

多相流技術應用在燃料電池流體通道之流場模擬

劉昭忠*¹ 王萱錫² 劉昭恕³ 程冠儒⁴

^{1,2} 中州科技大學 電機與能源科技系

³ 國立高雄應用科技大學 機械工程系

⁴ 中州科技大學 工程技術研究所(研究生)

摘 要

本研究利用多相流技術模擬燃料電池中流體通道之流場特性。在質子交換膜燃料電池中，由於氫離子穿過質子交換膜到達陰極觸媒層與氧氣結合產生水，所以在陰極流道內會有氧氣與水的多相傳輸現象。此多相傳輸現象不但會阻礙氧氣進入擴散層，而產生的水可能阻塞陰極流道，均會降低燃料電池的發電效能。為了瞭解燃料電池中陰極通道的多相流傳輸方式，乃利用多相流之數值模式，計算水膜在陰極通道內的流場變化，並進一步探討在陰極通道的不同表面結構對多相流場的影響。

關鍵字：多相流、水膜、陰極

通訊作者

姓名：劉昭忠

E-mail：c00jcl00@dragon.ccut.edu.tw



壹、前言

多相流是兩種或兩種以上之流體流場，其流場範圍或形狀會隨時間變化，故不論從理論上或數值計算上都很難處理。對於多相流的計算，Harlow 和 Welch (1965) 首先提出 MAC (Marker And Cell) 方法，此法以標識粒子 (Marker Particle) 之有無來捕捉邊界，雖然相當精確，但遇流場複雜時，例如邊界形成尖角或邊界合併時，必須設法移除某些標識粒子；其次，標識粒子的運動，可能造成邊界發展的不穩定，尤其當拓展至三維計算，標識粒子的移除更是困難。至於此方法之改進，可參見文獻 (1997)。Hirt 和 Nichol (1981) 發展出所謂的流體體積法 (Volume of Fluid; VOF) 來求解二維自由液面流場，此方法主要是利用一 Fractional Volume 或 Color Function ϕ 來標記某一計算網格為水 ($\phi=1$) 或為空氣 ($\phi=0$) 或為自由液面 ($0<\phi<1$)，在文獻上亦稱之為體積追蹤 (Volume Tracking) 法。此方法近年來重新獲得重視而有諸多改良，詳見文獻 (1992)。Osher 和 Sethian (1988) 發展並提出一套無須簿記 (Bookkeeping) 而能追蹤移動邊界之算則，亦即 Hamilton-Jacobi 等位函數 (Level Set Function) 表示法，此法可解決邊界合併、破裂等性質改變的問題，也可推展至三維計算。

迄今，燃料電池的研究已有一段時日(1991-2008)，發現影響質子交換膜燃料電池(PEMFC)的發電效能有眾多原因，其中包含液態水在流道產生並阻塞流道。因此，對 PEMFC 而言，控制液態水的產生和水含量的多寡是相當重要一環。

貳、文獻探討

在過去文獻中，Bernardi 與 Verbrugge (1991) 對於質子交換膜燃料電池的質子交換膜、擴散層和作用層已做數值模擬且獲得良好的計算結果。Nguyen 和 White (1993) 則建立一個二維、單相、穩態和熱傳模型，藉此探討在質子交換膜燃料電池裡水與熱的傳輸現象。文中提及質子交換膜燃料電池在過度排除液態水，將會導致薄膜開始乾燥而產生脫水現象，並且使質子的傳導阻力增加；反之，若排除不佳則可能使液態水阻塞流道，反應物將無法有效到達反應位置，且在高電流密度與低溫度下也容易產生阻塞現象，而造成燃料電池效能下降 ((J.J. Baschuk 等人, 2000)、(Xuan Liu 等人, 2006)、(S. Miachon 等人, 1995))。Klaus Tüber 等人 (2003) 則利用透明的兩平行氣體通道，研究液態水在質子交換膜燃料電池裡的可視化，並且提出在操作時間上水阻塞的圖像等條件加以探討。Zhigang Zhan 等人 (2006) 採用三維模型，模擬單一水滴與水薄膜在直線與彎曲流道的傳輸情形，探討氣體流速及韋伯數之影響。

Hontanon 等人 (2000) 則模擬燃料電池三維流道內的氣體分佈情況，在不同條件改變下(氣體通道的寬度、數目)，能有效提升電池的效能。張錦裕與黃育賢等人 (2007) 則以三維的平行流道，利用簡化共軛梯度法(Simplified conjugate-gradient method, SCGM)，來探討流體通道在設計不同的寬度比及高度情況下，獲得最佳的濃度分佈及流場的速度。Scholta 等人 (2006) 則以實驗與模擬方式，探討流道結構對電池效能的影響，由結果可知，流道設計尺寸的寬或窄可獲得不同的電流密度效應。Um 和 Wang (2004)、Su 等人 (2005)、Yan 等人 (2006)，以數值模擬與實驗方式研究不同流道配置的質子交換膜燃料電池，由結果可知，在平行流道(Parallel Straight)、叉型流道(Interdigitated)及蛇行流道(Serpentine)這三種流道比較之下，以叉型流道設計為最佳，其次蛇行流道，最後為平行流道。傅清揚 (2008) 則以二維模型，模擬在平行流道中加入週期連續性的凸塊排列，以一個週期為排列為研究對象，分別改變凸塊的大小並且採用層

