

## مدل سازی سه بعدی جریان حبابی الکترولیت در فاصله بین دو الکتروود یک سلول باتری جریانی با در نظر گرفتن جداکننده های متفاوت

احسان بهروزی زاده

سعید ناهیدی<sup>۱</sup>

دانشکده و پژوهشکده فنی- مهندسی، دانشگاه جامع امام حسین (ع) دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه شهید بهشتی  
(تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۲/۰۹؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۲/۰۷)

### چکیده

در باتری های جریانی Zn-Ag<sub>2</sub>O به عنوان یک نوع از باتری های ظرفیت بالا، الکترولیت به عنوان یک ماده فعال در واکنش های الکتروشیمیایی بین صفحات آند و کاتد جریان دارد. در طراحی این باتری ها، فاصله بین الکتروودهای آند و کاتد برای کاهش حجم و وزن، ناچیز و حدود ۲ mm است. لذا جهت جلوگیری از خطر اتصال کوتاه در درون باتری، از جداکننده هایی بین الکتروودها استفاده می گردد. در این باتری، گاز هیدروژن ناشی از واکنش های الکتروشیمیایی بصورت حباب از سطح کاتد به جریان الکترولیت وارد شده و جریان دوفازی تشکیل می گردد و می تواند در فرایندهای دشارژ سریع باعث کاهش سطح فعال الکتروشیمیایی الکتروودها، افزایش مقاومت در باتری و در نتیجه کاهش نرخ واکنش های الکتروشیمیایی گردد. در این مقاله به کمک مدل سازی سه بعدی جریان دوفازی الکترولیت و با در نظر گرفتن دو سطح مقطع متفاوت برای جدا کننده ها، نحوه تشکیل و حضور حباب های گازی بر روی سطوح الکتروودی و در فاصله بین الکتروودها با هدف افزایش سطح فعال الکتروشیمیایی و بهبود عملکرد این باتری، بررسی شده است.

**واژه های کلیدی:** باتری جریانی، جداکننده آند و کاتد، سطح فعال واکنش الکتروشیمیایی، مدل سازی سه بعدی، جریان دوفازی، حباب هیدروژن

### 3D modeling of the electrolyte bubble flow in the distance between two electrodes of a flow battery by considering different spacers

Saeed Nahidi

Department of Mechanical Engineering,  
Imam Hossein University

Ehsan Behroozzade

Department of Mechanical Engineering,  
Shahid Beheshti University

(Received: 26/ February/2023; Accepted:28/ February/2022,)

### ABSTRACT

In Zn-Ag<sub>2</sub>O flow batteries as a type of high-power batteries, the electrolyte as one of active substances in electrochemical reactions flows circulatory in the distance between electrodes. In these batteries, the hydrogen gas bubble due to electrochemical reactions is produced on the cathode and then released within the electrolyte flow. One factor in improving the performance of flow batteries is enhancing the capacity of the battery at fast discharging rates but the presence of hydrogen gas bubbles on the electrode surfaces reduces the electrochemically active surface of these electrodes and increases the ohmic resistance, thereby reducing the rate of reactions in the electrochemical cells. Also, In the designing and manufacturing of these batteries due to reduce the volume and weight, Usually the distance between the anode and cathode electrodes is considered narrow gap and in the range of 2mm. For this reason, the spacers between the two electrodes are used to avoid the risk of internal short circuit in the battery. In the two phase flow, the effect of the spacer shapes on the hydrodynamics of the two phase flow and the formation of gas bubbles becomes important. In this paper, using three-dimensional numerical simulation of two-phase electrolyte flow and considering two types of cross-sectional surfaces for spacers, the behavior of gas bubbles on the electrodes and within the electrolyte flow is investigated, and increasing the electrochemical active surface and improving the performance of this battery is studied.

**Keywords:** Zn-Ag<sub>2</sub>O Flow Battery, Spacers, Electrochemical Active Surface, 3D modeling, Two-phase Flow, Hydrogen Bubble

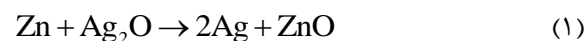
## فهرست علائم و اختصارات (در صورت لزوم)

محل فهرست علائم و اختصارات بعد از چکیده است. ابتدا علائم انگلیسی به ترتیب الفبا و سپس علائم یونانی به ترتیب الفبا و در جدول تایپ شود. در بالای حروف یونانی نوشته شود "علائم یونانی".

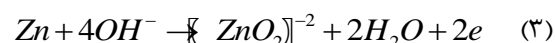
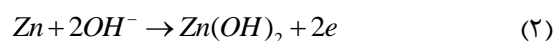
$A$	مساحت، $m^2$
$E$	مدول الاستیسیته، $N/m^2$
$\rho$	چگالی، $kg/m^3$
$f$	سیال
*	شرایط مرجع

## ۱- مقدمه

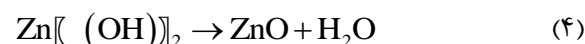
سیستم باتری روی (Zn)-اکسید نقره ( $Ag_2O$ ) (روی / الکترولیت قلیایی / اکسید نقره) در میان سیستم‌های محلول آبی مزایای متعددی از جمله ظرفیت بالا، ولتاژ تخلیه ثابت و حفظ ظرفیت ذخیره‌سازی خوب را دارا می‌باشد. هر سل باتری روی-اکسید نقره در یک ولتاژ ثابت، به طور معمول بین ۱/۵ تا ۱/۶ ولت، در هر دو نرخ بالا و پایین تخلیه می‌شود. این باتری، زمان ذخیره طولانی داشته و بیش از ۹۵ درصد ظرفیت اولیه خود را بعد از ۱ سال ماندن در دمای اتاق حفظ می‌کند [۱-۳]. واکنش الکتروشیمیایی کلی سلول روی-اکسید نقره به صورت زیر است:



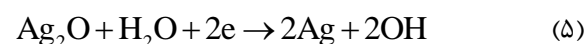
نظر به اینکه اکسایش روی در طول تخلیه این باتری، یک پدیده پیچیده است، خلاصه واکنش‌های آن به صورت زیر می‌تواند بیان گردد:



زمانی که الکترولیت اشباع می‌شود، اکسید روی رسوب کرده و آب آزاد می‌کند:



محصول واکنش در تخلیه باتری با کاتدی از جنس اکسید نقره تک ظرفیتی، فلز نقره با رسانندگی زیاد است.



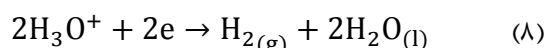
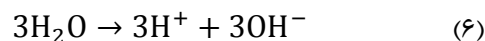
الکترولیت مورد استفاده در سلول‌های روی-اکسید نقره، محلول‌های آبی هیدروکسید پتاسیم (KOH) با غلظت ۲۰ تا ۴۵ درصد هستند. یک مانع فیزیکی برای جدا کردن آند روی و کاتد نقره از یکدیگر در سلول‌ها لازم است. خرابی این مانع منجر به اتصال کوتاه در سلول و از کار افتادن آن می‌شود. در باتری جریانی روی-اکسید نقره، از جداکننده‌هایی به صورت عمودی بین الکترودهای آند و کاتد استفاده می‌نمایند تا هم از اتصال کوتاه جلوگیری می‌کنند و هم انتقال یون بین دو الکترود با سهولت بیشتری انجام گیرد [۱-۳]. با توجه به شکل (۱) (الف)، در باتری‌های جریانی روی-اکسید نقره، مواد الکترولیت درون باتری محبوس نشده (ساکن نیستند) و طی گردشی در مدار بسته پس از تولید توان در باتری، از محفظه اصلی باتری خارج شده و پس از خنک‌کاری (ناشی از واکنش‌های گرم‌مازا در فرایند دشارژ و افزایش دما) جهت تولید توان مجدد به باتری پمپ می‌گردد.

وزن بالای باتری‌های با ظرفیت و نرخ دشارژ بالا، یکی از نکات منفی آن‌ها می‌باشد، لذا محققان بر کاهش وزن و حجم این باتری‌ها تلاش دارند. یکی از راهکارهای کاهش وزن باتری‌های جریانی، کاهش فاصله بین کاتد و آند سلول باتری‌ها به حدود ۲ میلی‌متر است. از آنجا که خطر اتصال کوتاه داخلی بین آند و کاتد با کاهش فاصله بین الکترودها افزایش می‌یابد، در این باتری از جداکننده‌هایی مطابق شکل (۱) (ب) بین الکترودهای آند و کاتد استفاده می‌گردد. البته این جداکننده‌ها به عنوان مانعی در مسیر جریان الکترولیت قرار دارند و بر هیدرودینامیک آن تاثیرگذار می‌باشند. از طرفی چون یکی از فرآورده‌های واکنش‌های درون این باتری، گاز هیدروژن بوده و به صورت حباب درون جریان الکترولیت ظاهر می‌شود، جداکننده‌ها به خصوص شکل مقطع آن‌ها، در این جریان حبابی بر قطر حباب‌ها، انسداد جریان و سطح فعال واکنش تاثیرگذار می‌باشند.

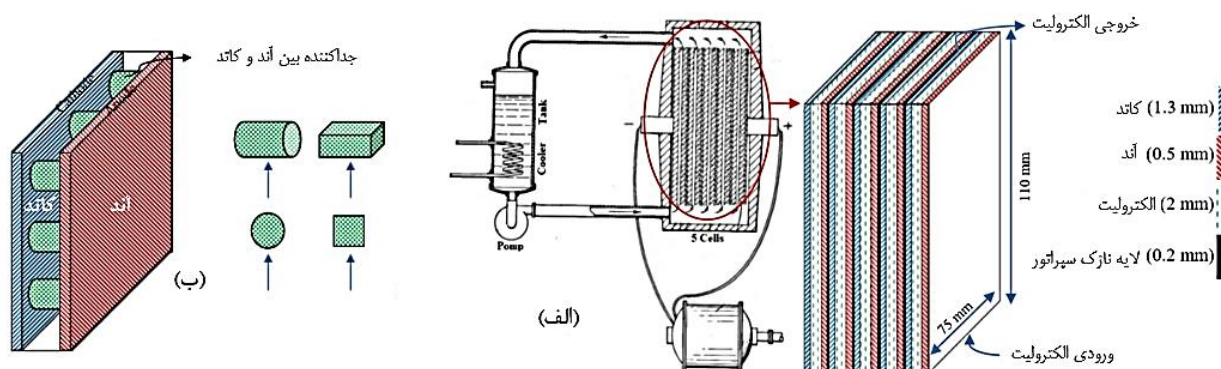
در این قسمت لازم است اشاره شود که حضور حباب‌های گازی هیدروژن در باتری روی-اکسید نقره به عنوان یکی از فرآورده‌های واکنش‌های الکتروشیمیایی در بخش واکنش‌های مربوط به کاتد اکسید نقره قابل تفسیر است. بطور خلاصه، چنانچه زیر واکنش‌های این واکنش در نظر گرفته شوند، اکسید نقره ابتدا با هیدروژن مثبت واکنش

فرایند های الکتروشیمیایی و در نتیجه کاهش بازدهی این سیستم ها می گردد، لذا در طراحی این سیستم باید کوشید تا پارامترهای دینامیک حباب های گازی (قطر، سرعت و فرکانس تولید حباب ها و ...) بطور مناسب کنترل گردد. از آنجا که حضور جداکننده ها در جریان الکترولیت باتری جریانی، به عنوان یک مانع موثر در مسیر حرکت آن و بر ترکیب، شکسته شدن و قطر حباب ها تاثیر گذار است، در این مقاله تلاش شده است تا بصورت عددی اثر انواع شکل سطح مقطع آنها بر روی پارامترهای دینامیکی حباب های گازی و تغییر سطح فعال واکنش های الکتروشیمیایی مطالعه گردد. لازم به ذکر است که این موضوع تاکنون در مطالعات انجام شده در زمینه باتری های جریانی دیده نشده و لذا برای تحقیق حاضر انتخاب شده است. همچنین نگرش و تمرکز مقاله حاضر بر دینامیک سیالات بوده و از رفتار الکتروشیمیایی باتری صرف نظر شده است.

