



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΔΥΤΙΚΗΣ ΜΑΚΕΔΟΝΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

«ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΩΝ ΠΕΔΙΩΝ ΡΟΗΣ
ΚΑΙ ΤΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ
ΣΤΗ ΜΙΚΡΟΚΛΙΜΑΚΑ ΤΩΝ ΠΟΡΩΔΩΝ ΥΛΙΚΩΝ»

Εργασία υποβληθείσα για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος

Αναστάσιος Σ. Κοπανίδης
Μηχανολόγος Μηχανικός Α.Π.Θ.

Εξεταστική Επιτροπή:

Καθηγητής	Μπάρτζης Ιωάννης
Καθηγητής	Τομπουλίδης Ανανίας
Reader	Γκαβαϊσές Εμμανουήλ
Αναπληρωτής Καθηγητής	Κικκινίδης Ευστάθιος
Αναπληρωτής Καθηγητής	Μπούρης Δημήτριος
Αναπληρωτής Καθηγητής	Τουρλιδάκης Αντώνιος
Επίκουρος Καθηγητής	Υάκινθος Κύρος

Κοζάνη 2009

*Αφιερώνεται,
Στους γονείς μου*

και

*Σε όσους έδωσαν τη ζωή τους
για να χαιρόμαστε σήμερα την ελευθερία μας.*

*Στον ήρωα Σμηναγό (Ι) Κωσταντίνο Ηλιάκη,
που «έπεσε» πάνω από την Κάρλαθο
τον Μάιο του 2006
-ενώ η διατριβή αυτή έπαιρνε σάρκα και οστά-
κατά τη διάρκεια εμπλοκής με Τούρκους εισβολείς*

Ευχαριστίες

Υπάρχουν στη ζωή ενός ανθρώπου στιγμές που φτάνει στα όρια του, φοβάται για την ψυχική και πνευματική του υγεία και επιστρατεύει ότι έχει στη διάθεσή του, για να συνεχίσει στην πορεία που επέλεξε. Τέτοιες στιγμές υπήρξαν πολλές σε αυτή την προσπάθεια-ιδιαίτερα τους τελευταίους μήνες, όμως κάποιοι άνθρωποι ηθελημένα ή όχι, με βοήθησαν να συνεχίσω.

Κατ'αρχάς λοιπόν, θέλω να ευχαριστήσω τους γονείς μου-εκ μέρους και των τριών παιδιών τους- για όσα μας πρόσφεραν με αιματηρές θυσίες μέχρι τώρα. Όσα (νομίζουμε πως) μας στέρησαν, απλά μας έκαναν καλύτερους σαν ανθρώπους. Τίποτα δε θα ήταν δυνατό χωρίς αυτούς. Αυτοί γινόταν οι αποδιοπομπαίοι τράγοι σε κάθε κακοτοπιά που συνέβαινε.

Εκτός από αυτούς όμως και τα αδέρφια μου, ο Αποστόλης και ο Δημήτρης, σήκωσαν το φορτίο του «αποσβέστη» σε περιόδους που ήμουν φορτισμένος, χωρίς να είναι υποχρεωμένα, ούτε να έχουν κάποιο όφελος. Τους ευχαριστώ και τους δύο για όσα μου δώσαν και για όσα μοιράστηκαν μαζί μου. Να ξέρουν ότι όλα θα πάν καλά και ότι με τη σκληρή δουλειά δεν έχεις τίποτα να φοβάσαι, ούτε για τίποτα να αισθάνεσαι υποχρεωμένος.

Την τριμελή επιστημονική επιτροπή μου, την είχα σαν πρότυπο επιστημόνων και σαν έμπνευση για όλη τη διαδικασία. Τους ευχαριστώ, τον καθένα ξεχωριστά, για την καθοδήγηση και τη βοήθειά τους.

Στην εταιρεία **Fluid-Research**, φορέα συγχρηματοδότησης και συνεργάτη ελκρινή, θέλω να εκφράσω τις ευχαριστίες μου τόσο για την επιστημονική καθοδήγηση, όσο και για το «ξελάσπωμα» σε στιγμές που «βάλτωνα». Ανδρέα και Μανώλη σας ευχαριστώ! Γιώργο να'σαι καλά και συ για τη βοήθειά σου...

Τις φίλες και συναδέλφους Μελίνα Πετρίδου και Σοφία Μαυρίδου, τις ευχαριστώ και μόνο επειδή τις γνώρισα: Η πρώτη ήταν εκεί όποτε χρειαζόμουν τη συμβουλή, τη βοήθεια ή την παρέα της και η δεύτερη είναι «η μικρή αδερφή που ποτέ δεν είχα», χωρίς την οποία δεν ξέρω σε τι άκρα θα είχα φτάσει ορισμένες φορές... Τις αξίζουν τα καλύτερα και είμαι σίγουρος ότι θα τα

καταφέρουν σε όλους τους τομείς. Είναι και οι δυο τους εξαιρετικοί άνθρωποι. Κορίτσια υπομονή!!! Η δικαίωση πλησιάζει...

Τον «συγκάτοικο» μου στο γραφείο **204**, φίλο και συνάδελφο Κώστα Ορδουμποζάνη τον ευχαριστώ για την υπομονή που έδειξε όλο αυτό το διάστημα, έχοντας ένα τόσο θορυβώδες και δύστροπο πλάσμα όπως εγώ απέναντί του. Η συμβολή του σε όλα τα θέματα δεν ήταν ασήμαντη. Κώστα, μην ανησυχείς. Όλα θα πάν καλά. Ξέρεις τι εννοώ...

Καθοριστική ήταν η ψυχολογική και επιστημονική βοήθεια που έδιναν σε καθημερινή βάση οι υπόλοιποι «ξενύχτες» του ορόφου, οι «ΠΕΝΕΔιστές» φίλοι και συνάδελφοι Σάκης Γκατζούλης, Φώτης Κόνιας και Γιώργος Τζολάκης. Μόνο καλά λόγια έχω να πω για τον καθένα καθώς είναι αξιέπαινα παιδιά και οι δύο ακριανοί ξενυχτούν και εκτός Πανεπιστημίου! Τους ευχαριστώ και τους τρεις για τις παρατηρήσεις και τη βοήθεια που πρόσφεραν σε διάφορα ζητήματα και τους εύχομαι συγχαρητήρια για την ολοκλήρωση των διδακτορικών τους.

Στα δυσκολότερα κομμάτια αυτής της διαδρομής, αρκετοί άνθρωποι βοήθησαν με τον τρόπο τους ώστε να μη λυγίσω:

Ο Ζήσης, βράχος ακλόνητος σε χρόνια δύσκολα και δυσκολότερα, καθημερινός φίλος με όλη τη βαθειά σημασία της λέξης.

Ο Βαγγέλης, σημείο αναφοράς και δέκτης ατέρμονων συζητήσεων και αναλύσεων, «παραγιός», όπως λέει, της μάνας μου και ισορροπιστής δεινός της ζωής και της φιλίας μας.

Η Ελένη Μαυρίδου, αρχή της διαδρομής, από τα χρόνια που τα ζόρια ήταν γραμμένα με **bold**. Δεξαμενή με ανυπολόγιστη υπομονή και συμπόνια για όλους μας. Ο Θεός να την έχει καλά.

Νίκο τα βουνά που ανεβήκαμε τόσες φορές μου έδιναν να καταλάβω πως κανένα βουνό τελικά δεν είναι αδύνατο να το ανεβείς-να'σαι καλά γιατί εξαιτίας σου είδαν τα μάτια μου τα ωραιότερα τοπία που έχουν μέχρι στιγμής δει, άλλα υπάρχουν και κάποια που μέλλει να τα δούμε...Και συ κι όλη η παρέα να είστε γεροί.

Κίμωνα, βγήκες απ'το συρτάρι πάλι όταν δε γινόταν αλλιώς. Καθόλου δε σε μειώνει αυτό. Ίσα-ίσα... Να'σαι καλά!

Κωστάκη (Μανούσο), ήθελες δεν ήθελες έφαγες τρέξιμο όποτε σε χρειαζόμουν, όμως οι φορές που ερχόσουν στη δύσκολη στιγμή χωρίς να σου το πεί κανείς, μόνο τυχαίες δεν είναι. Σε ευχαριστώ για όλα.

Στην αλυσίδα των ανθρώπων που δεν ξέρω γιατί τους γνώρισα, ανήκει ο επιβλέπων μου Αναπλ. Καθ. Δημήτρης Μπούρης, ο οποίος αν δεν ήταν εξαιρετικός Μηχανολόγος και Παιδαγωγός, θα μπορούσε να είναι και Φιλολόγος, Μηχανολόγος και Παιδαγωγός. Δεν ξέρω ποια τύχη με έστειλε από σπόντα στην πόρτα του αλλά ξέρω πόσο τυχερός είμαι που έγινα κοινωνός της ποιότητας της δουλειάς του (και της κούρασης που αυτό συνεπάγεται!), της επιστημοσύνης του και της διαπαιδαγωγικής του συμπεριφοράς. Φέρθηκε περισσότερο σαν συνεργάτης παρά σαν καθηγητής, προϊστάμενος ή εργοδότης (για να μην πω αφεντικό και πειραχτεί). Δεν τον ευχαριστώ για αυτά που λέω πιο πάνω γιατί ξέρω τι θα πει, θα μου μείνει όμως μια κουβέντα που κάναμε κάτω στο εργαστήριο ένα βράδυ, όποτε θα χωρέσω όλα τα ευχαριστώ τεσσάρων χρόνων σε αυτή.

Θα ήταν αγνωμοσύνη, αχαριστία και μικρότητα αν παρέλειπα την αναφορά μου στην κοπέλα που με ανέχτηκε για περισσότερα από έξη χρόνια και που τώρα δεν είναι εδώ. Επειδή δε φημίζομαι για καμία από τις παραπάνω ιδιότητες, την ευχαριστώ για όλα και γιατί χωρίς αυτή δεν ξέρω αν θα είχα φτάσει ως εδώ. Ο Θεός να τη έχει καλά εκεί που είναι. Ελπίζω η τραγωδία που ζήσαμε να έγινε για κάποιο σοβαρό λόγο.

Τέλος ευχαριστώ το Θεό, γιατί χωρίς την πίστη μου σε αυτόν, τίποτα δε θα πραγματοποιούνταν, από τα παιδικά μου χρόνια μέχρι σήμερα **28** Νοεμβρίου **2009**.

Η παρούσα διδακτορική διατριβή εκπονήθηκε στα πλαίσια ερευνητικού προγράμματος με τίτλο «Αριθμητική διερεύνηση των πεδίων ροής και της μεταφοράς θερμότητας στη μικροκλίμακα των πορωδών υλικών».

Το έργο συγχρηματοδοτείται

- 75% της Δημόσιας Δαπάνης από την Ευρωπαϊκή Ένωση-Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
- 25% της Δημόσιας Δαπάνης από το Ελληνικό Δημόσιο Υπουργείο Ανάπτυξης-Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας

στο πλαίσιο του Μέτρου 8.3 του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα-Γ' Κοινοτικό Πλαίσιο Στήριξης.

Μέρος της χρηματοδότησης προέρχεται από τον ιδιωτικό τομέα, Fluid Research, Αθήνα, Ελλάδα

Περίληψη

Στην παρούσα διατριβή επιχειρείται η απευθείας τρισδιάστατη μοντελοποίηση της τοπολογίας πορώδων υλικών που παρουσιάζουν συντεταγμένη δομή και γεωμετρία με σκοπό τη διερεύνηση φαινομένων ροής αέρα και της μετάδοσης θερμότητας στο εσωτερικό τους. Στην ερευνητική προσπάθεια που γίνεται στα πλαίσια του έργου, εξετάζονται δύο διαφορετικά υλικά των οποίων η μικροδομή καθορίζει την μακροσκοπική τους συμπεριφορά και κατ' επέκταση την απόδοσή τους στην ενεργειακή εφαρμογή στην οποία είναι ενταγμένα. Στόχος είναι να αναπτυχθεί αριθμητική μεθοδολογία που θα επιτρέψει την καλύτερη κατανόηση των θερμορυστομηχανικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα εντός των υλικών και που θα μπορεί να αξιοποιείται ως αριθμητικό εργαλείο σχεδιασμού και βελτιστοποίησης. Οι περιπτώσεις υλικών και αντίστοιχων ενεργειακών εφαρμογών που εξετάζονται είναι : η ροή μέσα από το ηλεκτρόδιο διάχυσης αερίου 'Gas Diffusion Layer' (GDL) μιας κυψέλης καυσίμου PEM (Proton Exchange Membrane) και η ροή αέρα μέσα από μεταλλικούς αφρούς υψηλού πορώδους που συνήθως χρησιμοποιούνται σε εναλλάκτες θερμότητας.

Για την επίτευξη των στόχων, τα επιμέρους ζητήματα που διαπραγματεύεται η εργασία είναι:

- Ανάπτυξη αριθμητικής μεθοδολογίας για την τριδιάστατη αναπαράσταση της γεωμετρίας μεταλλικών αφρών υψηλού πορώδους, σε κλίμακα πόρου (μικροκλίμακα). Η αριθμητική μεθοδολογία που αναπτύχθηκε βασίζεται σε συνδυασμένη χρήση ανοικτού πηγαίου κώδικα (Surface Evolver) και κωδικών CAD-CAE. Έγινε πιστοποίησή της, συγκρίνοντας τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αριθμητικού προτύπου με αντίστοιχες μετρήσεις.
- Ανάπτυξη αριθμητική μεθοδολογίας για την τριδιάστατη αναπαράσταση της γεωμετρίας υφάσματος ανθρακωδών, το οποίο αποτελεί μέρος του ηλεκτροδίου καθόδου σε κυψέλη καυσίμου τύπου PEM. Η μεθοδολογία βασίζεται σε συνδυασμένη χρήση εξειδικευμένου λογισμικού γεωμετρικής αναπαράστασης υφασμάτων (WiseTex) και κωδικών CAD-CAE. Η κατασκευή του αριθμητικού προτύπου του υφάσματος συνοδεύτηκε από την κατασκευή της γεωμετρίας τμήματος της καθόδου της κυψέλης καυσίμου, συμπεριλαμβανομένου του καναλιού και της μεμβράνης. Ο συνδυασμός τους έδωσε την τελικά εξεταζόμενη γεωμετρία, της οποίας οι διαστάσεις και λοιπά στοιχεία προέκυψαν από βιβλιογραφικές πηγές.
- Χρήση προηγμένου κώδικα υπολογιστικής ρευστομηχανικής, όπως παραχωρήθηκε από τον συνεργαζόμενο φορέα (κώδικα GFS, εταιρεία Fluid Research O.E.). Έγιναν αριθμητικές προσομοιώσεις ισόθερμων ροών σε μεταλλικούς αφρούς υψηλού πορώδους και για δύο διαφορετικές πυκνότητες, και σε τμήμα της καθόδου κυψέλης καυσίμου PEM. Η επίλυση των ρευστομηχανικών ροών έγινε λαμβάνοντας υπόψη την τριδιάστατη μικροδομή του υφάσματος και τα αποτελέσματα από τους υπολογισμούς

μακροσκοπικών χαρακτηριστικών πιστοποιήθηκαν συγκρίνοντας με αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις.

- Έγινε προσαρμογή του κώδικα **GFS**, ώστε να επιλύεται συζυγής μετάδοση θερμότητας εντός ρευστού και στερεού υλικού, και επαναλήφθηκαν οι υπολογισμοί για ροές με μετάδοση θερμότητας αξιολογώντας και την επίδραση της συζυγούς επίλυσης. Έγινε πρόλεξη της απόδοσης των μεταλλικών αφρών ως εκτεταμένες επιφάνειες μετάδοσης θερμότητας και πρόλεξη του φαινομένου της συμπύκνωσης παραγόμενης υγρασίας εντός του διαχύτη καθόδου της κυψέλης καυσίμου.
- Αξιοποιήθηκε η αναπτυχθείσα αριθμητική προσέγγιση, καθώς και η τεχνογνωσία αριθμητικής αναπαράστασης της μικροδομής υφασμάτων και μεταλλικών αφρών, για την αξιολόγηση βιβλιογραφικά προτεινόμενης πρωτότυπης διάταξης για την κάθοδο κυψέλης καυσίμου **PEM**. Εξετάστηκε τροποποίηση της διάταξης που αφορούσε την χρήση μεταλλικού αφρού σε αντικατάσταση του συστήματος καναλιών (σερπαντίνα) με στόχο την βελτιστοποίηση της λειτουργίας και την αποφυγή συμπύκνωσης.

Abstract

In this dissertation, 3D numerical modelling of flow and heat transfer phenomena is performed in well defined geometrical structures that correspond to the pore scale of porous media. The research effort deals with the examination of two distinct porous media, whose microstructure determines their macroscopic behavior in terms of the efficiency of the energy application they belong to. The scope of the effort is the development of a numerical methodology which will allow for the in depth understanding of the thermo-fluid mechanics phenomena taking place in the interior of these media and that can be used as a tool for the design and optimization of porous media engaging flow energy devices. The materials and energy applications studied are: The flow through the Gas Diffusion Layer of Proton Exchange Membrane fuel cell, and the flow through high porosity metal foam, recently applied in heat exchanging applications.

For the achievement of its goals the individual aspects studied in this work are:

- Development of a numerical methodology for the 3-dimensional reconstruction of high porosity metal foams' geometry at the pore scale (microscale). The numerical methodology developed is based in the combined use of open source code (Surface Evolver) and CAD-CAE packages. Its validation was achieved by comparing the geometrical and topological features of the numerical model with relevant measurements from international literature.
- Development of a numerical methodology for the 3-dimensional reconstruction of carbon cloth geometry, which is part of the cathode electrode in PEM fuel cells. The methodology developed is based on the combined use of special textile representation software (WiseTex) and CAD-CAE packages. The recreation of the cloth's geometry was combined with part of the fuel cell's cathode geometry including the gas channel and membrane. This combination led to the final geometry examined herewith, whose dimensions and other relevant aspects needed were derived from literature sources.
- Use of advanced fluid mechanics solver code, offered by the co-operating organization (GFS code, Fluid Research Co.). Iso-thermal flows were simulated numerically for high porosity metal foams for two different pore densities, as well as for part of a PEM fuel cell cathode. The fluid-mechanics flow solving was carried out considering the 3-dimensional microstructure of the foam and the cloth and the resulting macro-scale were validated by comparison with corresponding relevant experimental measurements.
- Modification of the GFS code so as to solve conjugate heat transfer at the solid and fluid part of the material. Calculations were repeated considering conjugate heat transfer. Prediction of the efficiency of metal foams as extended heat transferring surfaces was performed and

prediction of the condensation of humidity produced in the fuel cell GDL also took place.

- **The developed numerical approach as well as the know-how of the numerical representation of metal foam and cloth microstructure was exploited for the evaluation of novel configuration for a PEM fuel cell cathode. The particular arrangement examined involved a metal foam topology, replacing the channel system (serpentine), aiming at the optimization of the apparatus operation and the avoidance of condensation.**

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ:

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ	13
1.1. ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ	14
1.1.1. Ροές σε πορώδη μέσα.....	15
1.1.2. Τεχνολογικό πρόβλημα που επιχειρείται να θεραπευτεί	16
1.1.3. Προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακα: δυνατότητες και πλεονεκτήματα.....	17
1.1.4. Στόχοι της διατριβής	25
1.2. ΔΙΑΡΘΡΩΣΗ ΚΕΦΑΛΑΙΩΝ ΔΙΑΤΡΙΒΗΣ.....	27
2. ΥΠΟΒΑΘΡΟ ΕΞΕΤΑΖΟΜΕΝΩΝ ΥΛΙΚΩΝ	31
2.1. ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΣ ΑΦΡΟΣ (ΑΝΟΙΚΤΟΥ ΚΕΛΙΟΥ)	31
2.1.1. Εισαγωγή-Μεταλλικοί Αφροί	32
2.1.2. Μέθοδοι κατασκευής και χρήσεις μεταλλικών αφρών.....	38
2.1.3. Προηγούμενες προσπάθειες προσομοίωσης μεταλλικών αφρών ανοικτής δομής.....	43
2.2. ΎΦΑΣΜΑ ΑΝΘΡΑΚΟΪΝΩΝ ΔΙΑΧΥΤΗ ΚΥΦΕΛΗΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ PEM	49
2.2.1. Εισαγωγή: οι κυψέλες καυσίμου PEM.....	49
2.2.2. Λειτουργία, συστατικά μέρη και υλικά GDL.....	51
2.2.3. Προηγούμενες προσπάθειες προσομοίωσης.....	58
3. ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ	61
3.1. ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΙΣΩΣΕΩΝ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΜΑΖΑΣ ΚΑΙ ΟΡΜΗΣ	64
3.1.1. Ορθοκανονικό Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.....	74
3.1.2. Διακριτοποίηση διαφορικών εξισώσεων.....	77
3.1.3. Μέθοδος SIMPLE.....	84
3.1.4. Οριακές Συνθήκες:.....	86
3.2. ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΙΣΩΣΗΣ ΜΕΤΑΔΟΣΗΣ ΘΕΡΜΟΤΗΤΑΣ	90
3.2.1. Εξισώσεις ενέργειας & διακριτοποίηση αυτών.....	92
3.2.2. Συζυγής επίλυση θερμοκρασίας.....	95
3.3. ΕΠΙΛΥΣΗ ΕΙΣΩΣΗΣ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΣΥΓΚΕΝΤΡΩΣΗΣ ΥΓΡΑΣΙΑΣ	98
3.3.1. Εξίσωση συγκέντρωσης & διακριτοποίηση.....	100
3.3.2. Οριακές συνθήκες υγρασίας.....	100
4. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΣΤΑΣΗ ΤΗΣ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΣΤΗ ΜΙΚΡΟΚΛΙΜΑΚΑ	103
4.1. ΔΗΛΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ	103
4.2. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΥ ΑΦΡΟΥ	104
4.2.1. Κανονικά και μη κανονικά πολύεδρα-στοιχεία θεωρίας στερεομετρικών σχημάτων.....	109
4.2.2. Λογισμικό Προσομοίωσης Επιφανειών Διαμορφούμενων από Επιφανειακές Τάσεις (Surface Evolver) I15	
4.2.3. Κατασκευή, επαναληψιμότητα και διαστάσεις γεωμετρικού προτύπου μεταλλικού αφρού.....	121
4.2.4. Πιστοποίηση και αξιολόγηση αριθμητικού προτύπου.....	130
4.3. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΓΕΩΜΕΤΡΙΑΣ ΠΟΡΩΔΟΥΣ ΥΛΙΚΟΥ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΑΕΡΙΟΥ (GDL) ΣΤΙΣ ΚΥΦΕΛΕΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ PEM.....	133
4.3.1. Το λογισμικό WISETEX.....	134
4.3.2. Ιδιότητες υφάσματος ανθρακοϊνών.....	139
4.3.3. Κατασκευή γεωμετρικού προτύπου υφάσματος – καναλιού καθόδου	140
4.3.4. Πιστοποίηση και αξιολόγηση δομής GDL.....	145
4.4. ΧΩΡΙΚΗ ΔΙΑΚΡΙΤΟΠΟΙΗΣΗ	148
4.4.1. Διακριτοποίηση γεωμετρικού προτύπου μεταλλικού αφρού.....	148
4.4.2. Διακριτοποίηση γεωμετρικού προτύπου GDL.....	153
5. ΠΕΔΙΟ ΡΟΗΣ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΣΤΗ ΜΙΚΡΟΚΛΙΜΑΚΑ	159
5.1. ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ ΣΥΖΥΓΟΥΣ ΕΠΙΛΥΣΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΚΟΥ ΠΕΔΙΟΥ	159
5.2. ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΔΙΟΥ ΡΟΗΣ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΣΤΗ ΜΙΚΡΟΤΟΠΟΛΟΓΙΑ ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΥ ΑΦΡΟΥ ΑΝΟΙΚΤΗΣ ΔΟΜΗΣ.....	162
5.2.1. Πεδίο Ροής.....	162

5.2.2.	<i>Πεδίο Θερμοκρασίας</i>	178
5.3.	ΜΕΛΕΤΗ ΠΕΔΙΟΥ ΡΟΗΣ, ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΚΑΙ ΥΓΡΑΣΙΑΣ ΣΤΟ ΣΥΣΤΗΜΑ ΔΙΑΧΥΤΗ-ΚΑΝΑΛΙΟΥ ΚΑΘΟΔΟΥ ΚΥΨΕΛΗΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ ΡΕΜ.....	187
5.3.1.	<i>Πεδίο Ροής</i>	187
5.3.2.	<i>Πεδίο Θερμοκρασίας</i>	194
5.3.3.	<i>Κατανομή Υγρασίας</i>	201
5.4.	ΧΡΗΣΗ ΜΕΤΑΛΛΙΚΟΥ ΑΦΡΟΥ ΩΣ ΔΙΑΝΟΜΕΑ ΚΑΘΟΔΟΥ ΚΥΨΕΛΗΣ ΚΑΥΣΙΜΟΥ ΡΕΜ	210
6.	ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	219
6.1.	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΜΕΘΟΔΟΥ-ΑΞΙΟΠΙΣΤΙΑ ΚΑΙ ΕΥΧΕΡΕΙΑ	219
6.2.	ΑΠΟΤΙΜΗΣΗ ΤΗΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ.....	221
6.2.1.	<i>Επιτευξιμότητα στόχων</i>	221
6.2.2.	<i>Πρωτοτυπία στο επιστημονικό πεδίο</i>	223
6.3.	ΠΡΟΤΑΣΕΙΣ ΓΙΑ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ	226
	ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ	228
	ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	229

1. Εισαγωγή

Είναι αυτονόητο σήμερα για πολλούς λόγους πως η επιστήμη επιβάλλεται να στραφεί ερευνητικά σε τεχνολογίες που θα επιτρέψουν στο (άμεσο) μέλλον τόσο την παραγωγή «καθαρής» ενέργειας (π.χ. τεχνολογίες υδρογόνου, Ανανεώσιμων Πηγών Ενέργειας κλπ), όσο και την ακροτελεύτια βέλτιστη χρήση αυτής με βέλτιστη μετατροπή και μεταφορά της. Σε αυτό ακριβώς το πνεύμα κινείται και η ερευνητική προσπάθεια που γίνεται στα πλαίσια της διατριβής που παρουσιάζεται. Στη συγκεκριμένη προσπάθεια προδιαγράφεται η συλλογή πληροφοριών, η ορθή αριθμητική μοντελοποίηση και η σύγκριση των αποτελεσμάτων της με πειραματικά, όσον αφορά σε περιπτώσεις ροής μέσα από πορώδη υλικά, όπως αυτά χρησιμοποιούνται σε τεχνολογικά προηγμένες ενεργειακές εφαρμογές. Αυτό θα αποτελέσει πρόκριμα για την κατανόηση και ίσως την κρίση καταλληλότητας ή όχι της χρήσης των συγκεκριμένων υλικών σε εξειδικευμένες τεχνικές εφαρμογές ή για τη βελτιστοποίηση της απόδοσης ήδη υπαρχόντων εφαρμογών. Τέτοιες περιπτώσεις είναι : η ροή μέσα από το πορώδες στρώμα ανθρακοϊνών διάχυσης αερίου '**Gas Diffusion Layer**' (GDL), μιας κυψέλης καυσίμου **PEM (Proton Exchange Membrane)** και η ροή αέρα μέσα από Μεταλλικό Αφρό για χρήση σε εναλλάκτες θερμότητας εξειδικευμένων εφαρμογών.

Στόχος είναι να διερευνηθούν φαινόμενα τα οποία επηρεάζουν τη λειτουργία και την απόδοση συστημάτων όπου χρησιμοποιούνται τα εν λόγω υλικά και αφορούν ροϊκές εφαρμογές με ταυτόχρονη εναλλαγή ή και μεταφορά θερμότητας. Τα φαινόμενα αυτά δεν έχουν μελετηθεί είτε καθόλου είτε σε μικρό βαθμό από ότι συνάγεται από τη βιβλιογραφική έρευνα, ενώ η κατανόησή τους παίζει σπουδαίο ρόλο στην απόδοση λειτουργίας και στο σχεδιασμό συγκεκριμένων ενεργειακών διατάξεων.

Η συγκεκριμένη διατριβή εστιάζει στη μελέτη του ροϊκού και θερμοκρασιακού πεδίου που αναπτύσσεται για διάφορες συνθήκες διέλευσης αέρα μέσα από τα πορώδη υλικά που επιλέχθηκαν.

Ο τρόπος με τον οποίο επιχειρείται αυτό είναι, η απευθείας μοντελοποίηση της τρισδιάστατης τοπολογίας που παρουσιάζουν τα υλικά με αριθμητική αναπαράσταση της δομής τους σε επίπεδο μικροκλίμακας, η διακριτοποίηση των υπολογιστικών χωρίων που κατασκευάστηκαν και η επιβολή ρεαλιστικών οριακών συνθηκών. Η εφαρμοζόμενη μεθοδολογία προσεγγίζει τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα σε βαθμό που δεν είναι εύκολα πραγματοποιήσιμο από πειραματικές προσεγγίσεις. Η πιστοποίηση της αξιοπιστίας κάθε μοντέλου γίνεται με σύγκριση με αντίστοιχα μακροσκοπικά πειραματικά εξαγόμενα από τη διεθνή βιβλιογραφία.

Στις παρακάτω ενότητες θα εξηγηθεί αναλυτικά η λειτουργία του εκάστοτε συστήματος στο οποίο ανήκει κάθε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις προς μοντελοποίηση καθώς και η χρήση αυτής στο συγκεκριμένο σύστημα.

Στις παρακάτω παραγράφους λοιπόν, δίνεται συνοπτικά το αντικείμενο που πραγματεύεται η παρούσα διατριβή, η αναγκαιότητα την οποία έρχεται να καλύψει, το τεχνολογικό πρόβλημα που επιχειρεί να θεραπεύσει, όπως και η διάρθρωση της εργασίας συνολικά.

1.1. Αντικείμενο της εργασίας

Βασικοί άξονες της βελτιστοποίησης κάθε συστήματος είναι τόσο ο αρχικός βέλτιστος σχεδιασμός του (αρχικός πολυκριτηριακός σχεδιασμός-1^ο σταδίου), όσο και η επανατροφοδότηση με πληροφορίες και γνώσεις που προέρχονται από τη λειτουργία του ως αρχικού-πρωτότυπου συστήματος (πολυκριτηριακός σχεδιασμός 2^ο σταδίου). Ο επανασχεδιασμός ενός συστήματος μπορεί να στοχεύει στη βελτίωση των συστατικών του μερών και στην επιβολή των βέλτιστων συνθηκών και παραμέτρων λειτουργίας με βάση την εμπειρία που

αποκομίστηκε από το αρχικό στάδιο λειτουργίας, με σκοπό σε κάθε περίπτωση την περαιτέρω βελτίωση της αποδοτικότητάς του.

Η παρούσα διατριβή εστιάζει στην ανάπτυξη μοντέλων δύο πορώδων υλικών, του μεταλλικού αφρού ανοικτού κελιού (ή ανοικτής δομής) και του υφάσματος ανθρακοϊνών, με παραμετρική μελέτη της ροής και της μεταφοράς θερμότητας μέσα από αυτά. Η μελέτη γίνεται είτε στην πρωτογενή υπόσταση των υλικών, είτε εξετάζοντάς τα σαν μέρος κάποιας συσκευής, (ακόμη και σε συνδυασμό των 2 υλικών μεταξύ τους). Σκοπός είναι η αποκόμιση γνώσης σε επίπεδο μικροκλίμακας για τη συμπεριφορά των υλικών αυτών σε ροϊκές εφαρμογές στοχεύοντας μελλοντικά στη βελτιστοποίηση συγκεκριμένων διατάξεων στις οποίες χρησιμοποιούνται τα συγκεκριμένα υλικά.

Ακολούθως γίνεται αναφορά σε κάποιες από τις εφαρμογές των πορώδων υλικών στο σύγχρονο πολιτισμό, ενώ εξειδικεύεται και ο στόχος της συγκεκριμένης εργασίας.

