

doi:10.11835/j.issn.1000-582X.2020.08.001

重构全钒液流电池碳毡力学仿真及孔尺度模拟

肖柳胜^{1a,1b}, 罗马吉^{1a,1b}, 朱礼军^{1a,1b}, 段康俊^{1a,1b}, 冷文亮^{1a,1b},
Roswitha Zeis^{2a,2b}, 隋邦傑^{1a,1b}

(1. 武汉理工大学 a. 现代汽车零部件湖北省重点实验室; b. 汽车零部件技术湖北省协同创新中心, 武汉 430070;
2. 卡尔斯鲁厄理工大学 a. 亥姆霍兹研究所, Helmholtzstraße 11, 89081 乌尔姆, 德国;
b. 物理化学学院, Fritz-Haber-Weg 2, 76131 卡尔斯鲁厄, 德国)

摘要:为探究全钒液流电池(VRFB)碳毡微观尺度下承受压力的位移变形并量化其对传输特性的影响,应用 X 射线断层扫描(XCT)微观重构技术、有限元方法(FEM)和孔尺度模拟技术(PSM),考虑碳纤维间受压缩的接触摩擦及挤压弯曲,重构碳纤维微观结构,研究了碳纤维不同压缩比 3D(X,Y 和 Z 方向)位移分布,并量化位移变形对微结构传输特性的影响。结果表明:随着压缩比增大到 30%,Z 方向位移变化最为明显,计算域 A 位移变化为: $-59 \sim +5 \mu\text{m}$, 计算域 B 位移变化为: $-145 \sim +16 \mu\text{m}$, 钒离子 XY 方向扩散系数减小 15.4%, Z 方向扩散系数减小 24.2%, XY 方向电导率升高 112.5%, Z 方向电导率增大 113.3%, 模拟结果与实验结果趋势较吻合,可以较好模拟预测碳毡电导率计算域尺寸为: $X/Y=300 \sim 400 \mu\text{m}$, $Z=200 \sim 400 \mu\text{m}$ 。

关键词:全钒液流电池;碳毡;XCT 重构;有限元方法;位移变形;孔尺度模拟;传输特性

中图分类号: TM911.3

文献标志码: A

文章编号: 1000-582X(2020)08-001-10

Solid mechanical simulation and pore-scale modelling of reconstructed carbon felt for vanadium redox flow battery

XIAO Liusheng^{1a,1b}, LUO Maji^{1a,1b}, ZHU Lijun^{1a,1b}, DUAN Kangjun^{1a,1b}, LENG Wenliang^{1a,1b},
Roswitha Zeis^{2a,2b}, SUI Bangjie^{1a,1b}

(1a. Hubei Key Laboratory of Advanced Technology for Automotive Components; 1b. Hubei Collaborative Innovation Center for Automotive Components Technology, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, P. R. China; 2a. Helmholtz Institute, Karlsruhe Institute of Technology, Helmholtzstraße 11, 89081 Ulm, Germany; 2b. Institute of Physical Chemistry, Karlsruhe Institute of Technology, Fritz-Haber-W 2, 76131 Karlsruhe, Germany)

Abstract: X-ray computed tomography (XCT) reconstruction technique, finite element method (FEM) and pore scale modelling (PSM) were employed to investigate the displacement distribution of vanadium redox

收稿日期: 2020-03-01

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2017YFB0102702); 国家留学基金委 CSC 资助(201906950062); 中央高校基本科研业务费资助(2019-YB-017)。

Supported by National Key Research and Development Program of China (2017YFB0102702), China Scholarship Council (201906950062), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (2019-YB-017).

作者简介: 肖柳胜(1989—), 男, 武汉理工大学博士研究生, 主要研究方向为新能源汽车动力电池, (E-mail) lxxiao@whut.edu.cn。

通讯作者: 隋邦傑(1964—), 男, 武汉理工大学教授, 博士生导师, 主要研究方向为动力电池, (E-mail) pcsui@whut.edu.cn。

flow battery (VRFB) carbon felt and its effects on the transport properties under compression at pore scale. With contact friction, and extrusion bending between carbon fibers taken into consideration, the microstructure of a carbon felt was reconstructed by XCT first, then the 3D (X , Y and Z direction) displacement distribution of the microstructure with different compression ratio (CR) was investigated, and the relationship between the displacement and transport properties was quantified. The results show that the carbon-fiber displacement in the Z direction (through plane) under compression is more noticeable. As CR is increased to 30%, the displacement change in Z of domains A and B are $-59 \sim +5 \mu\text{m}$ and $-145 \sim +16 \mu\text{m}$, respectively. The diffusion coefficient of the vanadium ion in XY direction is decreased by 15.4%, and in Z direction by 24.2%. The conductivity in XY direction is increased by 112.5%, and in Z direction by 113.3%. The simulation results are in good agreement with the experimental data, and the suggested domain size that can better simulate and predict the carbon felt conductivity is: $X/Y=300 \sim 400 \mu\text{m}$, and $Z=200 \sim 400 \mu\text{m}$.

