

基于VOF模型的PEMFC蛇形流道气液两相流动模拟

储旭, 郭雪岩

上海理工大学能源与动力工程学院, 上海

收稿日期: 2022年3月15日; 录用日期: 2022年5月9日; 发布日期: 2022年5月16日

摘要

水管理是质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)中需要解决的关键问题之一, 本文建立了三维两相的数学模型, 利用VOF方法研究蛇形流道内液态水的输运。分析了挡板形状对流道内气液两相流的影响, 结果表明, 波浪形挡板更有利于液态水的输运, 相比于传统的蛇形通道, 液态水具有更快的传输速率; 还进一步分析了波浪形挡板通道内壁面接触角和液滴大小及数量对液态水输运的影响, 结果表明, 气体扩散层(GDL)壁面和通道底面接触角为 150° , 流道侧壁面接触角为 70° 时, 除水效果最佳, 可以使液滴脱离GDL, 防止液滴堵塞, 有利于反应物向GDL内扩散。

关键词

蛇形流道, 气液两相流, VOF模型, 水管理

Simulation of Gas-Liquid Two-Phase Flow in PEMFC Serpentine Channel Based on VOF Model

Xu Chu, Xueyan Guo

School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Mar. 15th, 2022; accepted: May 9th, 2022; published: May 16th, 2022

Abstract

Water management is one of the key issues to be solved in proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs), a three-dimensional two-phase mathematical model was established, and the VOF me-

thod was used to study the transport of liquid water in the serpentine channel. The influence of the baffle shape on the gas-liquid two-phase flow in the channel is analyzed, and the results show that the wave-shaped baffle is more conducive to the transmission of liquid water, and the liquid water has a faster transmission rate than the traditional serpentine channel; the influence of the contact angle of the inner wall of the wave-shaped baffle channel and the size and number of droplets on the transport of liquid water was further analyzed. The results show that when the contact angle between the wall surface of the gas diffusion layer (GDL) and the bottom surface of the channel is 150° , and the contact angle of the sidewall surface of the flow channel is 70° ; the water removal effect is the best, and it can make the droplets detach from the GDL, prevent the droplets from clogging the GDL, and facilitate the diffusion of the reactants into the GDL.

Keywords

Serpentine Flow Channel, Gas-Liquid Two-Phase Flow, VOF Model, Water Management

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

PEMFC 是氢气和氧气之间通过电化学反应产生电能的装置。其功率密度高、低温启动和几乎零排放等特点使 PEMFC 成为一种可行、清洁和高效的发电技术,被认为是汽车和备用电源中最有前途的零排放电源之一。但水管理仍是高性能 PEMFC 面临的严峻挑战,由于 PEMFC 的工作温度低于 100°C ,所以液态水是无法避免的,并且在高电流密度下,会产生更多的液态水,可能会堵塞 CL(催化层),增加反应物向催化层的传输阻力,造成浓度损失和高压降,从而导致燃料电池的性能变差[1] [2] [3] [4]。因此,流道内液态水的去除是提升燃料电池性能的关键。

然而,由于可视化技术的限制,目前的实验工作不能准确地再现运行中的 PEMFC 流道中的两相流动,很难获得液态水体积分数和 GDL(气体扩散层)水覆盖率等定量信息,所以许多研究者选择 VOF 模型来研究 PEMFC 流道内的两相流动特性,可以很好地捕捉相间分界面[5]。而且,Le 等[6]发现 VOF 方法的模拟结果与实验结果吻合较好,证实了方法的可靠性。

Hou 等[7]和 Ferreira 等[8]利用 VOF 方法对低温 PEMFC 的气液两相流进行了数值模拟,研究了阴、阳极通道内的除水过程,并进一步分析了壁面接触角对通道液态水去除的影响,结果表明疏水性壁面更有利于除水。Kang 等[9]采用具有多孔层的多相三维燃料电池阴极侧模型,对交叉型 PEMFC 流场中的液态水注入过程进行了研究,结果表明,在这种阴极流道设计中,液态水去除过程可分为三个阶段,并且阴极还会出现液态水雪崩现象。Peng 等[10]采用 VOF 模型跟踪动态气液界面,并对不同燃料电池运行条件下初始水相分布不同的五种情况进行了数值模拟。Song 等[11]对 PEMFC 蛇形流道内液滴动力学进行了数值研究,结果表明,与通道壁面均是亲水或疏水的两种情况相比,在蛇形流道的直流道部分由亲水性通道壁和在转折部分的疏水性壁组成的混合流道可以提高除水效果。陈旺和蒋方明[12]运用 FLUENT 软件 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,结果表明,增大扩散层表面接触角或入口气流速度均可以促进扩散层表面液滴的跃离。Jo 等[13]采用 VOF 方法模拟了液态水在通道转角处的输运特性,研究了 GDL 表面与其他通道壁接触角对通道内液态水输运的影响。Qin 等[14]采用 VOF 模型对通道中间有亲水板的流动通道的除水过程进行了数值研究,结果表明,流道内的液滴可以