1.1.1. Ροές σε πορώδη μέσα

Τόσο στη φύση (**Zhang and Xue, 2009**), όσο και στην τεχνική (**Wertz and Schneiders, 2009** και **Boomsma, 2002**), τα πορώδη υλικά απαντώνται υπό διάφορες μορφές και σε διάφορες χρήσεις. Μονώσεις σε τοιχοποιία, κονιάματα και εμφυτεύματα στην ιατρική, καταλύτες και μεμβράνες ώσμωσης στη χημική μηχανική, ακόμη και αισθητικές εφαρμογές αποτελούν κάποιες μόνο από τις περιπτώσεις στις οποίες βρίσκουν εφαρμογή τα πορώδη υλικά. Στην επιστήμη της μηχανολογίας, τα πορώδη υλικά χρησιμοποιούνται σαν δομικά υλικά ελαφριών κατασκευών (με σημαντικές εφαρμογές στην αεροναυπηγική), σαν φίλτρα, ενώ μπορεί να απαντηθούν και σε διαχύτες ή εναλλάκτες θερμότητας. Κάποιες από τις χρήσεις αυτές αφορούν ροές μέσα από πορώδη μέσα (ξανά είτε στη φύση-**Selley, 1998**, είτε στον τεχνικό κόσμο- **Klein et al., 2005** και **Nam et al., 2009**).

Όσον αφορά τη συγκεκριμένη μελέτη, αυτό στο οποίο επικεντρώνεται είναι η συμπεριφορά ενός συστήματος μεταλλικού αφρού-αέρα ή ανθρακούφασματος-αέρα και η επισκόπηση του ροϊκού και θερμοκρασιακού πεδίου του συστήματος αυτού. Το σύστημα αυτό είναι ένα σύστημα πορώδους υλικού μέσα από το οποίο διέρχεται καθαρό ρευστό και απαντάται γενικά σε πολλά φαινόμενα στη φύση και στην τεχνική μηχανική.

Αν και πέρα από τους σκοπούς της συγκεκριμένης διατριβής, πρέπει να τονιστεί ότι αλληλεπίδραση ροής σε πορώδη μέσα μπορεί να εμφανιστεί σε τέσσερα επίπεδα: **1.** Σε μακροσκοπικό, **2.** σε μεσοσκοπικό, **3.** σε μικροσκοπικό και τέλος **4.** σε νανοσκοπικό επίπεδο. Στην παρούσα εργασία θα εξεταστούν κλίμακες που βρίσκονται κυρίως στο μικροσκοπικό επίπεδο και οριακά στο μεσοσκοπικό.

1.1.2. Τεχνολογικό πρόβλημα που επιχειρείται να θεραπευτεί

Το τεχνολογικό πρόβλημα που επιχειρεί να θεραπεύσει η παρούσα εργασία, είναι η κατανόηση σε βάθος των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα σε επίπεδο μικροκλίμακας σε συστήματα παραγωγής, μεταφοράς και εναλλαγής ενέργειας, τα οποία χρησιμοποιούν στα συστατικά τους μέρη συγκεκριμένα πορώδη υλικά. Τούτο μπορεί να φανεί χρήσιμο σε σχεδιαστές και κατασκευαστές τέτοιων συστημάτων τόσο για τη βελτίωση του αρχικού τους σχεδιασμού μέσω αλληλεπίδρασης και τροποποίησης του πορώδους μέσου που χρησιμοποιούν, όσο και με την επιλογή των αποδοτικότερων λειτουργικών συνθηκών (βελτιστοποίηση με ανάδραση στις συνθήκες λειτουργίας).

Προκειμένου να συμβεί η επίτευξη του ανωτέρω στόχου κατασκευάστηκαν μοντέλα των υλικών που μελετώνται, πιστοποιήθηκε η ορθότητά τους, εντάχθηκαν σε μηχανολογικές διατάξεις (όπου αυτό ήταν θεμιτό) και μελετήθηκαν παραμετρικά διάφορες περιπτώσεις ροής και μετάδοσης θερμότητας, συγκέντρωσης υγρασίας-όπου οι συνθήκες λειτουργίας των εξεταζόμενων συστημάτων την περιλάμβαναν- και πιθανής συμπύκνωσης αυτής και έγινε σύγκριση με πειραματικές αντίστοιχες περιπτώσεις.

1.1.3. Προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακας: δυνατότητες και πλεονεκτήματα

Το πλάνο δράσης που ακολουθήθηκε (τμήματα του οποίου αναφέρονται στην προηγούμενη παράγραφο), περιλάμβανε την προσομοίωση της ροής και της μεταφοράς θερμότητας μέσω της απευθείας τρισδιάστατης αριθμητικής μοντελοποίησης των πορωδών υλικών που επιλέχθηκαν σε επίπεδο μικροκλίμακας.

Αν και η κατασκευή της τοπολογίας των υλικών και διατάξεων, η θεώρηση συνεχούς μέσου για το ρευστό (αέρας σε όλες τις περιπτώσεις) και η δυνατότητα ή όχι διακριτοποίησης με μη δομημένο πλέγμα σε κλίμακα ήταν μερικές μόνο από τις προκλήσεις που απασχόλησαν τη συγκεκριμένη μεθοδολογία προσέγγισης, τα πλεονεκτήματα που εμφάνιζε η απευθείας τρισδιάστατη αριθμητική προσομοίωση σε συνδυασμό με το καινοτόμο και πρωτότυπο της μεθόδου θεωρήθηκαν σημαντικά.

Η προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακας εμφανίζει συγκριτικά πολλά και ποσοτικά αποτελέσματα σε σχέση με την πειραματική μελέτη ενός πορώδους υλικού σε αυτή την τάξη μεγέθους ($\mu\text{m-mm}$) τα οποία παρουσιάζονται στην παράγραφο 1.1.3.2.

1.1.3.1. Συστήματα πορωδών μέσων: προσεγγίσεις

Οι μέχρι τώρα προσεγγίσεις για προσομοιώσεις σε συστήματα πορωδών μέσων συμβάδιζαν τόσο με την συσσώρευση της γνώσης που αποκομίζονταν για τα ίδια τα υλικά (μέσω πειραματικών κυρίως ερευνητικών προσπαθειών, πχ **Selley, 1998, Feser et al., 2006, Azzi et al., 2007**), όσο και με τις υπολογιστικές δυνατότητες που προσέφερε σε κάθε εποχή η ισχύς των χρησιμοποιούμενων εργαλείων αναπαράστασης και επίλυσης μοντέλων πορωδών υλικών.

Στην ενότητα 2.1.3 και 2.2.3 γίνεται εκτενής παρουσίαση διαφόρων προσπαθειών μοντελοποίησης παρόμοιων υλικών και συστημάτων με αυτά που μελετώνται στη συγκεκριμένη διατριβή. Σε εισαγωγικό επίπεδο αναφέρεται απλά ότι οι μέχρι τώρα προσεγγίσεις δεν αφορούσαν απευθείας επίλυση τρισδιάστατου πεδίου ροής σε επίπεδο μικροκλίμακας (εκτός από την περίπτωση των **Boomsma et al., 2003**) αλλά μαθηματικά μοντέλα προσέγγισης των διαφόρων όρων των εξισώσεων που ελάμβαναν υπόψη κατά την επίλυση (**Nguyen et al., 2004, Zong et al., 2006, Du Plessis et al., 1994**) και ειδικά για την περίπτωση του υφάσματος ανθρακοϊνών η αντιμετώπιση της ροής συνεπάγονταν την παρουσίαση για πρώτη φορά ενός γεωμετρικού προτύπου που αφορούσε τις ίνες του ανθρακοϋφάσματος.

Η συστηματική μελέτη και η πρόβλεψη ιδιοτήτων, όπως η προσρόφηση, η διαπερατότητα, η ηλεκτρική αγωγιμότητα, η μηχανική αντοχή κ.ά., πορώδων υλικών προϋποθέτει τη χρήση απλών ή πολυπλοκότερων μοντέλων τα οποία θα συνδέουν δομικές παραμέτρους των σωμάτων με τις παραπάνω ιδιότητες. Απαραίτητη συνιστώσα στην ανάπτυξη αυτών των μοντέλων αποτελεί ο τρόπος αναπαράστασης της πορώδους δομής. Η απλούστερη προσέγγιση βασίζεται σε έναν κύλινδρο, του οποίου η ακτίνα είναι ίση με το λόγο του πορώδους προς την ειδική επιφάνεια. Η ύπαρξη πόρων διαφορετικού μεγέθους λαμβάνεται υπόψη με τη θεώρηση του υλικού ως δέσμης κυλίνδρων με ακτίνες που ικανοποιούν συγκεκριμένη κατανομή, η οποία μπορεί να προσδιορισθεί πειραματικά. Η δυνατότητα εξαγωγής αναλυτικών εκφράσεων για την περίπτωση αυτή επιβάλλει τη μη αλληλοσύνδεση των κυλίνδρων. Για τη μελέτη της διαπερατότητας, οι κύλινδροι μπορεί να χαρακτηρισθούν μη ευθύγραμμο σωληνοειδή, οπότε εισάγεται ο συντελεστής δαιδαλώδους, ο οποίος εκφράζει την επιβράδυνση στις διεργασίες μεταφοράς ύλης που οφείλεται στη μαιανδροειδή (μορφοκλασματική) (**fractal**) δομή των σωληνοειδών. Τα παραπάνω μοντέλα τις περισσότερες φορές απέχουν από τη φυσική πραγματικότητα. Το γεγονός αυτό όμως δεν μειώνει την αξία τους, καθώς το ζητούμενο από αυτά δεν είναι η

πλήρης αναπαράσταση των φυσικών φαινομένων, αλλά η προσεγγιστική πρόβλεψη ενός μέρους πειραματικών αποτελεσμάτων. Ένας τρόπος περιγραφής πορώδων μέσων γενικά (δομημένων ή μη) είναι με τη μέθοδο του «πρότυπου δικτύου πόρων». Με βάση αυτή τη μέθοδο ανακατασκευής, επιτυγχάνεται μία σχετικά ρεαλιστική προσέγγιση της τοπολογίας και της μορφολογίας του πορώδους υλικού. Η πορώδης δομή θεωρείται ένα δίκτυο, δύο ή τριών διαστάσεων, αλληλοσυνδεδεμένων πόρων διαφόρων γεωμετρικών σχημάτων, κατά αναλογία των ηλεκτρικών κυκλωμάτων **Kirchoff (Nicholson and Petropoulos, 1984, Fatt, 1956)**. Τα βασικά συστατικά ενός δικτύου πόρων είναι οι κόμβοι (**nodes**) και οι δεσμοί (**bonds**). Οι κόμβοι συνδέονται μεταξύ τους διαμέσου των δεσμών. Ανάλογα με τον αριθμό των γειτονικών κόμβων με τους οποίους ενώνεται ένας κόμβος και την τοπολογία του δικτύου, το δίκτυο χαρακτηρίζεται τριγωνικό, τετραγωνικό, κυβικό κτλ. Το δίκτυο μπορεί να εκτείνεται σε μία, δύο ή και τρεις διαστάσεις, δίνοντας σχετικά καλή προσέγγιση των μακροσκοπικών ιδιοτήτων δομής ενός πραγματικού πορώδους υλικού.

Σε ένα δίκτυο είναι δυνατόν να υποθεθεί ότι οι κόμβοι έχουν μηδενικό όγκο και ότι ο κενός χώρος παρίσταται μόνο από τους δεσμούς. Με βάση αυτήν την προσέγγιση, δυναμικές ιδιότητες του πορώδους υλικού, όπως η διαπερατότητα, καθώς και οι ιδιότητες που αφορούν στην προσρόφηση εξαρτώνται, για δεδομένη χημική σύσταση της στερεής φάσης, από τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των δεσμών (σχήμα, κατανομή μεγέθους). Άλλη προσέγγιση θεωρεί ότι ο όγκος του κενού χώρου παρίσταται από τον όγκο των κόμβων, που σε αυτή την περίπτωση αναφέρονται και σε «θάλαμοι» και μπορεί να έχουν διάφορα σχήματα (σφαίρες, παραλληλεπίπεδα κ.ά.) ενώ οι δεσμοί, ή αλλιώς «λαιοί», καθορίζουν με το σχήμα και το μέγεθός τους τις δυναμικές ιδιότητες. Τέλος, οι ενδιάμεσες προσεγγίσεις είναι προφανώς υβρίδια των δύο παραπάνω περιπτώσεων.

Η απλότητα της αναπαράστασης της πορώδους δομής με το μοντέλο του δικτύου πόρων (**Adler, 1992**) πλεονεκτεί άλλων μεθόδων όσον αφορά την

απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ και βοηθά στην κατανόηση του τρόπου εξάρτησης ιδιοτήτων όπως η προσρόφηση, η διαπερατότητα, η ηλεκτρική αγωγιμότητα, από χαρακτηριστικά της πορώδους δομής. Παρόλα αυτά όμως η μέθοδος αυτή αναπαράστασης, λόγω απλουστεύσεων και παραδοχών που εμπεριέχει, δεν μπορεί να θεωρηθεί και η πλέον ακριβής.

Όσον αφορά την αναπαράσταση πορώδων υλικών μη δομημένης τοπολογίας αλλά στοχαστικά ελεγχόμενης χρησιμοποιείται αποτελεσματικά η μέθοδος της ψηφιοποιημένης αναπαράστασης της πραγματικής τοπολογίας. Η ανάπτυξη της τεχνολογίας των ηλεκτρονικών υπολογιστών καθιστά πλέον δυνατή την ψηφιακή αναπαράσταση της ετερογενούς δομής των πορώδων μέσων, η οποία περιγράφεται από τη συνάρτηση φάσης, $Z(\mathbf{x})$. Αν \mathbf{x} είναι το διάνυσμα θέσης ενός σημείου M του υλικού σε αυθαίρετο σύστημα συντεταγμένων, η συνάρτηση φάσης ορίζεται ως:

$$Z(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \text{αν το } M \text{ ανήκει σε κενό χώρο (πορώδης φάση)} \\ 0, & \text{αν το } M \text{ δεν ανήκει σε κενό χώρο (στερεή φάση)} \end{cases}$$

Λόγω της πολύπλοκης μορφολογίας των πορώδων υλικών, η συνάρτηση φάσης είναι μία στοχαστική ανέλιξη (ή αλλιώς, τυχαία συνάρτηση) (**stochastic process**), δηλαδή μία απειροπληθής οικογένεια τυχαίων μεταβλητών, $\{Z(\mathbf{x}), \mathbf{x} \in \mathbf{R}^d\}$, όπου d , είναι η διάσταση του χώρου. Για τρισδιάστατη απεικόνιση της πορώδους δομής είναι $d=3$. Η $Z(\mathbf{x})$ χαρακτηρίζεται από τις στατιστικές της ιδιότητες, δηλαδή από τη μέση τιμή και από τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης (αναλύεται παρακάτω).

Η μέση τιμή της $Z(\mathbf{x})$ αντιστοιχεί στο πορώδες ε (ή αλλιώς, συνάρτηση συσχέτισης ενός σημείου), δηλαδή:

$$\varepsilon = \langle Z(\mathbf{x}) \rangle$$

όπου ο συμβολισμός $\langle \cdot \rangle$ υποδηλώνει μέση τιμή. Το πορώδες εκφράζει την πιθανότητα το σημείο M του υλικού να ανήκει στην πορώδη φάση. Ως πιθανότητα, το πορώδες λαμβάνει τιμές στο διάστημα $[0,1]$.

Σαν ψηφιακή ανακατασκευή πορώδους υλικού ορίζεται ο αλγόριθμος με βάση τον οποίο από κατάλληλα πειραματικά δεδομένα προσδιορίζεται η συνάρτηση φάσης του υλικού. Με την ψηφιακή ανακατασκευή, η οποία θεωρείται η πλέον ακριβής μέθοδος από τις υπάρχουσες για την αναπαράσταση της μικροδομής των πορώδων υλικών, λαμβάνονται τρισδιάστατες, ψηφιοποιημένες δομές, στις οποίες μπορούν να υπολογιστούν οι διάφορες μακροσκοπικές ιδιότητες του εκάστοτε πορώδους υλικού. Οι μέθοδοι ψηφιακής ανακατασκευής κατατάσσονται σε τρεις βασικές κατηγορίες: στις *άμεσες μεθόδους*, στις *μεθόδους στοχαστικής ανακατασκευής* και στις *μεθόδους που προσομοιώνουν τη διεργασία παρασκευής του υλικού*.

Οι *άμεσες μέθοδοι (direct methods)*, (**Lin C. and Cohen M.H., 1982, M.D. Rintoul et al., 1996**) εφαρμόζονται σε μεγάλο βαθμό στη βιομηχανία εξαγωγής πετρελαίου. Με βάση αυτές, ανακατασκευάζονται τρισδιάστατες ψηφιοποιημένες δομές είτε με συνδυασμό διαδοχικών διδιάστατων τομογραφικών εικόνων ενός μακροπορώδους μέσου ή με μικροτομογραφία αυτού (με χρήση ακτίνων **X** -**Rintoul et al., 1996** ή με απεικόνιση μαγνητικού συντονισμού- **Baldwin et al., 1996**) με την οποία, η τρισδιάστατη πορώδης δομή απεικονίζεται άμεσα με ανάλυση της τάξης του μm . Η πρώτη μέθοδος είναι αρκετά επίπονη και χρονοβόρα και οι ληφθείσες με αυτήν διατομές είναι αδύνατο να έχουν διάστημα μεταξύ τους μικρότερο των **10 μm** (**Dullien, 1992**), ενώ η δεύτερη έχει περιορισμένη ανάλυση και υψηλό λειτουργικό κόστος. Παρόμοιες τεχνικές σειριακής τομογραφίας δεν μπορούν να εφαρμοσθούν σε μικροπορώδη και μεσοπορώδη υλικά, λόγω της πολύ υψηλής ανάλυσης που απαιτείται σε τόσο μικρές κλίμακες μήκους, καθώς και της καταστροφής των λεπτομερειών της πορώδους δομής με την τομή του υλικού. Η χρονοβόρα δημιουργία των τομογραφικών εικόνων μπορεί να αποφευχθεί με χρήση

μικροσκοπίας λέιζερ, με τη βοήθεια της οποίας μπορούν να απεικονιστούν πόροι μέχρι και σε βάθος περίπου **150 μm** του υλικού. Η πολυπλοκότητα και οι περιορισμοί των παραπάνω μεθόδων καθώς και το γεγονός ότι συνήθως αυτές καθίστανται αρκετά αντικοινωνικές, κάνουν επιτακτική την ανάγκη για χρήση εναλλακτικών μεθόδων ανακατασκευής.

Η *στοχαστική ανακατασκευή (stochastic reconstruction)*, είναι μία ιδιαίτερα ελκυστική μέθοδος ψηφιακής ανακατασκευής που οδηγεί στη δημιουργία τρισδιάστατων ψηφιοποιημένων δομών, ορισμένες στατιστικές ιδιότητες των οποίων, όπως η μέση τιμή (πορώδες) και η συνάρτηση συσχέτισης δύο σημείων, έχουν τιμές οι οποίες είναι συμβατές με τις αντίστοιχες του πραγματικού υλικού. Η συνάρτηση συσχέτισης δύο σημείων, $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, εκφράζεται από τη σχέση:

$$C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle Z(\mathbf{x} + \mathbf{r}_1) \cdot Z(\mathbf{x} + \mathbf{r}_2) \rangle$$

όπου, \mathbf{r}_1 και \mathbf{r}_2 είναι τα διανύσματα θέσης δύο σημείων του υλικού.

Οι τρόποι εξαγωγής της απαραίτητης για την ανακατασκευή στατιστικής πληροφορίας εξαρτώνται από το είδος του υλικού. Στα μακροπορώδη υλικά, χρησιμοποιούνται τομογραφικές εικόνες, ενώ στα μεσοπορώδη και τα μικροπορώδη, η συνάρτηση συσχέτισης μπορεί να προκύψει άμεσα από εικόνες ηλεκτρονικής μικροσκοπίας διέλευσης (**Transmission Electron Microscopy or TEM**) και ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης (**Scanning Electron Microscopy or SEM**) ή έμμεσα από τεχνικές μικρογωνιακής σκέδασης (**Small-Angle Scattering or SAS**).

Η τρίτη κατηγορία των μεθόδων ανακατασκευής στηρίζεται στην *προσομοίωση των φυσικών διεργασιών* με βάση τις οποίες δημιουργείται η πορώδης δομή (**process based methods**) (Kainourgiakis et al., 2002, Adler et al., 1992). Οι μέθοδοι αυτές στηρίζονται στη λεπτομερή γνώση της φυσικής και της χημείας του συστήματος, με αποτέλεσμα η ακριβής μοντελοποίηση του κάθε υλικού να απαιτεί πολλή έρευνα. Παραδείγματα των μεθόδων αυτών αποτελούν η ανακατασκευή ψαμμίτη και άλλων ιζηματογενών πετρωμάτων με προσομοίωση των γεωλογικών διεργασιών σχηματισμού των πετρωμάτων αυτών καθώς και η

ανακατασκευή υάλων ελεγχόμενου πορώδους (**Controlled Porous Glasses, CPGs**) (υλικών με μέσο μέγεθος πόρων κυμαινόμενο από **80** έως **2000 Å**) με μοριακή προσομοίωση της διεργασίας διαχωρισμού φάσεων (**spinodal decomposition**), που θεωρείται ως ο βασικός μηχανισμός σχηματισμού αυτών των υλικών. Οι μέθοδοι αυτοί ανακατασκευής, μολονότι από φυσικής άποψης είναι οι πιο ορθές έχουν το σοβαρό μειονέκτημα ότι περιορίζονται μόνο στο συγκεκριμένο υλικό του οποίου τη φυσική διεργασία παρασκευής περιγράφουν. Επίσης, τις περισσότερες φορές έχουν υψηλές υπολογιστικές απαιτήσεις.

Σε αυτή τη διατριβή, για πρώτη φορά στη διεθνή βιβλιογραφία, γίνεται απευθείας τρισδιάστατη μοντελοποίηση τόσο των υλικών όσο και της ροής και μετάδοσης θερμότητας μέσα από αυτά. Η εργασία αυτή επιχειρεί να καλύψει ένα κενό. Αυτό της έλλειψης σε βάθος επισκόπησης των φυσικών φαινομένων που λαμβάνουν χώρα λεπτομερώς στα πορώδη μέσα που χρησιμοποιούνται στις εφαρμογές που επιλέχθηκε, έλλειψη η οποία οφείλεται στην αδυναμία των πειραματικών μεθόδων να εστιάσουν με ακρίβεια στο εσωτερικό του πεδίου ροής μέσα σε ένα πορώδες υλικό σε επίπεδο μικροκλίμακας όπως και στην ανάγκη όποτε γίνει αυτό εφικτό, να πραγματοποιηθεί με μεθόδους **ex-situ** στις περισσότερες των περιπτώσεων (**Shimpalee et al., 2009, Quick et al., 2009** αλλά και **in-situ** πχ **Khandelwal et al., 2006**) καθώς οι μέθοδοι αυτοί είναι πιο εύχρηστες και οικονομικές από τις αντίστοιχες **in-situ** (**Quick et al., 2009**).

Η ανάγκη για επισκόπηση των φαινομένων αυτών σε βάθος εκπορεύεται από το γεγονός ότι η χρήση των πορώδων υλικών στις εφαρμογές που επιλέχθηκε να μελετηθούν επιτελεί πολύ συγκεκριμένη λειτουργία σε επίπεδο μικροκλίμακας: στους μεν μεταλλικούς αφρούς η διαδρομή που ακολουθούν οι ροϊκές γραμμές ενδιαφέρει σε τοπικό επίπεδο μιας και αυτοί χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές ανάμειξης, κατάλυσης και άλλες χημικής μηχανικής και εναλλαγής θερμότητας (βλ. και ενότητα **2.1.2**), στις δε κυψέλες καυσίμου PEM, το ύφασμα ανθρακοϊνών βοηθά στην ομαλή διάχυση τα προς αντίδραση αέρια, απάγει μέρος της παραγόμενης θερμότητας και βοηθά στην απομάκρυνση των υδρατμών ή και

συμπύκνωμάτων αυτών (βλ. και ενότητα 2.2.1 και 2.2.2) κάνοντας αναγκαία την πρόλεξη των περιοχών όπου θα εμφανιστεί πρωταρχικά πιθανή συμπύκνωση ύδατος, συμπύκνωση η οποία δρά έτσι ανασχετικά ως προς την ομαλή ροή του αέρα.

Τα ανωτέρω δεν μπορούν να μελετηθούν ακόμη και αν χρησιμοποιηθούν **in-situ** πειραματικές μεθοδολογίες μέτρησης και παρακολούθησης των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα.

1.1.3.2. Προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακας

Πέρα από τη δυσκολία της διεξαγωγής μιας πειραματικής μέτρησης ή παρακολούθησης - ειδικά σε επίπεδο μικροκλίμακας -, η επιλογή της τρισδιάστατης προσομοίωσης σαν μεθοδολογία προσέγγισης στη συγκεκριμένη μελέτη αφορά και άλλα πλεονεκτήματα που εμφανίζονται σε αυτή. Αυτά συνοπτικά είναι:

- Η σε βάθος επισκόπηση της πληροφορίας που μπορεί να εξαχθεί με την προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακας, βάθος που δε μπορεί να φτάσει η πειραματική προσέγγιση. Στη συγκεκριμένη διατριβή χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι αυτό της συζυγούς μεταφοράς θερμότητας όπου υπολογίζονται οι θερμοκρασίες στο εσωτερικό του στερεού υλικού του πορώδους μέσου, (βλ. και ενότητες 3, 4 και 5).
- Το κόστος μιας πειραματικής διάταξης είναι στη συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων πολλαπλάσιο του αντίστοιχου κόστους της αριθμητικής μεθοδολογίας για την παρακολούθηση του ίδιου φαινομένου, το οποίο συνήθως συνοψίζεται στο άθροισμα του κόστους της άδειας κάποιου σχετικού λογισμικού, του κόστους του υπολογιστικού συστήματος στο οποίο εκτελούνται οι προσομοιώσεις και του λειτουργικού κόστους («κόστος μνήμης» και ενέργειας που

δαπανάται, χρόνος υπολογισμού, κόστος ανθρωποώρας εξειδικευμένου επιστημονικού προσωπικού).

- Σε μια προσομοιωτική παραμετρική μελέτη, η επαναληψιμότητα των προσομοιώσεων γίνεται πολύ πιο εύκολα και ανώδυνα σε σχέση με πειραματικές παραμετρικές μελέτες. Εφόσον πιστοποιηθεί η αξιοπιστία ενός μοντελοποιημένου συστήματος και επαληθευτεί η ορθότητα των αποτελεσμάτων του, μπορεί εύκολα να εκτελεστεί ένας αριθμός περιπτώσεων (ροής εν προκειμένω), με τροποποιημένες συνθήκες ώστε να παριστάνει διαφορετικά φαινόμενα τα οποία είτε δεν είναι δυνατό να ελεγχθούν σε πειραματική διαδικασία είτε κάτι τέτοιο κοστίζει απαγορευτικά.

1.1.4. Στόχοι της διατριβής

Στη γενική περίπτωση ο κύριος στόχος της διατριβής αυτής είναι η ανάπτυξη αριθμητικής μεθοδολογίας που θα περιλαμβάνει την:

- σωστή μοντελοποίηση της τοπολογίας συγκεκριμένων πορώδων υλικών σε επίπεδο μικροκλίμακας
- αξιόπιστη επίλυση των ροϊκών φαινομένων και των μηχανισμών μετάδοσης θερμότητας που λαμβάνουν χώρα υπό διάφορες συνθήκες, προκειμένου να γίνει
- αξιολόγηση της συμπεριφοράς των ίδιων των υλικών αλλά και του συστήματος ρευστού-πορώδους που αυτά συνιστούν και
- πιθανή αξιοποίηση υλικών σε τεχνικές εφαρμογές και βελτιστοποίηση εφαρμογών που ήδη υπάρχουν.

Εξυπακούεται πως η πιστοποίηση της χρήσης της προσέγγισης με τρισδιάστατη μοντελοποίηση και επίλυση των εξισώσεων **Navier-Stokes** και ενέργειας απευθείας σε επίπεδο μικροκλίμακας αποτελεί το δεύτερο –και ευρύτερο, υπερκείμενο- γενικό στόχο της διατριβής. Ζητούμενο σε κάθε

αριθμητική μοντελοποίηση είναι τόσο η σωστή περιγραφή της γεωμετρίας και η κατασκευή της τοπολογίας, όσο και τα ρεαλιστικά αποτελέσματα για την απεικόνιση του πεδίου ροής (πιέσεις και ταχύτητες) και της μεταφοράς θερμότητας στο ρευστό αλλά και στο στερεό σώμα του κάθε μοντέλου, έπειτα από την επιβολή σωστών οριακών συνθηκών. Σημειώνεται εδώ, όπως θα φανεί και αργότερα, ότι οι εξεταζόμενες περιπτώσεις περιλαμβάνουν και θερμικές ροές μέσα από στερεά φάση και τα εξαγόμενα αποτελέσματα θα πρέπει να εξετάζουν και τις θερμοκρασιακές μεταβολές στη στερεά φάση του κάθε μοντέλου για την αποκόμιση ολοκληρωμένων αποτελεσμάτων (π.χ. ενεργειακά ισοζύγια).

Εξειδικεύοντας τους στόχους σε επίπεδο έκαστου υλικού, μπορεί να ειπωθεί πως για την περίπτωση του μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής (**open cell metal foam**), καταρχάς η ανάπτυξη και πιστοποίηση αριθμητικού προτύπου της γεωμετρίας είναι πρώτιστος στόχος με δεύτερο τη διερεύνηση της ικανότητας χρήσης του ως καινοτόμου υλικού σε εφαρμογές εναλλακτών θερμότητας λαμβάνοντας τιμές μακροσκοπικών παραμέτρων με απευθείας μοντελοποίηση και διερεύνηση σε επίπεδο μικροκλίμακας, εστιάζοντας στο συγκεκριμένο πορώδες μέσο. Επιπρόσθετος στόχος ήταν η σύγκριση των εξαγόμενων με τιμές αντίστοιχων μακροσκοπικών παραμέτρων σε σύμψηκτους εναλλάκτες θερμότητας (**compact HEX**). Ένα από τα επιχειρούμενα εγχειρήματα λοιπόν ήταν η εξαγωγή και σύγκριση μακροσκοπικών πληροφοριών (πχ. πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους) από τα αποτελέσματα της διερεύνησης σε μικροσκοπικό επίπεδο. Αυτό θα επέτρεπε την εξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με την ικανότητα του υλικού να χρησιμοποιηθεί σε σύμψηκτους εναλλάκτες θερμότητας ή να υποκαταστήσει παραδοσιακές δομές (πχ περύγια) σε αυτούς. Τόσο τα χαρακτηριστικά μετάδοσης θερμότητας όσο και η ροϊκή αντίσταση του υλικού πρέπει να συνυπολογιστούν ώστε να διαφανούν τα μειονεκτήματα και τα πλεονεκτήματα μιας τέτοιας ενδεχόμενης χρήσης αυτού.

Αντιστοίχως για το ύφασμα ανθρακοϊνών έγινε στοχευμένη επικέντρωση στην παραμετρική διερεύνηση φαινομένων στη μικροτοπολογία του διαχύτη

κυψέλης καυσίμου, στον οποίο εμπεριέχεται, με έμφαση στη διερεύνηση συζυγούς επίλυσης θερμοκρασίας και συμπύκνωσης υγρασίας, ώστε να γίνει η διαπίστωση των βέλτιστων συνθηκών λειτουργίας. Όπως αναφέρθηκε, αλλά περιγράφεται και στις ενότητες 2 και 4, οι κυψέλες καυσίμου PEM κατά τη λειτουργία τους εκλύουν θερμότητα και παράγουν νερό υπό μορφή υδρατμών. Σκοπός της στόχευσης στο συγκεκριμένο φαινόμενο ήταν να προλέξει τις περιοχές υψηλών θερμοκρασιών (αποφυγή καταστροφής μέσω υποβάθμισης της αντοχής συγκεκριμένων μερών) και υψηλής συγκέντρωσης ή συμπύκνωσης που εμφανίζονται (ειδικά που «πρωτο»-εμφανίζονται) στη διάταξη πορώδους υφάσματος-καναλιού διαχύτη PEM.

