اثر، عدد موینگی $0,102$ و زاویه خیزی 119° در نظر گرفته شده است. شکل ۴-۷ الگوی نهایی توزیع دو سیال را برای نسبت‌های ویسکوزیته‌ی مختلف نشان می‌دهد. هر چه نسبت ویسکوزیته کمتر باشد، ضخامت انگشتی‌ها بیشتر ولی طول آن‌ها کاهش می‌یابد بنابراین تشکیل انگشتی‌ها محدودتر می‌شود. با توجه به شکل ۴-۵ با کاهش نسبت ویسکوزیته، زمان رسوخ افزایش می‌یابد و سیال جابجا کننده دیرتر به مرز خروجی می‌رسد. رابطه اشباع سیال جابجا کننده با نسبت ویسکوزیته در شکل ۴-۶ آورده شده است که با توجه به آن با کاهش نسبت ویسکوزیته، اشباع سیال جابجا کننده افزایش می‌یابد. با توجه به مطالب بیان شده می‌توان نتیجه گرفت که وقتی سطح برای سیال جابجا شده غیر خیس‌کننده باشد، انگشتی‌ها متوقف شده، طول آن‌ها کوتاه‌تر و بنابراین تشکیل آن‌ها محدودتر می‌شود به همین دلیل سطح غیر خیس‌کننده از دیدگاه مهندسی مطلوب است. دلیل دیگر بر این موضوع، اشباع سیال جابجا کننده است. همان‌طوری که گفته شد اشباع سیال جابجا کننده برای نشان دادن بازده جابجایی استفاده می‌شود که شکل ۴-۵ بیانگر رابطه آن با زاویه خیزی است. با افزایش زاویه خیزی، اشباع سیال جابجا کننده افزایش می‌یابد پس برای جابجایی سیال، سطح غیر خیس‌کننده ترجیح داده می‌شود.



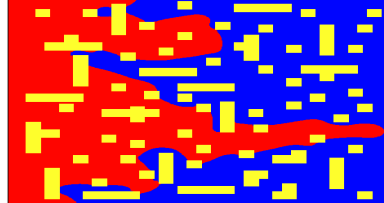
$$u_0 = 0.005, t = 52569, M = 1, Se = 0.7883$$



$$u_0 = 0.0057, t = 38246, M = 1.334, Se = 0.6770$$



$$u_0 = 0.0068, t = 23965, M = 2, Se = 0.5389$$



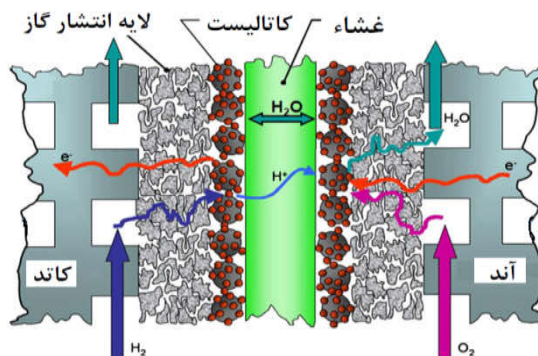
$$u_0 = 0.009, t = 15195, M = 3, Se = 0.4701$$

شکل ۴-۷: الگوی توزیع دو سیال در زمان رسوخ برای نسبت‌های ویسکوزیته مختلف و $Ca = 0.0102$, $\theta = 119^\circ$.

در حالت زاویه خیس 119° ، نسبت ویسکوزیته ۱ و عدد مویبگی 0.204 سه شبکه 201×201 ، 401×401 و 801×801 بررسی شده است. مقایسه اشباع آب مایع در این سه شبکه نشان می‌دهد که شبکه 401×401 ، برای این شبیه‌سازی مناسب است چون اشباع آب مایع در شبکه 201×201 نسبت به 401×401 دارای $4/7\%$ اختلاف ولی شبکه 401×401 نسبت به 801×801 دارای $1/52\%$ اختلاف است.

۴-۶ بررسی جریان دوفازی در قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون

در این قسمت هدف، بررسی جریان دوفازی در لایه انتشار گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون است.



شکل ۴-۸: اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون [۵].

اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون که از سه قسمت آند، کاتد و الکترولیت تشکیل شده در شکل ۴-۸ نشان داده شده است. قسمت کاتد و آند خود به سه ناحیه تقسیم می‌شوند: کانال گاز (GC)، لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور. مدیریت ضعیف آب در پیل سوختی غشای مبادله پروتون می‌تواند باعث ایجاد پدیده طغیان شود [۱۰۲] که این پدیده در اثر جمع شدن آب مایع اضافی در اجزای پیل سوختی غشای مبادله پروتون اتفاق می‌افتد [۱۰۳]. نتیجه‌ی این پدیده این است که آب مایع حفره‌های موجود در لایه انتشار گاز و کاتالیزور قسمت کاتد را پر کرده و اکسیژن نمی‌تواند به‌طور مؤثر انتقال یابد که در نهایت منجر به کمبود واکنش‌دهنده و کاهش بازده می‌شود [۱۰۲]. از طرف دیگر غشای خشک یا کم آب باعث افزایش مقاومت در برابر عبور پروتون می‌شود که این امر باعث افزایش تلفات اهمی در میان غشاء و کاهش بازده پیل سوختی می‌شود [۱۰۳]. لایه انتشار گاز نقش بحرانی و مهمی در مدیریت آب دارد زیرا باید تعادل بین حذف آب مایع و غشای آبدار را حفظ کند [۱۶۳].

لایه انتشار گاز از فیبرهای کربن ساخته شده و دارای ساختار متخلخل است. بیشترین و متداول‌ترین مواد مورد استفاده برای این لایه، کاغذ کربن یا پارچه کربن است. این لایه به‌طور طبیعی آب‌دوست است ولی برای سهولت در حذف آب مایع معمولاً با لایه‌ای از پلیمر غیر خیس‌کننده مانند پلی‌تترا-فلوئورواتیلن (PTFE) پوشانده می‌شود تا آب‌گریز شود [۱۰۳]. در این لایه آب که غیر خیس‌کننده است باعث جابجایی هوای خیس‌کننده می‌شود که در این جابجایی، نیروی موئینگی به دلیل کم بودن دبی آب مایع و فضاها تنگ و باریک حاکم است [۱۰۳].

همان‌طور که پیش‌تر ذکر شد عدد موئینگی نسبت نیروی ویسکوز به کشش سطحی است که با Ca نمایش داده شده و به صورت $Ca = \mu u / \sigma$ تعریف می‌شود. در این رابطه μ ویسکوزیته دینامیکی آب مایع، u سرعت آب مایع و σ کشش سطحی بین آب و هوا است. در شرایط کاری پیل سوختی غشای مبادله پروتون عدد موئینگی از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} و همچنین نسبت ویسکوزیته $(M = \mu_{\text{water}} / \mu_{\text{air}})$

تقریباً برابر ۱۷/۵ است. بر اساس دیاگرام فازی پیشنهاد شده توسط لنورمند [۱۶۴] و با توجه به مقادیر اعداد موینگی و نسبت ویسکوزیته رژیم حاکم بر حرکت سیال، انگشتی موینگی است.

به طور کلی رابطه بین نیروی کشش سطحی، نیروی ویسکوز، نیروی اینرسی و نیروی گرانش توسط سه عدد بدون بعد توصیف می‌شود که این اعداد شامل عدد موینگی، عدد وبر (نسبت نیروی اینرسی به نیروی کشش سطحی، $We = \rho u^2 d / \sigma$) و عدد باند (نسبت نیروی گرانش به کشش سطحی، $Bo = (\Delta \rho) d^2 g / \sigma$) است. در این روابط 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 کاتالیزور به درون لایه انتشار گاز نفوذ کرده و سپس وارد کانال گاز می‌شود [۱۰۳].

در شرایط کاری پیل سوختی غشای مبادله پروتون، در لایه انتشار گاز، عدد موینگی از مرتبه 10^{-8} تا 10^{-6} ، عدد باند حدود 10^{-9} و عدد وبر از مرتبه 10^{-10} است [۸۰]. این اعداد نشان‌دهنده حاکم بودن اثر نیروی کشش سطحی در مقایسه با بقیه نیروها بر رفتار آب مایع در لایه انتشار گاز است به این معنا که نیروی ویسکوز، نیروی گرانش و نیروی اینرسی قابل صرف‌نظر کردن هستند [۸۰]. پس اثرات نسبت ویسکوزیته و نسبت چگالی بر انتقال دو سیال در لایه انتشار گاز می‌توانند با اطمینان صرف‌نظر شوند [۶۱].

در مطالعه حاضر، رفتار دینامیکی انتقال آب مایع در لایه انتشار و کانال گاز قسمت کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون به روش شبکه بولتزمان بررسی شده است. از آنجایی که یکی از پارامترهای اصلی و مؤثر بر پدیده انتقال آب و همچنین کنترل‌کننده پدیده طغیان، زاویه خیزی سطوح لایه انتشار گاز است، به همین دلیل به بررسی این اثر بر حذف آب مایع پرداخته شده است. توجه شود که استفاده از موادی با آب‌گریزی بالا مثل پلی‌تترافلورواتیلن یک روش مرسوم برای جلوگیری از پدیده طغیان در لایه انتشار گاز است [۱۶۵]. از ویژگی‌های بررسی حاضر، میکروسکوپی بودن مطالعه، بررسی تشکیل خوشه‌های آب مایع و عمل اتصال بین آن‌ها، زمان رسیدن به حالت پایا، بررسی محلی و کلی اشباع آب مایع، اثر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز و مطالعه رفتار خوشه‌های آب مایع می‌باشد.

از جنبه‌های نوآوری این رساله بیان الگوی مناسب برای ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز، بررسی خوشه‌های آب مایع و دینامیک آن‌ها در مقیاس حفره است. همچنین این رساله از محدود مطالعاتی است که به بررسی هم‌زمان لایه انتشار گاز و کانال گاز در مقیاس حفره به روش شبکه بولتزمن پرداخته است.

۴-۷ هندسه مورد بررسی

در این مطالعه به جای استفاده از لایه انتشار گاز با ساختار همگن، از لایه‌ای با جنس کاغذ کربن و ساختار متخلخل پیچیده دوبعدی استفاده شده است که این ساختار دوبعدی مقطعی از یک لایه انتشار گاز متخلخل سه‌بعدی است. لایه انتشار گاز متخلخل سه‌بعدی به دو روش ساخته می‌شود. روش اول ترکیب عکس‌های سه‌بعدی^۱ و روش دوم، روش تصادفی و مجازی^۲ است [۱۶۶]. در روش اول عکس‌های سه‌بعدی توسط اشعه ایکس یا اشعه لیزر میکروسکوپی تهیه شده و با ترکیب آن‌ها ساختار هندسه موردنظر بدست می‌آید [۱۶۶].

در روش دوم ساختار میکرو محیط متخلخل بر اساس اطلاعات آماری، با هزینه کم و پیاده‌سازی آسان تولید می‌شود [۱۶۶]. توجه شود که بیشترین شبیه‌سازی‌های میکروسکوپی سه‌بعدی به روش شبکه بولتزمن روی لایه انتشار گاز بر اساس روش تولید تصادفی است [۱۶۷]. در این روش هر ساختار متخلخل پیچیده دلخواه می‌تواند توسط یک تابع فاز دوتایی صفر و یک توصیف شود که مقدار صفر متعلق به حفره و مقدار یک مربوط به مواد جامد است [۱۶۸]. بر اساس این روش لایه انتشار گاز سه‌بعدی با رعایت کردن مراحل مربوط به ساخت آن ایجاد می‌شود [۱۰۳]. شکل ۴-۴ تصویر میکروسکوپ الکترونی^۳ (SEM) لایه انتشار گاز از جنس کاغذ کربن را نشان می‌دهد [۶۲ و ۱۶۶]. به‌طور کلی در لایه انتشار گاز واقعی فیبرهای کربن به‌طور تصادفی در هر مقطعی قرار گرفته‌اند که باعث می‌شود خواص در جهت through-plane (ضخامت لایه انتشار گاز) متفاوت از جهت in-plane

¹ The 3D imaging combination

² Virtual stochastic generation

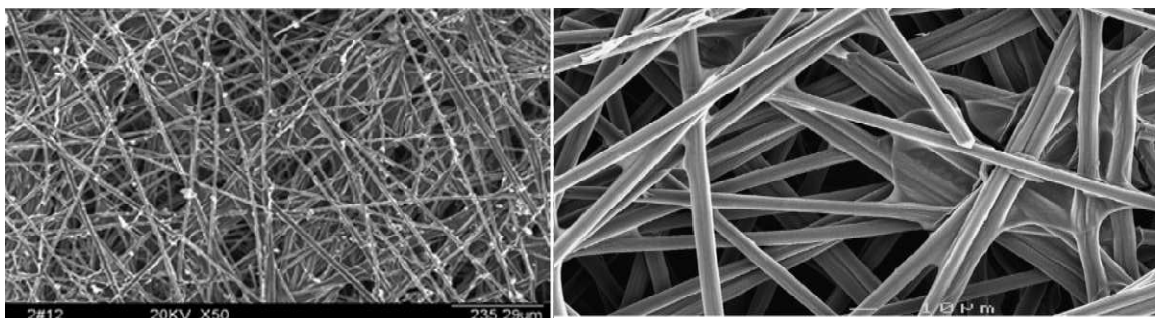
³ Scanning electron microscope

باشد [۱۶۶]. لازم به ذکر است که محورهای x, z جهت in-plane و محور y جهت through-plane است [۱۰۳].

با توجه به شکل مشخص است که فیبرهای کربن بلند و نازک به‌طور عمده در جهت in-plane قرار گرفته‌اند در حالی که فیبرهای کمی در جهت ضخامت وجود دارند [۱۰۳]. بر اساس لایه انتشار گاز واقعی، می‌توان فرضیات زیر را برای ساخت مدل سه‌بعدی لایه انتشار گاز به کار برد [۱۰۳]:

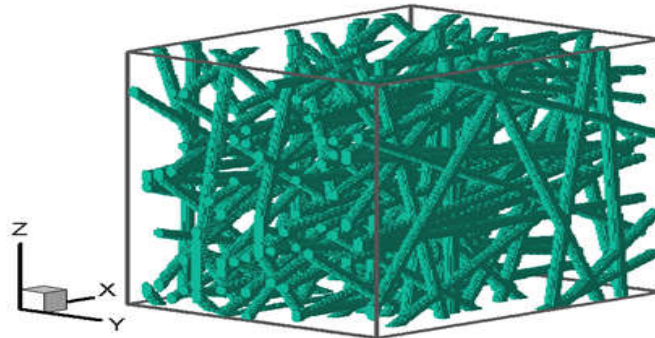
- فیبرهای کربن به صورت راست و مستقیم و با قطر ثابت و مشخص هستند.
- هیچ فیبری در جهت ضخامت لایه انتشار گاز جهت‌گیری نشده است [۱۶۶].
- فیبرها می‌توانند با هم هم‌پوشانی داشته باشند [۱۶۶] و تقاطع و برخورد آن‌ها به صورت توزیع تصادفی در جهت in-plane است.

ساخت مدل سه‌بعدی با داشتن اندازه لایه انتشار گاز، ضریب تخلخل و قطر فیبرها توسط چیدن لایه به لایه فیبرهای کربن با زاویه و محل‌های تصادفی انجام می‌شود [۱۰۳]. شروع فرآیند در هر لایه به این صورت است که ابتدا یک خط تصادفی تولید شده و سپس گره‌هایی از شبکه که فاصله آن‌ها از خط کمتر یا مساوی شعاع فیبر است را جامد در نظر می‌گیریم [۱۶۷]. چیدن فیبرهای کربن در هر لایه تا آنجایی ادامه می‌یابد که ضریب تخلخل هر لایه با ضریب تخلخل محیطی که می‌خواهیم بسازیم برابر شود [۱۰۳]. به علت هم‌پوشانی فیبرها، ضریب تخلخل هر لایه با ضریب تخلخل نهایی به‌طور دقیق برابر نیست ولی یک تقریب قابل قبولی از آن است [۱۶۶ و ۱۶۸] پس ضریب تخلخل واقعی محیط، نسبت حجم حفره‌ها به کل محیط است [۱۶۸].



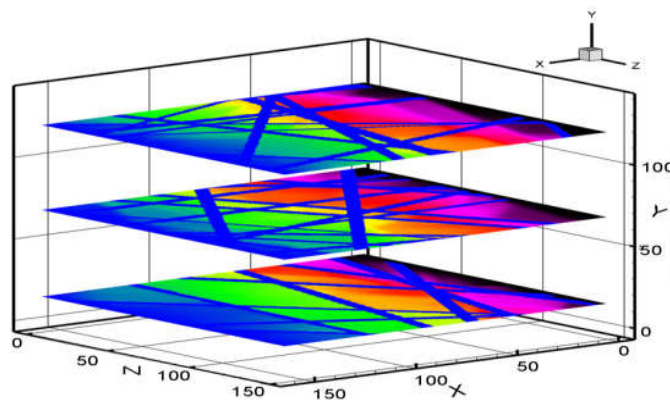
شکل ۴-۹: لایه انتشار گاز واقعی [۶۲ و ۱۶۶].

شکل ۴-۱۰ لایه انتشار گاز سه‌بعدی تولید شده با فیبرهای کربن به قطر ۷ میکرومتر و ضریب تخلخل ۰/۷ را نشان می‌دهد که در مجموع دارای ۲۴ لایه است و با روش پیشنهاد شده توسط اسپلادیز و همکارانش [۱۶۹] تولید شده است.



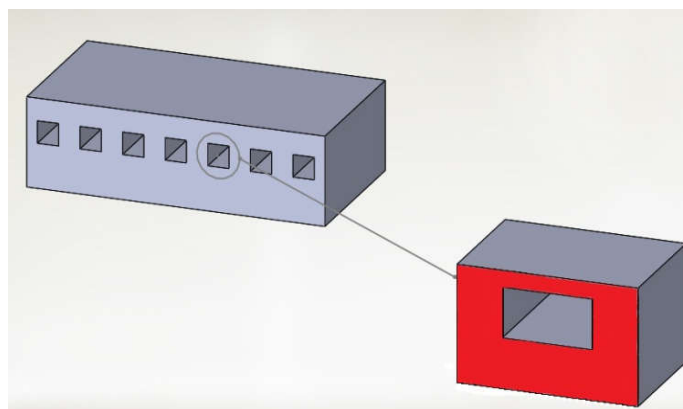
شکل ۴-۱۰: لایه انتشار گاز مصنوعی [۱۰۲].

همچنین می‌توان به شکل سه‌بعدی ۴-۱۱ اشاره کرد که فیبرها به صورت لایه لایه چیده شده و هیچ فیبری در جهت y قرار نگرفته است.



شکل ۴-۱۱: لایه انتشار گاز مصنوعی [۱۶۶].

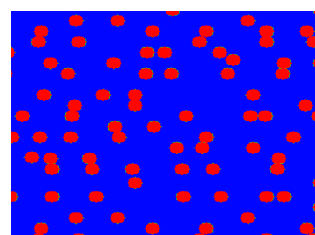
اگر در یک z دلخواه برشی از شکل سه‌بعدی ساخته شده ایجاد کنیم، شکل حاصل هندسه مورد مطالعه در این رساله است که در شکل ۴-۱۲ نمایش داده شده است. قسمت (الف) این شکل نمای کلی محیط است که به دلیل وجود تقارن در هندسه مسئله، فقط بخشی از آن را مورد بررسی قرار می‌دهیم. قسمت (ب) هندسه مورد بررسی و قسمت (ج) بزرگ‌نمایی شده‌ی آن است. نواحی آبی‌رنگ نشان‌دهنده‌ی فضای خالی و نواحی قرمز رنگ نشان‌دهنده‌ی سطوح جامد است.



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۴-۱۲: هندسه مورد بررسی: قسمت (الف) نمای کلی محیط مورد بررسی و قسمت (ب) بزرگ‌نمایی شده آن است

لایه انتشار گاز مورد بررسی به روش تصادفی ساخته شده که دارای ضخامت $400 \mu\text{m}$ [۱۶۸ و ۱۷۰] است و کانال گازی به ارتفاع $300 \mu\text{m}$ به قسمت بالای آن افزوده شده است. ناحیه محاسباتی مستطیلی به ابعاد $700 \Delta x \times 2000 \Delta x$ است که Δx همان طول شبکه (گام شبکه) است و برابر یک میکرومتر در نظر گرفته شده است بنابراین شبکه مورد استفاده دارای 701×2001 گره است. لایه انتشار گاز با قرار دادن تصادفی ذرات جامد دایره‌ای شکل در ناحیه‌ای به ضخامت $400 \Delta x$ ایجاد شده است. توجه شود که در روش شبکه بولترمن واحدهای طول، زمان و جرم با l_u ، t_s و μ نشان داده می‌شوند.

ذرات جامد دایره‌ای دارای قطر $10 l_u$ [۱۶۸] و ضریب تخلخل لایه انتشار گاز ایجاد شده 0.88 [۱۶۸] و [۱۷۰] است. ضریب نفوذپذیری محیط متخلخل ساخته شده را می‌توان با استفاده از قانون دارسی (و $u = (-K/\mu) \cdot \nabla p$) تعیین کرد. همچنین برای یک محیط متخلخل با ضریب تخلخل ϵ و قطر متوسط

ذرات d ، رابطه کوزنی- کارمن^۱ ضریب نفوذپذیری جریان را به صورت $K = (\varepsilon^3/180(1-\varepsilon)^2)d^2$ تخمین می‌زند. در جدول ۴-۴ مقادیر ضریب نفوذپذیری محاسبه شده از روش شبکه بولتزمن و رابطه کوزنی- کارمن مقایسه شده است که نتایج نشان می‌دهد تطابق بسیار خوبی بین این دو برقرار است. همچنین در این جدول نتایج تجربی ارائه شده مربوط به لایه انتشار گاز تجاری آمده است. پس مشخصات فیزیکی لایه انتشار گاز دوبعدی (ضریب نفوذپذیری، ضریب تخلخل، ابعاد و قطر فیبرهای کربن) مورد بررسی با مقادیر ارائه شده برای لایه انتشار گاز سه‌بعدی در منابع مطابقت دارد. بنابراین می‌توان فرض کرد که هندسه دوبعدی مورد نظر مقطعی از لایه انتشار گاز سه‌بعدی است.

جدول ۴-۴: مقادیر ضریب نفوذپذیری.

ضریب تخلخل	نتایج رابطه کوزنی- کارمن	نتایج شبکه بولتزمن	نتایج تجربی [۱۷۱]	نتایج تجربی [۱۷۲]
0.88	$2.6291 \times 10^{-11} m^2$	$2.70026 \times 10^{-11} m^2$	$3.1 \times 10^{-11} m^2$	$1.8 \times 10^{-11} m^2$

زاویه خیسی سطوح جامد در لایه انتشار گاز برابر 115° یا 145° [۶۱] و زاویه خیسی سطوح کانال برابر 110° در نظر گرفته شده است. در مرز پایین ناحیه محاسباتی، آب مایع با سرعت ثابت $7/877 \times 10^{-5} \text{ lu/ts}$ به درون لایه انتشار گاز تزریق می‌شود که برای اعمال آن از طرح زو و هی [۱۵۷] استفاده شده است. به دلیل تقارن هندسه شرایط مرزی سمت چپ و راست متناوب است [۶۲]. در مرز بالا (دیوار بالای کانال گاز) و روی سطوح جامد از شرط مرزی عدم لغزش (استفاده از برگشت به عقب) استفاده شده است. شرط برگشت به عقب یعنی اینکه توابع توزیع ورودی با توابع توزیع خروجی در جهت مخالف برابر باشند.

عدد رینولدز در لایه انتشار گاز برابر $0/004725$ 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 به اندازه کافی کوچک است که بتوان از اثرات ویسکوز صرف‌نظر کرد. همچنین مقدار عدد موینگی در شبیه‌سازی حاضر برابر 6×10^{-5} در نظر گرفته شده زیرا برای اطمینان از

¹ Kozeny-Carman

حاکم بودن نیروی موئینگی در انتقال آب مایع به اندازه کافی کوچک است. در این بررسی نیروی گرانش در نظر گرفته نشده است. شرایط شبیه‌سازی با توجه به اعداد بی‌بعد مربوط به انتقال آب مایع در پیل سوختی غشای مبادله پروتون انتخاب شده‌اند. عدد رینولدز در مقیاس میکرو به صورت $Re = ud/v$ تعریف می‌شود که u سرعت، d قطر ذرات و v ویسکوزیته سینماتیکی است.

همان‌طور که می‌دانیم شبیه‌سازی سه‌بعدی انتقال آب مایع در لایه متخلخل انتشار گاز واقعی‌تر است ولی نیازمند وسیله‌ی محاسباتی بینهایت بزرگ است به همین دلیل به بررسی برشی از سطح مقطع through-plane از لایه انتشار گاز سه‌بعدی ساخته شده اکتفا می‌کنیم [۱۰۳]. فیبرهای کربن در فاصله خیلی نزدیک به مرزهای ناحیه محاسباتی (مرزهای بالا، پایین، چپ و راست) قرار نگرفته‌اند [۱۰۳]. طول کانال ورودی و خروجی هوا در هندسه مورد بررسی $W = 500 \mu m$ است [۶۲]. همچنین طول قسمت دوقطبی مابین ورودی و خروجی طبق اطلاعات مرجع [۶۲] برابر $2W = 1000 \mu m$ در نظر گرفته شده است. در این مطالعه شبیه‌سازی به روش شبکه بولتزمن و با استفاده از مدل S-C دوجزئی و چند فازی صورت گرفته است.

