

3D Modeling of the Electrolyte Bubble Flow in the Distance Between two Electrodes of a Flow Battery by Considering Different Spacers

Nahidi, S.¹ Behroozizade, E.²

Imam Hossein University, Tehran, Iran

Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

(Received: 2022/05/30 ; revised: 2023/01/05 ; Accepted: 2023/01/17 ; published: 2023/03/02)

DOR: <https://dorl.net/dor/20.1001.1.23223278.1401.11.2.10.4>

ABSTRACT

In Zn-Ag₂O 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-Ag₂O Flow Battery, Spacers, Electrochemical Active Surface, 3D Modeling, Two-phase Flow, Hydrogen Bubble

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^۲

سعید ناهیدی^{۱*}

دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

دانشگاه جامع امام حسین (ع)، تهران، ایران

(دریافت: ۱۴۰۱/۰۳/۰۹، بازنگری: ۱۴۰۱/۱۰/۱۵، پذیرش: ۱۴۰۱/۱۰/۲۷، انتشار: ۱۴۰۱/۱۲/۱۱)

چکیده

در باتری های جریانی Zn-Ag₂O 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 به صورت حباب از سطح کاتد به جریان الکترولیت وارد شده و جریان دوفازی تشکیل می گردد و می تواند در فرایندهای دشوار 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 جداکننده 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

۱- استادیار (نویسنده پاسخگو): Kpsnahidi@yahoo.com

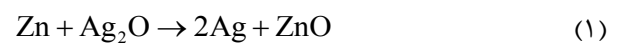
۲- کارشناسی ارشد: Eh.elbehroozzi@gmail.com

فهرست علائم و اختصارات

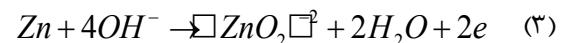
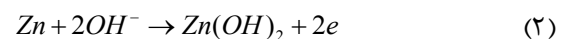
A	مساحت، m^2
E	مدول الاستیسیته، N/m^2
ρ	چگالی، kg/m^3
f	سیال
*	شرایط مرجع

۱- مقدمه

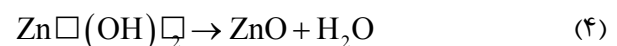
سیستم باتری روی (Zn)-اکسید نقره (Ag₂O) (روی / الکترولیت قلیایی / اکسید نقره) در میان سیستم‌های محلول آبی مزایای متعددی از جمله ظرفیت بالا، ولتاژ تخلیه ثابت و حفظ ظرفیت ذخیره‌سازی خوب را دارا می‌باشد. هر سل باتری روی - اکسید نقره در یک ولتاژ ثابت، به طور معمول بین ۱/۵ تا ۱/۶ ولت، در هر دو نرخ بالا و پایین 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:



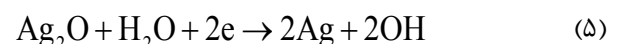
نظر به اینکه اکسایش روی در طول تخلیه این باتری، یک پدیده پیچیده است، خلاصه واکنش‌های آن به صورت زیر می‌تواند بیان گردد:



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



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

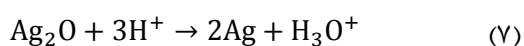
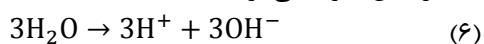


الکترولیت مورد استفاده در سلول‌های روی-اکسید نقره، محلول‌های آبی هیدروکسید پتاسیم (KOH) با غلظت ۲۰ تا ۴۵ درصد هستند. یک مانع فیزیکی برای جدا کردن آند روی و کاتد نقره از یکدیگر در سلول‌ها لازم است. خرابی این مانع منجر به اتصال کوتاه در سلول و از کار افتادن آن می‌شود. در

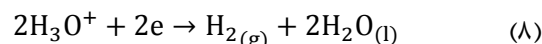
باتری جریان‌ی روی-اکسید نقره، از جداکننده‌هایی به صورت عمودی بین الکترودهای آند و کاتد استفاده می‌نمایند تا هم از اتصال کوتاه جلوگیری می‌کنند و هم انتقال یون بین دو الکترود با سهولت بیشتری انجام گیرد [۱-۳]. با توجه به شکل (۱) (الف)، در باتری‌های جریان‌ی روی - اکسید نقره، مواد الکترولیت درون باتری محبوس نشده (ساکن نیستند) و طی گردش در مدار بسته پس از تولید توان در باتری، از محفظه اصلی باتری خارج شده و پس از خنک‌کاری (ناشی از واکنش‌های گرمازا 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 آنجاکه 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 به‌عنوان مانعی در مسیر جریان الکترولیت قرار دارند و بر هیدرودینامیک آن تأثیرگذار می‌باشند. از طرفی چون یکی از فرآورده‌های واکنش‌های درون این باتری، گاز هیدروژن بوده و به‌صورت حباب درون جریان الکترولیت ظاهر می‌شود، جداکننده‌ها به‌خصوص شکل سطح مقطع آن‌ها، در این جریان حبابی بر قطر حباب‌ها، انسداد جریان و سطح فعال واکنش تأثیرگذار می‌باشند.

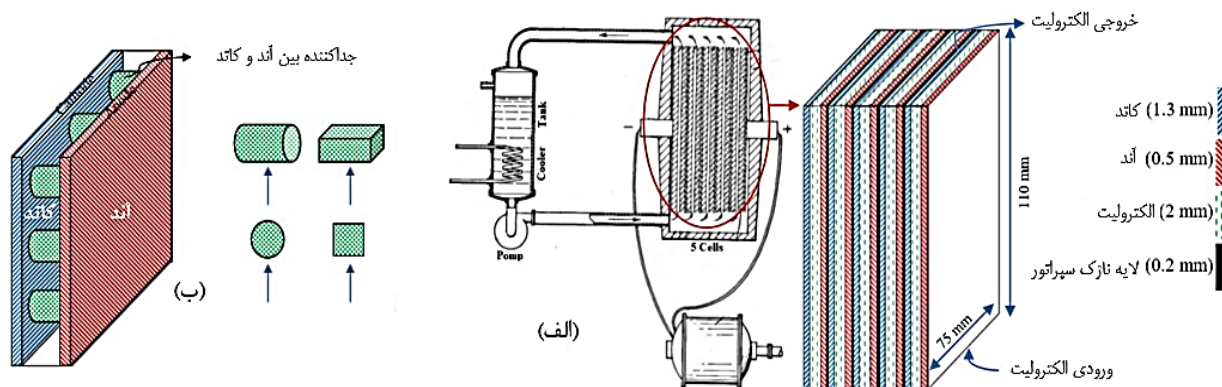
در این قسمت لازم است اشاره شود که حضور حباب‌های گازی هیدروژن در باتری روی - اکسید نقره به‌عنوان یکی از فرآورده‌های واکنش‌های الکتروشیمیایی در بخش واکنش‌های مربوط به کاتد اکسید نقره قابل تفسیر است. به‌طور خلاصه، چنانچه زیر واکنش‌های این واکنش در نظر گرفته شوند، اکسید نقره ابتدا با هیدروژن مثبت واکنش داده، نقره و هیدرونیوم (H^+) یا کاتیون آبی را حاصل می‌شود. این کاتیون آبی سپس در واکنش با الکترون، آب و گاز هیدروژن را تولید می‌کند (رابطه (۸)). طوریکه حضور حباب‌های هیدروژن در الکترولیت KOH، جریان‌ی دوفاز تشکیل داده و بر پیچیدگی عملکرد این باتری می‌افزاید.