داده، نقره و هیدرونیوم ( $+^H$ ) یا کاتیون آبی را حاصل می شود. این کاتیون آبی سپس در واکنش با الکترون، آب و گاز هیدروژن را تولید می کند (رابطه (۸)). بطوریکه حضور حباب های هیدروژن در الکترولیت KOH، جریانی دو فاز تشکیل داده و بر پیچیدگی عملکرد این باتری می افزاید.



لازم به ذکر است که حضور حباب های گازی در بسیاری از سیستم های الکتروشیمیایی دارای الکترولیت مایع همچون سیستم های تولید هیدروژن، پیل های سوختی و ... نیز وجود دارد و محققان زیادی بر روی افزایش بهره وری این سیستم ها مطالعه و تلاش نموده اند [۴-۶]. به اعتقاد ایشان، حضور این حباب ها بر روی سطوح الکتروودی و رها شدن آن ها در الکترولیت، اغلب باعث کاهش اختلال در



شکل (۱) (الف) اجزای تشکیل دهنده باتری یک باتری جریانی شامل ۵ سلول الکتروشیمیایی [۳] و (ب) جداکننده بین آند و کاتد و دو سطح مقطع مختلف در نظر گرفته شده برای آن

بر یکدیگر تاثیر گذار نیستند. بنابراین به دلیل تاثیر گذاری اجزای پخش شده یا حباب ها در جریان دو فاز الکترولیت سلول بر یکدیگر و کسر حجمی زیاد حباب ها، تنها مدل اوپلر-اوپلر می تواند جریان دو فاز الکترولیت در سلول باتری را به درستی مدل کند. لذا در تحقیق حاضر از این مدل استفاده شده است. در روش مدل سازی اوپلر-اوپلر در جریان های دو فاز معادلات پیوستگی، مومنتم برای هر دو فاز حل می شوند؛ با این تفاوت که کسر حجمی فازها در محاسبه خواص هر فاز تاثیر گذار است. برخی خواص مانند چگالی و لزجت از میانگین گیری حجمی به دست می آیند. بنابراین هر معادله به سه شکل مختلف (برای فاز مایع، برای فاز گاز و برای جریان کلی) ارائه می شود. زیر نمادهای،  $g$  و

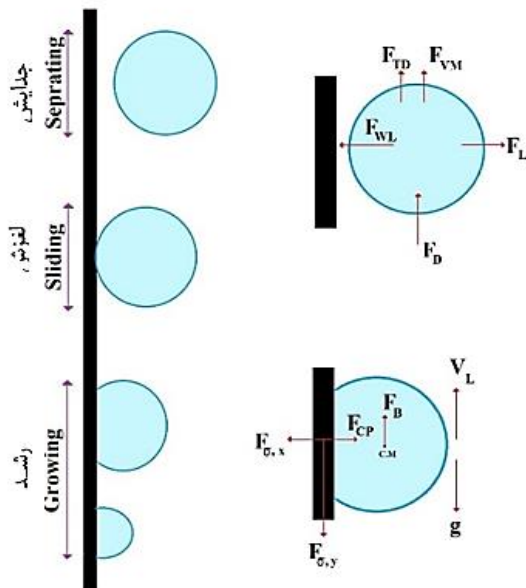
## ۲- مدل حل عددی و معادلات حاکم بر جریان دوفازی الکترولیت

برای مدل سازی جریان های دو فاز، دو روش اصلی اوپلر-اوپلر و اوپلر-لاگرانژ وجود دارد. در روش اوپلر-اوپلر معادلات پیوستگی، برای کلیه فازهای موجود در میدان حل به صورت فاز پیوسته در نظر گرفته شده و حل می شود. بنابراین در این روش اجزا مختلف فاز پخش شده بر یکدیگر تاثیر گذار هستند و حباب ها در جریان می توانند با یکدیگر ترکیب شده و حباب بزرگ تر تشکیل دهند یا به دو حباب کوچکتر شکسته شوند. اما در روش اوپلر-لاگرانژ تنها مسیر اجزا یا ذرات فاز پخش شده به صورت لاگرانژی دنبال شده و

پخش اغتشاش می‌باشند. بنابراین رابطه (۱۳) [۹] برای انتقال مومنتم بین فازها به دست می‌آید. در این رابطه نمادهای  $F_{TD}$ ،  $F_{WL}$ ،  $F_{VM}$ ،  $F_L$ ،  $F_D$  به ترتیب نیروی درگ، لیفت، جرم مجازی، روغن کاری دیواره و پخش اغتشاش را نشان می‌دهند.

$$\begin{aligned} (S_{Momentum})_{g \rightarrow l} &= -(S_{Momentum})_{l \rightarrow g} \quad (13) \\ &= (F_D + F_L + F_{VM} \\ &\quad + F_{WL} + F_{TD})_{l \rightarrow g} \end{aligned}$$

در شکل (۲) مراحل رشد، لغزش و جدایش حباب هیدروژن از سطح کاتد و نیروهای وارد بر حباب نشان داده شده است. در این شکل علاوه بر نیروهای درگ و غیر درگ نیروی شناوری<sup>۱</sup> ناشی از اختلاف چگالی دو فاز، نیروی کشش سطحی و نیروی تکیه‌گاه دیوار ( $F_{CP}$ ) نیز مشخص شده است.



شکل (۲) مراحل رشد، لغزش و جدایش یک حباب هیدروژن از سطح کاتد در جریان الکترولیت و نیروهای وارد بر آن [۷]

نیروهای شناوری و کشش سطحی از طریق عدد بی‌بعد اوتوس<sup>۳</sup> (رابطه (۱۴) [۹]) در نیروهای درگ و غیر درگ تاثیرگذار می‌باشند. در این رابطه نمادهای  $F_{\sigma}$ ،  $F_B$

<sup>۱</sup>Bouyancy Force

<sup>۲</sup>عدد اوتوس ( $Eo$ ) نسبت نیروی جاذبه به نیروی کشش سطحی تعریف می‌شود.

<sup>۳</sup>Eotvos Number

به ترتیب مربوط به فاز مایع (الکترولیت)، فاز گاز (هیدروژن) و سیالکلی است. باید به این نکته نیز توجه داشت که مجموع کسر حجمی ( $\alpha$ ) فازها برابر با ۱ است

$$\left( \sum_1^2 \alpha_i = 1 \right)$$

در معادله پیوستگی مربوط به هر فاز، جمله انتقال جرم از فاز مخالف نیز باید به معادله اضافه شود. بنابراین معادلات پیوستگی فاز مایع، فاز گاز و جریان کلی به صورت روابط (۹) و (۱۰) [۷،۸] نوشته می‌شوند. در این روابط نماد  $S$  مربوط به انتقال بین فازی است. به طور مثال  $(S_{Mass})_{l \rightarrow g}$  انتقال جرمی فاز مایع به گاز را نشان می‌دهد.

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) \quad (9)$$

$$= (S_{Mass})_{l \rightarrow g}$$

$$\sum_1^2 \alpha_i = 1 \quad (10)$$

در تحقیق حاضر از بخش واکنش‌ها و انتقال جرم بین فازها صرف نظر شده است. بنابراین بر اساس این فرض، در معادلات پیوستگی (۹) و (۱۰) مقادیر  $(S_{Mass})_{g \rightarrow l}$  و  $(S_{Mass})_{l \rightarrow g}$  برابر صفر است و انتقال جرمی بین فازها وجود ندارد. در معادله مومنتم نیز ضمن در نظر گرفتن کسر حجمی هر فاز و انتقال مومنتم بین فازها روابط (۱۱) و (۱۲) [۷،۸] به ترتیب برای فاز مایع، فاز گاز و جریان کلی تنظیم می‌شود.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l \vec{v}_l) &= -\nabla \cdot (\alpha_l p_l) \\ &\quad + \nabla \cdot (\alpha_l \mu_l \nabla \vec{v}_l) + \alpha_l \rho_l \vec{g} \\ &\quad + (S_{Momentum})_{g \rightarrow l} \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) &= -\nabla \cdot (\alpha_g p_g) \\ &\quad + \nabla \cdot (\alpha_g \mu_g \nabla \vec{v}_g) \\ &\quad + \alpha_g \rho_g \vec{g} \\ &\quad + (S_{Momentum})_{l \rightarrow g} \end{aligned} \quad (12)$$

طبق قانون سوم نیوتن، فاز گازی نیرویی برابر و در خلاف جهت نیروی وارده به خودش از طرف فاز مایع را به آن وارد می‌کند. این نیروها که در معادلات مومنتم هر فاز در نظر گرفته می‌شوند، نیروی درگ، نیروی لیفت، نیروی جرم مجازی، نیروی روغن کاری دیواره و نیروی

$$(F_D)_{l \rightarrow g} = -(F_D)_{g \rightarrow l} = \frac{1}{2} C_D \rho_l A_b |\vec{v}_r| \vec{v}_r \quad (16)$$

روش‌های مختلفی جهت مدل‌سازی و محاسبه نیروی درگ وجود دارد که تفاوت آن‌ها در نحوه محاسبه ضریب درگ ( $C_D$ ) می‌باشد [۱۰]. انتخاب مدل مناسب نیروی درگ بر اساس نوع جریان حاکم بر سیستم ضروری است. یکی از این مدل‌ها که مخصوص جریان‌های حبابی است، مدل گریس<sup>۱</sup> می‌باشد که با کمک اعداد بی‌بعد اتوس و مورتون<sup>۲</sup> (رابطه (۱۷) [۹])، سرعت نهایی حباب‌های کروی شکل را به دست آورده و در محاسبه ضریب درگ از آن استفاده می‌کند. سرعت نهایی حباب‌ها ( $v_{\infty}$ ) و ضریب درگ نیز به ترتیب از روابط (۱۸) [۹] و (۱۹) [۹] به دست آمده و در مدل گریس [۱۱] استفاده می‌شوند.

$$M = \frac{\mu_l^4 g \Delta \rho}{\rho_l^2 \sigma^3} \quad (17)$$

$$v_{\infty} = \frac{\mu_l}{\rho_l d} M^{-0.149} (J - 0.857) \quad (18)$$

$$J = 3.42 H^{0.441} \quad \text{for } H > 59.3 \quad (19)$$

$$H = \frac{4}{3} E_o M^{-0.149} \left( \frac{\mu_l}{9 \times 10^{-4}} \right)^{-0.14} \quad (20)$$

$$H = \frac{4}{3} E_o M^{-0.149} \left( \frac{\mu_l}{9 \times 10^{-4}} \right)^{-0.14} \quad (21)$$