دلیل استفاده از روش شبکه بولتزمن در فصل‌های پیشین به‌طور کامل توضیح داده شد و دلیل استفاده از مدل S-C دوجزئی و چند فازی سادگی، آسان بودن اعمال و تطبیق‌پذیری آن است که باعث شده به‌طور وسیعی برای شبیه‌سازی جریان‌های چند فازی مورد استفاده قرار گیرد [۱۳۸]. همچنین از مزیت‌های دیگر این مدل سادگی اعمال شرط مرزی در ساختارهای متخلخل پیچیده و قابلیت استفاده از انواع معادلات حالت در آن است [۸۰]. همان‌طور که بیان شد در این مدل نسبت ویسکوزیته و چگالی محدودند در صورتی که در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون این دو نسبت اعداد بزرگی هستند. توجیه استفاده از این روش در شبیه‌سازی جریان در لایه انتشار گاز کاتد پیل سوختی غشای مبادله پروتون به صورت زیر است:

۱. در جریان‌های دوفازی در لایه کاتالیزور متخلخل و لایه انتشار گاز فیبری به دلیل ساختار پیچیده و اندازه کوچک حفره‌ها، نیروهای سطحی نسبت به نیروی گرانش، ویسکوز و اینرسی از اهمیت بیشتری برخوردار بوده و بر محیط حکم‌فرما است [۸۰].
۲. همچنین با استفاده از تحلیل‌های انجام گرفته این نتیجه حاصل شده که برای شبیه‌سازی جریان دوفازی هوا-آب مایع در لایه انتشار گاز و لایه کاتالیزور پیل سوختی غشای مبادله پروتون، می‌توان با اطمینان از اثرات نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته به دلیل بیش از حد پایین بودن عدد موینگی صرف‌نظر کرد [۸۰].
۳. بر اساس دیاگرام فازی پیشنهاد شده توسط لنورمند [۱۷۳] و مطالعات وسیعی که اخیراً انجام شده است، این نتیجه حاصل شده که انتقال آب در لایه انتشار گاز در شرایط کارکرد، در محدوده رژیم انگشتی موینگی قرار دارد. در این رژیم نیروهای شناوری، ویسکوز و اینرسی جزئی و قابل صرف‌نظر کردن هستند [۶۱]. برای مثال در فرآیند انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز، عدد باند نشان‌دهنده نسبت نیروی‌های گرانش به کشش سطحی است ($B0 = g(\rho_w - \rho_a)d_p^2/\sigma$) و از مرتبه 10^{-5} است [۶۱]. در این رابطه g نشان‌دهنده شتاب گرانش، $(\rho_w - \rho_a)$ نشان‌دهنده اختلاف چگالی بین آب مایع و هوا و d_p نشان‌دهنده قطر حفره است. همچنین عدد موینگی نشان‌دهنده نسبت نیروهای ویسکوز به کشش سطحی است و از مرتبه 10^{-8} است و به صورت $(Ca = u_w \mu_w / \sigma)$ تعریف می‌شود [۶۱] که u_w نشان‌دهنده سرعت جریان آب مایع و μ_w ویسکوزیته دینامیکی آب مایع است. همچنین عدد رینولدز نشان‌دهنده نسبت نیروی اینرسی به ویسکوز است و است از مرتبه 10^{-5} است [۶۱]. مقادیر این سه عدد بی‌بعد نشان می‌دهد که کشش سطحی بسیار عمده‌تر و حکم‌فرما تر از نیروی ویسکوز، اینرسی و گرانش است؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که نسبت‌های ویسکوزیته و چگالی سیال اثری ناچیز بر انتقال جریان دوفازی در لایه انتشار گاز دارد که علت، کوچک بودن بیش از حد اعداد باند، موینگی و رینولدز است [۶۱].

بنابراین در مطالعه جریان دوفازی در لایه انتشار گاز می‌توان با اطمینان از اثرات نسبت‌های ویسکوزیته و چگالی بر جریان دوفازی صرف‌نظر کرد و چگالی‌های آب و گاز را به صورت دلخواه و برابر در نظر گرفت.

مطالعات زیادی وجود دارد که از این فرض برای بررسی لایه انتشار گاز استفاده کرده‌اند که در زیر به برخی از آن‌ها اشاره می‌شود:

مرجع [۶۱] نسبت ویسکوزیته آب به گاز را جهت جلوگیری از ناپایداری‌های عددی که ممکن است در نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته بالا رخ دهد مقدار دو در نظر گرفته است.

مرجع [۱۷۴] نیز چگالی هر دو سیال را برابر یک و ویسکوزیته سینماتیکی آن‌ها را $0/1667$ در نظر گرفته است.

در مراجع [۸۲، ۱۲۰ و ۱۷۵] مقادیر نسبت‌های ویسکوزیته و چگالی برای شبیه‌سازی جریان دوفازی به صورت دلخواه فرض شده است.

در مطالعه گاوو^۱ [۱۷۶] به منظور پایداری عددی، چگالی هر دو سیال برابر یک و ویسکوزیته سینماتیکی آن‌ها به ترتیب $0/1667$ و $0/2334$ است.

کویدو و همکارانش^۲ [۱۶۰] چگالی مایع و گاز را به ترتیب 160 و 80 و ویسکوزیته دینامیکی دو سیال را $16/7$ و $50/1$ در نظر گرفته‌اند.

چن و همکارانش^۳ [۱۰۳ و ۶۲] چگالی هر دو سیال را 2 در نظر گرفتند.

ملایی‌منش و اکبری^۴ [۱۷۷] چگالی دو سیال را $5/25$ و 2 در نظر گرفته‌اند.

جین و کیم^۵ [۱۶۸] نیز مشابه نویسندگان ذکر شده عمل کردند.

¹ Gao

² Koido et al.

³ Koido et al.

⁴ Molaieimanes, Akbari

⁵ Jeon and Kim

بر اساس توضیحات بیان شده در بالا، برای جلوگیری از ناپایداری‌های عددی که ممکن است در این روش در نسبت‌های چگالی و ویسکوزیته بالا اتفاق افتد، ویسکوزیته سینماتیکی آب و هوا در واحد شبکه بولتزمن برای هر دو سیال برابر 0.1667 در نظر گرفته شده است.

در لحظه ابتدایی در سطر اول ناحیه محاسباتی، سیال ۱ (آب مایع) و در بقیه نواحی، سیال ۲ (هوا) قرار گرفته است. چگالی آب مایع در لحظه ابتدایی در سطر اول برابر یک و در بقیه نقاط برابر صفر است ولی چگالی هوا در سطر اول برابر صفر و در بقیه نقاط برابر ۱ در نظر گرفته شده است (برای سادگی محاسبات، چگالی هر دو فاز برابر $1 \text{ mu}/(\text{lu}^3)$ در نظر گرفته شده است).

توجه شود که تبدیل زمان از واحد شبکه بولتزمن به واحد فیزیکی به صورت زیر است:

بین واحدهای شبکه بولتزمن و فیزیکی رابطه $Q = \tilde{Q} \times C_Q$ برقرار است که \tilde{Q} نشان‌دهنده واحد شبکه بولتزمن، C_Q ضریب تبدیل و Q واحد فیزیکی است. در حالت فیزیکی ضخامت محیط μm $H = 400$ و در شبکه بولتزمن $H = 400$ در نظر گرفته شده است پس $C_H = H/\tilde{H} = 400 \times 10^{-6} / 400 = 10^{-6}$ حال با توجه به واحد ویسکوزیته سینماتیکی رابطه $C_t = (\tilde{\nu}/\nu) \times C_H^2$ برقرار است که با جایگزاری مقادیر خواهیم داشت $C_t = (0.1667/10^{-6}) \times (10^{-6})^2 = 0.1667 \times 10^{-6}$ پس برای تبدیل زمان از واحد شبکه بولتزمن به واحد فیزیکی کافی است زمان مورد نظر در $C_t = 0.1667 \times 10^{-6}$ ضرب شود.

۴-۸ محدوده ضریب تخلخل، زاویه خیسی و عدد موینگی

محدوده ضریب تخلخل در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون که در مطالعات میکروسکوپی ذکر شده‌اند در جدول ۴-۵ آورده شده است:

جدول ۴-۵: محدوده ضریب تخلخل در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون در مطالعات میکروسکوپی.

شماره	نویسندگان	نوع شبیه‌سازی	ضریب تخلخل
۱	هاوو ^۱ و چن ^۲ [۶۱]	سه‌بعدی	۰/۷۹
۲	تاب و همکارانش ^۳ [۹۰]	دو‌بعدی	۰/۸
۳	چن و همکارانش ^۴ [۶۲]	دو‌بعدی	۰/۸۷
۴	مدیسی ^۵ و آلن ^۶ [۹۶]	دو‌بعدی	۰/۶۵
۵	چن و همکارانش ^۷ [۹۴]	دو‌بعدی	۰/۷۲
۶	ماخرجی و همکارانش ^۸ [۸۰]	سه‌بعدی	۰/۷۲
۷	کیم و همکارانش ^۹ [۱۷۴]	دو‌بعدی	۰/۷۲
۸	هاوو و چن [۹۲]	سه‌بعدی	۰/۷۹
۹	جین و کیم [۱۶۸]	دو‌بعدی	۰/۸۸
۱۰	لی و همکارانش ^{۱۰} [۷۷ و ۱۷۸]	سه‌بعدی	۰/۶۳۳
۱۱	ملایی‌منش و اکبری ^{۱۱} [۱۶۷]	سه‌بعدی	۰/۷۸
۱۲	کویدو و همکارانش [۱۶۰]	سه‌بعدی	۰/۸
۱۳	چن و همکارانش [۱۰۳]	دو‌بعدی	۰/۸۷
۱۴	چن و همکارانش [۱۰۲]	دو‌بعدی	۰/۸

همچنین در مرجع [۱۷۹] محدوده ضریب تخلخل برای لایه انتشار گاز بین ۰/۷ تا ۰/۸ ذکر شده است و در مرجع [۱۸۰] لایه انتشار گاز به صورت یک محیط بسیار متخلخل و دارای ضریب تخلخل بزرگ‌تر از ۰/۷ معرفی شده است. علاوه بر این مرجع [۱۸۱] محدوده ضریب تخلخل برای لایه انتشار گاز را بین ۰/۶ تا ۰/۹ بیان کرده است. محدوده زاویه خیزی در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون که در مطالعات میکروسکوپی ذکر شده‌اند به صورت زیر است:

-
- ¹ Hao
 - ² Cheng
 - ³ Tabe et al.
 - ⁴ Chen et al.
 - ⁵ Medici
 - ⁶ Allen
 - ⁷ Chen et al.
 - ⁸ Mukherjee et al.
 - ⁹ Kim et al.
 - ¹⁰ Lee et al.
 - ¹¹ Molaeimanesh, Akbari

جدول ۴-۶: محدوده زاویه خیسی در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون در مطالعات میکروسکوپی.

شماره	نویسندگان	شبیه‌سازی	زاویه خیسی سطوح آب‌گریز	زاویه خیسی سطوح آب‌دوست
۱	هاوو و چن [۶۱]	سه‌بعدی	115° و 145°	80°
۲	تاب و همکارانش [۹۰]	دو‌بعدی	150°	-
۳	چن و همکارانش [۶۲]	دو‌بعدی	100° تا 130°	-
۴	ماخرجی و همکارانش [۸۰]	سه‌بعدی	140°	80°
۵	کویدو و همکارانش [۱۶۰]	سه‌بعدی	135°	-
۶	لی و همکارانش [۷۷]	سه‌بعدی	120°	-
۷	کیم و همکارانش [۱۷۴]	دو‌بعدی	100° ، 120° و 140°	-
۸	چن و همکارانش [۱۰۲]	دو‌بعدی	120°	60°
۹	چن و همکارانش [۱۰۳]	دو‌بعدی	120°	60°
۱۰	ملایی‌منش و اکبری [۱۰۱]	دو‌بعدی	130° تا 150°	80°
۱۱	ملایی‌منش و اکبری [۱۷۷]	دو‌بعدی	115°	80°
۱۲	مدیسی و آلن [۹۶]	دو‌بعدی	110°	-
۱۳	هاوو و چن [۹۲]	سه‌بعدی	115° و 145°	-
۱۴	جین و کیم [۱۶۸]	دو‌بعدی	130°	-
۱۵	لی و همکارانش [۱۷۸]	سه‌بعدی	120°	-

مقادیر اعداد بی‌بعد و سرعت آب ورودی به لایه انتشار گاز در مطالعات میکروسکوپی در جدول ۴-۷ خلاصه شده است. با توجه به پایین بودن مقدار سرعت آب مایع، انتقال آن بسیار کند خواهد بود و باید شبیه‌سازی در مدت‌زمان زیادی صورت گیرد. توجه شود که در لایه انتشار گاز علت پایین بودن عدد موینگی، پایین بودن سرعت آب مایع تزریق شده به این لایه است که دلیل آن نیز پایین بودن سرعت تولید آب در لایه کاتالیزور است [۷۷].

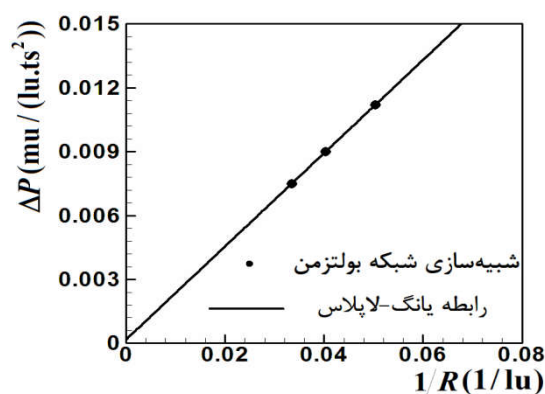
جدول ۴-۷: اعداد بی‌بعد و سرعت آب ورودی به لایه انتشار گاز در مطالعات میکروسکوپی.

شماره	نویسندگان	شبیه‌سازی	عدد موینگی	سرعت آب ورودی	عدد رینولدز آب
۱	هاوو و چن [۶۱]	سه‌بعدی	4.5×10^{-7}	7.5×10^{-5}	-
۲	گاوو [۱۷۶]	سه‌بعدی	2.47×10^{-8} - 1.92×10^{-7}	-	2.12×10^{-4} - 1.65×10^{-4}
۳	کویدو و همکارانش [۱۶۰]	سه‌بعدی	کمتر از 10^{-5}	7×10^{-4}	کمتر از 10^{-2}
۴	کیم و همکارانش [۱۷۴]	دو‌بعدی	4.76×10^{-6}	-	3.84×10^{-3}
۵	چن و همکارانش [۱۰۲]	دو‌بعدی	4×10^{-5}	-	-
۶	چن و همکارانش [۱۰۳]	دو‌بعدی	4×10^{-7}	-	-
۷	جین و کیم [۱۶۸]	دو‌بعدی	1.2×10^{-5}	-	6×10^{-3}

لی و همکارانش [۱۷۸] بیان کرده‌اند که حتی اگر کل بخار آب تولید شده در لایه کاتالیزور تبدیل به مایع شده و وارد لایه انتشار گاز شود باز هم سرعت آب مایع بسیار کم خواهد بود و رژیم جریان، انگشتی موئینگی است.

در این بررسی از معادله حالت $\psi = \rho$ استفاده شده و پارامترهای مورد نیاز به صورت $G_{11} = G_{22} = 0, G_{12} = G_{21} = 4, \tau_1 = \tau_2 = 1, \nu_1 = \nu_2 = 0.1667$ است. در این قسمت برای تأیید درستی برنامه استفاده شده، دو حالت صحت‌سنجی جهت تعیین برخی پارامترهای فیزیکی مورد نیاز برای شبیه‌سازی جریان دوفازی انجام شده 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. صحت‌سنجی اول مربوط به آزمون قطره برای محاسبه G_c و صحت‌سنجی دوم مربوط به آزمون قطره ساکن برای ارزیابی G_{ads} است.

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. تغییرات اختلاف فشار بین مرز مشترک دو سیال برحسب $1/R$ در شکل ۴-۱۳ رسم شده است.

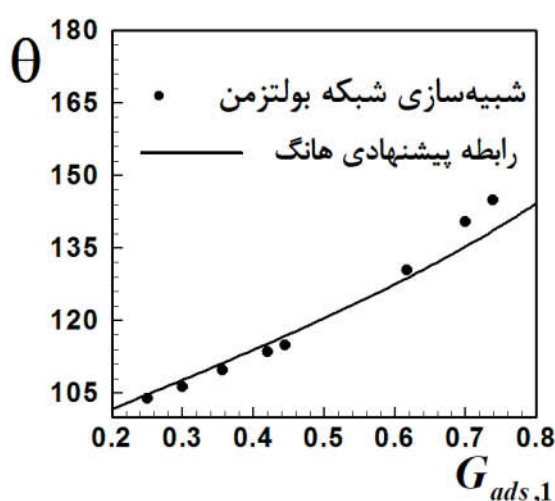


شکل ۴-۱۳: رابطه بین ΔP و $1/R$.

نقاط نشان داده شده روی شکل، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی عددی و خط رسم شده از بین این نتایج مربوط به قانون لاپلاس است. شیب خط رسم شده در این شکل بیانگر کشش سطحی است که

برابر $0.218849 \mu\text{m}/(\text{ts}^2)$ است. تطابق خوب بین نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمن و معادله لاپلاس درستی برنامه مورد استفاده را تأیید می‌کند.

برای انجام آزمون قطره ساکن، یک نیم قطره از مایع در غیاب هرگونه نیروی حجمی در مرکز هندسی دیوار پایین قرار می‌گیرد. وقتی این قطره در مرز پایین به حالت پایا رسید با اندازه‌گیری شعاع قطره R ، ارتفاع a_0 و طول خیس‌کنندگی b_0 می‌توان زاویه خیزی آن را تعیین کرد [۱۸۲]. رابطه بین زاویه خیزی اندازه‌گیری شده و $G_{ads,1}$ در شکل ۴-۱۴ نشان داده شده است.



شکل ۴-۱۴: زاویه خیزی به صورت تابعی از قدرت اثر متقابل سیال - جامد.

در شکل ۴-۱۴ زاویه‌های خیزی به دست آمده از شبیه‌سازی عددی (نقاط دایره‌ای) با نتایج به دست آمده از رابطه ارائه شده توسط هانگ و همکارانش (خط رسم شده) [۱۴۹] مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل، نتایج شبیه‌سازی شبکه بولتزمن تطابق بسیار خوبی با این رابطه دارند. توجه شود که زاویه‌های خیزی مختلفی با تغییر $G_{ads,1}$ ایجاد می‌شوند.

حرکت سیال را می‌توان بر اساس نسبت بین مسافت آزاد میانگین مولکولی و مقیاس طول فیزیکی در رژیم‌های مختلف بیان کرد. مسافت آزاد میانگین مولکولی، طولی است که مولکول قبل از برخورد با مولکول‌های دیگر طی می‌کند و مقیاس طول فیزیکی، مشخصه اندازه‌ی سیستم است. این نسبت به‌عنوان عدد نادسن^۱ در نظریه جنبشی شناخته می‌شود [۱۷۶]. اگر این عدد به‌اندازه کافی کوچک

¹ Knudsen number

باشد، سیال می‌تواند به صورت پیوسته فرض شود و حرکتش با استفاده از متغیرهای ماکروسکوپی مانند سرعت و چگالی توصیف گردد. اگر عدد نادسن بزرگ باشد، رفتار سیال به صورت محیطی پیوسته نیست و باید از روش‌های جایگزینی برای شبیه‌سازی حرکت آن استفاده کرد. از آنجایی که عدد نادسن برای هوا در لایه متخلخل میکرو در شرایط کارکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون از مرتبه $0.1/0$ است بنابراین می‌تواند به صورت محیطی پیوسته در نظر گرفته شود که توجیهی برای اعمال شرط مرزی عدم لغزش با استفاده از برگشت به عقب است [۱۷۴].

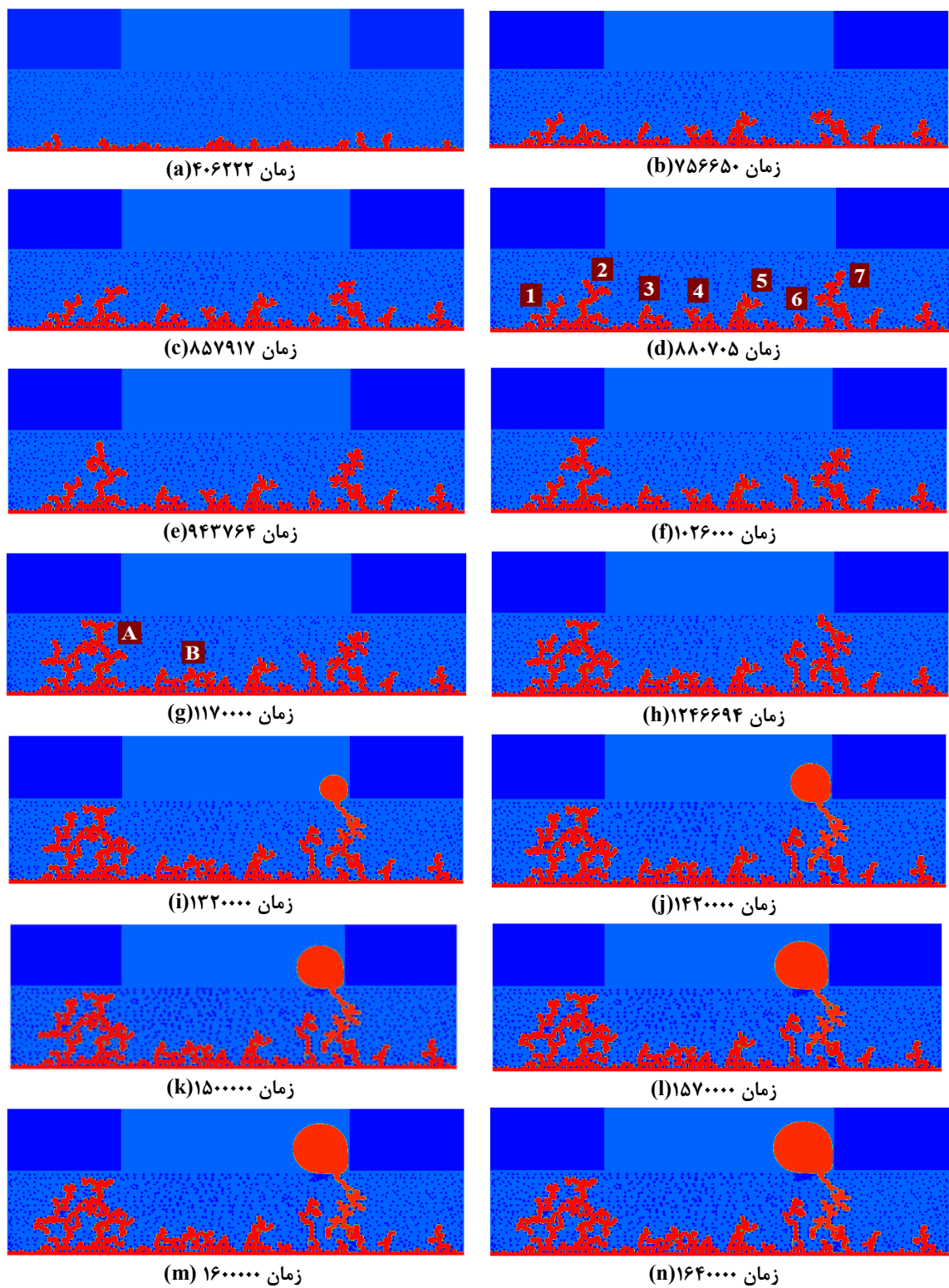
۹-۴ نتایج

۱-۹-۴ بررسی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز

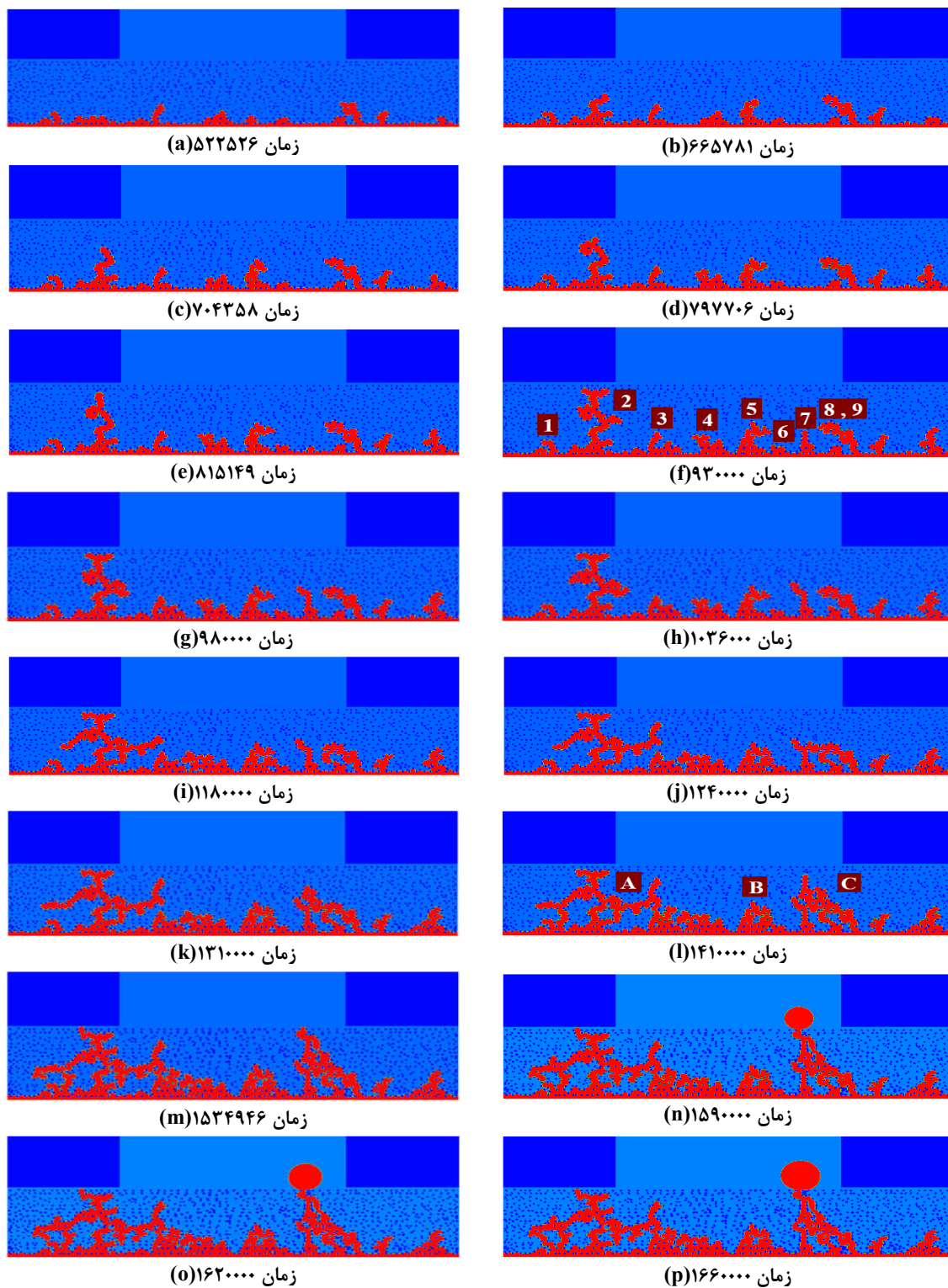
در این قسمت ابتدا به بررسی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز می‌پردازیم و اثر زاویه خیزی را بر رفتار آب مایع مطالعه می‌کنیم.