1.2. Διάρθρωση κεφαλαίων διατριβής

Η διατριβή αυτή αποτελείται από έξι κεφάλαια με εννοιολογική διαφοροποίηση τα οποία χωρίζονται σε υποενότητες. Η διάρθρωση της διατριβής έχει ως εξής:

Το πρώτο κεφάλαιο είναι το παρόν εισαγωγικό κεφάλαιο που χαρακτηρίζεται από τη δήλωση των στόχων που έχουν τεθεί.

Το κεφάλαιο δύο αποτελεί μια ανασκόπηση του ρόλου, των ιδιοτήτων και των τρόπων κατασκευής των υλικών που μελετώνται, ενώ αναφέρει και χαρακτηριστικές ιδιότητες και τιμές λειτουργίας για διατάξεις στις οποίες εντάσσονται τα εν λόγω υλικά. Εν τάχει αναφέρονται προηγούμενα μοντέλα προσομοίωσης της ροής και της μεταφοράς θερμότητας για κάθε μέσο που μελετάται, από τη διεθνή βιβλιογραφία.

Στο τρίτο κεφάλαιο επιχειρείται να δοθεί το μαθηματικό υπόβαθρο στο οποίο στηρίχθηκε η διερεύνηση τόσο του ροϊκού, όσο και του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό των υλικών. Δίνονται σχέσεις που αφορούν ιδιότητες των υλικών και συνδέουν μακροσκοπικές, μεσοσκοπικές και μικροσκοπικές παραμέτρους ροής μέσα από τα υλικά που μελετώνται ενώ γίνεται διερεύνηση της υπόθεσης

συνεχούς θεώρησης του ρευστού και της επίδρασης του πεδίου βαρύτητας στις εν λόγω ροές.

Η μοντελοποίηση των υλικών που επιλέχθηκαν, η κατασκευή της τοπολογίας τους, η διαστασιολόγηση των συσκευών στις οποίες εντάσσονται, η πιστοποίηση της αξιοπιστίας της γεωμετρίας (**validation**) που κατασκευάστηκε και το θεωρητικό υπόβαθρο πίσω από όλα τα ανωτέρω, είναι το αντικείμενο που πραγματεύεται το τέταρτο κεφάλαιο. Γίνεται παρουσίαση της διαδικασίας διακριτοποίησης, της διερεύνησης ανεξαρτησίας πλέγματος, κωδικοποιούνται τα κριτήρια και η ποιότητα του πλέγματος που επιλέχθηκε και επαναλαμβάνεται η ίδια διαδικασία και για την περίπτωση της διακριτοποίησης της στερεάς φάσης.

Τα αποτελέσματα που εξήχθησαν όσον αφορά τα δύο υλικά και το συνδυασμό που προτείνεται από τα δύο σε διάταξη τόσο από άποψη ροϊκού, όσο και θερμοκρασιακού πεδίου αναλύονται στο κεφάλαιο πέντε. Γίνεται σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα από τη διεθνή βιβλιογραφία και επιχειρείται η πρόλεξη φαινομένων με βάση τα πιστοποιημένα αποτελέσματα. Παρουσιάζεται τέλος η επαλήθευση της ορθότητας του εργαλείου συζυγούς επίλυσης της θερμοκρασίας σε σύστημα στερεού-ρευστού πορώδους μέσου και γίνεται εκμετάλλευση του για εξαγωγή συμπερασμάτων όσον αφορά την κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό των στερών μερών των υλικών. Σε μια προσπάθεια να συνδυαστούν τα δύο υλικά εξαιτίας κάποιων ιδιαίτερων χαρακτηριστικών της δομής του μεταλλικού αφρού, τα οποία εν δυνάμει θα μπορούσαν να φανούν χρήσιμα στη λειτουργία των κυψελών καυσίμου PEM, επιχειρήθηκε η διερεύνηση του πεδίου ροής και της μεταφοράς θερμότητας σε διάταξη που περιείχε και τα δύο υλικά. Επιπλέον μελετήθηκε η συμπεριφορά του προτεινόμενου συνδυασμού όσον αφορά τη συμπύκνωση υγρασίας στο εσωτερικό του υφάσματος ανθρακοϊνών, σε σύγκριση με τα αποτελέσματα που προέκυπταν για την περίπτωση υφάσματος, χωρίς συνύπαρξη δομής αφρού στο μοντέλο.

Τέλος στο έκτο κεφάλαιο, συνοψίζονται τα συμπεράσματα από όλη τη διαδικασία και κυρίως από τα εξαγόμενα αποτελέσματα, ενώ επιχειρείται και η ταυτοποίηση της επιτευξιμότητας ενός εκάστου εκ των στόχων που τέθηκαν στην αρχή της παρούσας διατριβής.

2. Υπόβαθρο Εξεταζόμενων Υλικών

Η παρούσα διατριβή, όπως έχει ήδη αναφερθεί στην ενότητα 1, πραγματεύεται τη δημιουργία μοντέλων πορώδων υλικών και τη διερεύνηση σε επίπεδο μικροκλίμακας της ροής και της μεταφοράς θερμότητας διαμέσου αυτών για διάφορες περιπτώσεις. Τα υλικά που επιλέχθηκε να μοντελοποιηθούν παρουσιάζουν τεχνικό ενδιαφέρον σε εφαρμογές και κοινά χαρακτηριστικά μεταξύ τους (όπως δομημένη τοπολογία-βλ. ενότητα 4). Επιπρόσθετα έχει ενταθεί ολοένα και περισσότερο η πειραματική τους μελέτη (Ashby et al., 2000, Bhattacharya et al., 2002, Phanikumar and Mahajan, 2002, Azzi et al., 2007, Klein et al., 2005, Quick et al., 2009, Khandelwal and Mench, 2006 κ.α.) προλέγοντας διάφορες πολυεπίπεδες χρήσεις για αυτά και έχει γίνει κατά καιρούς προσπάθεια σε βάθος άντλησης πληροφοριών μέσω λεπτομερούς προσομοίωσης (Boomsma et al., 2003, Quan and Lai, 2007 κ.α.) τόσο των ίδιων των υλικών καθεαυτών, όσο και διαφόρων εφαρμογών στις οποίες χρησιμοποιούνται. Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται τα πορώδη υλικά που επιλέχθηκε να μοντελοποιηθούν και γίνεται αναφορά στις μεθόδους κατασκευής τους, στις ιδιότητες που αυτά παρουσιάζουν και τις δυνατότητες που παρέχουν για διάπλαση και τροποποίηση υπό συνθήκες ώστε να εφαρμόζονται σε συγκεκριμένες μηχανολογικές εφαρμογές. Τα υλικά που τελικά μοντελοποιήθηκαν δεν επιλέχθηκαν τυχαία αλλά διαλέχθηκαν έτσι ώστε να μπορούν να ανακατασκευαστούν αριθμητικά με βάση τις διαδικασίες παρασκευής τους στην πραγματικότητα, να παρουσιάζουν δομημένη και όχι στοχαστική τοπολογία και να έχουν εφαρμογές που παρουσιάζουν ερευνητικό ενδιαφέρον.

2.1. Μεταλλικός Αφρός (ανοικτού κελιού)

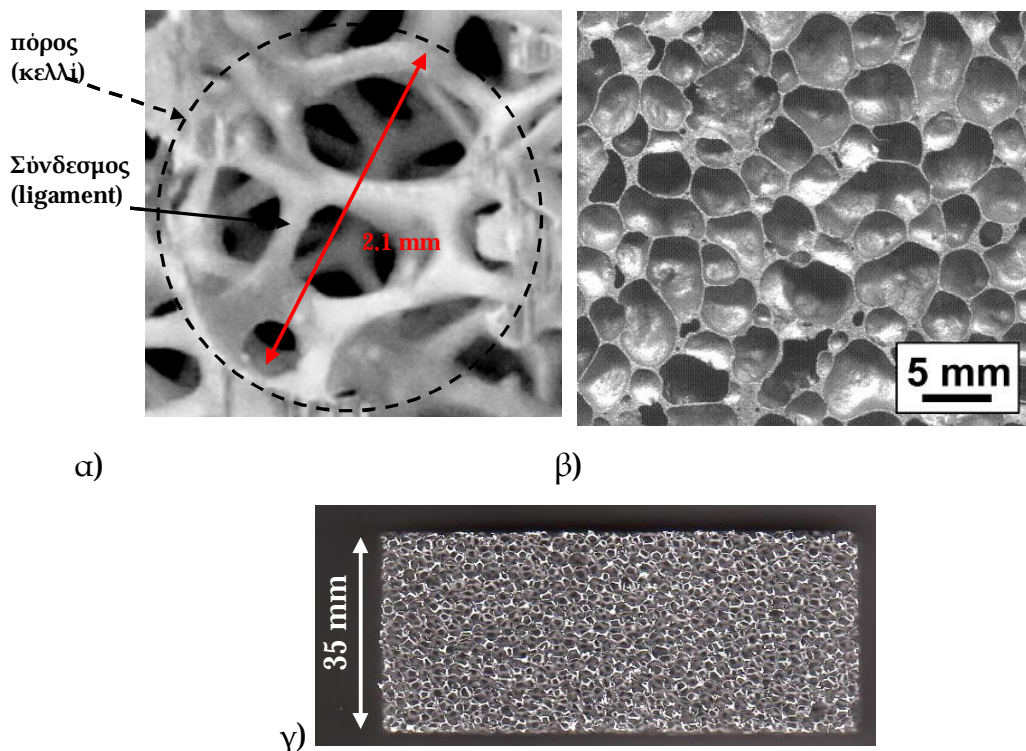
Το πρώτο πορώδες υλικό που επιλέχθηκε προς μελέτη ήταν μεταλλικός αφρός ανοικτού κελιού που θεωρήθηκε όσον αφορά τις ιδιότητές του ότι προέρχεται

από μητρικό υλικό Αλουμίνιο. Ακολούθως λοιπόν γίνεται εκτενής επισκόπηση των ιδιοτήτων και των χαρακτηριστικών των μεταλλικών αφρών.

Ο μεταλλικός αφρός είναι ένα ανερχόμενο κατασκευαστικό υλικό, με εφαρμογές που θα απαριθμηθούν κατωτέρω και αφορούν τόσο στη χρήση του σαν δομικό υλικό, όσο και σαν υλικό αγωγής θερμότητας. Στην παρούσα μελέτη αυτό που εξετάζεται είναι κυρίως η γεωμετρία και κατασκευαστική του δομή, οι ιδιότητες των μεταλλικών αφρών ως προς τον καθορισμό των παραμέτρων που διέπουν το ροϊκό πεδίο και τη μεταφορά θερμότητας στο σύστημα στερεού-ρευστού που προκύπτει, οι τιμές των θερμοφυσικών τους σταθερών και οι χρήσεις τους σε διάφορες πρακτικές εφαρμογές με εστίαση κυρίως τους εναλλάκτες θερμότητας

2.1.1. Εισαγωγή-Μεταλλικοί Αφροί

Με τον όρο «μεταλλικός αφρός» χαρακτηρίζονται τα πορώδη εκείνα υλικά που έχουν σαν μητρικό υλικό ένα μέταλλο υψηλής αντοχής, συνήθως χαμηλής πυκνότητας, και παρασκευάζονται με ειδικές διεργασίες χύτευσης, κραμάτωσης και πήξης, έτσι ώστε να έχουν χαρακτηριστική διάτρητη δομή (πορώδη σαν μεταλλικά σφουγγάρια) και να αποτελούνται από πολύεδρα κελιά επαναλαμβανόμενα (σε κάποιες περιπτώσεις περιοδικά) στο χώρο. Γενικά οι μεταλλικοί αφροί χωρίζονται σε 2 κατηγορίες: α) στους αφρούς ανοικτής δομής (ή ανοικτού κελιού ή ανοικτού πορώδους) οι οποίοι χαρακτηρίζονται από την διάτρητη στερεομετρία του αφρού μέσω της οποίας δίνεται η δυνατότητα σε ένα ρευστό να διαπεράσει το εσωτερικό του αφρού β) στους αφρούς κλειστής δομής οι οποίοι έχουν πορώδη δομή στο εσωτερικό τους, όμως τα κελιά του στερεού μέρους του αφρού δεν έχουν ανοίγματα, οπότε δεν επιτρέπεται η είσοδος ρευστού και η «επικοινωνία» με το εσωτερικό τμήμα του αφρού (Σχήμα 2-1).



Σχήμα 2-1: Φωτογραφία Μεταλλικού Αφρού α) ανοικτού κελιού 40 PPI β) κλειστού κελιού τύπου Alporas (Shinko Wire Company) γ) μεταλλικός αφρός ανοικτού κελιού 40 PPI (δείγμα Duocel®)

Οι αφροί ανοικτού κελιού αποτελούνται από κελιά που διατάσσονται στο χώρο έτσι ώστε να τον καλύπτουν πλήρως και να μην αφήνουν ασυνέχειες στο υλικό στην ιδανική περίπτωση, γεγονός που καθιστά στις περισσότερες των περιπτώσεων βάσιμη την παραδοχή περί ομογενούς και ισότροπου υλικού (ERG co., Duocel®). Τα κελιά αυτά αποτελούνται από διάτρητες έδρες και συνδέονται μεταξύ τους με συνδέσμους οι οποίοι συναντιούνται σε κόμβους που ενώνουν τρεις ή τέσσερις συνδέσμους (βλ. και ενότητα 4), Σχήμα 2-1α. Αντιστοίχως οι αφροί κλειστού κελιού παρουσιάζουν δομή «φωλεμένων» κελιών με μεγάλα διάκενα μεταξύ των διαφόρων διαμερισμάτων που αυτά ορίζουν και έχουν μεγαλύτερη απόκλιση από την ομογενή – ισότροπη θεώρηση (Ashby et al., 2000).

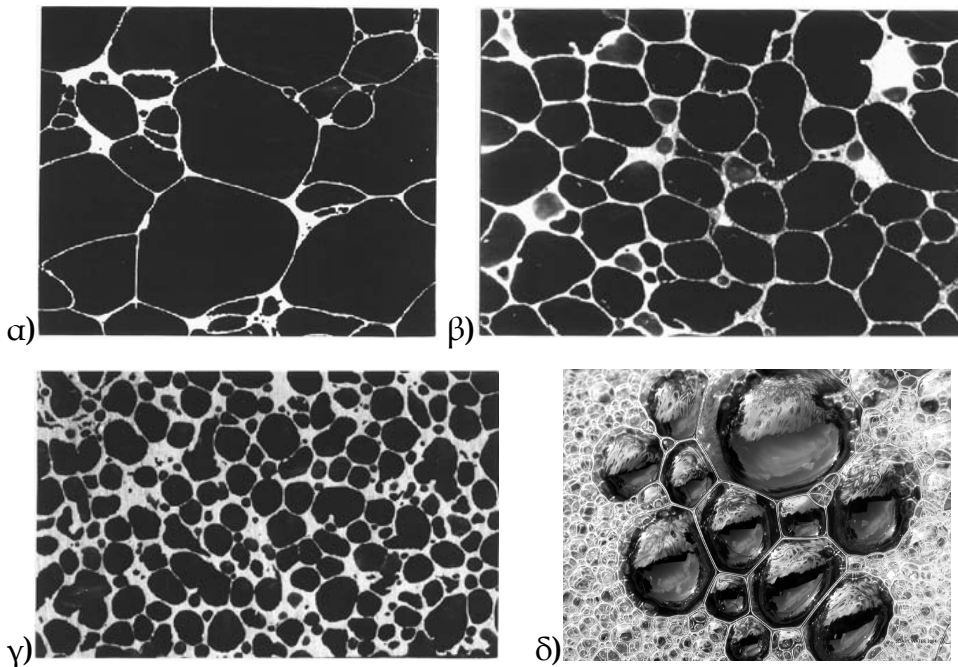
Τα μητρικά υλικά από τα οποία κατασκευάζονται οι μεταλλικοί αφροί (γενικά και όχι μόνο ανοικτού πορώδους) είναι συνήθως: Al, Ti, Pd, Ni, Mg, SiC, και C (Azzi et al., 2007, Phanikumar and Mahajan, 2002). Υπάρχουν και άλλα

υλικά από τα οποία μπορούν να παρασκευαστούν αφροί, αυτοί όμως δε χαρακτηρίζονται σαν μεταλλικοί και διαφέρουν ως προς τα χαρακτηριστικά και τις εφαρμογές τους σε σχέση με τους μεταλλικούς αφρούς. Τέτοια υλικά είναι τα κεραμικά, τα πολυμερή και διάφορα καρβίδια (Stemmet et al., 2005) . Οι αφροί που παράγονται από τέτοια υλικά ονομάζονται γενικά Στερεοί Αφροί (**Solid Foams**) και χρησιμοποιούνται σε εξειδικευμένες εφαρμογές θερμομόνωσης, ηχομόνωσης και δόμησης στοιχείων μηχανών και εξαρτημάτων και δεν απασχολούν περισσότερο την παρούσα διατριβή. Οι αφροί που παράγονται από τα τελευταία δύο υλικά της ανωτέρω λίστας (**SiC** και **C**) εντάσσονται σε αυτή την κατηγορία των στερεών αφρών.

Τα χαρακτηριστικά ενός αφρού συνοψίζονται βέλτιστα δίνοντας την περιγραφή του μητρικού υλικού από το οποίο είναι κατασκευασμένος, τη σχετική του πυκνότητα ρ/ρ_s (είναι ο λόγος της πυκνότητας του αφρού ρ , προς την πυκνότητα του στερεού μητρικού υλικού ρ_s), την ταξινόμησή του σε ανοικτού ή κλειστού κελιού τύπο αφρού και των αριθμό των πόρων ανά μήκος ίντσας **PPI (Pores Per Inch)**. Περαιτέρω, οι ιδιότητες του αφρού επηρεάζονται εκτός από τα ανωτέρω χαρακτηριστικά και από δομικά, όπως ανισοτροπία και ατέλειες με συνηθέστερες τα στρεβλά, πορπωτά και σπασμένα τοιχώματα των κελιών που τον απαρτίζουν, ή κελιά διαφοροποιημένου σχήματος και μεγέθους από το σύνολο (Ashby et al., 2000).

Στο Σχήμα 2-2 παρουσιάζεται ενδεικτικά η δομή τριών εμπορικών αφρών (Ashby et al., 2000). Η δομή αυτή έχει έντονη ομοιότητα με τη δομή μεμβρανών αφρού σαπουνόνερού αφού απαρτίζεται από πολυέδρα κελιά με λεπτές επιφάνειες που συνορεύουν με πιο παχείς ακμές (κανόνες **Plateau**, βλ. και ενότητα 4, Kelvin 1887, Ashby et al., 2000). Κάποια από τα χαρακτηριστικά των μεταλλικών αφρών εμφανίζεται να καθορίζονται από την επιφανειακή ενέργεια (Ashby et al., 2000), όπως καθορίζονται και στις μεμβράνες σαπουνάδας με εμφανές παράδειγμα τους κανόνες **Plateau**. Άλλα χαρακτηριστικά πάλι δεν καθορίζονται από την επιφανειακή ενέργεια: αρκετές έδρες των κελιών του

αφρού δεν έχουν ομαλή καμπυλότητα και γεωμετρία, ή είναι ρυτιδωμένες και έχουν περιστασιακά σπασμένα τοιχώματα τα οποία όντας σε κάποιο σημείο ενωμένα με το υλικό, αιωρούνται στο χώρο του αφρού, απομακρύνοντας έτσι τις ιδιότητες του υλικού από τις ιδανικές. Ωστόσο στην παρούσα, θεωρείται ιδανική τοπολογία αφρού ανοικτού κελιού ώστε να γίνει η μοντελοποίηση και στη συνέχεια η προσομοίωση ροής.



Σχήμα 2-2: Μεταλλικοί αφροί (Ashby et al., 2000), α) αφρός Cymat σχετικής πυκνότητας $\rho/\rho_s = 0,04$ (πυκνότητα αφρού 108 kg/m^3) β) αφρός Alporas $\rho/\rho_s = 0,09$ (πυκνότητα 240 kg/m^3) γ) αφρός Alulight $\rho/\rho_s = 0,25$ (πυκνότητα 435 kg/m^3) δ) αφρός σαπουνάδας

Οι ιδιότητες των μεταλλικών αφρών εξαρτώνται άμεσα περισσότερο από τις ιδιότητες του μητρικού υλικού από το οποίο είναι παρασκευασμένος ο αφρός και από τη σχετική πυκνότητα του ίδιου του αφρού, αλλά επηρεάζονται και από τη δομή του αφρού. Αυτή η επιρροή, ατελώς κατανοητή επί του παρόντος, αποτελεί αντικείμενο εντατικής μελέτης και έρευνας από την επιστημονική κοινότητα στην παρούσα περίοδο (Ashby et al., 2000).

Παραβλέποντας τις πολύ χρήσιμες μηχανικές ιδιότητες που παρουσιάζουν οι μεταλλικοί αφροί στην αεροναυπηγική, τη στατική των κατασκευών μέσω μεταφοράς και των κτιρίων ελαφριών δομικών στοιχείων (Ashby et al., 2000 και Brothers and Dunand, 2006), πρέπει να δοθούν στοιχεία όσον αφορά τις θερμικές/θερμοδυναμικές ιδιότητες μεταλλικών αφρών που θα απασχολήσουν και αυτή την εργασία. Έτσι, οι Ashby et al., 2000 δίνουν τα εξής χαρακτηριστικά για κάποιους μεταλλικούς αφρούς που υπάρχουν στο εμπόριο:

Ιδιότητα /Είδος αφρού	Cymat	Alulight	Alporas	ERG	Inco
Υλικό	Al - SiC	Al	Al	Al	Ni
Σχετική πυκνότητα	0.02-0.2	0.1-0.35	0.08-0.1	0.05-0.1	0.03-0.04
Δομή	Κλειστού κελιού	Κλειστού κελιού	Κλειστού κελιού	Ανοικτού κελιού	Ανοικτού κελιού
Σημείο τήξης, T_m [K]	830 - 910	840 - 850	910 - 920	830 - 920	1700 - 1720
Μέγιστη θερμοκρασία λειτουργίας, T_{max} [K]	500 - 530	400 - 430	400 - 420	380 - 420	550 - 650
Ελάχιστη θερμοκρασία λειτουργίας, T_{min} [K]	1-2	1-2	1-2	1-2	1-2
Ειδική θερμοχωρητικότητα, C_p [J/kg·K]	830 - 870	910 - 920	830 - 870	850 - 950	450 - 460
Θερμική αγωγιμότητα, K [W/m·K]	0.3-10	3.0-35	3.5-4.5	6.0-11	0.2-0.3
Συντελεστής θερμικής διαστολής, α [$10^{-6}/K$]	19-21	19-23	21-23	22-24	12-14
Λανθάνουσα θερμότητα τήξης, L [kJ/kg]	355 - 385	380 - 390	370 - 380	380 - 395	280 - 310

Πίνακας 2-1: Ιδιότητες διαφόρων τύπων μεταλλικού αφρού, όσον αφορά θερμικά χαρακτηριστικά

Το σημείο τήξης, η ειδική θερμοχωρητικότητα και ο συντελεστής διαστολής, έχουν τις ίδιες τιμές με αυτές του μετάλλου από το οποίο είναι κατασκευασμένος ο αφρός. Η θερμική αγωγιμότητα διαβαθμίζεται ανάλογα με τη σχετική πυκνότητα ως εξής:

$$k \approx k_s \left(\frac{r}{r_s} \right)^q$$

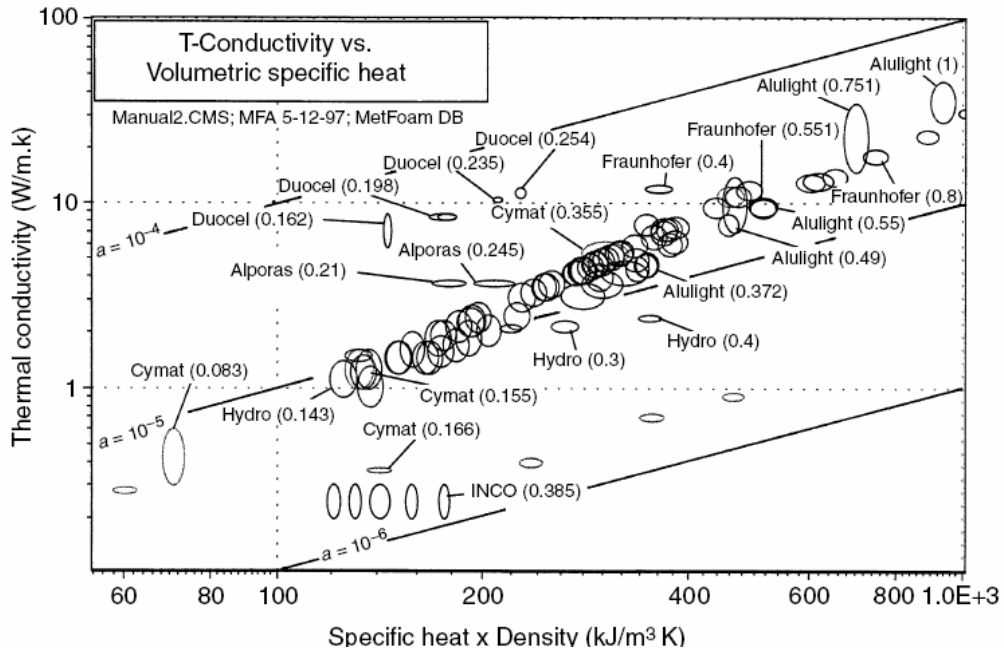
(2-1)

,όπου $\mathbf{q}=1,65$ έως $1,8$ και \mathbf{k}_s η θερμική αγωγιμότητα του μητρικού υλικού στο μεταλλικό αφρό που αναφερόμαστε.

Το Σχήμα 2-3 δίνει σημαντικές πληροφορίες για τις θερμικές ιδιότητες διαφόρων μεταλλικών αφρών: Οι αριθμοί σε παρένθεση είναι η πυκνότητα του αφρού σε $\mathbf{Mg/m^3}$. Στο διάγραμμα απεικονίζεται η θερμική αγωγιμότητα \mathbf{k} συναρτήσει της ογκομετρικής ειδικής θερμοχωρητικότητας $\mathbf{C_p \cdot \rho}$, ενώ σε αυτό έχουν προστεθεί ισοϋψείς της θερμικής διαχυτότητας

$$a = \frac{k}{C_p \rho}$$

(2-2)



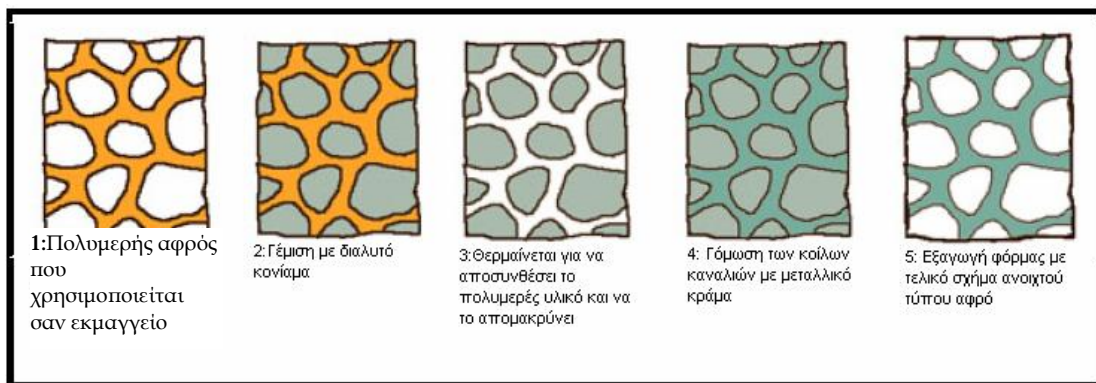
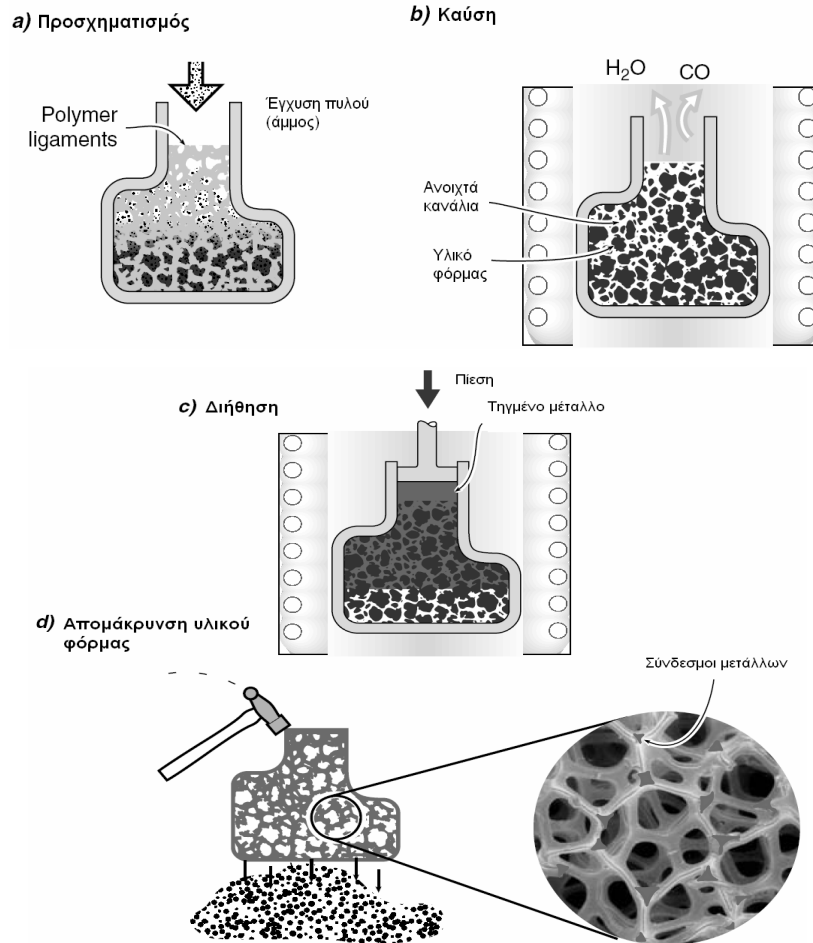
Σχήμα 2-3: Θερμική αγωγιμότητα \mathbf{k} συναρτήσει της ογκομετρικής ειδικής θερμοχωρητικότητας $\mathbf{C_p \cdot \rho}$ για διάφορους τύπους διαθέσιμων εμπορικών αφρών. Οι ισοϋψείς παριστάνουν θερμική διαχυτότητα (\mathbf{a}).

Ακολούθως παρουσιάζονται οι χρήσεις και οι κατασκευαστικές επιλογές που έχει στη διάθεσή του ο μηχανικός για την παραγωγή διαφόρων τύπων μεταλλικού αφρού.

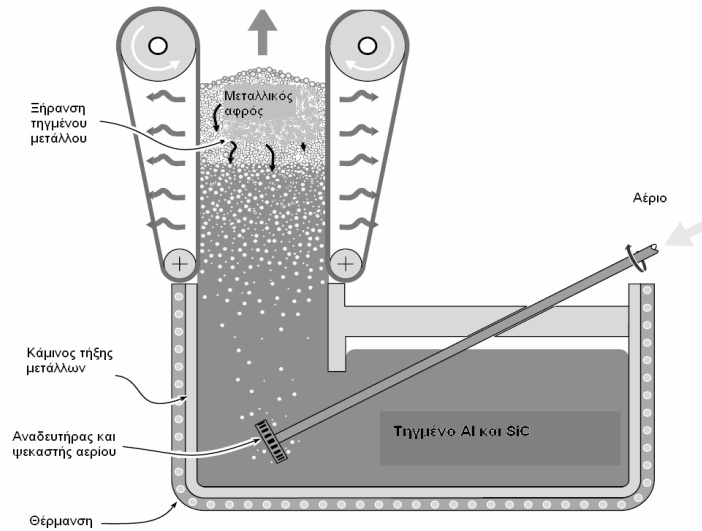
2.1.2. Μέθοδοι κατασκευής και χρήσεις μεταλλικών αφρών

Οι διαδικασίες παρασκευής των μεταλλικών αφρών είναι πολλές (Ashby et al., 2000) όμως αποτελούν παραλλαγές που ομοιάζουν μεταξύ τους και από αυτές ξεχωρίζουν δύο : Η Τεχνική Χύτευσης με Διήθηση, (**Infiltration Casting Technique**) και η μέθοδος έγχυσης. Κατά την πρώτη ξεκινώντας από πολυμερή αφρό που σχηματοποιείται υπό την επίδραση επιφανειακών τάσεων (Ashby et al., 2000, Boomsma et al., 2003 και ERG co.-Duocel), κατασκευάζεται στερεό πορώδες καλούπι από κεραμικό κονίαμα (Ashby et al., 2000) και στη συνέχεια αφαιρείται ο πολυμερής αφρός με θέρμανση ώστε να αντικατασταθεί από το τήγμα του μετάλλου (Σχήμα 2-4). Ως εκ τούτου, η μορφή των συνδέσμων του αφρού μπορεί να ελεγχθεί προσεκτικά και η διάμετρος των συνδέσμων μέσα στον αφρό μπορεί να θεωρηθεί σταθερή (Leong και Jin, 2005). Αυτή η μέθοδος δίνει αφρούς τύπου ανοικτής δομής ή «Ανοιχτού Κελιού» (**open cell**) που είναι και ο τύπος της προς μοντελοποίηση γεωμετρίας μεταλλικού αφρού σε αυτή τη διατριβή.

