

doi: 10.11835/j.issn.1000-582X.2022.126

基于纤维面内取向分布的气体扩散层重构与传输性能分析

尹泽泉¹, 王 虎¹, 张锐明^{2,3}, 唐浩林^{2,3}, 隋邦傑^{1,2,3}

(1. 武汉理工大学汽车工程学院, 武汉 430070; 2. 先进能源科学与技术广东省实验室佛山分中心, 广东 佛山 528200; 3. 广东省武理工氢能产业技术研究院, 广东 佛山 528216)

摘要:提出一种重构燃料电池气体扩散层(GDL)微观结构的新方法,用于研究纤维面内取向分布对 GDL 传输性能的影响。利用 XCT 扫描获取 GDL 二维切片图进行阈值分割得到 GDL 三维模型,通过纤维追踪技术区分纤维与粘接剂,得出纤维面内取向概率分布、纤维骨架局部孔隙率、纤维与粘接剂组分比例等信息作为控制因素,重构更加准确的 GDL 纤维骨架,并通过形态学处理添加粘接剂得到 GDL 孔尺度模型。对 1 000 μm ×1 000 μm ×200 μm 的 GDL 计算域进行性能模拟计算,分析不同纤维取向分布对 GDL 的气体传输、热电传导性能的影响。由于碳纸在制造中大部分纤维顺着造纸机运行方向(纵向)排列,不同排列方式严重影响 GDL 在纵向、横向和穿面方向(TP 方向)的性能。研究表明:随着纤维纵向分布集中程度提高,气体传输与热电传导性能在纵向提高,但在横向降低;对于 TP 方向,本研究中的纤维集中于纵向的一致性系数为 0.029 的取向分布时, GDL 模型性能较优;电导率及热导率对纤维取向分布比气体扩散率更敏感。

关键词:气体扩散层;纤维追踪;纤维取向概率分布;编程重构;传输性能

中图分类号:TK91

文献标志码:A

文章编号:1000-582X(2023)09-023-10

Reconstruction and transport performance of gas diffusion layer based on the in-plane distribution of fibers

YIN Zequan¹, WANG Hu¹, ZHANG Ruiming^{2,3}, TANG Haolin^{2,3}, SUI PangChieh^{1,2,3}

(1. School of Automotive Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, P. R. China;

2. Foshan Xianhu Laboratory of the Advanced Energy Science and Technology Guangdong Laboratory,

Foshan, Guangdong 528200, P. R. China; 3. Guangdong Hydrogen Energy Institute of WHUT, Foshan,

Guangdong 528216, P. R. China)

Abstract: A new method to reconstruct the microstructure of the gas diffusion layer (GDL) in fuel cells is proposed in this work to investigating the influence of fiber's in-plane distribution on the GDL transport performance. A 3D

收稿日期:2022-06-15 网络出版日期:2022-10-19

基金项目:先进能源科学与技术广东省实验室佛山分中心(佛山仙湖实验室)开放基金(XHD2020-004);广东省重点领域研发计划项目(2019B090909003)。

Supported by the Open-end Funds of Foshan Xianhu Laboratory of the Advanced Energy Science and Technology Guangdong Laboratory (XHD2020-004), and the Guangdong Key Areas Research and Development Program (2019B090909003).

作者简介:尹泽泉(1996—),男,硕士研究生,主要从事质子交换膜燃料电池气体扩散层研究,(E-mail) y_zequan@whut.edu.cn。

通信作者:隋邦傑,男,武汉理工大学,教授,博士生导师,主要从事质子交换膜燃料电池研究,(E-mail) pcsui@whut.edu.cn。

model of GDL is obtained by threshold segmentation of the 2D slices acquired through X-ray computed tomography (XCT) scanning. Fiber-tracking technique is used to differentiate fibers and binders, to obtain information such as the in-plane orientation probability distribution of fibers, local porosity of the fiber skeleton, and the proportion of fiber and binder components as control factors. This enables the reconstruction of a more accurate GDL fiber skeleton. A pore scale model is then reconstructed by adding binders through morphological processing. Performance simulations are conducted on a $1\ 000\ \mu\text{m}\times 1\ 000\ \mu\text{m}\times 200\ \mu\text{m}$ computational domain to analyze the effects of different fiber orientation distributions on the GDL diffusivity, electronic and thermal conductivities. Because most of the fibers of carbon paper in the manufacturing are arranged in the direction of the paper machine (machine direction), different arrangements seriously affect the performance of GDL in the machine direction, cross-machine direction, and through-plane direction (TP direction). The results show that as the concentration of fibers in the machine direction increases, the gas transmission and thermoelectric conduction performance increase in the machine direction, and decrease in the cross-machine direction. In the TP direction, the GDL model with a consistency coefficient of 0.029 for the orientation distribution of fibers concentrated in the machine direction in this study has better performance. The study reveals that the electrical conductivity and thermal conductivity are more sensitive to the fiber orientation distribution than the gas diffusion rate.