شکل‌های ۱۵-۴ و ۱۶-۴ توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی را نشان می‌دهند که به ترتیب مربوط به زاویه‌های خیزی 145° و 115° است. با توجه به شکل (a) ۱۵-۴ به دلیل هجوم آب مایع از لایه کاتالیزور به لایه انتشار گاز، خوشه‌های آب مایع بسیار کوچکی شکل گرفته‌اند. این خوشه‌ها به هفت خوشه بزرگ که آن‌ها را خوشه‌های مؤثر می‌نامیم گسترش می‌یابند. در شکل‌های توزیع آب، رنگ‌های قرمز و آبی به ترتیب بیانگر آب مایع و هوا هستند. این خوشه‌ها به ترتیب با اندیس‌های ۱ تا ۷ در شکل (d) ۱۵-۴ نام‌گذاری شده‌اند. علاوه بر این خوشه‌ها، چهار خوشه-ی 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.

در الگوی انگشتی مویبندی نیروی اصلی نیروی مویبندی است بنابراین سیال جابجا کننده ترجیح می‌دهد برای حرکت خود از میان حفره با بیشترین گلوگاه (جایی که کمترین فشار مویبندی برای حمله وجود داشته باشد) عبور کند [۹۵].

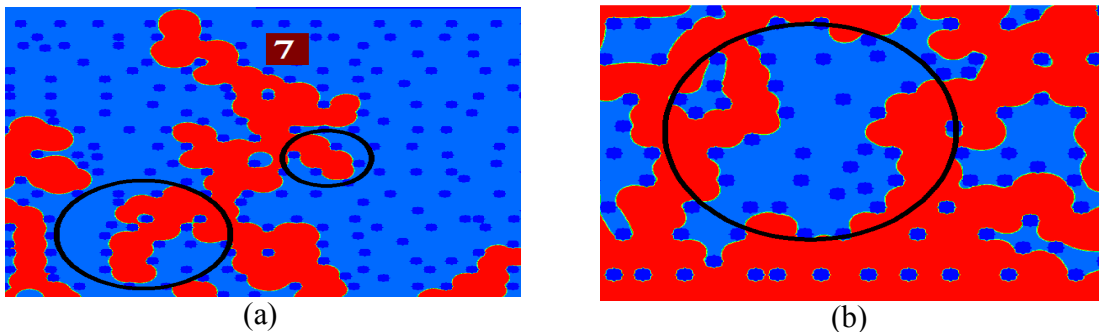


شکل ۴-۱۵: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه خیزی 145° .



شکل ۴-۱۶: بررسی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز با زاویه خیزی 115° .

در الگوی انگشتی موبینگی انگشتی‌ها در تمام جهت‌ها حتی برگشت به عقب نیز حرکت می‌کنند که نتایج شبیه‌سازی حاضر این موضوع را نشان می‌دهد. برای مثال قسمتی از خوشه شماره ۷ که در شکل (a) ۴-۱۷ با دایره مشکی نشان داده شده در جهت عقب و به سمت لایه کاتالیزور پیشروی کرده است. همچنین سیال جابجا شده ممکن است به دلیل گسترش حلقه‌های تشکیل شده توسط انگشتی‌ها به دام بیفتد [۱۰۶] که نتایج بدست آمده از این شبیه‌سازی مطابق شکل (b) ۴-۱۷ (با دایره مشکی نشان داده شده است) این موضوع را تأیید می‌کند. بنابراین رفتار آب مایع تحت شرایط شبیه‌سازی (در نظر گرفتن مقدار $10^{-5} \times 6$ برای عدد موبینگی) در محدوده رژیم انگشتی موبینگی است.



شکل ۴-۱۷: نمایش حرکت رو به عقب خوشه‌ها در مرحله زمانی ۱۲۴۶۶۹۴ (سمت چپ) و تشکیل حلقه در مرحله زمانی ۱۳۲۰۰۰۰ (سمت راست) در لایه انتشار گاز با زاویه خیسی 145° . همان‌طوری که از شکل (g) ۴-۱۵ مشخص است خوشه‌های آب مایع ۱ و ۲ در لایه انتشار گاز به هم متصل شده و با هم 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 (g) ۴-۱۵). نکات زیر را می‌توان از شکل ۴-۱۵ استخراج کرد (زمان‌های ارائه شده در واحد شبکه بولتزمن هستند):

الف- توقف رشد برخی از خوشه‌ها

در مرحله‌های زمانی ۷۵۶۶۵۰، ۱۲۴۶۶۹۴ و ۱۳۲۰۰۰۰ رشد خوشه‌های ۵، ۶ و ۷ متوقف شده است (به ترتیب شکل‌های (b) ۴-۱۵، (h) ۴-۱۵ و (i) ۴-۱۵).

ب- اتصال برخی از خوشه‌ها

خوشه‌های ۳ و ۴ در مرحله زمانی ۱۱۷۰۰۰۰ به هم متصل شده و خوشه جدید B را ایجاد می‌کنند که در این زمان رشد خوشه جدید (B) متوقف می‌شود (شکل (g) ۴-۱۵).

ج- حرکت رو به عقب برخی از خوشه‌ها

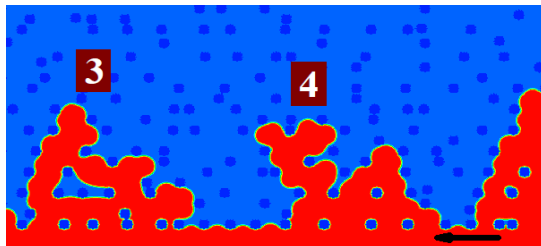
با مقایسه شکل‌های (f) ۴-۱۵ و (g) ۴-۱۵ مشخص است که رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده در حالی که برخی شاخه‌های این خوشه در جهت عقب در حال پیشروی هستند. این خاصیت به دلیل شرایط انگشتی مویینگی است که رژیم حاکم در پیل سوختی غشای مبادله پروتون است. توجه شود که حرکت روبه عقب خوشه‌های آب مایع اثر منفی بر عملکرد پیل سوختی دارد.

د- رسیدن برخی از خوشه‌ها به کانال گاز

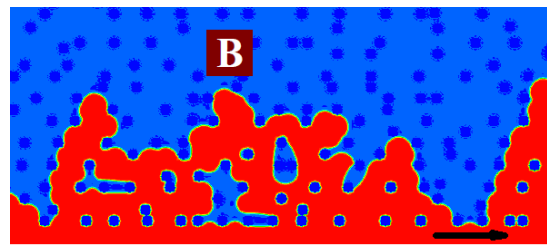
در مرحله زمانی ۱۱۷۰۰۰۰ رشد خوشه ۷ به سمت کانال گاز تقریباً متوقف شده است. به علت توقف رشد خوشه B در همین زمان، آب مایع مسیر خوشه B را برای حرکت خود به سمت کانال انتخاب نکرده و از میان خوشه ۷ به حرکت خود ادامه می‌دهد. این موضوع باعث رشد مجدد خوشه ۷ به سمت کانال گاز شده و باعث می‌شود آب مایع از میان این خوشه خود را به کانال گاز برساند (این موضوع در شکل ۴-۱۸ نشان داده شده است که جهت پیکان جهت حرکت سیال را نشان می‌دهد).

ه- تشکیل حلقه‌های بسته

خوشه‌های آب مایع متصل شده تشکیل حلقه می‌دهند. هر چه عمل اتصال بین خوشه‌ها دیرتر صورت گیرد، حلقه تشکیل شده بزرگ‌تر خواهد بود. سیال جابجا شده (هوا) بین حلقه‌های ایجاد شده در اثر رشد خوشه‌ها به دام می‌افتد (شکل (g) ۴-۱۵) بنابراین تشکیل حلقه 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.



قبل از توقف



بعد از توقف

شکل ۴-۱۸: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه خیسی 145° .

برای زاویه خیسی 115° آب مایع به صورت ۹ خوشه بزرگ گسترش پیدا می‌کند که این خوشه‌ها با شماره‌های ۱ تا ۹ در شکل (f) ۱۶-۴ نمایش داده شده‌اند. علاوه بر این‌ها دو خوشه‌ی آب مایع دیگر وجود دارد که به دلیل توقف رشد آن‌ها در مراحل زمانی اولیه، در نظر گرفته نمی‌شوند. همان‌طوری که در شکل (l) ۱۶-۴ مشخص است، خوشه‌های آب مایع ۱، ۲ و ۳ در لایه انتشار گاز به هم متصل شده و خوشه جدید A را تشکیل می‌دهند. همچنین خوشه‌ی B از اتصال خوشه‌های ۵ و ۶ و خوشه‌ی C از اتصال خوشه‌های ۷، ۸ و ۹ به وجود می‌آیند. با توجه به شکل ۱۶-۴ نکات زیر را می‌توان استخراج کرد (زمان‌های ارائه شده در واحد شبکه بولتزمن است):

الف- توقف رشد برخی از خوشه‌ها

در زمان‌های 1240000 ، 1590000 و 1180000 به ترتیب رشد خوشه‌های A، B و ۴ متوقف شده است (به ترتیب شکل‌های (j) ۱۶-۴، (n) ۱۶-۴ و (i) ۱۶-۴).

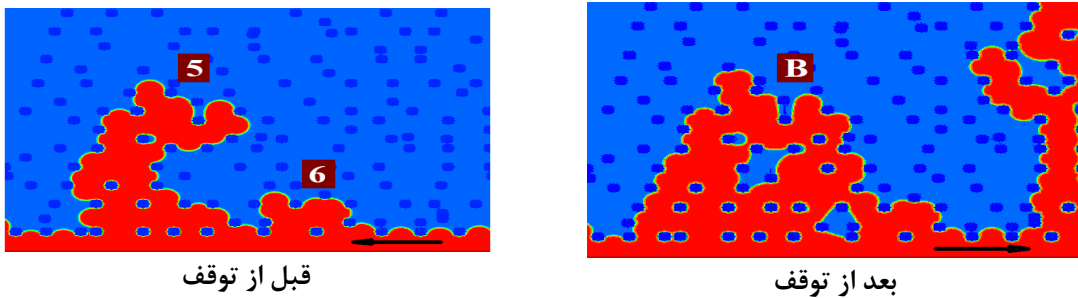
ب- اتصال برخی از خوشه‌ها

خوشه‌های ۱، ۲ و ۳ در زمان 1410000 (شکل (l) ۱۶-۴)، خوشه‌های ۷، ۸ و ۹ در زمان 1240000 (شکل (j) ۱۶-۴) و خوشه‌های ۵ و ۶ در زمان 1180000 (شکل (i) ۱۶-۴) به هم متصل شده‌اند.

ج- رسیدن برخی از خوشه‌ها به کانال گاز

در زمان 1240000 رشد خوشه‌ی B به سمت کانال گاز متوقف شده و آب مایع مسیر این خوشه را برای حرکت به سمت کانال گاز انتخاب نمی‌کند بنابراین آب مایع از میان خوشه‌ی C حرکت کرده و خود را

کانال گاز می‌رساند (این موضوع در شکل ۴-۱۹ نشان داده شده که جهت پیکان نشان‌دهنده‌ی جهت حرکت سیال است).



شکل ۴-۱۹: رفتار دینامیکی آب مایع قبل و بعد از توقف خوشه B برای زاویه خیسی 115° .

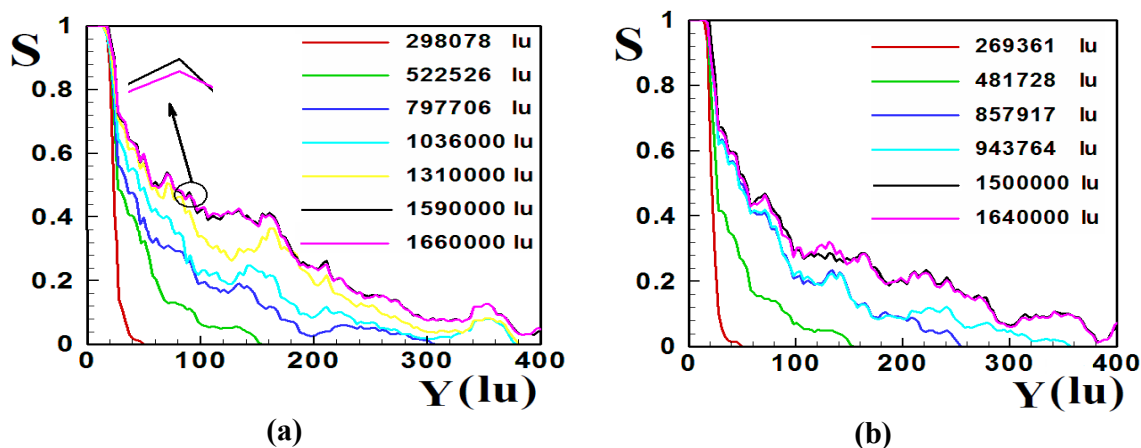
تعداد عمل اتصال بین خوشه‌ها در زاویه خیسی 115° بیشتر از زاویه خیسی 145° است. هیچ‌کدام از خوشه‌های آب مایع متصل شده به هم در حالتی که زاویه خیسی 145° است نتوانسته‌اند خود را به کانال گاز برسانند ولی در زاویه خیسی 115° خوشه‌ی آب مایع C توانسته خود را به کانال گاز برساند. حجم سیال جابجا شده (هوا) که به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

۴-۹-۱- روش‌های تعیین حالت پایا

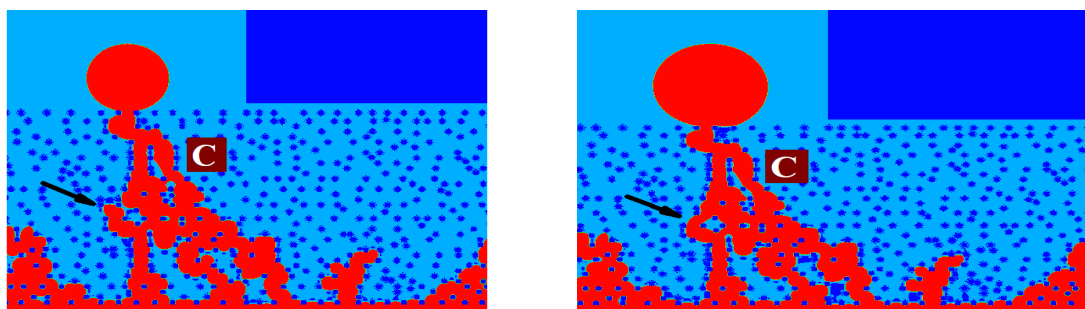
روش اول: اشباع محلی آب مایع در لایه انتشار گاز

شکل ۴-۲۰ تغییر توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز را با نمودار اشباع آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی بیان می‌کند. اشباع آب مایع به صورت نسبت حجم آب مایع به حجم فضای خالی تعریف شده و با S نمایش داده می‌شود و به دو صورت محلی یا کلی محاسبه می‌گردد. در حالت محلی اشباع آب مایع در Y‌های مختلف محاسبه شده و به صورت نمودار S-Y بیان می‌شود. در حالت کلی اشباع آب مایع در کل محیط محاسبه شده و به صورت نمودار S-t توصیف می‌شود. توجه شود که برای رسم نمودار ۲۰ کافی است در زمان موردنظر در هر ارتفاعی از لایه انتشار گاز (Y) نسبت آب مایع به فضای خالی تعیین شود. در این نمودار رنگ‌های مختلف نشان‌دهنده زمان‌های مختلف شبیه‌سازی است. با توجه به این نمودار

توزیع اشباع آب مایع محلی در لایه انتشار گاز برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° در زمان‌های 1590000 و 1500000 به حالت توسعه‌یافته‌ی خود می‌رسد. منظور از حالت توسعه‌یافته این است که خوشه‌های آب مایع به حالت پایای خود رسیده و تغییرات اشباع آب مایع محلی با گذشت زمان ناچیز خواهد بود. شکل ۲۰-۴ نشان می‌دهد که توزیع اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز تا زمانی که قطره‌های آب مایع در کانال گاز شکل گیرند و مقدار اشباع آب مایع به حالت پایا برسد، به‌طور پیوسته در حال افزایش است.



شکل ۲۰-۴: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (a) زاویه خیسی 115° (b) زاویه خیسی 145° . مقدار اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز دارای کاهش‌های محلی در برخی نقاط است که مربوط به جهت‌گیری برخی از جبهه‌های آب مایع به سمت کانال گاز است که در شکل ۲۱-۴ نشان داده شده است.



شکل ۲۱-۴: رفتار دینامیکی آب مایع برای زاویه خیسی 115° .

با توجه به شکل ۲۰-۴ می‌توان ضخامت لایه انتشار گاز را به چهار قسمت تقسیم کرد:

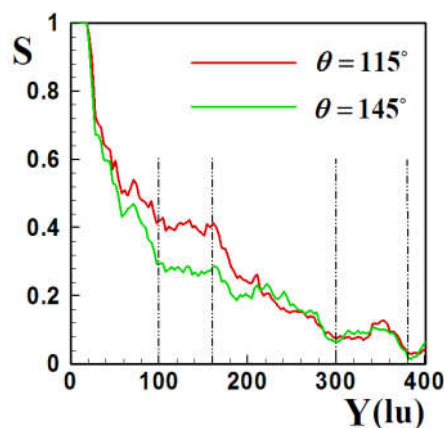
قسمت اول: $0 < y < 100$: در این بخش مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز از مقدار یک در مرز لایه کاتالیزور- لایه انتشار گاز تا حدود $0/4$ و $0/3$ برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° به‌طور شدیدی کاهش می‌یابد.

قسمت دوم: $100 < y < 160$: در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز تقریباً یکنواخت است.

قسمت سوم: $160 < y < 300$: در این قسمت مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا به‌طور ملایم کاهش می‌یابد.

قسمت چهارم: $380 < y < 400$: در این بخش مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا افزایش می‌یابد که علت تغییر قابل توجه در اندازه حفره‌ها بین دو لایه انتشار گاز و کانال گاز است.

شکل ۴-۲۲ اثر زاویه خیسی را بر اشباع آب مایع نشان می‌دهد. با توجه به شکل بیشترین اختلاف این دو نمودار مربوط به ناحیه $50 < y < 220$ است پس بیشترین اثر زاویه خیسی مربوط به این ناحیه از لایه انتشار گاز است چون بیشترین تعداد خوشه‌های آب مایع در این ناحیه قرار گرفته‌اند پس با تغییر زاویه خیسی، حجم اشغال شده توسط خوشه‌های آب مایع بیشترین تغییرات را دارد و محتوای آن به‌طور قابل توجهی تغییر می‌یابد.

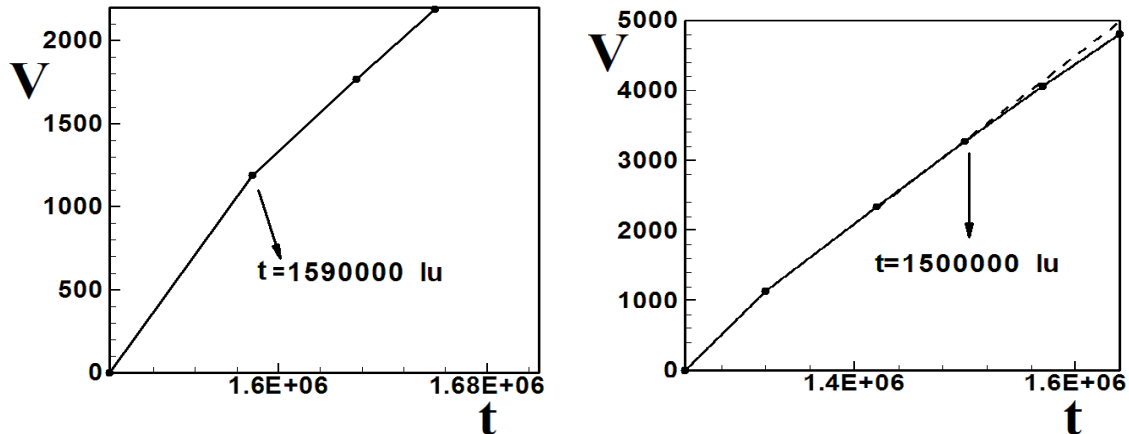


شکل ۴-۲۲: مقایسه اشباع محلی آب مایع برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° .

همان طوری که قبلاً بیان شد توزیع اشباع آب مایع محلی در لایه انتشار گاز برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° در زمان‌های 1590000 و 1500000 به حالت پایا می‌رسد. علاوه بر روش اول، برای تعیین حالت پایا دو روش زیر پیشنهاد می‌شود که روش دوم بررسی دبی حجمی آب مایع در کانال گاز و روش سوم تعیین اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز است.

روش دوم: بررسی دبی حجمی آب مایع در کانال گاز

در این روش حجم آب مایع در کانال گاز برحسب زمان رسم می‌شود (شکل ۴-۲۳). این نمودار خطی است. با بررسی تغییرات شیب این نمودار، زمان حالت پایا تعیین می‌شود. زمانی که شیب این نمودار ثابت شده و بدون تغییر باقی بماند متناظر با زمان شروع حالت پایا است. در این حالت شیب این نمودار برابر دبی حجمی جریان آب مایع ورودی است. با توجه به نمودار ۴-۲۳ زمان حالت پایا برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° به ترتیب 1590000 و 1500000 است.

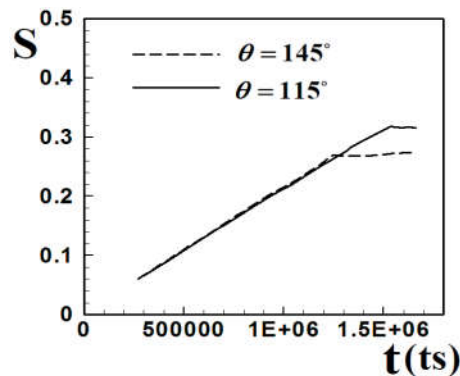


شکل ۴-۲۳: حجم آب مایع در کانال گاز برحسب زمان برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° .

روش سوم: تعیین اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز

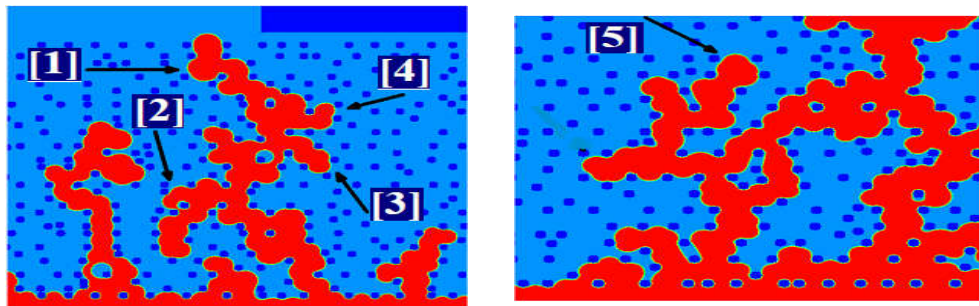
در این قسمت به بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز برحسب زمان پرداخته شده است (شکل

۴-۲۴).