Keywords: vanadium redox flow battery (VRFB); carbon felt; X-ray computed tomography (XCT) reconstruction; finite element method (FEM); displacement; pore scale modelling (PSM); transport properties

氧化还原液流电池由于服务寿命长、容量大、设计灵活及安全可靠等特点被认为是大型储能方案最佳候选者之一^[1],其中全钒液流电池(VRFB)发展最快,并已实现商业化^[2-3]。多孔电极作为 VRFB 重要组件之一,主要由高电导率及电化学稳定性的碳毡组成,其微观结构特征决定传输特性优劣,并进一步影响电池输出性能。

然而,碳毡电极在高电流密度及电化学活性存在一些挑战^[4-5],影响充放电电压,限制电池工作效率,碳毡微观结构参数如孔隙率、迂曲率、孔径分布等因受装配压力影响,将改变多孔电极传质传导特性,如渗透率和导电导热系数,并进一步影响电池总体性能。为了提高并改善电极充放电性能,一些研究人员探究了压缩作用对电极性能之间的关系,并找到最佳压缩比^[6-10],Oh 等^[11]研究发现一定程度的压缩可以显著提高电极充放电性能,且电极中钒的分布更加均匀。

近年来研究主要包括宏观尺度^[12-14]和微观孔尺度^[15-19]探究多孔电极结构形状变化对传输特性及电池性能的影响,但是从宏观尺度视角,仅仅可以看到全局特征变化,不能反映碳纤维的真实微观结构变化,而微观孔尺度可以提供电极材料表面、内部及接触面的有用信息,更能准确地表达碳纤维微观结构特征,指导未来新材料的设计优化,如近年来发展使用 XCT 技术探究多孔电极材料微观结构变化^[20]。Shojaeefard 等^[21]和 Fadzillah 等^[22]对电极材料碳纤维重建技术和方法进行了综述,主要包括随机数值重构方法和 XCT 实验重构技术。Jervis 等^[23]利用 XCT 技术对一种常用商业化的 VRFB 电极碳毡材料进行在线测试,探究压缩力对多孔介质微观结构孔隙率、孔径分布和迂曲率的影响。但 XCT 实验技术需多次试验得到不同压缩比微观结构,耗时长,耗费大。

因此,一些研究人员通过数值模拟技术,得到不同压缩程度下电极材料碳纤维(碳纸或碳毡)的微观结构^[24-28],但是存在一些假设来模拟碳纤维的压缩位移。文献[26-28]中假设碳纤维只在压缩方向(Z 方向)上发生平移。Gaiselmann 等^[24]实验模拟相结合,利用向量矩阵代表碳纤维在 Z 方向上不同位移大小,不考虑 X 和 Y 方向上位移变化。需要指出的是,数值模拟技术得到的电极材料微观模型不如 XCT 实验重构得到的模型准确,且数值模拟碳纤维压缩变形存在较多假设,不能真正反映压缩后结构变化。

根据以上实验及模拟技术优缺点,笔者提出了一种结合 XCT 实验重构技术、有限元方法(FEM)和孔尺度模拟技术(PSM)分别对电极材料碳毡结构进行微观重构、力学变形仿真和传输特性模拟的方法,主要创新

性与贡献如下:1)XCT 技术结合 FEM,模拟压缩变形后得到任意压缩比微结构模型,不同于以往研究中每个压缩比微结构需要单独进行 XCT 实验扫描,本研究在满足微结构模型准确度前提下,大大降低 XCT 实验耗时耗资问题;2)首次结合有限元方法、显式动力学理论和微观重构技术,得到微观结构 3D 压缩位移变化,碳纤维内部 X, Y, Z 方向位移变形,不同于以往研究中仅考虑压缩方向(Z 方向)位移变形,且不考虑压缩过程中碳纤维间接触摩擦和挤压变形,本研究得到的微结构位移变形更加真实准确;3)可以应用 PSM 对任意压缩比微结构进行传输特性研究,不同于以往研究中需要多次 XCT 实验,且仅能模拟两三个特定压缩比下微结构传输特性。

1 模型建立

研究路线如图 1 所示。通过 XCT 实验技术,扫描得到微观结构点云数据,利用 AVIZO 软件重构得到碳纤维未压缩模型;然后对其进行数据后处理,将空心面片几何体转化得到实体 FEM 模型,进一步应用 ANSYS 软件进行固体力学仿真,得到任意压缩比碳毡微结构及其压缩变形的位移分布;最后,应用 MATLAB 软件对不同压缩比碳毡模型进行后处理,得到碳毡孔尺度模型,并对其进行 PSM 孔尺度传输特性研究。

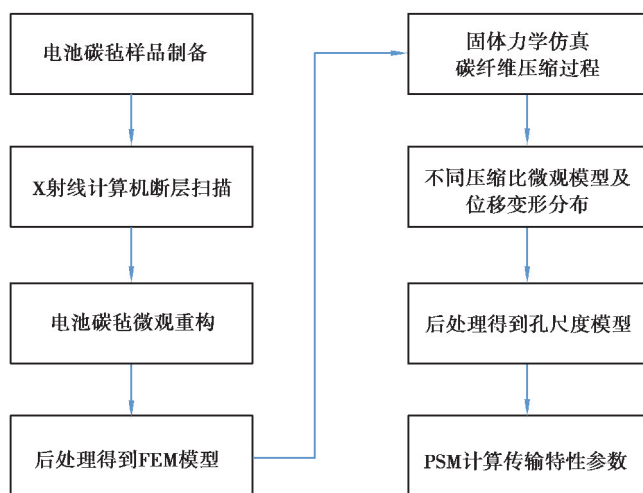


图 1 研究路线

Fig. 1 Research route

使用的碳毡电极样品型号为德国 SIGRACELL © GFA 6EA,微观结构扫描电镜图如图 2 所示,平均碳纤维直径为 $10 \mu\text{m}$,孔隙率为 90% 。应用 XCT 实验设备对碳毡样品进行扫描,得到 $2015 \times 2015 \times 2015$ 像素的灰度图像¹⁵,每像素为 $2.44 \mu\text{m}$,如图 3(a)所示。为了分辨扫描数据中碳纤维/孔隙和噪音,应用 AVIZO 对灰度图像进行阈值分割,得到二进制图像(1 代表碳纤维,0 代表孔隙),并进一步根据所有 2D 二进制图像层层累加重构得到 3D 碳毡微观模型,如图 3(b)所示。