被有效去除, 亲水板的表面接触角应大于底部通道表面, 但小于 GDL 表面, 这样有利于液态水的去除。

从上述的参考文献中可以看出, 研究者们对于流道内的气液两相流模拟主要都基于简单的直通道或者蛇形通道, 很少考虑挡板形状对液态水运输的影响, 本文将在蛇形流道中添加不同形状的挡板, 来研究流道内液态水的动态运动过程, 同时还分析了壁面接触角、液滴大小和数量等因素对除水过程的影响。

2. 数值模拟

2.1. 几何模型

图 1 所示的为本文计算使用的 3D 蛇形流道模型, 包括波浪形(图 1(a))、半圆形(图 1(b))、矩形(图 1(c))和没有挡板的常规流道(图 1(d))。蛇形流道的截面均为边长 1 mm 的正方形, 直流道部分长度为 14 mm, 其中上顶面为 GDL, 另外三个面则对应为双极板和通道之间的壁面。为了研究液态水在流道内的流动过程, 在 GDL 表面距离入口处 1.5 mm 的位置预设一滴直径为 0.4 mm 的水滴, 并且不考虑水的相变。

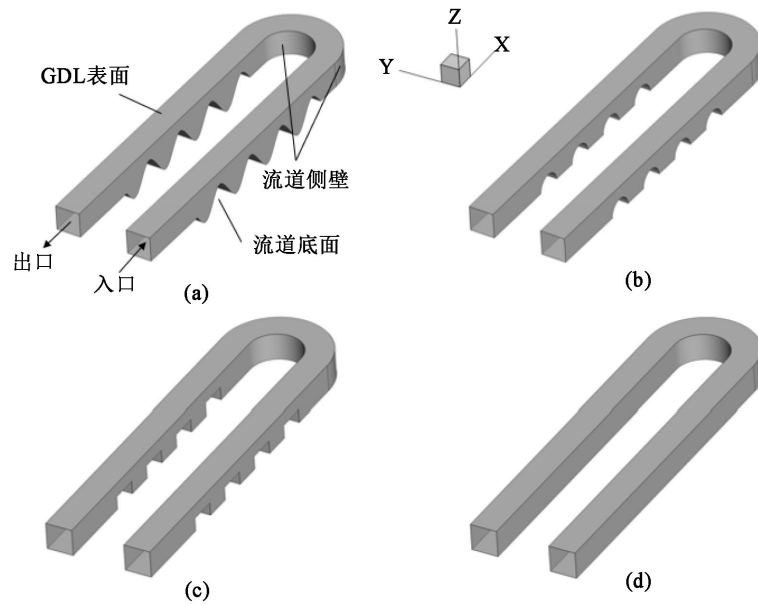


Figure 1. Model structure (a) Wave; (b) Semicircle; (c) Rectangle; (d) Conventional runner

图 1. 模型结构(a) 波浪形; (b) 半圆形; (c) 矩形; (d) 常规流道

2.2. 数学模型

2.2.1. 控制方程

本研究采用 VOF 方法计算气相和液相的体积分数, 并在整个区域内跟踪气相和液相的界面。VOF 方法的连续性方程和动量守恒方程如下:

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

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \cdot \vec{v}) = -\nabla P + \mu \nabla \cdot (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) + \rho \vec{g} + \vec{F}_s \quad (2)$$