Keywords: gas diffusion layer; fiber tracking; fiber orientation probability distribution; programming reconstruction; transport performance

环境污染、化石能源短缺问题日趋严重,世界各国为达到“双碳”目标正致力于发展新型能源,打破传统化石能源技术壁垒,早日摆脱化石能源依赖。其中,质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)由于利用氢气作为燃料,在运行过程中绿色无污染,没有二氧化碳排放,是最有前景的可再生和可持续能源转换设备^[1]。

气体扩散层(gas diffusion layer, GDL)作为质子交换膜的重要组件,位于催化层(catalyst layer, CL)和双极板(bipolar plates, BPPs)之间,微观上以聚丙烯腈(polyacrylonitrile, PAN)碳纤维为骨架^[2-3],利用酚醛树脂^[4]作为粘接剂(binder)将碳纤维紧密粘接在一起,并加入聚四氟乙烯(polytetrafluoroethylene, PTFE)作为防水剂^[1]。在燃料电池运行过程中,GDL主要起3种作用:传输反应物到达催化层^[5],从催化层中传导电子^[6],将阴极生成的水排出^[7-8]。GDL的这些输运性质取决于GDL的内部结构,如孔隙率、碳纤维直径、粘结剂和PTFE的形状及比例等。

为了研究GDL微观输运性质,目前主要有2种获取GDL结构模型的方法:X射线计算机断层扫描技术(X-ray computed tomography, XCT)重构和数值编程重构。Shojaeefard等^[9]和Fadzillah等^[10]对GDL的2种重构方法进行了综述。目前,一些学者运用XCT技术重构真实GDL的结构模型,表征结构参数并分析输运性质^[11-16],但是无法将GDL结构参数与输运性质关联研究,难以进行结构优化,而且XCT技术成本较高。为了克服这一缺点,Schulz等^[17]运用编程重构获取了GDL三维模型,之后数值重构GDL方法被广泛用于微结构^[15-16]、有效传输性能^[18-19]、水行为^[20-21]、力学仿真^[22-23]等研究。运用编程重构技术方便快捷,能获得一系列结构参数的GDL模型,可用于后续的结构分析和性能计算,是优化GDL结构的一种强有力的工具。Simaafrookhteh等^[24-25]指出碳纤维的取向分布呈现一定的正态分布,并将实验统计的纤维取向概率分布考虑到GDL重构中,研究GDL的有效输运性质,发现GDL在面内方向(in-plane direction, IP方向)的输运性质存在明显的各向异性。Zhu等^[18]也考虑了纤维取向分布重构GDL模型,研究气体扩散性质。需要指出的是,上述考虑纤维面内取向分布的GDL性能研究都是基于某一款特定碳纸,具有一定的局限性,没有揭示纤维面内取向分布的差异对碳纸有效扩散率、热导率和电导率的影响。

本研究中采用XCT技术和纤维追踪技术获得碳纤维取向概率分布、局部孔隙率分布、组分比例等参数,考虑有限长碳纤维,优化编程重构方法,获得更加真实的GDL碳纤维骨架结构,并应用形态学方法添加粘接

剂,考虑碳纤维取向分布差异,对GDL的孔径分布进行表征,获得GDL三维模型。对 $1\ 000\ \mu\text{m}\times 1\ 000\ \mu\text{m}\times 200\ \mu\text{m}$ 的GDL计算域进行性能参数模拟计算,分析纤维面内取向分布对GDL有效扩散率、电导率、热导率的影响。

1 方法

本研究中采用结合XCT技术与纤维追踪技术获取气体扩散层碳纤维微结构重构的新方法,生成Toray 060碳纸碳纤维骨架3D结构,从而得到纤维取向概率分布和局部孔隙率分布,并以此为编程重构输入信息,重构碳纤维骨架的3D模型。分析过程如图1所示,对XCT技术得到的碳纸图像利用纤维追踪算法提取出GDL的碳纤维结构,获取组分比例、局部孔隙率分布和纤维取向概率分布,并通过正态分布的离散化处理得到不同的纤维取向概率分布,利用这些信息重构出碳纤维骨架,随后进行形态学操作,添加粘接剂,对GDL模型进行大计算域的数值计算和结构表征,分析碳纤维取向分布差异对GDL性能的影响。

1.1 纤维追踪理论

纤维追踪算法利用AVIZO软件将X射线计算机断层扫描技术得到GDL的切片图进行图像处理得到纤维中心线,其原理来自于文献^[26-28],主要分为2个步骤:第1步是用模拟短柱体的模板计算断层成像内各体素之间的互相关系数值。所使用的模板是一个实心圆柱体,调整圆柱体的直径和长度,用算法将圆柱体内的体素归类,即对于每个体素,存储最高的相关值和产生该值的模板方向。第2步是直线搜索,从一个体素 x 开始的搜索锥沿模板方向延伸至长度 d ,对于搜索锥中的每个候选体素 x_c ,计算其值:

$$S(x, x_c) = C(x_c) L(x, x_c). \quad (1)$$

式中: $C(x_c)$ 是候选点的相关性; S 为体素 x 和 x_c 属于同一根纤维的可能性值; L 是类似于Fischer和Buhmann定义的平滑项^[28],它隐式地惩罚方向场线的偏离和强曲率; $L(x, x_c)$ 定义为

$$L(x, x_c) = e^{-\frac{\beta+\gamma}{w_0}}. \quad (2)$$

式中: w_0 为权重参数; β 和 γ 分别是向量 \vec{xx}_c 和点 x 、点 x_c 的模板方向之间的角度。产生最大 S 值的体素被选择为下一个点。从这一点开始新的搜索,如果在搜索锥中找不到 x_c ,搜索停止。

通过上述2个步骤,得到纤维中心线的空间分布,生成碳纤维骨架,统计得出纤维和粘接剂占比、局部孔隙率和纤维取向角度信息,利用这些信息进行编程重构得到更准确的GDL模型。

