

# H<sub>2</sub>/空气质子交换膜燃料电池气体扩散层表面水滴行为的VOF模拟研究\*

陈 旺<sup>1,2,3</sup>, 蒋方明<sup>1,2,3†</sup>

(1. 中国科学院广州能源研究所, 广州 510640; 2. 中国科学院可再生能源重点实验室, 广州 510640;  
3. 广东省新能源和可再生能源研究开发与应用重点实验室, 广州 510640)

**摘要:** 在研发和设计 H<sub>2</sub>/空气质子交换膜燃料电池时, 如何促进扩散介质及气流通道内液态水的传输是需要考虑的主要问题之一。本文运用 FLUENT 软件流体体积 (VOF) 模块模拟了燃料电池气体扩散层表面液滴的形成、脱落及输运行为。液滴受气体剪切力、粘滞力和表面张力的共同影响, 对不同的壁面浸润角和不同的气体剪切力, 呈现出复杂的液滴动力学行为。考察了通道气体流速和扩散层表面浸润力对液滴行为的影响。结果表明, 增大扩散层表面浸润角或入口气流速度均可以促进扩散层表面液滴的跃离, 前者对液滴跃离的促进作用更大; 扩散层表面的凹坑可以使液滴的跃离提前。此外, 还发现阳极气流通道内液滴一旦形成, 将更可能附着在扩散层表面而不易被气流带走。

**关键词:** 质子交换膜燃料电池; 微通道; 气液两相流; VOF

中图分类号: TK121; TM911

文献标志码: A

doi: 10.3969/j.issn.2095-560X.2017.06.004

## Dynamic Behaviors of Water Droplets on H<sub>2</sub>/Air PEMFC Gas Diffusion Layer Surface: VOF Simulations

CHEN Wang<sup>1,2,3</sup>, JIANG Fang-ming<sup>1,2,3</sup>

(1. Guangzhou Institute of Energy Conversion, Chinese Academy of Sciences, Guangzhou 510640, China;

2. CAS Key Laboratory of Renewable Energy, Guangzhou 510640, China;

3. Guangdong Provincial Key Laboratory of New and Renewable Energy Research and Development, Guangzhou 510640, China)

**Abstract:** How to enhance liquid water transport or removal in gas diffusion layers and gas flow channels is an important problem needs to be carefully considered in the research and design of advanced H<sub>2</sub>/Air PEMFC (proton exchange membrane fuel cell). In the present work, the FLUENT volume of fluid (VOF) module is employed to simulate and study the dynamic behavior of liquid water droplet formation, detachment and transportation on or from the surface of gas diffusion layer. Water droplets show complex dynamic behavior, which is a result of the combined effect of shearing forces, viscous forces and surface tension. Water droplet detaches from the surface of gas diffusion layer more easily if the contact angle is larger or the gas flow velocity is higher. The effect of contact angle on water droplet dynamic behavior is greater than the gas velocity. A downstream notch on the surface of gas diffusion layer can facilitate the detachment of water droplet. In addition, water droplet dynamic behavior on the anode side is studied as well. It is found that once water droplet forms on the surface of gas diffusion layer, it more possibly sticks on the surface and is hard to be blown away by the H<sub>2</sub> flow.

**Key words:** proton exchange membrane fuel cell; micro channel; gas-liquid two-phase flow; VOF

## 0 前 言

液态水有可能在 H<sub>2</sub>/空气质子交换膜燃料电池 (proton exchange membrane fuel cell, PEMFC) 催化

层 (catalyst layer, CL)、气体扩散层 (gas diffusion layer, GDL, 包括微孔层) 和气体流道 (gas flow channel, GFC) 产生或出现。CL 内液态水可能覆盖活性反应点, 气体扩散层内的液态水可能会堵塞微

\* 收稿日期: 2017-08-24

修订日期: 2017-10-07

基金项目: 广东省自然科学基金重大基础培育项目 (2015A030308019); 中国科学院“百人计划”项目; 广州市科技计划项目 (2014J4100217)

† 通信作者: 蒋方明, E-mail: jiangfm@ms.giec.ac.cn

孔通道,阻碍反应物传输到 CL,两者均会造成燃料电池性能下降甚至停止运行,通常谓之 PEMFC “水淹”。当大量液态水滞留在 GFC 内堵塞气体通道时也会造成 PEMFC “水淹”的发生。PEMFC 气体流道的“水淹”不仅会造成燃料电池性能下降、气流阻增大而使得寄生泵功增加,同时可能会造成燃料电池催化层出现燃料饥饿及后续碳腐蚀、加速膜电极组合的老化,从而给燃料电池的寿命带来灾难性影响。另外,对于 PEMFC 堆,GFC “水淹”会造成气流(反应物)在各个单电池间的不均匀分布,从而进一步加重“水淹”的负面效应。研究 GFC “水淹”机理对 PEMFC 水管理极为重要。