流與紊流兩種模式做為比較，來探討加入凸塊後速度場與壓力場的分佈情況。

本研究係利用流體體積法模擬陰極三維 U 型流道的流動分佈以及流速特性，並且改變流道表面結構，藉此探討對多相流場的影響。

參、研究方法

一、物理及數學模式

主要是模擬多相流的傳輸現象，乃假設一顆球形水滴或長方形水膜位於三維 U 形的流體通道內流動（圖 1，圖 2）。

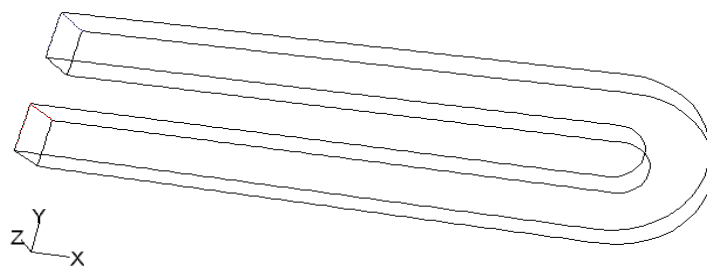


圖 1 U 形管示意圖

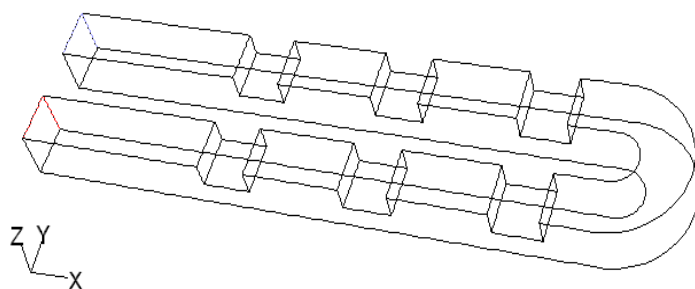


圖 2 U 形凸管示意圖

其統御方程式如下：

連續方程式：

$$\nabla \cdot (\rho \bar{u}) = 0 \quad (1)$$

動量方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}) + \nabla \cdot (\rho \bar{u} \bar{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \bar{u} + \nabla \bar{u}^T)] + \rho \bar{g} + \bar{F} \quad (2)$$

$$\sum_q^n \alpha_q = 1 \quad (3)$$

$$\rho = \sum_q \alpha_q \rho_q \quad (4)$$

動量方程式：

$$\frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + \bar{u} \cdot \nabla \alpha_q = \frac{S_{\alpha_q}}{\rho_q} \quad (5)$$

由於表面張力(surface tension)及壁面附著力(wall surface adhesion)會與動量方程式有所關聯，其方程式如下：

$$\vec{F} = \frac{2\sigma_{ij}\rho k_i \nabla \alpha_i}{\rho_i + \rho_j} \quad (6)$$

二、數值模式

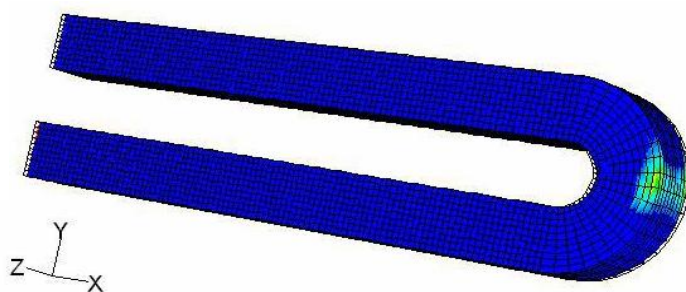
本研究以數值模式來求解問題，對於多相流計算則採用 VOF 模式加以處理。所需的邊界條件，水滴或水膜與氣體具有相同之入口速度，出口為壓力邊界，壁面為不滑動邊界(No Slip)，為了使數值計算方法較為穩定，採用 PISO 演算法求解。

肆、結果與討論

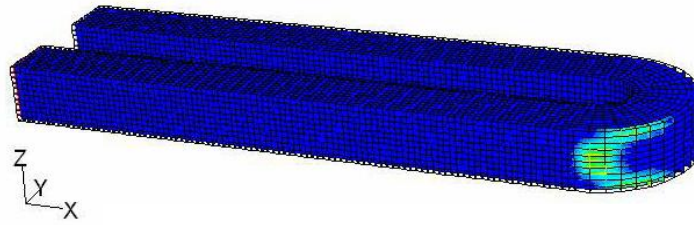
為了瞭解多相流在燃料電池陰極流道的傳輸現象，假設一顆球形水滴或長方形水膜位於 U 形流道內，在相同的流速下，計算多相流的傳輸特性，並進一步探討 U 形凸塊流道，對多相流場的影響。

首先，假設一顆半徑為 0.2mm 球形水滴接近於入口邊界及位於管徑中心，其周圍為空氣，尺寸為 23mm(長)* 1mm(寬)*1mm(高)設計之 U 形管。在條件設定方面，入口速度與球形水滴相等，分別以入口速度為 6m/s，雷諾數為 300 ($Re = \frac{\rho u D}{\mu}$) 和韋伯數為 ($We = \frac{\sigma}{\rho u^2 D}$) 1.9。