1.2 纤维取向概率分布设计

以往气体扩散层的平面上两方向由于性能与结构各向同性,被统称为面内方向(in-plane direction, IP方向),垂直碳纸方向称之为穿面方向(through-plane direction, TP方向)。在造纸工艺中,纸张在IP方向上有一定的方向细分,结构和性能存在一定差异,如图2(a)所示,大部分纤维顺着造纸机运行的方向排列,这个方向称为纵向(machine direction, MD),而与运行方向垂直的方向称为横向(cross-machine direction, CMD)。纤维在MD方向上的角度分布差异对GDL传输性能、力学性能造成较大影响。纤维取向角度概率分布是GDL碳纤维结构中的重要属性,影响GDL的传质传热性能,而目前在编程重构中考虑该因素的研究欠缺,SimaafrOOKhteh等^[24-25]和Zhu等^[18]的研究中统计得出GDL的碳纤维取向概率分布类似正态分布,导致GDL的面内传输性能不同。本研究中以MD和CMD两垂直轴作为直角坐标,定义纤维取向角度从-CMD方向转向MD和CMD方向,纤维角度从 -90° 逐渐增加到 90° 。通过将正态分布离散化,获取不同纤维取向角度下对应的概率分布,作为重构条件获得GDL结构。纤维取向角度概率分布如图2(b)所示,设计了4个模型与Toray碳纸模型进行对比,纤维取向角度取值范围从 -90° 到 90° ,概率分布均值为 0° 。

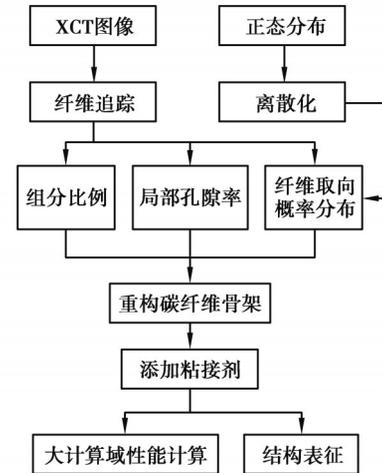
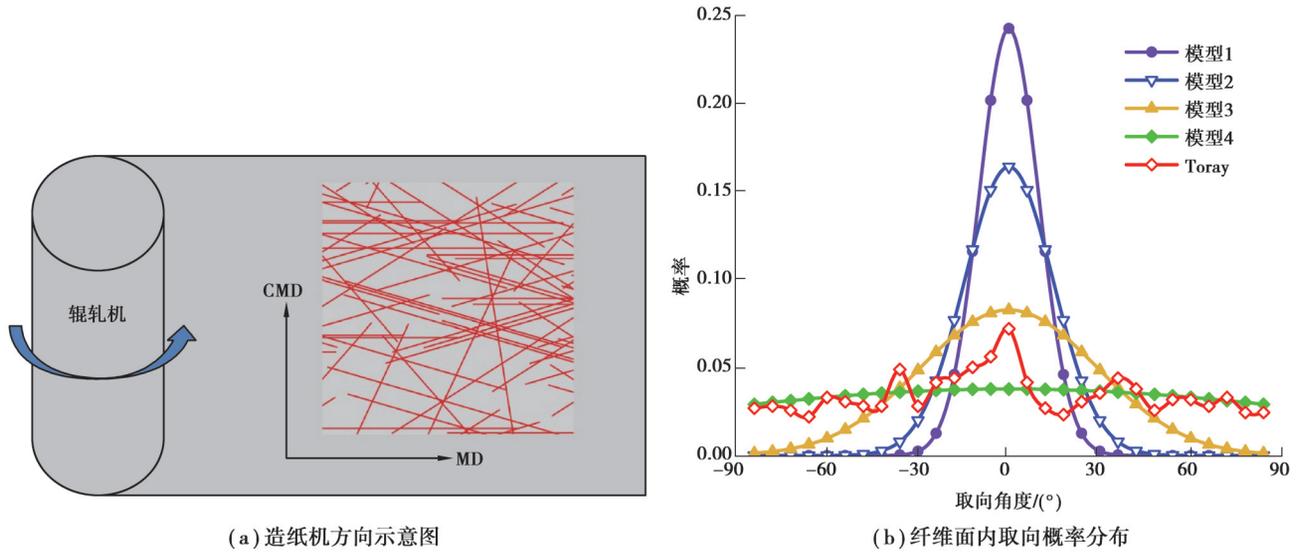


图1 本文研究路线

Fig. 1 Flowchart of this study



(a) 造纸机方向示意图

(b) 纤维面内取向概率分布

图2 纤维取向角度定义与概率分布图

Fig. 2 Definition of fiber orientation angle and probability distribution

为了量化纤维取向特性,本文中利用标准差概念对取向概率进行数据处理,定义纤维一致性系数

$$k = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (p - \bar{p})^2}{n-1}} \quad (3)$$

式中: p 是取向角度概率值; \bar{p} 是取向角度概率值的平均值; n 是角度取值数量。Toray 060碳纸的纤维一致性系数为0.011,模型1~4的纤维一致性系数分别为0.070、0.054、0.029、0.003,呈逐步降低趋势,代表纤维面内角度分布逐渐均匀化,且模型4的 k 值比Toray 060模型的小,表明模型4纤维面内分布比Toray更加均匀,与图2(b)中的展示纤维面内取向分布曲线一致。

1.3 孔尺度模拟理论

评价不同微结构GDL性能的许多经验公式基于体孔隙率进行计算,忽略了内部微观结构的影响,低估或者高估了GDL的传输性能。Yiotis等^[29]利用编程重构 $200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ 计算域进行GDL传输性能计算,缺乏一定的代表性。然而对GDL大计算域进行传输性能模拟是一项具有挑战性的工作,目前的研究欠缺。本文中利用AVIZO软件,对重构 $1000 \mu\text{m} \times 1000 \mu\text{m} \times 200 \mu\text{m}$ 大小的GDL碳纤维模型进行阈值化和相位分割处理后,进行孔尺度模拟,计算多相微结构的气体扩散层的气体扩散率、电导率和热导率数值。

1.3.1 气体扩散率计算

多孔介质中气体扩散率是表征孔连通性的重要参数,高气体扩散率数值的GDL结构可以使反应气体快速到达催化层,提升电池性能。为了计算GDL的气体扩散率,考虑菲克第二扩散定律:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D_{\text{eff}} \cdot \nabla^2 c = 0 \quad (4)$$