GFC 内液态水可能是由于水蒸汽凝结产生。其可能会在气流通道内、集流板(bi-polar plate, BP)壁面、GDL 表面凝结生成液态水滴<sup>[1-3]</sup>,主要原因是水蒸气在该处分压超过该温度条件下的饱和蒸汽压力。另外 GDL 内液态水也会在毛细力等作用下突破 GDL/GFC 界面进入气流通道<sup>[4]</sup>。针对液态水在 GFC 积累可能会导致 GFC “水淹”的情况,研究者们从多方面用不同方法进行了分析研究。例如可视化手段研究流道内液滴形成与迁移<sup>[5-8]</sup>,可以探究液滴尺寸与关键参数诸如温度、气流速度、湿度,流道长度之间联系,这些对 PEMFC 流道设计和优化具有重要意义。由于阴极相对更容易产生液态水,因此较多的研究着眼于阴极。事实上,阳极 GFC 液态水积累同样会形成水膜和柱塞流<sup>[9-10]</sup>,也可能造成“水淹”情况。此外 GFC 形态结构、材料特性和运行工况对电池性能影响也是研究热门<sup>[11-13]</sup>。

VOF 通过计算网格单元流体与网格体积比来追踪自由界面上质点的运动,在研究相分界面明显的流动中有优势,其在 PEMFC 的应用比较广泛<sup>[14-18]</sup>,THEODORAKAKOS 等<sup>[19]</sup>较早通过 VOF 模型研究单液滴在流道内 GDL 表面不同液滴温度、不同重力大小与方向条件下的受力变形及脱离过程,并且追踪润湿角与气体流速的关系以及液滴脱离速度与直径的关系。研究者们利用该方法建立 GFC 内两相流模型,用以研究 GFC 结构形状、材料特性对电池性能的影响。MANCUSI 等<sup>[20]</sup>用 VOF 方法模拟研究了在锥形截面的流道内的气液两相流。结果显示,由于增加了下游的气流流速,锥形截面流道更有利于液态水排出;与截面不变的流道相比,在锥形截面

流道中,液态水更多以膜形态流出,而在截面不变流道内则以比较明显的柱状流形态流出。另外,还发现 GDL 疏水性降低时,尽管不是很明显的锥形截面流道内也会出现明显的膜状流液态水。SONG 等<sup>[21]</sup>建立了一个三维蛇形流道,用 VOF 方法模拟了液滴在通道内的动力学行为,对比研究了蛇形流道内的亲水与厌水壁面对液态水滴运动过程的影响。对于亲水性壁面,液态水会再顶部边上积累,而在 GDL 表面覆盖率较小,但会在流道拐角处附着,对于厌水性壁面,液态水在拐角处会形成一个凸面,相对亲水的情况液态水更容易排出。在混合润湿的流道中,液态水不仅在 GDL 表面覆盖率较低,附着在拐角处的液态水含量也相对降低了。另外一些研究者关注了 GFC 形状对排水的影响,并采用设计不同的 GFC 形状以增强排水并提高电池的性能。LORENZINI-GUTIERREZ 等<sup>[22]</sup>采用 VOF 方法,通过对比降压、GDL 表面覆盖率以及液滴在流道内的停留时间来研究了 GFC 壁面与 GDL 表面润湿特性、流道截面形状、空气流速对气液两相流的影响。研究发现,流道顶部的膜状流有利于氧气的传输与排水。液态水滴在 GDL 表面的动力学行为直接影响到 GFC 内液态水流动形态(如珠状流、膜状流以及柱塞流等),进而影响到排水的难易。对影响液滴行为的工况、材料属性以及流道结构形态进行研究对提高水管理具有重要意义。

本文通过 FLUENT®软件自带的 VOF 模块模拟水滴在 PEMFC 微通道内流动过程,对影响 GFC 内液态水滴的脱离、跃离等动力学行为的 GDL 表面特性、结构形态以及气流进行了研究,为流道以及 GDL 设计提供参考。

## 1 数值模型

### 1.1 数学模型

在 VOF 模型中,液滴的尺寸是求解的关键,而液滴的尺寸与扩散层的表面性质、气体流动特性等有关。本文通过求解液滴脱落直径,将扩散层表面性质作为影响因素耦合进了两相流方程。采用单方程模型(两相的控制方程由同一组方程来实现)连续性方程如下:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

其中,  $\rho$  为密度,  $t$  是时间,  $\vec{v}$  为速度。各相的物性参数可以不同, 方程中的物性参数由体积分数  $\alpha$  控制: 密度  $\rho = (1 - \alpha_v)\rho_l + \alpha_v\rho_v$ , 动力粘度  $\mu = (1 - \alpha_v)\mu_l + \alpha_v\mu_v$ , 其中  $\alpha_v$  是气相的体积分数, 下标  $l$  代表液相, 下标  $v$  代表气相, 在液相中为 0, 在气相中为 1, 在汽液界面处其取值在 0~1 之间。

气相的体积分数应该满足气相的连续性方程, 有

$$\frac{\partial \alpha_v}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_v \vec{v}) = 0 \quad (2)$$

相应的液相体积分数方程为

$$\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \vec{v}) = 0 \quad (3)$$

容易看出式 (2) 和式 (3) 隐含满足方程 (1),  $\alpha_l = 1 - \alpha_v$ 。

动量守恒方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \left[ \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) \right] + \rho \vec{g} + F_{vol} \quad (4)$$

其中,  $p$  为压力,  $\mu$  为粘度,  $\vec{g}$  为重力加速度,  $F_{vol}$  为体积力。

在 FLUENT® 中, 表面张力采用连续表面力 (continuum surface force, CSF) 模型计算, 根据散度定理, 最终可以写成体积力  $F_{vol} = 2\sigma \frac{\rho k \nabla \alpha}{\rho_l + \rho_v}$ , 其中