نیروی لیفت، متقاطع با جهت جریان بوده و اصلی‌ترین مکانیسم فیزیکی در تعیین توزیع حباب‌ها در یک لوله عمودی می‌باشند. در جریان‌های بالارونده در یک لوله، حباب‌ها به طرفین جداره‌ها هل داده می‌شوند. نیروی لیفت با استفاده از رابطه (۲۱) [۱۲] محاسبه می‌شود. در این رابطه،  $C_L$  ضریب لیفت و توسط مدل‌های مختلف تعیین می‌شود.

$$(F_L)_{l \rightarrow g} = -(F_L)_{g \rightarrow l} = C_L \alpha_g \rho_l \vec{v}_r \nabla \vec{v}_l \quad (21)$$

ضریب لیفت نیز که وابسته به عدد رینولدز و اتوس می‌باشد، در روش‌های مختلف مدل‌سازی نیروی لیفت، تعیین می‌شود. در تحقیق حاضر از مدل تامیاما<sup>۳</sup> که برای جریان‌های حبابی بسیار مناسب می‌باشد، استفاده شده است. در این مدل، تغییر علامت نیروی لیفت به علت تغییر شکل حباب‌ها و اندازه آن‌ها در نظر گرفته می‌شود. این مدل

$d$  و  $\sigma$  به ترتیب نیروی شناوری، نیروی کشش سطحی، طول مشخصه، قطر حباب و ضریب کشش سطحی را نشان می‌دهند. طول مشخصه نیز در این رابطه قطر حباب در نظر گرفته شده است.

$$E_o = \frac{F_B}{F_\sigma} = \frac{g \Delta \rho L^3}{\sigma L} = \frac{g(\rho_l - \rho_g) d^2}{\sigma} \quad (14)$$

مدل‌های مختلفی برای محاسبه نیروی کشش سطحی با ضریب کشش سطحی بین دو فاز وجود دارد. یکی از این مدل‌ها، نیروی صفحه‌ای پیوسته می‌باشد که نرم‌افزار Ansys CFX نیز از این مدل استفاده می‌کند. این مدل با مشخص کردن فاز اولیه و ثانویه، مرز مشترک بین دو فاز را دقیقاً دنبال می‌کند. در این روش طول مشخصه در رابطه مربوط به نیروی کشش سطحی (مخرج کسر رابطه (۱۶))، خمیدگی سطح مشترک دو فاز در نظر گرفته می‌شود. با فرض اینکه  $A(x)$  یک تابع تک متغیره مشخص برای فصل مشترک دو فاز باشد، رابطه (۱۵) برای آن برقرار است. اگر این تابع کسر حجمی گاز هیدروژن باشد، مقدار آن در الکترولیت برابر صفر و در حباب برابر ۱ است؛ به این ترتیب مکانی که مقدار کسر حجمی گاز هیدروژن برابر با میانگین این دو یعنی عدد ۰/۵ باشد، مرز بین حباب هیدروژن و الکترولیت می‌باشد. [۱۰]

$$A(x) = \begin{cases} a_1 & \text{in Fluid 1} \\ a_2 & \text{in Fluid 2} \\ (a_1 + a_2)/2 & \text{at the interface} \end{cases} \quad (15)$$

اختلاف سرعت بین حباب گازی و مایع جریان دوازگی موجب درگ یا انتقال مومنتم میان فازها می‌شود. در این جریان سرعت حباب گازی، توسط مایع کاهش و مایع توسط حباب‌ها شتاب می‌گیرد. درگ میان ذرات فاز پخش شده (حباب گازی) و فاز پیوسته (مایع) به اندازه و شکل اجزای فاز پخش شده، رژیم جریان و ویژگی‌های مایع بستگی دارد. برای یک حباب، نیروی درگ به سرعت نسبی بین حباب و مایع بستگی دارد. ارتباط بین نیروی درگ و سرعت نسبی با استفاده از ضریب درگ به صورت رابطه (۱۶) برقرار می‌شود. در این رابطه نمادهای  $C_D$ ،  $A_b$  و  $\vec{v}_r$  به ترتیب ضریب درگ، مساحت سطح مقطع عرضی حباب ( $A_b = \pi d^2/4$ ) و بردار سرعت نسبی دو فاز ( $\vec{v}_r = \vec{v}_1 - \vec{v}_g$ )

<sup>۱</sup>Grace<sup>۲</sup>Morton Number<sup>۳</sup>Tomiya[۹] می‌باشند. ( $\vec{v}_1 - \vec{v}_g$ )

اتوس بهبود یافته با قرار دادن مقدار طول مشخصه بهبود یافته ( $d_H$ ) (رابطه (۲۳)) در رابطه (۲۴) به دست می‌آید [۹]. همچنین در این روابط، عدد رینولدز حساب از رابطه (۲۵) محاسبه می‌شود [۹].

$$C_L = \begin{cases} \min[0.288 \tanh(0.121 Re_b), f(Eo_d)] & Eo_d < 4 \\ f(Eo_d) = 0.00105 Eo_d^3 - 0.0159 Eo_d^2 - 0.204 Eo_d - 0.27 & 4 \leq Eo_d \leq 10 \\ -0.27 & Eo_d > 10 \end{cases} \quad (22)$$

$$Eo_d = \frac{g(\rho_l - \rho_g) d_H^2}{\sigma} \quad (23)$$

$$d_H = d(1 + 0.163 Eo^{0.757})^{\frac{1}{3}} \quad (24)$$

$$Re_b = \frac{\rho_l \bar{v}_r d}{\mu_l} \quad (25)$$

را شامل می‌شود که توسط محققان رابطه‌های مختلفی برای آن در نظر گرفته شده است. یکی از این مدل‌ها، رابطه اصلاح شده فرانک<sup>۱</sup> است که مقادیر ثابت موجود در این مدل ( $C_{WD}$ ،  $C_{WC}$  و  $p$ ) برای جریان‌های حبابی درون لوله‌های عمودی اعتبار سنجی شده است [۹].

ضریب روغن کاری دیواره در این مدل از رابطه (۲۹) به دست می‌آید. در این رابطه نمادهای  $Y_W$  و  $C_W$  به ترتیب فاصله مرکز جرم حباب تا دیواره و تابعی برحسب عدد اتوس را نشان می‌دهند. [۱۴]

$$(F_{WL})_{l \rightarrow g} = -(F_{WL})_{g \rightarrow l} = C_{WL} \alpha_g \rho_l \bar{v}_r^2 \quad (28)$$

$$C_{WL} = C_W(Eo) \cdot \max \left[ 0, \frac{1}{C_{WD}} \cdot \frac{1 - \frac{Y_W}{d C_{WC}}}{Y_W \cdot \left( \frac{Y_W}{d C_{WC}} \right)^{p-1}} \right] \quad (29)$$

$$C_{WC} = 10, C_{WD} = 6.8, p = 1.7 \quad (30)$$

$$C_W = \begin{cases} \exp(-0.933 Eo + 0.179) & \text{for } 1 \leq Eo \leq 5 \\ 0.007 Eo + 0.04 & \text{for } 5 < Eo \leq 33 \\ 0.179 & \text{for } Eo > 33 \end{cases}$$

آشفستگی جریان باعث پراکندگی اغتشاش حباب‌ها در آن می‌شود با توجه به مدل لوپزد برتودانو<sup>۲</sup> نیروی پخش اغتشاش به گرادیان کسر حجمی بستگی دارد. نیروی پخش اغتشاش از رابطه (۳۱) [۱۵] به دست آمده و در آن،  $C_{TD}$  ضریب پخش اغتشاش است که وابسته به عدد بی‌بعد استوکس بوده و برای رژیم جریان بیضوی و حباب‌های با اندازه متوسط بین ۰/۱ تا ۰/۵ در نظر گرفته می‌شود و برای

به عدد بی‌بعد اتوس وابسته بوده و اثرات نیروی کشش سطحی و جاذبه نیز در آن در نظر گرفته شده است. ضریب لیفت در مدل تامیاما از رابطه (۲۲) [۱۲] به دست می‌آید. در این رابطه نمادهای  $Eo_d$  و  $Re_b$  به ترتیب عدد اتوس بهبود یافته و عدد رینولدز حساب را نشان می‌دهند. عدد

نیروی جرم مجازی به علت اینرسی فاز پخش شده و سیال اطراف آن ایجاد می‌شود. وقتی حباب در جریان شتاب می‌گیرد، مقداری از سیال اطراف را نیز با خود حمل می‌کند. اثر سیال اطراف به صورت جرم مجازی تفسیر می‌شود. با این توضیحات این نیرو وابسته به شتاب نسبی بین فازها می‌باشد. نیروی جرم مجازی به کمک رابطه (۲۶) محاسبه می‌شود. در این رابطه نیز نماد  $C_{VM}$  ضریب جرم مجازی است که رابطه‌های مختلفی بر اساس کسر حجمی فاز گازی (حباب) برای محاسبه آن گزارش شده است. رابطه (۲۷) در تحقیق حاضر برای ضریب جرم مجازی در نظر گرفته شده است. [۱۳]

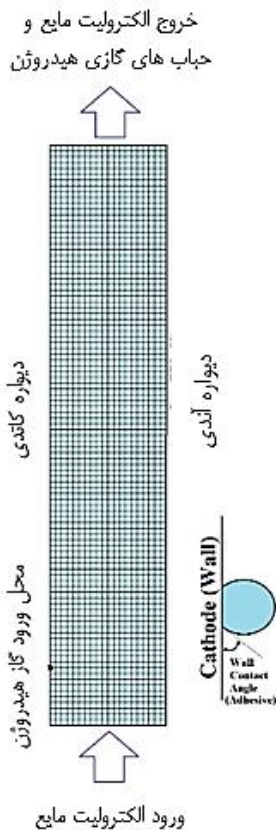
$$(F_{VM})_{l \rightarrow g} = -(F_{VM})_{g \rightarrow l} = \alpha_g \rho_l C_{VM} \left( \frac{\partial \bar{v}_g}{\partial t} + \bar{v}_g \cdot \nabla \bar{v}_g - \frac{\partial \bar{v}_l}{\partial t} + \bar{v}_l \cdot \nabla \bar{v}_l \right) \quad (26)$$

$$C_{VM} = \frac{\alpha_g (1 + 2\alpha_g)}{2(1 - \alpha_g)} \quad (27)$$

کشش سطحی مانع از نزدیکی بیش از حد حباب‌ها به جداره‌های مسیر جریان می‌شود. بر همین اساس، مدل‌سازی بر اساس نیروی جداره‌ای به نام نیروی روغن کاری دیواره که حباب‌ها را به سمت دور از جداره هل می‌دهد، انجام می‌شود. این نیرو که از رابطه (۲۸) قابل محاسبه می‌باشد، نیز یک ضریب روغن کاری دیواره ( $C_{WL}$ )

<sup>۱</sup>Frank

<sup>۲</sup>Lopez de Bertodano



شکل (۳) هندسه، شبکه بندی و شرایط مرزی مدل سازی عددی تولید و رهایش حباب گازی در جریان الکترولیت