式中, P 是压力, ρ 和 μ 分别是流体密度和粘度, \vec{v} 是速度向量, \vec{g} 是重力加速度, \vec{F}_s 为动量源项, 根据 CSF 模型[15], 表示如下:

$$F = 2\sigma k \frac{\rho \nabla \alpha_1}{\rho_1 + \rho_2} \tag{3}$$

式中, σ 为表面张力系数, k 为两相界面处的表面曲率, α_1 为空气的体积分数, ρ_1 和 ρ_2 分别为空气和水的密度, 表面曲率 k 可以通过下式计算:

$$k = \nabla \cdot \hat{n} = \nabla \cdot \frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} \tag{4}$$

式中, \hat{n} 为表面单位法向量, \vec{n} 为表面法向量, 定义为相体积分数的梯度。考虑到壁面粘附作用, 流道壁面单元网格内两相界面的单位法向量根据壁面静态接触角来确定, 所以壁面附近表面曲率可以表示为:

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos(\theta) + \hat{t}_w \sin(\theta) \tag{5}$$

$$k = \nabla \cdot \hat{n} = \nabla \cdot [\hat{n} = \hat{n}_w \cos(\theta) + \hat{t}_w \sin(\theta)] \tag{6}$$

式中, \hat{n}_w 为单位表面法向量, \hat{t}_w 为单位表面切向量, θ 为静态接触角。

2.2.2. 边界条件

流道进口采用速度进口边界条件, 进气速度为 $4 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, 流道出口为压力出口, 出口压力为 $101,325 \text{ Pa}$, 所有壁面均采用无滑移壁面边界条件。非定常控制方程的求解采用基于压力的求解器, 多相模拟采用基于显示格式的 VOF 方法, 空气是主要相, 液态水是次要相。采用 PISO 算法进行压力 - 速度耦合, 同时压力离散化采用 PRSTO 方案进行处理。计算的时间步长为 10^{-6} s , 在每一个时间步里, 收敛残差设为 10^{-3} 。

3. 结果与讨论

设计流道内液态水的去除一般从两个方面考虑, 一方面是液态水在通道内的传输速率, 水的传输速率越高, 通道内液态水的停留时间越短, 发生水淹的几率也就越小; 另一方面是 GDL 表面液态水覆盖率, 水附着在 GDL 表面, 会阻碍反应气体向 GDL 扩散, 降低催化层内反应物的浓度, 使得催化层上的反应位点不能充分利用, 影响燃料电池的性能。为了研究 PEMFC 蛇形流道两相流中的水行为, 分别详细讨论了流道挡板形状、壁面接触角和液滴大小及数量对流道内液态水运输的影响, 具体设置如表 1 所示。

Table 1. Simulation conditions of different cases

表 1. 不同案例的模拟条件

案例	挡板形状	接触角/ $^\circ$			液滴半径/mm	液滴数量
		GDL	流道底面	流道侧壁		
1	无挡板	120	70	70	0.4	1
2	矩形	120	70	70	0.4	1
3	半圆形	120	70	70	0.4	1
4	波浪形	120	70	70	0.4	1
5	波浪形	30	70	70	0.4	1
6	波浪形	70	70	70	0.4	1
7	波浪形	150	70	70	0.4	1
8	波浪形	150	150	30	0.4	1
9	波浪形	150	150	70	0.4	1
10	波浪形	150	150	150	0.4	1
11	波浪形	150	150	70	0.6	1
12	波浪形	150	150	70	0.4	3

3.1. 不同形状挡板对液态水运输的影响

案例 1~4 是研究了挡板形状对通道内液态水运输的影响, 从图 2 可以看出, 不添加挡板的常规通道内, 流场的整体速度偏小, 液滴的移动速度缓慢, 而在有挡板的通道内, 速度明显增大, 液滴移动相同的距离时, 有挡板的通道所需时间更短, 这样更有利于液态水的排除, 防止液态水在通道内聚积, 堵塞气体扩散层。这是因为添加挡板后, 减小了通道的截面积, 增大了气体流速, 较高的流速会对液滴产生更强的拖曳效果, 从而加快了液态水的去除。同时从图 3(b)中发现, 矩形挡板虽然可以加速液滴的传输速率, 但是其速度过快, 在惯性力的作用下, 液滴脱离了 GDL, 移动到了通道底部, 由于矩形挡板的自身结构缺陷, 造成液滴堵塞, 容易发生水淹, 降低燃料电池的输出性能, 所以矩形挡板不利于液态水的排除。