式中: c 是气体浓度; t 是时间; D_{eff} 是有效扩散系数。

采用体积平均法将上述方程转化,求解无量纲的有效分子扩散张量:

$$\varepsilon \frac{\mathbf{D}_{\text{eff}}}{D_{\text{bulk}}} = \varepsilon \left(\mathbf{I} + \frac{1}{V_f} \int_{S_s} \mathbf{n}_{fs} \mathbf{b} \, ds \right) \quad (5)$$

式中: ε 是孔隙率; \mathbf{D}_{eff} 是有效扩散系数张量; D_{bulk} 是体扩散系数; \mathbf{I} 是单位张量; s 是面积; \mathbf{b} 是一个闭包变量,用来将Fick方程转换成矢量问题; V_f 和 S_s 分别是流体的体积与流体-固体界面面积; \mathbf{n}_{fs} 是一个垂直于流固界面从流体指向固体的向量。AVIZO在变量 \mathbf{b} 和几何上应用周期性边界条件来关闭矢量问题,并定义了流固界面条件

$$-\mathbf{n}_{fs} \nabla \mathbf{b} = \mathbf{n}_{fs} \quad (6)$$

1.3.2 电导率/热导率计算

良好的GDL需要有足够的导电和导热性能。电导率会影响燃料电池的极化曲线,热导率会影响燃料电池的电化学反应速率,准确测定GDL电导率和热导率对评估燃料电池性能至关重要。电子(电流)的通量用欧姆定律计算如下:

$$j_e = -\sigma_e \nabla \phi_e \quad (7)$$

式中: j_e 是电子通量; σ_e 是材料电子电导率; ϕ_e 是电子电势。电子只能在碳纤维和粘接剂中传导,而热量还可以在孔隙中传递。热通量用傅里叶定律求解:

$$j_T = -\lambda \nabla T \quad (8)$$

式中: j_T 是热通量; λ 是材料导热系数; T 是温度。GDL由石墨化的纤维和无定形碳化树脂粘接剂组成,这2种材料的电导率和热导率相差较大。本文中模拟使用Toray碳纸纤维和粘接剂的电导率、热导率参数值如表1所示。

表1 材料的电导率和热导率^[30]

Table 1 Electrical and thermal conductivity of materials^[30]

材料	电导率/(S·m ⁻¹)	热导率/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)
纤维	100 000	100
粘接剂	22 000	37
空气		0.01

综上所述,电子和热量的守恒方程为

$$\nabla j_e = 0, \quad (9)$$

$$\nabla j_T = 0. \quad (10)$$

为了求解上述方程,将入口和出口的边界设置为Dirichlet边界条件,其余4个边界设为绝缘、绝热条件。GDL的有效输运性质由通量计算得出:

$$M_{\text{eff}} = -\frac{j l}{c_2 - c_1} \quad (11)$$

式中: M_{eff} 是有效输运参数; j 是模拟计算的通量; l 是计算域的长度; c_1 、 c_2 是预先描述的边界条件。

2 结果与讨论

2.1 纤维追踪结果

将CT灰度图像阈值分割形成二值图像,如图3(a)所示,由于碳纤维与粘接剂的灰度值相近,此时模型中并不能区分出这2种材料。随后二值图像经过纤维追踪,将纤维体素聚类,直线搜索后获得纤维的中心线,并赋予纤维直径生成碳纤维骨架模型,从而区分出碳纤维和粘接剂2种材料,如图3(b)所示,红色为碳纤维,黄色为粘接剂。

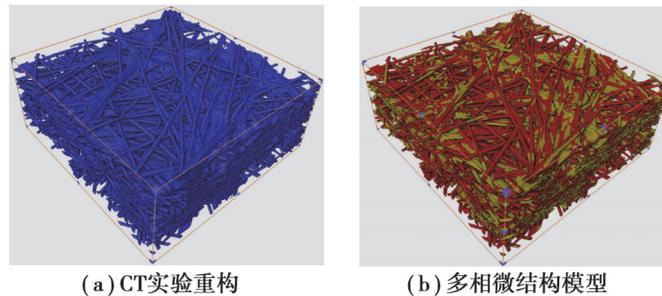


图3 3D模型图

Fig. 3 3D model diagram

2.2 3D微结构重构

通过追踪纤维获取碳纤维面内取向概率分布、局部孔隙率、粘接剂的固相占比等信息,考虑纤维有限长,利用MATLAB编程重构生成如图4(a)所示域大小为 $1\ 000\ \mu\text{m}\times 1\ 000\ \mu\text{m}\times 200\ \mu\text{m}$ 的碳纤维骨架。从图中可以看出局部碳纤维分布密度、长度稍有不同,这与实际的碳纤维结构相符。基于纤维骨架使用AVIZO软件进行形态学闭运算,产生在固相中占比体积分数为22.7%的盘状粘接剂,如图4(b)所示。最终GDL多相结构展示在图3(c)中,模型孔隙率为0.78。

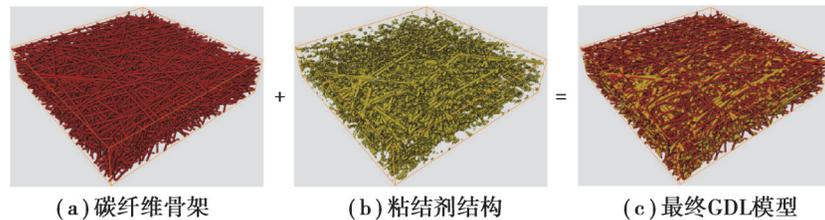


图4 重构3D渲染图

Fig. 4 3D rendering of the reconstruction

2.3 局部孔隙率分布

局部孔隙率分布是气体扩散层的重要结构参数,用于评价GDL的TP方向的孔隙率变化情况。GDL在TP方向上局部孔隙率的不均匀分布对气体扩散率有重要影响。本研究中利用纤维追踪算法分离出碳纤维与粘接剂,获得碳纤维骨架的局部孔隙率作为重构控制条件,如图5所示,编程重构得到的碳纤维骨架局部孔隙率与纤维追踪算法的结果吻合程度较高,表明重构算法具有一定的精确度。获得纤维骨架后通过数值图像形态学运算添加粘接剂重构出最终的GDL结构,其局部孔隙率与CT实验结果对比。由于GDL粘接剂形态结构复杂,难以完全实现现实GDL的粘接剂重构,导致重构的GDL局部孔隙率与实验存在一定差距。