موضوع دیگر اندازه شبکه در قسمت های مختلف سیستم می باشد که در شبکه بندی مدل های عددی با توجه به اهمیت و جزئیات محل، اندازه سلول های محاسباتی در قسمت های مختلف هندسه متفاوت است. در این مدل سازی حباب با کوچک ترین قطر در هر ناحیه از سلول باتری می تواند وجود داشته باشد؛ بنابراین تمام نواحی سیستم از اهمیت یکسان برخوردار بوده و اندازه شبکه تمام نواحی باید بتواند پایداری کوچک ترین حباب را تضمین کند. شبکه بندی این صفحه به صورت ساختار یافته و مربع شکل (شطرنجی) مطابق شکل (۳) انجام شده است. طبق مشاهدات تجربی مربوط به باتری های جریانی اکسایش-احیا روی-اکسید نقره [۳]، اندازه قطر کوچک ترین حباب در این مدل سازی ۰/۴ میلی متر در نظر گرفته شده است. به این ترتیب شبکه بندی مدل با مربع هایی یکسان با ضلع ۰/۱ میلی متر انجام شده است. به این ترتیب فاصله ۲ میلی متری بین مرز کاتد و آنود شامل ۲۰ قسمت و ارتفاع ۱۰ میلی متری آن ها شامل ۱۰۰ قسمت بوده و در مجموع این

حباب های کوچک تا مقدار ۵۰۰ بالا می رود. [۱۶]

$$(F_{TD})_{I \rightarrow g} = -(F_{TD})_{g \rightarrow I} \quad (31)$$

$$= C_{TD} \rho_I k_I \nabla \alpha_g$$

### ۳- هندسه، شبکه بندی، تنظیمات حل و شرایط مرزی مدل سازی اولیه برای تنظیم شرایط تولید حباب در جریان

در شکل (۱) (الف) هندسه و ابعاد یک سلول از باتری روی-اکسید نقره تشریح شده است. با توجه به این هندسه، کاتد و آنود دو صفحه با ابعاد ۷/۵ در ۱۱ سانتی متر مربع می باشند که با فاصله ۲ میلی متر از یکدیگر قرار گرفته و الکترولیت از این فاصله عبور می کند. حباب های هیدروژن بر سطح کاتد رشد کرده از آن جدا شده و در جریان الکترولیت قرار می گیرند. بنابراین در نمای دوبعدی یک صفحه با ابعاد ۲ میلی متر و ۱۱ سانتی متر دیده می شود که مرز سمت چپ کاتد و مرز سمت راست آنود است. در ابتدا، جهت کاهش منابع سخت افزاری و زمان حل، هندسه مدل سازی طبق شکل (۳)، با ابعاد ۲ میلی متر و ۱ سانتی متر در نظر گرفته شده است اما در ادامه این مدل سازی دو فاز و حبابی به ابعاد بزرگتر سلول تعمیم داده می شود.

شبکه بندی هندسه مدل عددی در جریان های حبابی و دو فازی بسیار وابسته به قطر حباب ها می باشد. شبکه باید به حدی باشد که کوچک ترین حباب موجود در جریان حداقل با تعداد کافی سلول محاسباتی درگیر باشد. به عبارتی دیگر سلول های محاسباتی باید از حباب ریزتر باشند تا دقیقاً بتوانند فصل مشترک بین حباب گازی و مایع را مدل کنند. به علاوه پایداری حباب پس از تشکیل با گذر زمان، وابستگی زیادی به اندازه شبکه دارد. چنانچه بعد از تشکیل کوچک ترین حباب، با گذر زمان، حباب در سیستم بدون هیچ دلیلی محو شود، نشان از کم بودن تعداد سلول ها جهت مدل سازی این اندازه حباب می دهد و باید شبکه بندی ریزتر و تعداد سلول های محاسباتی بیشتر شود. بنابراین مشخص کردن کوچک ترین قطر حباب در مدل سازی های جریان دو فازی حبابی امری لازم است. به این ترتیب در این مدل سازی حباب ها تا کمترین قطر شکسته و دنبال می شوند و با کوچک تر شدن قطر آن دیگر حباب نبوده و جزئی از فاز مایع در نظر گرفته می شود.

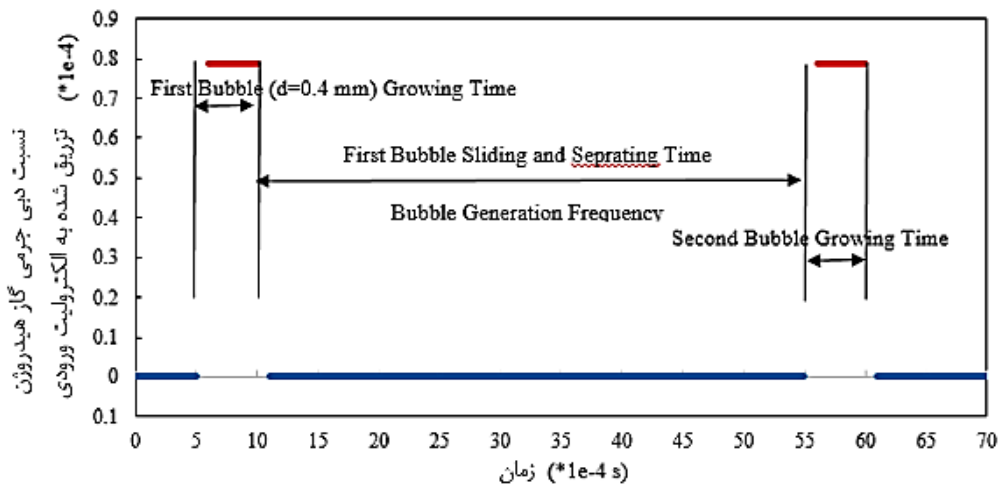
فرآیند تزریق حباب با قطر  $0/4$  میلی‌متر به جریان الکترولیت از سطح کاتد طبق نمودار پله‌ای شکل (۴) انجام شده است. رشد حباب اول و تزریق هیدروژن به جریان پس از گذشت ۵ گام زمانی، از گام زمانی ششم آغاز شده و طی ۵ گام زمانی بعد انجام می‌شود. جرم هر حباب از حاصل ضرب جرم هیدروژن تزریق شده در هر گام زمانی، در عدد ۵ بدست می‌آید.

صفحه با ۲۰۰۰ سلول محاسباتی جهت حل شبکه‌بندی شده است (شکل (۳)). خواص هر دو فاز الکترولیت (محلول آبی ۳۳ درصد هیدروکسید پتاسیم) و گاز هیدروژن باید به نرم‌افزار CFX وارد شود تا در معادلات از آن‌ها استفاده کند. علاوه بر خواص دو فاز، ضریب کشش سطحی بین آن‌ها نیز برای محاسبه نیروی کشش سطحی در نرم‌افزار نیاز است. به همین منظور، ضریب کشش سطحی بین محلول آبی ۳۳ درصد هیدروکسید پتاسیم و گاز هیدروژن  $0/0925$  نیوتن بر متر [۱۷] در نظر گرفته شده است. در این مدل سازی عددی، الکترولیت در نرم افزار به عنوان سیال اولیه و پیوسته و گاز هیدروژن به عنوان سیال ثانویه و گسسته با کمترین قطر حباب  $0/4$  میلی‌متر تنظیم شده است. جریان دو فازی به طور کاملاً غیر همگن در هر فاز حل شده است به این معنی که معادلات برای هر فاز به صورت جداگانه می‌شود. مدل‌های دو معادله‌ای  $k-\epsilon$  و معادله صفر فاز گسسته<sup>۱</sup> به ترتیب به عنوان مدل اغتشاشی برای فاز مایع الکترولیت و فاز گازی هیدروژن در نظر گرفته شده‌اند. در مرز ورودی فقط الکترولیت با دبی ۸۰ لیتر بر ساعت (برای یک سلول با مساحت ورودی ۲ در ۷۵ میلی‌متر که سرعت ورودی  $0/148$  متر بر ثانیه به دست می‌دهد) وارد می‌شود. در مرز خروج نیز فشار محیط تنظیم شده و از آن الکترولیت و گاز هیدروژن خارج می‌شود. دو مرز کنار آند و کاتد به عنوان دیوار در نظر گرفته شده‌اند. از آنجا که جهت جدایش حباب از سطح کاتد، تنظیم زاویه تماس آن با دیوار لازم است. زاویه تماس حباب با دیوار در شکل (۳) نشان داده شده است. بنابراین در مرز دیوار کاتد، زاویه ۳۰ درجه تنظیم شده است تا حباب از سطح دیوار جدا شود. در فاصله ۱ میلی‌متری از مرز ورودی، برای تزریق حباب هیدروژن در جریان، بر سطح کاتد، نقطه‌ای در نظر گرفته شده است.

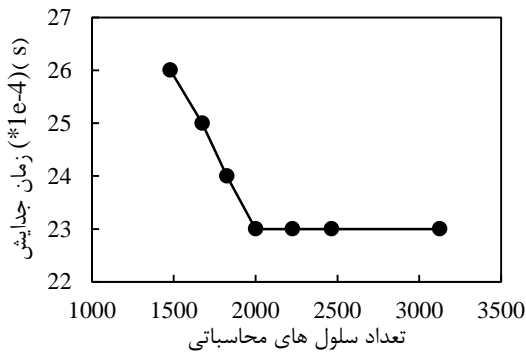
مدل سازی به صورت گذرا با گام زمانی  $0/0001$  ثانیه انجام شده و در زمان صفر در غیاب هیدروژن، تنها الکترولیت در سلول باتری از پایین به بالا جریان دارد. همان‌طور که پیش از این ذکر شد، در تحقیق حاضر تولید حباب به صورت تزریق هیدروژن از نقاطی بر سطح کاتد انجام شده و از تغییر فاز واکنش‌های درون باتری صرف‌نظر شده است. قطر حباب تولید شده به مقدار هیدروژن تزریقی و نسبت آن با دبی الکترولیت بستگی دارد. در تحقیق حاضر

<sup>1</sup>Dispersed Phase Zero Equation





شکل (۴) نمودار نسبت دبی جرمی گاز هیدروژن تزریق شده به الکترولیت ورودی به سلول بر حسب زمان



شکل (۵) نمودار زمان جدایش حباب از کاتد بر حسب تعداد سلول‌های محاسباتی جهت بررسی استقلال نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دو فاز از شبکه بندی

این نمودار نشان می‌دهد که تعداد ۲۰۰۰ شبکه با اندازه سلول محاسباتی ۰/۱ میلی‌متر برای مدل‌سازی حبابی به قطر ۰/۴ میلی‌متر مناسب می‌باشد زیرا با افزایش تعداد شبکه بیش از ۲۰۰۰ سلول محاسباتی، زمان برخاستن حباب از سطح کاتد تغییری نمی‌کند؛ بنابراین جهت کاهش زمان حل مدل عددی، همیشه کمترین تعداد شبکه با جواب صحیح (در این مدل سازی ۲۰۰۰ شبکه) انتخاب می‌شود.