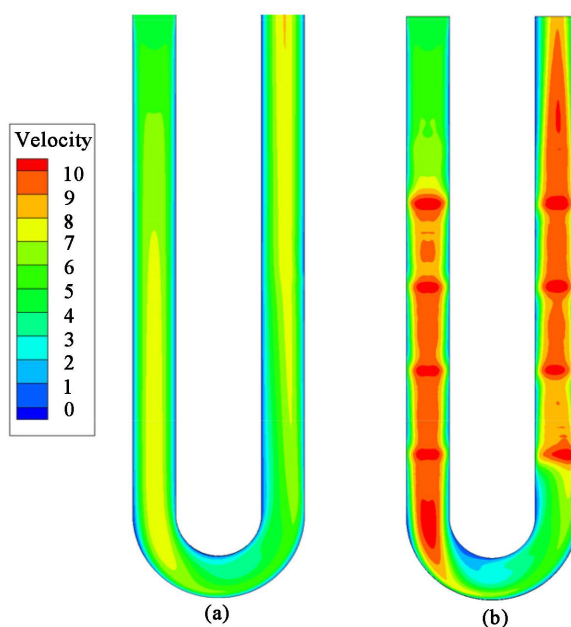


Figure 2. Velocity field in the flow channel (a) without baffle; (b) with baffle

图 2. 通道内的速度场(a) 无挡板; (b) 有挡板

图 4 显示的是案例 3 和 4 通道内压降的变化, 从图中可以看出, 两种工况具有相同的压降趋势, 在有挡板的地方压降增大, 并且第二排挡板处的压降小于第一排, 这是因为液滴在经过转角时, 由于惯性的作用, 加上侧壁面的接触角小于 GDL, 液滴吸附在壁面上继续向前运动, 液滴失去的原本的球形, 气体的流动阻力减小, 所以压降也随之降低。对比这两种形状的挡板可以发现, 波浪形的通道内产生的压降更小, 产生的泵送功率更少, 而且液滴在通道内的停留时间更短, 这可以避免通道内水淹的发生。这也与 Dehsara 和 Kermani [16]的研究结果保持一致, 他们研究了半圆形和波浪形挡板对 PEMFC 性能的影响, 结果表明, 波浪形通道的性能略好于半圆形通道, 因为波浪形顶部比半圆形的顶部更锐利, 在这种情况下, 反应物质可以渗透到反应位点内的更深端。

3.2. 壁面亲疏水性对液态水运输的影响

基于上一节的研究结果, 本节在波浪形挡板通道的基础上, 研究壁面材料的亲疏水性对通道内液态水运输的影响, 模拟工况选取了 30°、70°、120°和 150°的壁面接触角来代表不同程度的亲疏水性, 接触角