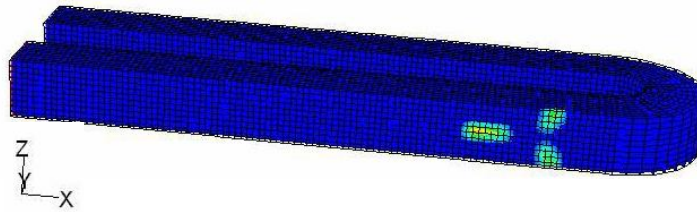
初時，球形水滴在入口直線流道部份時，因流速穩定，球形水滴不會與壁面接觸，因此，穩定往前流動。當球形水滴從直線進入彎道後，由於流動方向的改變，球形水滴開始撞擊流道壁面，球形水滴受到接觸壁面之黏滯力而貼在壁面上，再加上流動慣性力的增強與水滴本身表張力之故，球形水滴沿著壁面慢慢拉長，而開始破裂(圖 3a-3b)。最後，隨著時間增加，破裂的水滴隨著空氣的流動流至出口(圖 3c)。



(a) $t = 1.9 \text{ ms}$



(b) $t = 2.3 \text{ ms}$

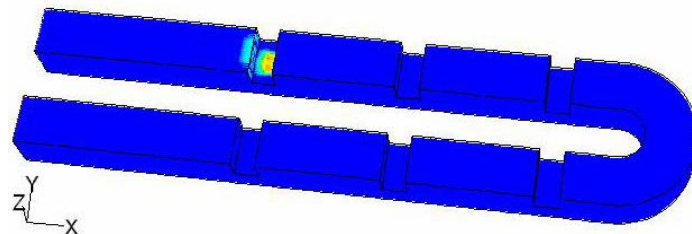


(c) $t = 2.9 \text{ ms}$

圖 3 在不同時間內球形水滴在 U 形流道通道中之流動圖，($u=6\text{m/s}$ 、 $We=1.9$)。

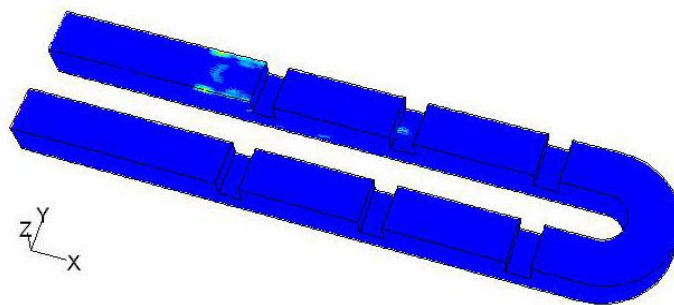
其次，採用 U 形凸塊流道來探討多相流的變化。在幾何外形部份，U 形凸塊流道總尺寸為 27mm (長) $\times 1\text{mm}$ (寬) $\times 1\text{mm}$ (高)，凸塊尺寸為 0.5mm (長) $\times 1\text{mm}$ (寬) $\times 0.5\text{mm}$ (高)，高/長=1/1，並以連續週期性的擺設於流道內。初始條件假設球形水滴以及入口空氣的速度相等，同樣地，以 $Re=300$ ， $We=1.9$ 的模擬條件加以探討。

假設一顆半徑為 0.2mm 球形水滴接近於入口邊界及位於上層凸塊為之流道管徑中心。初時，都未撞擊上層凸塊。隨著時間增加，流動方向受障礙物影響，使的在上層第一凸塊下緣流速較快，當球形水滴與流道凸塊發生撞擊後，由於與壁面的黏滯力增加，以及慣性力的增強，使的球形水滴的表面張力無法維持平衡，而開始產生破裂(4a)。當球形水滴撞擊上層第一凸塊破裂後，未受第一凸塊阻擋之破裂水滴，隨著流場往下游流動，又因上層第一凸塊至第三凸塊間的迴流現象，破裂水滴較不會在第一凸塊至第三凸塊間的迴流區存在，此時，上層第一凸塊產生的迴流區也逐漸增強，被阻擋破裂的水滴也隨迴流區的流動破裂成更多的小水滴(4b)。當破裂後水滴到達轉彎處時，水滴開始撞擊流道壁面，水滴受到接觸壁面之黏滯力，再加上流動慣性力的增強與水滴本身表張力之故，水滴沿著壁面慢慢拉長變形，甚至開始破裂(圖 4c)。當離開轉彎處之水滴，也因凸塊作用，造成流場變化，水滴再一次破裂，而往出口流動(圖 4d)。