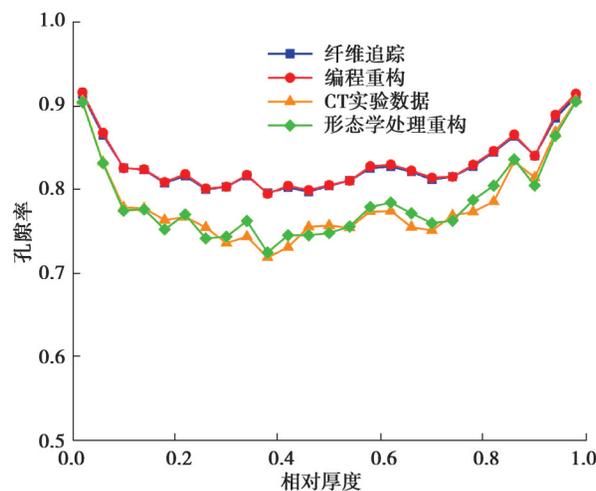


图5 局部孔隙率分布实验与重构验证

Fig. 5 Local porosity distribution experiment and reconstruction verification

2.4 纤维取向概率分布

纤维取向角度概率分布表征纤维的面内方向分布情况,可用于定性了解纤维在面内方向的气体扩散率、电导率和热导率等参数的差异。目前大多数的GDL数值重构研究中,假设碳纤维随机均匀分布,这与实际情况不符。本研究中得出Toray 060 GDL的碳纤维取向概率分布情况如图6所示,碳纤维在 0° 附近的角范围内分布较多,通过编程重构严格控制碳纤维的面内方向分布,结果表明,重构得到的纤维面内取向分布与实验获得的结果较为吻合,可用于后续不同纤维面内取向分布的GDL模型获取,研究其对结构与性能的影响。

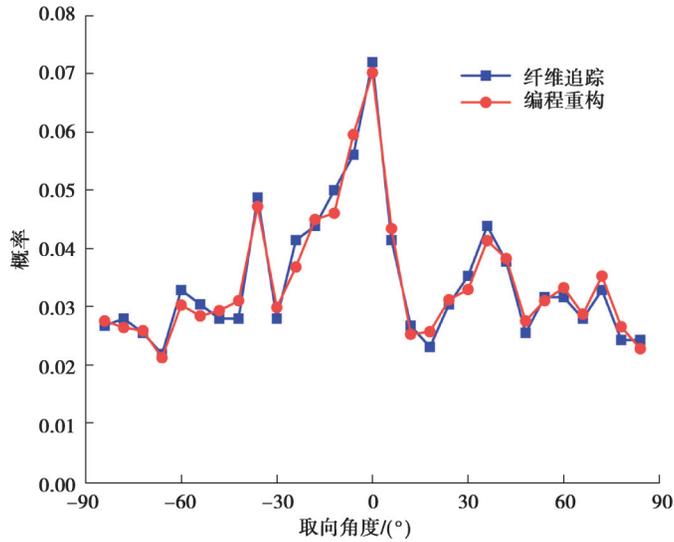


图 6 Toray 060 碳纸纤维取向概率分布

Fig. 6 Probability distribution of fiber orientation of Toray 060 carbon paper

2.5 孔径分布

孔径分布影响 GDL 的气体扩散性能。利用等效体积法,将不规则孔隙等效成球体计算直径来统计孔径分布情况。图 7(a)中 Toray 060 GDL 的 90% 孔的孔径小于 60 μm,孔径分布主要集中于 20~50 μm 范围内,平均孔径 42 μm,与文献^[11]报道较为符合。图 7(b)表明,随纤维一致性系数增大,模型 4~1 的 GDL 孔径分布曲线向右偏移,平均孔径逐渐增大,模型大孔分布逐渐增多,小孔分布减少。这是因为纤维逐渐集中在纵向分布,导致孔的连通性更好,大孔增多。