جداکننده‌ها در جریان الکترولیت باتری جریانی، به‌عنوان یک مانع مؤثر در مسیر حرکت آن و بر ترکیب، شکسته شدن و قطر حباب‌ها تأثیرگذار است، در این مقاله تلاش شده است تا به‌صورت عددی اثر انواع شکل سطح مقطع آنها بر روی پارامترهای دینامیکی حباب‌های گازی و تغییر سطح فعال واکنش‌های الکتروشیمیایی مطالعه گردد. لازم به ذکر است که این موضوع تاکنون در مطالعات انجام شده در زمینه باتری‌های 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.



لازم به ذکر است که حضور حباب‌های گازی در بسیاری از سیستم‌های الکتروشیمیایی دارای الکترولیت مایع همچون سیستم‌های تولید هیدروژن، پیل‌های سوختی و... نیز وجود دارد و محققان زیادی بر روی افزایش بهره‌وری این سیستم‌ها مطالعه و تلاش نموده‌اند [۴-۶]. به اعتقاد ایشان، حضور این حباب‌ها بر روی سطوح الکترودی و رهاسدن آن‌ها در الکترولیت، اغلب باعث کاهش اختلال در فرایندهای الکتروشیمیایی و در نتیجه کاهش بازدهی این سیستم‌ها می‌گردد، لذا در طراحی این سیستم باید کوشید تا پارامترهای دینامیک حباب‌های گازی (قطر، سرعت و فرکانس تولید حباب‌ها و...) به‌طور مناسب کنترل گردد. از آنجاکه حضور



شکل (۱): (الف) اجزای تشکیل‌دهنده 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

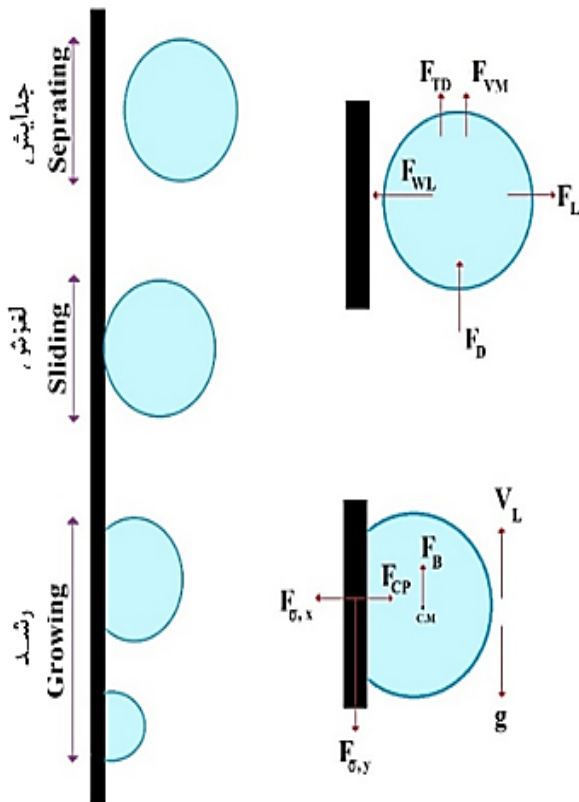
می‌تواند جریان دوفازی الکترولیت در سلول باتری را به‌درستی مدل کند. لذا در تحقیق حاضر از این مدل استفاده شده است. در روش مدل‌سازی اویلر - اویلر در جریان‌های دوفاز معادلات پیوستگی، مومنتم برای هر دوفاز حل می‌شوند؛ با این تفاوت که کسر حجمی فازها در محاسبه خواص هر فاز تأثیرگذار است. برخی خواص مانند چگالی و لزجت از میانگین‌گیری حجمی به دست می‌آیند. بنابراین هر معادله به سه شکل مختلف (برای فاز مایع، برای فاز گاز و برای جریان کلی) ارائه می‌شود. زیر نمادهای l ، g و 0 به ترتیب مربوط به فاز مایع (الکترولیت)، فاز گاز (هیدروژن) و سیال کلی است. باید به این نکته نیز توجه داشت که مجموع کسر حجمی (α) فازها برابر

$$\sum_1^2 \alpha_i = 1 \quad \text{با } ۱ \text{ است}$$

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

برای مدل‌سازی جریان‌های دوفاز، دو روش اصلی اویلر - اویلر و اویلر - لاگرانژ وجود دارد. در روش اویلر - اویلر معادلات پیوستگی، برای کلیه فازهای موجود در میدان حل به‌صورت فاز پیوسته در نظر گرفته شده و حل می‌شود. بنابراین در این روش اجزا مختلف فاز پخش شده بر یکدیگر تأثیرگذار هستند و حباب‌ها در جریان می‌توانند با یکدیگر ترکیب شده و حباب بزرگ‌تر تشکیل دهند یا به دو حباب کوچک‌تر شکسته شوند. اما در روش اویلر - لاگرانژ تنها مسیر اجزا یا ذرات فاز پخش شده به‌صورت لاگرانژی دنبال شده و بر یکدیگر تأثیرگذار نیستند. بنابراین به دلیل تأثیرگذاری اجزای پخش شده یا حباب‌ها در جریان دوفازی الکترولیت سلول بر یکدیگر و کسر حجمی زیاد حباب‌ها، تنها مدل اویلر - اویلر

این شکل علاوه بر نیروهای درگ و غیر درگ نیروی شناوری^۱ ناشی از اختلاف چگالی دوفاز، 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 بی بعد اوتوس^{۳۲} (رابطه (۱۴) [۹]) در نیروهای درگ و غیر درگ تأثیرگذار می‌باشند. در این رابطه نمادهای F_B ، F_{σ} ، L ، d و σ 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.

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

مدل‌های مختلفی برای محاسبه نیروی کشش سطحی با ضریب کشش سطحی بین دوفاز وجود دارد. یکی از این مدل‌ها، نیروی صفحه‌ای پیوسته می‌باشد که نرم‌افزار Ansys

1-Bouyancy Force

۲- عدد اوتوس (Eo) نسبت نیروی جاذبه به نیروی کشش سطحی تعریف می‌شود.

3-Eotvos Number

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.

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = (S_{Mass})_{l \rightarrow g} \quad (9)$$

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

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.