شرط و عدد کورانت<sup>۱</sup> رابطه‌ای بین گام زمانی، مکانی و سرعت سیال در مدل‌سازی‌های عددی گذرا برقرار می‌کند. برقراری این شرط، جهت همگرایی حل معادله‌های دیفرانسیلی جزئی در روش عددی تفاضل محدود لازم است. طبق این شرط، عدد کورانت که حاصل تقسیم سرعت سیال

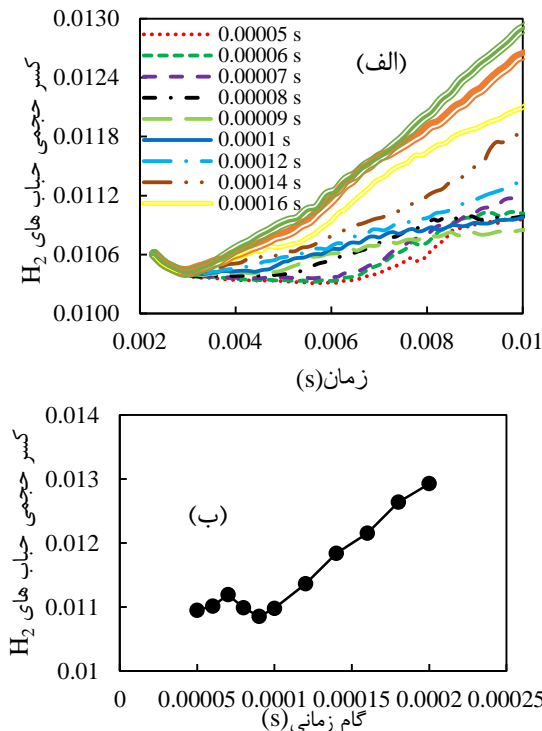
تولید حباب‌ها در واقعیت از تغییر فاز و واکنش شیمیایی الکترولیت حاصل می‌شوند؛ بنابراین سرعت و دمای هیدروژن تزریقی برابر با سرعت و دمای الکترولیت در نقطه تزریق در نظر گرفته شده است. ۵۰ گام زمانی برای فاصله بین تشکیل حباب اول و دوم، فقط برای نمایش واضح‌تر در نظر گرفته شده است و می‌تواند متفاوت باشد. به این ترتیب با تنظیم تصادفی برخی متغیرها مانند تعداد و مکان نقاط تزریق بر سطح کاتد، تعداد حباب‌های تولیدی از هر نقطه تزریق و فرکانس زمانی تولید حباب در هر نقطه تزریق می‌توان نرخ تولید حباب در سلول باتری را اعمال کرده، جریانی حبابی ایجاد کرده و تاثیر جداکننده‌ها بر این جریان را بررسی کرد.

#### ۴- بررسی استقلال نتایج از شبکه بندی و گام زمانی و صحت سنجی نتایج بررسی عددی جریان دوفازی الکترولیت و شبیه سازی حباب در آن

همان‌طور که اشاره شد، تعداد و اندازه شبکه‌ها تاثیر مهمی بر پایداری حباب بعد از تشکیل دارند. در نمودار شکل (۵)، ۷ شبکه بندی با اندازه و تعداد سلول محاسباتی متفاوت در نظر گرفته شده و زمان برخاستن حباب از سطح کاتد در هر کدام بررسی شده است.

<sup>۱</sup>Courant Number

تعریف شد که در آن چگالی و لزجت دینامیکی فاز مایع (الکترولیت)، سرعت نسبی فاز مایع (الکترولیت) و فاز گاز (حباب هیدروژن) و قطر حباب به عنوان طول مشخصه استفاده می‌شود.



شکل (۶) نمودار (الف) کسر حجمی حباب بر حسب زمان و (ب) کسر حجمی حباب در آخرین گام قبل از زمان ۰/۰۱ ثانیه بر حسب گام زمانی جهت بررسی استقلال نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دو فاز از گام زمانی

اکثر محققان مطالعات خود بر شکل حباب و وابستگی آن به سه عدد بی‌بعد رینولدز، اوتوس و مورتون را در قالب نمودار ارائه کرده‌اند که معروف‌ترین آن‌ها نمودار گریس [۱۱] است که به عنوان مرجع در مطالعات استفاده می‌شود. این نمودار در شکل (۷) نمایش داده شده است که محور افقی آن عدد اوتوس، محور عمودی آن عدد رینولدز حباب بوده و خطوط مورتون ثابت نیز در آن رسم شده است. با یافتن سه عدد بی‌بعد و محل قرارگیری در نمودار گریس، شکل حباب نیز از نمودار مشخص می‌شود. با توجه به خواص دو سیال محلول آبی ۳۳ درصد هیدروکسید پتاسیم و گاز هیدروژن، عدد مورتون ۱۲-۱۰ × ۲/۸۸ و لگاریتم آن ۱/۵- به دست می‌آید. خط مورتون ثابت مربوط به مدل‌سازی حاضر، در نمودار گریس شکل (۷) رسم شده و ۶ نقطه با قطر حباب و اوتوس متفاوت واقع بر این خط

(۷) و گام زمانی ( $\Delta t$ ) بر گام مکانی ( $\Delta x$ ) است، بهتر است کمتر از ۱ ( $C_{max}$ ) باشد (رابطه (۳۲)) [۱۸].

$$C = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq C_{max} = 1 \quad (32)$$

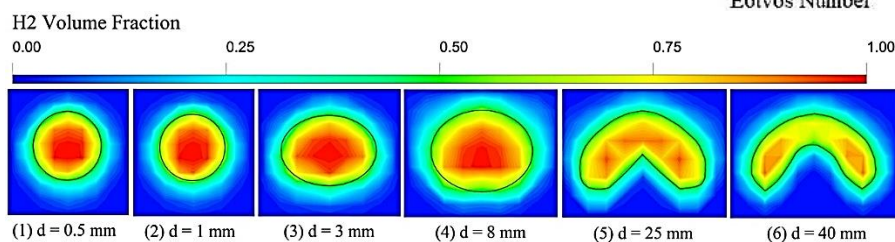
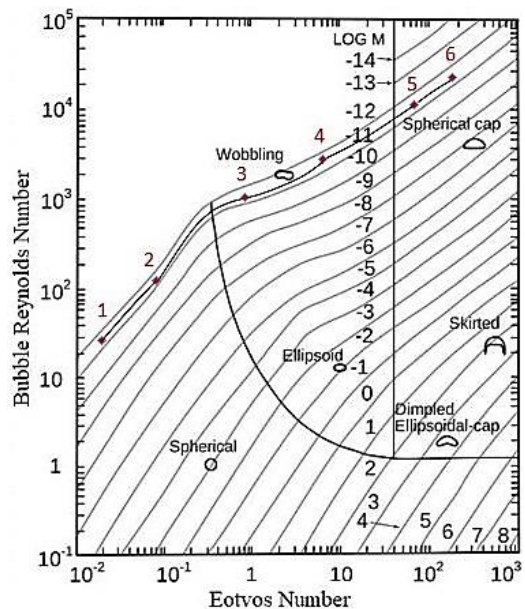
در نمودارهای شکل (۶) (الف)، ۱۱ گام زمانی متفاوت در نظر گرفته شده، عدد کورانت، نحوه افزایش کسر حجمی حباب (گاز هیدروژن) تا زمان ۰/۰۱ ثانیه و کسر حجمی حباب در آخرین گام قبل از ۰/۰۱ ثانیه بررسی شده است. با توجه به بالا آمدن حباب در مایع به علت چگالی کمتر، فشار مایع کاهش (به صورت خطی با کاهش ارتفاع)، حجم و قطر حباب افزایش می‌یابد. نمودار شکل ۶ (الف) نشان می‌دهد که با کاهش گام زمانی از مقدار ۰/۰۰۰۱ ثانیه، تغییر چشم‌گیری در روند افزایشی (شیب) کسر حجمی دیده نمی‌شود در حالی که با افزایش گام زمانی بیشتر از ۰/۰۰۰۱ ثانیه، تغییر محسوس‌تر است. جهت بررسی بهتر و دقیق‌تر، نمودار شکل (۶) (ب) که کسر حجمی حباب در آخرین گام قبل از ۰/۰۱ ثانیه بر حسب گام زمانی را نشان می‌دهد، رسم شده است. مطالعه این نمودار نیز نشان می‌دهد که با کاهش گام زمانی از ۰/۰۰۰۱ ثانیه، کسر حجمی حباب در آخرین گام تقریباً ثابت است.

با توجه به اینکه پایان و زمان کل حل ۰/۰۱ ثانیه (۱۰۰ گام با گام زمانی ۰/۰۰۰۱ ثانیه) در نظر گرفته شده است، در برخی از گام‌های زمانی (مانند ۰/۰۰۰۱ و ۰/۰۰۰۵)، آخرین گام دقیقاً در زمان ۰/۰۱ ثانیه و در برخی گام‌های زمانی دیگر (مانند ۰/۰۰۰۰۷) آخرین گام در زمان‌های نزدیک به آن رخ می‌دهند؛ بنابراین علت نوسانی بودن و یکسان نبودن کسر حجمی حباب در آخرین گام با گام‌های زمانی کمتر ۰/۰۰۰۱ ثانیه در نمودار شکل (۶) (ب)، یکسان نبودن زمان پایان و آخرین گام در آن هاست. به این ترتیب گام زمانی ۰/۰۰۰۱ ثانیه که عدد کورانت مناسبی نیز دارد، در این مدل‌سازی انتخاب شده است.

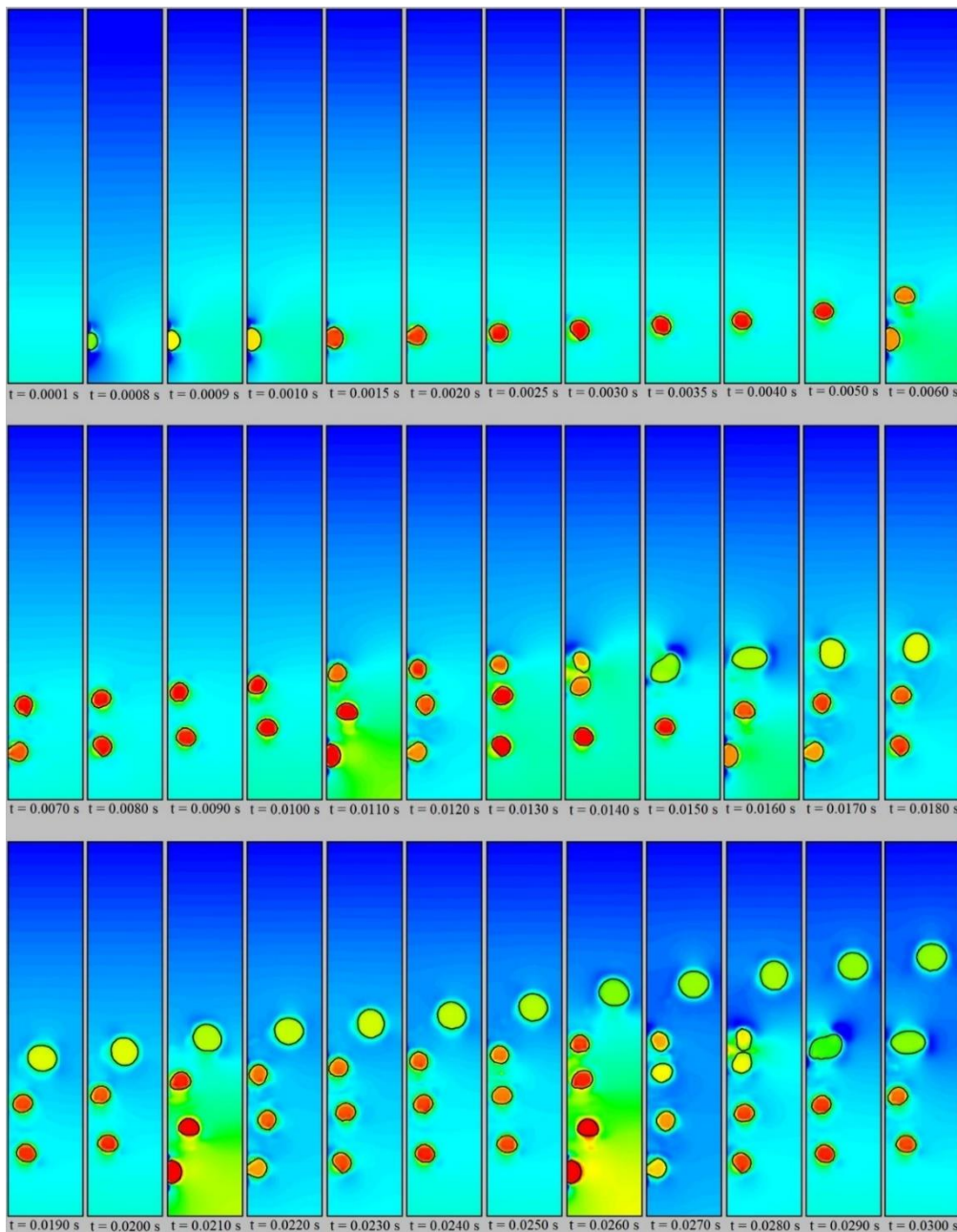
شکل حباب در جریان‌ها متفاوت و وابسته به ویژگی‌های جریان و دو سیال می‌باشد. مطالعات آزمایشگاهی زیادی بر شکل حباب و رابطه آن با سه عدد بی‌بعد رینولدز حباب، اوتوس و مورتون انجام شده است. همانطور که پیشتر اشاره شد، عدد مورتون وابسته به خواص دو فاز جریان بوده و با تغییر قطر حباب و سرعت جریان، بدون تغییر و ثابت است. عدد اوتوس اما با تغییر قطر حباب متفاوت است. عدد رینولدز حباب نیز طبق رابطه (۲۷)