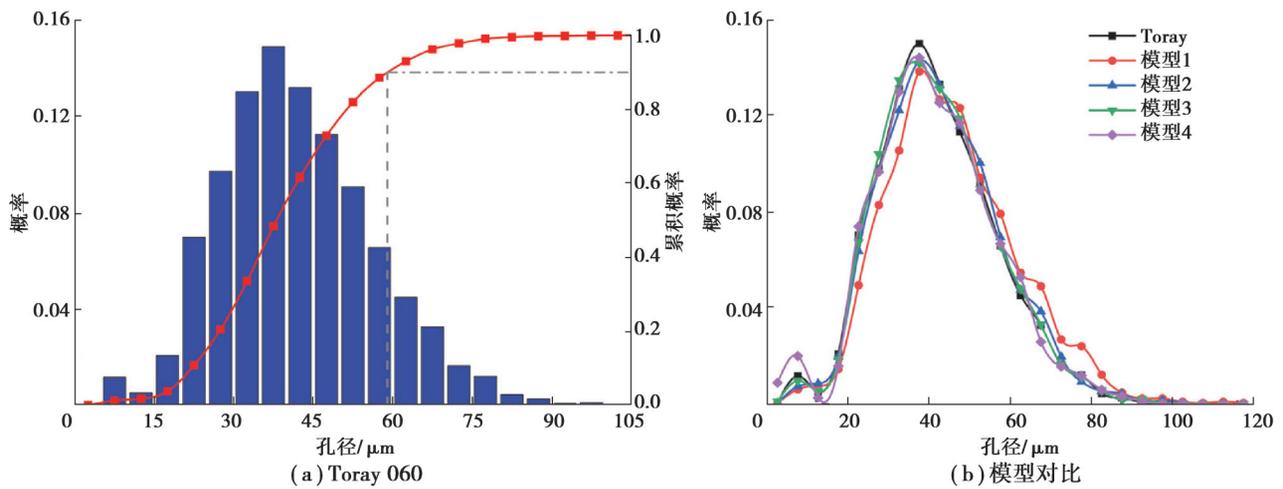


图 7 孔径分布

Fig. 7 Pore size distribution

2.6 气体扩散率

在 AVIZO 中利用体积平均法求解无量纲的有效气体扩散率 $\epsilon \frac{D_{\text{eff}}}{D_{\text{bulk}}}$,用于比较各模型的气体扩散性能,反映 GDL 模型中孔的连通性和迂曲度。在 1.2 节中,定义了 GDL 纤维取向一致性系数,代表了纤维在纵向上的角度分布集中程度,用于量化纤维的面内取向分布差异,基准模型 Toray 060 碳纸的纤维一致性系数为 0.011。为了更好地进行对比,性能分析论述部分均用一致性系数作为变量。图 8(a)中展示了各模型在 MD、CMD、TP 方向上的气体扩散率。随着纤维一致性系数增大,碳纸纵向气体扩散率增大,横向气体扩散率降低。图 8

(b)~(d)展示了模型1的切片图,因为纤维在纵向上的集中程度增大,导致在图8(b)MD-O-TP切片图中的纵向上的孔连通性较好,图(c)CMD-O-TP切片图中,横向的孔连通性较差,从而造成了气体传输在纵向和横向的不同变化。此外,随着纤维一致性系数增大,TP方向气体扩散率先增加后减小,说明在碳纸制备过程中并不是纤维均匀分布最好,这与以往大多数研究中假设纤维在面内方向均匀地随机分布不同,存在一个适当的有利于TP方向气体传输的一致性系数(在本研究中其值为 $k = 0.029$),当纤维一致性系数过大,GDL在TP方向上因为纤维并行排列和粘接剂面内分布,并行排列的纤维附近的孔洞与其他小孔洞处填充粘接剂,严重阻碍气体传输路径,如图8(d)所示,导致气体扩散性能降低。与Toray 060碳纸($k = 0.011$)相比, k 增加至0.07,CMD、TP方向气体扩散性能降低10%,MD方向气体扩散性能提高10%。