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

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

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

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

در شکل (۲) مراحل رشد، لغزش و جدایش حباب هیدروژن از سطح کاتد و نیروهای وارد بر حباب نشان داده شده است. در

مورتون^۲ (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_{∞}) و ضریب درگ نیز به ترتیب از روابط (۱۸) [۹] و (۱۹) [۹] به دست آمده و در مدل گریس [۱۱] استفاده می‌شوند.

$$M = \frac{\mu_1^4 g \Delta \rho}{\rho_1^2 \sigma^3} \quad (17)$$

$$v_{\infty} = \frac{\mu_1}{\rho_1 d} M^{-0.149} (J - 0.857) \quad (18)$$

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

$$H = \frac{4}{3} E_o M^{-0.149} \left(\frac{\mu_1}{9 \times 10^{-4}} \right)^{-0.14} \quad (20)$$

$$H = \frac{4}{3} E_o M^{-0.149} \left(\frac{\mu_1}{9 \times 10^{-4}} \right)^{-0.14} \quad (21)$$

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.

$$(F_L)_{I \rightarrow g} = -(F_L)_{g \rightarrow I} = C_L \alpha_g \rho_1 \vec{v}_r \vec{v}_1 \quad (21)$$

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^۳ 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 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 Re_b و E_o_d به ترتیب عدد اتوس بهبود یافته و عدد رینولدز حباب را نشان می‌دهند. عدد 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 حباب از رابطه (۲۵) محاسبه می‌شود [۹]

CFX نیز از این مدل استفاده می‌کند. این مدل با مشخص کردن فاز اولیه و ثانویه، مرز مشترک بین دوفاز را دقیقاً دنبال می‌کند. در این روش طول مشخصه در رابطه مربوط به نیروی کشش سطحی (مخرج کسر رابطه (۱۶))، خمیدگی سطح مشترک دوفاز در نظر گرفته می‌شود. با فرض اینکه $A(x)$ یک تابع تک‌متغیره مشخص برای فصل مشترک دوفاز 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 با 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 دوفازی 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) به‌اندازه 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 به‌صورت رابطه (۱۶) برقرار می‌شود. در این رابطه نمادهای A_b ، C_D و \vec{v}_r به ترتیب ضریب درگ، مساحت سطح مقطع عرضی حباب ($A_b = \pi d^2/4$) و بردار سرعت نسبی دوفاز

$$(\vec{v}_r = \vec{v}_1 - \vec{v}_g) \text{ می‌باشند. [۹]}$$

$$(F_D)_{I \rightarrow g} = -(F_D)_{g \rightarrow I} = \frac{1}{2} C_D \rho_1 A_b |\vec{v}_r| \vec{v}_r \quad (16)$$

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^۱ می‌باشد که با کمک اعداد بی‌بعد اتوس و

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

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

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

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

جرم حباب تا دیواره و تابعی برحسب عدد اتوس را نشان می‌دهند. [۱۴]

$$(F_{WL})_{l \rightarrow g} = -(F_{WL})_{g \rightarrow l} \quad (28)$$

$$= C_{WL} \alpha_g \rho_l \bar{v}_r^2$$

$$C_{WL} \quad (29)$$

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

$$C_{WC} = 10, C_{WD} = 6.8, p = 1.7$$

$$C_W = \begin{cases} \exp(-0.933 Eo + 0.179) & \text{for } 1 \leq \\ 0.007 Eo + 0.04 & \text{for } 5 < \\ 0.179 & \text{for } Eo \end{cases} \quad (30)$$

آشفته‌گی جریان باعث پراکندگی اغتشاش حباب‌ها در آن می‌شود با توجه به مدل لوپزد برتودانو^۲ 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 بی بعد استوکس بوده و برای رژیم جریان بیضوی و حباب‌های با اندازه متوسط بین ۰/۱ تا ۰/۵ در نظر گرفته می‌شود و برای حباب‌های کوچک تا مقدار ۵۰۰ بالا می‌رود. [۱۶]

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

$$= C_{TD} \rho_l k_l \nabla \alpha_g$$

۳- هندسه، شبکه‌بندی، 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 آند دو صفحه با ابعاد ۷/۵ در ۱۱ سانتی‌متر مربع می‌باشند که با فاصله ۲ میلی‌متر از یکدیگر قرار گرفته و الکترولیت از این فاصله عبور می‌کند. حباب‌های هیدروژن بر سطح کاتد رشد

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].

$$(F_{VM})_{l \rightarrow g} = -(F_{VM})_{g \rightarrow l} \quad (26)$$

$$= \alpha_g \rho_l C_{VM} \left(\frac{\partial \bar{v}_g}{\partial t} + \bar{v}_g \cdot \nabla \bar{v}_g - \frac{\partial \bar{v}_l}{\partial t} + \bar{v}_l \cdot \nabla \bar{v}_l \right)$$

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

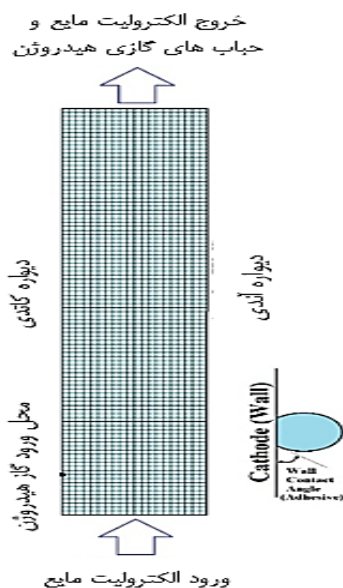
کشش سطحی مانع از نزدیکی بیش از حد حباب‌ها به جداره‌های مسیر جریان می‌شود. بر همین اساس، مدل سازی بر اساس نیروی جداره‌ای به نام نیروی روغن کاری دیواره که حباب‌ها را به سمت دور از جداره هل می‌دهد، انجام می‌شود. این نیرو که از رابطه (۲۸) قابل محاسبه می‌باشد، نیز یک ضریب روغن کاری دیوار (C_{WL}) را شامل می‌شود که توسط محققان رابطه‌های مختلفی برای آن در نظر گرفته شده است. یکی از این مدل‌ها، رابطه اصلاح شده فرانک^۱ 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