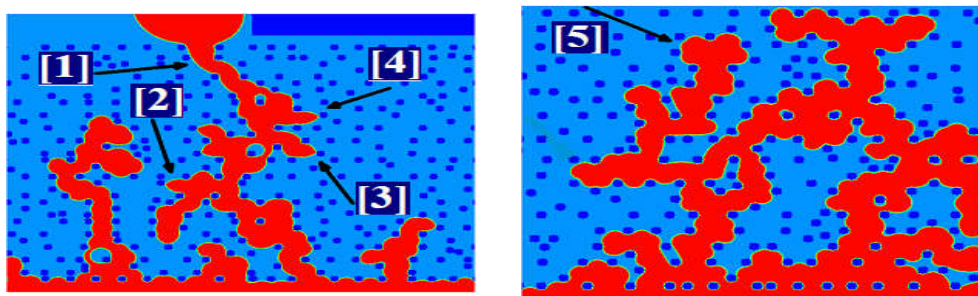


شکل ۴-۲۴: اشباع کلی آب مایع برای زاویه‌های خیزی 115° و 145° .

لایه انتشار گاز (شکل (ب) ۴-۱۲) می‌تواند به صورت یک حجم کنترل در نظر گرفته شود. اعمال قانون بقای جرم برای این حجم کنترل به صورت $dM/dt = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out}$ است. با توجه به شکل ۴-۲۴ این نمودار به دو قسمت خطی و هموار تقسیم می‌شود: قسمت خطی مربوط به زمان‌هایی است که هنوز آب مایع به کانال گاز نرسیده است. در این حالت دبی خروجی از انتهای لایه انتشار گاز (ورودی به کانال گاز) صفر و تغییرات زمانی جرم درون این لایه برابر دبی جرمی آب ورودی است. چون آب مایع ورودی ثابت و یکنواخت است پس نمودار در این حالت خطی با شیب مثبت و ثابت است. در بخش دوم نمودار، خوشه‌های آب مایع به کانال گاز رسیده و قطره‌های آب مایع شکل گرفته‌اند. در این حالت تغییرات جرم درون لایه انتشار گاز صفر است بنابراین یک بخش تقریباً هموار برای اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز به دست می‌آید که شرایط حالت‌پایا متناظر با شروع این بخش است. در حالت‌پایا دبی جرمی مرزهای ورودی و خروجی برابرند. اگر شیب قسمت خطی نمودار (S-t) در حجم فضای خالی لایه انتشار گاز ضرب شود شیب نمودار (V-t) در حالت‌پایا (دبی حجمی آب مایع ورودی به لایه انتشار گاز) به دست می‌آید. زمان حالت‌پایای محاسبه شده با استفاده از این روش مقداری کمتر از حالت واقعی است زیرا معیار رسیدن به حالت‌پایا، ثابت ماندن اشباع کلی آب مایع است یعنی اگر در محلی مقداری از اشباع آب مایع کم و در محلی دیگر به همان اندازه زیاد شود این روش قادر به تشخیص این تغییرات نیست.



الف. مرحله زمانی ۱۲۴۶۶۹۴



ب. مرحله زمانی ۱۳۲۰۰۰۰

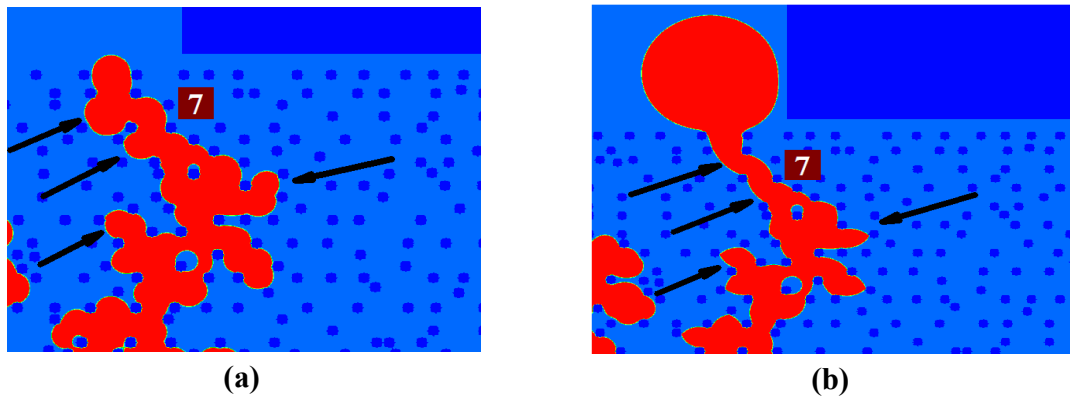
شکل ۴-۲۵: رفتار دینامیکی خوشه‌های آب مایع در لایه انتشار گاز برای زاویه خیسی 145° . برای نمونه در شکل ۴-۲۵ توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز برای زاویه خیسی 145° در دو زمان ۱۲۴۶۶۹۴ و ۱۳۲۰۰۰۰ نشان داده شده است. بر اساس این نمودار در برخی از نقاط لایه انتشار گاز، حجم آب مایع کاهش (شکل سمت چپ) و در بخش‌های دیگر افزایش یافته است (شکل سمت راست). بر همین اساس استفاده از نمودار S-t برای تعیین زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا ممکن است مقداری خطا داشته اشد و زمان کمتری را برای شروع حالت پایا پیش‌بینی کند.

پس به‌طور کلی سه روش برای تعیین حالت پایا بیان شد: نمودار اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف برحسب Y، نمودار حجم آب مایع موجود در کانال گاز برحسب زمان و نمودار اشباع کلی آب مایع برحسب زمان

۴-۹-۱-۲ پروکیدگی و انقباض^۱

¹ Shrinkage

وقتی خوشه‌ی آب مایع وارد کانال گاز می‌شود به دلیل اختلاف زیاد فشار مویینگی بین لایه انتشار گاز و کانال گاز، دچار چروکیدگی و انقباض می‌شود. این موضوع در شکل ۴-۲۶ برای زاویه خیسی 145° و خوشه ۷ نشان داده شده است.



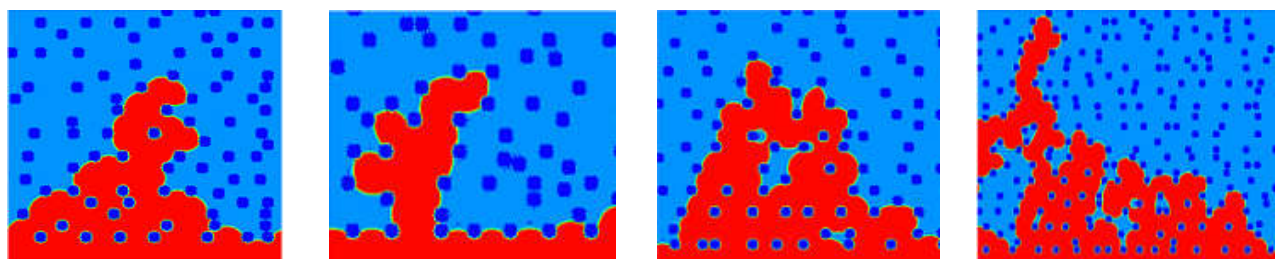
شکل ۴-۲۶: چروکیدگی و انقباض برای خوشه آب مایع شماره ۷ در زاویه خیسی 145° : (a) در لحظه رسیدن خوشه به انتهای لایه انتشار گاز و (b) بعد از ورود خوشه به کانال گاز.

قسمت (a) از این شکل مربوط به لحظه رسیدن آب مایع به انتهای لایه انتشار گاز (قبل از چروکیدگی و انقباض) و قسمت (b) مربوط به ورود آب مایع به کانال گاز و رشد آن (بعد از چروکیدگی و انقباض) است. محل‌هایی از خوشه که دچار چروکیدگی و انقباض شده‌اند با پیکان نمایش داده شده‌اند. توجه شود که چروکیدگی و انقباض اثر مناسبی روی عملکرد پیل سوختی دارد چون منجر به کاهش رشد شاخه‌های نهایی خوشه و حرکت مستقیم آب مایع به سمت کانال گاز می‌شود. همچنین رفتاری مشابه در طول حرکت آب مایع از لایه متخلخل میکرو به لایه انتشار گاز نیز توسط محققین مشاهده شده است که اثر نیز به دلیل تغییر در اندازه حفره‌ها ایجاد می‌شود [۱۷۴].

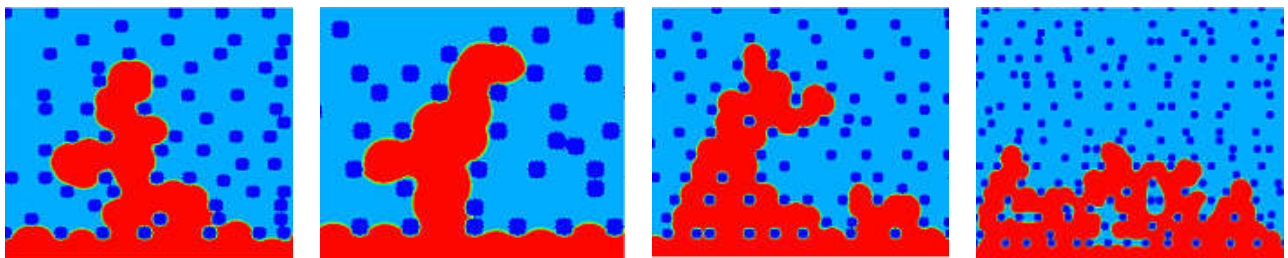
۴-۹-۱-۳ فشار مویینگی

بر اساس معادله لاپلاس فشار مویینگی (PC) در جریان دوفازی آب - هوا در لایه انتشار گاز به صورت $P_C = P_{air} - P_{water} = 2\sigma \cos\theta/r$ بیان می‌شود [۱۷۴]. در این رابطه r شعاع حفره است. فشار مویینگی به صورت اختلاف فشار در مرز مشترک بین دو سیال (هوا و آب مایع) تعریف می‌شود. با توجه به اینکه فشار

نسبی هوا در لایه انتشار گاز که در آن نیروی موینگی حاکم است، تقریباً ثابت و صفر است، فشار نسبی آب مایع می‌تواند از رابطه $P_{water} = -2\sigma \cos\theta / r$ محاسبه شود [۱۷۴]. مقدار $\cos\theta$ برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° به ترتیب برابر $-0/422$ و $-0/819$ است بنابراین فشار بحرانی برای ورود آب مایع در لایه انتشار گاز در زاویه خیسی 145° بیشتر از 115° است. پس در حالتی که زاویه خیسی 115° باشد آب مایع بیشتری در لایه انتشار گاز نفوذ خواهد کرد. به همین دلیل هر چه آب‌گریزی سطوح جامد بیشتر باشد مقدار اشباع حالت پایا کمتر خواهد بود. توزیع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° در شکل ۴-۲۷ نشان داده شده است. در این شکل خوشه‌های متناظر در این دو زاویه به صورت بزرگنمایی شده با هم مقایسه شده‌اند. بر اساس این نمودار حجم آب مایع در لایه انتشار گاز با افزایش زاویه خیسی کاهش می‌یابد بنابراین سطوح با آب‌گریزی بیشتر برای مدیریت آب مایع در لایه انتشار گاز مطلوب‌ترند. همچنین شکل کلی خوشه‌های آب مایع تشکیل شده در لایه انتشار گاز (مستقل از زاویه خیسی) تقریباً مشابه‌اند.



(a) $\theta = 115^\circ$, زمان 1590000



(b) $\theta = 145^\circ$, زمان 1600000

شکل ۴-۲۷: توزیع اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز: (a) زاویه خیسی 115° و (b) زاویه خیسی 145° .

۴-۹-۴ زمان عبور خوشه‌های آب مایع از لایه‌های انتشار گاز

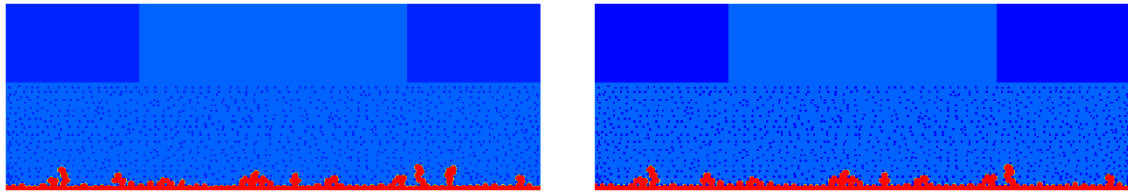
در این بررسی ضخامت لایه انتشار گاز $400\ \mu\text{m}$ است که آن را به هشت لایه تقسیم کرده‌ایم بنابراین ضخامت هر لایه $50\ \mu\text{m}$ است. این لایه‌ها به ترتیب به نام لایه‌های ۱، ۲، ... و ۸ در جدول ۴-۸ معرفی شده‌اند. در این جدول ضریب تخلخل هر لایه و زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی برای زاویه‌های خیسی 115° و 145° بیان شده است. ضریب تخلخل این لایه‌ها تقریباً برابرند (ماکزیمم اختلاف بین ضریب تخلخل لایه‌ها ۵٪ است). بر اساس این جدول سه پارامتر مؤثر برای تحلیل زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی وجود دارد که شامل ضریب تخلخل، زاویه خیسی و چیدمان فیبرهای جامد موجود در هر لایه است. در این جدول ستونی برای تحلیل زمان عبور خوشه‌ها وجود دارد که به بررسی مقادیر $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115}$ در هر لایه می‌پردازد که Δt زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی است. به‌طور کلی زمان عبور آب مایع از کل لایه انتشار گاز در زاویه خیسی 145° کمتر از 115° است پس $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115} < 1$ است ولی در برخی از لایه‌ها (لایه‌های ۲، ۴، ۵ و ۷) این نسبت ممکن است بیشتر از یک باشد که در زیر علت آن‌ها بیان شده است.

جدول ۴-۸: ضریب تخلخل و زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی.

توضیحات	ضریب تخلخل	نسبت زمان عبور خوشه‌های آب مایع از هر لایه به لایه بعدی (در واحد شبکه بولتزمن) $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115}$
لایه اول ($1 < y < 51$)	۰/۸۸۸۴	۰/۹۰۳۷
لایه دوم ($51 < y < 101$)	۰/۸۶۲۲	۱/۱۳۶۳
لایه سوم ($101 < y < 151$)	۰/۸۹۳۷	۰/۷۲۶۰
لایه چهارم ($151 < y < 201$)	۰/۸۷۹۲	۱/۹۱۹۱
لایه پنجم ($201 < y < 251$)	۰/۸۵۸۳	۲/۶۲۵۱
لایه ششم ($251 < y < 301$)	۰/۸۷۳۷	۰/۲۴۴۱
لایه هفتم ($301 < y < 351$)	۰/۸۹۶۶	۳/۶۱۵۱
لایه هشتم ($351 < y < 401$)	۰/۸۷۳۹	۰/۴۲۰۹
کل لایه انتشار گاز	۰/۸۸	۰/۸۱۲۲

لایه ۲: در این لایه مشاهده شده است که $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115} > 1$ است. با توجه به شکل ۲۸ مشخص است که در زاویه 145° یک خوشه اضافی بعد از خوشه شماره ۷ تشکیل شده است که این خوشه غیر مؤثر است.

تشکیل این خوشه‌ی اضافی در زاویه 145° نسبت به زاویه 115° باعث شده که سرعت رشد بقیه خوشه‌ها پایین‌تر آمده و زمان بیشتری طول بکشد تا اولین خوشه از لایه دوم عبور کند.



زاویه خیزی 145° و زمان ۴۰۶۲۲۲

زاویه خیزی 115° و زمان ۴۱۸۵۲۱

شکل ۴-۲۸: مقایسه توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز.

لایه ۴: در این لایه $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115} > 1$ است. با توجه به بخش b از شکل‌های ۱۵-۴ و ۱۶-۴ مشخص است که در زاویه 145° خوشه شماره ۷ و در زاویه 115° خوشه شماره ۲ سریع‌تر از بقیه خوشه‌ها این لایه را گذرانده‌اند. رشد خوشه شماره ۱ در زاویه 145° بیشتر از 115° است و همچنین یک خوشه غیر مؤثر در زاویه 145° در انتهای سمت راست محیط ایجاد شده است که این دو عامل باعث می‌شوند سرعت رشد بقیه خوشه‌ها در زاویه 145° پایین‌تر آمده و زمان بیشتری طول بکشد تا اولین خوشه از لایه چهارم عبور کند.

لایه ۵: همچنین در این لایه نیز مشاهده شده است که $\Delta t_{\theta=145}/\Delta t_{\theta=115} > 1$ است. با توجه به بخش c از شکل‌های ۱۵-۴ و ۱۶-۴ مشخص است که در زاویه 145° خوشه شماره ۷ و در زاویه 115° خوشه شماره ۲ سریع‌تر از بقیه خوشه‌ها این لایه را گذرانده‌اند. رشد خوشه شماره ۱ در زاویه 145° بیشتر از زاویه 115° است و همچنین خوشه مؤثر شماره ۷ در زاویه 115° هنوز تشکیل نشده ولی خوشه‌ی متناظر آن در زاویه 145° (خوشه شماره ۷) تشکیل شده است که این دو عامل باعث می‌شوند سرعت رشد بقیه خوشه‌ها در حالتی که زاویه 145° است پایین‌تر آمده و زمان بیشتری طول بکشد تا اولین خوشه از لایه پنجم عبور کند.

لایه ۷: در این لایه نیز $\Delta t_{0=145}/\Delta t_{0=115} > 1$ است. با توجه به بخش e از شکل‌های ۴-۱۵ و ۴-۱۶ مشخص است که در زاویه خیسی 145° و 115° خوشه‌ی شماره ۲ سریع‌تر از بقیه خوشه‌ها این لایه را گذرانده است. چون خوشه شماره ۲ در زاویه 145° دارای یک شاخه اضافی است به همین علت سرعت رشد این خوشه در زاویه 145° کمتر از 115° است و زمان بیشتری طول می‌کشد تا این خوشه از لایه هفتم عبور کند.

خوشه‌های غیر مؤثر به دلیل ساختار تصادفی فیبرها و حفره‌ها در لایه انتشار گاز تولید می‌شوند پس مهم‌ترین پارامتر در افزایش عملکرد پیل سوختی بهینه‌سازی پارامترهای زاویه خیسی و چیدمان فیبرهای کربن است. همچنین می‌توان با ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز در لایه انتشار گاز انتقال آب مایع را بهبود بخشید. با توجه به جدول ۴-۸ و متفاوت بودن زمان انتقال در لایه‌های مختلف، می‌توان به چیدمانی از فیبرها رسید که تولید خوشه‌های غیر مؤثر کمینه شوند. تولید این خوشه‌ها باعث کاهش سرعت خوشه‌های دیگر، افزایش زمان عبور و همچنین افزایش اشباع آب مایع می‌شود. همچنین با توجه به جدول بالا نسبت زمان عبور آب مایع از کل لایه انتشار گاز در زاویه‌های خیسی 145° و 115° تقریباً $0/8122$ است که نشان‌دهنده مطلوب بودن مکانیزم حرکت آب مایع در زاویه خیسی 145° است. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که هر چه آب‌گریزی سطوح جامد لایه انتشار گاز بیشتر شود تعداد خوشه‌های مؤثر کاهش می‌یابد پس این موضوع نشان‌دهنده حذف سریع آب مایع از لایه انتشار گاز به کانال گاز و بهبود مدیریت آب مایع برای سطوح جامد با آب‌گریزی بیشتر است.

۴-۹-۲ اثر ترکیب زاویه خیسی^۱

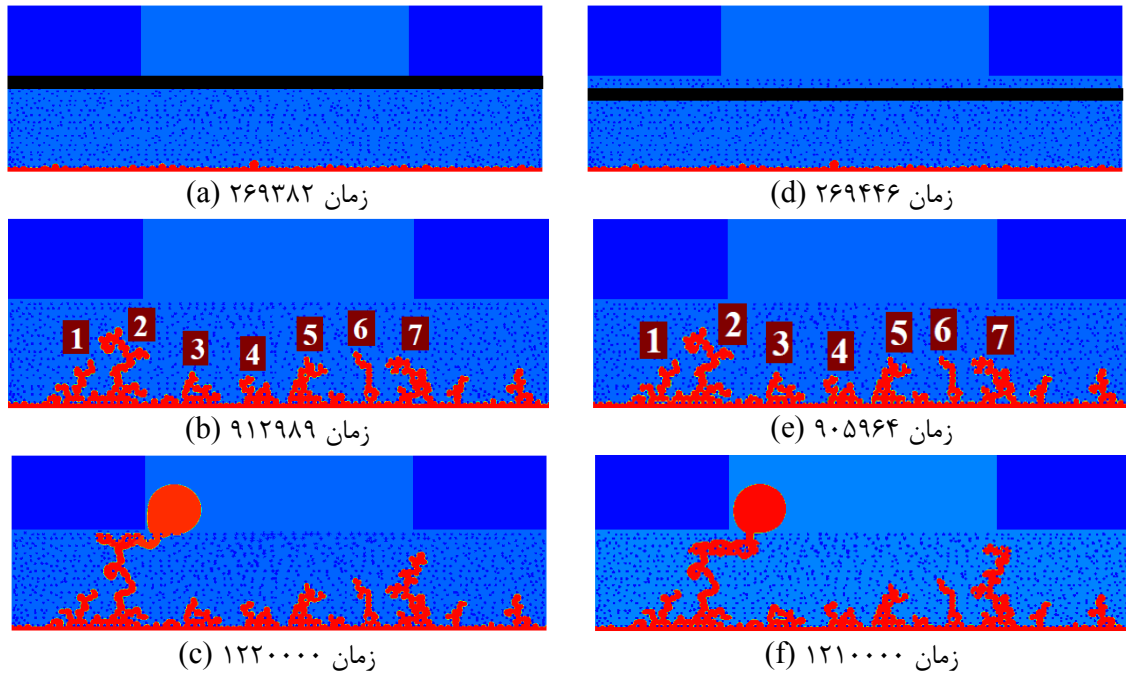
در این قسمت به بررسی اثر ترکیب زاویه خیسی (استفاده هم‌زمان فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز) بر رفتار آب مایع، توزیع حالت‌پایا، زمان لازم برای انتقال آب از مرز مشترک لایه کاتالیزور- لایه انتشار گاز به کانال

¹ Mixed wettability

گاز، زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا، اشباع محلی و کلی آب مایع و تعداد خوشه‌های مؤثر در لایه انتشار گاز پرداخته می‌شود. برای این منظور از لایه‌های آب‌دوست با ضخامت و موقعیت متفاوت استفاده شده و حالت مناسب ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز و محل قرارگیری آن‌ها در این حالت معرفی شده است. در حالت ترکیب زاویه خیسی، زاویه خیسی فیبرهای آب‌گریز و آب‌دوست به ترتیب 145° و 80° می‌باشند. در بخش قبلی لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز در دو حالت زاویه خیسی 145° و 115° مورد بررسی قرار گرفت که آن‌ها را به ترتیب حالت یک و دو در نظر می‌گیریم. برای شروع بررسی ترکیب زاویه خیسی، دو حالت را معرفی و مورد مطالعه قرار می‌دهیم و آن‌ها را به ترتیب حالت سه و چهار می‌نامیم. در این دو حالت فیبرهای آب‌دوست به ترتیب در محل $351lu \leq Y \leq 401lu$ (حالت سوم) و $301lu \leq Y \leq 351lu$ (حالت چهارم) قرار گرفته‌اند. شکل‌های توزیع آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی برای این دو حالت به ترتیب در سمت چپ و راست شکل ۴-۲۹ نشان داده شده‌اند. ناحیه سیاه رنگ نشان داده شده در شکل‌های a و d محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست است. شروع ناحیه آب‌دوست در حالت سه و چهار به ترتیب $87/5$ و 75 درصد از ضخامت لایه انتشار گاز است. همچنین ضخامت ناحیه آب‌دوست در این دو حالت برابر $12/5$ درصد ضخامت کل لایه انتشار گاز است. در حالت سه و چهار (حالت‌هایی که فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز قرار گرفته‌اند) مانند حالت اول تعداد خوشه‌های مؤثر ۷ عدد است. همچنین حضور فیبرهای آب‌دوست باعث تغییراتی در رشد برخی از خوشه‌ها شده است (رشد برخی خوشه‌ها زیاد، برخی کم و برخی بدون تغییر باقی مانده‌اند). به همین دلیل اتصال بین خوشه‌های مختلف، حلقه‌های تشکیل شده در اثر اتصال بین این خوشه‌ها و حجم سیال جابجا شده (هوا) که به دلیل گسترش این حلقه‌ها به دام افتاده‌اند، نیز تغییر کرده است. زمان مورد نیاز برای رسیدن آب مایع به کانال گاز برای حالت سه و چهار به ترتیب 1034534 و

۱۰۵۶۴۵۵ است که نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز (حالت اول که زمان مورد نیاز ۱۲۴۶۶۹۴ بود) به

ترتیب ۱۷ و ۱۵ درصد کاهش یافته است. علت این کاهش حضور فیبرهای آب‌دوست است.