Κατά τη δεύτερη μέθοδο (μέθοδος έγχυσης) , όταν το κράμα του μετάλλου τηχθεί και βρίσκεται στην υγρή φάση, εγχέεται αέριο (ή προσθετικό) στο τήγμα του κράματος δημιουργώντας φυσαλίδες στο τηγμένο μέταλλο. Αυτές είναι ελεύθερες να κινηθούν και στοιβάζονται σε συγκεκριμένο χώρο έχοντας την τάση να επιτυγχάνουν τη φυσική κατάσταση ελάχιστης επιφανειακής ενέργειας, ενώ το υγρό μέταλλο συσσωρεύεται στις άκρες των φυσαλίδων δημιουργώντας την τελική δομή η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι «Κλειστού Κελιού» (Boomsma et al., 2003 και Ashby et al., 2000, βλ. Σχήμα 2-5).



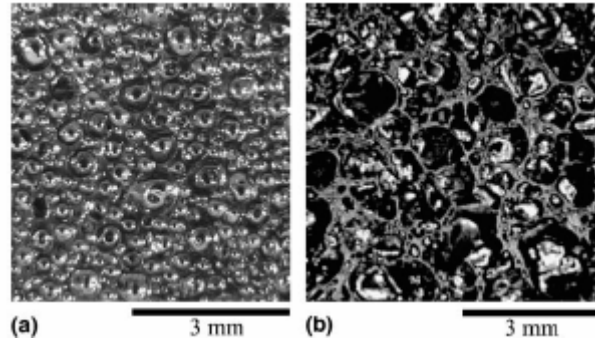
Σχήμα 2-4: Μέθοδος παρασκευής μεταλλικού αφρού μέσω χύτευσης με διήθηση (ERG-Duocel®). a) Κατασκευή φόρμας (καλούπι) από πολυμερές εκμαγείο b) διάτρηση καλουπιού (αρνητικό αποτύπωμα) c) έγχυση υπό πίεση του τήγματος d) απομάκρυνση του υλικού του καλουπιού (Ashby et al., 2000).



Σχήμα 2-5: Μέθοδος παραγωγής μεταλλικού αφρού κλειστής δομής με έγχυση αερίου στο τήγμα του μετάλλου (Ashby et al., 2000)

Τόσο η κατασκευαστική σύνθεση και δομή των μεταλλικών αφρών, όσο και οι ιδιότητες των μητρικών υλικών παρασκευής αυτών τους δίνουν χαρακτηριστικά που δεν απαντώνται σε άλλα υλικά καθιστώντας τους έτσι ικανούς να χρησιμεύουν σε ένα ευρύ φάσμα κατασκευαστικών και θερμικών-ροϊκών εφαρμογών. Έτσι οι άμορφοι μεταλλικοί αφροί (Σχήμα 2-6) χρησιμεύουν στις εξής εφαρμογές (Brothers and Dunand, 2005) :

- Δομικά μέρη ελαφρών κατασκευών
- Κατευναστές εκρήξεων/κρούσεων
- Φίλτρα ρευστών
- Στηρίξεις καταλυτών (δομικά υποστρώματα)
- Βιοϊατρικά εμφυτεύματα.



Σχήμα 2-6: Φωτογραφία άμορφου μεταλλικού αφρού (τύπου **closed-cell**): (a) αφρός Pd παρασκευασμένος με χρήση προσθετικού που προκαλεί απελευθέρωση αερίου και (b) αφρός Pd παρασκευασμένος με απευθείας εγκλωβισμό αερίου (**Brothers και Dunand, 2005**)

Επίσης, σε αμφίπλευρες δομές (**sandwich structures**) μπορούν να χρησιμοποιηθούν σαν δοκοί, στήλες ή πλάκες δόμησης εξαρτημάτων, κελύφη σε δοχεία πίεσης, περιστρεφόμενοι δίσκοι και περιστρεφόμενα τύμπανα φυγοκέντρωσης. Ομοίως σαν ελαστικοί σύνδεσμοι οι άμορφοι μεταλλικοί αφροί βρίσκουν διάφορες εφαρμογές, όπως παρεμβύσματα συμπίεσης και αποσβέστες κρούσεων (**ductile AMF**).

Οι **Dukhan et al. (2005)** αναφέρουν και τις εξής χρήσεις των μεταλλικών αφρών γενικά (και όχι των άμορφων) σε:

- Ελαφρές δομικές κατασκευές (στήριξης/στατικής) στην αεροδιαστημική & αεροναυπηγική
- Μέσα απορρόφησης μεταξύ στιβαρής κατασκευής και κυμαινόμενου θερμοκρασιακού πεδίου (απόσβεση συστολοδιαστολών)
- Γεωθερμικές λειτουργίες
- Δεξαμενές πετρελαίου
- Συμβατικούς εναλλάκτες θερμότητας για αεροπορικό εξοπλισμό
- Αερόψυκτους πόργους συμπύκνωσης
- Συμβατικούς και σύμπακτους απορροφητές θερμότητας για ηλεκτρονικά ισχύος

Οι **Kadar et al. (2004)** δίνουν τις ακόλουθες εφαρμογές για τα κυψελωτά υλικά που παρασκευάζονται από μέταλλο αλλά και για τους μεταλλικούς αφρούς:

- Βιοϊατρικά πρόσθετα μέλη
- Προστατευτικές διαπερατές μεμβράνες
- Εναλλάκτες θερμότητας
- Θερμο/ηχομονωτικές επενδύσεις
- Απορρόφηση ενέργειας
- Συγκράτηση φλόγας

Εξάλλου οι **Singh** και **Kasana (2004)**, λαβάνοντας υπόψιν τους την κατασκευαστική σύνθεση και τους ειδικούς μηχανισμούς παραμόρφωσης των μεταλλικών αφρών, αναφέρονται στις κατωτέρω χρήσεις τους:

- Κατασκευή περὶ γων στην αεροναυπηγική
- Επιφάνειες κατάλυσης για χημικές αντιδράσεις
- Δομικά στοιχεία πυρήνα πλαισίων υψηλής αντοχής
- Δομικό υλικό θαλάμου περιορισμού σε καυστήρα στερεών προωθητικών καυσίμων

Επικεντρώνοντας την προσοχή στις θερμικές και ροϊκές εφαρμογές των μεταλλικών αφρών, αυτές αναφέρονται κυρίως σε απαγωγείς θερμότητας για ηλεκτρονικά ισχύος και πολυστρωματικούς (**multi-layered**) εναλλάκτες θερμότητας σε αεροναυτικές εφαρμογές (**Lu et al. 1998**). Μπορούν να σταχυολογηθούν οι ακόλουθες θερμικές και ροϊκές εφαρμογές του υλικού αυτού:

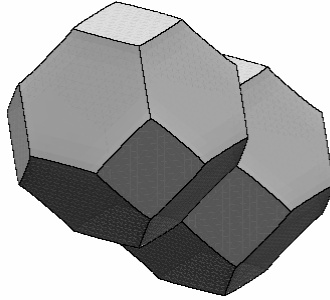
- Εντατικοποιημένη μεταφορά θερμότητας σε:
 - Κρυογενικούς εναλλάκτες θερμότητας
 - Εναλλάκτες θερμότητας για αεροπορικό εξοπλισμό
 - Καυστήρες άνθρακα
- Απορροφητές θερμότητας για ηλεκτρονικές συσκευές υψηλής ισχύος

- Θερμο-ασπίδες (**heat-shielding**) για τις εξατμίσεις αεροσκαφών
- Συμβατικοί εναλλάκτες θερμότητας
- Εναλλάκτες θερμότητας υγρού
- Αερόψυκτοι συμπυκνωτές, πύργοι ψύξης και αναθερμαντήρες θερμικών μηχανών

Έχοντας δώσει τις κυριότερες εκ των ιδιοτήτων και των εφαρμογών στις οποίες χρησιμοποιούνται μεταλλικοί αφροί παραπάνω, γίνεται στην επόμενη παράγραφο μια ανασκόπηση των αριθμητικών προτύπων που έχουν κατά καιρούς παρουσιαστεί από διάφορους ερευνητές για την προσομοίωση ροής μέσα από μεταλλικό αφρό ανοικτού κελιού.

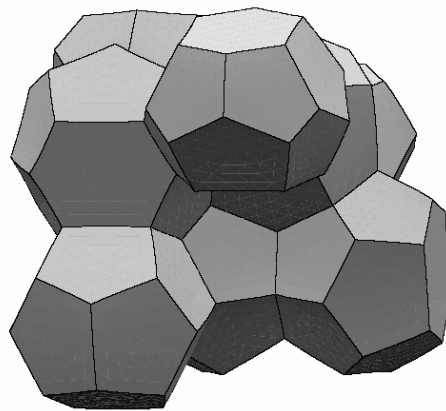
2.1.3. Προηγούμενες προσπάθειες προσομοίωσης μεταλλικών αφρών ανοικτής δομής

Το σχήμα που δημιουργείται (επιλέγεται) από τη φύση στις περιπτώσεις της ελαχιστοποίησης του χώρου, λόγω ακριβώς της ελαχιστοποίησης της επιφανειακής ενέργειας που επιφέρει κάθε μία από τις ανωτέρω προαναφερθείσες μεθόδους παρασκευής μεταλλικού αφρού, πιστευόταν μέχρι πρόσφατα πως είναι το δεκατετράεδρο, αποτελούμενο από έξι τετράγωνα και οκτώ εξάγωνα έδρες (**Lord Kelvin, 1887**). Το μοντέλο αυτό για τη γεωμετρία του αφρού συμπληρωνόταν από τις συνθήκες **Plateau (1883)** σύμφωνα με τις οποίες τα επίπεδα των εδρών πρέπει να σχηματίζουν γωνία 120° μεταξύ τους και οι ακμές τους να συναντιούνται υπό γωνία $\arccos(-1/3)$ καλούμενη και τετραεδρική γωνία (Σχήμα 2-7). Στην περίπτωση αυτή αναζητούνταν η ελάχιστη επιφάνεια που θα δημιουργηθεί σε σφαιρικά σώματα αν αυτά αφεθούν ελεύθερα να καταλάβουν συγκεκριμένο όγκο υπό την επίδραση μόνο της επιφανειακής τάσης.



Σχήμα 2-7: Το μοντέλο του **Kelvin** σε δύο 14-εδρα κελιά (**Weaire and Phelan, 1994**)

Ωστόσο, οι **Phelan, Weaire** και **Brakke** (**Weaire and Phelan, 1994** και **Brakke, 1992**), απέδειξαν ότι ένα άλλο μοντέλο επιτυγχάνει μικρότερη επιφανειακή ενέργεια και οδηγεί σε μικρότερη επιφάνεια από αυτό του **Kelvin** κατά **0,3%**. Το μοντέλο αυτό, καλούμενο ως **WP** στο εξής, αποτελούνταν όχι από ένα μόνο χαρακτηριστικό κελί αλλά από έναν αντιπροσωπευτικό όγκο αποτελούμενο από έξι 14-εδρα και δύο μη κανονικά 12-εδρα (Σχήμα 2-8). Με μέθοδο που οδηγεί στο ανωτέρω σχήμα εικάζεται ότι δημιουργείται και το αρχικό πολυμερές εκμαγείο που χρησιμοποιείται και στην πρώτη μέθοδο της χύτευσης με διήθηση που αναφέρθηκε στην παράγραφο 2.1.2 (**Duocel**®) για την παρασκευή μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής.

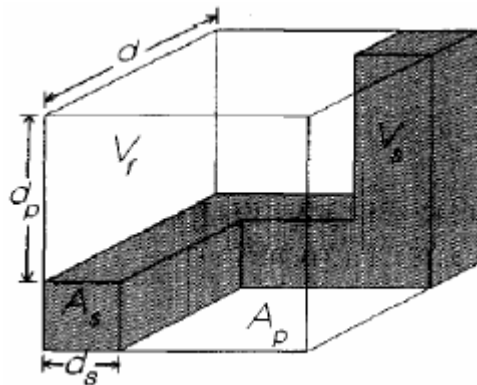


Σχήμα 2-8: Αντιπροσωπευτικός όγκος του μοντέλου των **Weaire** και **Phelan** (**Weaire and Phelan, 1994**)

Οι **Boomsma et al., 2003** χρησιμοποίησαν αυτήν ακριβώς τη γεωμετρία για να μοντελοποιήσουν ροή μέσα από μεταλλικό αφρό ανοικτού κελιού, σε μια από τις καλύτερες τοπολογικές προσεγγίσεις που έχουν παρουσιαστεί.

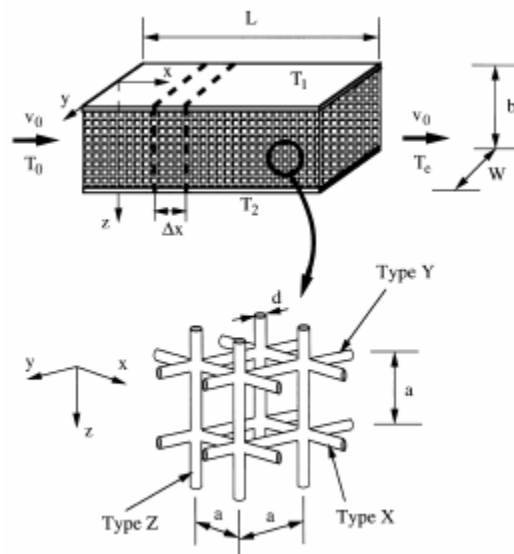
Ωστόσο, μέχρι να παρουσιαστεί το μοντέλο των **Weaire** και **Phelan**, οι μοντελοποιήσεις μεταλλικών αφρών ανοικτού κελιού που επιχειρήθηκαν για τον τρισδιάστατο χώρο πέρασαν από πολλά στάδια, γεγονός που οφείλεται τόσο στην σταδιακή βελτίωση της κατανόησης και της επισκόπησης του ίδιου του υλικού, όσο και στην εξέλιξη της χρησιμοποιούμενης τεχνολογίας-είτε αυτή αφορούσε τις μεθόδους παρασκευής του υλικού, είτε τα υπολογιστικά εργαλεία προσομοίωσης.

Στη σύγχρονη εποχή, ένα από τα πρώτα εγχειρήματα προσομοίωσης της δομής μεταλλικού αφρού ήταν αυτό των **Du Plessis et al. (1994)**, το οποίο θεωρούσε την ισοδύναμη διάμετρο του πόρου ενός υλικού για να αναπαραστήσει ένα αντιπροσωπευτικό κελί το οποίο είχε τον ίδιο λόγο κενού προς ολικό όγκο (ίδιο πορώδες) και το χρησιμοποίησε για να συσχετίσει τη συστροφή (βλ. ενότητα 3) με το πορώδες σε μια προσπάθεια πρόλεξης των πειραματικών αποτελεσμάτων για ροή μέσα από αφρούς υψηλού πορώδους, με τα οποία έκανε συγκρίσεις (Σχήμα 2-9).



Σχήμα 2-9: Το μοντέλο των **Du Plessis et al., 1994** για προσομοίωση ροής σε μεταλλικό αφρό

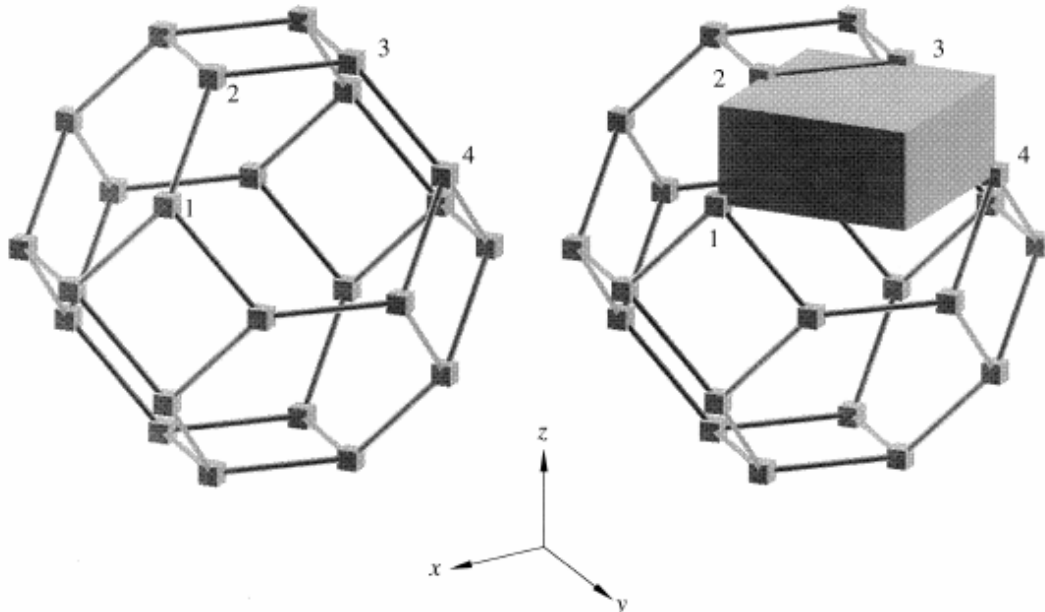
Ένα λίγο πιο πολύπλοκο και μεγαλύτερο μοντέλο ήταν αυτό που παρουσίασαν οι **Lu et al., (1998)** με σκοπό τη μελέτη της μεταφοράς θερμότητας στο εσωτερικό των μεταλλικών αφρών ανοικτού κελιού, διαμέσου των στερεών συνδέσμων του (**ligaments**), οι οποίοι παραστάθηκαν ως κύλινδροι ορθογώνια διατεταγμένοι μεταξύ τους. Στην εργασία τους δίνονται σχέσεις που συνδέουν τη διάμετρο του αντιπροσωπευτικού κελιού που προτείνουν με την (ειδική) επιφάνεια του μεταλλικού αφρού, το μέγεθος του αφρού με την πτώση πίεσης κατά την εξαναγκασμένη συναγωγή και δίνουν δύο παραδείγματα των σχέσεων αυτών σε εφαρμογές εναλλακτών θερμότητας με τη χρήση μεταλλικού αφρού ανοικτού κελιού (Σχήμα 2-10).



Σχήμα 2-10: Το μοντέλο που προτείνουν οι **Lu et al., (1998)**, με τη χρήση ορθογώνια διατεταγμένων κυλίνδρων.

Έχοντας αφήσει τις πρώτες προσπάθειες προσομοίωσης που αναφέρθηκαν πίσω, αφού η εξέλιξη της υπολογιστικής δύναμης των ηλεκτρονικών υπολογιστών και η ανάπτυξη νέων εργαλείων τοπολογικής αποτύπωσης τις κατέστησε ξεπερασμένες, οι ερευνητές επικεντρώθηκαν στη χρήση ακριβέστερων γεωμετριών για χρήση στις μεθόδους στοιχειώδους αντιπροσωπευτικού όγκου (**REV-Representative Elementary Volume, Boomsma, 2002**). Έτσι το μοντέλο που

παρουσίασαν οι **Boomsma and Poulidakos, 2001** βασιζόταν στη γεωμετρία του τετρακαιδεκάεδρου (14-εδρου) που όπως αναφέρθηκε πιστευόταν ότι αντιπροσώπευε τη δομή του κελιού σε μεταλλικούς αφρούς ανοικτού κελιού (Σχήμα 2-11).

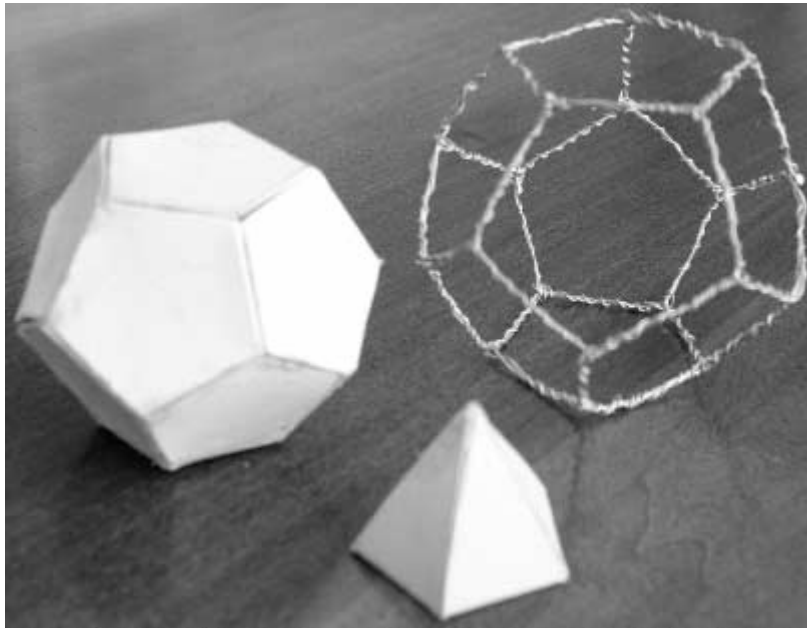


Σχήμα 2-11: Το τετρακαιδεκάεδρο (14-εδρο) χρησιμοποιήθηκε από τους **Boomsma and Poulidakos, (2001)** για τον υπολογισμό της μετάδοσης θερμότητας

Σκοπός τους ήταν να ερευνήσουν την επίδραση του ρευστού και του στερεού μέρους της πορώδους κατασκευής υπό συνθήκες καθαρής αγωγής στη θερμική αγωγιμότητα του όλου συστήματος. Τα αποτελέσματα συνηγορούν στο ότι ακόμη και σε μεγάλες τιμές πορώδους (δηλ. μεγάλου ποσοστού αέριας φάσης μέσα στον αφρό), η τιμή της θερμικής αγωγιμότητας του στερεού μέρους (μητρικό υλικό) του μεταλλικού αφρού είναι αυτή που υπερισχύει και συντελεί περισσότερο στον υπολογισμό της συνολικής ή «δρώσας» θερμικής αγωγιμότητας.

Σε μια προσπάθεια να συνδέσει το πραγματικό στερεομετρικό σχήμα του κελιού μεταλλικού αφρού και τις γεωμετρικές του παραμέτρους με τα θερμοφυσικά χαρακτηριστικά που εμφανίζει τόσο η καθαρή αγωγή, όσο και η

εξαναγκασμένη συναγωγή μέσα από αυτόν, ο **Ozmat et al., (2004)** παρουσίασε ένα τοπολογικό μάρφωμα για να αναπαραστήσει το κελί του μεταλλικού αφρού **Duocel**® το οποίο βασίζεται στο **12**-εδρο που αποτελείται αποκλειστικά από πεντάγωνα έδρες (βλ. και ενότητα **4**).



Σχήμα 2-12: Το μοντέλο **Ozmat et al., (2004)** βασίστηκε στη στερεομετρία του **12**εδρου

Η δημοσίευσή τους παρουσιάζει σχέσεις που συσχετίζουν τις διαμέτρους του κελιού, του ανοίγματος της κάθε έδρας (ύψος πεντάγωνου) και τον όγκο του κελιού με την ειδική επιφάνεια και το μήκος του συνδέσμου και επιχειρεί να συνδέσει την πυκνότητα του αφρού με τη θερμική αγωγιμότητα που αυτός παρουσιάζει.

Με το ερώτημα περί της βέλτιστης επιλογής μεταξύ **14**εδρου και **12**εδρου για την αναπαρασταση του κελιού μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής να παραμένει ανοικτό, οι **Weaire and Phelan, (1994)** παρουσίασαν το μοντέλο που αναφέρθηκε παραπάνω (Σχήμα 2-8) και υιοθετήθηκε από τους **Boomsma et al., (2003)** με το οποίο γίνεται συγκερασμός των δύο σε μια γεωμετρία που μαθηματικά έχει αποδειχθεί ότι είναι αυτή που εμφανίζει την ελάχιστη επιφανειακή ενέργεια σε

σχέση με όλες όσες έχουν κατά καιρούς προταθεί και με την οποία θα ασχοληθεί εκτενώς η παρούσα διατριβή στην ενότητα 4.

2.2. Ύφασμα ανθρακοϊνών διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM

Έχει ήδη γίνει αναφορά στην αναγκαιότητα που επιχειρεί να καλύψει η παρούσα εργασία με τη διερεύνηση των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα στο στρώμα διάχυσης αερίου (διαχύτης **Gas Diffusion Layer- GDL**) σε επίπεδο μικροκλίμακας για την περίπτωση των κυψελών καυσίμου τύπου PEM. Στις παραγράφους που ακολουθούν γίνεται παρουσίαση των κυψελών καυσίμου PEM και του τρόπου λειτουργίας τους, ενώ δίνονται και κάποια χαρακτηριστικά τους που χρειάζεται να λαμβάνονται υπόψιν κατά τη μοντελοποίηση των εμπλεκόμενων μερών και την προσομοίωση της ροής διαμέσου αυτών που επιχειρείται.

2.2.1. Εισαγωγή: οι κυψέλες καυσίμου PEM

Η κυψέλη καυσίμου **PEM (Proton Exchange Membrane** ή **Polymer Electrolyte Membrane**, Σχήμα 2-13), λειτουργεί σαν ‘παραγωγός’ ηλεκτρικής ενέργειας (ρεύματος συνεχούς ροής). Αποτελείται από τα κανάλια προσαγωγής των αντιδρώντων (υδρογόνο και ατμοσφαιρικός αέρας ή –σπανιότερα- καθαρό οξυγόνο), τα στρώματα διάχυσης των αερίων (**GDL**) τα οποία διαθέτουν γόμωση από πορώδες υλικό, το καταλυτικό υπόστρωμα και τη μεμβράνη εκτέλεσης της αντίδρασης. Στην άνοδο διοχετεύεται το καύσιμο (υδρογόνο σε αυτή την περίπτωση) και στην κάθοδο ατμοσφαιρικός αέρας (ή καθαρό οξυγόνο σπανιότερα). Στην άνοδο ιονίζεται το H_2 (αμέσως μετά το **GDL** και με τη βοήθεια καταλύτη **Pt** που στηρίζεται στο μητρικό υλικό του **GDL** με τη βοήθεια συνδετικού υλικού, π.χ. **Nafion®**), δίνοντας κατιόντα H^+ και ηλεκτρόνια, e^- . Τα ηλεκτρόνια διοχετεύονται στην κάθοδο όπου και ιονίζουν τα μόρια του O_2 ,

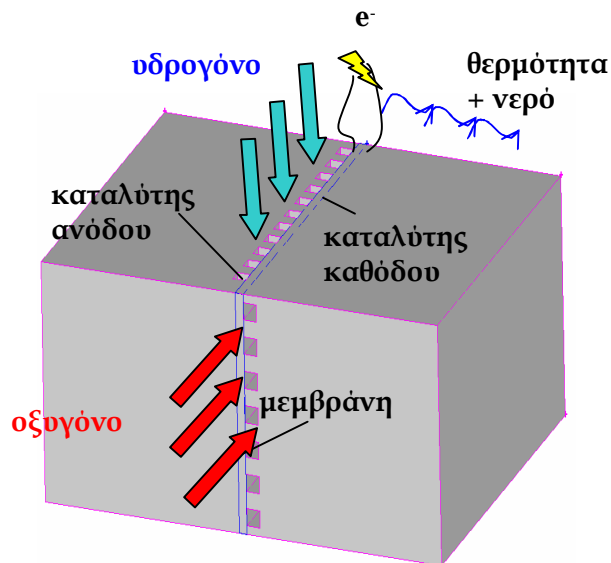
δίνοντας ανιόντα O^{2-} . Όλα τα ανωτέρω γράφονται με τη μορφή χημικών εξισώσεων ως εξής:



και τελικά:



Άρα, όπως εύκολα γίνεται αντιληπτό, το προϊόν της συνολικής αντίδρασης είναι μόνο το νερό, πράγμα που έχει τεράστια σημασία από περιβαλλοντικής απόψεως. Η όλη αντίδραση συνοδεύεται από έκλυση θερμότητας και παραγωγή ηλεκτρικού ρεύματος. Αυτό ακριβώς το ηλεκτρικό ρεύμα είναι που εκμεταλλεύεται από ενεργειακής άποψης η συγκεκριμένη διάταξη για να κινήσει κάποιο μεταφορικό μέσο (οχήματα προς το παρόν αλλά και αεροσκάφη στο προσεχές μέλλον, βλ. και <http://www.whnet.com/4x4/fuelcell.html>, Σχήμα 2-14) ή να ηλεκτροδοτήσει στατικά συστήματα.



Σχήμα 2-13: Απεικόνιση κυψέλης καυσίμου PEM. Διακρίνονται τα κανάλια προσαγωγής καυσίμου και αέρα καθώς και τα ηλεκτρόδια GDL (άνοδος και κάθοδος)



Σχήμα 2-14: Σχεδιαζόμενο πτητικό μέσο με χρήση PEM κυψέλης καυσίμου (πηγή: <http://www.whnet.com/4x4/fuelcell.html>)

2.2.2. Λειτουργία, συστατικά μέρη και υλικά GDL

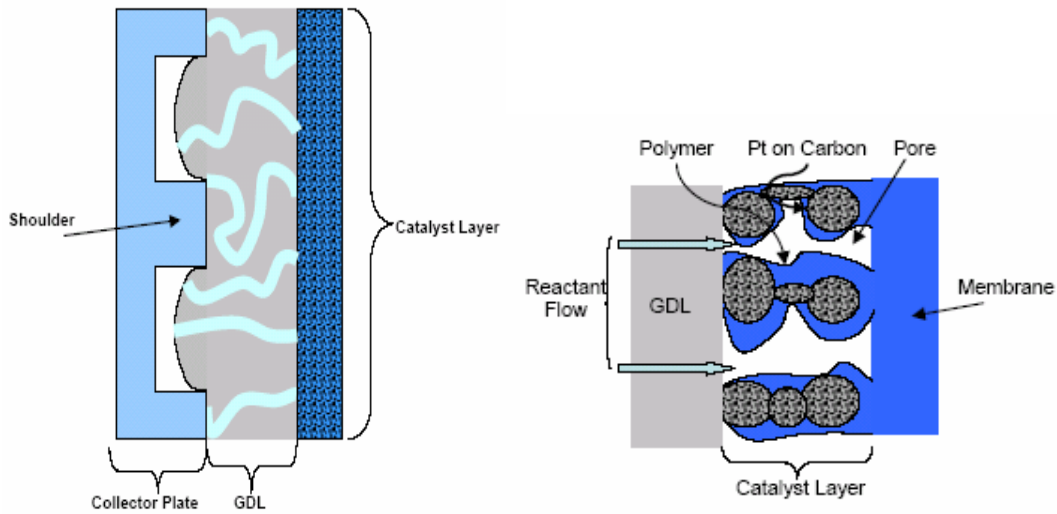
Όπως έχει αναφερθεί, η λειτουργία της κυψέλης καυσίμου PEM (Πίνακας 2-2), συνεπάγεται την παραγωγή υγρασίας, η οποία δρα ανασχετικά προς την απόδοση της αντίδρασης διότι, λόγω παρουσίας συμπυκνωμάτων νερού, φράσει το χώρο του GDL εν μέρει και του καταλυτικού υποστρώματος σε μεγαλύτερο βαθμό (Nam et al., 2009) και σε εκτεταμένες περιπτώσεις πλημμυρίζει τη μεμβράνη με αποτέλεσμα την τελική διακοπή της αντίδρασης σε αυτή (Nam et

al., 2009). Ωστόσο, για να λειτουργεί σωστά η μεμβράνη χρειάζεται να παραμένει σε κάποιο βαθμό υγρασία σε αυτή ώστε να μην καταστρέφεται (**drain**) λόγω των σχετικά υψηλών θερμοκρασιών που αναπτύσσονται κατά την αντίδραση (~ **353K**, **Quan and Lai, 2007** και **Chang et al., 2006**) αφού το αποτέλεσμα θα είναι το ίδιο (διακοπή της αντίδρασης). Καθίσταται έτσι το ζήτημα της διαχείρισης της υγρασίας ζωτικό, τόσο για το σχεδιαστή-μηχανικό, όσο και για το μηχανικό των υλικών που χρησιμοποιούνται.