图 3 中得到的碳毡 3D 模型是由点集或者三角面片组成的空心几何体,因此需要进行实体化处理,得到可用于有限元网格划分的实体几何。本模型计算域大小为: $X \times Y \times Z = 260 \times 260 \times 130 (\mu\text{m})$ 。实体化后的碳毡模型导入 ANSYS 中,划分适用于显示动力学计算的有限元网格,得到 FEM 模型,如图 4 所示。综合考虑网格质量和计算耗时,模型划分数量为 6 870 000,为保证单元连通性和高网格质量,在重叠、接触、边界和应力集中特定区域采用较小的单元尺寸,其余采用较大尺寸。

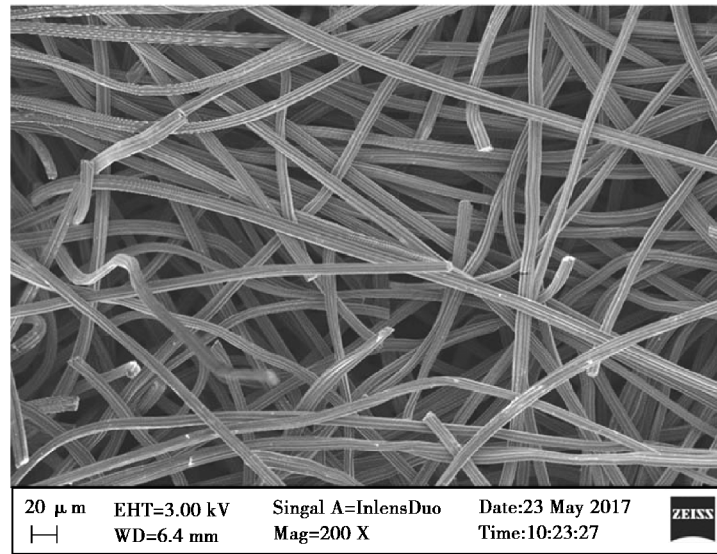
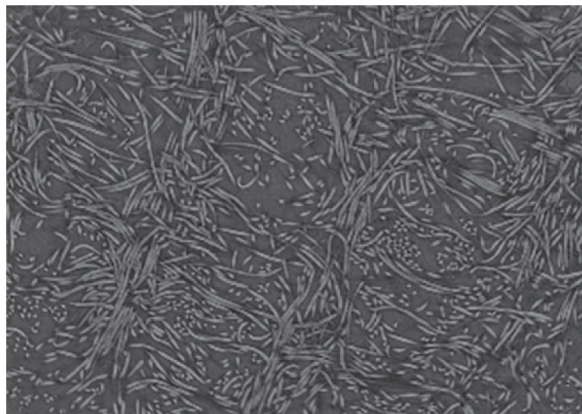
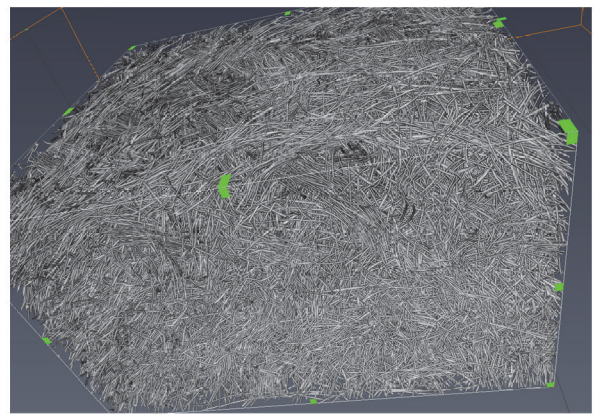


图 2 碳毡扫描电镜图(GFA 6EA)

Fig. 2 SEM image of the investigated carbon felt (GFA 6EA)



(a) 碳毡微结构阈值分割二维图



(b) 碳毡微结构三维重构图

图 3 重构碳纤维

Fig. 3 Reconstructed carbon fibers



图 4 碳毡有限元网格模型

Fig. 4 Finite element model of carbon felt

2 结果讨论

2.1 压缩变形仿真

得到图 4 中有限元模型后,利用 ANSYS 进行固体力学仿真,采用显示动力学理论及求解方法探究不同压缩程度下碳纤维微观结构 3D 位移分布^[29-31]。不同于以往研究中只有压缩方向上位移变化,且存在碳纤维受压缩平移的假设,这不符合碳纤维间真实的接触挤压现象。为模拟纤维之间动态接触现象,笔者将碳纤维之间接触类型设置为摩擦接触,压缩过程中自动识别接触点,不允许碳纤维材料渗透。在压缩方向(Z 方向)设置位移约束,模拟压缩比(CR)=30%,在模型左、右、前、后边界上添加对称约束。参考其他文献中碳纤维材料属性参数^[32-34];摩擦系数取为 0.1,杨氏模量为 6.1×10^6 Pa,泊松比为 0.1,密度为 440 kg/m^3 。