شکل ۴-۲۹: توزیع آب مایع در حالت سوم: سمت چپ و حالت چهارم: سمت راست.

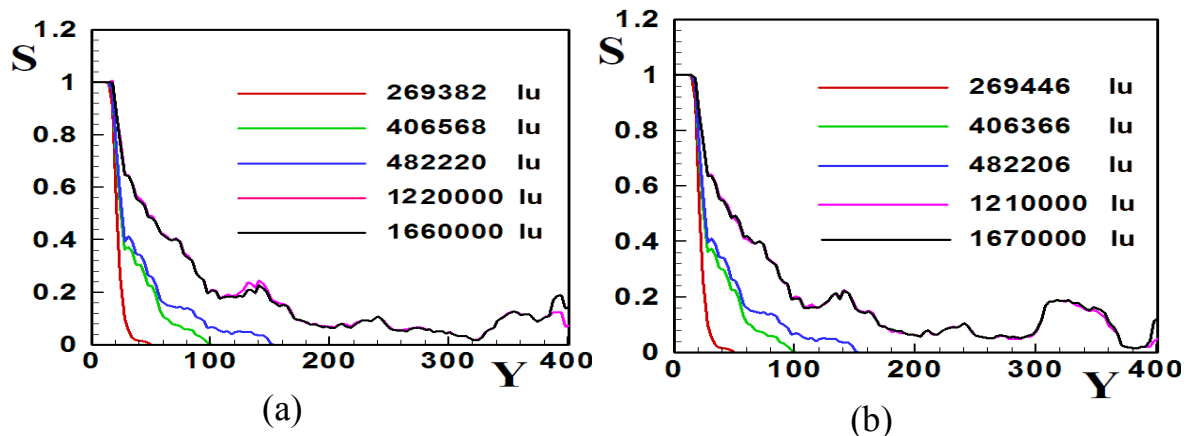
شکل ۴-۳۰: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی نشان را نشان می‌دهد. همان‌طوری

که از شکل مشخص است توزیع اشباع آب مایع برای حالت‌های ۳ و ۴ در زمان‌های ۱۲۲۰۰۰۰ (۱۸/۶۷)

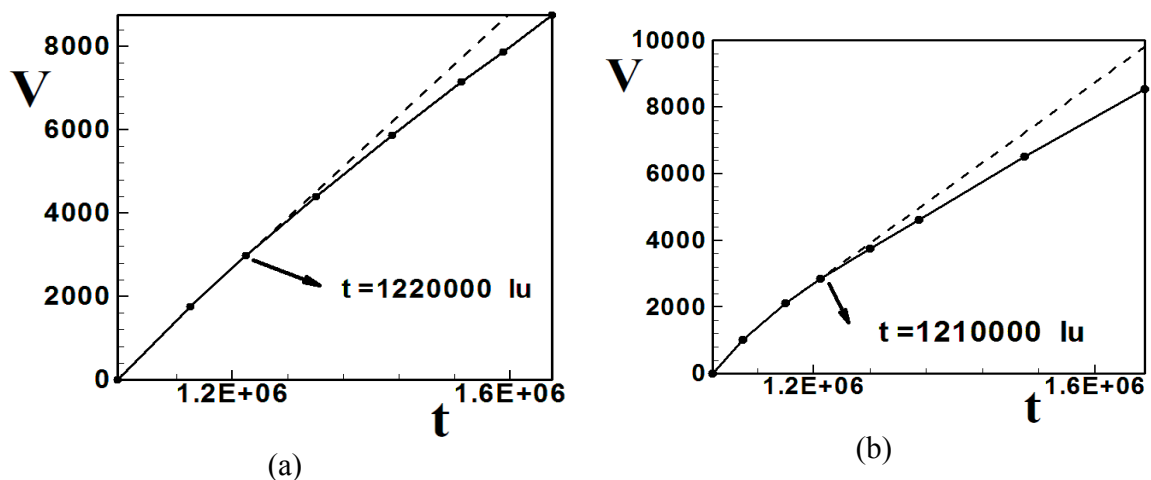
درصد کاهش نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز با زاویه 145° و 1210000 (۱۹/۳۴) درصد کاهش نسبت به

حالت کاملاً آب‌گریز با زاویه 145° به حالت‌پایا رسیده است (برای حالت سه و چهار این زمان تقریباً

برابر است).



شکل ۳۰-۴: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی (a) حالت سوم (b) حالت چهارم. پس آب‌دوست کردن نواحی انتهایی لایه انتشار گاز (حالت سوم و چهارم) باعث کاهش زمان لازم برای رسیدن به حالت پایا می‌شود. توجه شود که برای تعیین زمان رسیدن به حالت پایا علاوه بر نمودار بالا (استفاده از اشباع محلی آب مایع) می‌توان از نمودار حجم آب مایع تولیدی در کانال گاز برحسب زمان هم استفاده کرد که مقادیر بدست آمده از هر دو روش یکسان هستند.



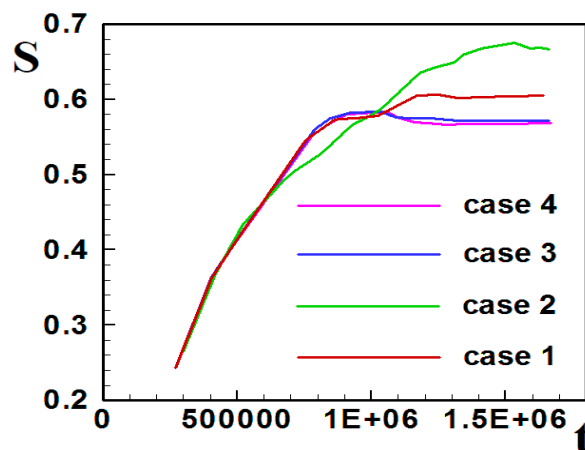
شکل ۳۱-۴: حجم آب مایع برحسب زمان در کانال گاز (a) حالت سوم (b) حالت چهارم.

۴-۹-۲-۱ بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور

حال در این قسمت به بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور می‌پردازیم ($0 < y < 100$). شکل

۳۲-۴ نمودار تغییرات اشباع کلی آب مایع را برحسب زمان نشان می‌دهد. با توجه به این نمودار، در

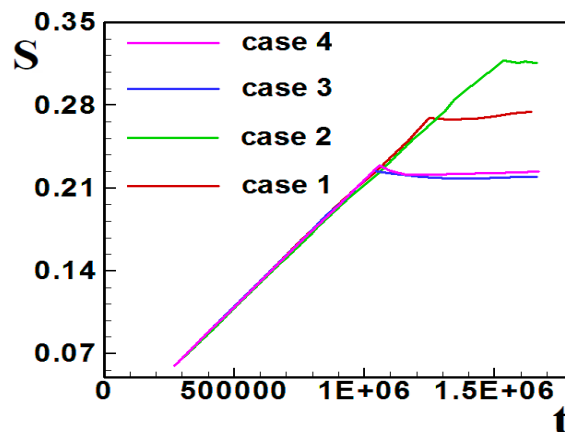
حالت پایا اشباع آب مایع برای زاویه 115° برابر 0.6671 و برای زاویه 145° برابر 0.6038 است که در حالت سوم و چهارم اشباع آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور ($0 < y < 100$) و در حالت پایا کمتر از حالت کاملاً آب‌گریز است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش زاویه خیسی اشباع آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور کاهش می‌یابد. علت این است که با افزایش زاویه خیسی فشار مویینگی بحرانی برای ورود آب مایع به حفره زیاد شده و تعداد خوشه‌های کمتری می‌توانند نفوذ کنند. پس با افزایش زاویه خیسی تعداد خوشه‌های مؤثر کم شده و اشباع آب مایع در لایه نزدیک کاتالیزور ($0 < y < 100$) کاهش می‌یابد. همچنین نتایج نشان می‌دهد که آب‌دوست کردن قسمت انتهایی محیط باعث کاهش اشباع آب مایع در حالت پایا و در لایه نزدیک کاتالیزور ($0 < y < 100$) می‌شود.



شکل ۴-۳۲: اشباع آب مایع در نواحی نزدیک کاتالیزور برای حالت‌های مختلف.

۴-۹-۲ بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز
 حال در این قسمت به بررسی اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز می‌پردازیم (شکل ۴-۳۳). با توجه به این نمودار، مقدار اشباع کلی آب مایع در حالت‌های اول تا چهارم در حالت پایا به ترتیب برابر 0.3703 ، 0.3157 ، 0.2197 و 0.2214 است.

نتایج نشان می‌دهد که محتوای آب مایع با انتخاب سطوح با آب‌گریزی بالاتر کاهش می‌یابد. همچنین استفاده از فیبرهای آب‌دوست در نواحی نزدیک کانال گاز (حالت سوم و چهارم) باعث کاهش اشباع کلی آب مایع در حالت پایا می‌شود.



شکل ۴-۳۳: اشباع کلی آب مایع برای حالت‌های مختلف.

۳-۲-۹-۴ جذب آب توسط فیبرهای آب‌دوست و تشکیل حوضچه‌ی آب مایع

استفاده از فیبرهای کربن با آب‌گریزی بیشتر (استفاده از حالت یک به جای حالت دو) باعث کاهش اشباع کلی آب مایع به مقدار تقریباً ۱۴ درصد می‌شود ولی استفاده از فیبرهای آب‌دوست در نواحی نزدیک کانال (استفاده از حالت سوم به جای اول) تقریباً ۱۹ درصد اشباع کلی آب مایع را کاهش می‌دهد. تا اینجا چهار حالت معرفی شد. حال به معرفی بقیه حالت‌ها می‌پردازیم.

حالت پنجم، ششم، هفتم، هشتم و نهم حالت‌هایی هستند که فیبرهای آب‌دوست در محل

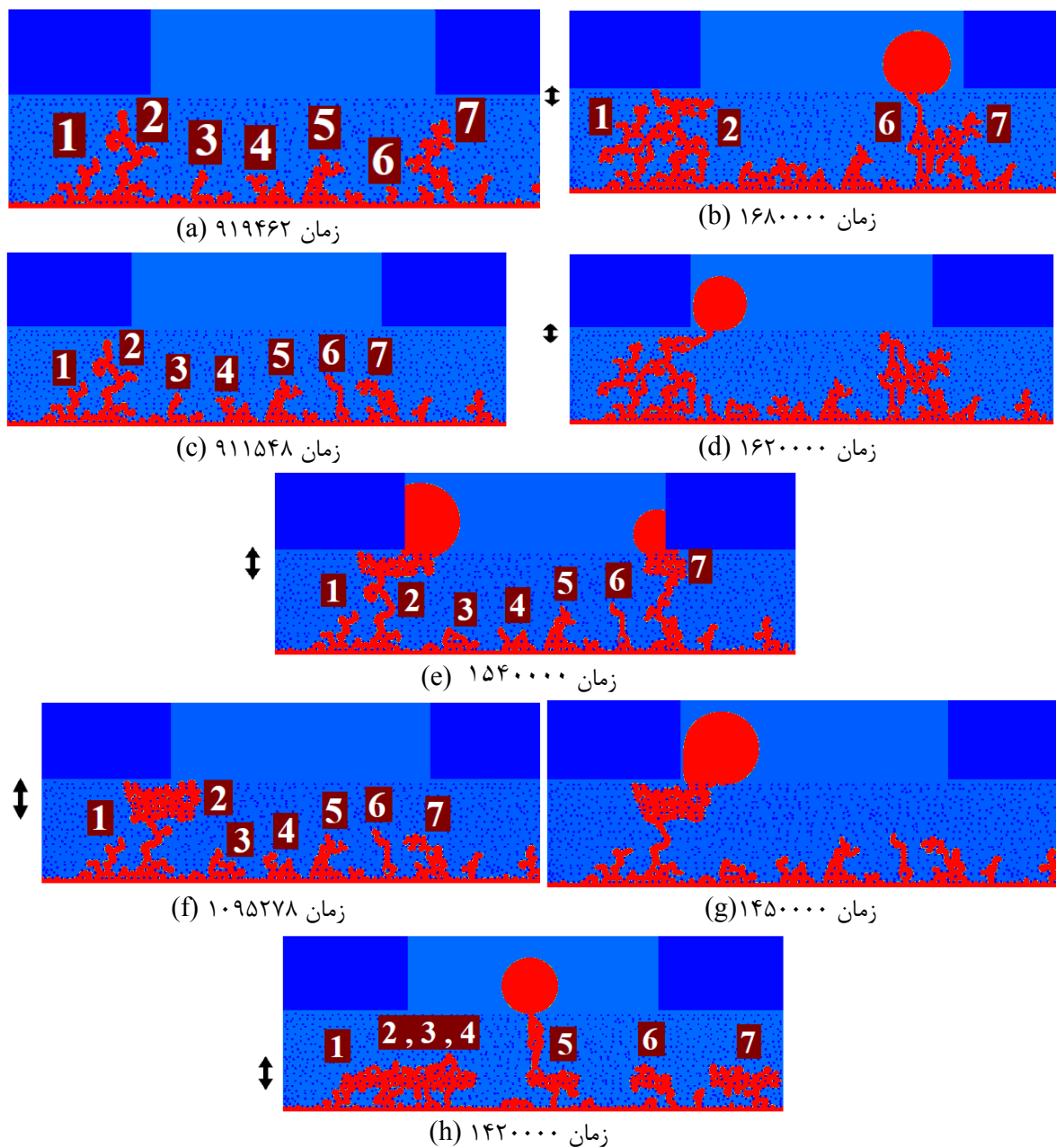
$$251lu \leq Y \leq 401lu, \quad 301lu \leq Y \leq 401lu, \quad 389lu \leq Y \leq 401lu, \quad 376lu \leq Y \leq 401lu$$

و

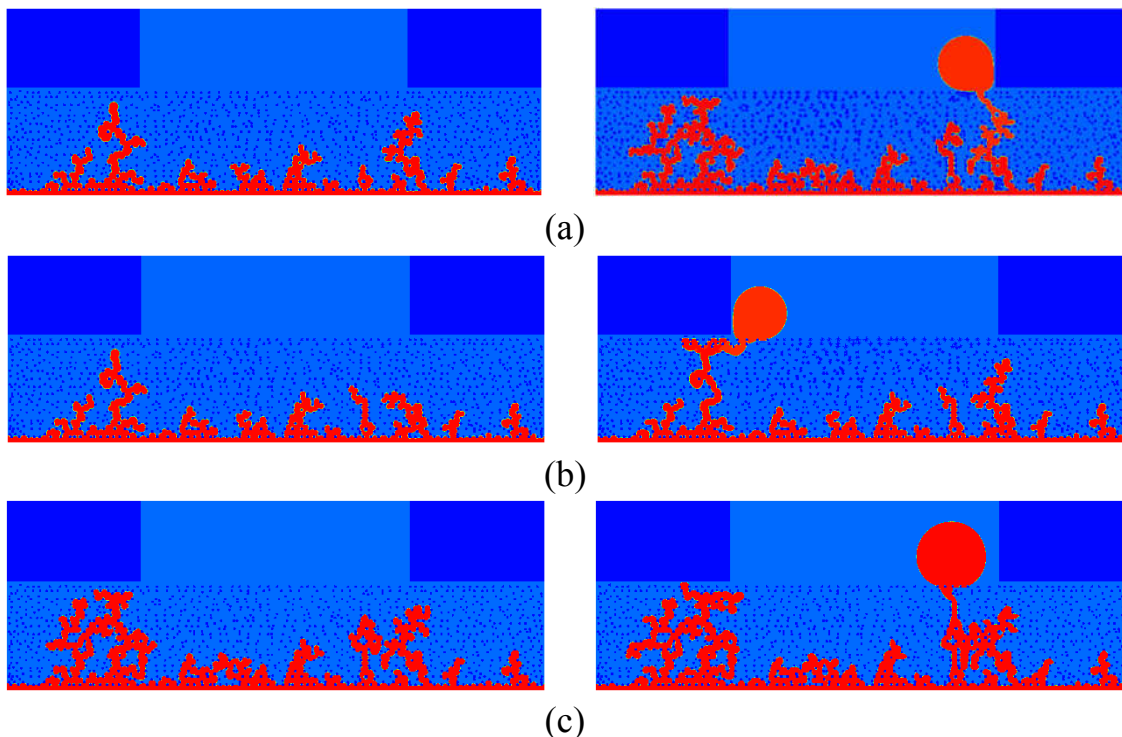
$101lu \leq Y \leq 151lu$ قرار گیرند که توزیع آب مایع در این حالت‌ها در شکل ۴-۳۴ نشان داده شده است.

در این قسمت به بررسی و شرح جزئیات مربوط به روند انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز در حالت‌های ۱،

۳ و ۵ می‌پردازیم (شکل ۴-۳۵).



شکل ۴-۳۴: توزیع آب مایع در لایه انتشار گاز (a) و (b): حالت پنجم، (c) و (d): حالت ششم، (e): حالت هفتم، (f) و (g): حالت هشتم و (h) حالت نهم، که محل آب دوست با پیکان نشان داده شده است.



شکل ۴-۳۵: توزیع آب مایع در حالت‌های ۱، ۳ و ۵. بخش (a) مربوط به حالت اول است که سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا را نشان می‌دهد. بخش (b) مربوط به حالت سوم است و سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا است. بخش (c) حالت پنجم است و سمت چپ زمانی است که اولین خوشه آب مایع به محل $y=376$ رسیده باشد و سمت راست حالت پایا است.

در شکل (a) ۳۵-۴ بیانگر حالت اول (لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیزی 145°) است. قسمت چپ این شکل لحظه رسیدن اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ و سمت راست توزیع حالت پایا را نشان می‌دهد. در بخش (b) لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیزی 145° است که ناحیه‌ی $351 < y < 401$ آب‌دوست شده است. سمت چپ این شکل لحظه رسیدن اولین خوشه آب مایع به $y=351$ و شکل سمت راست آن مربوط به حالت پایا است. بخش (c) لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیزی 145° است که ناحیه‌ی $376 < y < 401$ آب‌دوست شده است. شکل سمت چپ آن لحظه رسیدن اولین خوشه آب مایع به $y=376$ و شکل سمت راست آن مربوط به حالت پایا است. با مقایسه شکل‌های سمت

چپ و راست حالت (a) مشخص است که بعد از رسیدن اولین خوشه آب مایع به محل $y=351$ ، رشد خوشه‌های شماره ۱، ۶ و ۷ هنوز قابل توجه است.

در حالت (b) وقتی اولین خوشه آب مایع به ناحیه آب‌دوست می‌رسد (شکل چپ)، فیبرهای آب‌دوست از طریق این خوشه شروع به جذب آب مایع می‌کنند و باعث ایجاد یک حوضچه در این محل (محل قرارگیری حفره‌های آب‌دوست) می‌شوند. جذب آب مایع توسط فیبرهای آب‌دوست می‌تواند رشد برخی از خوشه‌ها را نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز متوقف و رشد برخی دیگر را کاهش دهد. با مقایسه شکل‌های سمت چپ و راست حالت (b) مشخص است که رشد خوشه‌های ۶ و ۱ متوقف شده و رشد خوشه ۷ قابل توجه است. همچنین مقایسه شکل‌های سمت راست در حالت (a) و (b) نشان می‌دهد که رشد خوشه ۷ در حالت (a) بیشتر است بنابراین اشباع آب مایع در حالت (b) کمتر خواهد بود و مدیریت و عملکرد پیل سوختی بهتر می‌شود. توجه شود که در حالت a, b, خوشه ۲ اولین خوشه‌ی آب مایعی است که به محل $y=351$ از لایه انتشار گاز رسیده با این وجود در حالت (a) این خوشه نتوانسته خود را به کانال گاز برساند ولی در حالت b این خوشه به کانال گاز رسیده است. این موضوع تائید می‌کند که فیبرهای آب‌دوست باعث جذب آب مایع می‌شوند.

مقایسه شکل‌های سمت چپ و راست در حالت (c) نشان می‌دهد که بعد از رسیدن اولین خوشه‌ی آب مایع به محل $y=376$ (شروع ناحیه آب‌دوست) رشد خوشه‌های ۲ و ۶ هنوز خیلی زیاد است. همچنین مقایسه شکل‌های سمت راست از حالت‌های (a) و (c) نشان می‌دهد که رشد خوشه‌ی ۲ و ۶ در حالت (c) بزرگ‌تر از (a) است بنابراین مقدار اشباع آب مایع در این حالت بیشتر است یعنی استفاده از فیبرهای آب‌دوست در این حالت مدیریت و عملکرد پیل سوختی را کاهش داده است.

پس در حالت (b) و (c) به ترتیب فیبرهای آب‌دوست باعث افزایش و کاهش مدیریت آب مایع می‌شوند. به‌طور کلی می‌توان نتیجه گرفت که فیبرهای آب‌دوست بسته به ضخامتی که دارند و موقعیتی که در آن

قرار می‌گیرند می‌توانند باعث بهبود یا تضعیف عملکرد پیل سوختی شوند. مقایسه بین حالت یک (حالت

کاملاً آب‌گریز) با حالت‌های سوم و چهارم (حالت ترکیب زاویه خیسی) نشان می‌دهد که:

۱. تعداد خوشه‌های مؤثر بدون تغییر می‌ماند.

۲. زمان رسیدن به حالت پایا در حالت ترکیب زاویه خیسی زودتر اتفاق می‌افتد.

۳. زمان مورد نیاز برای رسیدن خوشه‌های آب مایع به کانال گاز در حالت ترکیب زاویه خیسی کمتر است.

۴. مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا در حالت ترکیب زاویه خیسی کمتر است.

۵. مقدار اشباع آب مایع در ناحیه نزدیک کاتالیزور در حالت ترکیب زاویه خیسی کمتر است.

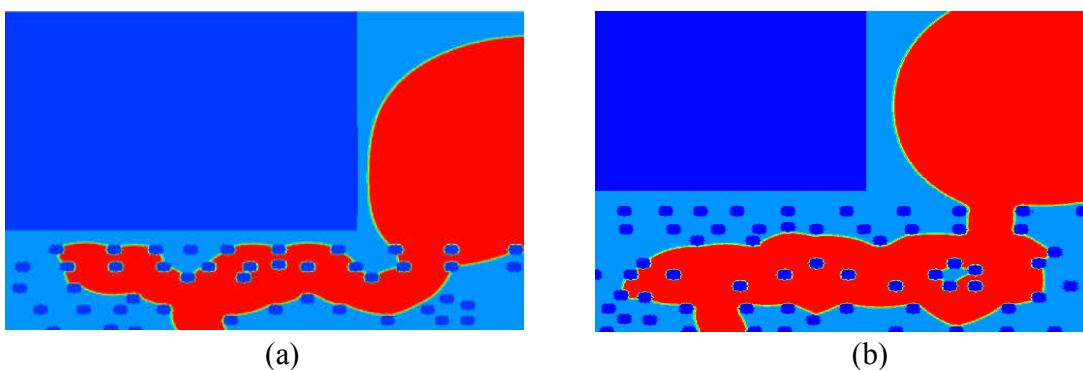
۶. تعداد اتصال بین خوشه‌ها، گسترش حلقه‌های ایجاد شده در اثر این اتصال و حجم سیال جابجا

شده (هوا) که بین حلقه‌ها به دام افتاده‌اند تغییر می‌کند (در حالت ترکیب زاویه خیسی اتصال

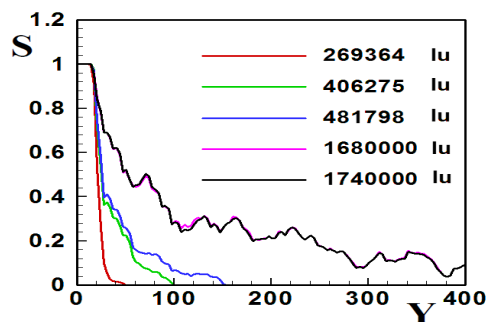
بین خوشه‌های اصلی و همچنین تشکیل حلقه صورت نگرفته است).

با توجه به این مقایسه مشخص است که وقتی فیبرهای آب‌دوست در نزدیکی کانال گاز (حالت سوم و

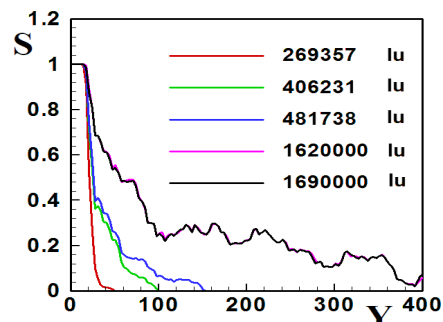
چهارم) قرار گیرند مدیریت و عملکرد پیل سوختی بهبود بخشیده می‌شود.