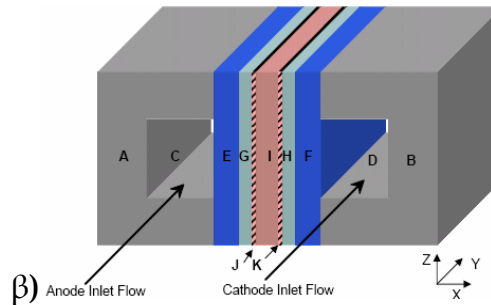
Οι **Quick et al., (2009)** γράφουν για αυτούς τους λόγους ότι οι ιδιότητες του πορώδους μέσου που βρίσκεται στο **GDL** προς διάχυση και χημική ενεργοποίηση (κινητικότητα) των αντιδρώντων αερίων πριν την είσοδό τους στο καταλυτικό υπόστρωμα πρέπει να είναι οι εξής: καλή ηλεκτρική και θερμική αγωγιμότητα, καλή χημική και θερμοκρασιακή αντοχή και τέλος βελτιωμένη διαπερατότητα (βλ. ενότητα **3** και **4**) στο νερό και στα αέρια. Όμως, κάποιες από αυτές είναι αντικρουόμενες μεταξύ τους, όπως η αύξηση του πορώδους που οδηγεί σε βελτίωση της διαπερατότητας του υλικού αλλά υποβαθμίζει τις μηχανικές αντοχές και την θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα.

Η επιλογή λοιπόν των υλικών που χρησιμοποιούνται σαν πορώδη μέσα στο εσωτερικό του **GDL**, περιορίζεται για τους λόγους αυτούς σε δύο κύριες κατηγορίες υλικών (**Siegel, 2003** και **Khandelwal and Mench, 2006**):

- α) Στα χαρτόφυλλα άνθρακα (**carbon papers**)
- β) Στα ανθρακοϋφάσματα ή υφάσματα ανθρακοϊνών (**carbon cloth**)



α)



Σχήμα 2-15: α),β) :Τρισδιάστατη απεικόνιση των μερών κυψέλης καυσίμου PEM (Siegel, 2003)

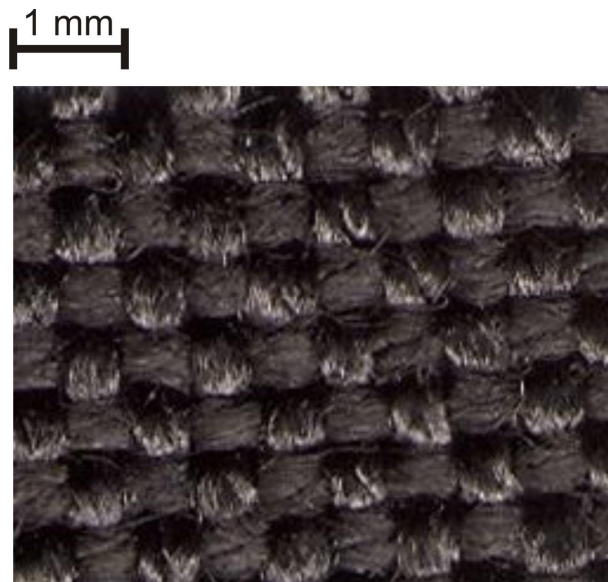
Στοιχείο		Διάσταση X, (mm)	Διάσταση Y, (mm)	Διάσταση Z, (mm)
Πλάκα συλλέκτη ανόδου	A	15	60	2
Πλάκα συλλέκτη καθόδου	B	15	60	2
Κανάλι αερίου ανόδου	C	1	60	1
Κανάλι αερίου καθόδου	D	1	60	1
GDL ανόδου	E	0,254	60	2
GDL καθόδου	F	0,254	60	2
Στρώμα καταλύτη ανόδου	G	0,013	60	2
Στρώμα καταλύτη καθόδου	H	0,013	60	2
Μεμβράνη	I	0,051	60	2
Ειδική επιφάνεια ανόδου	J	0,001	60	2
Ειδική επιφάνεια καθόδου	K	0,001	60	2
Σύνολο	-	2,587	60	2

Πίνακας 2-2: Διαστάσεις δομικών τμημάτων κυψέλης καυσίμου PEM (Σχήμα 2-15)

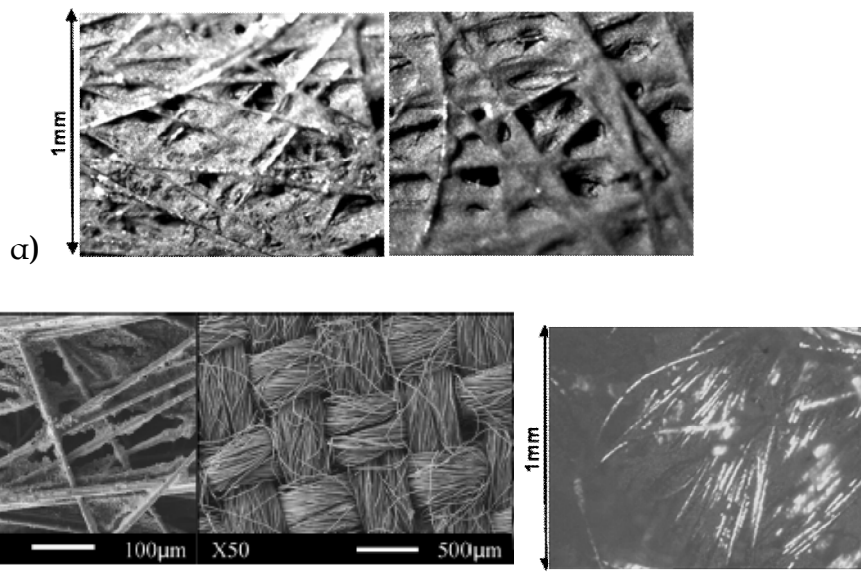
Αν και οι εταιρείες κατασκευής των ανωτέρω δύο υλικών δε δίνουν πολλές πληροφορίες για τους τρόπους που κατασκευάζονται (θεωρείται απόρρητη

βιομηχανική ιδιοκτησία), υπάρχει η δυνατότητα συλλογής κάποιων τιμών για τις χαρακτηριστικές τους ιδιότητες όπως και τις γεωμετρικές τους διατάξεις. Έτσι μπορεί να υποστηριχθεί η μοντελοποίηση των εν λόγω υλικών όσον αφορά την τοπολογία από μετρήσεις δειγμάτων των υλικών (Σχήμα 2-16) και βιβλιογραφικές πληροφορίες. Όσον αφορά τις θερμοφυσικές τους ιδιότητες η άντληση πληροφοριών γίνεται κυρίως από βιβλιογραφικές πηγές που αφορούν μετρήσεις στα εν λόγω υλικά, καθώς στην παρούσα διατριβή δεν υπήρχε η δυνατότητα να υποστηριχθεί απευθείας μέτρηση τέτοιων υλικών.

Το υλικό που επιλέχθηκε να μοντελοποιηθεί για την προσομοίωση ροής μέσα από το κανάλι προσαγωγής των αερίων και το πορώδες στρώμα του **GDL**, ήταν το ύφασμα **carbon cloth**, γιατί μεταξύ των δύο υλικών που προαναφέρθηκαν (**carbon cloth** και **carbon paper**), είναι αυτό που παρουσιάζει δομημένη τοπολογία και οργάνωση στη δομή και τοποθέτησή του στο **GDL** (Σχήμα 2-17).



Σχήμα 2-16: Ύφασμα ανθρακοϊνών (**carbon cloth**) γνωστής αυτοκινητοβιομηχανίας, που παραχωρήθηκε στα πλαίσια της διατριβής από την εταιρεία **Fluid Research**



Σχήμα 2-17: α) Είδη **carbon paper**, β) είδη **carbon cloth** (Feser et al ,2006)

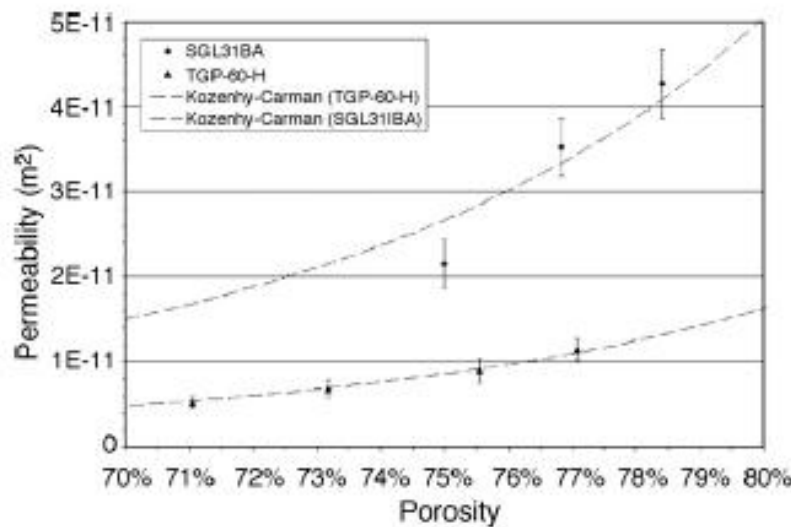
Κάποιες από τις ιδιότητες των ινών του **carbon cloth** που χρειάζονται σε μια μοντελοποίηση των θερμοφυσικών χαρακτηριστικών του υλικού είναι αυτές που αναφέρονται σε πινακοποιημένη μορφή (Πίνακας 2-3), (Siegel, 2003). Σε αυτόν παρουσιάζονται, τόσο τα θερμοφυσικά χαρακτηριστικά του πορώδους υφάσματος που μελέτησε ο Siegel, (2003), όσο και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αγωγού-καναλιού προσαγωγής των αντιδρώντων, τα κατασκευαστικά χαρακτηριστικά των εμπλεκόμενων υπολοίπων μερών και λειτουργικές τιμές των διαφόρων παραμέτρων που εμφανίζονται κατά τη χρήση της κυψέλης καυσίμου PEM.

Είδος/ιδιότητα	Τιμή	Μέθοδος
Μήκος καναλιού εισόδου αερίου (Gas channel length, L_{gc})	30,0 cm	μέτρηση
Πλάτος καναλιού εισόδου αερίου (Gas channel length, W_{gc})	1,0 mm	μέτρηση
Ύψος καναλιού εισόδου αερίου (Gas channel height, H_{gc})	1,0 mm	μέτρηση
Πάχος συλλέκτη (Collector thickness, t_{col})	1,5 cm	μέτρηση
Πάχος ηλεκτροδίου GDL ανόδου (Anode GDL thickness, t_{agd})	0,254 mm	εκτίμηση
Πάχος ηλεκτροδίου GDL καθόδου (Cathode GDL thickness, t_{cgd})	0,254 mm	εκτίμηση
Ποσοστό πορώδους στο ηλεκτρόδιο GDL (Gas diffusion layer void fraction, ϵ_{gd})	0,375	εκτίμηση
Πάχος στρώματος καταλύτη (Catalyst layer thickness, t_{cat})	0,013 mm	μέτρηση
Ποσοστό Pt και άνθρακα στη διεπιφάνεια του καταλύτη (Pt and carbon volume fraction in the catalyst layer, ϵ_{cat}^C)	0,45	υπολογισμός
Ποσοστό πορώδους στη διεπιφάνεια του καταλύτη (Catalyst layer void fraction, ϵ_{cat})	0,31	υπολογισμός
Ποσοστό πολυμερούς στη διεπιφάνεια του καταλύτη (Polymer volume fraction in the catalyst layer, ϵ_{cat}^P)	0,24	υπολογισμός
Πάχος Μembrάνης (Membrane thickness, t_m)	0,0508 mm	
Θερμοκρασία κελύφους (Cell temperature, T_{cell})	353 K	μέτρηση
Εξωτερική πίεση (Outlet pressure, P_{cell})	101 kPa	μέτρηση
Σχετική υγρασία αέρα (Air inlet relative humidity, R_{hc})	98%	μέτρηση
Σχετική υγρασία εισερχόμενου καυσίμου (Fuel inlet relative humidity, R_{ha})	98%	μέτρηση
Θεωρητική τάση ανοικτού κυκλώματος (Theoretical open circuit voltage, E_{th})	1,18	υπολογισμός
Ειδική επιφάνεια αντίδρασης (Specific reaction area of the catalyst layer, A)	7000 mm^{-1}	μέτρηση
Μέσο μέγεθος συσσώρευσης (Mean agglomerate size, L_{aggl})	1,0 μm	δεδομένο
Συστροφή ηλεκτροδίου GDL (Tortuosity of the GDL, τ_{gd})	8,0	δεδομένο
Συντελεστής εξάτμισης/συμπύκνωσης (Evap./cond. mass transfer coefficient, ψ_e, ψ_c)	0,0011 $\text{g}/\text{mm}^3 \cdot \text{s}$	εκλογή
Συντελεστής μεταφοράς μάζας διάλυσης/εξάτμισης (Dissolved/vapor mass transfer coefficient, h_m)	5000 s^{-1}	εκλογή

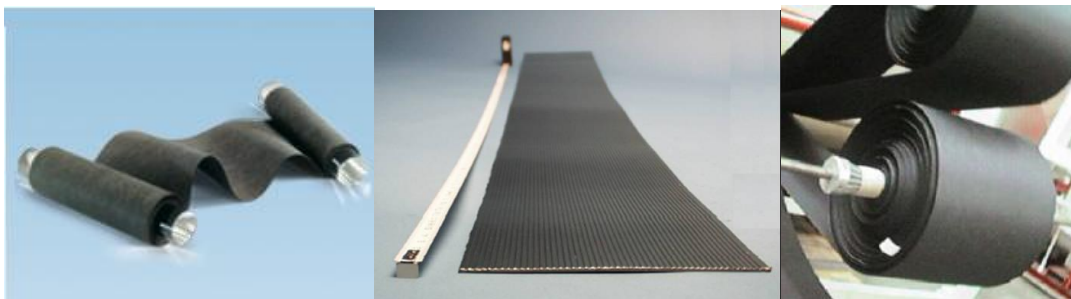
Πίνακας 2-3: Θερμοφυσικές ιδιότητες GDL και λοιπών μερών της κυψέλης PEM

Ένα από τα κύρια χαρακτηριστικά όταν αναφέρεται κανείς σε πορώδη υλικά είναι το πορώδες (ϵ) ή αλλιώς το ποσοστό όγκου/κενού σε μια μοναδιαίου όγκου περιοχή (βλ. και ενότητα 3). Αυτό για την περίπτωση του ανθρακοϋφάσματος

(carbon cloth) αναφέρεται στη διεθνή βιβλιογραφία (Luo et al., 2004) ίσο με 0,4 (Fiber volume fraction= 0,4 ή 40%). Ωστόσο οι Feser et al. (2006) αναφέρουν ότι το GDL παρουσιάζει υψηλό πορώδες (μεταξύ 60 και 90%). Εξάλλου από το πορώδες εξαρτάται στα υλικά αυτά και η διαπερατότητα (Feser et al, 2006). Το Σχήμα 2-18 παρουσιάζει την αυξητική τάση που παρουσιάζει η διαπερατότητα (ενότ. 3) για εμπορικά carbon cloth (Σχήμα 2-19).



Σχήμα 2-18: Αύξηση του πορώδους οδηγεί σε αύξηση της διαπερατότητας για διάφορα εμπορικά carbon cloth (Feser et al, 2006)

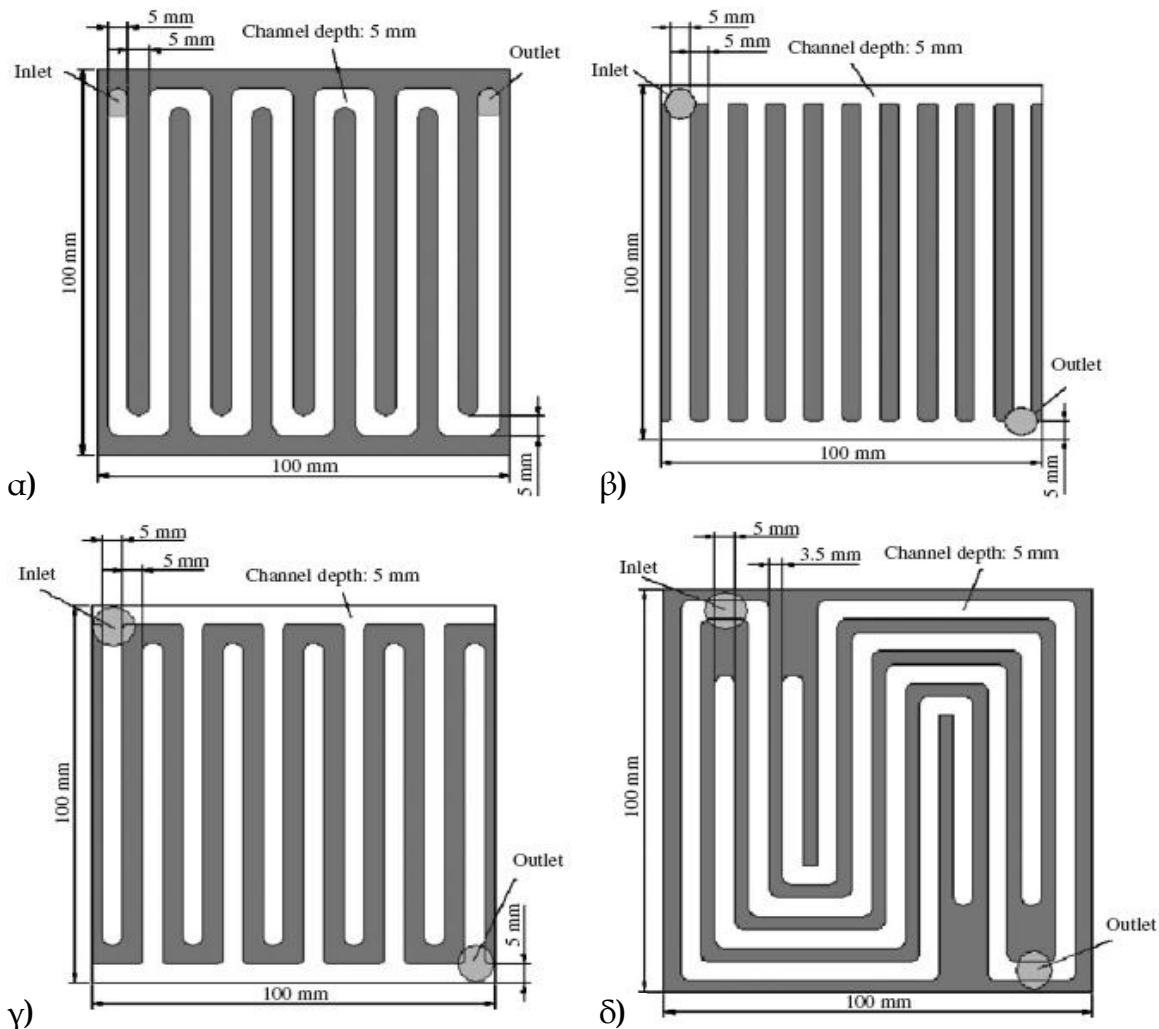


Σχήμα 2-19: Εμπορικά υφάσματα carbon cloth για PEM κυψέλες καυσίμου

2.2.3. Προηγούμενες προσπάθειες προσομοίωσης

Λαμβάνοντας υπόψη την ατελή γνώση για τις διεργασίες και την αλληλουχία των φαινομένων στο εσωτερικό του **GDL**, διάφοροι ερευνητές επιχείρησαν να συμβάλλουν στην κατανόηση των φαινομένων με τη μοντελοποίηση της λειτουργίας σε ροϊκό επίπεδο και την προσομοίωσή της σε επίπεδο μέσο-μάκρο κλίμακας. Οι προσπάθειές τους επικεντρώθηκαν κυρίως στην παραμετρική μελέτη της ροής σε διάφορες διατάξεις καναλιών (παραλλήλων, σπειροειδούς διαδρομής ή μαιανδρικής διάταξης, Σχήμα 2-20) με κύριο σκοπό την εξαγωγή σχέσεων που συνδέουν τις παραμέτρους της ροής, τη βελτιστοποίηση των γεωμετρικών τόπων των καναλιών (καμπύλες, γωνίες και είδος διάταξης) καθώς και τη διερεύνηση του αντίκτυπου όλων όσων αναφέρθηκαν στην απόδοση της κυψέλης.

Έτσι οι **Grujicic and Chittajallu (2004)** βρήκαν πως η βέλτιστη γεωμετρία για το **GDL** καθόδου σχετίζεται με παραμέτρους που προάγουν το ρόλο της προσαγωγής οξυγόνου με συναγωγή στη διεπιφάνεια μεμβράνης/**GDL** καθόδου και μειώνουν το πάχος του οριακού στρώματος λόγω συναγωγής, ενώ παράλληλα μειώνουν την πιθανότητα πλημμυρισμού στη μεμβράνη.



Σχήμα 2-20: Διάταξη καναλιών προσαγωγής αερίων στα PEM α) τύπου σερπαντίνας β) παράλληλη διάταξη γ) διάταξη μαιάνδρου δ) συνδυασμός μαιάνδρου-σερπαντίνας (Su et al., 2006)

Οι Quan and Lai (2007) μελέτησαν αριθμητικά τη ροή αέρα στην κάθοδο κυψελών PEM, για διάφορες συνθήκες λειτουργίας, με τη γεωμετρία του καναλιού και την ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα σαν παραμέτρους. Τα ευρήματά τους υποδεικνύουν πως οι υδρόφιλες επιφάνειες αυξάνουν την πτώση πίεσης στο εσωτερικό του GDL κατά τη ροή και πως η πτώση πίεσης της διφασικής ροής αυξάνει σχεδόν γραμμικά με την αύξηση της ταχύτητας του εισερχόμενου αέρα.

Το τρισδιάστατο CFD μοντέλο PEM με GDL διάταξης σερπαντίνας που παρουσίασαν οι Nguyen et al. (2004) υπολογίζει, σε συνδυασμό με έναν

αλγόριθμο τάσης-ρεύματος, τη μεταφορά θερμότητας λόγω συναγωγής και διάχυσης, όπως και το υπερ-δυναμικό τοπικής ενεργοποίησης.

Όσον αφορά τα θερμοκρασιακά φαινόμενα και τα αντίστοιχα της συγκέντρωσης υγρασίας, οι **Zong et al. (2006)** ανέπτυξαν ένα μοντέλο διαχείρισης υγρασίας και θερμοκρασίας για PEM, συγκρίνοντας αποτελέσματα από μοντέλα τόσο σταθερής, όσο και μη-σταθερής θερμοκρασίας σε συστοιχίες κυψελών PEM.

Τέλος, αν και δεν ανήκει σε προσπάθεια μοντελοποίησης ροής ή προσομοίωσης λειτουργίας, αξίζει να αναφερθεί η πειραματική δουλειά των **Su et al. (2006)**, στην οποία υπάρχουν ενδείξεις πως ο πλημμυρισμός λόγω συμπύκνωσης υγρασίας, λαμβάνει χώρα κατάντι σε δομές μαιάνδρου σερπαντίνας (Σχήμα 2-20δ) και κυρίως στις γωνίες-καμπύλες των καναλιών. Το συμπέρασμα αυτό υποδεικνύει πως ο σχεδιασμός της διαδρομής του πεδίου ροής πρέπει να προσαρμόζεται στη μορφή των γραμμών ροής, ώστε να ελαττώνονται φαινόμενα στροφής (**corner effects**).

Λαμβάνοντας υπόψη τις πληροφορίες από τις ανωτέρω ερευνητικές προσπάθειες καθώς και κατασκευαστικές πληροφορίες από τη διεθνή βιβλιογραφία, σε συνδυασμό με τις ιδιότητες των υλικών που αναφέρθηκαν πιο νωρίς σε αυτή την ενότητα, έγινε η προσπάθεια προσομοίωσης ροής σε επίπεδο μικροκλίμακας για όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται σε αυτή τη διατριβή.

3. Μαθηματικό Υπόβαθρο

Στις σελίδες που ακολουθούν γίνεται η περιγραφή των μαθηματικών σχέσεων στις οποίες στηρίχθηκε τόσο η μοντελοποίηση και θεωρητική περιγραφή των χαρακτηριστικών των υλικών που προσομοιώθηκαν, όσο και η επίλυση των πεδίων ροής και θερμοκρασίας (συμπεριλαμβανομένης και της συζυγούς επίλυσης στερεάς-αέριας φάσης), καθώς και η επεξεργασία των αποτελεσμάτων (κυρίως σε ότι αφορά τη διερεύνηση της συγκέντρωσης υγρασίας στις κυψέλες καυσίμου). Δίνονται επίσης οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν και η επεξήγηση κάθε μιας από αυτές.

Επιπλέον σε ότι αφορά το ροϊκό πεδίο, πρέπει να οριστούν οι χαρακτηριστικοί αριθμοί που χρησιμοποιήθηκαν για την αδιαστατοποίηση παραμέτρων επίλυσης και οι οποίοι συχνά χρησιμοποιούνται στην βιβλιογραφία για τον χαρακτηρισμό πορώδων υλικών. Έτσι ξεκινώντας από το επίπεδο της μοντελοποίησης ορίζεται σαν «συστροφή» (**tortuosity**) ενός πορώδους μέσου το οποίο διαρρέεται από ρευστό, ο λόγος της συνολικής συνεστραμμένης ελεύθερης διαδρομής που ακολουθεί το ρευστό κατά μήκος της ροής **S** σε ένα προεπιλεγμένο χωρίο υπολογισμού (**computational domain**) προς το μήκος του ευθύγραμμου τμήματος του χωρίου αυτού ομοίως στη διεύθυνση της ροής **L** (Σχήμα 3-1):

$$c = \frac{S}{L} \tag{3-1}$$

Η συστροφή για την περίπτωση των μεταλλικών αφρών ανοικτού κελιού παίρνει τη μορφή (**Bhattacharya et al.,2002**) :

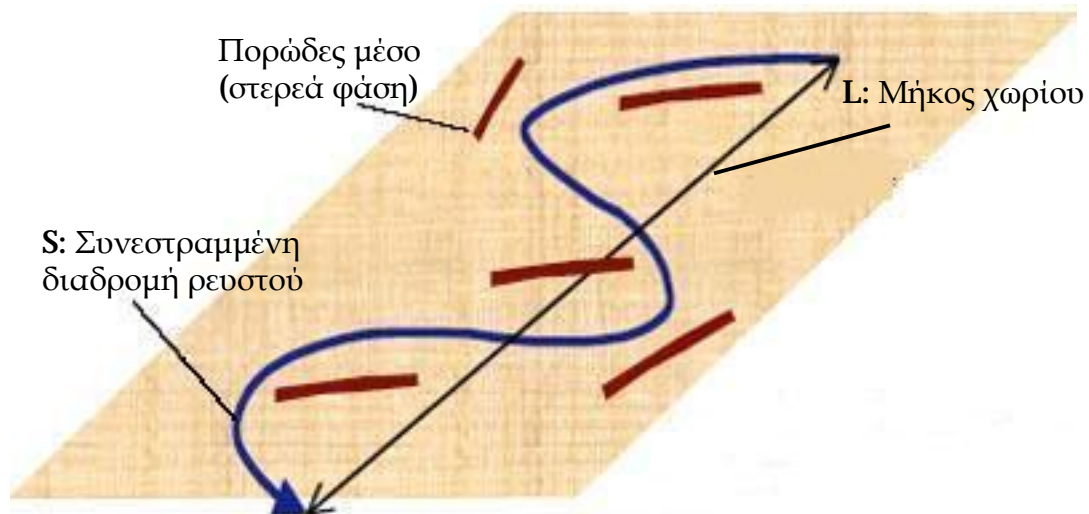
$$c = \frac{e \cdot d_a^2}{A_p} \tag{3-2}$$

όπου

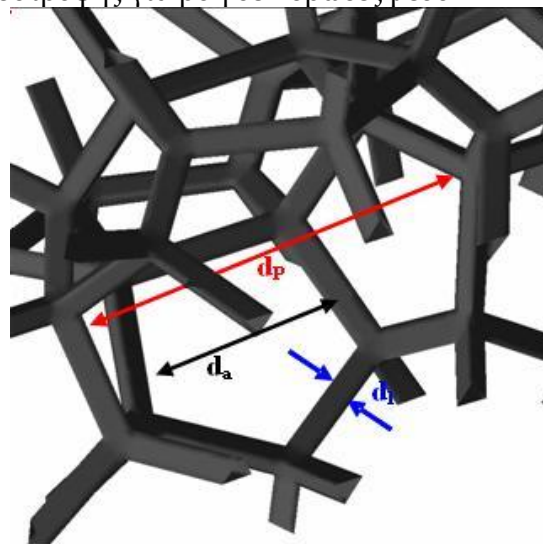
$$e = \frac{V_t - V_s}{V_t}$$

(3-3)

είναι το πορώδες του υλικού (ο λόγος του όγκου της «κενής» φάσης $V_t - V_s$ προς το συνολικό όγκο του στερεού υλικού V_t), d_a η διάμετρος του ανοίγματος κάθε έδρας του κελιού (πόρου) και $A_p = \frac{P}{4}(d_a^2 - d_l^2)$ με d_l να υποδηλώνει τη διάμετρο του συνδέσμου (**ligament**), ενώ d_p (ή d_{cell}) είναι η διάμετρος του κελιού, Σχήμα 3-1.



Σχήμα 3-1: Ορισμός συστροφής για ροή σε πορώδες μέσο



Σχήμα 3-2: Ορισμός μεγεθών d_a , d_l και d_p

Πρέπει να τονιστεί το είδος της εξάρτησης που διέπει την πτώση πίεσης μέσα σε ένα πορώδες μέσο από τη μέση ταχύτητα U του ρευστού που διέρχεται από αυτό. Η σχέση που συνδέει αυτά τα δύο μεγέθη είναι (**Dupuit 1863** στο **Alvarez-Hernandez, 2005** και στο **Boomsma et al., 2003**):

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{m}{K}U + r \frac{C_f}{\sqrt{K}}U^2 \quad (3-4)$$

και καλείται νόμος του **Darcy** όταν στο δεύτερο μέλος υπάρχει μόνο ο πρώτος όρος που ουσιαστικά λέει ότι η πτώση πίεσης συνδέεται γραμμικά με τη σταθμισμένη μέση ταχύτητα ροής (για περιοχές χαμηλών ταχυτήτων, **Boomsma and Poulidakos, 2002**). Όταν οι τιμές των ταχυτήτων διέλευσης του ρευστού μέσα από το πορώδες μέσο είναι μεγαλύτερες, γίνεται υπολογίσιμη η επίδραση του τετραγώνου της ταχύτητας όπου ήταν αμελητέα στις χαμηλές ταχύτητες και εμφανίζεται στο δεύτερο μέλος της εξίσωσης (3-4) ο δεύτερος όρος ο οποίος λέγεται επέκταση **Forcheimer-Dupuit (Dupuit, 1863)**. Οι όροι που εμφανίζονται στην παραπάνω εξίσωση είναι με τη σειρά: μ [**kg m⁻¹ s⁻¹**] το δυναμικό ιξώδες, K [**m²**] η διαπερατότητα του μέσου, η οποία δίνει ένα μέτρο της ικανότητάς του να διαποτιστεί από ένα ρευστό υπό συγκεκριμένες συνθήκες επιβολής πίεσης και C_f ένας συντελεστής πειραματικά υπολογισμένος, που καλείται συντελεστής αδρανείας (**inertia coefficient**). Συνήθεις μονάδες της διαπερατότητας K (**Selley, 1998**) -εκτός **S.I.**- είναι το **D (darcy)** το οποίο ορίζεται ως η διαπερατότητα εκείνη που προκαλεί ροή **1 cm³/s** σε ρευστό με ιξώδες **1 mPa·s** υπό διαφορά πίεσης ανά μονάδα μήκους ίση με **1 atm/cm** όταν εφαρμόζεται σε επιφάνεια **1 cm²** και το **mD (mili darcy)**. Οι μονάδες αυτές χρησιμοποιούνται συνήθως στην πετρελαϊκή βιομηχανία.