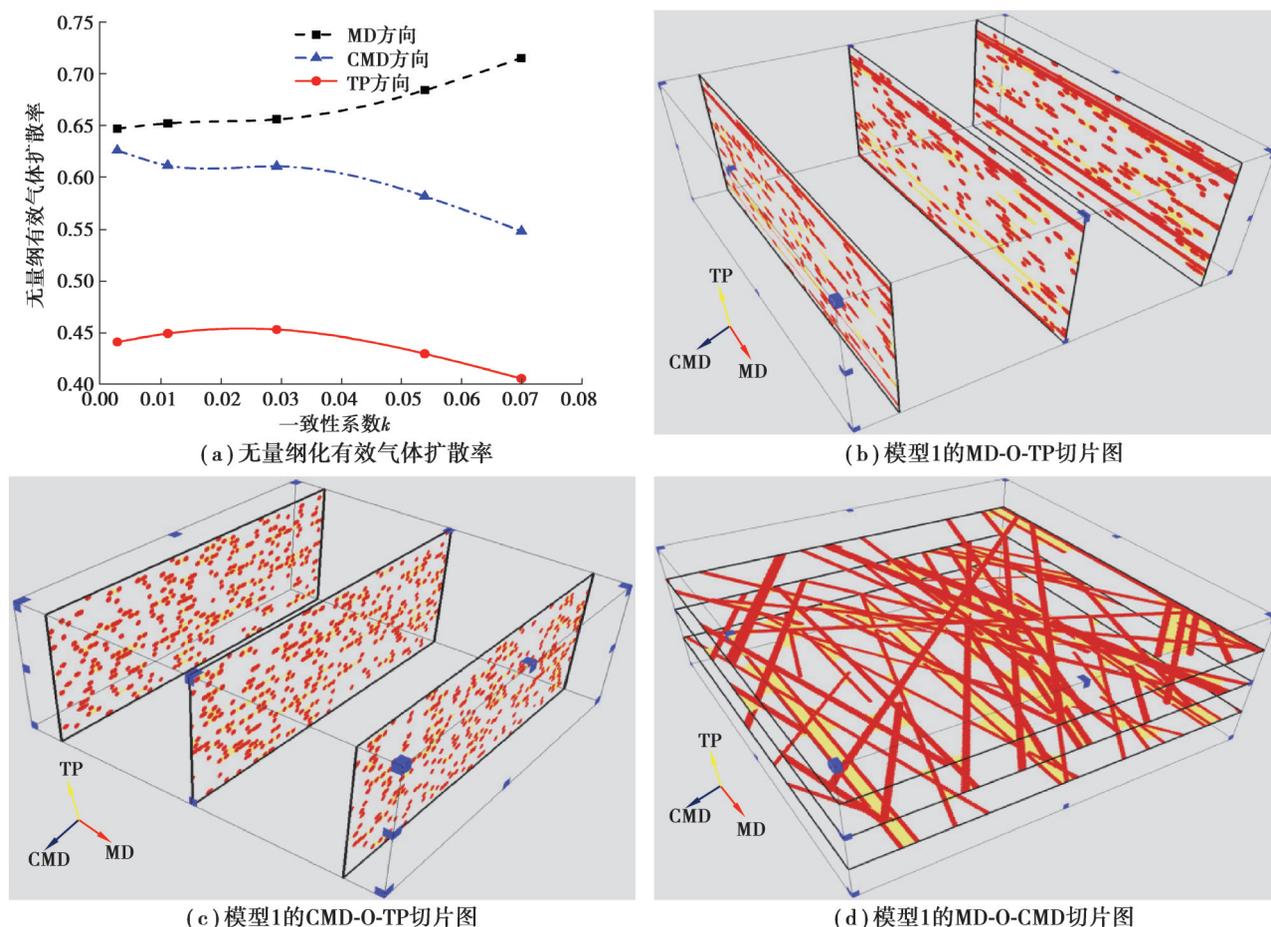


图8 无量纲有效气体扩散率与GDL模型切片图

Fig. 8 The dimensionless effective gas diffusivity and section diagram of GDL model

2.7 电导率与热导率

电导率和热导率作为GDL的基本性能参数,表征GDL中材料的连续性。电子在碳纤维与粘接剂中传导,而热量与电子相比,还能在孔隙空气中传递,在不同的介质中电子和热量的传导系数不同,并且热量在空气中传递系数远小于在碳纤维与粘接剂中,因此,GDL中电子传导和热量传导性能变化趋势相同(图9)。与气体扩散率变化相似,随着纤维一致性系数 k 增大,电导率与热导率在纵向逐渐增大,在横向上的性能变化与纵向相反。这是因为纤维逐渐在纵向集中分布,导致GDL结构在纵向上材料连续性较好,横向的材料连续性较差,使得纵向的电子传导路径多于横向。此外,当 $k < 0.029$,电导率和热导率的变化幅度较小;当 $k > 0.029$,在MD方向和CMD、TP方向上导电传热性能提高和降低的幅度明显增大。说明纤维一致性系数 $k < 0.029$ 的正态分布有利于TP方向的电子与热量传递,同时纵向和横向导电和导热性能也保持在较高的水平。与Toray 060碳纸(纤维一致性系数 $k = 0.011$)相比,纤维一致性系数增加至0.07,MD方向电导率和热导率提高约32%,CMD和TP方向电导率和热导率分别降低约50%和18%,电导率与热导率对纤维取向分布比气体扩散率更敏感。

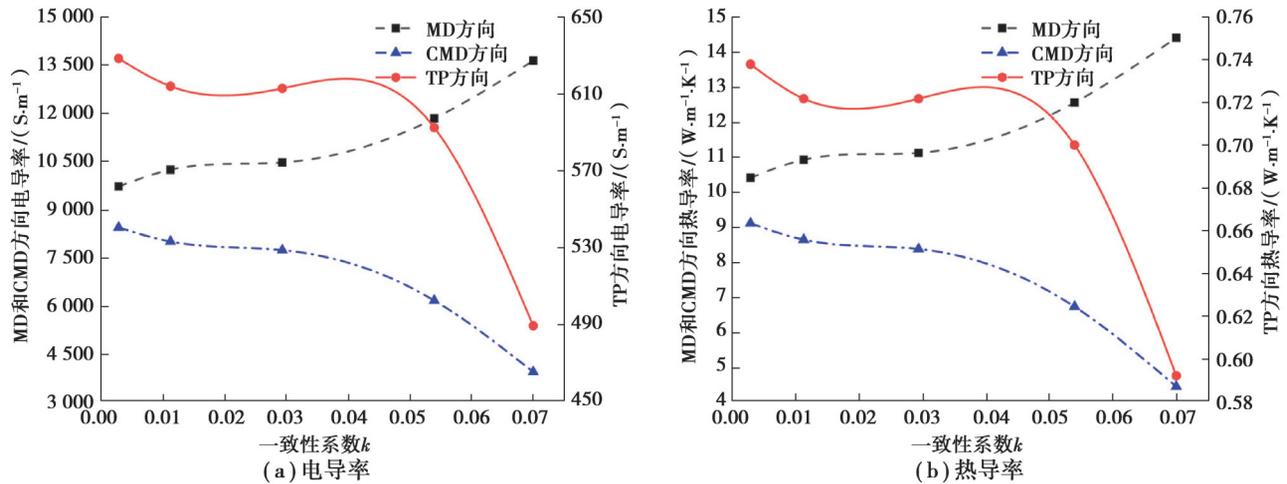


图9 电子与热量传导性能

Fig. 9 Electrical and thermal conductivity

3 结论

对大计算域的多相微结构气体扩散层考虑多种因素进行编程控制,获得更加准确的孔尺度模型,利用AVIZO进行数值模拟计算,分析纤维取向分布差异对GDL的气体扩散率、电导率、热导率的影响。主要研究结果和结论如下。

1)结合XCT技术和纤维追踪技术区分出GDL中的碳纤维与粘接剂,获得纤维取向概率分布、局部孔隙率分布和组分比例,更加准确地重构多相微结构的气体扩散层模型。

2)对 $1\ 000\ \mu\text{m}\times 1\ 000\ \mu\text{m}\times 200\ \mu\text{m}$ GDL大计算域进行气体扩散率、电导率和热导率的计算,模型更具有代表性,计算结果相对更加准确。

3)设计不同纤维面内取向分布曲线,定义纤维一致性系数,分析纤维取向分布差异对GDL传输性能的影响。随着纤维一致性系数增大,传输性能在纵向提高,但在横向降低。纤维一致性系数为0.029时TP方向性能最佳。电导率与热导率对纤维取向分布比气体扩散率更敏感。