界面曲率  $k = \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \left( \frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right)$ ,  $\vec{n}$  为界面外法向单位矢量。

综上, VOF 模型的控制方程如下:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \alpha \vec{v}) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \left[ \mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) \right] + \rho \vec{g} + F_{vol} \end{cases} \quad (5)$$

### 1.2 计算域与网格

燃料电池应用比较普遍的气流通道横截面近似为矩形, 底面为疏水性的 GDL 表面, 两侧面与顶部

为亲水性的集流板内壁面。反应气体通过 GDL 表面进入催化层, 而液态水会在毛细、压差或者粘性作用下在 GDL 表面突破形成液态水滴, 水滴在流道内被气流带走。对于电池堆而言, 流道沿气流流动方向设计有蛇形通道、平行流道、螺旋流道和网格流道。流道设计的目的主要是提高传质和水管理性能, 提高反应物分布均匀性, 提高运行效率、比功率以及稳定性。本文主要研究液滴在 GDL 表面的运动行为, 为了简化问题, 计算区域包含长度为 0.004 m, 高度为 0.001 m 的二维微通道, 一个在 GDL 表面长度为 0.000 05 m, 高度为 0.000 1 m 的液相注水孔(用于模拟液态水从 GDL 向流道内排出并积累的过程)。计算需要将计算区域(小段流道)离散化, 网格划分采用四边形网格单元, 网格数为 160 × 40, 其中注入孔网格数为 10 × 10。计算区域具体网格划分与 GFC 各部分对应描述如图 1。网格独立性测试能够检验模拟结果精确性, 相比图 1 所示网格系统, 当采用更精细化网格系统(采用 1/2 现有网格大小尺寸), 通过理查德森(Richardson)外推方法对比两套不同网格模拟计算时流道出口平均速度发现, 以 Richardson 外推得到平均速度精确解与现有网格尺度下模拟结果相差小于 3%, 验证了模拟结果的可靠性并具有较高的精度。

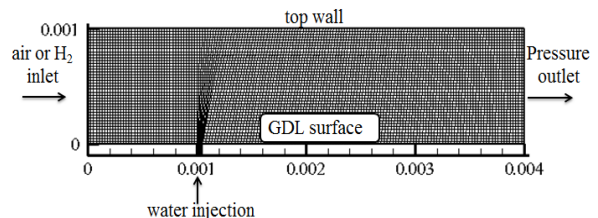


图 1 计算区域及网格

Fig. 1 The computational domain and mesh

### 1.3 初始及边界条件

整个计算过程是瞬态过程, 初始时刻计算区域内没有水, 随着空气(或氢气)吹入与水滴注入观察水滴形成、脱离与跃离的过程。区域(见图 1)左侧面为空气或氢气速度入口边界, 假设电池运行工况以及确定材料的物性如下: 电池反应面积为 10 cm<sup>2</sup>, GDL 孔隙率为 0.7, 流道截面积为 1 mm × 1 mm。电池运行工况为电流密度  $j = 2$  A/cm<sup>2</sup>、空气计量系数比为 2/1.5 ( $c/a$ )。根据工况估算空气与氢气流速分别为 10 m/s、3.5 m/s, 此时电池一般处于电流密

度较大的运行状态。入口气流速度为 10 m/s 或 15 m/s (对应空气计量系数为 2 或 3), GDL 表面离左端 0.001 m 处为液态水向上注入口, 入口气流流速为 0.1 m/s, 区域上表面为润湿角为 50° 亲水性固壁面, 下表面 (GDL 表面) 根据工况分别设置为 150° 或 120° 两种不同浸润角的疏水性固壁面, 区域右侧出口为定压力边界条件。计算时由于水滴表面张力相对重力要大得多 (在此研究中以直径为 0.000 5 m 液滴为例, 邦德数 (Bond number  $Bo = 0.033$ ), 故忽略重力的影响。

## 2 结果与讨论

影响燃料电池流道内部的两相流动情况的因素很多, 如结构参数、组件的物性参数 (BP、GDL 等的物理属性等)、及运行参数等, 并且不同的条件下液态水的传递方式也不尽相同, 本文的主要目的是研究 GDL 表面液滴脱离的影响因素。根据液滴在 GDL 表面受力情况, 由力平衡可以得出<sup>[23]</sup>:

$$F_{\Delta p} + F_{\tau,a} + F_s = 0 \quad (6)$$

其中  $F_{\Delta p}$  为液滴沿流场方向受到的压力, 在真实的流道内作用力大小为<sup>[23]</sup>

$$F_{\Delta p} = \frac{48H^2R^2\eta_a U_a}{b^3} \quad (7)$$

其中  $H$  为流道的高度,  $U_a$  为气流的平均速度,  $b$  为液滴顶部到流道顶端面之间的距离。  $\eta_a$  为气体的粘度,  $R$  为液滴的半径。  $F_{\tau,a}$  为气流从液滴周边表面流过, 由于气体粘性对液滴的剪切力, 其大小理论值为<sup>[24-25]</sup>