3.1. Επίλυση Εξισώσεων Μεταφοράς Μάζας και Ορμής

Σε ότι αφορά το ροϊκό πεδίο πρέπει να αναφερθεί ευθύς εξαρχής ότι αφορά μονοφασική ροή σε μόνιμη κατάσταση (**steady state**) με τιμές ταχυτήτων που αφορούν στη στρωτή περιοχή της ροής και για τα δύο προσομοιωμένα συστήματα ροής. Σε ότι έχει να κάνει με το μεταλλικό αφρό ωστόσο, η κλίμακα μεγέθους των **10 PPI** (το μοντέλο με τις μεγαλύτερες διαστάσεις από τα δύο του μεταλλικού αφρού) έδινε τιμές αριθμού **Re** για τις υψηλές ταχύτητες που εισέρχονταν στη μεταβατική περιοχή. Κατά συνέπεια, χρησιμοποιήθηκε σε **2** περιπτώσεις μοντέλο επίλυσης τυρβώδους ροής για τη μοντελοποίηση της παραγωγής και καταστροφής της τυρβώδους κινητικής ενέργειας.

Όσον αφορά την επίλυση του πεδίου ροής και τον υπολογισμό των συνιστωσών του (**u,v,w** ταχύτητες και ολική πίεση **P**) χρησιμοποιήθηκε η εξίσωση διατήρησης της ορμής,

$$\frac{\partial(rU_i)}{\partial t} + \frac{\partial(rU_i U_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[m \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) - d_{ij} \frac{2}{3} m \vec{\nabla} \cdot \vec{u} \right] + r g_i \quad (3-5)$$

η οποία οδηγεί στις εξισώσεις **Navier-Stokes** για ασυμπίεστη ροή. Απαλοιφή της υπόθεσης **Stokes** και των χωρικών-χρονικών παραγώγων της πυκνότητας ρ και θεώρηση μόνιμης κατάστασης (απαλοιφή όλων των χρονικών παραγωγίσεων), χωρίς την επίδραση πεδίου βαρύτητας για τις **3** συνιστώσες, δίνει για τις συνιστώσες των **Navier-Stokes** (Παπαϊωάννου, 2002):

$$r \left(U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + m \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) \text{-(X-συνιστώσα)} \quad (3-6)$$

$$r \left(U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + m \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) \text{-(Y-συνιστώσα)} \quad (3-7)$$

$$r \left(U \frac{\partial W}{\partial x} + V \frac{\partial W}{\partial y} + W \frac{\partial W}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial z} + m \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial z^2} \right) \text{-(Z-συνιστώσα)}$$

(3-8)

Η εξίσωση της συνέχειας του ρευστού έρχεται να συμβάλει με το ισοζύγιο μάζας που χρειάζεται για να δοθεί η τέταρτη σχέση που θα κλείσει το 4×4 σύστημα των διαφορικών εξισώσεων και αυτή στη γενική διαφορική της μορφή είναι:

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \frac{\partial(rU)}{\partial x} + \frac{\partial(rV)}{\partial y} + \frac{\partial(rW)}{\partial z} = 0$$

(3-9)

η οποία αναπτύσσεται

$$\frac{\partial r}{\partial t} + r \frac{\partial U}{\partial x} + r \frac{\partial V}{\partial y} + r \frac{\partial W}{\partial z} + U \frac{\partial r}{\partial x} + V \frac{\partial r}{\partial y} + W \frac{\partial r}{\partial z} = 0$$

(3-10)

Στην περίπτωση της επίλυσης του πεδίου ροής που μελετάται στη διατριβή αυτή, ο πρώτος όρος της εξ. (3-10) απαλείφεται λόγω θεώρησης μόνιμης κατάστασης (**steady state**), ενώ οι 3 τελευταίοι ομοίως απαλείφονται λόγω θεώρησης ασυμπίεστότητας του ρευστού. Έτσι η ανωτέρω εξίσωση απλοποιείται τελικά στην:

$$r \frac{\partial U}{\partial x} + r \frac{\partial V}{\partial y} + r \frac{\partial W}{\partial z} = 0 \quad \text{ή} \quad r \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} \right) = 0$$

(3-11)

Σε ένα επίπεδο παρακάτω για να διερευνηθεί εάν η ροή είναι στρωτή ή τυρβώδης, ώστε να χρησιμοποιηθούν και τα κατάλληλα εργαλεία για την αριθμητική επίλυση (πχ μοντέλα τύρβης), γίνεται χρήση του αδιάστατου αριθμού **Re (Reynolds)** ο οποίος αποτελεί το λόγο των αδρανειακών δυνάμεων προς τις δυνάμεις ιξώδους. Έτσι αν ο αριθμός αυτός είναι συγκριτικά μικρός,

οποιαδήποτε διαταραχή λόγω αδρανειακών δυνάμεων (ορμή) παρουσιάζεται στο πεδίο, αποσβένεται από τις δυνάμεις ιξώδους και η ροή του πεδίου χαρακτηρίζεται ως στρωτή. Αν ο αριθμός αυτός είναι μεγαλύτερος από μια κρίσιμη τιμή, οι διαταραχές αυτές δεν μπορούν να αποσβεστούν από τις δυνάμεις ιξώδους, πολλαπλασιάζονται και οδηγούν στην περαιτέρω αύξηση των ακραίων τιμών ρευστοδυναμικών παραμέτρων (ταχύτητα ροής, πίεση, θερμοκρασία) με συνέπεια την απρόβλεπτη συμπεριφορά της ροής, η οποία προσεγγίζεται με στατιστικές μεθόδους και χαρακτηρίζεται ως τυρβώδης. Σε μια περιοχή τιμών του αριθμού **Re** η ροή χαρακτηρίζεται ως «μεταβατική» και παρουσιάζει διακυμάνσεις στις τιμές των μεγεθών του πεδίου ροής, χωρίς όμως αυτές να είναι τόσο έντονες ώστε να μπορεί η ροή να χαρακτηριστεί ως τυρβώδης.

Ο αριθμός **Re** λοιπόν είναι αυτός που καθορίζει αν η ροή είναι στρωτή ή τυρβώδης μέσω της σύγκρισής του με αντίστοιχους αριθμούς που προέκυψαν και πινακοποιήθηκαν για διάφορες περιπτώσεις ροής (πχ πάνω από πλάκα, γύρω από κύλινδρο, εκροή από ακροφύσιο κυκλικής διατομής κ.α.) με πειραματική διερεύνηση του είδους της ροής τους. Στη γενική του μορφή ο αριθμός αυτός εκφράζεται ως :

$$\text{Re} = \frac{\rho u r}{\mu}$$

(3-12)

με **l [m]** να χαρακτηρίζει ένα αδιάστατο μήκος αναφοράς (πχ διάμετρος κυλίνδρου ή απόσταση του σημείου μέτρησης της ροής από την αρχή της πλάκας κ.ο.κ), **u [m/sec]** η μέση (ή σε κάποιες περιπτώσεις η αδιατάρακτη) ταχύτητα ροής, **ρ [kg/m³]** η πυκνότητα του ρευστού που εξετάζεται και **μ [kg m⁻¹ s⁻¹]** το δυναμικό ιξώδες αυτού (Παπαϊωάννου, 2002). Για την περίπτωση ωστόσο των πορωδών υλικών, η πιο πάνω εξίσωση εξειδικεύεται στην ακόλουθη :

$$\text{Re} = \frac{\sqrt{K}ur}{m} \quad (3-13)$$

με χρήση της διαπερατότητας K , ή

$$\text{Re} = \frac{d_p ur}{m} \quad (3-14)$$

με χρήση της (μέσης) διαμέτρου του πόρου σε κάποιο τέτοιο υλικό, ενώ για την περίπτωση των μεταλλικών αφρών μπορεί να εμφανιστεί και η μορφή

$$\text{Re} = \frac{d_l ur}{m} \quad (3-15)$$

όπου d_l η (μέση) διάμετρος του συνδέσμου του συγκεκριμένου αφρού. Σε κάθε περίπτωση όταν μπορεί να εκτιμηθεί εύκολα η υδραυλική διάμετρος D_h ενός συστήματος υπό μορφή αγωγού (όπως συμβαίνει και με τα δύο υπολογιστικά χωρία των υλικών που μοντελοποιήθηκαν σε αυτή τη διατριβή) και ιδιαίτερα όταν δεν μπορεί με ασφάλεια να εκτιμηθεί κάποια άλλη παράμετρος μήκους ώστε να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό του αριθμού Re , γίνεται χρήση της D_h για τον υπολογισμό του Re , η οποία ορίζεται ως

$$D_h = \frac{4A}{W} \quad (3-16)$$

με A το εμβαδό της (συνολικής) διατομής από την οποία διέρχεται το ρευστό στην περιοχή όπου γίνεται ο υπολογισμός του αριθμού Re και W η βρεχόμενη περίμετρος ομοίως στην ίδια περιοχή. Ο ορισμός του Re γίνεται τότε :

$$\text{Re} = \frac{D_h u \Gamma}{m} \quad (3-17)$$

Έχοντας υπόψιν την απαλοιφή των όρων βαρύτητας από τις εξισώσεις **Navier-Stokes** που αναφέρθηκε, πρέπει εδώ να δοθεί ο ορισμός ενός ακόμη αδιάστατου χαρακτηριστικού αριθμού, του αριθμού **Gr (Grashof)** που δείχνει κατά πόσον μπορεί να αμεληθούν οι δυνάμεις βαρύτητας από την θεώρηση του πεδίου ροής. Ο αριθμός αυτός ουσιαστικά εκφράζει το λόγο των δυνάμεων βαρύτητας προς τις δυνάμεις ιξώδους και ορίζεται από τη σχέση :

$$\text{Gr} = \frac{g \beta (T_s - T_\infty) L^3}{\nu^2} \quad (3-18)$$

με **g [m/s²]** να εκφράζει την επιτάχυνση της βαρύτητας, **β [1/K]** , για ιδανικό ρευστό ισούται με το αντίστροφο της θερμοκρασίας του ρευστού, **T_s [K]** η θερμοκρασία της επιφάνειας πάνω από την οποία ρέει το ρευστό και **T_∞ [K]** η θερμοκρασία της αδιατάρακτης ροής (στην περίπτωση μας η θερμοκρασία εισόδου στον όγκο υπολογισμού). Ωστόσο στη γενική περίπτωση (χωρίς θεώρηση ιδανικού αερίου) ο ογκομετρικός συντελεστής θερμικής διαστολής, **β**, ορίζεται διαφορετικά (είναι ίσος με $\frac{1}{r} \left(\frac{\partial r}{\partial T} \right)_p$ -υπό σταθερή πίεση). Όπου **ν [m²/s]** στην εξ. (3-18) είναι το κινηματικό ιξώδες και **L [m]** ένα χαρακτηριστικό μήκος (το μήκος του οριζοντίου επιπέδου για την περίπτωση πλάκας θεωρήθηκε στους υπολογισμούς αυτής της διατριβής). Η πιο δυσμενής περίπτωση πρέπει να τονιστεί ότι έδινε έναν αριθμό **Gr ~ 10⁻²** (συγκεκριμένα **1,47 × 10⁻²**), οπότε θεωρήθηκε ότι μπορούσε να γίνει η απαλοιφή των όρων της επιτάχυνσης της βαρύτητας από τις εξισώσεις **Navier-Stokes**, αφού ο κρίσιμος αριθμός για

οριζόντια πλάκα (πάνω από τη θερμαινόμενη επιφάνειά της) κυμαίνεται για τον Gr από $10^3 \sim 10^6$ (Cengel, 2005). Αυτό ενισχύθηκε και από τη διαπίστωση ότι η επίλυση της ίδιας ακριβώς περίπτωσης που επιχειρήθηκε τόσο με, όσο και χωρίς την επίδραση της βαρύτητας σε μια από τις τρεις διαστάσεις του χώρου, δεν έδωσε διαφοροποιημένα αποτελέσματα όσον αφορά την εικόνα του πεδίου ροής (τόσο ποιοτικά, όσο και ποσοτικά).

Στη διατριβή αυτή, οι περιπτώσεις που μελετήθηκαν-όπως έχει ήδη αναφερθεί- αφορούν στη στρωτή περιοχή ροής. Ωστόσο στην περίπτωση του μεγαλύτερου από τα δύο μοντελοποιημένα μεγέθη μεταλλικού αφρού, υπήρξε αστάθεια κατά την επίλυση στις δύο μεγαλύτερες τιμές ταχύτητας ροής, με αποτέλεσμα να μην υπάρχει σύγκλιση της λύσης. Επειδή οι τιμές ταχύτητας και οι αριθμοί Re -καίτοι υψηλοί- στην εν λόγω περίπτωση δεν έδιναν με ασφάλεια το συμπέρασμα ότι πρόκειται περί τυρβώδη ροή (οι Pinson et al., 2006 δίνουν τιμές της τάξης του 10^4 για τους Re για τυρβώδεις ροές σε πορώδη μέσα χρησιμοποιώντας την υδραυλική διάμετρο), έγινε η υπόθεση ότι πρόκειται περί περιοχής μετάβασης της ροής. Παρόλα αυτά έπρεπε να χρησιμοποιηθεί κάποιο μοντέλο τύρβης ώστε να σταθεροποιηθεί η λύση και το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε ήταν το λεγόμενο « $k-\epsilon$ » μοντέλο τύρβης. Η χρήση της συγκεκριμένης αριθμητικής προσέγγισης δε συνεπάγεται την απόλυτα ορθή αντιμετώπιση του προβλήματος. Οι μεταβατικές ροές χαρακτηρίζονται από αστάθεια στην περιγραφή των τιμών των μεγεθών τους και από έλλειψη πλήρους γνώσης των φαινομένων που λαμβάνουν χώρα από καθαρά επιστημονική σκοπιά. Έτσι το μοντέλο τύρβης « $k-\epsilon$ » επιλέχθηκε ως η «βέλτιστη λύση ανάγκης», με την αίρεση ότι πρέπει να χρησιμοποιηθούν πληρέστερα μαθηματικά εργαλεία για την ολοκληρωμένη μελέτη των φαινομένων στην περιοχή αυτή για ροές σε πορώδη μέσα.

Το μοντέλο αυτό συνίσταται στην ποσοτικοποίηση της τυρβώδους κινητικής ενέργειας (k) και την καταστροφή αυτής (ϵ). Συγκεκριμένα, σε ένα τυρβώδες πεδίο ροής, κάθε ροϊκό μέγεθος (u, v, w ταχύτητες και πίεση P), γράφεται σαν ένα

άθροισμα της μέσης τιμής ($\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ και \bar{P}) και της διακύμανσης που αυτό παρουσιάζει (u', v', w' και P') τοπικά (Παπαϊωάννου, 2002). Έτσι προκύπτει :

$$\mathbf{u} = \bar{u} + u' \quad (3-19)$$

$$\mathbf{v} = \bar{v} + v' \quad (3-20)$$

$$\mathbf{w} = \bar{w} + w' \quad (3-21)$$

και

$$P = \bar{P} + P' \quad (3-22)$$

Επιπροσθέτως το «ενεργό» (η ολικό) ιξώδες σε τυρβώδη ροή δίνεται από τη σχέση:

$$m_{eff} = m_l + m_t \quad (3-23)$$

με m_l να εκφράζει το ιξώδες του ρευστού σε στρωτή ροή (ιδιότητα του υλικού) και m_t το λεγόμενο «ιξώδες τύρβης». Αυτό ορίζεται ως :

$$m_t = rC_m \frac{k^2}{e} \quad (3-24)$$

όπου C_m είναι υπολογιστικά βελτιστοποιημένη σταθερά (συνήθως $C_m = 0,09$, Jones and Launder, 1972) και

$$k = \frac{\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}}{2} \quad (3-25)$$

$$e = \frac{m}{r} \left(\frac{\partial^2 \overline{u'}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{u'}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{u'}}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \overline{v'}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{v'}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{v'}}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \overline{w'}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \overline{w'}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \overline{w'}}{\partial z^2} \right) \quad (3-26)$$

όπου η άνω παύλα (¯) δηλώνει χρονικά μέση τιμή, ο τονισμός (') τυρβώδη διακύμανση και τα x, y, z τις χωρικές συντεταγμένες (Μπούρης, 1997 και Στρωτός, 2007).

Η αντικατάσταση των k και e στη γενική εξίσωση μεταφοράς (3-5)

$$\frac{\partial rj}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\vec{r} u j - \frac{m_{eff}}{s_j} \nabla j \right) = S_j \quad (3-27)$$

όπου σ_μ σταθερά πειραματικά υπολογισμένη (τυρβώδεις αριθμοί **Prandtl, Jones and Launder, 1972**), και με όρους πηγής για τις δύο εκφράσεις στο εσωτερικό του πεδίου :

$$S_k = G - re = G - \frac{r^2 C_m}{m_t} k^2 \quad (3-28)$$

και

$$S_e = C_1 \frac{e}{k} G - C_2 r \frac{e^2}{k} + C_3 re \cdot \nabla u = \frac{C_1 C_m r k}{m_t} \cdot G - \frac{C_2 C_m r^2 k}{m_t} \cdot e + C_3 re \cdot \nabla u \quad (3-29)$$

δίνει τη δυνατότητα υπολογισμού της τυρβώδους συνεκτικότητας η οποία με τη σειρά της θα δώσει την τιμή του m_{eff} . Αντικατάσταση του m με το m_{eff} στις εξισώσεις **Navier-Stokes** επιτρέπει τον υπολογισμό των ροϊκών παραμέτρων του

πεδίου. Οι C_1 , C_2 , C_3 είναι σταθερές και G είναι η παραγωγή τυρβώδους κινητικής ενέργειας :

$$G = m_i \nabla \vec{u} \cdot \left(\nabla \vec{u} + \left(\nabla \vec{u} \right)^T \right) - \frac{2}{3} \nabla \vec{u} \left(r k + m_i \nabla \vec{u} \right) \quad (3-30)$$

Τυπικές τιμές για τις σταθερές στο μοντέλο k - ϵ είναι : $C_\mu = 0,09$, $C_1 = 1,44$, $C_2 = 1,92$, $C_3 = -0,373$, $\sigma_k = 1,0$ και $\sigma_\epsilon = 1,3$ (Στρωτός, 2007).

Πρέπει εδώ να δοθεί με έμφαση η εξήγηση πως όλα τα παραπάνω αναφερόμενα, αφορούν σε ρευστό που θεωρείται συνεχές μέσο. Επειδή όμως το επίπεδο μοντελοποίησης και επίλυσης απευθείας των εξισώσεων ήταν της τάξης των μm (επίπεδο μικροκλίμακας), έγινε διερεύνηση της ορθότητας της υπόθεσης αυτής, αφού θα μπορούσε να υποστηριχτεί ότι η ροή παρουσιάζει χαρακτηριστικά μοριακής ροής στη θεωρούμενη κλίμακα μήκους, απομακρύνοντας έτσι τη θεώρηση του ρευστού από την υπόθεση του ως συνεχές μέσο.

Έτσι με τη βοήθεια του αδιάστατου αριθμού Kn (**Knudsen**) ο οποίος δίνει το λόγο μεταξύ της μέσης ελεύθερης μοριακής διαδρομής (ήτοι της διαδρομής που ακολουθεί ένα μόριο του ρευστού μεταξύ 2 διαδοχικών συγκρούσεων του με άλλα μόρια), προς ένα χαρακτηριστικό μήκος, απεδείχθη πως η ροή απέιχε πολύ από το να χαρακτηριστεί μοριακή , άλλα ενέπιπτε καθαρά στον ορισμό της ροής συνεχούς μέσου. Ο αριθμός Kn εκφράζεται :

$$Kn = \frac{l}{L} \quad (3-31)$$

Στην παραπάνω εξίσωση l [**m**] είναι το μήκος της μέσης ελεύθερης διαδρομής και L [**m**] ένα χαρακτηριστικό μήκος (η μικρότερη φυσική κλίμακα που απαντάται

στη συγκεκριμένη προσομοίωση και είναι η διάμετρος του συνδέσμου του μεταλλικού αφρού **40 PPI**, ίση με **$0,13 \times 10^{-3}$ [m]**, βλ. και ενότητα **4**). Το λ αποτελεί χαρακτηριστική (θερμοδυναμική) σταθερά που αφορά το είδος του αερίου που μελετάται η συνέχειά του, ενώ εξαρτάται από τη θερμοκρασία. Από την κινητική θεωρία των αερίων μια εμπειρική σχέση για το λ είναι (**Crowe et al., 1998**):

$$\lambda = \frac{\mu}{r \sqrt{gRT}} \quad (3-32)$$

όπου μ το δυναμικό ιξώδες, ρ η πυκνότητα του ρευστού που εξετάζεται, R η παγκόσμια σταθερά των αερίων [**287 J /kg K**] και T [K] η θερμοκρασία του θεωρούμενου μέσου. Για τη δυσμενέστερη περίπτωση που θεωρήθηκε (διάμετρος συνδέσμου μεταλλικού αφρού **40PPI~ $0,13 \times 10^{-3}$ [m]** και θερμοκρασία εισόδου $T=293$ [K]), το λ υπολογίστηκε ίσο με $\lambda = 6,802 \times 10^{-8}$ [m] δίνοντας έτσι $Kn = 5,23 \times 10^{-4}$, ο οποίος όντας κάτω από όριο του 10^{-3} επέτρεψε τη θεώρηση συνεχούς μέσου για το ρευστό που υιοθετήθηκε για την προσομοίωση σε επίπεδο μικροκλίμακας (Πίνακας **3-1**).

Είδος Ροής	Διακόμευση αριθμού Kn
Συνεχούς μέσου	< 0,001
Έρπουσα ροή	0,001-0,1
Μεταβατική ροή	0,1-10
Μοριακή ελεύθερη	> 10

Πίνακας **3-1**: Τιμές αριθμού Kn για διάφορα είδη ροής

Τέλος, στο κομμάτι της θεώρησης του πεδίου ροής εντάσσεται και η διερεύνηση της σχετικής υγρασίας για την περίπτωση των κυψελών καυσίμου. Έτσι η επίλυση της γενικής εξίσωσης μεταφοράς στη διαφορική της μορφή, θεωρούμενου απείρως μικρού όγκου αναφοράς:

$$\frac{\partial rj}{\partial t} + \nabla \cdot (rj \vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla j) + S_j(j) \quad (3-33)$$

γίνεται για την περίπτωση όπου φ είναι η συγκέντρωση της υγρασίας C (για κατάσταση μόνιμης ροής),

$$\frac{\partial(rCu)}{\partial x} + \frac{\partial(rCv)}{\partial y} + \frac{\partial(rCw)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S_c \quad (3-34)$$

με S_c να εκφράζει τον όρο πηγής στο θεωρούμενο σημείο τοπικά. Στις παραπάνω εξισώσεις, το $\Gamma = \rho D_{\text{eff}} = \frac{m}{S_c}$, ενώ ο όρος πηγής εκφράζει τη μάζα του συστατικού που παράγεται στη μονάδα του όγκου. Το D_{eff} είναι ο (ενεργός) συντελεστής διάχυσης στο (υγρό ή αέριο) μίγμα του συστατικού του οποίου η συγκέντρωση C διερευνάται και ρ η πυκνότητα του μίγματος αερίου-συστατικού C. Το S_c είναι ο αδιάστατος αριθμός **Schmidt** ο οποίος ορίζεται σαν ο λόγος του κινηματικού ιξώδους ν [m^2/s] προς τη διαχυτότητα (συντελεστής διάχυσης D_{eff} εδώ) της μάζας του συγκεκριμένου συστατικού στη μάζα του μίγματος.

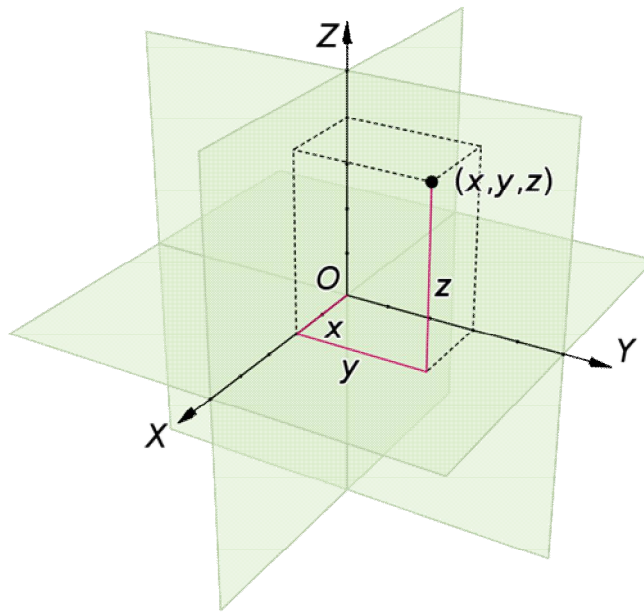
3.1.1. Ορθοκανονικό Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων

Προκειμένου να γίνει η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων που αναφέρονται ανωτέρω, πρέπει να επιλεγεί κάποια αριθμητική μέθοδος με τη βοήθεια της οποίας οι διαφορικές εξισώσεις γραμμικοποιούνται και επιλύονται για ένα σύνολο διακριτών σημείων που διακριτοποιούν τον υπολογιστικό χώρο. Η διαδικασία διακριτοποίησης και δημιουργίας υπολογιστικού πλέγματος

αναφέρεται διεξοδικά στο κεφάλαιο 4, ωστόσο εδώ δίνονται οι πληροφορίες που αφορούν στο μαθηματικό σύστημα το οποίο χρησιμοποιήθηκε για τη διακριτοποίηση του χώρου και στο οποίο έγιναν οι υπολογισμοί για την επίλυση των εξισώσεων που διέπουν το πεδίο ροής.

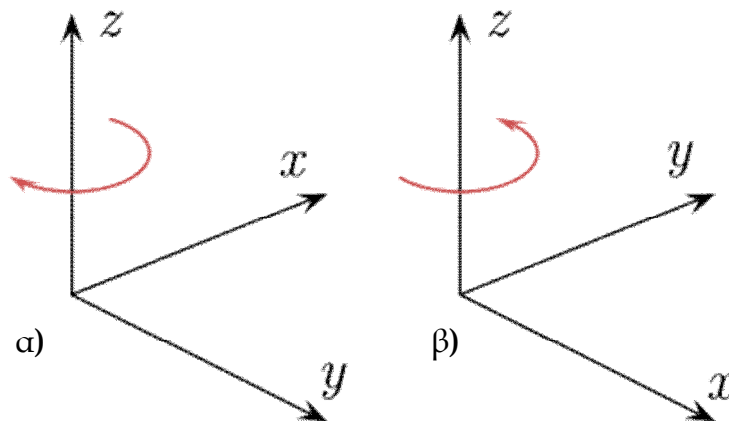
Στον τρισδιάστατο Ευκλείδειο χώρο, χρησιμοποιούνται διάφορα συστήματα συντεταγμένων ώστε να περιγράψουν και να κωδικοποιήσουν κάθε σημείο του. Ενδεικτικά αναφέρονται το ορθογώνιο καμπυλόγραμμο, το κυλινδρικό, το σφαιρικό σύστημα συντεταγμένων και τέλος το ορθογώνιο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε το καρτεσιανό ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων το οποίο παρουσιάζει απλότητα στην περιγραφή του κάθε σημείου του χώρου, ενώ διευκολύνει τις ανυσματικές πράξεις άλγεβρας πρώτου βαθμού (γραμμικές πράξεις). Το σύστημα αυτό αποτελείται από τρεις άξονες απείρου μήκους X , Y και Z οι οποίοι τέμνονται κάθετα μεταξύ τους και ορίζουν με μοναδικό τρόπο κάθε τυχαίο σημείο M στο χώρο. Ο ορισμός αυτός έγκειται στην ύπαρξη 3 μοναδικών αριθμών, της τετμημένης x , της τεταγμένης y και της κατηγμένης z οι οποίοι αντιπροσωπεύουν τις αποστάσεις του σημείου M από το σημείο τομής O των αξόνων. Κάθε τριάδα αριθμών αφορά μόνο ένα συγκεκριμένο σημείο το οποίο ορίζει μοναδικά (Σχήμα 3-3).



Σχήμα 3-3 : Ορισμός σημείου στο καρτεσιανό ορθογώνιο σύστημα συντεταγμένων

Οι άξονες συντεταγμένων σε ένα τέτοιο σύστημα έχουν συγκεκριμένο προσανατολισμό μεταξύ τους. Έτσι όταν ο προσανατολισμός είναι αυτός που φαίνεται στο Σχήμα 3-4α) μιλάμε για αριστερόστροφο καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων ενώ στην περίπτωση του Σχήμα 3-4β) το σύστημα συντεταγμένων χαρακτηρίζεται δεξιόστροφο, το οποίο και επιλέγεται να χρησιμοποιηθεί τις περισσότερες φορές.



Σχήμα 3-4 : α) Αριστερόστροφο β) δεξιόστροφο συστήματα καρτεσιανών συντεταγμένων

Στην περίπτωση λοιπόν του ορθογώνιου καρτεσιανού συστήματος, ο διανυσματικός λογισμός που λαμβάνει χώρα, εκτελείται σε μία ορθοκανονική βάση, η οποία ορίζεται ως

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (3-35)$$

όπου δ είναι η γνωστή συνάρτηση **Kronecker** που παίρνει την τιμή **1** όταν $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ και **0** όταν $\mathbf{i} \neq \mathbf{j}$. Τα \mathbf{e}_i , $\mathbf{i} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ καλούνται μοναδιαία διανύσματα και η βάση αποτελείται από τα $\mathbf{e}_1 = \langle \mathbf{1}, \mathbf{0}, \mathbf{0} \rangle$, $\mathbf{e}_2 = \langle \mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{0} \rangle$ και $\mathbf{e}_3 = \langle \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1} \rangle$. Τα συγκεκριμένα ανύσματα αποτελούν μια δεξιόστροφη ορθοκανονική βάση (Παπαϊωάννου, 2003).

3.1.2. Διακριτοποίηση διαφορικών εξισώσεων

Η γενική εξίσωση μεταφοράς ολοκληρωμένη χωρικά σε υπολογιστικό όγκο:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V rj \, dV + \int_V \nabla \cdot (rj \mathbf{u}) \, dV = \int_V \nabla \cdot (\Gamma \nabla j) \, dV + \int_V S_j(j) \, dV \quad (3-36)$$

για μέσο χωρίς ασυνέχειες, όπως αποδείχθηκε ότι είναι το θεωρούμενο σε αυτή τη διατριβή με τη θεώρηση απείρως μικρού όγκου αναφοράς, μετατρέπεται στην διαφορική εξίσωση

$$\frac{\partial rj}{\partial t} + \nabla \cdot (rj \vec{u}) = \nabla \cdot (\Gamma \nabla j) + S_j(j) \quad (3-37)$$

η οποία είναι μια μη γραμμική διαφορική εξίσωση στην οποία το μέγεθος ϕ μεταβάλλεται και στο χρόνο και στο χώρο. Αναλυτική λύση δεν υπάρχει για αυτή την περίπτωση (παρά ελαχίστων εξαιρέσεων με απλοποιήσεις όρων βάσει

πολύ συγκεκριμένων παραδοχών που ξεφεύγουν από το πλαίσιο αυτού του κειμένου) και η επίλυσή της συνεπάγεται επαναληπτική αριθμητική μέθοδο.