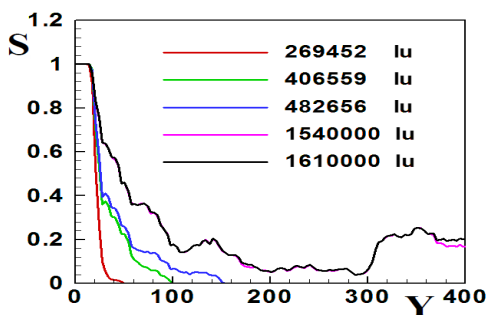
شکل ۴-۳۶: تشکیل حوضچه‌ی آب مایع در حالت پایا برای حالت‌های (a) سوم و (b) چهارم.



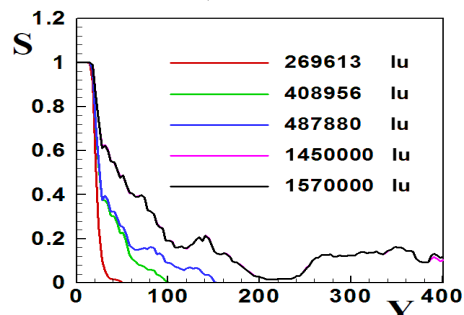
(a): حالت پنجم



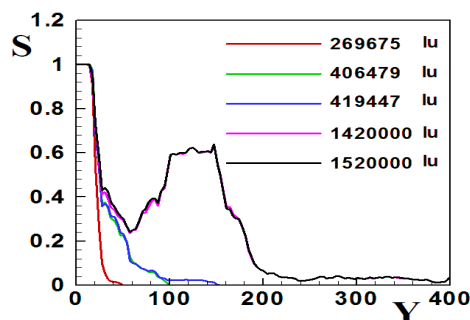
(b): حالت ششم



(c): حالت هفتم



(d): حالت هشتم



(e): حالت نهم

شکل ۴-۳۷: اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی.

حال به مقایسه حالت سوم و چهارم می‌پردازیم:

نتایج نشان می‌دهد که وقتی فیبرهای آب دوست در محل ($351 < y < 401$) قرار گیرند (حالت سوم) اشباع آب مایع در حالت پایا در لایه انتشار گاز کمتر و عملکرد پیل سوختی بهتر خواهد شد که علت به صورت زیر است:

- توزیع حالت پایای این دو حالت نشان می‌دهد (شکل (c) ۴-۲۹ و (f) ۴-۲۹) که رشد خوشه شماره ۷ در حالت چهارم بیشتر از حالت سوم است در حالی که بقیه خوشه‌ها رشد تقریباً یکسانی دارند.

- تشکیل حوضچه‌ی آب مایع در حالت پایا در شکل ۴-۳۶ نشان داده شده است که با توجه به این

شکل حجم حوضچه‌ی آب مایع در حالت سوم کمتر از حالت چهارم است.

شروع ناحیه آب‌دوست در حالت‌های سوم تا نهم به ترتیب برابر $۸۷/۵$ ، ۷۵ ، $۹۳/۷۵$ ، ۹۷ ، ۷۵ ، $۶۲/۵$ و ۲۵ درصد از ضخامت لایه انتشار گاز است. همچنین ضخامت ناحیه آب‌دوست در حالت‌های سوم تا نهم به ترتیب برابر $۱۲/۵$ ، $۱۲/۵$ ، $۱۲/۵$ ، $۶/۵$ ، ۳ ، ۲۵ ، $۳۷/۵$ و $۱۲/۵$ درصد ضخامت لایه انتشار گاز است. نمودار اشباع محلی آب مایع در زمان‌های مختلف شبیه‌سازی برای حالت‌های پنجم تا نهم در شکل ۴-۳۷ آمده است که با توجه به این نمودار مشخص است که زمان رسیدن به حالت پایا برای حالت‌های پنجم تا نهم به ترتیب برابر ۱۶۸۰۰۰۰ ، ۱۶۲۰۰۰۰ ، ۱۵۴۰۰۰۰ ، ۱۴۵۰۰۰۰ و ۱۴۲۰۰۰۰ در واحد شبکه بولتزمن است.

نمودار اشباع محلی آب مایع (شکل ۴-۳۷) نشان می‌دهد که در محل‌هایی از نمودار بیشینه نسبی وجود دارد. این نقاط معمولاً محل قرارگیری حوضچه‌ی آب مایع (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست) یا محل قرارگیری خوشه‌های آب مایعی است که رشد آن‌ها متوقف شده است. همان‌طور که قبلاً بیان شد فیبرهای آب‌دوست باعث جذب آب مایع شده و تشکیل حوضچه می‌دهند. این عمل باعث افزایش اشباع محلی آب مایع و در نتیجه ایجاد یک بیشینه نسبی در نمودار آن می‌شود که وابسته به نحوه ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز است. همچنین برخی از خوشه‌ها به کانال گاز نمی‌رسند و پس از مقداری پیشروی در لایه انتشار گاز متوقف می‌شوند. توقف این خوشه‌ها نیز باعث ایجاد یک بیشینه نسبی در نمودار اشباع محلی آب مایع می‌شود که این ناشی از چیدمان فیبرهای کربن است.

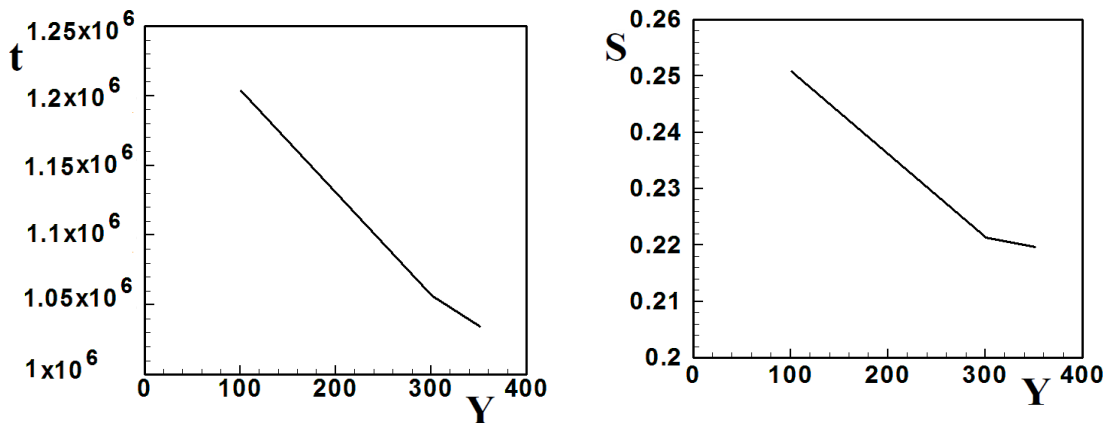
۴-۹-۲-۴ محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست

اشباع کلی آب مایع و زمان رسیدن آن به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز بر حسب محل شروع ناحیه آب‌دوست (Y) در شکل ۴-۳۸ نشان داده شده است. در تمامی این حالت‌ها ضخامت فیبرهای آب‌دوست $۱۲/۵$ درصد ضخامت کل لایه انتشار گاز است. بر اساس این نمودار هر چه محل قرارگیری

فیبرهای آب‌دوست دور از مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز باشد اشباع کلی آب مایع و زمان مورد نیاز برای رسیدن آن به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز افزایش می‌یابد علت این است که هر چه محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست به کاتالیزور نزدیک‌تر باشد حوضچه آب مایع در محل پایین‌تری تشکیل شده و ممکن است خوشه‌های آب مایع بیشتری به این حوضچه برسند. برای مثال در حالتی که فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانالیزور (حالت نهم) قرار گیرند مقدار اشباع کلی آب مایع در لایه انتشار گاز در حالت پایا 0.2508 است که نسبت به حالت سوم (حالتی که فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز باشند) $14/2$ درصد افزایش یافته است.

شکل (e) $37-4$ و (a) $30-4$ مربوط به اشباع محلی آب مایع در حالت نهم و سوم است. با توجه به شکل، اشباع محلی آب مایع در محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست برای این دو حالت تقریباً 0.6 و 0.16 است که اختلاف بسیار زیادی دارند. از طرفی با مقایسه شکل‌های (c) $29-4$ و (h) $34-4$ که مربوط به توزیع آب مایع در حالت سوم و نهم است مشخص است که طول و حجم حوضچه آب مایع در حالت نهم بسیار بیشتر از حالت سوم است. پس در شرایطی که فیبرهای آب‌دوست نزدیک لایه کاتالیزور باشند حوضچه آب مایع حجم بیشتری دارد که مانع انتقال مؤثر مواد واکنش‌دهنده از کانال گاز به لایه کاتالیزور می‌شود. از طرفی تشکیل حوضچه آب مایع در نزدیکی کانال گاز نسبت به کاتالیزور امکان خروج راحت‌تری در حضور جریان گاز دارد.

بنابراین بهترین محل برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز است.



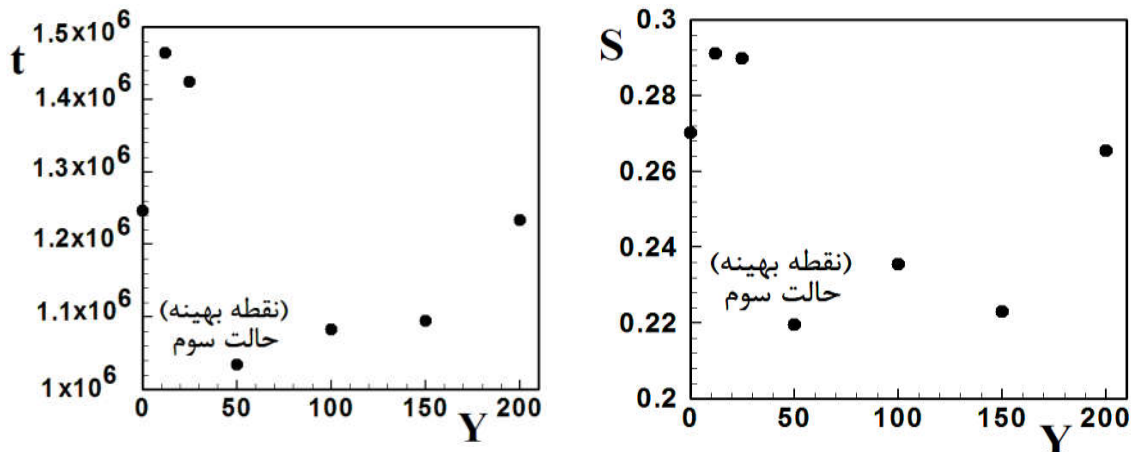
شکل ۴-۳۸: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب محل شروع ناحیه آبدوست در لایه انتشار گاز (Y).

۴-۹-۲-۵ ضخامت فیبرهای آبدوست

اشباع کلی آب مایع و زمان رسیدن آن به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز بر حسب ضخامت ناحیه آبدوست (Y) در شکل ۴-۳۹ نشان داده شده است. در تمامی این حالات فیبرهای آبدوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز قرار گرفته‌اند. همان‌طوری که در قسمت قبل اشاره شد بهترین محل برای قرارگیری فیبرهای آبدوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز است. حال در این قسمت می‌خواهیم ضخامت مناسب فیبرهای آبدوست را در این محل به دست آوریم. برای این منظور ضخامت فیبرهای آبدوست به ترتیب برابر ۱۲، ۲۵، ۵۰، ۱۰۰، ۱۵۰ و ۲۰۰ در نظر گرفته شده است. مقدار اشباع آب مایع در حالت‌پایا برای این حالت‌ها به ترتیب برابر ۰/۲۹۱۱، ۰/۲۸۹۸، ۰/۲۱۹۷، ۰/۲۳۵۶، ۰/۲۲۳۱ و ۰/۲۶۵۶ بدست آمده است. بر اساس این نمودار، ضخامت مناسب برای فیبرهای آبدوست ۵۰ میکرومتر است که مربوط به حالت سوم است. کاهش یا افزایش ضخامت فیبرهای آبدوست در حالت سوم باعث افزایش اشباع آب مایع در لایه انتشار گاز در حالت‌پایا می‌شود. توجه شود که در حالت سوم هر چه ضخامت فیبرهای آبدوست را بیشتر کاهش دهیم عملکرد پیل سوختی ضعیف‌تر خواهد شد.

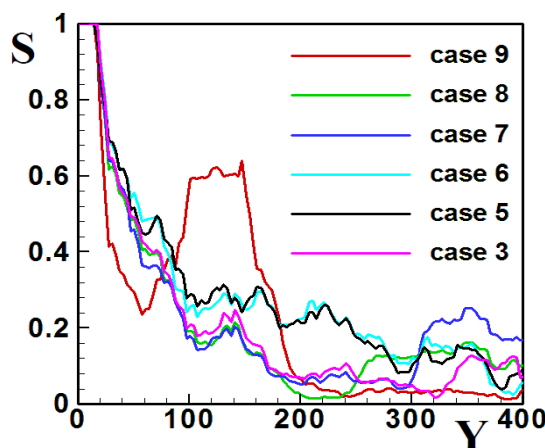
همچنین نتایج نشان می‌دهد که ضخامت کم فیبرهای آبدوست در مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (حالت‌های پنجم و ششم) اثر منفی بر انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز دارد و حتی عملکرد پیل

سوختی در این حالت نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز ضعیف‌تر است. (حالت‌های پنجم و ششم اشباع آب مایع بیشتری نسبت به حالت کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° دارند).



شکل ۴-۳۹: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب ضخامت ناحیه آب‌دوست در لایه انتشار گاز (Y).

نمودار زیر اشباع محلی آب مایع در حالت‌های مختلف شبیه‌سازی را در حالت پایا نشان می‌دهد. با توجه به نمودار مشخص است که حالت سوم کمترین مساحت زیر نمودار را دارد. پس بهترین حالت برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز بوده و ضخامت مناسب برای فیبرهای آب‌دوست $12/5$ درصد ضخامت کل لایه انتشار گاز است.



شکل ۴-۴۰: اشباع محلی آب مایع در حالت‌های مختلف شبیه‌سازی.

فیبرهای آبدوست ممکن است باعث کاهش یا افزایش زمان لازم برای انتقال آب مایع از مرز مشترک لایه انتشار گاز- کاتالیزور به نقطه شروع فیبرهای آبدوست شوند. همچنین طبق توضیحات بالا ممکن است باعث بهبود یا تضعیف عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون شوند. برای روشن تر شدن این موضوع دو مثال در جدول ۴-۹ بیان شده است:

جدول ۴-۹: تأثیر ترکیب فیبرهای آبدوست و آب‌گریز بر زمان انتقال آب مایع.

پس استفاده از فیبرهای آبدوست باعث کاهش زمان انتقال آب مایع از مرز مشترک لایه انتشار گاز- کاتالیزور به نقطه شروع فیبرهای آبدوست شده است.	در حالت سوم (محل قرارگیری فیبرهای آبدوست در $351lu \leq Y \leq 401lu$ است) آب مایع بعد از ۹۲۳۸۴۳ مرحله زمانی به $Y=351$ می‌رسد	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از ۹۴۳۷۶۴ مرحله زمانی به محل $Y=351$ می‌رسد	مثال اول
استفاده از فیبرهای آبدوست باعث افزایش زمان انتقال آب مایع از مرز مشترک لایه انتشار گاز- کاتالیزور به نقطه شروع فیبرهای آبدوست شده است.	در حالت چهارم (محل قرارگیری فیبرهای آبدوست در $301lu \leq Y \leq 351lu$ است) آب مایع بعد از ۹۰۵۹۶۴ مرحله زمانی به این محل می‌رسد	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از ۸۸۰۷۰۵ مرحله زمانی به محل $Y=301$ می‌رسد	مثال دوم

همان‌طوری که در بالا اشاره شد فیبرهای آبدوست ممکن است باعث کاهش یا افزایش زمان لازم برای انتقال آب مایع از مرز مشترک لایه انتشار گاز- کاتالیزور به نقطه شروع فیبرهای آبدوست شوند ولی زمان انتقال آب مایع از نقطه شروع فیبرهای آبدوست به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز را همواره کاهش می‌دهند. مقدار این کاهش بستگی به محل قرارگیری فیبرهای آبدوست و ضخامتشان دارد. برای مثال در حالتی که ناحیه آبدوست $301lu \leq Y \leq 401lu$ باشد، آب مایع پس از ۱۶۱۳۲۶ مرحله زمانی از ابتدای محل آبدوست به کانال گاز می‌رسد ولی در حالتی که ناحیه آبدوست $301lu \leq Y \leq 351lu$ باشد این زمان به ۵۰۴۹۱ مرحله زمانی کاهش می‌یابد. شروع ناحیه آبدوست این دو حالت یکسان است اما ضخامت متفاوتی دارند. پس هر چه ضخامت قسمت آبدوست کمتر باشد آب مایع در مدت‌زمان کمتری خود را از ابتدای قسمت آبدوست به کانال گاز می‌رساند (در حالت کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی

۱۴۵° مدت زمانی که طول می‌کشد تا آب مایع از محل $y=301$ به انتهای لایه انتشار گاز برسد ۳۶۵۹۸۹ مرحله زمانی است).

خوشه آب مایعی که به کانال گاز می‌رسد الزاماً اولین خوشه آب مایع رسیده به محل شروع فیبرهای آب‌دوست نیست. برای مثال در حالت نهم خوشه ۵ به کانال گاز رسیده ولی اولین خوشه‌ی آب مایع رسیده به محل فیبرهای آب‌دوست خوشه ۶ است.

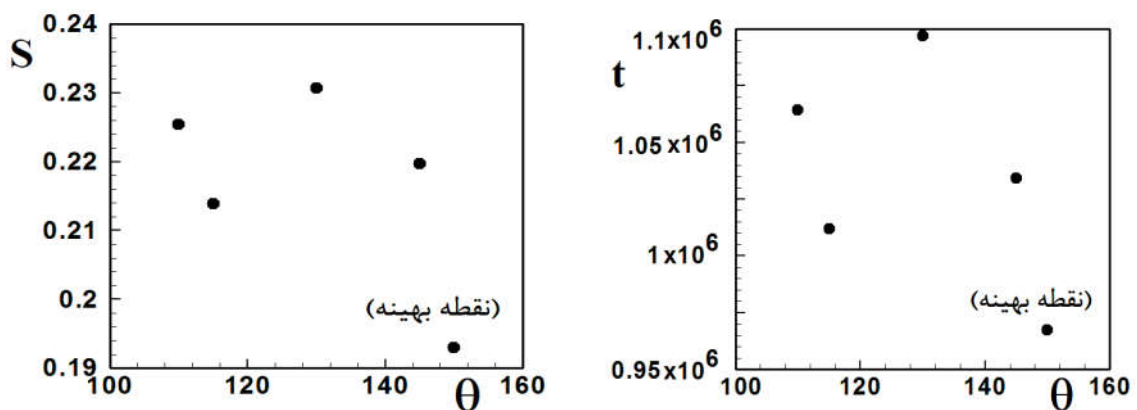
برای فهم بیشتر توضیحات بالا پنج مثال در جدول ۴-۱۰ خلاصه شده است.

جدول ۴-۱۰: تأثیر ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز بر زمان انتقال آب مایع.

در حالت سوم (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست در $351lu \leq Y \leq 401lu$ است) آب مایع بعد از ۱۱۰۶۹۱ مرحله زمانی به این محل می‌رسد.	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از 302930 مرحله زمانی از محل $y=351$ به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز می‌رسد	مثال اول
در حالت چهارم (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست در $301lu \leq Y \leq 351lu$ است) آب مایع بعد از ۱۵۰۴۹۱ مرحله زمانی به این محل می‌رسد.	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از 365989 مرحله زمانی از محل $y=301$ به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز می‌رسد	مثال دوم
در حالت هشتم (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست در $251lu \leq Y \leq 401lu$ است) آب مایع بعد از 238376 مرحله زمانی به این محل می‌رسد.	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از 388777 مرحله زمانی از محل $y=251$ به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز می‌رسد	مثال سوم
در حالت هفتم (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست در $301lu \leq Y \leq 401lu$ است) آب مایع بعد از 161326 مرحله زمانی به این محل می‌رسد.	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از 365989 مرحله زمانی از محل $y=301$ به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز می‌رسد	مثال چهارم
در حالت نهم (محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست در $101lu \leq Y \leq 151lu$ است) آب مایع بعد از 797408 مرحله زمانی به این محل می‌رسد.	در لایه انتشار گاز کاملاً آب‌گریز با زاویه خیسی 145° آب مایع بعد از 840472 مرحله زمانی از محل $y=101$ به مرز مشترک لایه انتشار گاز-کانال گاز می‌رسد	مثال پنجم

۴-۹-۲-۶ زاویه خیسی فیبرهای آب‌گریز

تاکنون دریافته‌ایم که بهترین مکان برای قرارگیری فیبرهای آب‌دوست، مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز است. همچنین ضخامت مناسب فیبرهای آب‌دوست نیز در این حالت تعیین شد که برابر ۵۰ میکرومتر یا ۱۲/۵ درصد ضخامت کل لایه انتشار گاز است. در این قسمت می‌خواهیم زاویه خیسی مناسب برای فیبرهای آب‌گریز را تعیین کنیم. برای این منظور فیبرهای آب‌گریز لایه انتشار گاز را برای مقادیر مختلف زاویه خیسی بررسی می‌کنیم. شکل ۴-۴۱ اشباع کلی آب مایع و زمان رسیدن آن به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز را بر حسب زاویه خیسی ناحیه آب‌گریز نشان می‌دهد. در تمامی این حالت‌ها، فیبرهای آب‌دوست دارای ضخامت ۵۰ میکرومتر و نزدیک مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز قرار گرفته‌اند. با توجه به نمودار مشخص است که در زاویه خیسی 150° زمان لازم برای رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز و همچنین اشباع آب مایع در کل لایه انتشار گاز کمترین مقدار را دارد پس در این حالت پیل سوختی عملکرد مناسب‌تری را خواهد داشت.

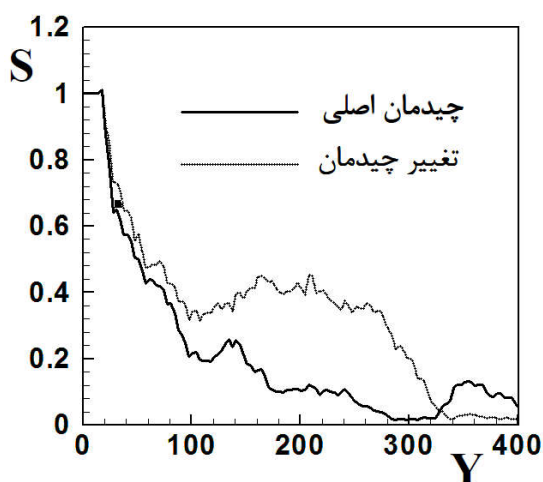


شکل ۴-۴۱: اشباع کلی آب مایع (S) و زمان رسیدن آب مایع به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز (t) بر حسب زاویه خیسی ناحیه آب‌گریز.

در این مطالعه اعتبارسنجی نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی لایه انتشار گاز به صورت زیر است:

- نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که آب مایع خروجی از مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز به صورت قطره است که با گذشت زمان بزرگ و بزرگ‌تر می‌شود. بسیاری از نتایج تجربی این مشاهده را تأیید می‌کنند [۱۸۳-۱۸۶].
 - وقتی آب مایع وارد کانال گاز می‌شود، قطره شکل می‌گیرد و به تدریج رشد می‌کند. در همین زمان پدیده چروکیدگی و انقباض اتفاق می‌افتد (به دلیل شکل‌گیری گذرگاه‌های ترجیحی آب مایع). این پدیده باعث کاهش رشد شاخه‌های انتهایی خوشه‌ها و حرکت مستقیم آن‌ها به سمت کانال گاز می‌شود. این پدیده سازگار با مشاهدات تجربی است [۱۸۶].
 - آب مایع برای حرکت به سمت کانال حفره‌های بزرگ‌تر (مسیرهایی با کمترین مقاومت) را انتخاب می‌کند. همچنین برخی خوشه‌ها در حرکت خود به سمت کانال به هم می‌پیوندند. مطالعات تجربی این دو پدیده را نیز تأیید می‌کند [۱۸۶].
 - بر اساس نتایج شبیه‌سازی وقتی زاویه خیسی افزایش یابد، زمان لازم برای رسیدن اولین خوشه به مرز مشترک لایه انتشار گاز- کانال گاز کاهش می‌یابد. همچنین در مرجع [۶۱] این نتیجه به دست آمده است که درستی این موضوع را تأیید می‌کند.
- لازم به ذکر است با شبیه‌سازی مجدد یک حالت خاص، نتایج یکسانی به دست آمد چون درست است که رژیم حاکم بر لایه انتشار گاز از نوع انگشتی موپینگی است ولی این رژیم اثر خود را به صورت حرکت انگشتی مانند سیال نشان می‌دهد. پس با توجه به یکسان بودن شرایط مرزی، شرایط اولیه، معادلات و تمام پارامترهای موجود در مسئله نتایج یکسان خواهد بود.

نمودار زیر اشباع محلی آب مایع برای دو لایه انتشار گاز با ضریب تخلخل ثابت و چیدمان متفاوت را نشان می‌دهد. در این نمودار حالتی بررسی شده که فیبرهای آب‌دوست با ضخامت ۵۰ میکرومتر در نزدیک کانال گاز قرار گرفته‌اند. هدف از این نمودار بررسی اثر چیدمان فیبرهای کربن بر رفتار آب مایع است. برای ایجاد چیدمان متفاوت محل برخی از فیبرهای کربن تغییر کرده است.