随着压缩比(CR)增大,碳纤维在 X , Y 和 Z 方向位移变化也增大,其中 Z 方向变化最为明显,图 5 为计算域 A ($X \times Y \times Z = 260 \times 260 \times 130 (\mu\text{m})$) 在 30% 压缩比下位移分布,图 6 为计算域 B ($X \times Y \times Z = 400 \times 400 \times 400 (\mu\text{m})$) 在 30% 压缩比下位移分布。位于碳毡顶部碳纤维位移变形较大,而位于碳毡底部碳纤维位移变化较小。计算域 A 在 Z 方向位移变化为: $-59 \sim +5 \mu\text{m}$,计算域 B 在 Z 方向位移变化为: $-145 \sim +16 \mu\text{m}$,碳纤维受压缩同时存在压缩下移和挤压上翘现象,正数代表碳纤维受挤压上翘,负数代表碳纤维受压缩下移。对比计算域 A 和 B 在 Z 方向位移变化相差约 3 倍,正好接近其计算域厚度尺寸的差值。随着压缩比增大,碳毡中部碳纤维受顶部碳纤维挤压发生变形和弯曲翘起,当压缩比大于 20%,挤压弯曲现象愈加明显。接近 50% 碳纤维节点位移变化很小, $\pm 1 \mu\text{m}$ 以内,如图 7 所示,微小位移变化大多位于模型底部和中部。计算域 A 中,10% 压缩比下位移约束设置为 $-13 \mu\text{m}$,但存在 3% 碳纤维节点位移超过 $-13 \mu\text{m}$;20% 压缩比下位移约束设置为 $-26 \mu\text{m}$,却存在 4.6% 碳纤维节点位移超过 $-26 \mu\text{m}$;30% 压缩比下位移约束设置为 $-39 \mu\text{m}$,约 3.5% 碳纤维节点位移超过 $-39 \mu\text{m}$,这是因为碳纤维受挤压弯曲下翘,嵌入到下层孔隙中。对比图 7 中计算域 A 和 B 在 30% 压缩比下位移变化,发现计算域 B 有更多纤维材料保持很小位移,而计算域 A 有更多纤维材料发生较大位移,这是因为计算域 B 比 A 厚度大 3 倍,中部和底部纤维材料更多更厚,结构更稳定,总体积更大,使得纤维材料保持微小位移的概率增大。

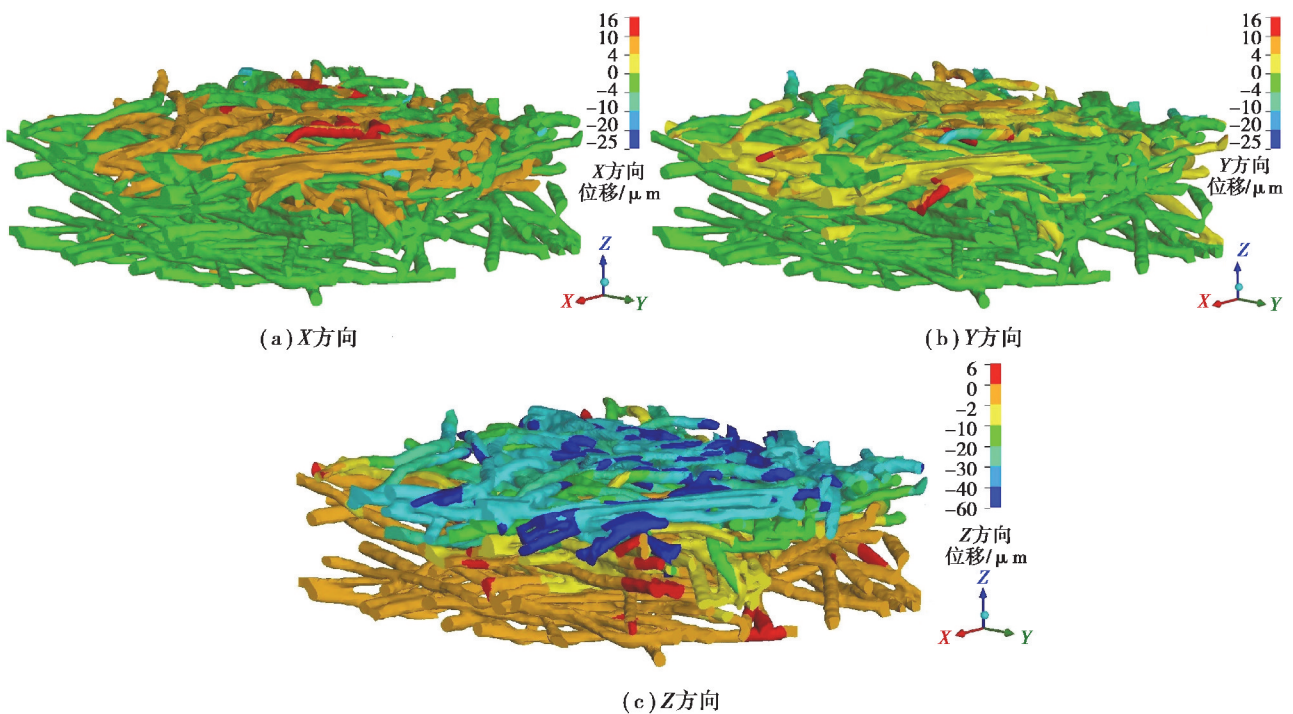


图 5 计算域 A 在 30% 压缩比下 X , Y , Z 方向位移分布

Fig. 5 Displacement distribution in X , Y , and Z directions of domain A with $CR=30\%$

压缩过程中碳纤维间由于接触挤压造成弯曲翘起,在 Z 方向上位移变化最明显,但也存在 X,Y 方向上位移变化,计算域 A 在 X,Y 方向上位移变化约 $\pm 20 \mu\text{m}$,计算域 B 在 X,Y 方向上位移变化约 $\pm 40 \mu\text{m}$,如图 5,6 所示,这将对碳毡微结构传输特性产生不容忽视的影响,如钒离子扩散系数和电子传导率。对比图 5 和 6 显示计算域 B 和计算域 A 计算结果大致吻合,但根据图 7 对比结果显示,计算域 B 更接近真实情况,更大计算域尺寸可以更真实反映多孔电极受压缩后微结构变化。