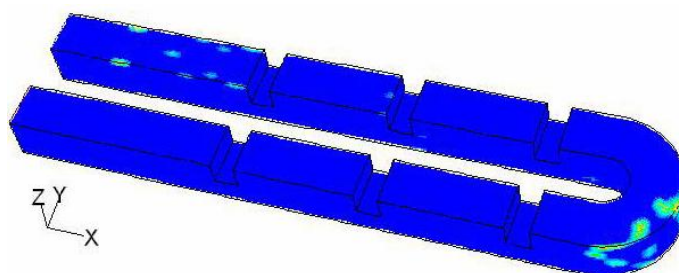


(a) $t = 0.5 \text{ ms}$

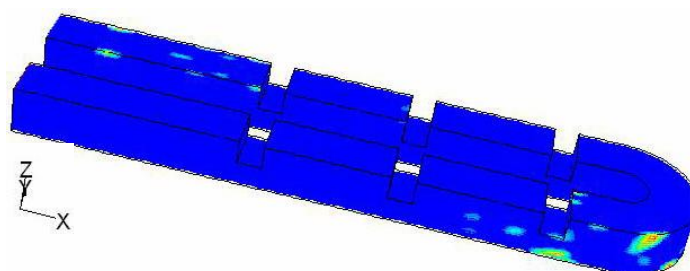




(b) $t = 1.0$ ms



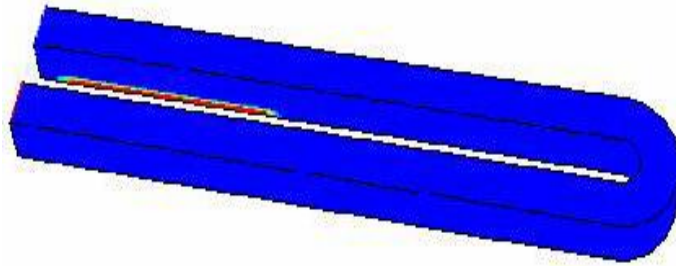
(c) $t = 2.4$ ms



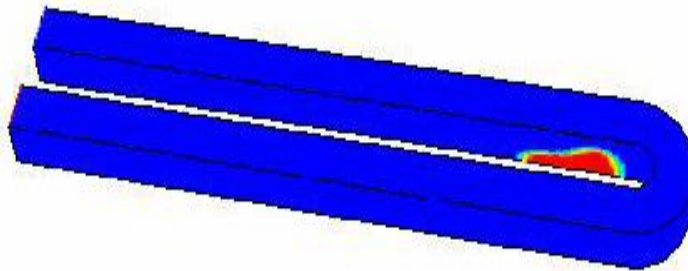
(d) $t = 3.0$ ms

圖 4 在不同時間內球形水滴在 U 形凸塊(高/長=1/1)流道通道中之流動圖，($u=6\text{m/s}$ 、 $We=1.9$)。

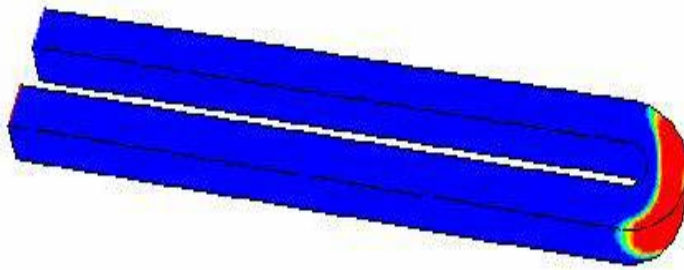
假設 6 mm (長) * 1 mm (寬) * 0.2 mm (高)的長方形水膜覆蓋於入口附近的氣體擴散層(GDL)上，其周圍為空氣，尺寸為 17.5 mm (長)* 1 mm (寬)* 1 mm (高)設計之 U 型管，格點總數 86800。在條件設定方面，入口空氣速度與水膜相等，分別以入口速度為 2 m/s ，雷諾數為 100 和韋伯數為 17.5。初時，水膜位於入口直線流道(圖 5a，圖 6a)，隨著時間增加，因受 GDL 壁面的黏滯力和流動慣性力的推擠，再加上本身表面張力之作用，水膜開始堆積變形流動(圖 5b，圖 6b)。當變形的的水膜到達彎道之處，由於流動方向的改變，水膜撞擊流道壁面。在水膜撞擊流道壁面之時，因受壁面黏滯力的影響而附著於壁面之上，又因流動慣性力與水膜本身表面張力之作用，導致水膜沿著壁面慢慢拉長，甚至延伸至上層壁面(圖 5c，圖 6c)。當水膜流過彎到後，因慣性力小於壁面黏滯力而開始堆積堵塞流道(圖 5d，圖 6d)。最後，隨著時間增加，由空氣的推動流至出口(圖 5e，圖 6e)。