$$F_{\tau,a} = -\frac{24HR^2\eta_a U_a}{b^2} \quad (8)$$

另外,  $F_s$  为液滴表面张力, 在气流的作用下, 液态水滴在固壁处的接触角不再是固定值, 即不是静态接触角, 此时液滴背风面与迎风面的夹角随着液滴的变形而不断变化。将这两个夹角分别定义为  $\theta_a$  和  $\theta_r$ , 液滴受气流作用而变形时, 其表面张力计算有不同的方法, 对一个表面平整光滑的液滴来说, 比较简单的一种计算方法是假设迎风角与背风接触角的大小在液滴变形过程中保持不变, 此时液滴受到的表面张力大小为<sup>[25]</sup>

$$F_{s1} = \sigma w (\cos \theta_r - \cos \theta_a) \quad (9)$$

式中  $w = 2R \sin \theta_s$ ,  $\theta_s$  为液态水的静态接触角。事实上, 在液态水从 GDL 表面突破进入 GC 过程中, 液滴脱离难易程度受注水孔处表面张力的影响, 这部分表面张力的理论表达式为<sup>[25]</sup>

$$F_{s2} = -\pi \sigma d \quad (10)$$

其中,  $d$  是液态水注入孔的等效直径。分析可知  $F_s$  实际上包含两部分: 一部分是液滴在平直光滑面变形时所产生的; 另一部分则是由注水孔与液滴相连而产生的, 在本文中注水孔直径不改变, 所以这部分作用力为常数。

液滴在受到各部分作用下, 其变形、脱离的驱动力是否足以克服阻力是液滴能否脱离甚至跃离的力学判据, 而这也是各种因素如运行参数、组件物性、结构参数等对水滴在 GDL 表面运动形态特性影响的本质问题。以下将逐一讨论并分析这些因素的影响。

### 2.1 表面特性对液滴的影响

#### 2.1.1 润湿角对通道液滴的影响

润湿角可以反映液、固相和气相之间分子力作用的大小, 给定的固液气系统在给定的温度压力下存在唯一的润湿角。GDL 层为憎水性材料, 一般通过调节其成分中聚四氟乙烯 (PTFE) 或者全氟磺酸 (Nafion) 的含量来改变其亲、疏水性质。不同 GDL 材料浸润角不同, 如在文献[12]中实验得到在碳纸的浸润角为 128°, 而 PTFE 生料带润角为 115°。GDL 表面一般呈现出疏水性, 这是由于 GDL 通常被憎水处理过, 目的是为了通过毛细力控制液态水的流动, 保留内部孔相区域不完全被液态水占据, 给气体扩散提供通道。当液态水从 GDL 内部突破进入流道时, 其表面的疏水特性会影响到液态水的形态, 而液态水滴的不同形态会导致其受气流作用不同, 液态水从流道排水的难易直接影响电池的性能, 故而有必要研究 GDL 表面特性对液态水滴运动的影响。

本文对比研究了水滴在不同润湿角 GDL 表面的运动情况。空气从入口以相同流速流入, 图 2 描述了壁面浸润角为 150° 水滴在微孔处长大、脱离并跃离 GDL 表面的过程。图 3 与图 4 分别为液滴在浸润角为 150° 与 120° 情况下的时间演化图, 前者液滴在大约  $3.93 \times 10^{-2}$  s 时脱离 GDL 壁面, 后者液滴并

不能跃离而只在表面爬行。从式 9 可知, 当迎风背风接触角保持不变时, 静态接触角越大 (150°), 表面张力也越大 (曲率越大), 此时液滴在疏水的 GDL 表面收缩, 直接导致了液滴与表面接触面积减

小, GDL 表面表现出对液滴排斥增强, 因此液滴更容易被气流带走。由此可见增大 GDL 润湿角可以减小液滴在表面的接触面积, 并且有利于液滴排出, 降低流道水淹风险。

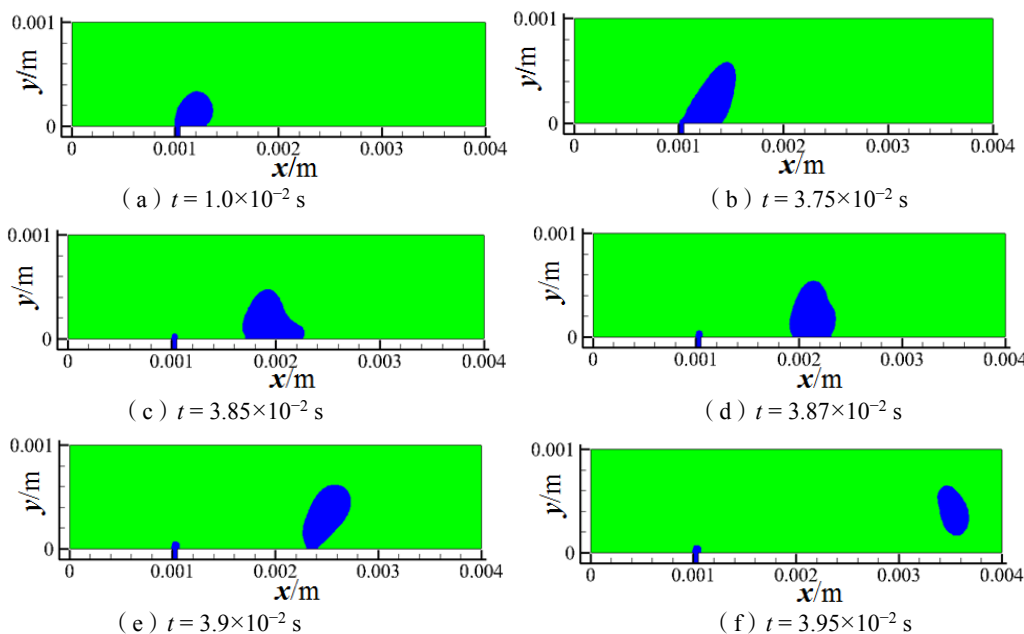


图 2 空气入口速度为 10 m/s、壁面浸润角为 150°时液滴形成及跃离过程

Fig. 2 The growth and detachment of water droplet with  $v_{air}=10$  m/s and  $\theta=150^\circ$