موضوع دیگر اندازه شبکه در قسمت‌های مختلف سیستم می‌باشد که در شبکه‌بندی مدل‌های عددی با توجه به اهمیت و جزئیات محل، اندازه سلول‌های محاسباتی در قسمت‌های مختلف هندسه متفاوت است. در این مدل‌سازی حباب با کوچک‌ترین قطر در هر ناحیه از سلول باتری می‌تواند وجود داشته باشد؛ بنابراین تمام نواحی سیستم از اهمیت یکسان برخوردار بوده و اندازه شبکه تمام نواحی باید بتواند پایداری کوچک‌ترین حباب را تضمین کند. شبکه‌بندی این صفحه به صورت ساختاریافته و مربع‌شکل (شطرنجی) مطابق شکل (۳) انجام شده است. طبق مشاهدات تجربی مربوط به باتری‌های جریان‌ی اکسایش - احیا روی - اکسید نقره [۳] اندازه قطر کوچک‌ترین حباب در این مدل‌سازی ۰/۴ میلی‌متر در نظر گرفته شده است. به این ترتیب شبکه‌بندی مدل با مربع‌هایی یکسان با ضلع ۰/۱ میلی‌متر انجام شده است. به این ترتیب فاصله ۲ میلی‌متری بین مرز کاتد و آنده شامل ۲۰ قسمت و ارتفاع ۱۰ میلی‌متری آن‌ها شامل ۱۰۰ قسمت بوده و در مجموع این صفحه با ۲۰۰۰ سلول محاسباتی جهت حل شبکه‌بندی شده است (شکل ۳). خواص هر دوفاز 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 دوفاز، 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 ۰/۰۹۲۵ نیوتن بر متر [۱۷] در نظر گرفته شده است. در این مدل‌سازی عددی، الکترولیت در نرم‌افزار به‌عنوان سیال اولیه و پیوسته و گاز هیدروژن به‌عنوان سیال ثانویه و گسسته با کمترین قطر حباب ۰/۴ میلی‌متر تنظیم شده است. جریان دوفازی به‌طور کاملاً غیرهمگن در هر فاز حل شده است به این معنی که معادلات برای هر فاز به‌صورت جداگانه می‌شود. مدل‌های دو معادله‌ای $k-\epsilon$ و معادله صفر فاز گسسته ۱ به ترتیب به‌عنوان 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 ۰/۱۴۸ 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

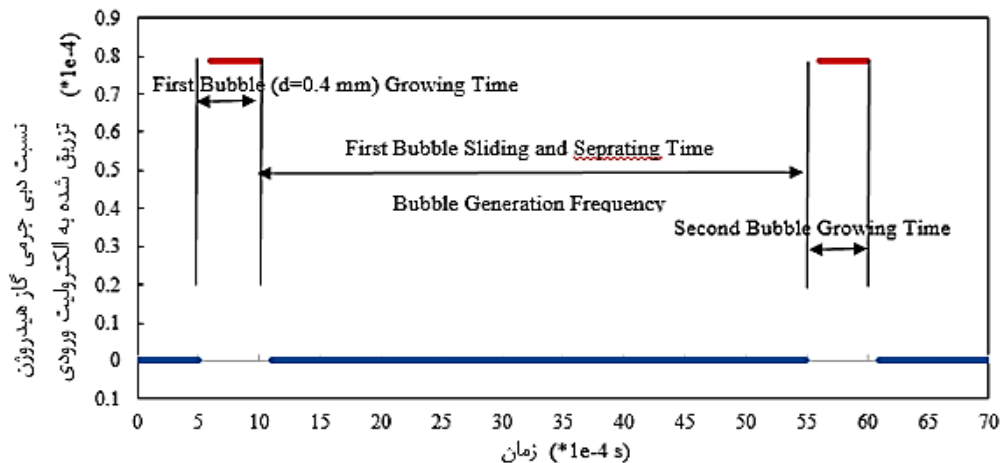
کرده از آن جدا شده و در جریان الکترولیت قرار می‌گیرند. بنابراین در نمای دوفازی یک صفحه با ابعاد ۲ میلی‌متر و ۱۱ سانتی‌متر دیده می‌شود که مرز سمت چپ کاتد و مرز سمت راست آنده است. در ابتدا، جهت کاهش منابع سخت‌افزاری و زمان حل، هندسه مدل‌سازی طبق شکل (۳)، با ابعاد ۲ میلی‌متر و ۱ سانتی‌متر در نظر گرفته شده است؛ اما در ادامه این مدل‌سازی دوفاز و حبابی به ابعاد بزرگ‌تر سلول تعمیم داده می‌شود.

شبکه‌بندی هندسه مدل عددی در جریان‌های حبابی و دوفازی بسیار وابسته به قطر حباب‌ها می‌باشد. شبکه باید به حدی باشد که کوچک‌ترین حباب موجود در جریان حداقل با تعداد کافی سلول محاسباتی درگیر باشد. به عبارتی دیگر سلول‌های محاسباتی باید از حباب ریزتر باشند تا دقیقاً بتوانند فصل مشترک بین حباب گازی و مایع را مدل کنند. به‌علاوه پایداری حباب پس از تشکیل با گذر زمان، وابستگی زیادی به اندازه شبکه دارد. چنانچه بعد از تشکیل کوچک‌ترین حباب، با گذر زمان، حباب در سیستم بدون هیچ دلیلی محو شود، نشان از کمبود تعداد سلول‌ها جهت مدل‌سازی این اندازه حباب می‌دهد و باید شبکه‌بندی ریزتر و تعداد سلول‌های محاسباتی بیشتر شود. بنابراین مشخص کردن کوچک‌ترین قطر حباب در مدل‌سازی‌های جریان دوفازی حبابی امری لازم است. به این ترتیب در این مدل‌سازی حباب‌ها تا کمترین قطر شکسته و دنبال می‌شوند و با کوچک‌تر شدن قطر آن دیگر حباب نبوده و جزئی از فاز مایع در نظر گرفته می‌شود.



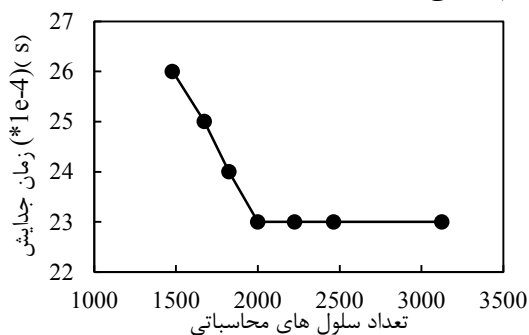
شکل (۳): هندسه، شبکه‌بندی و شرایط مرزی مدل‌سازی عددی تولید و رهایش حباب گازی در جریان الکترولیت

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 فرایند 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 حاصل‌ضرب جرم هیدروژن تزریق شده در هر گام زمانی، در عدد ۵ به دست می‌آید.