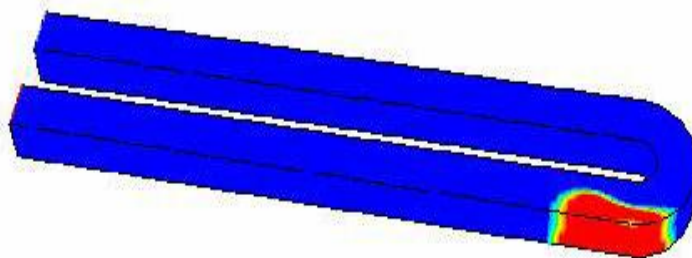
(a) $t=0.1$ ms



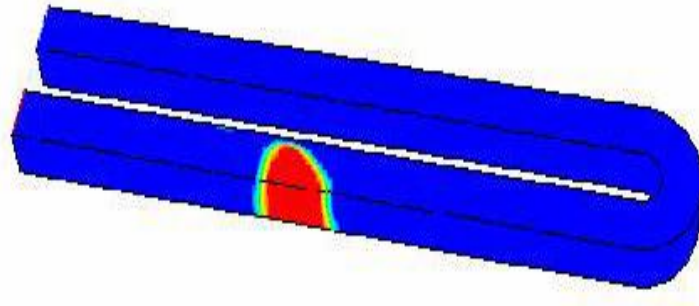
(b) $t=7$ ms



(c) $t=10$ ms

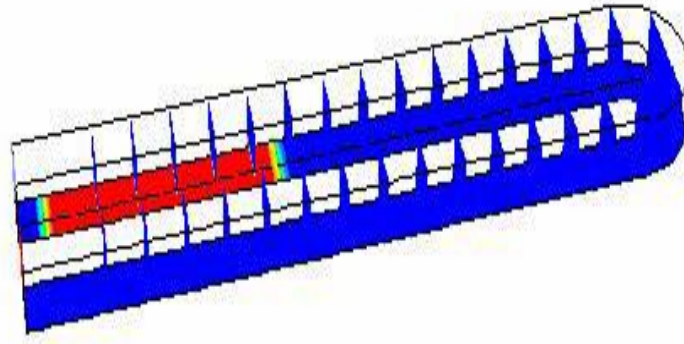


(d) $t=13.5$ ms

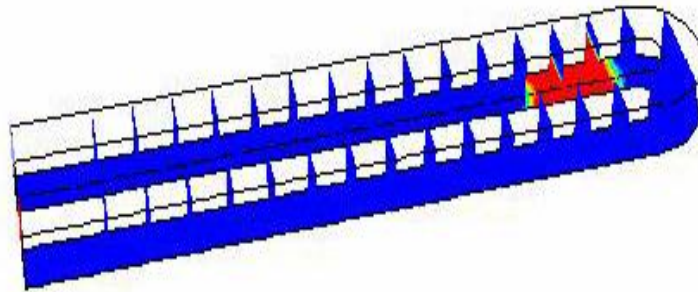


(e) $t=21$ ms

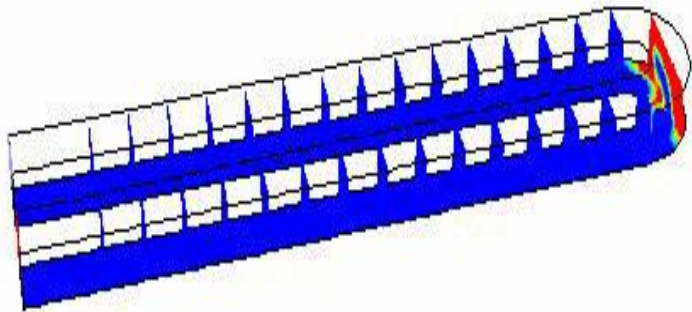
圖 5 在不同時間內水膜在 U 型通道中之流動圖，($u=2$ m/s， $We=17.5$)。



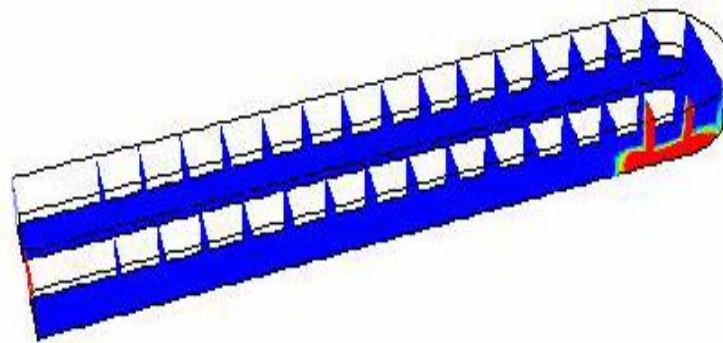
(a) $t=0.1$ ms



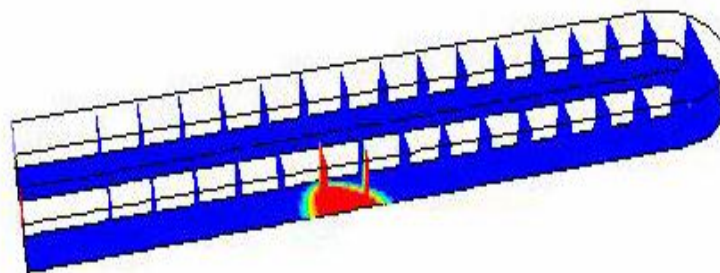
(b) $t=7$ ms



(c) $t=10$ ms



(d) $t=13.5$ ms

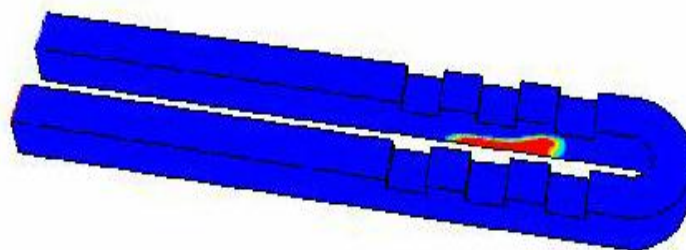


(e) $t=21$ ms

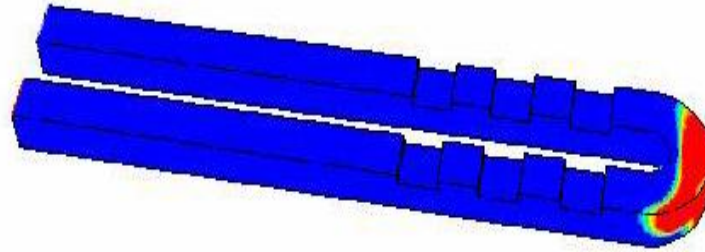
圖 6 在不同時間內水膜在 U 型通道中之流動截面圖，($u=2$ m/s， $We=17.5$)。