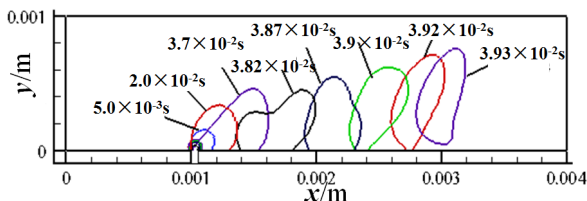


图 3 空气入口速度为 10 m/s、浸润角为 150°时液滴形成及跃离的时间演化成图

Fig. 3 Evolution (growth and detachment) of water droplet with  $v_{air}=10$  m/s and  $\theta=150^\circ$

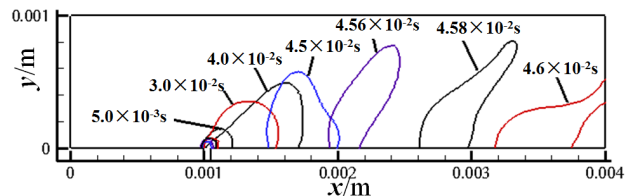


图 4 空气入口速度为 10 m/s、浸润角为 120°时液滴形成及爬行的时间演化成图

Fig. 4 Evolution (growth and crawling) of water droplet with  $v_{air}=10$  m/s and  $\theta=120^\circ$

### 2.1.2 GDL 表面形态对液滴的影响

GDL 的实际表面并不光滑平整, 但当液滴体积远大于 GDL 孔径时, 近似将其表面看成是平整, 以

往数值研究大多将气体扩散层表面简化为光滑面, 实际上也是出于上述考虑。GDL 厚度大约为 100 ~ 400  $\mu\text{m}$ , 而 GDL 孔径约为 20  $\mu\text{m}$ , 如果在 GDL 表面做一定的拓扑结构改造并不会破坏掉 GDL, 为了探索 GDL 表面形态对液态水滴动力学行为的影响, 本节借助数值模型研究 GDL 表面开槽时液态水的动力学行为。

VOF 方法本身也难以处理复杂固体边界, 为能够体现出 GDL 表面不平整的特性, 在出水孔隙下游较短距离处开一道形状规则的凹槽 (见图 5b) 用以研究 GDL 表面的形态对液滴跃离过程的影响。结果显示, 在入口气流流速 (10 m/s) 与 GDL 表面浸润角 (150°) 均相同的条件下, 下游存在疏水性凹槽相对无凹槽的情况, 可使液滴跃离时间略微提前, 而跃离前滑行的距离则明显缩短 (对比图 5a 与图 5b)。这表明凹槽对液滴脱离注水孔影响较小, 但当液滴脱离后, 即液滴摆脱注水孔表面张力的束缚后, 液滴只受到气流和 GDL 表面作用时, 凹槽大大减小了液滴与 GDL 表面的接触面积, 液滴与表面固壁面的作用力消失, 液滴更容易跃离 GDL 表面。凹槽的

出现未改变气流、GDL 表面疏水特性,但减少了液滴与 GDL 表面的接触面积,从这个角度看,是变相增大了润湿角,故而更有利于液态水的跃离。该结果表明,在 GDL 表面人为构建微型凹槽结构对通道排水有帮助。

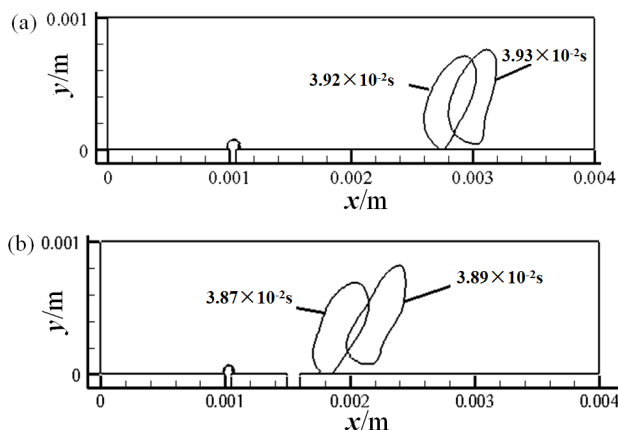


图 5 凹槽对液滴跃离前后时间及位置影响

Fig. 5 The effect of a notch on time instant and location for water droplet detaching from the GDL surface: (a) the channel without downstream notch, (b) the channel with a downstream notch

## 2.2 入口速度对通道液滴的影响

外部设备向 PEMFC 内供气提供燃料与氧化剂,通常气流的大小实际上取决于气体的化学计量数,除此之外,累积在通道内的液态水也需要借助气流

的吹扫排出,防止液态水覆盖 GDL 表面,影响气体的运输。在不影响反应物气体供应的前提下,通过调节气流大小,使液态水及时排出对电池性能有重要意义。本节通过对比研究,探讨不同气流速度对 GDL 表面突破产生的液态水滴动力学行为的影响。