شکل (۷) نمودار گریس و شکل حباب‌ها در جریان [۱۱] همراه با ۶ نقطه انتخاب شده در این نمودار جهت صحت‌سنجی نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دو فاز

انتخاب شده است. در مدل‌سازی عددی حاضر با ۶ قطر انجام شده، رینولدز و شکل حباب با نتایج نمودار تجربی گریس در شکل (۷) مقایسه شده تا صحت نتایج مدل‌سازی عددی بررسی شود. همچنین در شکل (۸) تصویر حباب در ۶ قطر متفاوت نمایش داده شده است.



شکل (۸) کانتور کسر حجمی گاز هیدروژن و شکل حباب\* در ۶ قطر متفاوت در نظر گرفته شده جهت صحت‌سنجی نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دو فاز (\*مرز حباب و الکترولیت با توجه به روش نیروی صفحه‌ای پیوسته برای مدل‌سازی کشش سطحی بین دو فاز در مکانی است که کسر حجمی گاز هیدروژن مقدار ۰/۵ دارد).



شکل (۹) نمایش نحوه رشد و جدایش حباب هیدروژن از سطح کاتد همراه با توزیع فشار در مدل عددی مذکور

حباب گازی و ترکیب دو حباب را نیز نشان می‌دهد. افزایش قطر حباب موجب کاهش فشار درون آن می‌شود. مهم‌ترین اهداف از توسعه مدل با ابعاد و زمان کوچک در تحقیق حاضر، بررسی مدل دو فاز و حبابی، صحت‌سنجی آن، استقلال نتایج از شبکه و گام زمانی و به خصوص کاهش نیاز سخت‌افزاری و زمان حل بود که در بخش‌های قبل انجام شد. در بخش بعد، این مدل‌سازی تعمیم داده شده، هندسه باتری با جدایش تعداد حباب بیشتر از سطح

بیشتر نحوه مدل‌سازی عددی جدایش حباب از سطح کاتد در یک هندسه کوچک تشریح شد. نتایج این مدل‌سازی در شکل (۹) همراه با کانتور فشار نشان داده شده است. طبق نمودار شکل (۴) در پنج گام زمانی، گاز هیدروژن از نقطه‌ای بر سطح کاتد به جریان تزریق شده، حبابی با قطر  $0.4$  میلی‌متر تشکیل، در ادامه از سطح کاتد جدا شده و در مسیر جریان قرار می‌گیرد. پس از  $50$  گام زمانی، حباب بعدی رشد می‌کند. شکل (۹)، فشار بیشتر در

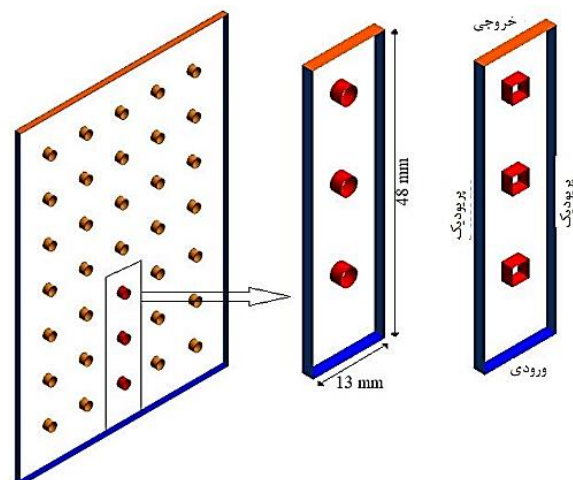
با وجود ساده‌سازی مدل جهت کاهش نیاز سخت‌افزاری، حل با یک سیستم قدرتمند شامل ۶۴ هسته فیزیکی پردازشی با سرعت  $2/2$  G گیگاهرتز و حافظه ۱۲۸ گیگابایت انجام شده است. با چنین سیستم قدرتمندی هر کدام از دو مدل‌ها طی بیش از ۱۴ روز حل شده‌اند. به بیان دیگر حل معادلات  $0/26$  ثانیه از باتری در حدود ۱۴ روز انجام شده است. در زمان صفر، حبابی در سیستم وجود ندارد و به تدریج با گذشت زمان حباب‌ها تشکیل و وارد جریان می‌شوند. بنابراین با گذشت زمان، تعداد معادلات در هر گام زمانی بیشتر و سرعت حل کندتر می‌شود؛ به طوری که  $0/1$  ثانیه ابتدایی باتری تنها در ۲۴ ساعت اول حل شده و حل  $0/16$  ثانیه پس از آن بیش از یک هفته زمان گرفته است. در بخش قبل، مدل‌سازی بر اساس تک حبابی که بر سطح کاتد رشد کرده و از آن جدا می‌شود، انجام شده است؛ اما در واقعیت باتری تعداد زیادی حباب در زمان‌های مختلف بر نقاط مختلف سطح کاتد رشد می‌کند. همان‌طور که پیشتر اشاره شد، در تحقیق حاضر، تولید حباب در باتری که ناشی از واکنش‌های شیمیایی است، از حل معادلات حاکم بر واکنش‌ها به دست نیامده و حباب‌ها به جریان تزریق می‌شوند تا جریان حبابی مشابه را تشکیل دهند. تزریق حباب نیازمند به کدنویسی در نرم افزار CFX است که در شرایط حباب با تعداد بالا، نوشتن این کد به صورت دستی مشکل است. بنابراین در تحقیق حاضر به کمک زبان برنامه‌نویسی C-Sharp (C#)، این کد برای نرم‌افزار CFX آماده شده است به طوری که در زمان‌ها و نقاط تصادفی، حباب‌ها را تزریق کرده و نرخ تولید حباب مورد نیاز در باتری را تامین می‌کند.

در شکل (۱۱) و (۱۲)، توزیع و حرکت حباب‌ها در سلول باتری با جداکننده‌های به ترتیب دایروی و مربعی شکل از زمان صفر تا  $0/26$  ثانیه طی چند تصویر از زاویه دید کاتد (هر  $0/05$  ثانیه یک تصویر) نمایش داده شده است. با دقت در این تصاویر مشخص است که الگوی تزریق حباب بر سطح کاتد در هر دو حالت (دایره و مربع) کاملاً یکسان بوده و در زمان صفر حبابی در جریان وجود ندارد. با گذشت زمان حباب‌ها افزایش و وارد جریان می‌شوند. به منظور بررسی احتمال ترکیب شدن حباب‌ها در هر یک از حالات، سرنوشت دو حباب واقع در پشت جداکننده‌ها دنبال

کاتد مدل‌سازی می‌شود. بنابراین بررسی و بحث بیشتر بر نتایج جریان الکترولیت دوفاز نیز در بخش بعد ارائه می‌شود.

## ۵- هندسه، شبکه بندی و ارائه نتایج جریان حبابی در سلول باتری با جداکننده

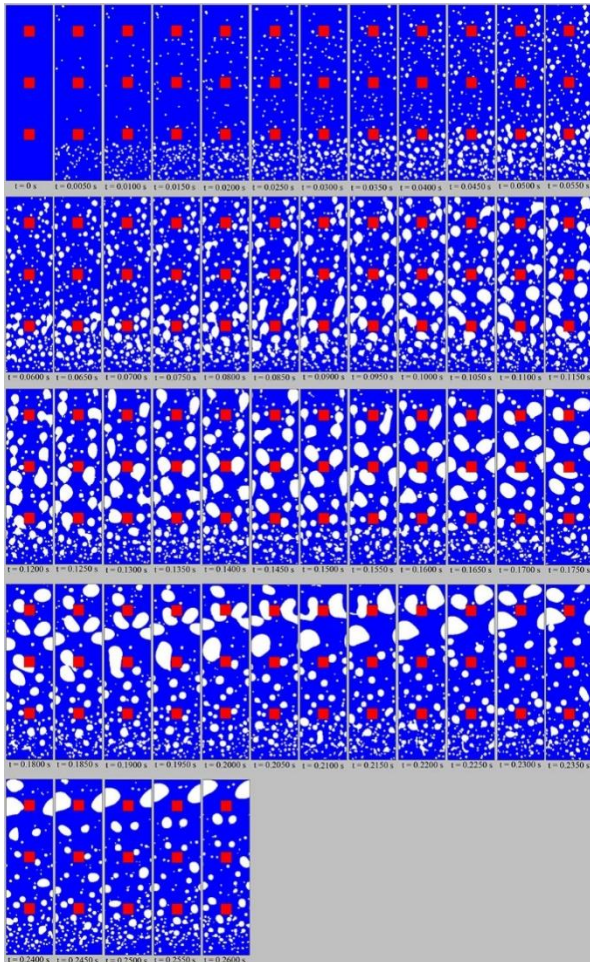
مدل‌سازی جریان دوفازی الکترولیت، یکی از سنگین‌ترین مدل‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی به شمار می‌رود که نیازمند سخت‌افزار قدرتمند برای اجرا می‌باشد؛ زیرا معادلات اصلی علاوه بر محلول KOH، باید برای گاز هیدروژن نیز حل شوند. همچنین این حل فقط با دقت دو برابر جواب‌های صحیح داشته و الزاماً باید گذرا باشد. بنابراین با توجه به کمبود منابع سخت‌افزاری و زمان، از تمام فاصله بین دو الکتروود ارائه شده در شکل (۱)، دو قطعه ۱۳ در ۴۸ میلی‌متر مربعی از سلول باتری، یکی با جداکننده‌های سطح مقطع دایروی شکل و دیگری با سطح مقطع مربعی شکل مطابق شکل (۱۰) انتخاب شده تا مدل‌سازی در آن انجام شود. با توجه به اینکه پیشتر شبکه مناسب برای حباب با قطر  $0/4$  میلی‌متر، مربع‌هایی با اضلاع  $0/1$  تعیین شد، در این مدل‌سازی سه‌بعدی نیز از شبکه بندی شش‌وجهی با اضلاع  $0/1$  میلی‌متر استفاده شده است. تعداد شبکه در قطعه ۱۳ در ۴۸ میلی‌متری سلول با سطح مقطع دایره و مربع شکل به ترتیب  $1207300$  و  $1194700$  می‌باشد. گام زمانی حل نیز طبق بررسی استقلال نتایج از گام زمانی انجام شده، مقدار  $0/0001$  ثانیه در نظر گرفته شده و کل زمان حل  $0/26$  ثانیه است.