採用 U 型凸塊流道來探討在不同流速下多相流的變化。在幾何外形部份，U 型凸塊流道總尺寸為 17.5 mm(長)* 1 mm(寬)*1 mm(高)，凸塊尺寸為 1 mm(長)*1 mm(寬)*0.5 mm(高)，凸塊高度(h)/流道高度(H)= $1/2$ (格點總數 79600) 以及 1 mm(長)*1 mm(寬)*0.25 mm(高)，凸塊高度(h)/流道高度(H)= $1/4$ (格點總數 84640) 兩種，並擺設於流道內。初始條件假設水膜以及入口空氣的速度相等，同樣地，採用 $Re=100$ ， $We=17.5$ 模擬條件加以探討。

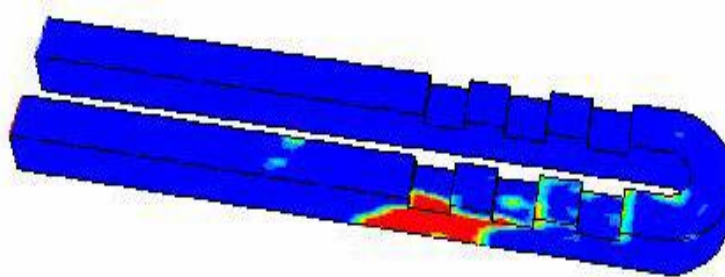
在上層凸塊為($h/H=1/4$)之 U 型流道中，假設長 6 mm*寬 1 mm*高 0.2 mm 的長方形水膜覆蓋於入口附近的氣體擴散層(GDL)上。當 $Re=100$ ， $We=17.5$ ，水膜流動從直線至轉彎之處，因流場速度較小，凸塊的高度較低，凸塊間的流場變化，並無影響到水膜在 GDL 的流動，所以，此部分的流動模式都類似於在相同條件下，平滑 U 型流道的對應部分(圖 7a-7b，圖 8a-8b)。當受壁面黏滯力的變形水膜流過彎道之後，因受到凸塊所產生的流場變化，水膜的表面張力無法維持平衡而破碎，其中少數的破碎水滴會殘留於迴流區內(圖 7c，圖 8c)。



(a) $t=5.7$ ms

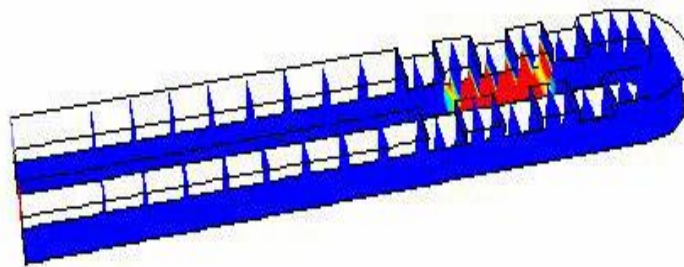


(b) $t=8.9$ ms

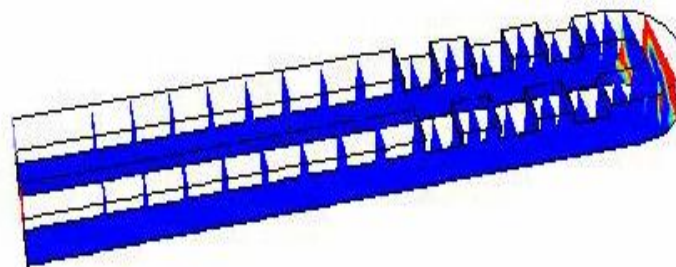


(c) $t=17$ ms

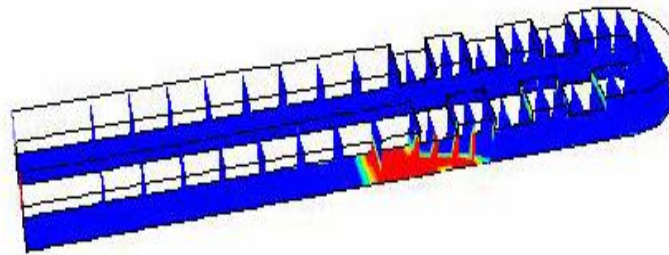
圖 7 在不同時間內水膜在 U 型凸塊(凸塊高度/流道高度=1/4)流道通道中之流動圖，($u=2$ m/s， $We=17.5$)。