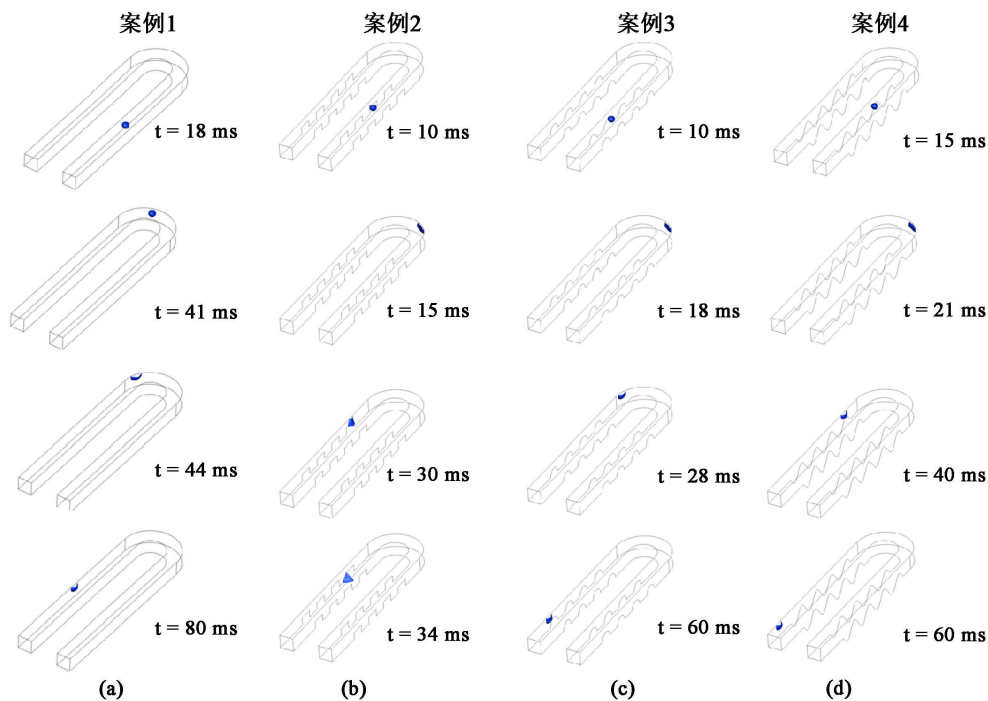


Figure 3. Liquid water removal process of baffles of different shapes
图 3. 不同形状挡板的液态水去除过程

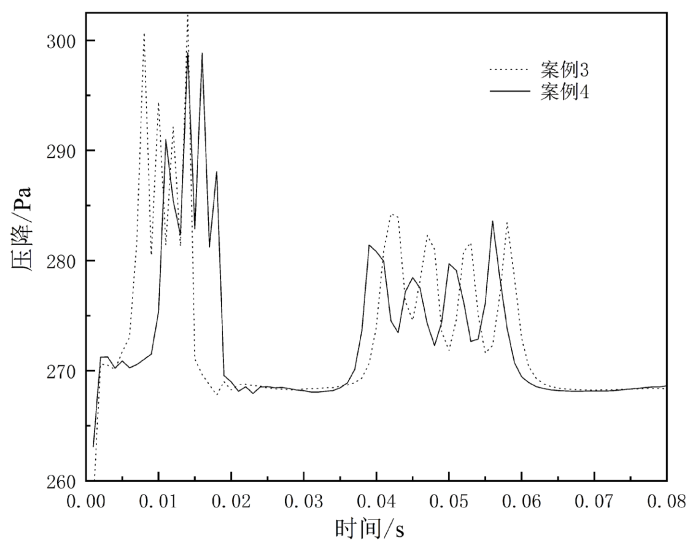


Figure 4. Pressure drop in the flow channel of baffles with different shapes
图 4. 不同形状挡板流道内的压降

越小代表壁面越亲水, 相反接触角越大则壁面越疏水, 全方位的研究 GDL 表面和流道侧壁面接触角对液态水运输的影响。

3.2.1. GDL 亲疏水性对液态水运输的影响

案例 5 是 GDL 接触角为 30° , 这属于非常亲水形的壁面。如图 5(a)所示, 整个液滴平铺在 GDL 表面, 随着液滴继续向前移动, 逐渐粉碎成一个个小液滴, 然后这些小液滴会成功排除, 但由于 GDL 亲水时,

壁面的粘滞作用很大, 液滴难以去除, GDL 表面会形成一层水膜, 反应气体难以进入 GDL, 到达催化层, 严重影响燃料电池的性能, 所以, 在设计燃料电池时, GDL 应避免亲水形壁面。

案例 6 是 GDL 接触角为 70° , 属于相对亲水形壁面, 相比于图 5(a), 当接触角为 70° 时, 壁面的粘滞作用并不会导致液滴整个平铺在 GDL 上, 但粘滞阻力依然很大, 使得液滴移动缓慢, 不利于流道内液态水的排除, 严重时可能会造成水淹。

案例 7 是 GDL 接触角为 150° , 是非常疏水的。从图 5(c)可以看出, 当液滴撞到转角壁面时, 整个液滴从 GDL 上脱离, 移动到流道侧壁上, 这是因为当 GDL 壁面接触角为 150° 时, 壁面毛细作用过小, 而受到气流的剪切力较大, 不能有效的阻止液滴脱离。然而液滴脱离 GDL 这种运动状态对于流道内液态水的排除过程是正面的影响, 因为液滴附着在 GDL 上会影响反应物向 GDL 扩散, 降低催化层内反应物的浓度, 影响燃料电池的性能, 所以 GDL 接触角选择 150° 更有利于排水。从图 5(c)中发现, 在液滴脱离 GDL 到达底面时, 发生了堆积, 这是因为底面的接触角太小, 粘滞作用大, 在后续的研究中为了避免堆积, 将底部的接触角设置为 150° , 如图 6(b)所示, 当底面变成疏水形后, 液滴可以顺利通过, 可以防止液态水在通道内堆积。