将 GDL 表面浸润角度均设置  $150^\circ$ , 外部气流速度分别取  $10 \text{ m/s}$  (图 2)、 $15 \text{ m/s}$  (图 6), 结果发现流速增大后液态水滴脱离的直径减小、跃离时间缩短,从式 (7) 与式 (8) 可知,增大气流速度对液滴的压力以及粘性作用力均增大,另外液滴半径增大、其上表面与流道顶部的距离减小,这进一步增大了气流的压力与粘性力,故同等半径大小的液滴,气流速度越大,压力与粘性力均更大,液滴脱离注水孔以及跃离更容易。另外,当气流速度增大的同时润湿角减小至  $120^\circ$  (见图 7), 与图 4 相比,尽管两者液滴均未跃离 GDL 表面,但气流速度增大仍能使液滴更早脱离、爬行速度更快。由于注水孔表面张力的大小取决于注水孔半径大小,所以这部分表面张力是常量 [见式 (10)], 润湿角减小(液滴曲率变小)相同体积的液态水高度减小,此时这部分表面张力的变化不利于增加气流的压力与粘性力,导致液滴不能跃离,而只能在 GDL 表面爬行。事实上,直径越小的液滴越不容易接触并附着到亲水的侧壁面或与其他液滴团聚成更大

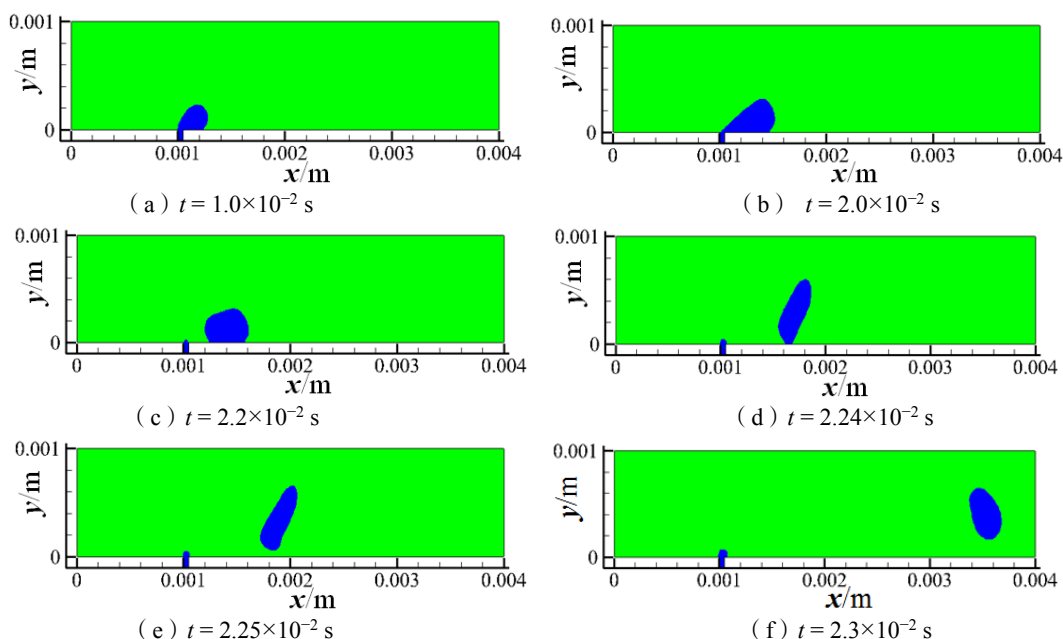


图 6 入口速度为  $15 \text{ m/s}$ 、浸润角为  $150^\circ$  时液滴形成及跃离过程

Fig. 6 The growth and detachment of water droplet with  $v_{\text{air}} = 15 \text{ m/s}$  and  $\theta = 150^\circ$

体积的水滴,甚至成为柱状或者膜状流,增加了水道水淹的几率,但过分加大气流速度会增大流道内阻力损失,增加辅助设备能耗,所以在实际应用时,需综合考虑各方面因素。针对此模拟结果,在某些工况下相应增大润湿角对液滴跃离的促进作用大于单纯增加流速。

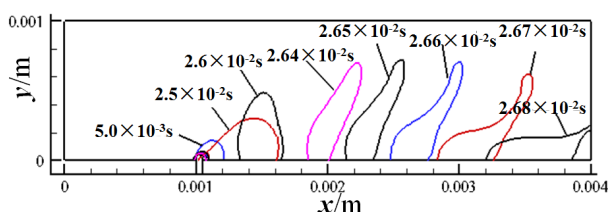


图7 入口速度为 15 m/s、浸润角为 120°时液滴形成及爬行时间演化合成图

Fig. 7 Evolution (growth and crawling) of water droplet with  $v_{air} = 15$  m/s and  $\theta = 120^\circ$