参考文献

- [1] Majlan E H, Rohendi D, Daud W R W, et al. Electrode for proton exchange membrane fuel cells: a review[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, 89: 117-134.
- [2] Liao Y K, Ko T H, Liu C H. Performance of a polymer electrolyte membrane fuel cell with fabricated carbon fiber cloth electrode[J]. *Energy & fuels*, 2008, 22(5): 3351-3354.
- [3] Kim S, Kuk Y S, Chung Y S, et al. Preparation and characterization of polyacrylonitrile-based carbon fiber papers[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2014, 20(5): 3440-3445.
- [4] Hung C H, Chiu C H, Wang S P, et al. Ultra thin gas diffusion layer development for PEMFC[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37(17): 12805-12812.
- [5] Lee S J, Lee C Y, Yang K T, et al. The surface morphology effects of a metallic bipolar plate on the interfacial contact resistance of a proton exchange membrane fuel cell[J]. *International Journal of Green Energy*, 2013, 10(7): 739-753.
- [6] Owejan J P, Trabold T A, Mench M M. Oxygen transport resistance correlated to liquid water saturation in the gas diffusion layer of PEM fuel cells[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2014, 71: 585-592.
- [7] Gostick J T, Fowler M W, Ioannidis M A, et al. Capillary pressure and hydrophilic porosity in gas diffusion layers for polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 156(2): 375-387.
- [8] Gostick J T, Ioannidis M A, Fowler M W, et al. On the role of the microporous layer in PEMFC operation[J]. *Electrochemistry Communications*, 2009, 11(3): 576-579.
- [9] 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.
- [10] 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.

- [11] 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.
- [12] Zenyuk I V, Parkinson D Y, Connolly L G, et al. Gas-diffusion-layer structural properties under compression via X-ray tomography[J]. *Journal of Power Sources*, 2016, 328: 364-376.
- [13] James J P, Choi H W, Pharoah J G. X-ray computed tomography reconstruction and analysis of polymer electrolyte membrane fuel cell porous transport layers[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37(23): 18216-18230.
- [14] Eller J, Rosén T, Marone F, et al. Progress in in situ X-ray tomographic microscopy of liquid water in gas diffusion layers of PEFC[J]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2011, 158(8): B963.
- [15] Hinebaugh J, Gostick J, Bazylak A. Stochastic modeling of polymer electrolyte membrane fuel cell gas diffusion layers - Part 2: a comprehensive substrate model with pore size distribution and heterogeneity effects[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(24): 15872-15886.
- [16] Hinebaugh J, Bazylak A. Stochastic modeling of polymer electrolyte membrane fuel cell gas diffusion layers - Part 1: physical characterization[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(24): 15861-15871.
- [17] Schulz V P, Becker J, Wiegmann A, et al. Modeling of two-phase behavior in the gas diffusion medium of PEFCs via full morphology approach[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2007, 154(4): B419.
- [18] Zhu L, Yang W, Xiao L, et al. Stochastically modeled gas diffusion layers: effects of binder and polytetrafluoroethylene on effective gas diffusivity[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2021, 168(1): 014514.
- [19] Zhu L J, Wang S F, Sui P C, et al. Multiscale modeling of an angled gas diffusion layer for polymer electrolyte membrane fuel cells: performance enhancing for aviation applications[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2021, 46(39): 20702-20714.
- [20] Zhou X, Niu Z Q, Bao Z M, et al. Two-phase flow in compressed gas diffusion layer: finite element and volume of fluid modeling[J]. *Journal of Power Sources*, 2019, 437: 226933.
- [21] He P, Chen L, Mu Y T, et al. Lattice Boltzmann method simulation of ice melting process in the gas diffusion layer of fuel cell [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 149: 119121.
- [22] 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.
- [23] Zhu L J, Zhang H, Xiao L S, et al. Pore-scale modeling of gas diffusion layers: effects of compression on transport properties [J]. *Journal of Power Sources*, 2021, 496: 229822.
- [24] Simaafrookhteh S, Taherian R, Shakeri M. Stochastic microstructure reconstruction of a binder/carbon fiber/expanded graphite carbon fiber paper for PEMFCs applications: mass transport and conductivity properties[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2019, 166(7): 3287-3299.
- [25] Simaafrookhteh S, Shakeri M, Baniassadi M, et al. Microstructure reconstruction and characterization of the porous GDLs for PEMFC based on fibers orientation distribution[J]. *Fuel Cells*, 2018, 18(2): 160-172.
- [26] Roseman A M. Particle finding in electron micrographs using a fast local correlation algorithm[J]. *Ultramicroscopy*, 2003, 94(3/4): 225-236.
- [27] Weber B, Greenan G, Prohaska S, et al. Automated tracing of microtubules in electron tomograms of plastic embedded samples of *Caenorhabditis elegans* embryos[J]. *Journal of Structural Biology*, 2012, 178(2): 129-138.
- [28] Rigort A, Günther D, Hegerl R, et al. Automated segmentation of electron tomograms for a quantitative description of actin filament networks[J]. *Journal of Structural Biology*, 2012, 177(1): 135-144.
- [29] Yiotis A G, Kainourgiakis M E, Charalambopoulou G C, et al. Microscale characterisation of stochastically reconstructed carbon fiber-based gas diffusion layers: effects of anisotropy and resin content[J]. *Journal of Power Sources*, 2016, 320: 153-167.
- [30] García-Salaberri P A, Zenyuk I V, Shum A D, et al. Analysis of representative elementary volume and through-plane regional characteristics of carbon-fiber papers: diffusivity, permeability and electrical/thermal conductivity[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 127: 687-703.
- [31] Tayarani-Yoosefabadi Z, Harvey D, Bellerive J, et al. Stochastic microstructural modeling of fuel cell gas diffusion layers and numerical determination of transport properties in different liquid water saturation levels[J]. *Journal of Power Sources*, 2016, 303: 208-221.