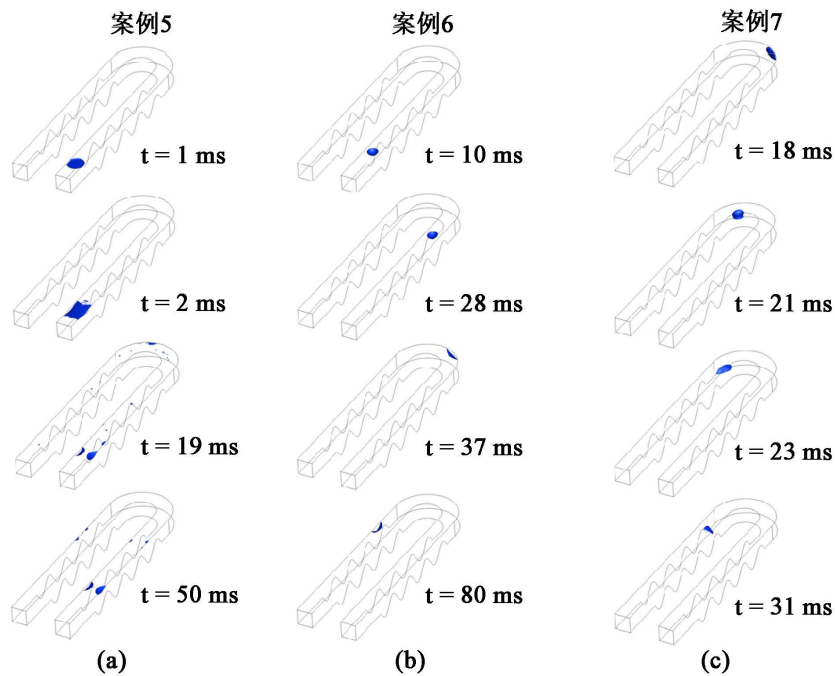


Figure 5. Liquid water removal process with different GDL wall surface contact angles
图 5. 不同 GDL 壁面接触角的液态水去除过程

3.2.2. 流道侧壁面接触角对液态水运输的影响

流道侧壁面连接着 GDL 和流道底面, 所以其亲疏水性影响流道内液态水的运输, 根据上一节的研究成果, 将 GDL 和流道底面的接触角设置为 150° , 分别研究侧壁面接触角为 30° 、 70° 和 150° 这三种情况, 即案例 8~10。

案例 8 是侧壁面接触角为 30° , 由于侧壁面接触角远小于顶面和底面, 所以液滴在转角接触到侧壁面时便立刻被吸附上, 而且不会移动到底面, 同时由于壁面的粘滞作用过大, 还有有破碎的小液滴滞留在了转角处, 尽管最后液滴也可以被排除通道, 但所需要的时间太长, 存在水淹的风险。

案例 9 是壁面接触角为 70° ，从图 6(b)中可以看出，液滴同样也会吸附在流道侧壁上，但由于气流的剪切作用大于壁面的毛细效应，所以液滴在气流的拖曳作用下，沿着流道侧壁面顺利排出，并且液滴脱离了 GDL，不会影响反应气体向内扩散，可以保持燃料电池内的反应物充足。

案例 10 的所有壁面接触角均为 150° ，是非常疏水的壁面，从图 6(c)中可以看出，极度疏水的壁与液滴之间的排斥力非常强，以至于液滴甚至无法附着在壁上。所以极度疏水的通道可以防止液态水被卡在通道中，液滴均能排除流道。