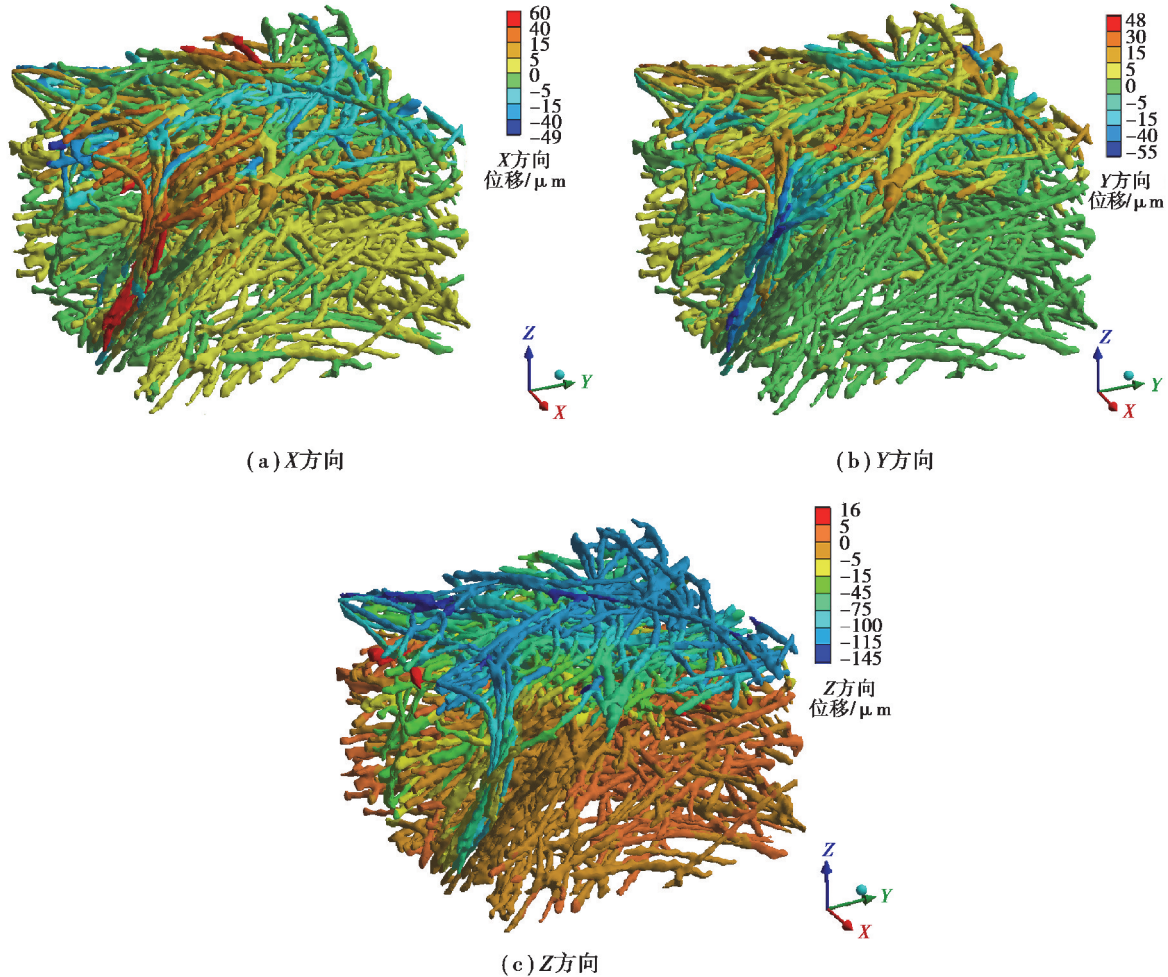


图 6 计算域 B 在 30% 压缩比下 X,Y,Z 方向位移分布

Fig. 6 Displacement distribution in X, Y, and Z directions of domain B with CR=30%

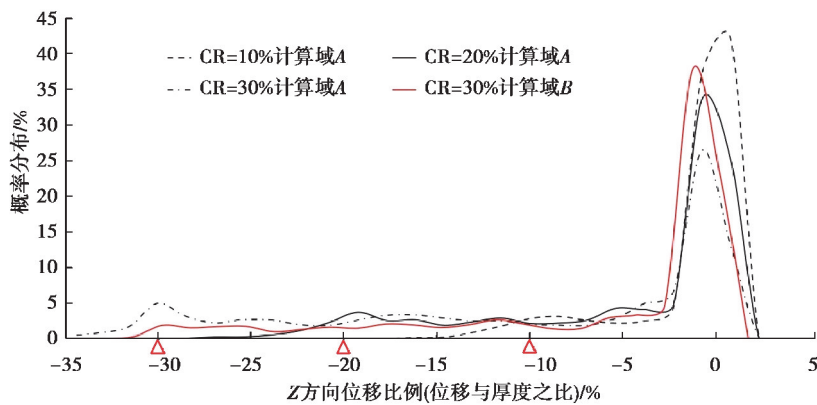


图 7 计算域 A,B 在 Z 方向不同位移值频率分布

Fig. 7 Frequency distribution at different displacements in Z direction of domains A and B

2.2 孔尺度传输特性计算

在上面的固体力学分析中,得到了不同压缩比的碳毡微观结构,经过 MATLAB 后处理得到孔尺度几何模型,应用文献[18, 35-36]的孔尺度模拟技术(PSM),程序算法经调试改进后用来计算本文不同压缩比(0%, 10%, 20%, 30%)碳毡微结构传输特性参数,包括钒离子扩散系数和电子传导系数。图 8 为不同计算域大小 0% 压缩比碳毡孔尺度几何模型,红色代表碳纤维,灰色代表孔隙。其中计算域 A: $X \times Y \times Z = 260 \times 260 \times 130(\mu\text{m})$, 计算域 B: $X \times Y \times Z = 400 \times 400 \times 400(\mu\text{m})$, 计算域 B 模型仅用于对比分析模拟电导率与实验值关系。