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

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



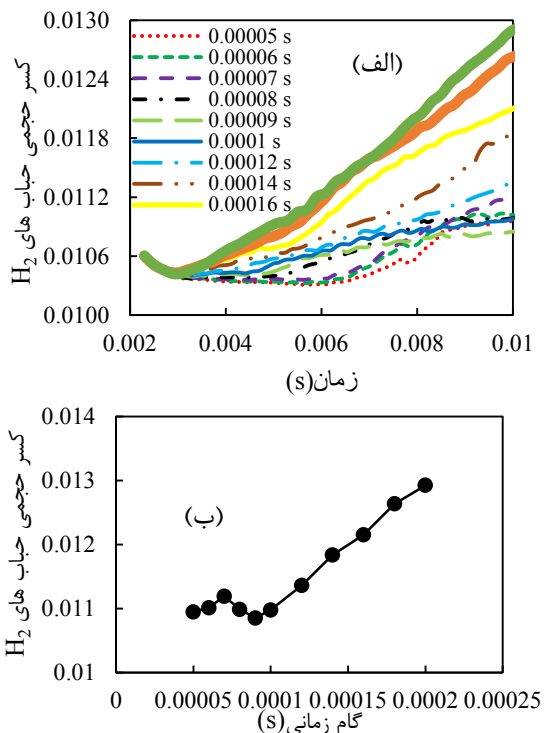
شکل (۵): نمودار زمان جدایش حباب از کاتد بر حسب تعداد سلول‌های محاسباتی جهت بررسی استقلال نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دوفاز از شبکه‌بندی

کنار آند و کاتد به‌عنوان دیوار در نظر گرفته شده‌اند. از آنجاکه 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 30° 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. مدل‌سازی به‌صورت گذرا با گام زمانی 0.0001 ثانیه انجام شده و در زمان صفر در غیاب هیدروژن، تنها الکترولیت در سلول باتری از پایین‌به‌بالا جریان دارد. همان‌طور که پیش از نیز ذکر شد، در تحقیق حاضر تولید حباب به‌صورت تزریق

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 تأثیر جداکننده‌ها بر این جریان را بررسی کرد.

۴- بررسی استقلال نتایج از شبکه‌بندی و گام زمانی و صحت‌سنجی نتایج بررسی عددی جریان دوفازی الکترولیت و شبیه‌سازی حباب در آن

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 مدل سازی 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 بی بعد رینولدز حباب، اوتوس و مورتون انجام شده است. همان‌طور که پیش‌تر اشاره شد، عدد مورتون وابسته به خواص دوفاز 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) 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 به‌عنوان 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 مدل سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دوفاز از گام زمانی اکثر محققان مطالعات خود بر شکل حباب و وابستگی آن به سه عدد بی بعد رینولدز، اوتوس و مورتون را در قالب نمودار ارائه کرده‌اند که معروف‌ترین آن‌ها نمودار گریس [۱۱] است که

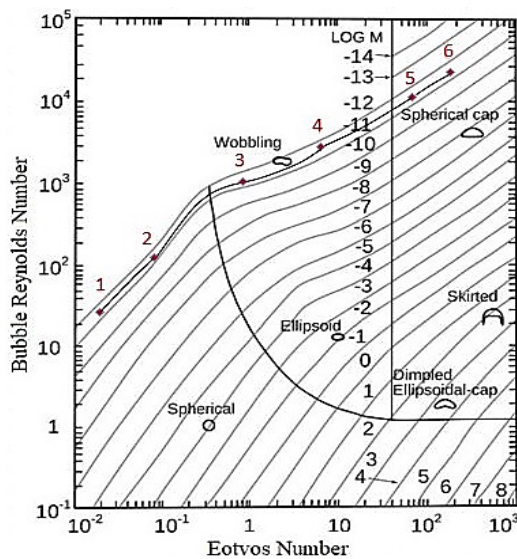
این نمودار نشان می‌دهد که تعداد ۲۰۰۰ شبکه با اندازه سلول محاسباتی ۰/۱ میلی‌متر برای مدل سازی حیابی به قطر ۰/۴ میلی‌متر مناسب می‌باشد؛ زیرا با افزایش تعداد شبکه بیش از ۲۰۰۰ سلول محاسباتی، زمان برخاستن حباب از سطح کاتد تغییری نمی‌کند؛ بنابراین جهت کاهش زمان حل مدل عددی، همیشه کمترین تعداد شبکه با جواب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

شرط و عدد کورانت ۱ رابطه‌ای بین گام زمانی، مکانی و سرعت سیال در مدل سازی‌های 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 (u) و گام زمانی (Δt) بر گام مکانی (Δx) است، بهتر است کمتر از ۱ (C_{max}) باشد (رابطه (۳۲)) [۱۸].

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

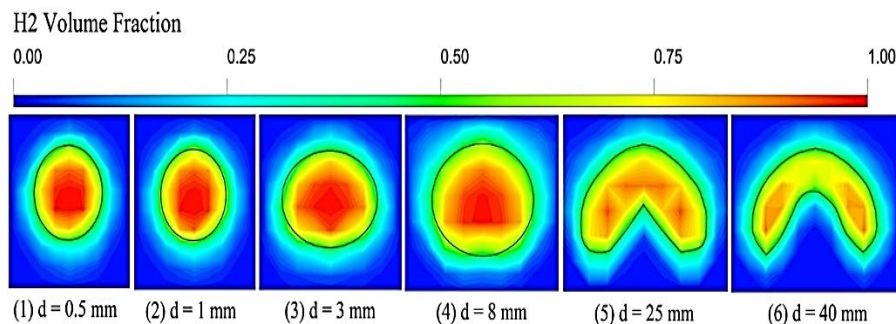
در نمودارهای شکل ۶ (الف)، ۱۱ گام زمانی متفاوت در نظر گرفته شده، عدد کورانت، نحوه افزایش کسر حجمی حباب (گاز هیدروژن) تا زمان ۰/۰۱ ثانیه و کسر حجمی حباب در آخرین گام قبل از ۰/۰۱ ثانیه بررسی شده است. با توجه به بالا آمدن حباب در مایع به علت چگالی کمتر، فشار مایع کاهش (به‌صورت خطی با کاهش ارتفاع)، حجم و 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 ۰/۰۰۰۰۵)، 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 (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 دوفاز

به‌عنوان 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 مورتنون 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 مورتنون $10-12 \times$ و $2/88$ و لگاریتم آن $11/5-$ به دست می‌آید. خط مورتنون 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 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.