شکل ۴-۴۲: اشباع محلی آب مایع بر حسب ضخامت لایه انتشار گاز برای دو چیدمان متفاوت.

همان‌طوری که در ابتدای این فصل توضیح داده شد آب مایع برای حرکت خود مسیر با بزرگ‌ترین قطر را انتخاب می‌کند که علت کم بودن فشار موینگی در چنین مسیری است. وقتی محل فیبرهای کربن تغییر کند اندازه‌ی حفره‌ها تغییر کرده و مسیر حرکت آب نیز تغییر خواهد کرد. از طرفی ضریب نفوذپذیری لایه انتشار گاز دقیقه تابع چیدمان فیبرهای کربن است بنابراین اشباع آب مایع نیز مقداری تغییر خواهد کرد.

فصل پنجم:

نتیجه‌گیری و پیشنهادها

هدف این رساله، بررسی انتقال آب مایع در لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون به روش میکروسکوپی و با استفاده از شبکه بولتزمن است. منظور از بررسی میکروسکوپی مدل سازی فیبرهای کربن موجود در محیط است. در بررسی های مختلف برای مدل کردن تخلخل محیط از موانع جامد مستطیلی، دایره ای، کروی، استوانه ای یا صفحات افقی استفاده می شود که در مطالعه حاضر موانع دایره ای به کار گرفته شده است.

برای مدل سازی میکروسکوپی لایه انتشار گاز دو روش ترکیب عکس های سه بعدی و روش تصادفی و مجازی استفاده می شود. در روش اول عکس های سه بعدی توسط اشعه ایکس یا اشعه لیزر میکروسکوپی تهیه شده و با ترکیب آن ها ساختار هندسه مورد نظر بدست می آید. در روش دوم ساختار میکرو محیط متخلخل بر اساس اطلاعات آماری، با هزینه کم و پیاده سازی آسان تولید می شود که بیشترین شبیه سازی های میکروسکوپی سه بعدی به روش شبکه بولتزمن روی لایه انتشار گاز بر اساس روش تولید تصادفی است.

در لایه انتشار گاز به دلیل انجام واکنش الکتروشیمیایی آب تولید می شود که تجمع آن اتفاق در این لایه باعث گرفتگی منافذ شده و مانع از انتقال اکسیژن به کاتالیزور می شود. آب گرفتگی پدیده ای معروف و محدودکننده عملکرد پیل سوختی غشای مبادله پروتون است. از این رو در این رساله می خواهیم مدیریت آب مایع در لایه انتشار گاز را بهبود بخشیم.

۵-۱ روش های بهبود عملکرد پیل سوختی

برای مدیریت آب در لایه انتشار گاز دو روش پیشنهاد می شود:

روش اول: افزایش آب گریزی

نتایج این بررسی نشان می دهد که هر چه آب گریزی سطوح جامد لایه انتشار گاز بیشتر شود (سطوح جامد آب گریز تر شوند) تعداد خوشه های مؤثر کاهش می یابد (در زاویه 115° تعداد ۹ خوشه و در زاویه

۱۴۵° تعداد ۷ خوشه مؤثر شکل گرفته‌اند) چون با این کار فشار موینگی بحرانی برای ورود آب مایع به حفره زیاد شده و تعداد خوشه‌های کمتری می‌توانند نفوذ کنند به همین دلیل عاملی مؤثر در افزایش کارایی پیل سوختی غشای مبادله پروتون به حساب می‌آید. همچنین با افزایش زاویه خیسی، مقدار اشباع آب مایع در حالت پایا کاهش خواهد یافت. این موضوع نشان‌دهنده‌ی حذف سریع آب مایع از لایه انتشار گاز به کانال گاز و بهبود مدیریت آب مایع برای سطوح جامد با آب‌گریزی بیشتر است.

روش دوم: ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز

به‌طور کلی مطالعه جامعی در مورد استفاده از فیبرهای آب‌دوست در لایه انتشار آب‌گریز وجود ندارد و نتایج متناقضی در مراجع ارائه شده است به عنوان نمونه برخی از مراجع به این نتیجه رسیده‌اند که با این کار عملکرد پیل سوختی بهتر می‌شود در حالی که برخی ذکر کرده‌اند که این کار کارایی پیل سوختی را کاهش می‌دهد. در این رساله رفتار لایه انتشار گاز با ترکیب فیبرهای آب‌دوست و آب‌گریز بررسی شده و تأثیر آن بر عملکرد سلول بیان می‌شود. نتایج این رساله نشان می‌دهد که انتخاب موقعیت و ضخامت فیبر آب‌دوست می‌تواند باعث افزایش یا کاهش عملکرد پیل سوختی شود. در این رساله با در نظر گرفتن حالات مختلف، موقعیت و ضخامت فیبرهای آب‌دوست و همچنین زاویه فیبرهای آب‌گریز برای عملکرد مناسب‌تر پیل سوختی تعیین شده است.

نتایج کلیدی این مطالعه به صورت زیر است:

۱. فیبرهای آب‌دوست نزدیک لایه کاتالیزور قرار داده نشود زیرا تأثیر منفی دارد. علت این است که هر چه محل قرارگیری فیبرهای آب‌دوست به کاتالیزور نزدیک‌تر باشد حوضچه آب مایع در محل پایین‌تری تشکیل شده و ممکن است خوشه‌های آب مایع بیشتری به این حوضچه برسند.

۲. مکان و ضخامت مناسب برای فیبرهای آبدوست، چسبیده به کانال و ۵۰ میکرومتر است که این مکان و ضخامت با انجام شبیه‌سازی‌های متعدد و رسم نمودار زمان و اشباع کلی آب مایع بدست آمده است
۳. محدوده‌ی زاویه خیسی فیبرهای آب‌گریز برای لایه انتشار گاز در مطالعات میکروسکوپی 110° تا 150° بیان شده است که نتایج این رساله نشان می‌دهد زاویه مناسب برای عملکرد پیل سوختی 150° است.
۴. اگر فیبرهای آبدوست چسبیده به کانال باشند هرچه ضخامت آن‌ها از ۵۰ میکرومتر کمتر شود عملکرد پیل سوختی ضعیف‌تر خواهد شد.
۵. عملکرد پیل سوختی و تأثیر ترکیب فیبرهای آبدوست و آب‌گریز وابسته به محل قرارگیری و ضخامت فیبرهای آبدوست است.
۶. اگر لایه آبدوست با ضخامت و در مکان مناسب قرار گیرد می‌تواند تأثیر بسیار بیشتری بر بهبود عملکرد پیل سوختی نسبت به افزایش آب‌گریزی فیبرهای کربن داشته باشد.

۲-۵ پیشنهادها و کارهای آینده

برای ادامه بررسی لایه انتشار گاز پیل سوختی غشای مبادله پروتون، پیشنهادهای زیر ارائه می‌شود:

- بررسی به صورت تجربی انجام گیرد و با نتایج عددی مقایسه گردد.
- می‌توان اثر دما و تغییر فاز را روی توزیع آب مایع بررسی کرد.
- یکی از روش‌هایی که در سال‌های اخیر برای بهبود عملکرد پیل سوختی استفاده می‌شود به‌کارگیری لایه متخلخل میکرو است که بین کاتالیزور و لایه انتشار گاز قرار می‌گیرد. مطالعات تجربی نشان می‌دهد که این لایه می‌تواند تأثیر مطلوبی بر کارایی پیل سوختی داشته باشد. در

راستای ادامه این رساله، می‌توان اثر ضخامت، ضریب تخلخل و زاویه خیزی این لایه را مورد بررسی قرار داد.

- هنگامی که اجزای مختلف لایه انتشار گاز ساخته شده و با فشار به یکدیگر متصل می‌شوند مقداری فشردگی در حفره‌های زیر صفحات دوقطبی ایجاد می‌شود که مطالعات محدودی در این زمینه وجود دارد. می‌توان در راستای ادامه‌ی این رساله اثر مقادیر مختلف فشار را بر رفتار انتقال آب مایع بررسی کرد.

- در لایه انتشار گاز واقعی آب مایع از مرز پایین و هوا از طریق کانال گاز وارد لایه انتشار گاز می‌شوند. در این رساله با توجه به دو بعدی بودن هندسه و مقطع مورد بررسی، جریان هوا مدل نشده است. برای بررسی آن می‌توان هندسه را به صورت سه بعدی در نظر گرفت.

- [1] Larminie J. and Dicks A. (2003), **“Fuel Cell Systems Explained”**. John Wiley & Sons Ltd., New York, ISBN: 978-0-470-84857-9, pp.428.
- [2] Castagne D., (2008), MC. thesis, **“Mathematical modeling of PEM fuel cell cathodes: comparison of first-order and half-order reaction kinetics”**, Chem. Engineering depart. Queen’s University,
- [3] Das P. K., (2010), PhD. Thesis, **“Transport Phenomena in Cathode Catalyst Layer of PEM Fuel Cells”**, Mech. Depart. Waterloo university,
- [4] P. K. Sinha and C. Y. Wang, (2008) **“Liquid water transport in amixed-wet gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell”** *Chem. Eng. Sci.*, **63**, pp 1081 – 1091.
- [5] P. Costamagna and S. Srinivasan, (2001) **“Quantum jumps in the PEMFC science and technology from the 1960s to the year 2000 Part I. Fundamental scientific aspects”** *J. Power Sources*, **102**, 1–2, pp 242–252.
- [6] P. Costamagna and S. Srinivasan, (2001) **“Quantum jumps in the PEMFC science and technology from the 1960s to the year 2000 Part II. Engineering, technology developmentand application aspects”** *J. Power Sources*, **102**, 1–2, pp 253–269.
- [7] P. K. Das, X. Li and Z. S. Liu, (2007) **“Analytical approach to polymer electrolyte membrane fuel cell performance and optimization”** *J. Electroanal. Chem.*, **604**, 2, pp 72–90.
- [8] D. Bernardi and M. Verbrugge, (1991) **“Mathematical model of a gas-diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte”** *AIChE J.*, **37**, 8, pp 1151–1163.
- [9] D. Bernardi and M. Verbrugge, (1992) **“A mathematical model of the solid polymer electrolyte fuel cell”** *J. Electrochem. Soc.*, **139**, 9, pp 2477–2491.
- [10] M. Verbrugge and R. Hill, (1990) **“Ion and solvent transport in ion-exchange membranes. 1. A macrohomogeneous mathematical model”** *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 3, pp 886–893.
- [11] T. Springer, T. Zawodzinski and S. Gottesfeld, (1991) **“Polymer electrolyte fuel cell model”** *J. Electrochem. Soc.*, **138**, 8, pp 2334–2342.
- [12] T. Springer, M. Wilson and S. Gottesfeld, (1993) **“Modeling and experimental diagnostics in polymer electrolyte fuel cells”** *J. Electrochem. Soc.*, **140**, 12, pp 3513– 3526.
- [13] T. Fuller and J. Newman, (1993) **“Water and thermal management in solid-polymer-electrolyte fuel cells”** *J. Electrochem. Soc.*, **140**, 5, pp 1218–1225.
- [14] T. V. Nguyen and R. White, (1993) **“A water and heat management model for proton- exchange-membrane fuel-cells”** *J. Electrochem. Soc.*, **140**, 8, pp 2178–2186.
- [15] D. Thirumalai and R. White, (1997) **“Mathematical modeling of proton-exchange-membranefuel-cell stacks”** *J. Electrochem. Soc.*, **144**, 5, pp 1717–1723.
- [16] J. Yi and T. V. Nguyen, (1998) **“An along-the-channel model for proton exchange membranefuel cells”** *J. Electrochem. Soc.*, **145**, 4, pp 1149–1159.
- [17] M. Wöhr, K. Bolwin, W. Schnurnberger, M. Fischer, W. Neubrand and G. Eigenberger, (1998) **“Dynamic modelling and simulation of a polymer membrane**

- fuel cell including mass transport limitation” **Int. J. Hydrog. Energy**, **23**, **3**, pp **213–218**.
- [18] A. Rowe and X. Li, (2001) “Mathematical modeling of proton exchange membrane fuel cells” **J. Power Sources**, **102**, pp **82–96**.
- [19] G. Maggio, V. Recupero and C. Mantegazza, (1996) “Modelling of temperature distribution in a solid polymer electrolyte fuel cell stack” **J. Power Sources**, **62**, **2**, pp **167–174**.
- [20] S. Shimpalee and S. Dutta, (2000) “Numerical prediction of temperature distribution in PEM fuel cells” **Numer. Heat Transfer, Part A - Applications**, **38**, **2**, pp **111–128**.
- [21] P. Costamagna, (2001) “Transport phenomena in polymeric membrane fuel cells” **Chem. Eng. Sci.**, **56**, **2**, pp **323–332**.
- [22] H. Ju, H. Meng and C. Y. Wang, (2005) “A single-phase, non-isothermal model for PEM fuel cells” **Int. J. Heat Mass Transfer**, **48**, **7**, pp **1303–1315**.
- [23] Y. Shan and S. Choe, (2005) “A high dynamic PEM fuel cell model with temperature effects” **J. Power Sources**, **145**, pp **30–39**.
- [24] V. Gurau, H. Liu and S. Kakac, (1998) “Two-dimensional model for proton exchange membrane fuel cells” **Aiche J.**, **44**, **11**, pp **2410–2422**.
- [25] S. Um, C. Y. Wang and K. Chen, (2000) “Computational fluid dynamics modeling of proton exchange membrane fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **147**, **12**, pp **4485–4493**.
- [26] S. Um and C. Y. Wang, (2004) “Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells” **J. Power Sources**, **125**, **1**, pp **40–51**.
- [27] S. Um and C. Y. Wang, (2006) “Computational study of water transport in proton exchange membrane fuel cells” **J. Power Sources**, **156**, **2**, pp **211–223**.
- [28] T. Okada, G. Xie and M. Meeg, (1998) “Simulation for water management in membranes for polymer electrolyte fuel cells” **Electrochim. Acta**, **43**, **14–15**, pp **2141–2155**.
- [29] M. Eikerling, Y. Kharkats, A. Kornyshev and Y. Volfkovich, (1998) “Phenomenological theory of electro-osmotic effect and water management in polymer electrolyte proton-conducting membranes” **J. Electrochem. Soc.**, **145**, **8**, pp **2684–2699**.
- [30] T. Thampan, S. Malhotra, H. Tang and R. Datta, (2000) “Modeling of conductive transport in proton exchange membranes for fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **147**, **9**, pp **3242–3250**.
- [31] N. Siegel, M. Ellis, D. Nelson and M. V. Spakovsky, (2004) “A two-dimensional computational model of a PEMFC with liquid water transport” **J. Power Sources**, **128**, **2**, pp **173–184**.
- [32] H. Wu, P. Berg and X. Li, (2009) “On the modeling of water transport in PEM fuel cells” **Electrochim. Acta**, **54**, pp **6913–6927**.
- [33] J. J. Hwang and P. Y. Chen, (2006) “Heat/mass transfer in porous electrodes of fuel cells” **Int. J. Heat Mass Transfer**, **49**, pp **2315–2327**.
- [34] C. H. Chao and A. J. J. Hwang, (2006) “Predictions of phase temperatures in a porous cathode of polymer electrolyte fuel cells using a two-equation model” **J. Power Sources**, **160**, pp **1122–1130**.

- [35] L. K. Kwac and H. G. Kim, (2008) "Investigation of gas flow characteristics in proton exchange membrane fuel cell" **J. Mech. Sci. Technol**, **22**, pp 1561-1567.
- [36] H. V. Bussel, F. Koene and R. Mallant, (1998) "Dynamic model of solid polymer fuel cell water management" **J. Power Sources**, **71**, 1–2, pp 218–222.
- [37] F. Chen, Y. Su, C. Soong, W. Yan and H. Chu, (2004) "Transient behavior of water transport in the membrane of a PEM fuel cell" **J. Electroanal. Chem.**, **566**, 1, pp 85–93.
- [38] H. Wu, P. Berg and X. Li, (2007) "Non-isothermal transient modeling of water transport in PEM fuel cells" **J. Power Sources**, **165**, 1, pp 232–243.
- [39] **Khan M. A., (2009), Licentiate Thesis, "Numerical Simulation of Multi-scale Transport Processes and Reactions in PEM Fuel Cells using Two-Phase Models", Energy Sci. Depart. Lund University,**
- [40] Pinder G. F. and Gray W. G. (2008), "Essentials of Multiphase Flow and Transport in Porous Media", John Wiley & Sons, ISBN: 978-0-470-31762-4, pp.258.
- [41] C. Y. Wang and P. Cheng, (1996) "A multiphase mixture model for multiphase, multicomponent transport in capillary porous media. 1. Model development" **Int. J. Heat Mass Transfer**, **39**, 17, pp 3607–3618.
- [42] W. He, J. Yi and T. V. Nguyen, (2000) "Two-phase flow model of the cathode of PEM fuelcells using interdigitated flow fields" **Aiche J.**, **46**, 10, pp 2053–2064.
- [43] T. Berning and N. Djilali, (2003) "A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell" **J. Electrochem. Soc.**, **150**, 12, pp A1589–A1598.
- [44] Article I. Q. Ye and T. V. Nguyen, (2007) "Three-Dimensional Simulation of Liquid Water Distribution in a PEMFC with Experimentally Measured Capillary Functions" **J. Electrochem. Soc.**, **154**, pp B1242–B1251.
- [45] T. Berning, M. Odgaard and S. K. Kær, (2009) "A computational analysis of multiphase flow through PEMFC cathode porous media using the multifluid approach" **J. Electrochem. Soc.**, **156**, pp B1301–B1311.
- [46] W. Yuan, Y. Tang, M. Pan, Z. Li and B. Tang, (2010) "Model Prediction Of Effects Of Operating Parameters On Proton Exchange Membrane Fuel Cell Performance" **Renew. Energy**, **35**, pp 656–666.
- [47] Article II. N. K. H. Dalasm, K. Fushinobu and K. Okazaki, (2010) "Phase change in the cathode side of a proton exchange membrane fuel cell" **J. Power Sources**, **195**, pp 7003–7010.
- [48] Z. Wang, C. Y. Wang and K. Chen, (2001) "Two-phase flow and transport in the air cathode of proton exchange membrane fuel cells" **J. Power Sources**, **94**, 1, pp 40–50.
- [49] L. You and H. Liu, (2002) "A two-phase flow and transport model for the cathode of PEM fuel cells" **Int. J. Heat Mass Transfer**, **45**, 11, pp 2277–2287.
- [50] D. Natarajan and T. V. Nguyen, (2001) "A two-dimensional, two-phase, ulticomponent, transient model for the cathode of a proton exchange membrane fuel cell using conventional gas distributors" **J. Electrochem. Soc.**, **148**, 12, pp A1324–A1335.
- [51] U. Pasaogullari and C. Y. Wang, (2004) "Liquid water transport in gas diffusion

- layer of polymer electrolyte fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **151**, **3**, pp **A399–A406**.
- [52] U. Pasaogullari and C. Y. Wang, (2004) “Two-phase transport and the role of micro-porous layer in polymer electrolyte fuel cells” **Electrochim. Acta**, **49**, **25**, pp **4359–4369**.
- [53] U. Pasaogullari and C. Y. Wang, (2005) “Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **152**, **2**, pp **A380–A390**.
- [54] U. Pasaogullari, C. Y. Wang and K. Chen, (2005) “Two-phase transport in polymer electrolyte fuel cells with bilayer cathode gas diffusion media” **J. Electrochem. Soc.**, **152**, **8**, pp **A1574–A1582**.
- [55] Kuhn K., Ohlberger M., Schumacher J. O., Ziegler C., and R. Klokorn., (2003) “A dynamic two-phase flow model of proton exchange membrane fuel cells”, CSCAMM Report, 2nd EUROPEAN PEFC FORUM, Luzern
- [56] D. Song, Q. Wang, Z. S. Liu and C. Huang, (2006) “Transient analysis for the cathode gas diffusion layer of PEM fuel cells” **J. Power Sources**, **159**, pp **928–942**.
- [57] M. H Chang, F. Chen and H. S. Teng, (2006) “Effects of two-phase transport in the cathode gas diffusion layer on the performance of a PEMFC” **J. Power Sources**, **160**, pp **268–276**.
- [58] F. Chen, M. H. Chang and P. T. Hsieh, (2008) “Two-phase transport in the cathode gas diffusion layer of PEM fuel cell with a gradient in porosity” **Int. J. Hydrog. Energy**, **33**, pp **2525 – 2529**.
- [59] J. Liu, N. Oshima, E. Kurihara and L. K. Saha, (2010) “Transport phenomena within the porous cathode for a proton exchange membrane fuel cell” **J. Power Sources**, **195**, pp **6342–6348**.
- [60] N. Akhtar and P. J. A. M. Kerkhof, (2011) “Effect of channel and rib width on transport phenomenon within the cathode of a proton exchange membrane fuel cell” **Int. J. Hydrog. Energy**, **36**, pp **5536–5549**.
- [61] L. Hao and P. Cheng, (2010) “Lattice Boltzmann simulations of water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte membrane fuel cell” **J. Power Sources**, **195**, pp **3870–3881**.
- [62] L. Chen, H. B Luan, Y. L He and W. Q Tao, (2012) “Pore-scale flow and mass transport in gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cell with interdigitated flow fields” **Int. J. Therm. Sci.**, **51**, pp **132–144**.
- [63] U. Pasaogullari and C. Y. Wang, (2005) “Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **152**, **2**, pp **A380–A390**.
- [64] Y. Wang and C. Y. Wang, (2006) “A nonisothermal, two-phase model for polymer electrolyte fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **153**, **6**, pp **A1193–A1200**.
- [65] K. J. Lee, J. H. Nam and C. J. Kim, (2009) “Pore-network analysis of two-phase water transport in gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells” **Electrochim. Acta**, **54**, pp **1166–1176**.
- [66] Article III. C. Ziegler and D. Gerteisen, (2009) “Validity of two-phase polymer electrolyte membrane fuel cell models with respect to the gas diffusion layer” **J. Power Sources**, **188**, pp **184–191**.

- [67] Article IV. X. G. Yang, F. Y. Zhang, A. L. Lubawy and C. Y. Wang, (2004) “Visualization of Liquid Water Transport in a PEFC” **Electrochem. Solid State Lett.**, **7**, pp **A408–A411**.
- [68] Article V. F. Y. Zhang, X. G. Yang and C. Y. Wang, (2006) “Liquid Water Removal from a Polymer Electrolyte Fuel Cell” **J. Electrochem. Soc.**, **153**, **2**, pp **A225–A232**.
- [69] Article VI. S. Litster, D. Sinton and N. Djilali, (2006) “Ex situ visualization of liquid water transport in PEM fuel cell gas diffusion layers” **J. Power Sources**, **154**, pp **95–105**.
- [70] P. K. Sinha, P. Halleck and C. Y. Wang, (2006) “Quantification of Liquid Water Saturation in a PEM Fuel Cell Diffusion Medium Using X-ray Microtomography” **Electrochem. Solid State Lett.**, **9**, **7**, pp **A344–A348**.
- [71] N. Pekula, K. Heller, P. A. Chuang, A. Turhan, M. M. Mench, J. S. Brenizer and K. Ünlü, (2005) “Study of water distribution and transport in a polymer electrolyte fuel cell using neutron imaging” **Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A, Methods Phys. Res. A**, **542**, pp **134–141**.
- [72] M. A. Hickner, N. P. Siegel, K. S. Chen, D. S. Hussey, D. L. Jacobson and M. Arif, (2008) “In situ high-resolution neutron radiography of cross-sectional liquid water profiles in proton exchange membrane fuel cells” **J. Electrochem. Soc.**, **155**, pp **B427–B434**.
- [73] C. Hartnig, I. Manke, R. Kuhn, N. Kardjilov, J. Banhart and W. Lehnert, (2008) “Cross-sectional insight in the water evolution and transport in polymer electrolyte fuel cells” **Appl. Phys. Lett.**, **92**, **3**, **134106**.
- [74] P. K. Sinha and C. Y. Wang, (2007) “Pore-network modeling of liquid water transport in gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell” **Electrochim. Acta**, **52**, pp **7936–7945**.
- [75] P. K. Sinha and C. Y. Wang, (2008) “Liquid water transport in a mixed-wet gas diffusion layer of a polymer electrolyte fuel cell” **Chem. Eng. Sci.**, **63**, pp **1081–1091**.
- [76] K. J. Lee, J. H. Nam and C. J. Kim, (2009) “Pore-network analysis of two-phase water transport in gas diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells” **Electrochim. Acta**, **54**, pp **1166–1176**.
- [77] K. J. Lee, J. H. Nam and C. J. Kim, (2010) “Steady saturation distribution in hydrophobic gas-diffusion layers of polymer electrolyte membrane fuel cells: A pore-network study” **J. Power Sources**, **195**, pp **130–141**.
- [78] S. Y. Chen and G. D. Doolen, (1998) “Lattice Boltzmann method for fluid flows” **Annu. Rev. Fluid Mech.**, **30**, pp **329-364**.
- [79] Article VII. S. Chen and G. Doolen, (1998) “Lattice Boltzmann method for fluid flows” **Annu. Rev. Fluid Mech.**, **30**, pp **329-364**.
- [80] P. P. Mukherjee, C. Y. Wang and Q. Kang, (2009) “Mesoscopic modeling of two-phase behavior and flooding phenomena in polymer electrolyte fuel cells” **Electrochim. Acta**, **54**, pp **6861–6875**.
- [81] J. T. Gostick, M. W. Fowler, M. A. Ioannidis, M. D. Pritzker, Y. M. Volfkovich and A. Sakars, (2006) “Capillary pressure and hydrophilic porosity in gas diffusion layers for polymer electrolyte fuel cells, **J. Power Sources**, **156**, pp

375-387.