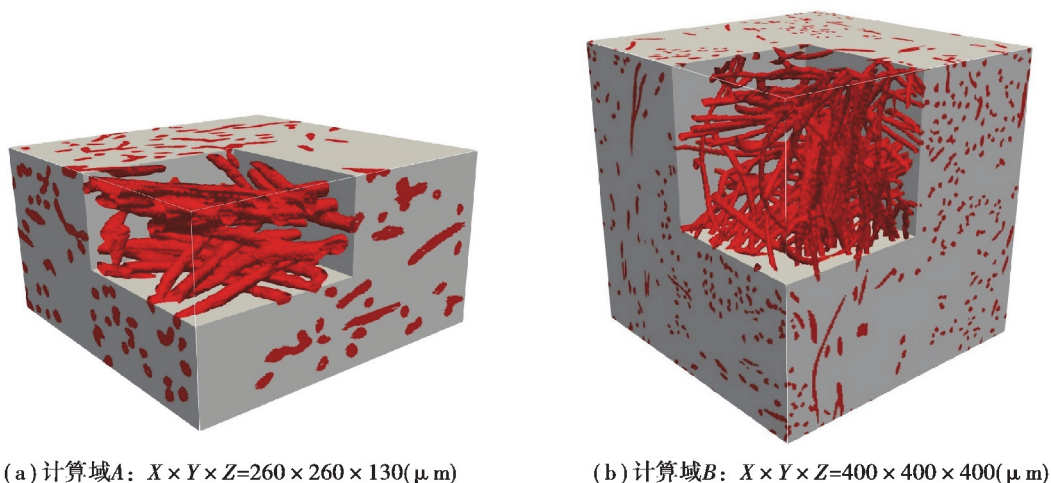


图 8 不同计算域大小孔尺度几何模型

Fig. 8 Pore scale model with different domain size

随着压缩比增大,碳毡孔隙率逐步减小,碳纤维受挤压会增加钒液扩散阻力,使钒离子扩散系数逐步减小,图 9 为计算域 A 模拟结果,这是因为压缩改变了孔隙直径大小,降低了孔与孔之间的连通性。随着压缩比从 0% 增加到 30%,钒离子面内方向(XY 方向)扩散系数减小 15.4%,压缩方向(Z 方向)扩散系数减小 24.2%,说明碳毡 Z 方向受压缩影响更大。随着压缩比从 0% 增加到 20%,钒离子扩散系数线性下降,但压缩比大于 20% 之后,钒离子扩散系数下降速度加快,这是因为碳毡初始孔隙率很大,0% 到 20% 压缩比只是轻微改变孔尺寸和形状,但 20% 以上压缩比会急剧改变孔径大小和形貌,并严重影响孔与孔之间的连续性。

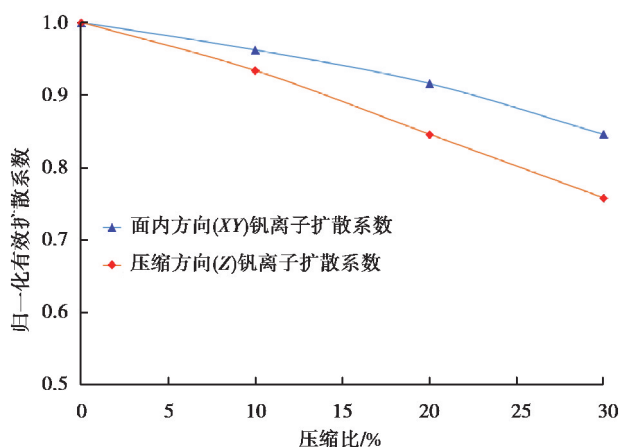


图 9 计算域 A 钒离子扩散系数

Fig. 9 Normalized diffusivity of vanadium ion in domain A

随着压缩比增大,碳纤维体积分数及纤维挤压接触面积增大,被挤压嵌入到临近孔隙中碳纤维增多,导致电导率逐渐升高,如图 10 所示计算域 A 和 B 模拟结果与实验数值曲线,这是因为压缩减小了孔隙大小,提高了碳纤维之间的结构连续性,降低了碳纤维间接触电阻。随着压缩比从 0% 增加到 30%,计算域 A 面内方向(XY 方向)电导率升高 102.1%,压缩方向(Z 方向)电导率增大 72.7%;计算域 B 面内方向(XY 方向)电导率升高 112.5%,压缩方向(Z 方向)电导率增大 113.3%;实验测量面内方向(XY 方向)电导率升高 71.6%,压缩方向(Z 方向)电导率增大 131.3%。从图 10 可以看出计算域 B 的模拟结果与实验数值更加吻合,而计算域 A 在压缩方向上变化趋势和幅值差距较大,这是因为计算域 A 厚度太薄,造成模型厚度方向上局部碳纤维稀少的偶然性,进一步造成电导率随着压缩比增大变化较慢且增幅较小。模拟结果与实验数值对比显示,可以较好模拟预测碳毡电导率变化的计算域尺寸为: $X/Y=300\sim 400\ \mu\text{m}$, $Z=200\sim 400\ \mu\text{m}$ 。