(a) $t=5.7$ ms



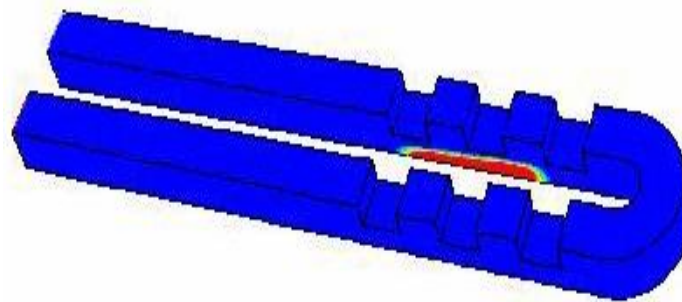
(b) $t=8.9$ ms



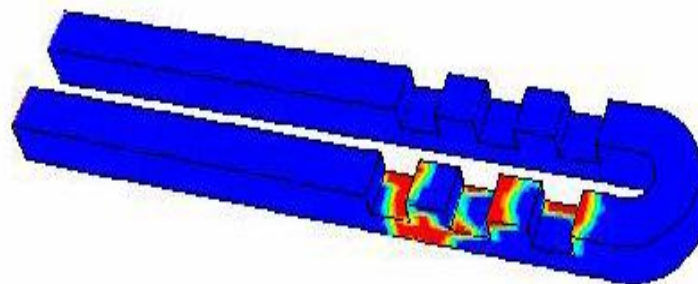
(c) $t=17$ ms

圖 8 在不同時間內水膜在 U 型凸塊(凸塊高度/流道高度=1/4)流道通道中之流動截面圖，
($u=2$ m/s， $We=17.5$)。

接著改變上層凸塊比例， $h/H=1/2$ 之 U 型流道，以 $Re=100$ ， $We=17.5$ 探討之，發現改變上層凸塊比例，其水膜的流動模式與凸塊比例， $h/H=1/4$ 之前述結果相似，但彼此仍有差異。當入口流道的凸塊高度增加時，凸塊與凸塊之間的迴流效應增加，導致上層凸塊間的迴流效應增大，使得在 GDL 上流動的水膜變化較為平坦(圖 7a，圖 9a)，而出口流道的凸塊，也因凸塊間迴流效應的增大，水膜的表面張力更不足以維持形狀產生破碎，凸塊間會殘留破碎水膜(圖 7d，圖 9b)。



(a) $t=5$ ms



(b) $t=14.5$ ms

圖 9 在不同時間內水膜在 U 型凸塊(凸塊高度/流道高度=1/2)流道通道中之流動圖，($u=2$ m/s， $We=17.5$)。

最後，由圖 10 得知，對於平滑、凸塊比例 1/4 和凸塊比例 1/2 的 U 型流道而言，水膜流動因受凸塊比例 1/4 的凸塊高度影響不大，僅在流道轉彎後造成水膜些許破裂，所以在平滑和凸

塊比例 1/4 的出口處，兩者水膜排出的質量流率和時間相當，僅有些許差異。在凸塊比例 1/2 時，凸塊高度明顯造成水膜破碎，導致破碎的水膜排出時間較早，但排出的質量流率較小，若要完全將水膜排出出口流道之外，則須在花更長時間。

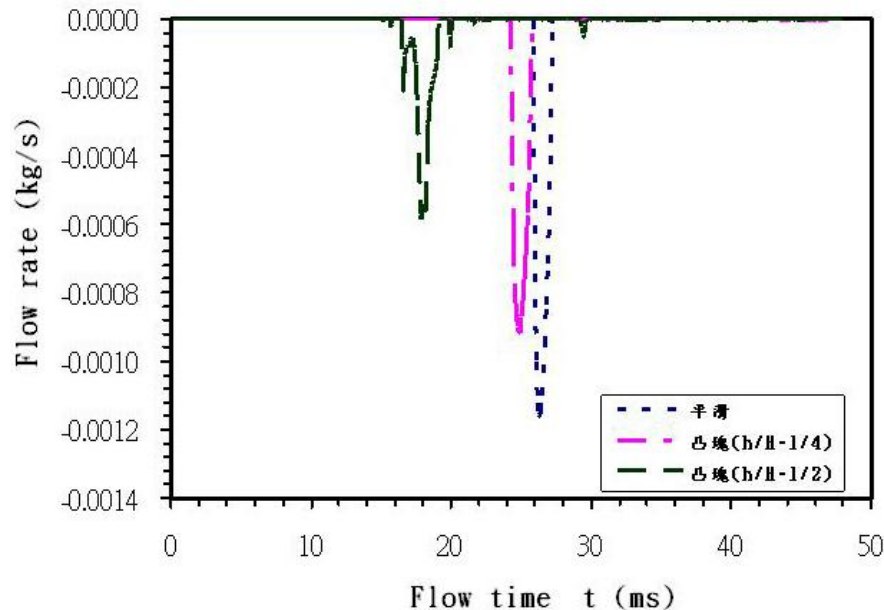


圖 10 水膜在不同設計 U 型流道出口之流率圖，(u=2 m/s，We=17.5)。

伍、結論

本研究利用多相流技術模擬質子交換膜燃料電池陰極流道內多相流之傳輸行為。在 U 形流道中，球形水滴在轉彎處，受到接觸壁面之黏滯力，再加上流動慣性力的增強與水滴本身表張力之故，使得球形水滴沿著壁面拉長而破裂。在 U 形凸塊流道(高/長=1/1)中，造成凸塊流道內之水滴破裂情形更加明顯。對於長方形水膜，無論是平滑或凸塊之 U 型管，在出口排出前均會發生破碎現象，尤其凸塊比例愈高時，因凸塊間的迴流效應更加明顯，水膜破碎將更為嚴重。當 $Re=100$ ， $We=17.5$ 條件下，比較平滑、凸塊比例 1/4 和凸塊比例 1/2 三種 U 型流道的水膜排出質量流率，由計算結果得知，平滑和凸塊比例 1/4 之水膜排出的質量流率和時間相當，而凸塊比例 1/2 時，凸塊高度明顯造成水膜破碎，導致破碎的水膜排出時間較早，但排出的質量流率較小，若要完全將水膜排出出口流道之外，則須在花更長時間。