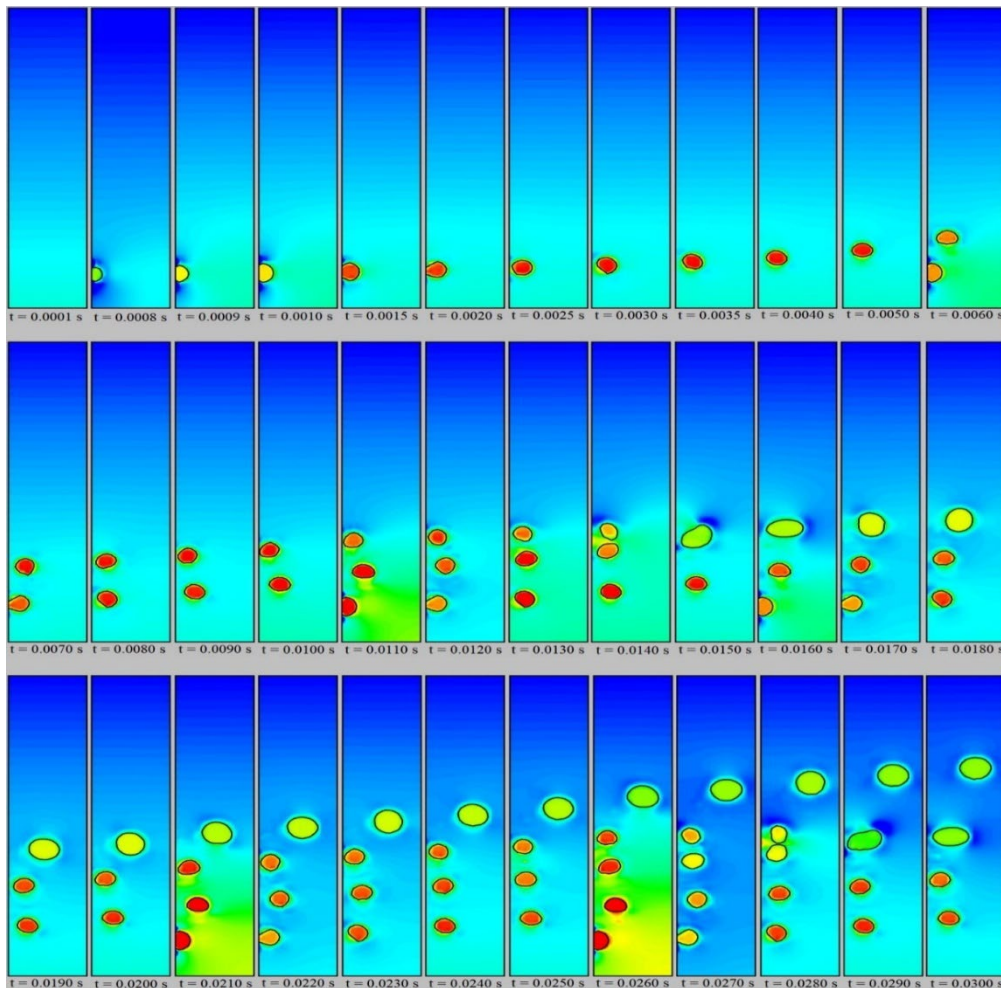
شکل (۸): کانتور کسر حجمی گاز هیدروژن و شکل حباب* در ۶ قطر متفاوت در نظر گرفته شده جهت صحت‌سنجی نتایج مدل‌سازی عددی حباب هیدروژن در جریان الکترولیت دوفاز (*مرکز حباب و الکترولیت با توجه به روش نیروی صفحه‌ای پیوسته برای مدل‌سازی کشش سطحی بین دوفاز در مکانی است که کسر حجمی گاز هیدروژن مقدار ۰/۵ دارد).

میلی‌مترمربعی 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 ۰/۴ میلی‌متر، مربع‌هایی با اضلاع ۰/۱ تعیین شد، در این مدل‌سازی سه‌بعدی نیز از شبکه‌بندی شش‌وجهی با اضلاع ۰/۱ میلی‌متر استفاده شده است. تعداد شبکه در قطعه ۱۳ در ۴۸ میلی‌متری سلول با سطح مقطع دایره و مربع‌شکل به ترتیب ۱۲۰۷۳۰۰ و ۱۱۹۴۷۰۰ می‌باشد. گام زمانی حل نیز طبق بررسی استقلال نتایج از گام زمانی انجام شده، مقدار

۵- هندسه، شبکه‌بندی و ارائه نتایج جریان حبابی در سلول باتری با جداکننده

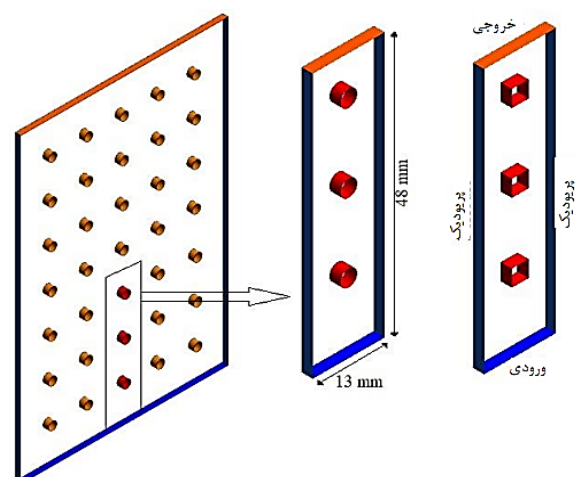
مدل‌سازی جریان دوفازی الکترولیت، یکی از سنگین‌ترین مدل‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی به شمار می‌رود که نیازمند سخت‌افزار قدرتمند برای اجرا می‌باشد؛ زیرا معادلات اصلی علاوه بر محلول KOH، باید برای گاز هیدروژن نیز حل شوند. همچنین این حل فقط با دقت دوبرابر جواب‌های صحیح داشته و الزاماً باید گذرا باشد. 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

۰/۰۰۰۱ ثانیه در نظر گرفته شده و کل زمان حل ۰/۲۶ ثانیه است.



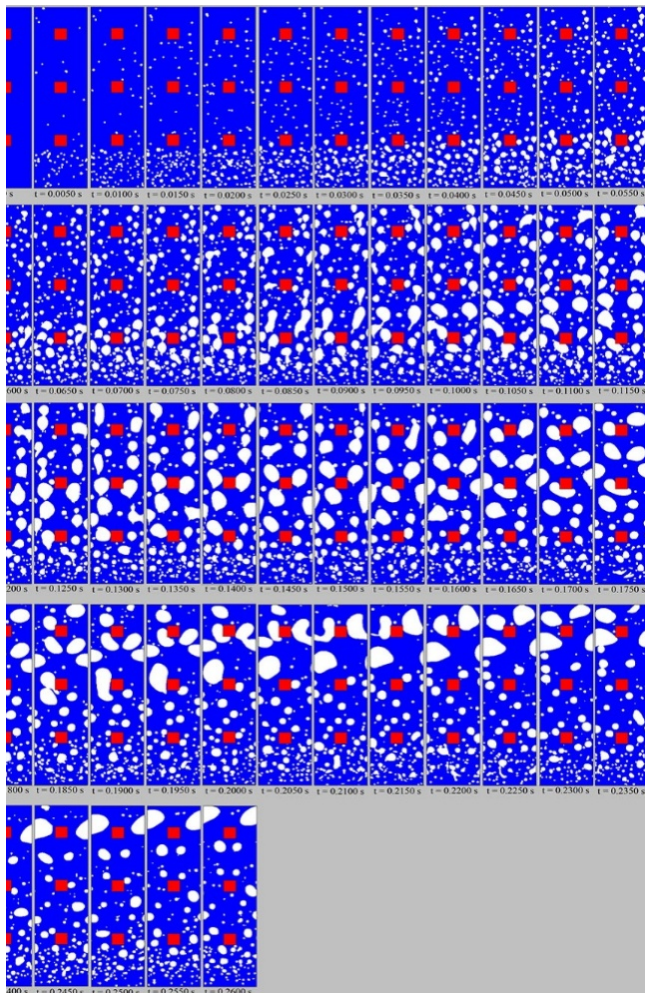
شکل (۹): نمایش نحوه رشد و جدایش حباب هیدروژن از سطح کاتد همراه با توزیع فشار در مدل عددی مذکور