شکل (۱۰) نمایی از هندسه و شرایط مرزی مدل‌سازی حبابی در سلول باتری با جداکننده



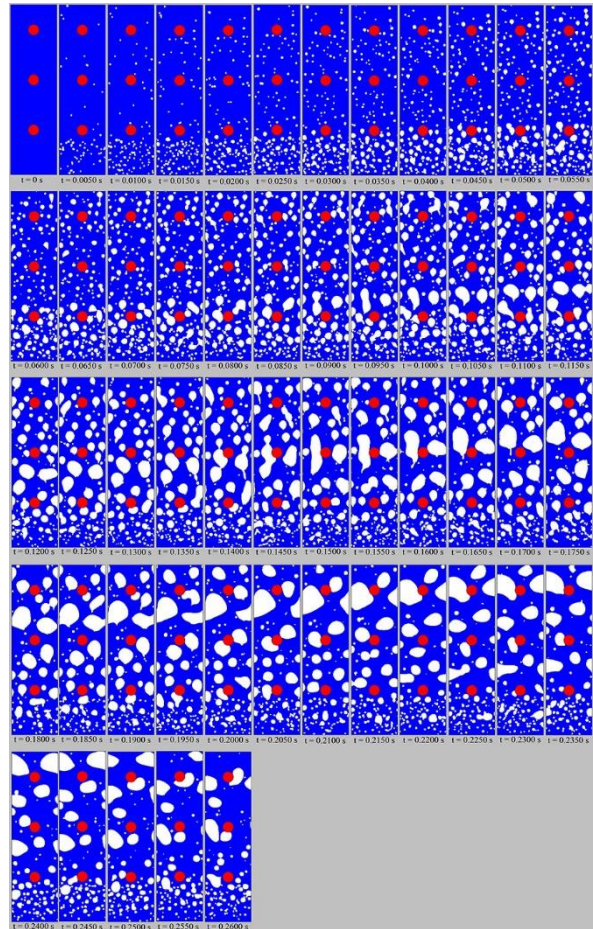
احتمال به هم پیوستن حباب‌های هیدروژن در سلول با جداکننده مربع بیشتر از دایره است.



شکل (۱۲) توزیع و حرکت حباب‌ها در باتری با جداکننده مربع شکلاز زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از دید کاتد

در شکل (۱۳) و (۱۴)، زاویه دید تغییر کرده و توزیع و حرکت حباب‌ها از دید جانبی به ترتیب برای جداکننده دایره و مربع ارائه شده است. در این زاویه دید حرکت حباب‌ها و جداسدن آن‌ها از سطح کاتد نمایش بهتری دارد.

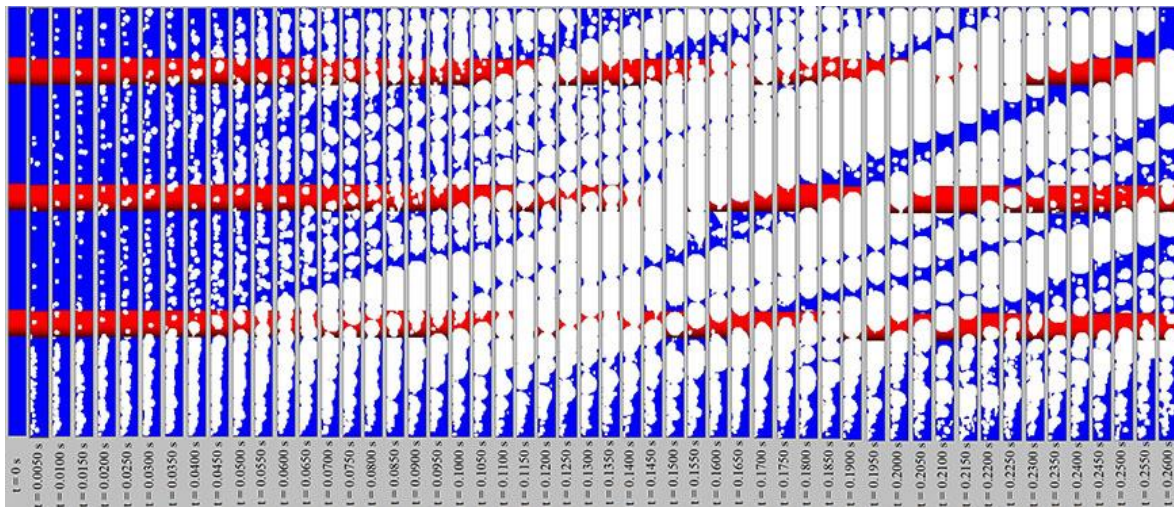
شده و در تصاویر با دایره سیاه رنگ و خط‌چین وضعیت آن نشان داده شده است.



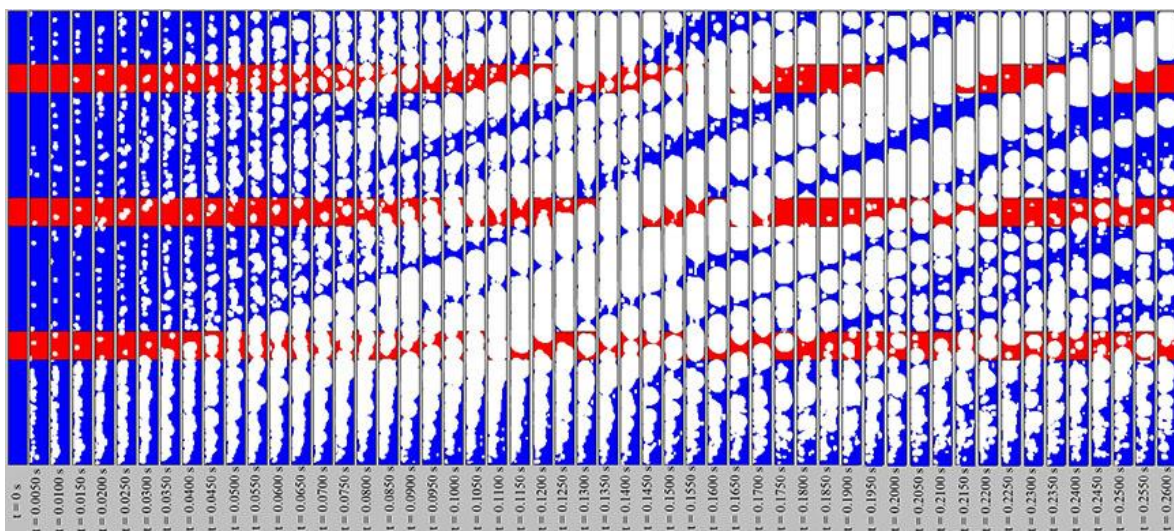
شکل (۱۱) توزیع و حرکت حباب‌ها در باتری با جداکننده دایره شکلاز زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از زاویه دید کاتد

با توجه به شکل‌ها و دنبال کردن حباب‌ها (مشخص شده با دایره مشکی و خط‌چین در شکل) می‌توان نتیجه گرفت که حباب‌ها زمان بیشتری پشت جداکننده با شکل سطح مقطع مربع طی کرده تا از آن عبور کند؛ یا به عبارتی دیگر جداکننده با سطح مقطع دایره شکل اجازه عبور راحت‌تر به حباب‌ها را می‌دهد. این تاخیر در جداکننده‌های مربع احتمال رسیدن دیگر حباب‌ها و ترکیب شدن را بیشتر می‌کند؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که





شکل (۱۳) توزیع و حرکت حبابها در باتری با جداکننده های دایروی شکل از زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از دید جانبی

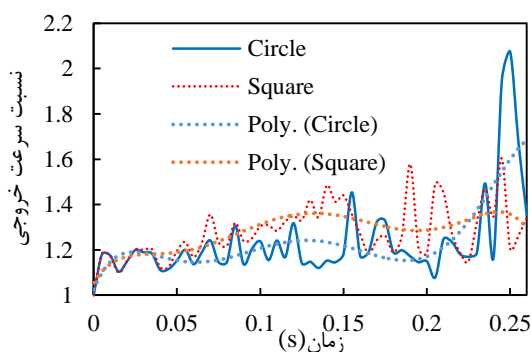


شکل (۱۴) توزیع و حرکت حبابها در باتری با جداکننده های مربعی شکل از زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از دید جانبی

همان طور که پیش از این نیز ذکر شد با توجه به متفاوت بودن شکل هندسی سطح مقطع جداکننده ها، معیار طراحی آن ها قطر هیدرولیکی برابر (۳ میلی متر) در نظر گرفته شده است. بنابراین در دو سلول حل شده در این قسمت، قطر هیدرولیکی جداکننده های دایروی و مربعی شکل برابر با ۳ میلی متر اما مساحت اشغالی از سطوح کاتد و آند توسط جداکننده مربع شکل بیشتر از دایره می باشد. به این ترتیب سطح فعال واکنش در زمان صفر در حالت جداکننده دایره شکل بیشتر است. این امر در نمودار شکل (۱۵) الف قابل مشاهده می باشد. در این نمودار تغییرات نسبت سطح فعال واکنش بر سطح کل آند و کاتد (بدون

حضور جداکننده ها)، در گذر زمان را نشان می دهند. در این نمودار سطح فعال واکنش بخشی از سطح کاتد و آند است که توسط الکترولیت پوشانده شده و امکان انجام واکنش وجود دارد؛ لذا سطح غیر فعال نیز (بدون در نظر گرفتن سطح اشغال شده توسط جداکننده ها) سطحی است که پوشیده از حباب های هیدروژن بوده و مانع از دسترسی الکترولیت به کاتد یا آند می شود. نمودار تغییرات نسبت سطح غیر فعال واکنش بر سطح کل آند و کاتد (بدون حضور جداکننده ها) در گذر زمان نیز در شکل (۱۵) ب) رسم شده است. بررسی نمودارهای اصلی و خط روند در این دو شکل نشان می دهد که در ابتدا سطح فعال واکنش حالت

با توجه به توضیحات ذکر شده در دو پاراگراف اخیر، احتمال ترکیب حباب‌ها در سلول با جداکننده های مربعی شکل بیشتر است و این احتمال در این مدل سازی باعث بیشتر شدن سطح فعال واکنش نسبت به حالت دایروی شده است. این نتایج نشان می دهد که اگر اکثر حباب‌ها بر سطح کاتد و آند قرار داشته باشند، ترکیب شدن حباب‌ها باعث افزایش سطح فعال واکنش و بهبود عملکرد باتری خواهد شد. البته اگر اکثر حباب‌ها درون جریان هم بوده و با یکدیگر ترکیب شوند، افزایش قطر آن‌ها موجب اشغال سطح کاتد و آند، انسداد جریان و کاهش سطح فعال واکنش می‌شود. در مدل سازی دوفاز نیز نمودار تغییرات نسبت سرعت الکترولیت خروجی از باتری به سرعت اولیه حسب زمان در شکل ۱۶ رسم شده است. این نمودار نیز نشان می‌دهد که سرعت جریان الکترولیت در سلول با جداکننده مربع بیشتر از جداکننده دایره است. قابل ذکر است که افزایش سرعت الکترولیت، افزایش نرخ واکنش و بهبود عملکرد باتری را در پی دارد.