### 2.3 液气密度比对通道液滴的影响

燃料电池阳极主要是氢气的还原反应,交换膜内水与质子结合后在电渗拖曳作用下往阴极运动,阴极水在压差、浓度差作用下向阳极回流,如果阴极液态水积累严重,回流大大超过电渗拖曳作用时就可能导致阳极也出现较多的液态水,HEIDARY 等<sup>[13]</sup>采用可视化实验观察到阳极流道液态水覆盖率甚至超过阴极流道,因此研究阳极液态水滴的形成与运动也十分重要。图 8 显示了当入口气体由空气换作氢气,密度变得小得多,即使是气流流速达到 15 m/s (计量比达到 6.4),浸润角为 150°时,液滴仍无法克服表面张力从液滴孔隙入口脱离,更无法跃离 GDL 表面,而只是随着时间增长逐渐长大。一方面氢气粘度比空气粘度小得多,根据式(7)与式(8)可知,液滴受到的剪切力也小;另一方面氢气密度远远小于空气密度,因此相同流速下的氢气惯性力远小于吹入空气的情况。该结果表明,燃料电

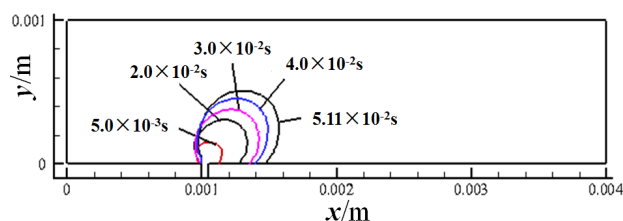


图8 氢气在入口速度为 15 m/s、浸润角为 150°时液滴的增长与不脱离

Fig. 8 Evolution (growth and no-detachment) of water droplet in anode H<sub>2</sub> flow with  $v_{H_2} = 15$  m/s and  $\theta = 150^\circ$

池阳极一旦出现液态水将更难以用吹气方式将其排出,当液态水积累过多,覆盖在 GDL 表面阻碍燃料(H<sub>2</sub>)进入 CL 层时,也会出现“水淹”现象。

## 3 结论

本文建立二维 CFD 模型,采用 VOF 方法分别对燃料电池阴、阳极流道内扩散层表面的液滴动力学行为进行了模拟计算,并对不同工况下的模拟结果进行详细的描述与讨论,结合数学理论模型对模拟结果作了相应的分析,得出以下结论:

(1) 在阴极,空气速度一定时,GDL 表面浸润角增大(疏水)有助于液滴的脱离,并能减小液滴脱离时的体积,同时液滴更容易跃离表面、以更快速度被空气带走,这是由于 GDL 表面的疏水性增加时,液滴的附着力减小。

(2) 在阴极,当 GDL 表面浸润角一定时,增大大气流速度,液滴脱离直径越小,液滴跃离 GDL 表面所需的时间和滑行距离缩短,这是由于空气流速增加使液滴受到更大的压力与剪切力。

(3) 液滴流经人为构建 GDL 表面的凹槽(厌水)时,缩短了液滴跃离的距离与时间,这是由于凹槽的出现减小了液滴与 GDL 表面的作用力。凹槽可以减少 GDL 表面水滴聚合,形成更大液滴乃至水膜的可能性。

(4) 在阳极,由于氢气的密度与粘度均远小于空气,施加在液滴上的剪切力与压力远小于阴极空气气流,因此在电池正常运行工况下,氢气吹扫很难对形成的液滴造成影响,在通常工况下,通过增大大气流速度来排水几乎是不可能的。

设置合理的气流速度、GDL 表面疏水性,以及设计 GDL 表面结构形态均对阴极排水有帮助;而在阳极则无法通过简单的增加气流速度来促进排水。

### 参考文献:

- [1] JIANG F M, WANG C Y. Numerical modeling of liquid water motion in a polymer electrolyte fuel cell[J]. International journal of hydrogen energy, 2014, 39(2): 942-950. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.10.113.
- [2] BEN AMARA M E A, BEN NASRALLAH S. Numerical simulation of droplet dynamics in a proton exchange membrane (PEMFC) fuel cell micro-channel[J]. International journal of hydrogen energy, 2015, 40(2): 1333-1342. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2014.09.077.
- [3] GARCÍA-SALABERRI P A, SÁNCHEZ D G, BOILLAT P, et al. Hydration and dehydration cycles in polymer electrolyte fuel cells operated with wet anode and dry cathode feed: a neutron imaging and modeling study[J].