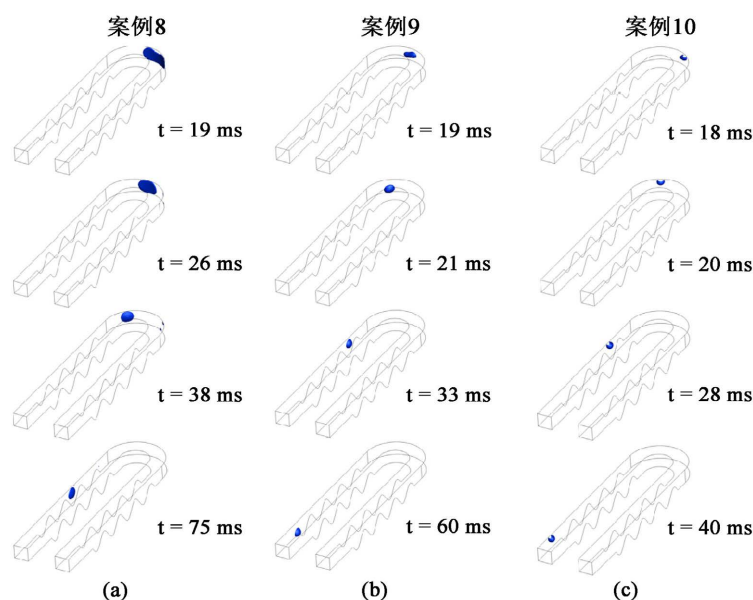


Figure 6. Liquid water removal process with different contact angles of the sidewall surface of the flow channel

图 6. 不同流道侧壁面接触角的液态水去除过程

3.3. 液滴大小及数量对液态水运输的影响

在 PEMFC 正常运作下，液态水从 GDL 向流道内运输是一个连续的过程，并且形成的液滴大小及数量与工作电压和电流密度有密切关系，当在低电压高电流密度情况下工作时，就会产生更多的液态水，因此需要对液滴的大小和数量进行研究。

案例 11 的液滴直径为 0.6 mm ，如图 7(a)所示，大液滴的传输速率明显大于小液滴，这是因为大液滴使得流道内的气体流动阻力更大，受到的气流剪切作用也就越大。案例 12 是流道内同时存在 3 个液滴，从图 7(b)可以看出，三个液滴随着气流的运动，逐渐合并成一个大液滴，尽管液滴很大，但最终在转角处还是能够在气流和惯性的作用下脱离 GDL，和单液滴保持相同的运输路径，并且排除流道所需要的时间更短。因此，GDL、流道底面和流道侧壁面的接触角分别为 150° 、 150° 和 70° 的设计满足高电流密度的工作条件，能够实现液态水从 GDL 表面的脱离和快速排水。

4. 结论

采用 VOF 方法对蛇形流道内液滴进行三维两相流模拟，研究了流道内 GDL 表面液滴去除过程，并通过分析不同挡板结构、壁面接触角和液滴数量对去除液态水的影响，得到以下结论：

1) 不同挡板形状的流道对液态水运输的影响不同，其中波浪形挡板的流道内的液态水更容易排出，同时产生的压降也最小；

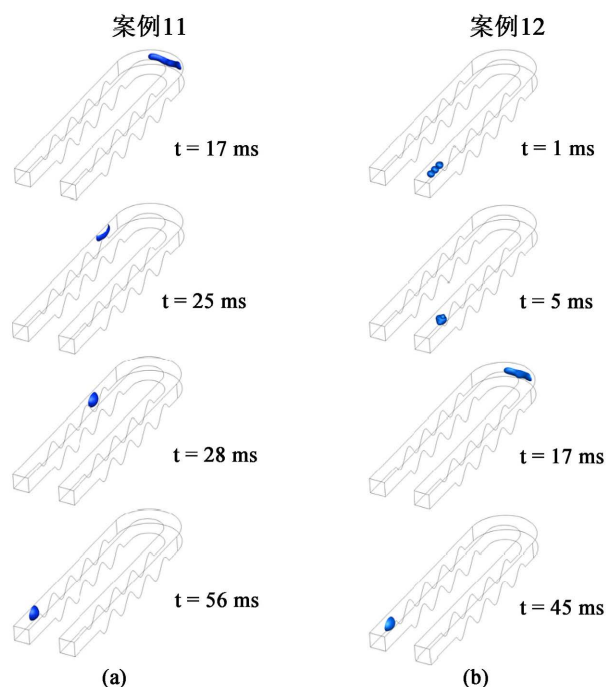


Figure 7. Liquid water removal process with different droplet sizes and numbers

图 7. 不同液滴大小和数量的液态水去除过程

2) GDL 选择非常疏水性的壁面更有利于液滴脱离壁面运动, 防止液滴在 GDL 形成液膜, 有利于提高催化层内反应物的浓度;

3) 当 GDL、流道底面和流道侧壁面的接触角分别为 150° 、 150° 和 70° 时, 流道内液滴大小不同, 或者同时存在多个液滴时, 仍然能够有效地去除 GDL 表面的液态水。