با سرعت $2/2 \text{ G}$ گیگاهرتز و حافظه 128 گیگابایت انجام شده است. با چنین سیستم قدرتمندی هر کدام از دو مدل‌ها طی بیش از 14 روز حل شده‌اند. به بیان دیگر حل معادلات $0/26$ ثانیه از باتری در حدود 14 روز انجام شده است. در زمان سفر، 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 24 ساعت اول حل شده و $0/16$ ثانیه پس از آن بیش از یک هفته زمان گرفته است. در بخش قبل، مدل سازی 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



شکل (۱۰) نمایی از هندسه و شرایط مرزی مدل سازی حبابی در سلول باتری با جداکننده با وجود ساده سازی مدل جهت کاهش نیاز سخت‌افزاری، حل با یک سیستم قدرتمند شامل 64 هسته فیزیکی پردازشی

با توجه به شکل‌ها و دنبال کردن حباب‌ها (مشخص شده در دایره مشکی و خط چین در شکل) می‌توان نتیجه گرفت که حباب‌ها زمان بیشتری پشت جداکننده با شکل سطح مقطع مربع شکل 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 تأخیر در جداکننده‌های مربع احتمال رسیدن دیگر حباب‌ها و ترکیب شدن را بیشتر می‌کند؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که احتمال به هم پیوستن حباب‌های هیدروژن در سلول با جداکننده مربع شکل بیشتر از دایره است.

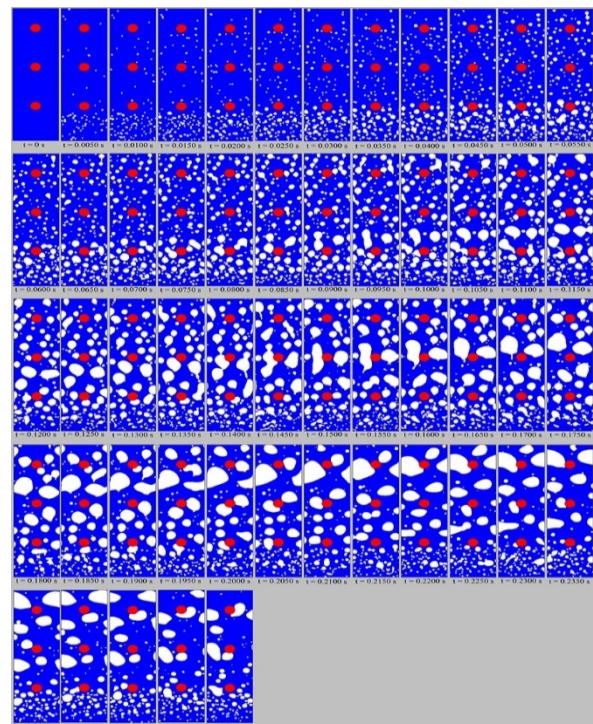


شکل (۱۲) توزیع و حرکت حباب‌ها در باتری با جداکننده مربع شکل از زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از دید کاتد

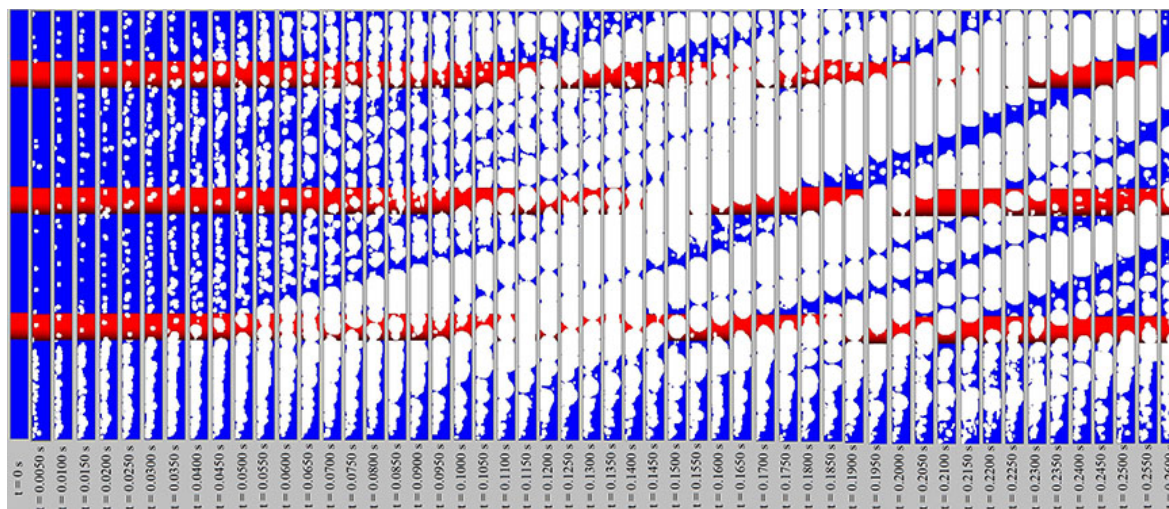
در شکل (۱۳) و (۱۴)، زاویه دید تغییر کرده و توزیع و حرکت حباب‌ها از دید جانبی به ترتیب برای جداکننده دایره و مربع ارائه شده است. در این زاویه دید حرکت حباب‌ها و جداسدن آن‌ها از سطح کاتد نمایش بهتری دارد.

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 نرم‌افزار 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 تأمین می‌کند.