- Journal of power sources, 2017, 359: 634-655. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2017.03.155.
- [4] CHEN W, JIANG F M. Impact of PTFE content and distribution on liquid-gas flow in PEMFC carbon paper gas distribution layer: 3D lattice Boltzmann simulations[J]. International journal of hydrogen energy, 2016, 41(20): 8550-8562. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.02.159.
- [5] OUS T, ARCOUMANIS C. The formation of water droplets in an air-breathing PEMFC[J]. International journal of hydrogen energy, 2009, 34(8): 3476-3487. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2009.02.037.
- [6] KIMBALL E, WHITAKER T, KEVREKIDIS Y G, et al. Drops, slugs, and flooding in polymer electrolyte membrane fuel cells[J]. AIChE journal, 2008, 54(5): 1313-1332. DOI: 10.1002/aic.11464.
- [7] CHEAH M J, KEVREKIDIS I G, BENZIGER J B. Water slug to drop and film transitions in gas-flow channels[J]. Langmuir, 2013, 29(48): 15122-15136. DOI: 10.1021/la403057k.
- [8] CHO S C, WANG Y, CHEN K S. Droplet dynamics in a polymer electrolyte fuel cell gas flow channel: forces, deformation, and detachment. I: theoretical and numerical analyses[J]. Journal of power sources, 2012, 206: 119-128. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2012.01.057.
- [9] SERGI J M, KANDLIKAR S G. Quantification and characterization of water coverage in PEMFC gas channels using simultaneous anode and cathode visualization and image processing[J]. International journal of hydrogen energy, 2011, 36(19): 12381-12392. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2011.06.092.
- [10] QIN C Z, HASSANIZADEH S M, RENSINK D. Numerical studies on liquid water flooding in gas channels used in polymer electrolyte fuel cells[J]. Chemical engineering science, 2012, 82: 223-231. DOI: 10.1016/j.ces.2012.07.049.
- [11] SELLMAN J T, SANTAMARIA A D. Ex-situ probing of PEFC liquid droplet dynamics in the presence of vibration[J]. International journal of hydrogen energy, 2017, 42(17): 12551-12558. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2017.02.140.
- [12] UTAKA Y, KORESAWA R. Performance enhancement of polymer electrolyte fuel cells by combining liquid removal mechanisms of a gas diffusion layer with wettability distribution and a gas channel with microgrooves[J]. Journal of power sources, 2016, 323: 37-43. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.05.036.
- [13] HEIDARY H, KERMANI M J, PRASAD A K, et al. Numerical modelling of in-line and staggered blockages in parallel flowfield channels of PEM fuel cells[J]. International journal of hydrogen energy, 2017, 42(4): 2265-2277. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.10.076.
- [14] FERREIRA R B, FALCÃO D S, OLIVEIRA V B, et al. Numerical simulations of two-phase flow in an anode gas channel of a proton exchange membrane fuel cell[J]. Energy, 2015, 82: 619-628. DOI: 10.1016/j.energy.2015.01.071.
- [15] GOLPAYGAN A, ASHGRIZ N. Multiphase flow model to study channel flow dynamics of PEM fuel cells: deformation and detachment of water droplets[J]. International journal of computational fluid dynamics, 2008, 22(1/2): 85-95. DOI: 10.1080/10618560701733707.
- [16] BAO N, ZHOU Y B, JIAO K, et al. Effect of gas diffusion layer deformation on liquid water transport in proton exchange membrane fuel cell[J]. Engineering applications of computational fluid mechanics, 2014, 8(1): 26-43. DOI: 10.1080/19942060.2014.11015495.
- [17] CARTON J G, LAWLOR V, OLABI A G, et al. Water droplet accumulation and motion in PEM (Proton Exchange Membrane) fuel cell mini-channels[J]. Energy, 2012, 39(1): 63-73. DOI: 10.1016/j.energy.2011.10.023.
- [18] PARK J W, JIAO K, LI X G. Numerical investigations on liquid water removal from the porous gas diffusion layer by reactant flow[J]. Applied energy, 2010, 87(7): 2180-2186. DOI: 10.1016/j.apenergy.2009.11.021.
- [19] THEODORAKAKOS A, OUS T, GAVAISES M, et al. Dynamics of water droplets detached from porous surfaces of relevance to PEM fuel cells[J]. Journal of colloid and interface science, 2006, 300(2): 673-687. DOI: 10.1016/j.jcis.2006.04.021.
- [20] MANCUSI E, FONTANA É, DE SOUZA A A U, et al. Numerical study of two-phase flow patterns in the gas channel of PEM fuel cells with tapered flow field design[J]. International journal of hydrogen energy, 2014, 39(5): 2261-2273. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.11.106.
- [21] SONG M, KIM H Y, KIM K. Effects of hydrophilic/hydrophobic properties of gas flow channels on liquid water transport in a serpentine polymer electrolyte membrane fuel cell[J]. International journal of hydrogen energy, 2014, 39(34): 19714-19721. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2014.09.168.
- [22] LORENZINI-GUTIERREZ D, KANDLIKAR S G, HERNANDEZ-GUERRERO A, et al. Residence time of water film and slug flow features in fuel cell gas channels and their effect on instantaneous area coverage ratio[J]. Journal of power sources, 2015, 279: 567-580. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2015.01.041.
- [23] CHEN L, HE Y L, TAO W Q. Effects of surface microstructures of gas diffusion layer on water droplet dynamic behaviors in a micro gas channel of proton exchange membrane fuel cells[J]. International journal of heat and mass transfer, 2013, 60: 252-262. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2012.11.024.
- [24] KUMBUR E C, SHARP K V, MENCH M M. Liquid droplet behavior and instability in a polymer electrolyte fuel cell flow channel[J]. Journal of power sources, 2006, 161(1): 333-345. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2006.04.093.
- [25] HAO L, CHENG P. Lattice Boltzmann simulations of liquid droplet dynamic behavior on a hydrophobic surface of a gas flow channel[J]. Journal of power sources, 2009, 190(2): 435-446. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2009.01.029.

### 作者简介:

陈 旺 (1987-), 男, 博士研究生, 主要从事燃料电池的数值模拟研究。

蒋方明 (1973-), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 中国科学院广州能源研究所先进能源系统研究室主任, 2002-2012 先后工作于德国的 IMM 公司、葡萄牙的阿维诺 (Aveiro) 大学、美国的宾州州立大学, 2011 年 4 月获中国科学院“百人计划”引进海外杰出人才择优支持, 主要从事电化学能量转化和存储、微尺度能量传递和转化、深层地热资源开发和利用、多尺度多物理数值模型及计算方法等研究。