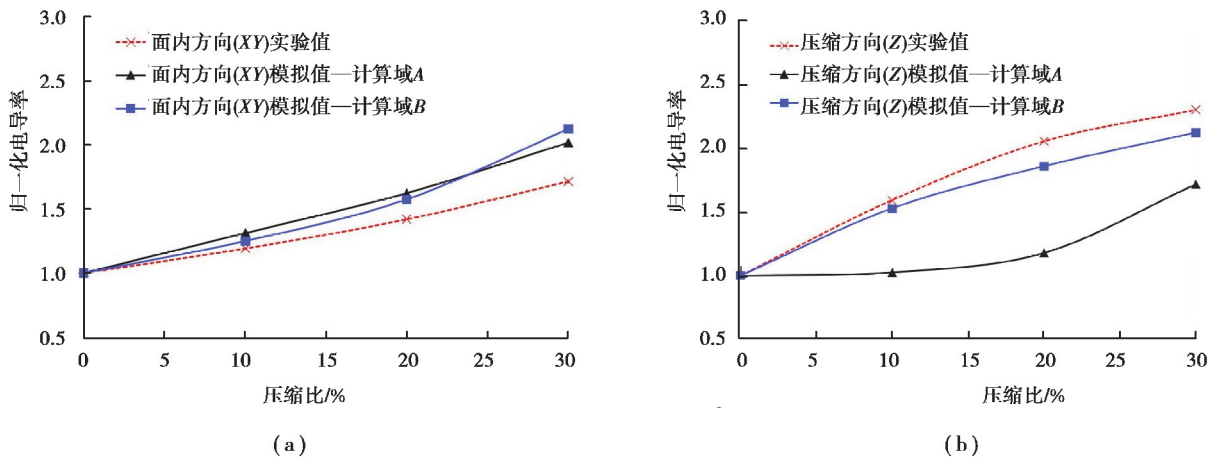


图 10 电子传导率模拟与实验值对比

Fig. 10 Comparison of simulated and experimental electronic conductivity

3 结论与展望

笔者利用 XCT 实验重构技术、有限元方法和孔尺度模拟技术对 VRFB 碳纤维微观结构进行微观重构、力学仿真及传输特性模拟。随着压缩比增大,Z 方向位移变化最为明显,计算域 A 位移变化为: $-59\sim +5\ \mu\text{m}$,计算域 B 位移变化为: $-145\sim +16\ \mu\text{m}$ 。由于碳纤维受挤压弯曲下翘,嵌入到下层孔隙中,3.0%~4.5%比例碳纤维节点超过设定 CR 位移值。计算域 A 在 X,Y 方向上位移变化约 $\pm 20\ \mu\text{m}$,计算域 B 在 X,Y 方向上位移变化约 $\pm 40\ \mu\text{m}$,因此碳毡微结构在 X,Y 方向上位移变化相比于 Z 方向位移变化更明显,其对多孔电极传输特性(如钒离子扩散系数和电导率)的影响不容忽视。随着压缩比从 0% 增加到 30%,计算域 A 钒离子 XY 方向扩散系数减小 15.4%,Z 方向扩散系数减小 24.2%,XY 方向电导率升高 102.1%,Z 方向电导率增大 72.7%;计算域 B 面内方向(XY 方向)电导率升高 112.5%,压缩方向(Z 方向)电导率增大 113.3%,实验测量面内方向(XY 方向)电导率升高 71.6%,压缩方向(Z 方向)电导率增大 131.3%。为更准确地模拟预测碳毡电导率变化,计算域尺寸建议为: $X/Y=300\sim 400\ \mu\text{m}$, $Z=200\sim 400\ \mu\text{m}$ 。

笔者对 XCT 实验得到的微观结构进行固体力学仿真,比虚拟编程随机重构模型更加准确,但数据处理难度更大,尤其是把实验扫描点云数据处理转换成有限元实体模型并划分高质量有限元网格,未来需要编程优化进程,提高数据处理效率;另外,微观尺度下碳纤维内部位移变形分布需进一步试验验证。攻克上述难题将对工程实践价值更高。

参考文献:

- [1] Cunha Á, Martins J, Rodrigues N, et al. Vanadium redox flow batteries: A technology review[J]. *International Journal of Energy Research*, 2015, 39(7): 889-918.
- [2] Ha S, Gallagher K G. Estimating the system price of redox flow batteries for grid storage[J]. *Journal of Power Sources*, 2015, 296: 122-132.
- [3] Uhrig M, Koenig S, Suriyah M R, et al. Lithium-based vs. vanadium redox flow batteries—a comparison for home storage systems[J]. *Energy Procedia*, 2016, 99: 35-43.
- [4] Kim Y, Choi Y Y, Yun N R, et al. Activity gradient carbon felt electrodes for vanadium redox flow batteries[J]. *Journal of Power Sources*, 2018, 408: 128-135.
- [5] Maggiolo D, Zanini F, Picano F, et al. Particle based method and X-ray computed tomography for pore-scale flow characterization in VRFB electrodes[J]. *Energy Storage Materials*, 2019, 16: 91-96.
- [6] Tötze C, Gaiselmann G, Osenberg M, et al. Three-dimensional study of compressed gas diffusion layers using synchrotron X-ray imaging[J]. *Journal of Power Sources*, 2014, 253: 123-131.
- [7] Davies T, Tummino J. High-performance vanadium redox flow batteries with graphite felt electrodes[J]. *C*, 2018, 4(1): 8.
- [8] Ince U U, Markötter H, George M G, et al. Effects of compression on water distribution in gas diffusion layer materials of PEMFC in a point injection device by means of synchrotron X-ray imaging[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, 43(1): 391-406.
- [9] Wang Q, Qu Z G, Jiang Z Y, et al. Experimental study on the performance of a vanadium redox flow battery with non-uniformly compressed carbon felt electrode[J]. *Applied Energy*, 2018, 213: 293-305.
- [10] Wang Q, Qu Z G, Jiang Z Y, et al. Numerical study on vanadium redox flow battery performance with non-uniformly compressed electrode and serpentine flow field[J]. *Applied Energy*, 2018, 220: 106-116.
- [11] Oh K, Won S, Ju H. Numerical study of the effects of carbon felt electrode compression in all-vanadium redox flow batteries[J]. *Electrochimica Acta*, 2015, 181: 13-23.
- [12] Aaron D S, Liu Q, Tang Z, et al. Dramatic performance gains in vanadium redox flow batteries through modified cell architecture[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, 206: 450-453.
- [13] Jiatang W, Jinliang Y, Jongsong Y, et al. Investigation of effects of non-homogenous deformation of gas diffusion layer in a PEM fuel cell[J]. *International Journal of Energy Research*, 2017, 41(14): 2121-2137.
- [14] Movahedi M, Ramiar A, Ranjber A A. 3D numerical investigation of clamping pressure effect on the performance of proton exchange membrane fuel cell with interdigitated flow field[J]. *Energy*, 2018, 142: 617-632.
- [15] Banerjee R, Bevilacqua N, Eifert L, et al. Characterization of carbon felt electrodes for vanadium redox flow batteries—A pore network modeling approach[J]. *Journal of Energy Storage*, 2019, 21: 163-171.
- [16] Eifert L, Banerjee R, Jusys Z, et al. Characterization of carbon felt electrodes for vanadium redox flow batteries; impact of treatment methods[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2018, 165(11): A2577-A2586.
- [17] Iliev O, Lakdawala Z, Neßler K H L, et al. On the pore-scale modeling and simulation of reactive transport in 3d geometries[J]. *Mathematical Modelling and Analysis*, 2017, 22(5): 671-694.
- [18] Lange K J, Sui P C, Djilali N. Pore scale simulation of transport and electrochemical reactions in reconstructed PEMFC catalyst layers[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2010, 157(10): B1434.
- [19] Mazur P, Mrlik J, Pocedic J, et al. Effect of graphite felt properties on the long-term durability of negative electrode in vanadium redox flow battery[J]. *Journal of Power Sources*, 2019, 414: 354-365.
- [20] Kok M D R, Jarvis R, Tranter T G, et al. Mass transfer in fibrous media with varying anisotropy for flow battery electrodes: direct numerical simulations with 3D X-ray computed tomography[J]. *Chemical Engineering Science*, 2019, 196: 104-115.
- [21] Shojaeefard M H, Molaeimanesh G R, Nazemian M, et al. A review on microstructure reconstruction of PEM fuel cells

- porous electrodes for pore scale simulation[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41 (44): 20276-20293.
- [22] Fadzillah D M, Rosli M I, Talib M Z M, et al. Review on microstructure modelling of a gas diffusion layer for proton exchange membrane fuel cells[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2017, 77: 1001-1009.
- [23] Jervis R, Kok M D R, Neville T P, et al. In situ compression and X-ray computed tomography of flow battery electrodes[J]. *Journal of Energy Chemistry*, 2018, 27(5): 1353-1361.
- [24] Gaiselmann G, Tötze C, Manke I, et al. 3D microstructure modeling of compressed fiber-based materials[J]. *Journal of Power Sources*, 2014, 257: 52-64.
- [25] Froning D, Brinkmann J, Reimer U, et al. 3D analysis, modeling and simulation of transport processes in compressed fibrous microstructures, using the Lattice Boltzmann method[J]. *Electrochimica Acta*, 2013, 110: 325-334.
- [26] Schulz V P, Becker J, Wiegmann A, et al. Modeling of two-phase behavior in the gas diffusion medium of PEMFCs via full morphology approach[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2007, 154(4): B419.
- [27] Espinoza M, Andersson M, Yuan J L, et al. Compress effects on porosity, gas-phase tortuosity, and gas permeability in a simulated PEM gas diffusion layer[J]. *International Journal of Energy Research*, 2015, 39(11): 1528-1536.
- [28] Molaeimanesh G R, Nazemian M. Investigation of GDL compression effects on the performance of a PEM fuel cell cathode by lattice Boltzmann method[J]. *Journal of Power Sources*, 2017, 359: 494-506.
- [29] Xiao L S, Luo M J, Zhang H, et al. Solid mechanics simulation of reconstructed gas diffusion layers for PEMFCs[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2019, 166(6): F377-F385.
- [30] Goldstein H, Poole C, Safko J. *Classic Mechanics*[M]. duPearson Education, NJ: Addison Wesley, 1980.
- [31] Wu S R, Gu L. *Introduction to the explicit finite element method for nonlinear transient dynamics*[M]. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2012.
- [32] Liu D, Peng L, Lai X. Effect of dimensional error of metallic bipolar plate on the GDL pressure distribution in the PEM fuel cell[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2009, 34(2): 990-997.
- [33] Zhou P, Wu C W. Numerical study on the compression effect of gas diffusion layer on PEMFC performance[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 170(1): 93-100.
- [34] Zhou Y B, Jiao K, Du Q, et al. Gas diffusion layer deformation and its effect on the transport characteristics and performance of proton exchange membrane fuel cell[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, 38 (29): 12891-12903.
- [35] Lange K J, Sui P C, Djilali N. Determination of effective transport properties in a PEMFC catalyst layer using different reconstruction algorithms[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, 208: 354-365.
- [36] Lange K J, Sui P C, Djilali N. Pore scale modeling of a proton exchange membrane fuel cell catalyst layer: effects of water vapor and temperature[J]. *Journal of Power Sources*, 2011, 196 (6): 3195-3203.