参考文献

- [1] Irznzo, A., Arredondo, C.H., Kannan, A.M. and Rosa, F. (2020) Biomimetic Flow Fields for Proton Exchange Membrane Fuel Cells: A Review of Design Trends. *Energy*, **190**, Article ID: 116435. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116435>
- [2] Pan, W., Chen, X., Wang, F. and Dai, G. (2020) Mass Transfer Enhancement of PEM Fuel Cells with Optimized Flow Channel Dimensions. *International Journal of Hydrogen Energy*, **46**, 29541-29555. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.09.105>
- [3] 廖珮懿, 杨代军, 明平文, 薛明喆, 李冰, 张存满. 微流道气-液两相流研究及其在 PEMFC 中的应用进展[J]. 化工进展, 2021, 40(9): 4734-4748.
- [4] Ren, G.P., Yu, L.J., Qin, M.J. and Jiang, X.-M. (2008) Transport Mechanisms and Performance Simulation of a PEM Fuel Cell. *International Journal of Energy Research*, **32**, 514-530. <https://doi.org/10.1002/er.1360>
- [5] Ferreira, R.B., Falcão, D.S., Oliveira, V.B. and Pinto, A.M.F.R. (2015) Numerical Simulations of Two-Phase Flow in Proton Exchange Membrane Fuel Cells Using the Volume of Fluid Method—A Review. *Journal of Power Sources*, **277**, 329-342. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.11.124>
- [6] Le, A.D., Zhou, B., Shiu, H.R., Lee, C.-I. and Chang, W.-C. (2010) Numerical Simulation and Experimental Validation of Liquid Water Behaviors in a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Cathode with Serpentine Channels. *Journal of Power Sources*, **195**, 7302-7315. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2010.05.045>
- [7] Hou, Y., Zhang, G., Qin, Y., Du, Q. and Jiao, K. (2017) Numerical Simulation of Gas Liquid Two-Phase Flow in Anode Channel of Low-Temperature Fuel Cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, **42**, 3250-3258. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.09.219>

-
- [8] Ferreira, R.B., Falcão, D.S., Oliveira, V.B. and Pinto, A.M.F.R. (2017) 1D + 3D Two-Phase Flow Numerical Model of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Applied Energy*, **203**, 474-495. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.06.048>
- [9] Kang, S., Zhou, B., Cheng, C.H., Shiu, H.-R. and Lee, C.-I. (2011) Liquid Water Flooding in a Proton Exchange Membrane Fuel Cell Cathode with an Interdigitated Design. *International Journal of Energy Research*, **35**, 1292-1311. <https://doi.org/10.1002/er.1858>
- [10] Peng, Q., Zhou, B., Sobesiak, A. and Liu, Z. (2005) Water Behavior in Serpentine Micro-Channel for Proton Exchange Membrane Fuel Cell Cathode. *Journal of Power Sources*, **152**, 131-145. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2005.02.075>
- [11] Song, M., Kim, H.Y. and Kim, K. (2014) Effects of Hydrophilic/Hydrophobic Properties of Gas Flow Channels on Liquid Water Transport in a Serpentine Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, **39**, 19714-19721. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.09.168>
- [12] 陈旺, 蒋方明. H₂/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[J]. 新能源进展, 2017, 5(6): 435-442.
- [13] Jo, J.H. and Kim, W.T. (2015) Numerical Simulation of Water Droplet Dynamics in a Right Angle Gas Channel of a Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, **40**, 8368-8383. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.04.122>
- [14] Qin, Y.Z., Li, X., Jiao, K., Du, Q. and Yin, Y. (2014) Effective Removal and Transport of Water in a PEM Fuel Cell Flow Channel Having a Hydrophilic Plate. *Applied Energy*, **113**, 116-126. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.06.053>
- [15] Brackbill, J.U., Kothe, D.B. and Zemach, C. (1992) A Continuum Method for Modeling Surface Tension. *Journal Computational Physics*, **100**, 335-354. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y)
- [16] Dehsara, M. and Kermani, M.J. (2014) Proton Exchange Membrane Fuel Cells Performance Enhancement Using Bi-polar Channel Indentation. *Journal of Mechanical Science and Technology*, **28**, 365-376. <https://doi.org/10.1007/s12206-013-0983-0>