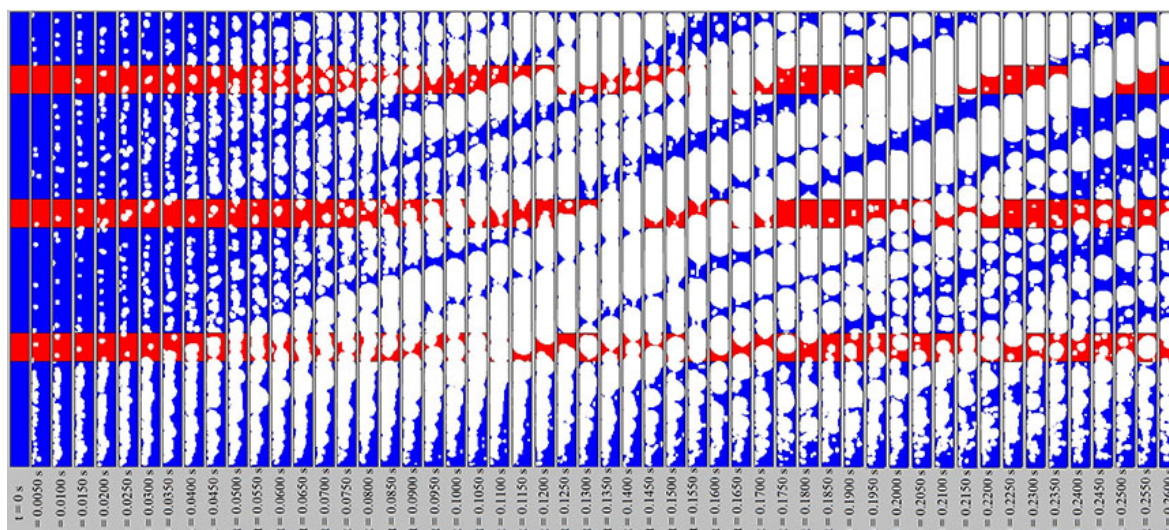
در شکل (۱۱) و (۱۲)، توزیع و حرکت حباب‌ها در سلول باتری با جداکننده‌های به ترتیب دایروی و مربع شکل از زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه طی چند تصویر از زاویه دید کاتد (هر ۰/۰۵ ثانیه یک تصویر) نمایش داده شده است. بادقت در این تصاویر مشخص است که الگوی تزریق حباب بر سطح کاتد در هر دو حالت (دایره و مربع) کاملاً یکسان 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 شده و در تصاویر با دایره سیاه‌رنگ و خط چین وضعیت آن نشان داده شده است.



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



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

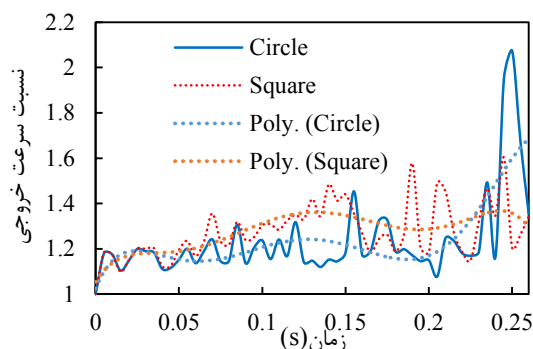


شکل (۱۴) توزیع و حرکت حبابها در باتری با جداکنندههای مربعی شکل از زمان صفر تا ۰/۲۶ ثانیه از دید جانبی

الکترولیت پوشانده شده و امکان انجام واکنش وجود دارد؛ لذا سطح غیر فعال نیز (بدون در نظر گرفتن سطح اشغال شده توسط جداکنندهها) سطحی است که پوشیده از حبابهای 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 جداکنندهها) 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 جداکننده دایره شکل بیشتر و سپس با گذر زمان کمتر از حالت مربع شکل می شود؛ 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 می شود. با گذر زمان و

همان طور که پیش از این نیز ذکر شد با توجه به متفاوت بودن شکل هندسی سطح مقطع جداکنندهها، معیار طراحی آنها قطر هیدرولیکی برابر (۳ میلی متر) در نظر گرفته شده است. بنابراین در دو سلول حل شده در این قسمت، قطر هیدرولیکی جداکنندههای 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 جداکنندهها)، در گذر زمان را نشان می دهند. در این نمودار سطح فعال واکنش بخشی از سطح کاتد و آند است که توسط

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 مدل‌سازی دوفاز نیز نمودار تغییرات نسبت سرعت الکترولیت خروجی از باتری به سرعت اولیه آن بر 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.

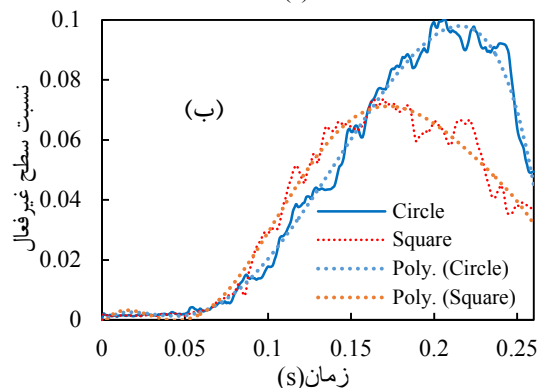
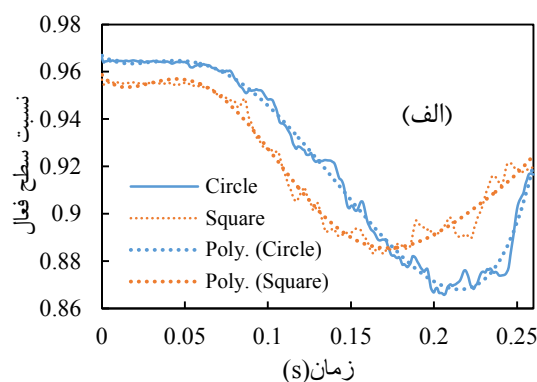


شکل (۱۶) نمودار نسبت سرعت خروجی به سرعت اولیه الکترولیت بر حسب زمان

۶- نتیجه‌گیری

با توجه به زیاد بودن وزن و حجم این باتری جریانی روی - اکسید نقره، در طراحی سلول‌های 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 دورنگه 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 دوفازی و حبابی شدن جریان، تأثیر 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

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

با توجه به توضیحات ذکر شده در دو پاراگراف اخیر، احتمال ترکیب حباب‌ها در سلول با جداکننده‌های مربعی شکل بیشتر است و این احتمال در این مدل‌سازی باعث بیشتر شدن سطح فعال واکنش نسبت به حالت دایروی شده است. این نتایج نشان می‌دهد که اگر اکثر حباب‌ها بر سطح کاتد و آند

6. Hreiza, R., Abdelouahed, L., Fünfschilling, D., and Lopicque, F. "Electrogenerated Bubbles Induced convection 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., and 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.
8. Ravichandra, S., Zhang, H., Zappi, G., and 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 Persian)
10. Brackbill, J. U., Kothe, D. B., and 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., and Weber, M. E. "Bubbles, Drops, and Particles", 1978.
12. Tomiyama, A., Tamai, H., Zun, I., and Hosokawa, S. "Transverse Migration of Single Bubbles in Simple 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., and 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., and Lucas, D. "Validation of CFD Models for

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. طوریکه 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. به طور 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. Reddy, T. "Linden's Handbook of Batteries", Fourth Edition, Los Angeles, United States, 2011.
2. Chen, R., Kim, S., and Chang, Z. "Redox Flow Batteries: Fundamentals and Application", 2017. DOI:<http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.68752>.
3. Anderson, G. E., and Middletown, R.I. "Al-AgO Primary Battery", United States Patent, 1975.
4. Taqieddin, A., Nazari, R., Rajic, L., and Alshwabkeh, A. "Review—Physicochemical 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., and 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>

- International Conference on Multiphase Flow, Japan , pp. 392-398, 2004.
17. Knewstubb, P. F., and 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., and 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>
- 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., and 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., and Shi, J., “The Favre Averaged Drag Model for Turbulent Dispersion in Eulerian Multi-Phase Flows”, 5th