誌謝

本論文感謝國科會專題計畫之經費補助，計畫編號: NSC 101-2221-E-235-003-

參考文獻

- 張錦裕、黃育賢、鄭金祥、吳一鳴, “質子交換膜燃料電池碳板流道寬度分佈最佳化,” 第十四屆全國計算流體力學學術研討會, 2007.
- 傅清揚, “燃料電池陰極流道表面結構效應之研究,” 私立中原大學碩士論文, 2008.
- Nguyen, T.V. and White, R.E., “A Water and Heat Management Model for Proton Exchange Membrane Fuel Cell,” *Journal of Electrochemical Society*, Vol.140, pp.2178-2186, 1993.
- J.J. Baschuk, Xianguo Li, “Modelling of polymer electrolyte membrane fuel cells with variable degrees of water flooding,” *Journal of Power Sources*, Vol. 86, pp.181-196, 2000.
- Zhigang Zhan, Jinsheng Xiao, Mu Pan, Runzhang Yuan, “Characteristics of droplet and film water motion in the flow channels of polymer electrolyte membrane fuel cells,” *Journal of Power Sources*, Vol. 160, pp.1-9, 2006.
- Xuan Liu, Hang Guo, Chongfang Ma, “Water flooding and two-phase flow in cathode channels of proton exchange membrane fuel cells,” *Journal of Power Sources*, Vol. 156, pp.267-280, 2006.
- S. Miachon, P. Aldebert, “Internal hydration H₂/O₂ 100 cm² polymer electrolyte membrane fuel cell,” *Journal of Power Sources*, Vol. 56, pp.31-36, 1995.
- Klaus Tüber, David Póca, Christopher Hebling, “Visualization of water buildup in the cathode of a transparent PEM fuel cell,” *Journal of Power Sources*, Vol. 124, pp.403-414, 2003.
- E. Hontañón, M. J. Escudero, C. Bautista, P. L. García-Ybarra, L. Daza, “Optimisation of flow-field in polymer electrolyte membrane fuel cells using computational fluid dynamics techniques,” *Journal of Power Sources*, Vol. 86, pp.363-368, 2000.
- S.K. Chang, Y.K. Di, H.K. Lee, Y.G. Shul, T.H. Lee, “Influence of pore-size distribution of diffusion layer on mass-transport problems of proton exchange membrane fuel cells,” *Journal of Power Sources*, Vol. 108, pp.185-191, 2002.
- J. Scholta, G. Escher, W. Zhang, L. Küppers, L. Jörissen, W. Lehnert, “Investigation on the influence of channel geometries on PEMFC performance,” *Journal of Power Sources*, vol. 155, pp.66-71,2006.
- Sukkee Um, C. Y. Wang, “Three-dimensional analysis of transport and electrochemical reactions in polymer electrolyte fuel cells,” *Journal of Power Sources*, vol. 125, pp.40-51, 2004.
- Fang-Bor Weng, Ay Su, Guo-Bin Jung, Yen-Chiao Chiu, Shih-Hung Chan, “Numerical prediction of concentration and current distributions in PEMFC,” *Journal of Power Sources*, vol. 145, pp.546-554, 2005.
- Yan, Wei-Mon, Mei, Sheng-Chin, Soong, Chyi-Yeou, Liu, Zhong-Sheng, Song, Datong, “Experimental study on the performance of PEM fuel cells with interdigitated flow channels,” *Journal of Power Sources*, Vol. 160, pp. 116-122, 2006.
- D.M. Bernardi, M.W. Verbrugge, “Mathematical Model of a Gas Diffuser Electrode Bonded to a Polymer-Electrolyte,” *AIChE Journal*, Vol. 37(8), pp. 1151-1163, 1991.
- Harlow, F. H. and Welch, J. E., “Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with a Free Surface,” *Phys. Fluids*, Vol. 8, pp. 2182-2189, 1965.
- V. Armenio. “An Improved MAC Method (SIMAC) for unsteady high-Reynolds free surface flows,”



International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 24, pp. 185-214, 1997.

- C. W. Hirt and B. D. Nichols. "Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries,"
Journal of Computational Physics, Vol. 39, pp.201-225, 1981.
- D. B. Kothe and R. C. Mjolsness, "Ripple: A new model for incompressible flows with free surfaces,"
AIAA Journal, Vol. 30, pp.2694-2700, 1992.
- S. Osher, S. and J. A. Sethian, "Fronts Propagating with Curvature Dependent Speed: Algorithms
Based on Hamilton-Jacobi Formulation", Journal of computational physics , Vol. 79(1), pp.
12-49, 1988.

Multiphase Flow Simulation for Gas Channel in PEMFC

Chao-Chung Liu^{1*}, Hsuan-Fu Wang², Chao-Shu Liu³, Guan-Ru Cheng⁴

^{1,2} Department of Electrical Engineering and Energy Technology,

Chung Chou University of Science and Technology

³ Departement of Mechanical Engineering ,

National Kaohsiung University of Applied Sciences

⁴ Graduate School of Engineering Technology ,

Chung Chou University of Science and Technology

Abstract

The main purpose of this study is to apply the multiphase flow technology to simulate the transport phenomena of flow channel in proton exchange membrane fuel cells (PEMFC). Water is produced by mixing hydro-iron and oxide-ion in the reaction side of catalyst layer of cathode in PEMFC. This is a multiphase flow field including fuel gas and water in oxidant channel. The transport phenomena of multiphase flow field in oxidant channel can influence the performance of the fuel cell. The multiphase flow model is applied to simulate the flow field of oxidant channel. The characteristics of multiphase flow field in oxidant channel are presented with the variant parameter. Furthermore, multiphase flow simulation on the different surface Structure effect are obtained from these computational results..

Keywords : Multiphase Flow, Water Film, flow Channel