Επειδή στη συγκεκριμένη διατριβή δε γίνεται διερεύνηση χρονικά μεταβαλλόμενου πεδίου ροής όπως ευθύς εξαρχής έχει δηλωθεί, δε θα αποτελέσει αντικείμενο ενασχόλησης η ολοκλήρωση της εξίσωσης (3-37) στο χρόνο, άλλα μόνο η χωρική ολοκλήρωση αυτής. Έτσι ολοκληρώνοντας ως προς το χώρο προκύπτει:

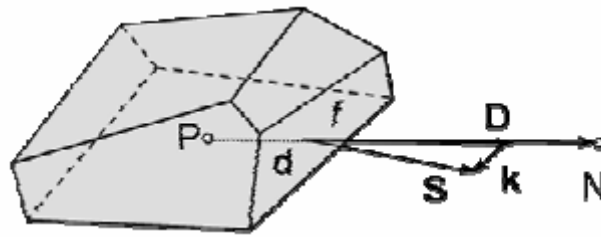
$$\int_{V_p} \nabla \cdot (\mathbf{r} \mathbf{j} u) dV = \int_{V_p} \nabla \cdot (\Gamma \nabla \mathbf{j}) dV + \int_{V_p} S_j (\mathbf{j}) dV \quad (3-38)$$

, όπου V_p είναι ο όγκος ελέγχου στον οποίο επιχειρείται η ολοκλήρωση. Σε παρόμοιες περιπτώσεις αριθμητικής ολοκλήρωσης, μια συχνά χρησιμοποιημένη μέθοδος που ακολουθείται και στην παρούσα εργασία είναι αυτή των πεπερασμένων όγκων.

Κατά τη μέθοδο αυτή, το υπολογιστικό χωρίο μετατρέπεται από συνεχές σε ασυνεχές μέσο με την διακριτοποίησή του σε επιμέρους όγκους υπολογισμού που καλούνται «υπολογιστικό πλέγμα» και που ενώνονται μεταξύ τους μόνο στους κόμβους που τους ορίζουν (βλ. και κεφάλαιο 4). Οι όγκοι του πλέγματος καλούνται πεπερασμένοι όγκοι και αποτελούνται από στερεομετρικά σχήματα η χρήση του καθενός από τα οποία προσφέρει ανάλογα με την περίπτωση και διαφορετικά πλεονεκτήματα /μειονεκτήματα. Στη συγκεκριμένη διατριβή χρησιμοποιήθηκαν τετράεδροι πεπερασμένοι όγκοι οι οποίοι παρουσιάζουν το πλεονέκτημα της ικανότητας διακριτοποίησης γεωμετριών που εμφανίζουν απότομες μεταβολές, οξύτητες, μη ομαλές τοπολογίες.

Ένα φυσικό χωρίο μπορεί στη γενική περίπτωση να διακριτοποιηθεί από μη ορθογώνια κελιά τυχαίου σχήματος. Αυτό κρίνεται αναγκαίο σε περιπτώσεις που μοντελοποιούνται πολύπλοκες γεωμετρίες, όπως καμπύλα όρια, αυξάνοντας

βέβαια την πολυπλοκότητα της λύσης. Ένα τέτοιο υπολογιστικό κελί φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 3-5 : Υπολογιστικό κελί τυχαίας στερεομετρίας

Το σημείο P είναι το κέντρο του υπολογιστικού κελιού και το σημείο N το κέντρο του γειτονικού κελιού. Το διάνυσμα $\mathbf{d}=\mathbf{PN}$ συνδέει τα κέντρα των δύο κελιών, \mathbf{S} είναι το κάθετο διάνυσμα στην επιφάνεια του κελιού, το οποίο δείχνει πάντα προς τα έξω και έχει μέτρο το εμβαδόν της επιφάνειας. Τα διανύσματα \mathbf{d} και \mathbf{S} είναι γνωστά από τη γεωμετρία του χώρου. Αν η γωνία μεταξύ των διανυσμάτων \mathbf{d} και \mathbf{S} είναι μη μηδενική, το πλέγμα ορίζεται ως μη ορθογώνιο. Για να μπορέσουμε να εκφράσουμε την ορθογώνια και μη ορθογώνια συνεισφορά των κλίσεων των διάφορων όρων της γενικής εξίσωσης μεταφοράς στις επιφάνειες των κελιών, ορίζονται τα διανύσματα \mathbf{D} και \mathbf{k} , τα οποία εκφράζουν αντίστοιχα την ορθογώνια και τη μη ορθογώνια συνιστώσα των κλίσεων στις επιφάνειες των κελιών. Έτσι, οι όροι που πολλαπλασιάζονται με το διάνυσμα \mathbf{D} μπορούν να γραμμικοποιηθούν, ενώ οι όροι που πολλαπλασιάζονται με το διάνυσμα \mathbf{k} δεν γραμμικοποιούνται όπως θα δούμε στη συνέχεια. Για τον υπολογισμό των διανυσμάτων \mathbf{D} και \mathbf{k} , προτείνονται [Jasak 1996] τρεις τρόποι, από τους οποίους ο επωνομαζόμενος “over relaxed” είναι ο καλύτερος και χρησιμοποιείται από τον Ubbink, 1997 (στο Στρωτός, 2007). Σύμφωνα με τα παραπάνω και από το Σχήμα 3-5, ισχύει:

$$\vec{D} = \frac{\vec{d}}{\vec{d} \cdot \vec{S}} \left| \vec{S} \right|^2 \quad (3-39)$$

$$\vec{k} = \vec{S} - \vec{D}$$

(3-40)

Σύμφωνα με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων, η διακριτοποίηση των εξισώσεων διατήρησης, αναλύεται σε αθροίσματα της συνεισφοράς της κάθε επιφάνειας στα γειτονικά της κελιά. Όλες οι εξαρτημένες μεταβλητές αποθηκεύονται στα κέντρα των κελιών, δηλαδή ακολουθείται ομόθετη προσέγγιση (**collocated**), ενώ καθοριστικό κομμάτι της διακριτοποίησης των όρων της γενικής εξίσωσης μεταφοράς, αποτελεί η εύρεση της τιμής του εκάστοτε μεγέθους ϕ πάνω στην επιφάνεια, χρησιμοποιώντας τις τιμές του μεγέθους στα κέντρα των κελιών P και N, που βρίσκονται εκατέρωθεν αυτής. Αυτό γίνεται χρησιμοποιώντας ένα σχήμα διαφορίσης που αποτελεί μια μορφή παρεμβολής από τις τιμές των εκατέρωθεν κέντρων, η επιλογή του οποίου καθορίζει και την ακρίβεια της λύσης και την ευστάθεια του αλγορίθμου.

Η πιο δύσκολη προς διακριτοποίηση παράσταση της γενικής εξίσωσης μεταφοράς, είναι εκείνη που αντιπροσωπεύει τη συναγωγή ($\nabla \cdot (\rho \vec{j} u)$) και αυτό επειδή περιέχει στους όρους της πέρα από την εκάστοτε μεταβλητή ϕ και την ταχύτητα. Γενικά, τα επιθυμητά χαρακτηριστικά ενός σχήματος διαφορίσης (Θεοδωρακάκος, 1998 στο Στρωτός, 2007), είναι:

- **Συντηρητικότητα:** Οι εσωτερικές ροές που προκύπτουν μεταξύ διαδοχικών κελιών, πρέπει να αλληλοαναιρούνται.
- **Να είναι φραγμένο:** Στα όρια του υπολογιστικού χώρου και αν δεν υπάρχουν εσωτερικές πηγές στο πεδίο, πρέπει η λύση που παίρνουμε για μια μεταβλητή ϕ να είναι φραγμένη από τις τιμές της μεταβλητής αυτής εντός των ορίων του υπολογιστικού χώρου.
- **Μεταφορικότητα:** Υποθέτοντας ένα πεδίο ομοιόμορφης ταχύτητας με σταθερή πηγή του μεγέθους ϕ , θα πρέπει η μορφή των ίσο-τιμών καμπύλων ϕ να μην είναι ανεξάρτητη από τον αριθμό **Peclet**, δηλαδή το λόγο των όρων μεταφοράς

προς τους όρους διάχυσης. Σε αντίθετη περίπτωση, προκύπτουν μη ρεαλιστικά αποτελέσματα.

- Ακρίβεια: Η χρήση σχημάτων διαφορίσης ανώτερης τάξης ικανοποιεί την απαίτηση αυτή, αυξάνοντας όμως την πολυπλοκότητα της επίλυσης καθώς και την απαιτούμενη υπολογιστική ισχύ.

Ορίζεται, πριν συνεχιστεί η ανάλυση για το μέγεθος ϕ , η ροή όγκου (F_f) και μάζας (C_f) μέσα από την επιφάνεια f (θεωρώντας γνωστές τις τιμές της ταχύτητας) :

$$F_f = S_f \cdot u_f \quad (3-41)$$

$$C_f = \rho_f F_f \quad (3-42)$$

Η τιμή της πυκνότητας στην επιφάνεια ρ_f , προκύπτει με γραμμική παρεμβολή από τους εκατέρωθεν κόμβους με κατάλληλο συντελεστή. Ο υπολογισμός των μεγεθών u_f και F_f απαιτεί ιδιαίτερο χειρισμό και θα ασχοληθούμε μαζί του αργότερα στην ενότητα αυτή. Θεωρώντας προς το παρόν γνωστές τις τιμές u_f και F_f , η τιμή του μεγέθους ϕ πάνω στην επιφάνεια έχει τη γενική μορφή :

$$\phi_f = \beta_f \phi_P + (1 - \beta_f) \phi_N \quad (3-43)$$

όπου ο συντελεστής β_f προκύπτει με ένα από τα παρακάτω σχήματα διαφορίσης.

Κεντρικό σχήμα διαφορίσης (Central differencing, CD)

Η πιο απλή προσέγγιση που θα μπορούσε να χρησιμοποιήσει κάποιος, είναι η γραμμική παρεμβολή ανάμεσα στα εκατέρωθεν κελιά.

$$\beta_f = f_P = \frac{|f_N|}{|P_N|} \quad (3-44)$$

Η τάξη ακρίβειας του σχήματος αυτού έχει αποτελέσει αντικείμενο συζήτησης, όμως οι **Ferziger & Peric, (1996)** αποδεικνύουν ότι είναι δεύτερης τάξης ακόμα και σε μη ομοιόμορφα πλέγματα. Το σχήμα αυτό μπορεί να οδηγήσει κάτω από ορισμένες συνθήκες (υψηλούς αριθμούς **Peclet**), σε μη φραγμένες λύσεις και αριθμητική διάχυση. Ο αριθμός **Peclet** ορίζεται σαν :

$$Pe = \frac{ru_x dx}{m} \quad (3-45)$$

Ανάντι σχήμα διαφόρισης (First order upwind, FOU)

Στο σχήμα αυτό, τον πιο καθοριστικό ρόλο έχει η διεύθυνση της ροής, ενώ η γεωμετρία δεν λαμβάνεται υπόψη. Αν δηλαδή η διεύθυνση της ταχύτητας έχει φορά από το P στο N, δεν λαμβάνεται καθόλου η επίδραση του κόμβου N στην επιφάνεια f.

$$\beta_f = \begin{cases} 1, C_f \geq 0 \\ 0, C_f < 0 \end{cases}$$

Το σχήμα αυτό είναι πρώτης τάξης ακρίβειας, κάτι το οποίο μπορεί να επηρεάσει την ακρίβεια της λύσης, ενώ εισάγει τεχνητή συνεκτικότητα σαν να υπήρχαν ισχυρότερα φαινόμενα διάχυσης στο πεδίο. Παρόλα αυτά, είναι φραγμένο και σε συνδυασμό με την απλότητα του, καθίσταται χρήσιμο εργαλείο για επίλυση ροών.

Υβριδικό σχήμα διαφόρισης (Hybrid scheme, HYBRID)

Το υβριδικό σχήμα διαφόρισης είναι απλό στην εφαρμογή του, πλήρως συντηρητικό και ευρέως διαδεδομένο. Λέγεται υβριδικό γιατί αποτελεί ένα συνδυασμό των δύο προηγούμενων σχημάτων διαφόρισης. Αν δηλαδή η ροή έχει έντονα συναγωγικό χαρακτήρα χρησιμοποιείται το ανάντι σχήμα και σε αντίθετη περίπτωση οι κεντρικές διαφορές.

$$\beta_f = \begin{cases} 1 \text{ (FOU) για } & Pe_f > \frac{1}{1+f_p} \\ f_p \text{ (CD) για } & -\frac{1}{f_p} \leq Pe_f \leq \frac{1}{1+f_p} \\ 0 \text{ (FOU) για } & -\frac{1}{f_p} > Pe_f \end{cases}$$

(3-46)

Ο τοπικός αριθμός Pe_f στην επιφάνεια f , εκφράζει το λόγο των όρων συναγωγής ως προς τους όρους διάχυσης στην επιφάνεια f . Υποθέτοντας ορθογώνιο πλέγμα με ισομεγέθη κελιά ($f_p=0.5$), προκύπτει ότι όταν $|Pe| > 2$ ο όρος διάχυσης είναι αμελητέος και λαμβάνεται υπόψη μόνο η συναγωγή από τις σχέσεις του ανάντι σχήματος.

Η χρήση όμως του υβριδικού σχήματος είναι δυνατόν να δημιουργήσει προβλήματα αριθμητικής διάχυσης σε ροές με υψηλούς αριθμούς Pe και σε ένα ορθογώνιο πλέγμα η αριθμητική διάχυση μεγιστοποιείται όταν η διεύθυνση της ροής είναι παράλληλη στη διαγώνιο των κελιών. Έτσι, κάποιο σφάλμα στο πεδίο μεταφέρεται αριθμητικά, ανεξάρτητα από το πεδίο ταχυτήτων στους γειτονικούς κόμβους (Μπεργελές 2000, στο Στρωτός, 2007). Προκειμένου να λυθούν τα προβλήματα αυτά, έχουν αναπτυχθεί στη διεθνή βιβλιογραφία, ανώτερα σχήματα διαφόρισης, όπως τα **QUICK**, **SKEW**, **TVD**, **BSOU** και άλλα. Τα σχήματα αυτά είναι ακριβέστερα, πλην όμως απαιτούν μεγαλύτερο

υπολογιστικό κόστος. Το υβριδικό σχήμα ήταν αυτό που χρησιμοποιήθηκε σε όλες τις προσομοιώσεις της συγκεκριμένης διατριβής.

3.1.3. Μέθοδος **SIMPLE**

Η πορεία επίλυσης των εξισώσεων (3-5)-(3-8) με τη συμπερίληψη της (3-11) και σε δεύτερη φάση της (3-34) που ακολουθείται σε αυτή την προσομοίωση σε γενικές γραμμές έχει ως εξής:

α) Αρχικά δίνονται τιμές σε όλες τις μεταβλητές και σε κάθε σημείο του διακριτοποιημένου χώρου (οριακές συνθήκες όπου αυτές υπάρχουν και αρχικές αυθαίρετες τιμές ως παράμετροι για τις υπόλοιπες)

β) Υπολογίζονται οι ιδιότητες των κελιών

γ) Χρησιμοποιείται συγκεκριμένη αριθμητική μεθοδολογία (παραλλαγή της **SIMPLE**) για υπολογισμό των πεδίων πίεσης και ταχύτητας

δ) Όταν χρειάζεται (σε δύο μόνο περιπτώσεις εδώ όπως αναφέρθηκε) επιλύονται οι εξισώσεις της τύρβης και διορθώνονται οι τιμές της συνεκτικότητας

ε) Επιλύονται οι εξισώσεις ενέργειας και συγκέντρωσης

στ) Αν δεν έχουν συγκλίνει τα υπόλοιπα των εξισώσεων ή των μεταβλητών (**u**, **v**, **w**, **P** και της **T** με ταυτόχρονη επαλήθευση του ισοζυγίου παροχής μάζας εισόδου και μάζας εξόδου) κάτω από ένα προκαθορισμένο όριο επαναλαμβάνονται τα βήματα β)-ε)

Στην επόμενη παράγραφο θα αναφερθούν κάποια στοιχεία που αφορούν τη μεθοδολογία επίλυσης (αλγοριθμική διαδικασία) **SIMPLE**.

3.1.3.1. Αριθμητική μεθοδολογία της μεθόδου **SIMPLE**

Η μέθοδος **SIMPLE (Patankar and Spalding, 1972)** είναι ένας επαναληπτικός αλγόριθμος ο οποίος βασίζεται στην αρχικά αυθαίρετη υπόθεση για το πεδίο πίεσης προκειμένου να υπολογιστούν οι υπόλοιπες τιμές του πεδίου ροής και στην χρήση της εξίσωσης της συνέχειας για να γίνει διόρθωση των τιμών της

πίεσης που αρχικά υποτέθηκαν. Η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι σύγκλισης των λύσεων όλων των μεταβλητών.

Αναλυτικότερα, η αρχική υπόθεση για το πεδίο της πίεσης γίνεται ώστε να υπολογιστούν οι όροι πίεσης στα S_U . Με βάση αυτό το αρχικό πεδίο πιέσεων (συμβολίζεται με P^*) λύνονται οι εξισώσεις ορμής για της ταχύτητες u, v, w . Οι ταχύτητες που προκύπτουν με αυτόν τον τρόπο (u^*, v^*, w^*) ικανοποιούν μεν τις εξισώσεις της ορμής (για το δεδομένο πεδίο πιέσεων P^*) αλλά δεν ικανοποιούν την εξίσωση της συνέχειας. Η εξίσωση αυτή χρησιμοποιείται για τη διόρθωση του πεδίου ταχυτήτων αλλά και συγχρόνως για την εύρεση μιας νέας τιμής για το πεδίο πιέσεων. Για την ακρίβεια, με την εξίσωση που θα διαμορφωθεί παρακάτω, υπολογίζεται μία διόρθωση (P') στην προηγούμενη τιμή της πίεσης (P^*) και από αυτήν γίνονται και οι διορθώσεις στις ταχύτητες που μόλις υπολογίστηκαν.

Η εξίσωση διόρθωσης της πίεσης προκύπτει τελικά έπειτα από διαδοχικές αντικαταστάσεις και παρεμβολές ως

$$\alpha'_{P'} P'_{P'} = \alpha'_{N'} P'_{N'} + \alpha'_{S'} P'_{S'} + \alpha'_{E'} P'_{E'} + \alpha'_{W'} P'_{W'} + \alpha'_{UP'} P'_{UP'} + \alpha'_{D'} P'_{D'} + S_U P' \quad (3-47)$$

$$S_U P' = -\rho_e u^* e \Delta y \Delta z + \rho_w u^* w \Delta y \Delta z + \rho_s u^* s \Delta x \Delta z - \rho_n u^* n \Delta x \Delta z + \rho_D u^* D \Delta x \Delta y - \rho_{UP} u^*_{UP} \Delta x \Delta y \quad (3-48)$$

,όπου οι δείκτες N, S, E, W, UP, D αντιστοιχούν στα άνω-κάτω-δεξιά-αριστερά ,άνω και κάτω όρια της κάθε επιφάνειας δηλαδή του κλειστού κελιού που μελετάται (P) και $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ οι διαστάσεις του όγκου ελέγχου ($W-E, N-S$ και $UP-D$ διεύθυνση αντίστοιχα). Η ανωτέρω παράσταση είναι σε τριδιαγώνια μορφή και λύνεται όμοια με τις εξισώσεις ορμής. Με την αναθεώρηση του πεδίου πιέσεων, έπειτα από τον υπολογισμό των διορθώσεων P' υπολογίζονται οι νέες τιμές των ταχυτήτων και της πίεσης.

3.1.4. Οριακές Συνθήκες:

Στις επόμενες παραγράφους αναλύονται οι οριακές συνθήκες που επιβλήθηκαν για κάθε μεταβλητή στο υπολογιστικό πλέγμα πεπερασμένων όγκων και επιχειρείται η επεξήγηση της φυσικής σημασίας κάθε μιας από αυτές

3.1.4.1. Είσοδος

Στην είσοδο κάθε μοντέλου που προσομοιώθηκε, επιβλήθηκαν οι συνθήκες που κάθε φορά αντιπροσώπευαν το φυσικό φαινόμενο που επιχειρούσε να προσομοιωθεί. Έτσι υπήρξαν δύο ειδών οριακές συνθήκες: αυτή της σταθερής πίεσης και αυτή της σταθερής ταχύτητας, συνδυασμένες κάθε φορά με τις αντίστοιχες τιμές των υπολοίπων μεταβλητών.

3.1.4.1.1. Επιβολή σταθερής (διαφοράς) πίεσης

Η επιβολή σταθερής διαφοράς πίεσης στον όγκο ελέγχου που μελετούνταν κάθε φορά ήταν αποτέλεσμα της θεώρησης πως στη συγκεκριμένη περίπτωση το τεμάχιο που εξετάζεται, αποτελεί μέρος μιας ευρύτερης ολότητας του υλικού και είναι τοποθετημένο κατάντι της εισόδου για αρκετά μήκη της υδραυλικής του διαμέτρου οπότε και η ροή θεωρούνταν πλήρως ανεπτυγμένη. Η επιβολή συνθηκών **Dirichlet** (σταθερές τιμές στους οριακούς κόμβους του πλέγματος εν προκειμένω) υποχρέωνε σε ταυτόχρονη επιβολή συνθηκών **Neumann** (μηδενική κλίση της τιμής) για όλες τις συνιστώσες της ταχύτητας στο ίδιο όριο.

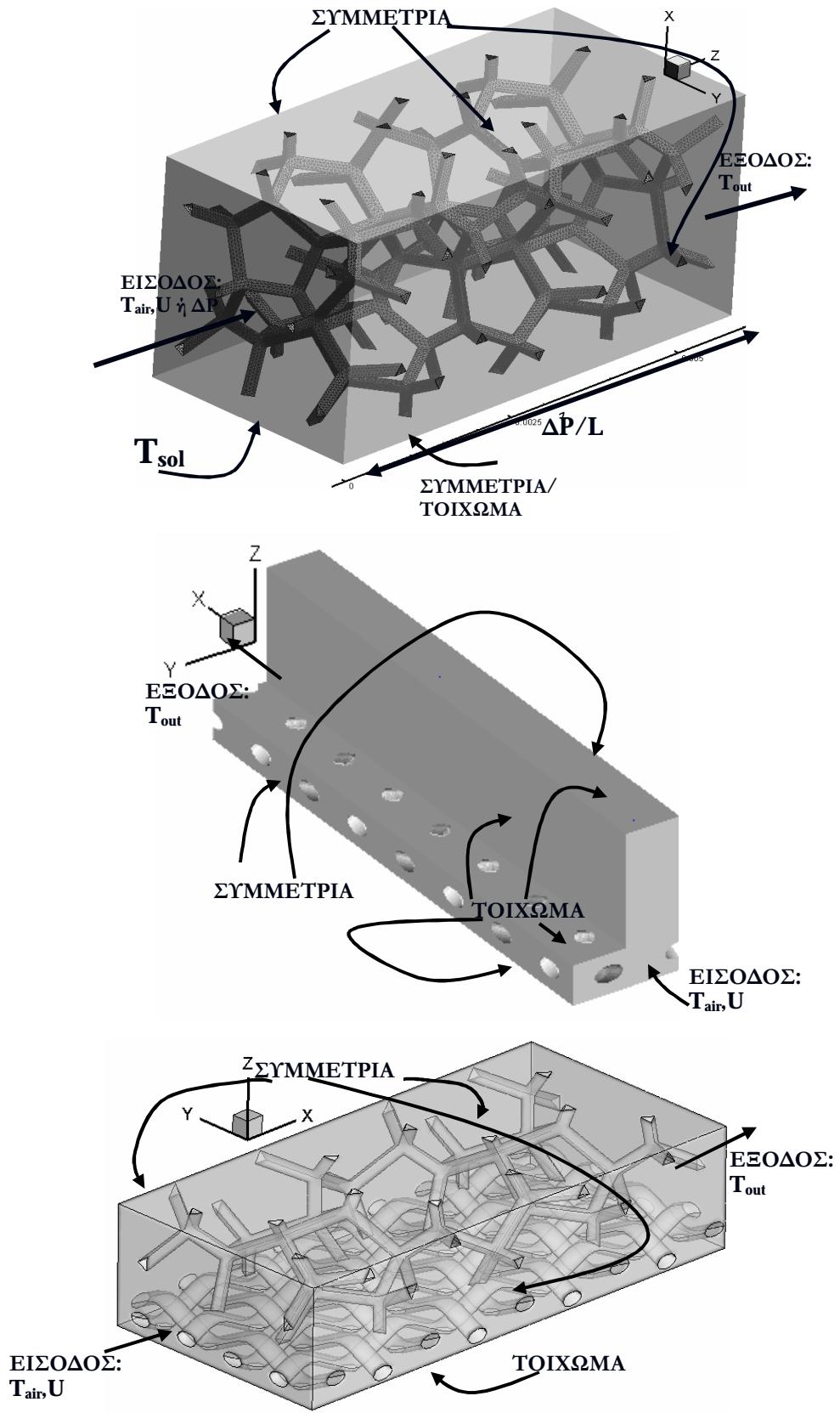
3.1.4.1.2. Επιβολή σταθερής ταχύτητας

Στην περίπτωση αυτή το υπολογιστικό χωρίο, θεωρούνταν ότι ερχόταν σε πρώτη επαφή με τον εισερχόμενο αέρα οπότε συνυπήρχαν και τα δύο «είδη» ροής σε αυτό: Τόσο μεταβατική περιοχή αρχικής ανάπτυξης όσο και περιοχή πλήρως ανεπτυγμένης ροής. Αυτό βέβαια δε μπορούσε να προλεχθεί, ωστόσο

αναφέρεται εδώ σαν πληροφορία που εκ των υστέρων είναι γνωστή. Η συνθήκη **Dirichlet** για την ταχύτητα εισόδου του ρευστού (με μη μηδενική τιμή αποκλειστικά και μόνο στη διεύθυνση της ροής, ενώ στις υπόλοιπες διευθύνσεις ήταν μηδενική), συνοδευόταν από συνθήκη **Neumann** (μηδενική κλίση της τιμής) για την μεταβλητή της πίεσης τόσο στην είσοδο όσο και στην έξοδο του χωρίου και των συνιστωσών της ταχύτητας στην έξοδο αυτού στις υπόλοιπες διευθύνσεις.

3.1.4.2. Συμμετρία

Κάθε περίπτωση προσομοίωσης, όπως εξηγείται και στο κεφάλαιο της κατασκευής της γεωμετρίας και του πλέγματος κάθε υπολογιστικού όγκου, εμπεριέχει τουλάχιστον **2** επίπεδα συμμετρίας (Σχήμα **3-6**). Σε αυτά τα επίπεδα ορισμένες συνθήκες κάθε μεταβλητής έπαιρναν τιμή μηδενική στην κάθετη διεύθυνση του ορίου και μηδενικής κλίσης στη διεύθυνση αυτού για να ικανοποιηθεί η συνθήκη συμμετρίας.



Σχήμα 3-6: Οριακές συνθήκες στους όγκους αναφοράς των μοντέλων προσομοίωσης

3.1.4.3. Τοιχώματα

Όπως και σε κάθε άλλη περίπτωση έτσι και σε αυτή της ύπαρξης τοιχώματος, επιβλήθηκαν οριακές συνθήκες για τις τιμές των μεταβλητών που αντιπροσώπευαν το φυσικό φαινόμενο που λαμβάνει χώρα εκεί. Συγκεκριμένα για τα τοιχώματα επιβλήθηκε συνθήκη μη ολίσθησης (**no slip condition**) για τις παράλληλες στο τοίχωμα συνιστώσες της ταχύτητας και συνθήκη μη εισχώρησης για την κάθετη συνιστώσα. Για την πίεση επιβάλλεται συνθήκη μηδενικής κλίσης. Μόνο στην περίπτωση επίλυσης τυρβώδους ροής επιβάλλονται οι γνωστές από την βιβλιογραφία συνθήκες τοιχώματος (**wall functions**).

3.1.4.4. Έξοδος

Στην έξοδο χρησιμοποιήθηκαν δύο είδη οριακών συνθηκών γενικά ,διότι σε κάποιες περιπτώσεις προσομοιώθηκε πλήρως ανεπτυγμένη ροή με αποτέλεσμα να χρειαστεί η επιβολή διαφοράς πίεσης στο υπολογιστικό χωρίο όπως έχει αναφερθεί.

3.1.4.4.1. Επιβολή σταθερής (διαφοράς) πίεσης

Στις περιπτώσεις αυτές συνήθως τίθεται μηδενική τιμή (και όχι κλίση) στην έξοδο (συνθήκη **Dirichlet**) ούτως ώστε η διαφορά από την τιμή που υπήρχε στην είσοδο να δίνει διαιρεμένη με το μήκος του χωρίου συγκεκριμένη πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους με σκοπό τη σύγκριση με πειράματα που περιείχαν αντίστοιχες πτώσεις πίεσης ανά μονάδα μήκους από τη διεθνή βιβλιογραφία.

Στις περιπτώσεις αυτές οι συνιστώσες των ταχυτήτων λάμβαναν συνθήκη μηδενικής κλίσης στο όριο της εξόδου (**Neumann**)

3.1.4.4.2. Επιβολή σταθερής κλίσης ταχύτητας

Σε όλες τις προαναφερόμενες περιπτώσεις (επιβολής διαφοράς πίεσης ή σταθερής ταχύτητας της συνιστώσας της ταχύτητας στη διεύθυνση της ροής) η

οριακή συνθήκη όλων των συνιστωσών της ταχύτητας στην έξοδο ήταν μηδενική πρώτη παράγωγος (κλίση), ήτοι συνθήκη **Neumann**.

3.2. Επίλυση Εξίσωσης Μετάδοσης Θερμότητας

Το δεύτερο κομμάτι της διερεύνησης που επιχειρήθηκε αφορούσε στο θερμοκρασιακό πεδίο που αναπτύσσεται σε δύο κατηγορίες θεώρησης:

α) Στην περίπτωση που η στερεά φάση κάθε υλικού θεωρούνταν υπό σταθερή θερμοκρασία (θερμοκρασιακό πεδίο που αναπτύσσεται στο ρευστό) και

β) Στην περίπτωση εκείνη κατά την οποία η στερεά φάση κάθε υλικού ήταν σε επαφή με θερμή πλάκα, ενώ στο εσωτερικό της ίδιας της στερεής φάσης του υλικού μεταβάλλονταν η θερμοκρασία υπό την επίδραση τόσο της συναγωγής του διαρρέοντος αέρα, όσο και της αγωγής στο εσωτερικό του υλικού. Αυτή είναι η περίπτωση συζυγούς επίλυσης όπου το θερμοκρασιακό πεδίο αναπτύσσεται στο ρευστό και στο στερεό μέρος του ρευστού.

Στην προσπάθεια να ποσοτικοποιηθούν τα ευρήματα, έγινε σύγκριση με αποτελέσματα πειραματικών μετρήσεων από την βιβλιογραφία, που αφορούν τη μετάδοση θερμότητας, τόσο σε κλασικά συστήματα, όσο και σε συστήματα πορωδών μέσων και επιπλέον σε εφαρμογές μηχανολογικών διατάξεων εναλλαγής θερμότητας.

Έγινε σύγκριση με τον ενεργό συντελεστή μετάδοσης θερμότητας h_{eff} [$W m^{-2} K^{-1}$] ο οποίος ορίζεται ως:

$$h_{eff} = \frac{m C_p (T_{out} - T_{in})}{A \left[(\Delta T_{out} - \Delta T_{in}) / \ln \left(\frac{\Delta T_{out}}{\Delta T_{in}} \right) \right]} \quad (3-49)$$

με τον όρο στην αγκύλη να υποδηλώνει ουσιαστικά τη μέση λογαριθμική διαφορά της θερμοκρασίας (**LMTD**), και όπου

$$\Delta T_{\text{out}} = T_{\text{sol}} - T_{\text{out}} \quad (3-50)$$

και

$$\Delta T_{\text{in}} = T_{\text{sol}} - T_{\text{in}} \quad (3-51)$$

, όπου T_{sol} η θερμοκρασία της στερεάς φάσης (ή της θερμής πλάκας στην περίπτωση της συζυγούς επίλυσης του θερμοκρασιακού πεδίου και T_{in} , T_{out} οι θερμοκρασίες εισόδου και εξόδου από τον υπολογιστικό όγκο του ρευστού που διέρχεται δια αυτού. Ο ενεργός συντελεστής μετάδοσης θερμότητας λαμβάνει υπόψιν του και την επιφάνεια εναλλαγής A [m^2], η οποία μπορεί να είναι είτε η επιφάνεια της θερμαινόμενης πλάκας (Alvarez- Hernandez, 2005), είτε η επιφάνεια των στερεών μερών του πορώδους, είτε η συνολική επιφάνεια (το άθροισμα των δύο). Στην παρούσα χρησιμοποιήθηκαν τόσο η επιφάνεια των στερεών μερών του πορώδους (ενεργός), όσο και οι άλλες δύο για τον υπολογισμό και τη σύγκριση (βλ. και ενότητα 5).