- [82] P. K. Sinha, P. P. Mukherjee and C. Y. Wang, (2007) "Impact of GDL structure and wettability on water management in polymer electrolyte fuel cells" **J. Mater. Chem.**, **17**, pp 3089-3103.
- [83] Wood III D. L. and Borup, R. L. in: Buchi F. N. Inaba M. and Schmidt T. J. (Eds.), (2009), "**Polymer Electrolyte Fuel Cell Durability**", Springer, New York, ISBN: 978-0-387-85536-3, pp.159.
- [84] J. H. Nam and M. Kaviany, (2003) "Effective diffusivity and water-saturation distribution in single- and two-layer PEMFC diffusion medium" **Int. J. Heat Mass Transfer**, **46**, pp 4595-4611.
- [85] J. P. Feser, A. K. Prasad and S. G. Advani, (2006) "Experimental characterization of in-plane permeability of gas diffusion layers" **J. Power Sources**, **162**, pp 1226-1231.
- [86] J. T. Gostick, M. W. Fowler, M. D. Pritzker, M. A. Ioannidis and L. M. Behra, (2006) "In-plane and through-plane gas permeability of carbon fiber electrode backing layers" **J. Power Sources**, **162**, pp 228-238.
- [87] J. G. Pharoah, K. Karan and W. Sun, (2006) "On effective transport coefficients in PEM fuel cell electrodes: anisotropy of the porous transport layers" **J. Power Sources**, **161**, pp 214-224.
- [88] D. Zhang, Q. Cai, and S. Gu, (2018) "Three-dimensional lattice-Boltzmann model for liquid water transport and oxygen diffusion in cathode of polymer electrolyte membrane fuel cell with electrochemical reaction" **Electrochimica Acta**, **262**, pp 282-296.
- [89] H. Huang, Z. Li, S. Liu and X. Lu, (2008) "Shan-and-Chen-type multiphase lattice Boltzmann study of viscous coupling effects for two-phase flow in porous media" **Int. J. Numer. Meth. Fluids**, **61**, **3**, pp 341-354.
- [90] Y. Tabe, Y. Lee, T. Chikahisa and M. Kozakai, (2009) "Numerical simulation of liquid water and gas flow in a channel and a simplified gas diffusion layer model of polymer electrolyte membrane fuel cells using the lattice Boltzmann method" **J. Power Sources**, **193**, pp 24-31.
- [91] P. P. Mukherjee, C. Wang and Q. Kang, (2009) "Mesoscopic modeling of two-phase behavior and flooding phenomena in polymer electrolyte fuel cells" **Electrochim. Acta**, **54**, pp 6861-6875.
- [92] L. Hao and P. Cheng, (2010) "Pore-scale simulations on relative permeabilities of porous media by lattice Boltzmann method" **Int. J. Heat Mass Transfer**, **53**, pp 1908-1913.
- [93] H. Huang, L. Wang and X. Lu, (2011) "Evaluation of three lattice Boltzmann models for multiphase flows in porous media" **Computers & Mathematics with Applications**, **61**, pp 3606-3617.
- [94] L. Chen, H. Luan, Y. Feng, C. Song, Y. He and W. Tao, (2012) "Coupling between finite volume method and lattice Boltzmann method and its application to fluid flow and mass transport in proton exchange membrane fuel cell" **Int. J. Heat Mass Transfer**, **55**, pp 3834-3848.

- [95] H. Liu, A. J. Valocchi, Q. Kang and C. Werth, (2013) “Pore-Scale Simulations of Gas Displacing Liquid in a Homogeneous Pore Network Using the Lattice Boltzmann Method” **Transp Porous Med.**, **99**, pp 555–580.
- [96] E. F. Médiçi and J. S. Allen, (2013) “Evaporation, two phase flow, and thermal transport in porous media with application to low-temperature fuel cells” **Int. J. Heat Mass Transfer**, **65**, pp 779–788.
- [97] R. Wu, G. Cui and R. Chen, (2014) “Pore network study of slow evaporation in hydrophobic porous media” **Int. J. Heat Mass Transfer**, **68**, pp 310–323.
- [98] K. J. Lange, P. Sui and N. Djilali, (2011) “Pore scale modeling of a proton exchange membrane fuel cell catalyst layer: Effects of water vapor and temperature” **J. Power Sources**, **196**, pp 3195–3203.
- [99] A. Kopanidis, A. Theodorakakos, M. Gavaises and D. Bouris, (2011) “Pore scale 3D modelling of heat and mass transfer in the gas diffusion layer and cathode channel of a PEM fuel cell” **Int. J. Therm. Sci.**, **50**, pp 456–467.
- [100] V. K. Surasani, T. Metzger and E. Tsotsas, (2009) “A Non-isothermal Pore Network Drying Model with Gravity Effect” **Transp Porous Med.**, **80**, pp 431–439.
- [101] G. Molaeimanesh and M. H. Akbari, (2014) “Water droplet dynamic behavior during removal from a proton exchange membrane fuel cell gas diffusion layer by Lattice-Boltzmann method” **Korean J. Chem. Eng.**, **31**, 4, pp 598–610.
- [102] L. Chen, H. B. Luan and W. Q. Tao, (2010) “Liquid water dynamic behaviors in the GDL and GC of PEMFCs using lattice Boltzmann method” **Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)**, **1**, 023002.
- [103] L. Chen, H. B. Luan, Y. L. He and W. Q. Tao, (2012) “Numerical Investigation of Liquid Water Transport and Distribution in Porous Gas Diffusion Layer of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Using Lattice Boltzmann Method” **Published in Russian in Elektrokhimiya**, **48**, 7, pp 786–800.
- [104] S. Sakaida, Y. Tabe and T. Chikahisa, (2017) “Large scale simulation of liquid water transport in a gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cells using the lattice Boltzmann method” **J. Power Sources**, **361**, pp 133–143.
- [105] G.R. Molaeimanesh and M. Nazemian, (2017) “Investigation of GDL compression effects on the performance of a PEM fuel cell cathode by lattice Boltzmann method” **J. Power Sources**, **359**, pp 494–506.
- [106] R. Lenormand, E. Touboul and C. Zarcone, (1988) “numerical models and experiments on immiscible displacements in porous media” **J Fluid Mech.**, **189**, pp 165–87.
- [107] R. P. Ewing and B. Berkowitz, (2001) “Stochastic pore-scale growth models of DNAPL migration in porous media” **Adv. Water Res.**, **24**, pp 309–323.
- [108] Jii Bazylak A. M., (2008), PhD. thesis, “Liquid water transport in fuel cell gas diffusion layers”, Mech. depart. Victoria university.
- [109] X. Zhu, P. C. Sui and N. Djilali, (2007) “Dynamic behaviour of liquid water emerging from a GDL pore into a PEMFC gas flow channel” **J. Power Sources**, **172**, pp 287–295.
- [110] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski and G. Zanetti, (1991) “Lattice Boltzmann model of immiscible fluids” **Phys. Rev. A**, **43**, 8, pp 4320–4327.

- [111] D. H. Rothman and J. M. Keller, (1988) “Immiscible cellular-automaton fluids” **14 J. Stat. Phys.**, **52**, 3–4, pp 1119–1127.
- [112] B. Ahrenholz, J. Tolke, P. Lehmann, A. Peters, A. Kaestner, M. Krafczyk and W. Durner, (2008) “Prediction of capillary hysteresis in a porous material using lattice Boltzmann methods and comparison to experimental data and a morphological pore network model” **Adv. Water Resour**, **31**, 9, pp 1151–1173.
- [113] X. Shan and H. Chen, (1993) “Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components” **Phys. Rev. E.**, **47**, 3, pp 1815–1819.
- [114] M. R. Swift, W. R. Osborn and J. M. Yeomans, (1995) “Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids” **Phys. Rev. Lett.**, **75**, 5, pp 830–833.
- [115] G. Hazi, A. R. Imre, G. Mayer and I. Farkas, (2002) “Lattice Boltzmann methods for two-phase flow modeling” **Ann Nucl Energy**, **29**, pp 1421–1453.
- [116] X. Y. He, S. Y. Chen, and R. Y. Zhang, (1999) “A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh–Taylor instability” **J. Comput. Phys**, **152**, 2, pp 642–663.
- [117] T. Lee and C. L. Lin, (2005) “A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio” **J. Comput. Phys.**, **206**, pp 16–47.
- [118] H. W. Zheng, C. Shu and Y. T. Chew, (2006) “A lattice Boltzmann model for 20 multiphase flows with large density ratio” **J. Comput. Phys.**, **218**, pp 353–371.
- [119] A. Fakhari and M. H. Rahimian, (2010) “Phase-field modeling by the method 24 of lattice Boltzmann equations” **Phys. Rev. E.**, **81**, 036707.
- [120] C. Pan, M. Hilpert and C. T. Miller, (2004) “Lattice-Boltzmann simulation of two-phase flow in porous media” **Water Resour. Res.**, **40**, W01501.
- [121] H. Li, C. Pan and C. T. Miller, (2005) “Pore-scale investigation of viscous coupling effects for two-phase flow in porous media” **Phys. Rev. E.**, **72**, 026705.
- [122] P. Yuan and L. Schaefer, (2006) “Equations of state in a lattice Boltzmann model” **Phys. Fluids**, **18**, 042101.
- [123] R. Benzi, L. Biferale, M. Sbragaglia, S. Succi and F. Toschi, (2006) “Mesoscopic modeling of a two-phase flow in the presence of boundaries: the contact angle” **Phys. Rev. E.**, **74**, 2, 021509.
- [124] X. Shan and H. Chen, (1994) “Simulation of nonideal gases and liquid–gas phase-transitions by the lattice Boltzmann equation” **Phys. Rev. E.**, **49**, pp 2941–2948.
- [125] Pathria R. K. (1996), “**statistical Mechanics**”, 2nd edition, Butterworth-Heinemann, ISBN: 978-0-471-81518-1, pp.512.
- [126] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross and M. Krook, (1954) “A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component system” **Phys. Rev.**, **94**, pp 511–525.
- [127] **Bao J.**, (2010), **PhD. Thesis**, “**High density ratio multi-component lattice Boltzmann flow model for fluid dynamics and cuda parallel computation**”, **Mech. Depart. Pittsburgh university**,
- [128] X. He and L. S Luo, (1997) “theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation” **Phys. Rev. E.**, **56**, 6 pp 6811–6817.

- [129] D. d. Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand and L. S. Luo, (2002) “Multi- Relaxation time lattice Boltzmann models in three dimensions” **Phil. Trans. R. Soc. Lond. A**, **360**, pp 437-451.
- [130] C. S. Michael and O. Dani, (2004) “Lattice Boltzmann method for modeling liquid-vapor interface configurations in porous media” **Water Resour. Res.**, **40**, **W01509**.
- [131] Succi S. (2001), “**The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond**”, Oxford University Press, Oxford, ISBN: 9780198503989, pp.304.
- [132] Aaron J. and Horwitz K., (2013), MS. thesis, “**Lattice Boltzmann simulations of multiphase flows**”, Mech. depart. Illinois university,
- [133] S. Gong and P. Cheng, (2012) “Numerical investigation of droplet motion and coalescence by an improved lattice Boltzmann model for phase transitions and multiphase flows” **Computers & Fluids**, **53**, pp 93–104.
- [134] Ikeda M., (2010), PhD. thesis, “**A novel multiple-phase, multiplecomponent, thermal lattice Boltzmann model**”, Mech. depart. Pittsburgh university,
- [135] Kuzmin A., (2009), PhD. thesis, “**Multiphase simulations with lattice Boltzmann scheme**”, Mech. depart. Calgary university,
- [136] Koosukuntla N. R., (2011), MS. thesis, “**Towards development of a multiphase simulation model using Lattice Boltzmann Method (LBM)**”, Mech. depart. Toledo university,
- [137] Jain P. K., (2010), PhD. thesis, “**Simulation o two-phase dynamics using lattice Boltzmann method (LBM)**”, Nucl. Engineering depart. Illinois university,
- [138] Nabovati A., (2003), PhD. thesis, “**Pore level simulation of single and two phase flow in porous media using lattice Boltzmann method**”, Mech. Depart. Sharif university of Technology,
- [139] A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev and D. I. Karpov, (2009) “On equations of state in a lattice Boltzmann method” **Computers & Mathematics with Applications**, **58**, pp 965-974.
- [140] B. Han, J. Yu and H. Meng, (2012) “Lattice Boltzmann simulations of liquid droplets evelopment and interaction in a gas channel of a proton exchange membrane fuel cell” **J. Power Sources**, **202**, pp 175– 183.
- [141] E. Esmaili, A. Moosavi and A. Mazloomi, (2012) “The dynamics of wettability driven droplets in smooth and corrugated microchannels” **journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment**, **P10005**, doi:10.1088/1742-5468/2012/10/P10005.
- [142] M. Swift, S. Orlandini, W. Osborn and J. Yeomans, (1996) “Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary-fluid systems” **Phys. Rev. E.**, **54**, pp 5041-5052.
- [143] Zhang R., (2000), PhD. thesis, “**Lattice Boltzmann Approach for Immiscible Multiphase Flow**”, Mech. Depart. u Delaware niversity,
- [144] Q. Kang, D. Zhang and S. Chen, (2004) “Immiscible displacement in a channel: simulations of fingering in two dimensions” **Adv Water Resour**, **27**, pp 13–22.
- [145] B. Dong, Y. Y. Yan, W. Li and Y. Song, (2010) “Lattice Boltzmann simulation of viscous fingering phenomenon of immiscible fluids displacement in a channel” **Computers & Fluids**, **39**, pp 768–779.

- [146] Q. Kang, D. Zhang and S. Chen, (2002) “Displacement of a two-dimensional immiscible droplet in a channel” **Phys. Fluids**, **14**, **9**, pp 3203-3214.
- [147] J. Chin, E. S. Boek and P. V. Coveney, (2002) “Lattice Boltzmann simulation of the flow of binary immiscible fluids with different viscosities using the Shan–Chen microscopic interaction model” **Phil. Trans. R. Soc. Lond. A**, **360**, pp 547–558.
- [148] S. Hou, X. Shan, Q. Zou, G. D. Doolen, and W. E. Soll, (1997) “Evaluation of Two Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows” **J. Comput. Phys.**, **138**, pp 695–713.
- [149] H. Huang, D. T. Thorne, M. G. Schaap and M. C. Sukop, (2007) “Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models” **Phys. Rev. E.**, **76**, 066701.
- [150] **Rannou G., (2008), MS. thesis., “Lattice Boltzmann method and immiscible two phase flow”, Mech. depart. Georgia Institute of Technology,**
- [151] H. Huang and X. Y. Lu, (2009) “Relative permeabilities and coupling effects in steady-state gas-liquid flow in porous media: A lattice Boltzmann study” **Phys Fluids**, **21**, 092104.
- [152] Y. Shi and G. H. Tang, (2014) “Simulation of Newtonian and non-Newtonian rheology behavior of viscous fingering in channels by the lattice Boltzmann method” **Computers & Mathematics with Applications**, **68**, pp 1279–1291.
- [153] G. Thömes, J. Becker, M. Junk, A. K. Vaikuntam, D. Kehrwald, A. Klar, K. Steiner and A. Wiegmann, (2009) “A lattice Boltzmann Method for immiscible multiphase flow simulations using the Level” **J. Comput. Phys.**, **228**, **4**, pp 1139-1156.
- [154] H. J. S. Hele-Shaw, (1898) “On the motion of a viscous fluid between two parallel plates” **Nature**, **58**, pp 34-36.
- [155] P. G. Saffman and S. G. Taylor, (1958) “The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid” **Proc. Roy. Soc. A**, **245**, pp 312-329.
- [156] **Chen W., (2011), MC. Thesis, “Lattice Boltzmann simulation of immiscible two phase flow at the pore scale”, Energy Res. Engineering depart. Stanford university,**
- [157] Q. Zou and X. He, (1997) “On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model” **Phys Fluids**, **9**, pp 1591–8.
- [158] D. Halpern and D. P. Gaver, (1994) “Boundary element analysis of the time-dependent motion of a semi-infinite bubble in a channel” **J. Comput. Phys.**, **115**, pp 366–375.
- [159] B. Dong, Y. Y. Yan, W. Z. Li and Y. C. Song, (2010) “Simulation of the Influence of Surface Wettability on Viscous Fingering Phenomenon in Porous Media” **J. BIONIC. ENG**, **7**, pp 267–275.
- [160] T. Koido, T. Furusawa and K. Moriyama, (2008) “An approach to modeling two-phase transport in the gas diffusion layer of a proton exchange membrane fuel cell” **J. Power Sources**, **175**, pp 127–136.
- [161] H. Huang., J. J Huang and X. Y. Lu, (2014) “Study of immiscible displacements in porous media using a color-gradient-based multiphase lattice Boltzmann

- method” **Computers & Fluids**, **93**, pp 164–172.
- [162] Dong B., Yan Y., and Li W., (2009) “Numerical Simulation of Viscous Fingering Phenomenon in Immiscible Displacement of Two Fluids in Porous Media Using Lattice Boltzmann Method” 2nd Micro and Nano Flows Conference West London, UK
- [163] H. Li, Y. Tang, Z. Wang, Z. Shi, S. Wu, D. Song, J. Zhang, K. Fatih, J. Zhang, H. Wang, Z. Liu, R. Abouatallah and A. Mazza, (2008) “A review of water flooding issues in the proton exchange membrane fuel cell” **J. Power Sources**, **178**, pp 103-117.
- [164] R. Lenormand, (1988) “Numerical Models and Experiments on Immiscible Displacements in Porous Media” **J Fluid Mech.**, **189**, pp 165–118.
- [165] M. M. Daino and S. G. Kandlikar, (2012) “3D phase-differentiated GDL microstructure generation with binder and PTFE distributions” **Int. J. Hydrog. Energy**, **37**, pp 5180–5189.
- [166] L. Hao and P. Cheng, (2009) “Lattice Boltzmann simulations of anisotropic permeabilities in carbon paper gas diffusion layers” **J. Power Sources**, **186**, pp 104–114.
- [167] G. R. Molaeimanesh and M. H. Akbari, (2014) “A three-dimensional pore-scale model of the cathode electrode in polymer-electrolyte membrane fuel cell by lattice Boltzmann method” **J. Power Sources**, **258**, pp 89-97.
- [168] D. H. Jeon and H. Kim, (2015) “Effect of compression on water transport in gas diffusion layer of polymer electrolyte membrane fuel cell using lattice Boltzmann method” **J. Power Sources**, **294**, pp 393-405.
- [169] Schladitz K. Peters S. Reinel-Bitzer D. Wiegmann A. and Ohser J. (2006) “Design of acoustic trim based on geometric modeling and flow simulation for non-woven” **Comput. Mater. Sci.**, **38**, pp 56–66.
- [170] I. V. Zenyuk, D. Y. Parkinson, G. Hwang and A. Z. Weber, (2015) “Probing water distribution in compressed fuel-cell gas-diffusion layers using X-ray computed tomography” **Electrochem. Commun.**, **53**, pp 24–28.
- [171] M. V. Williams, E. Begg, L. Bonville, H. R. Kunz and J. M. Fenton, (2004) “Characterization of gas diffusion layers for PEMFC” **J. Electrochem. Soc**, **151**, pp 1173–1180.
- [172] J. Itonen, M. Mikkola and G. Lindbergh, (2004) “Flooding of gas diffusion backing in PEFCs: physical and electrochemical characterization” **J. Electrochem. Soc**, **151**, pp 1152–1161.
- [173] R. Lenormand, (1990) “Liquids in porous media” **J. Phys.**, **2**, pp SA79–SA88.
- [174] K. N. Kim, J. H. Kang, S. G. Lee, J. H. Nam and C. J. Kim, (2015) “Lattice Boltzmann Simulation of Liquid Water Transport in Microporous and Gas Diffusion Layers of Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells” **J. Power Sources**, **278**, pp 703-717.
- [175] J. Park and X. Li, (2008) “Multi-phase micro-scale flow simulation in the electrodes of a PEM fuel cell by lattice Boltzmann method” **J. Power Sources**, **178**, pp 248–257.
- [176] Gao Y., (2012), **PhD. Thesis**, “Simulate fluid transport in gas diffusion layers of PEM Fuel Cells using lattice Boltzmann method and X-ray

computed tomography”, Liverpool university,

- [177] G. R. Molaeimanesh and M. H. Akbari, (2014) “Impact of PTFE distribution on the removal of liquid water from a PEMFC electrode by lattice Boltzmann method” **Int. J. Hydrog. Energy**, **39**, pp **8401-8409**.
- [178] K. J. Lee, J. H. Kang and J. H. Nam, (2014) “Liquid water distribution in hydrophobic gas diffusion layers with interconnect rib geometry: An invasion-percolation pore network analysis” **Int. J. Hydrog. Energy**, **39**, pp **6646-6656**.
- [179] J. H. Nam, K. J Lee, G. S Hwang, C. J Kim and M. Kaviany, (2009) “Microporous layer for water morphology control in PEMFC” **Int. J. Heat Mass Transfer**, **52**, pp **2779–2791**.
- [180] Zhang J. (2008), “**PEM Fuel Cell Electro catalysts and Catalyst Layers: Fundamentals and Applications**”, Springer. 1137, ISBN: 978-1-84800-936-3, pp.**329**.
- [181] M. Espinoza, B. Sunden, M. Andersson and J. Yuan, (2015) “Analysis of Porosity and Tortuosity in a 2D Selected Region of Solid Oxide Fuel Cell Cathode Using the Lattice Boltzmann Method” **ECS Trans.**, **65**, **1**, pp **59-73**.
- [182] Dullien F. A. L. (1992), “**Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure**”, Academic Press, San Diego, CA, ISBN: 978-0-12-223651-8, pp.**574**.
- [183] T. Ous and C. Arcoumanis, (2009) “The formation of water droplets in an air-breathing PEMFC” **Int. J. Hydrog. Energy**, **34**, pp **3476-87**.
- [184] K.C. Kumbur, K.V. Sharp and M. M. Mench, (2006) “Liquid droplet behaviour and instability in a polymer electrolyte fuel cell flow channel” **J. Power Sources**, **161**, pp **333-45**.
- [185] A. Su, F.B. Weng, C.Y. Hsu and Y.M. Chen, (2006) “Studies on flooding in PEM fuel cell cathode channels” **Int. J. Hydrog Energy**, **31**, pp **1031-9**.
- [186] A. Bazylak, D. Sinton and N. Djilali, (2008) “Dynamic water transport and droplet emergence in PEMFC gas diffusion layers” **J. Power Sources**, **176**, pp **240–246**.

Abstract

Fuel cells are devices in which chemical energy of fuel directly is converted into electrical energy without combustion. These devices produce less pollution or greenhouse. It is expected that fuel cells have important role in increasing fuel efficiency and reducing dependence on conventional fossil fuels. Fuel cells and electrochemical reactions in them, especially fuel hydrogen, is one of the possible solutions that can improve energy efficiency in the long time and reduce greenhouse gases. Also the significant environmental benefits of them are expected. They are very quiet work that is a very important feature for the use of them in vehicle. In this study proton exchange membrane fuel cell is investigated. This type of fuel cell works at low temperatures that causes start quickly. Also the thickness of it is low therefore it can be compact make. This is consists of three parts namely anode, cathode and electrolyte. The cathode is divided into three subdomains: gas channel (GC), the gas diffusion layer (GDL) and the catalyst. Gas diffusion layer is a porous medium that composed of a series of carbon fibers whit random positions. In this thesis, pore scale modeling two phase transport in porous gas diffusion layer of a proton exchange membrane fuel cell is investigated i.e., modeling structure of porous medium. In this study, Lattice Boltzmann Method (LBM) is used to examine two phase flow in a gas diffusion layer. Utilizing of mixed wettability i.e., containing both hydrophilic and hydrophobic pores is the goal of this thesis that the suitable case is introduced. This case is suitable place of hydrophilic fibers, thickness of them and contact angle of hydrophobic fibers. The hydrophilic fibers by considering their place and thickness can improve or reduce the efficiency of fuel cell.

The results show that if hydrophilic fibers are placed near gas channel, the efficiency of fuel cell will be better. For example, if these fibers with thickness 50 micrometer are placed in GDL-GC interface (suitable case), the time required for liquid water to reach the GDL-GC interface and liquid water saturation are reduced about 17% and 19% than purely hydrophobic GDL.

Key words: Fuel cells, Gas diffusion layer, Lattice Boltzmann method, mixed wettability.



Shahrood University of Technology

Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering

PhD Dissertation in Energy Conversion Engineering

**Numerical Investigation on Two-Phase Flow in the Gas Diffusion Layer of
a Polymer Electrolyte Fuel Cell**

By: Esmail Shakeri Nejad

Supervisor:

Dr Mohammad Hasan Kayhani

Adviser:

Dr Mohsen Nazari

January 96