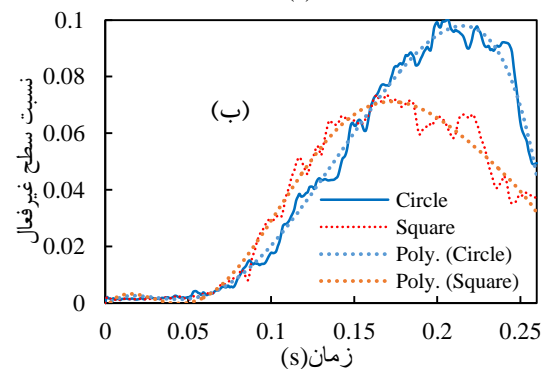
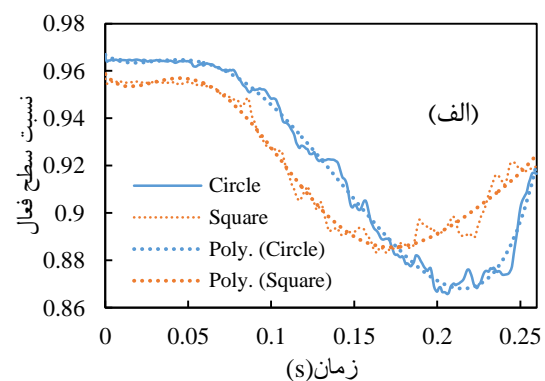


شکل (۱۶) نمودار نسبت سرعت خروجی به سرعت اولیه الکترولیت بر حسب زمان

#### ۶- نتیجه گیری

با توجه به زیاد بودن وزن و حجم این باتری جریانی روی-اکسید نقره، در طراحی سلول های این باتری، سعی بر نزدیک کردن کاتد و آند به یکدیگر است که البته این موضوع، خطر اتصال کوتاه داخلی درون باتری را افزایش می‌دهد؛ به همین دلیل، جهت جلوگیری از این اتفاق، از جداکننده‌هایی بین دو الکتروود استفاده شده تا آن‌ها را به حد کافی از یکدیگر دور نگه دارد. همچنین یکی از فرآورده‌های واکنش‌های الکتروشیمیایی در این باتری، گاز هیدروژن است که به صورت حباب از سطح کاتد به جریان الکترولیت اضافه شده و جریان دوفازی تشکیل می‌دهد. با

جداکننده دایره شکل بیشتر و سپس با گذر زمان کمتر از حالت مربع شکل می‌شود؛ یا به تفسیری دیگر سطح غیر فعال واکنش (حباب‌های هیدروژن) در ابتدا در حالت جداکننده مربع شکل بیشتر و سپس با گذر زمان کمتر از حالت دایره شکل می‌شود. با گذر زمان و ترکیب شدن بیشتر حباب‌ها سطح فعال واکنش افزایش و سطح غیر فعال کاهش می‌یابد. علت این اتفاق با ذکر مثالی واضح خواهد شد. فرض می‌شود که دو حباب کروی هر دو به قطر ۲ بر سطح کاتد حرکت کرده و به یکدیگر نزدیک شوند. مجموع سطح اشغالی دو حباب از سطح کاتد برابر با مساحت دو دایره تصویر شده با قطر ۲ می‌باشد. حال اگر دو حباب به یکدیگر رسیده و تبدیل به یک حباب بزرگتر شوند، بر اساس پایستگی حجم، حبابی جدید با قطر ۲/۵ ایجاد می‌کنند. حباب حاصل سطحی دایره شکل با قطر ۲/۵ از سطح کاتد اشغال کرده که کمتر از سطح اشغال شده پیش از ترکیب حباب‌ها می‌باشد. بنابراین چنانچه حباب‌ها هر دو از سطح کاتد بر همان سطح کاتد با یکدیگر ترکیب شوند، سطح اشغالی از کاتد توسط آن‌ها یا به عبارتی دیگر سطح غیر فعال واکنش کاهش می‌یابد.



شکل (۱۵) نمودار نسبت (الف) سطح فعال و (ب) سطح غیر فعال به مساحت کل کاتد و آند (بدون جداکننده) بر حسب زمان



- Hydrodynamicsof Gas Bubbles in Two Phase Electrochemical Systems”, Journal of The Electrochemical Society, vol ,13, 164, pp. E448-E459 , 2017. <https://doi.org/10.1149/2.1161713jes>
5. Aldas, K., Pehlivanoglu, N., Mat, M. D., “Numerical and experimental investigation of two-phaseflow in an electrochemical cell”, international journal of hydrogen energy , vol. 33 , pp. 3668 – 367, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2008.04.047>
  6. Hreiza, R., Abdelouahed, L., Fünfschilling, D., Lopicque, F., “Electrogenerated bubbles inducedconvection in narrow vertical cells: A review”, chemical engineering research and design, vol. 100, pp . 281-268, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2015.05.035>
  7. Mat, M. D., Aldas, K., Veziroolu, T.N., “A two phase model for electrochemical systems”, Full Cell Technologies, pp. 271-277, 2005. DOI : [https://doi.org/10.1007/1-4020-3498-9\\_30](https://doi.org/10.1007/1-4020-3498-9_30).
  8. Ravichandra, S., Zhang, H., Zappi, G., Bourgeois, R., “Modeling Bubble Flow and Current Density Distribution in an Alkaline Electrolysis Cell”, Journal of Computational Multiphase Flows, pp. 341-349, 2009. DOI : <https://doi.org/10.1260%2F1757-482X.1.4.341>.
  9. Esmailpour, K., “A comprehensive Guide to Ansys CFX (Advanced)”, Dibagaran Publisher, 2014. ISBN: 978-600-124-348-6 (in Persion)
  10. Brackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach, C., “A Continuum Method for Modeling Surface Tension”, Journal of Computational Physics, 100, pp. 335-354, 1992. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(92\)90240-Y](https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90240-Y).
  11. Clift, R., Grace, J. R., Weber, M. E., “Bubbles, Drops, and Particles”, 1978.
  12. Tomiyama, A., Tamai, H., Zun, I., Hosokawa, S., “Transverse migration of single bubbles in simple

دو فازی و حبابی شدن جریان، تاثیر این جداکننده‌ها بر هیدرودینامیک جریان دوفازی و حباب‌های هیدروژن نیز حائز اهمیت است. ترکیب این حباب‌ها می‌تواند موجب کاهش سطح فعال واکنش و انسداد در مسیر جریان الکترولیت شود. بنابراین در مقاله حاضر، اثر شکل جداکننده‌های بین آند و کاتد در باتری جریان‌ی روی-اکسید نقره بر نحوه تشکیل حباب‌های گازی در جریان دوفازی الکترولیت و اثر آن بر روی کاهش سطح فعال الکتروشیمیایی (فصل مشترک الکتروود و الکترولیت) بررسی شده است. در مدل سازی عددی الکترولیت دوفازی انجام شده در این مقاله، برای یک سل با دو شکل متفاوت برای جداکننده‌ها (دایروی و مربعی شکل) به خوبی نشان داده شده است که سطح مقطع دایروی شکل جداکننده‌ها (در شرایط یکسان قطر هیدرودینامیکی)، برتری‌ها بر شکل مربعی آن دارد. بطوریکه احتمال ترکیب شدن حباب‌ها در سلول با جداکننده مربع بیشتر از دایره می‌باشد. این امر از دو جهت مثبت و منفی در این مقاله بررسی شده است. بطور خلاصه، اگر ترکیب شدن حباب‌ها روی سطح الکتروودها انجام شود (دو حباب روی سطح الکتروود قرار داشته و روی سطح آن نیز با یکدیگر ترکیب شود)، سطح فعال واکنش افزایش یافته، این اتفاق مثبت بوده و باعث افزایش نرخ واکنش می‌شود. اما اگر ترکیب شدن حباب‌ها درون جریان الکترولیت (بدون تماس با الکتروودها) انجام شود، بزرگتر شدن قطر آن‌ها احتمال محصور بخشی از الکتروودها، کاهش سطح فعال واکنش و انسداد جریان را بیشتر می‌کند که اتفاقی منفی است.

#### ۷- مراجع

1. Thomas B. Reddy, “Linden's Handbook of Batteries”, Fourth Edition, Los Angeles, United States, 2011.
2. Chen, R., Kim, S., Chang, Z., “Redox Flow Batteries: Fundamentals and Application”, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.68752>.
3. Anderson, G. E., Middletown, R.I, Al-AgO Primary Battery, United States Patent, 1975.
4. Taqieddin, A., Nazari, R., Rajic, L., Alshwabkeh, A., “Review—Physicochemical

- shear flows”, *Chemical Engineering Science*, 57, pp. 1849 – 1858, 2002. DOI:[https://doi.org/10.1016/S0009-2509\(02\)00085-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2509(02)00085-4).
13. Paladino, E.E., Maliska, C.R., “Virtual mass in accelerated bubbly flows”, *SINMEC - Computational Fluid Dynamics Laboratory, Federal University of Santa Catarina, Florianopolis/SC – Brazil - CEP: 88040-900*, 2003.
14. Frank, T., Zwart, P.J., Krepper, E., Prasser, H.M., Lucas, D., “Validation of CFD models for mono- and polydisperse air–water two-phase flows in pipes”, *Nuclear Engineering and Design*, 238, pp. 647–659, 2008. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2007.02.056>.
15. Lahey Jr, R.T., Lopez de Bertodano, M., Jones Jr, O.C., “Phase distribution in complex geometry conduits”, *Nuclear Engineering and Design*, 141, pp. 177-201, 1993. DOI:[https://doi.org/10.1016/00295493\(93\)90101-E](https://doi.org/10.1016/00295493(93)90101-E).
16. Burns, A. D., Frank, T., Hamill, I., Shi, J., “The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows”, *5th International Conference on Multiphase Flow, Japan* , pp. 392-398, 2004.
17. Knewstubb, P. F., Suoden, T. M., “Surface Tension of Aqueous Solutions of Pottassium Hydroxide, *Nature*”, *Department of Physical Chemistry, University of Cambridge*, 196 , pp. 1312-1313, 1962.
18. Courant, R., Friedrichs, K., Lewyt, H., “On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics”, *IBM Journal*, pp. 215-234, 1967. DOI:<https://doi.org/10.1147/rd.112.0215>