Επιπρόσθετα χρησιμοποιήθηκε και ο αδιάστατος παράγον Colburn j ο οποίος διαφέρει από τον ενεργό συντελεστή μετάδοσης θερμότητας ως προς ότι δίνει ένα μέτρο της απόδοσης ενός συστήματος εναλλαγής θερμότητας, συγκρίνοντας την επιτυγχανόμενη μετάδοση θερμότητας με συναγωγή με το έργο που απαιτείται ώστε να διέλθει το ρευστό από τον όγκο του συστήματος αυτού (Boomsma et al., 2003). Ο παράγον Colburn j ορίζεται:

$$j = \frac{h}{rC_p U} (\text{Pr})^{2/3} \quad (3-52)$$

όπου ρ η πυκνότητα του ρευστού που εξετάζεται, U η μέση ταχύτητα ροής αυτού, h ο συντελεστής μετάδοσης θερμότητας και Pr ο αδιάστατος αριθμός **Prandtl** που δίνει ένα μέτρο για το πόσο υπερισχύει η διάχυση λόγω μάζας (ιξώδης διάχυση) της διάχυσης λόγω κλίσεων θερμοκρασίας (θερμική διάχυση) και δίνεται ως:

$$Pr = \frac{C_p m}{k} \quad (3-53)$$

Στις ανωτέρω δύο εξισώσεις, C_p [$J K^{-1} Kg^{-1}$] είναι η ειδική θερμότητα, ενώ k [$Wm^{-1}K^{-1}$] η θερμική αγωγιμότητα του ρευστού και μ [$kg m^{-1} s^{-1}$] η συνεκτικότητα του ρευστού.

Στις επόμενες παραγράφους γίνεται παρουσίαση της εξίσωσης ενέργειας και της μετασχηματισμένης εξίσωσης ενέργειας για την περίπτωση που επιλύεται η συζυγής μετάδοση θερμότητας.

3.2.1. Εξισώσεις ενέργειας & διακριτοποίηση αυτών

Η εξίσωση ενέργειας στη μόνιμη κατάσταση και ασυμπίεστη ροή θεωρώντας σταθερή ειδική θερμοχωρητικότητα μετατρέπεται στην εξίσωση μεταφοράς της θερμοκρασίας:

$$r \left(\frac{\partial uT}{\partial x} + \frac{\partial vT}{\partial y} + \frac{\partial wT}{\partial z} \right) - \frac{k}{C_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = S_{\Phi_x} \quad (3-54)$$

,όπου ο όρος πηγής S_{Φ} [$kg K m^{-3} s^{-1}$] εκφράζει κάθε παραγωγή ενέργειας με την μορφή παραγωγής θερμοκρασίας για την μετασχηματισμένη εξίσωση.

Εν προκειμένω η εξίσωση αυτή προέρχεται από τη γενική εξίσωση μεταφοράς με τις εξής παραδοχές:

α) χρονικές παράγωγοι μηδενίζονται (αφού το φαινόμενο είναι στη μόνιμη κατάσταση του).

β) η πυκνότητα του μέσου δε μεταβάλλεται (ομογενές και ασυμπίεστο ρευστό)

γ) η θερμική αγωγιμότητα \mathbf{k} [W/mK] είναι σταθερή σε όλες τις διευθύνσεις (ομογενής αγωγιμότητα).

δ) Έχοντας υπόψιν όλα τα ανωτέρω αν τεθεί στη γενική εξίσωση μεταφοράς όπου $\Phi = C_p T$ και $\Gamma = \mathbf{k} (= \frac{m}{Pr} C_p)$, με τη θεώρηση $d\Phi = C_p dT$, με διαίρεση όλων των όρων με C_p προκύπτει η (3-54).

Η διακριτοποίηση της συγκεκριμένης εξίσωσης γίνεται σύμφωνα με την παράγραφο 3.1.2. Ακολούθως περιγράφονται οι οριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν για τη διερεύνηση του πεδίου θερμοκρασίας.

3.2.1.1. Είσοδος: Επιβολή σταθερής θερμοκρασίας

Ο εισερχόμενος στο υπολογιστικό χωρίο αέρας είχε πάντοτε σταθερή θερμοκρασία (περιβάλλοντος, ή και λίγο μεγαλύτερη). Συνθήκες **Dirichlet** λοιπόν επιβάλλονταν στους οριακούς κόμβους της εισόδου.

3.2.1.2. Συμμετρία (κλίσεις)

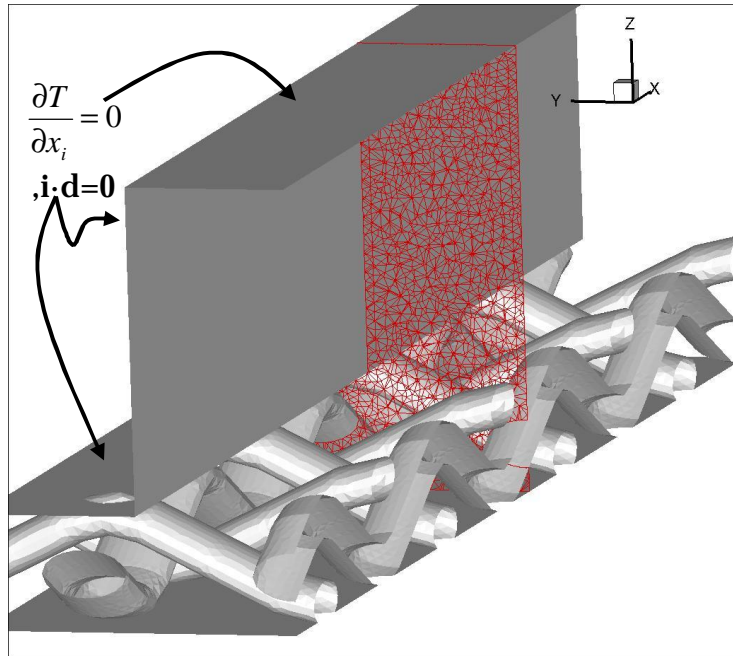
Ομοίως στα επίπεδα συμμετρίας η τιμή της θερμοκρασίας που επιβάλλονταν αφορούσε σε μηδενική κλίση κάθετα στη διεύθυνση του ορίου .

3.2.1.3. Τοιχώματα

3.2.1.3.1. Επιβολή μηδενικής κλίσης θερμοκρασίας

Στα τοιχώματα και σε κάθε στερεό όριο των υπολογιστικών χωρίων των μοντέλων πορωδών υλικών επιβλήθηκαν κυρίως συνθήκες **Dirichlet** (στα όρια της στερεάς φάσης όταν επρόκειτο για τη διερεύνηση που αφορούσε θεώρηση σταθερής θερμοκρασίας στο πορώδες και όχι συζυγούς επιλυμένης). Ωστόσο σε

κάποιες περιπτώσεις χρησιμοποιήθηκαν και συνθήκες **Neumann** μηδενικής κλίσης της τιμής της θερμοκρασίας αντιστοιχώντας σε αδιαβατικά τοιχώματα. Αυτές ήταν στο άνω και πλάι στέλεχος του καναλιού ροής του **GDL** στην περίπτωση των PEM κυψελών καυσίμου (Σχήμα 3-7).



Σχήμα 3-7: Όρια μηδενικής κλίσης θερμοκρασίας στις PEM κυψέλες καυσίμου

Στις περιπτώσεις συζυγούς επίλυσης το τοίχωμα ερχόταν σε επαφή με θερμή πλάκα και το θερμοκρασιακό πεδίο στο εσωτερικό της στερεάς φάσης μεταβάλλονταν με επίλυση της εξίσωσης της ενέργειας όπως θα αναλυθεί παρακάτω.

3.2.1.3.2. Επιβολή σταθερής θερμοκρασίας

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, υπήρξε μια σειρά προσομοιώσεων όπου η θερμοκρασία στη στερεά φάση του πορώδους θεωρήθηκε σταθερή και έγινε σύγκριση τόσο με πειραματικά εξαγόμενα, όσο και με τα αντίστοιχα της θεώρησης μεταβλητής θερμοκρασίας στη στερεά φάση. Η επιβολή σταθερής θερμοκρασίας στις περιπτώσεις που όλο το στερεό πορώδες υλικό ήταν υπό σταθερή θερμοκρασία έγινε τόσο για περιπτώσεις όπου υπήρχε πλάκα στο

κατώτατο οριζόντιο επίπεδο, όσο και για περιπτώσεις που θεωρήθηκε επίπεδο συμμετρίας. Ωστόσο στην περίπτωση του **GDL** των κυψελών καυσίμου πάντα υπήρχε παρουσία πλάκας στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο, προσομοιώνοντας τη μεμβράνη που λαμβάνουν χώρα οι αντιδράσεις.

Ωστόσο στην περίπτωση της συζυγούς επίλυσης του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό των στερεών μερών του πορώδους συστήματος, έπρεπε να είναι σε επαφή τα στερεά μέρη με κάποια πηγή πρόσδοσης θερμότητας, οπότε θεωρήθηκε ότι τόσο η μεμβράνη στις κυψέλες καυσίμου (που ούτως ή άλλως υπήρχε), όσο και το κατώτατο επίπεδο στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού (και της σύζευξης των υλικών στο μοντέλο εμβάθυνσης) είχαν συνθήκη **Dirichlet** για τη θερμοκρασία.

3.2.1.4. Έξοδος

Στην έξοδο από τον όγκο ελέγχου επιβάλλονταν συνθήκη μηδενικής κλίσης της θερμοκρασίας, λαμβάνοντας έτσι την τιμή που υπολογίστηκε για το τελευταίο κελί όπου ο υπολογισμός ήταν εφικτός και προσομοιώνοντας έτσι συνθήκες ελεύθερης εξόδου.

3.2.2. Συζυγής επίλυση θερμοκρασίας

Ένα από τα καινοτόμα στοιχεία που παρουσιάζεται με τη διατριβή αυτή, είναι και η συζυγής επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου που αναπτύσσεται υπό συνθήκες ροής στο εσωτερικό της στερεάς φάσης των πορώδων υλικών που προσομοιώνονται. Στις ακόλουθες παραγράφους γίνεται περιγραφή της θεωρητικής βάσης στην οποία στηρίχτηκε ο υπολογισμός της κατανομής της θερμοκρασίας στο εσωτερικό των στερεών μερών του πορώδους.

Για την αντιμετώπιση του προβλήματος, διακριτοποιήθηκε με τρισδιάστατο πλέγμα τετράεδρων πεπερασμένων όγκων (βλ. και ενότητα 4) ο στερεός χώρος

(στερεά φάση) του κάθε μοντέλου πορώδους υλικού που δημιουργήθηκε κατά την κατασκευή των αντίστοιχων υπολογιστικών χωρίων (βλ. κεφ. 4)

Η διαδικασία επίλυσης βασίστηκε και σε αυτή την περίπτωση στην εξίσωση ενέργειας, όπως αυτή μετασχηματίζεται με τη χρήση της υπόθεσης μηδενικής ταχύτητας στο εσωτερικό των στερεών μερών. Σε αυτή την περίπτωση η εξίσωση (3-54) αναπτύσσεται:

$$r \left(u \frac{\partial T}{\partial x} + T \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + T \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} + T \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{k}{C_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = S_\phi \quad (3-55)$$

οπότε μηδενίζοντας τους όρους που περιέχουν ταχύτητα προκύπτει :

$$-\frac{k}{C_p} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = S_\phi \quad (3-56)$$

όπου είναι προφανές πλέον πως έχει εκφυλιστεί στην εξίσωση αγωγής σε στερεό για τον τρισδιάστατο χώρο.

Το ζήτημα που προκύπτει σε αυτή την περίπτωση έχει να κάνει με την επιβολή της σωστής οριακής συνθήκης στο όριο του στερεού τοιχώματος, αφού οι οριακοί κόμβοι εκεί ανήκουν τόσο στο εσωτερικό πλέγμα (στερεού), όσο και στο εξωτερικό πλέγμα (ροής). Είναι απαραίτητο τα δύο πλέγματα να συμπίπτουν σε αυτά τα σημεία και έχει ληφθεί ειδική μέριμνα επ'αυτού (βλ. και ενότητα 4). Η σωστή οριακή συνθήκη δίνεται ως (Μπούρης, 1997) :

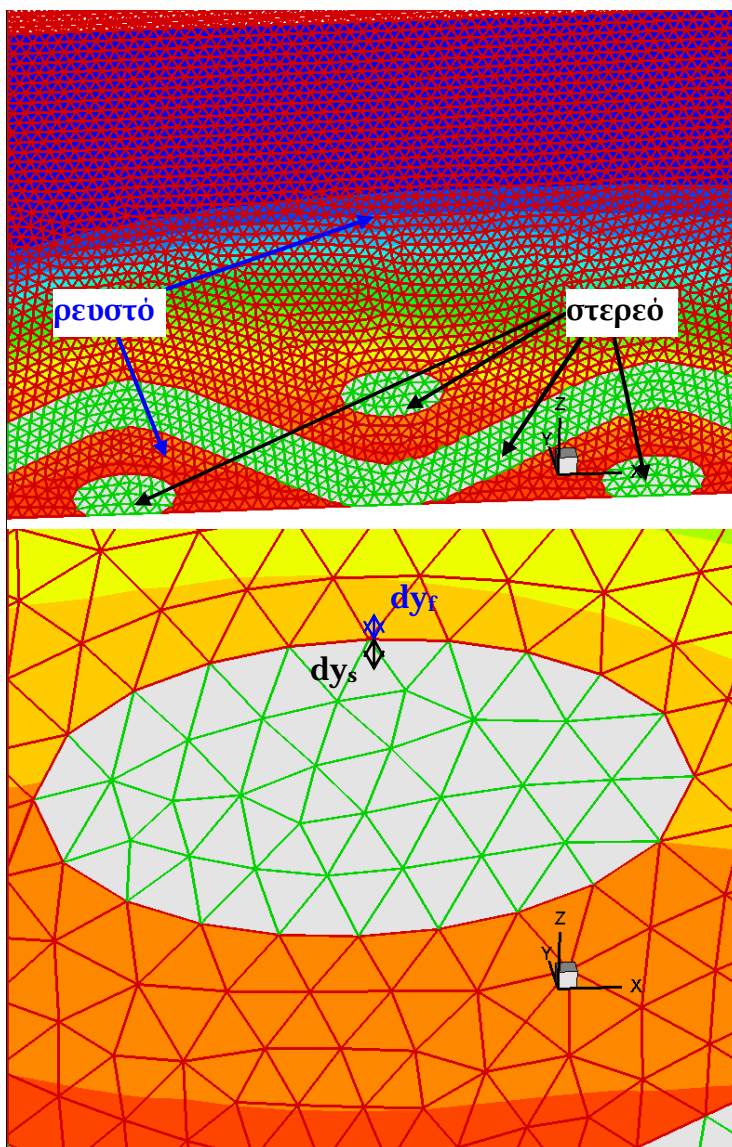
$$T_{S-F} = \frac{ck_s T_s + k_f T_f}{ck_s + k_f} \quad (3-57)$$

με

$$c = \frac{dy_f}{dy_s}$$

(3-58)

να συμβολίζει το λόγο των αποστάσεων των κέντρων των πρώτων (οριακών κελιών) της ρευστής (dy_f) και της στερεής (dy_s) φάσης αντίστοιχα από τους οριακούς κόμβους των τοιχωμάτων στη στερεά φάση του μοντέλου (βλ. και Σχήμα 3-8).



Σχήμα 3-8: Απεικόνιση μεγεθών dy_s και dy_f στο πλέγμα ροής και στερεού

Η τιμή αυτή εν συνεχεία επιβαλλόταν ως συνθήκη σταθερής τιμής (**Dirichlet**) στα όρια των επιφανειών, όπως ακριβώς η ταχύτητα στην είσοδο στις περιπτώσεις σταθερής ταχύτητας εισόδου και επιλύονταν σε κάθε επανάληψη το πεδίο θερμοκρασίας θεωρώντας τη νέα κάθε φορά τιμή της T διεπιφάνειας ως σταθερή.

Η συνθήκη σταθερής θερμοκρασίας όπως αναφέρθηκε συμπλήρωνε τις οριακές συνθήκες, επιβαλλόμενη στο κατώτατο επίπεδο του κάθε όγκου υπολογισμού είτε αυτό προσομοίωνε μεμβράνη (**GDL** στις κυψέλες καυσίμου) είτε για θερμαινόμενη πλάκα (μεταλλικοί αφροί ως εκτεταμένη επιφάνεια εναλλαγής).

Τέλος επισημαίνεται πως –αν και έγιναν δοκιμαστικές διερευνήσεις τόσο με την ύπαρξη όρου βαρύτητας όσο και χωρίς- έγινε και υπολογιστική πρόλεξη της επίδρασης ανωστικών φαινομένων με χρήση του αριθμού **Froude** συναγωγής. Αυτός ορίζεται σαν

$$Fr = \sqrt{\frac{u^2}{g \frac{\Delta q}{q} L}} \quad (3-59)$$

με $\Delta\theta$ να είναι η μέγιστη θερμοκρασιακή διαφορά εν προκειμένω ($T_{sol}-T_{in}$), θ η μέση θερμοκρασία του ρευστού και L ένα χαρακτηριστικό μήκος. Στη χειρότερη των περιπτώσεων (σαν μήκος ελήφθη η διάμετρος της ίνας στο ύφασμα ανθρακοϊνών και η μέγιστη διαφορά θερμοκρασίας **60 K** για τη χαμηλότερη ταχύτητα ροής **0,3 m/s**), ο αριθμός αυτός ήταν **3**. Ως εκ τούτου η ροή είναι ανεξάρτητη από ανωστικά φαινόμενα (**ASHRAE, 2009**)

3.3. Επίλυση Εξίσωσης Μεταφοράς Συγκέντρωσης Υγρασίας

Το τελευταίο κομμάτι της διερεύνησης της ροής μέσα από πορώδη υλικά, αφορούσε την κατανομή της συγκέντρωσης υγρασίας που προκύπτει από την

παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη των κυψελών καυσίμου καθώς και από το περιεχόμενο υγρασίας του εισερχόμενου αέρα. Πρέπει εδώ λοιπόν να δοθούν οι παρακάτω ορισμοί:

Λόγος υγρασίας **W** [**kg H₂O/kg** ξηρού αέρα (ξ.α.)] ονομάζεται η κατά βάρος ποσότητα H₂O που περιέχει ένα μίγμα αέρα-υδρατμών και είναι ανεξάρτητο των συνθηκών στις οποίες αυτό εμφανίζεται. Είναι ανηγμένο ωστόσο στη μονάδα της μάζας του ξηρού αέρα.

Σε αντίθεση με το λόγο υγρασίας, η σχετική υγρασία (**R.H.** ή **φ**) δεν είναι ανεξάρτητη των υπολοίπων συνθηκών οι οποίες επικρατούν στο περιβάλλον του μίγματος. Έτσι η εξίσωση υπολογισμού της σχετικής υγρασίας για την περίπτωση της συγκεκριμένης διατριβής είναι:

$$j = \frac{W \cdot P}{(0,62198 + P) \frac{17,27T}{611e^{T+273,3}}} \quad (3-60)$$

η οποία προκύπτει αν στην εξίσωση

$$j = \frac{P_w}{P_{ws}} \quad (3-61)$$

που είναι ο ορισμός της σχετικής υγρασίας αντικατασταθεί όπου

$$P_w \frac{W \cdot P}{(0,62198 + W)} \quad (3-62)$$

να είναι η μερική πίεση των ατμών με P την στατική πίεση σε [Pa] και

$$P_{ws} = 611e^{\frac{17,27T}{T+273,3}} \quad (3-63)$$

η πίεση κορεσμού με τη θερμοκρασία T εκφρασμένη σε [°C].

3.3.1. Εξίσωση συγκέντρωσης & διακριτοποίηση

Η εξίσωση διατήρησης του συστατικού X ή αλλιώς εξίσωση συγκέντρωσης, προκύπτει από τη γενική εξίσωση μεταφοράς για $\Phi = C = Y_X$ [kg/kg] και $\Gamma = \rho D_{gm,X} = \frac{m}{Sc}$, με μ το δυναμικό ιξώδες και Sc τον αδιάστατο αριθμό **Schmidt**. Για την περίπτωση αερίου μίγματος (**gm=gas mixture**), εκφράζεται από την εξίσωση:

$$\nabla \cdot (rY_X u) = \nabla \cdot (rD_{gm,X} \nabla Y_X) + S_{YX} \quad (3-64)$$

Στην εξίσωση αυτή ο όρος πηγής ισούται με τη παροχή μάζας του στοιχείου που εξατμίζεται ή συμπυκνώνεται ανα μονάδα όγκου. Αν λύνουμε συγκέντρωση σε αέριο/υγρό, η πυκνότητα είναι αυτή του αερίου/υγρού μίγματος και ο συντελεστής διάχυσης είναι αυτός του στοιχείου X στο αέριο/υγρό μίγμα.

Η διακριτοποίηση της εξίσωσης συγκέντρωσης στο χώρο (αφού και σε αυτή την περίπτωση δεν ενδιαφέρει η χρονική διακριτοποίηση λόγω μονιμότητας φαινομένου) γίνεται σύμφωνα με την παράγραφο **3.1.2**, θέτοντας $\phi = Y_X$ και

$$\Gamma = \frac{m}{Sc}.$$

3.3.2. Οριακές συνθήκες υγρασίας

Όσον αφορά τις οριακές συνθήκες που επιβλήθηκαν στους κόμβους του υπολογιστικού πλέγματος κατά τη διερεύνηση της υγρασίας, αυτές έχουν να κάνουν με την παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη των **PEM fuel cells** (συνθήκες

Dirichlet στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο του υπολογιστικού χωρίου), και συνθήκες **Dirichlet** επίσης όσον αφορά τον εισερχόμενο αέρα και τη σχετική υγρασία που αυτός περιέχει (**Siegel, 2003**). Σε κάθε άλλη περίπτωση οι οριακές συνθήκες για την υγρασία ήταν τύπου **Neumann** (μηδενική κλίση συγκέντρωσης υγρασίας). Αξίζει να σημειωθεί εδώ ότι όσον αφορά την επιβολή των συνθηκών συγκέντρωσης υγρασίας, η σταθερή τιμή που επιβάλλονταν στο όριο αφορούσε **kg H₂O/kg** μίγματος και όχι ξηρού αέρα (ξ.α.), λόγω δομής του υπολογιστικού κώδικα που χρησιμοποιούνταν, οπότε έπρεπε να υπολογιστεί από το περιεχόμενο **W** του λόγου υγρασίας [**kg H₂O/kg** ξηρού αέρα (ξ.α.)], ως εξής:

$$C = \frac{W}{1+W}$$

(3-65)

δίνοντας σαν μονάδες **kg H₂O/kg** μίγματος.

4. Αριθμητική παράσταση της γεωμετρίας στη μικροκλίμακα

Το κεφάλαιο που ακολουθεί περιλαμβάνει τη θεωρητική θεμελίωση της γεωμετρίας που μοντελοποιήθηκε σε κάθε υλικό, τη διαδικασία που ακολουθήθηκε για την αριθμητική της αναπαράσταση σε κάθε περίπτωση, την πιστοποίηση και επαλήθευση της ορθότητάς της με βάση τους πειραματικούς χαρακτηρισμούς των μεγεθών που συγκρίνονται και την εκάστοτε προσαρμογή και τροποποίηση της τοπολογίας ώστε να ενταχθεί σε μηχανολογική διάταξη όπου αυτό ήταν εφικτό ή επιθυμητό για τη διερεύνηση της ροής και της μεταφοράς θερμότητας σε επίπεδο μικροκλίμακας.

Επίσης παρουσιάζονται σε κάποιο βαθμό τα υπολογιστικά αριθμητικά πακέτα που χρησιμοποιήθηκαν για τη θεωρητική αποτύπωση της γεωμετρίας καθώς και η φυσική θεωρία στην οποία στηρίζονται οι αρχές που αυτά τα πακέτα χρησιμοποιούν.

Ακολουθεί η διαδικασία χωρικής διακριτοποίησης για κάθε περίπτωση που μελετήθηκε και συγκεκριμένα η δημιουργία πλέγματος πεπερασμένων όγκων τόσο για τη ρευστή (κενή), όσο και για τη στερεή (πορώδες μητρικό υλικό) φάση της κάθε κατασκευής, ο έλεγχος της ποιότητας του πλέγματος και η παρουσίαση της ανεξαρτησίας των αποτελεσμάτων από το μέγεθος του πλέγματος.

4.1. Δήλωση προβλήματος

Σκοπός της κατασκευής της τοπολογίας στην περίπτωση των πορώδων υλικών που επιλέχθηκαν ήταν να παρουσιάζεται με όσο το δυνατόν καλύτερη λεπτομέρεια (στο βαθμό που το επέτρεπαν οι δυνατότητες των χρησιμοποιούμενων μέσων) η μικροδομή των υλικών και να γίνεται χρήση της επαναληψιμότητας της γεωμετρίας του κάθε πορώδους και της σαφούς περιγραφής αυτής. Αυτό ήταν αναγκαίο τόσο για την ορθή αποτύπωση των

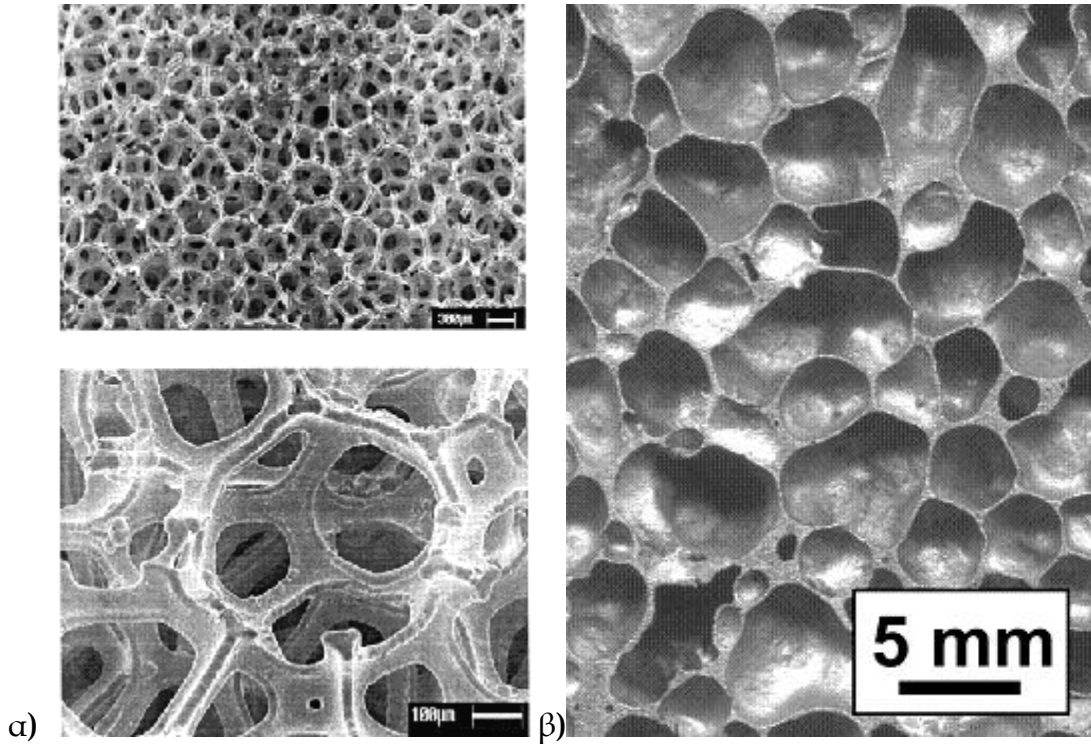
μέσων/σωμάτων που θα παρεμβάλλονταν στη ροή, όσο και για την αποτελεσματική διακριτοποίηση καθαρής της στερεής φάσης του κάθε υλικού, στην περίπτωση της συζυγούς επίλυσης του θερμοκρασιακού πεδίου.

Προς τούτο επιλέχθηκαν προς μοντελοποίηση υλικά (βλ. και κεφάλαιο 1 και 2), τα οποία παρουσίαζαν δομημένη τοπολογία με σαφή γεωμετρική περιγραφή και περιοδικότητα σε κάποιο βαθμό (σε 3 διαστάσεις στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού και σε 1 διάσταση στην περίπτωση της ίνας του ανθρακοϋφάσματος). Σε κάθε περίπτωση η επιλογή των υλικών έγινε με κριτήρια που θα επέτρεπαν την ορθή αναπαράσταση της γεωμετρίας τους, την ικανότητα μοντελοποίησης των ιδιοτήτων τους και την εύκολη πρόσβαση σε πληροφορίες που τα αφορούσαν στη διεθνή βιβλιογραφία. Ο μεταλλικός αφρός αλουμινίου (ERG-Duocel®) και το ύφασμα ανθρακοϊνών ή ανθρακοϋφασμα (carbon cloth, BASF Fuel Cell, Inc.) είναι υλικά τα οποία ανταποκρίνονται σε αυτά ακριβώς τα χαρακτηριστικά.

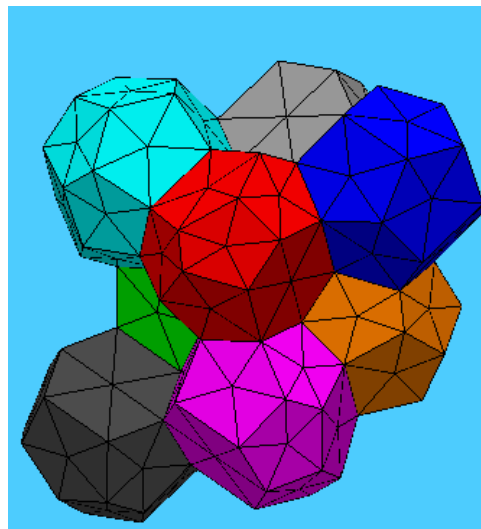
4.2. Αριθμητική Προσομοίωση Γεωμετρίας Μεταλλικού Αφρού

Όπως έχει ήδη αναφερθεί (βλ. και ενότητα 2), ο μεταλλικός αφρός μπορεί να είναι είτε ανοικτής είτε κλειστής δομής. Στην περίπτωση του αφρού ανοικτής δομής η τοπολογία συνίσταται από επαναλαμβανόμενα πολύεδρα κελιά διάτρητων εδρών τα οποία συνδέουν οι «σύνδεσμοι» ή «κομβοελάσματα» (ligaments) του αφρού (Σχήμα 4-1). Στην παρούσα διατριβή μοντελοποιήθηκε μεταλλικός αφρός ανοικτής δομής (ή ανοικτού κελιού) και για να κατασκευαστεί η τοπολογία του χρησιμοποιήθηκε σαν αρχική δομή το μαθηματικό μοντέλο που ανέπτυξαν οι Weaire και Phelan, (1994) (καλούμενο και WP στο εξής, βλ. και Σχήμα 4-2) και χρησιμοποιήθηκε και από τους Boomsma et al., (2003) σε μια παρόμοια προσπάθεια προσομοίωσης ροής μέσα από μεταλλικό αφρό. Η πρότυπη αυτή δομή περιγράφεται αναλυτικά παρακάτω αφού γίνει μια

ανασκόπηση των δομών που έχουν κατά καιρούς γίνει αποδεκτές για μεταλλικούς αφρούς.



Σχήμα 4-1: α)Μεταλλικός αφρός ανοικτής δομής β)μεταλλικός αφρός κλειστής δομής

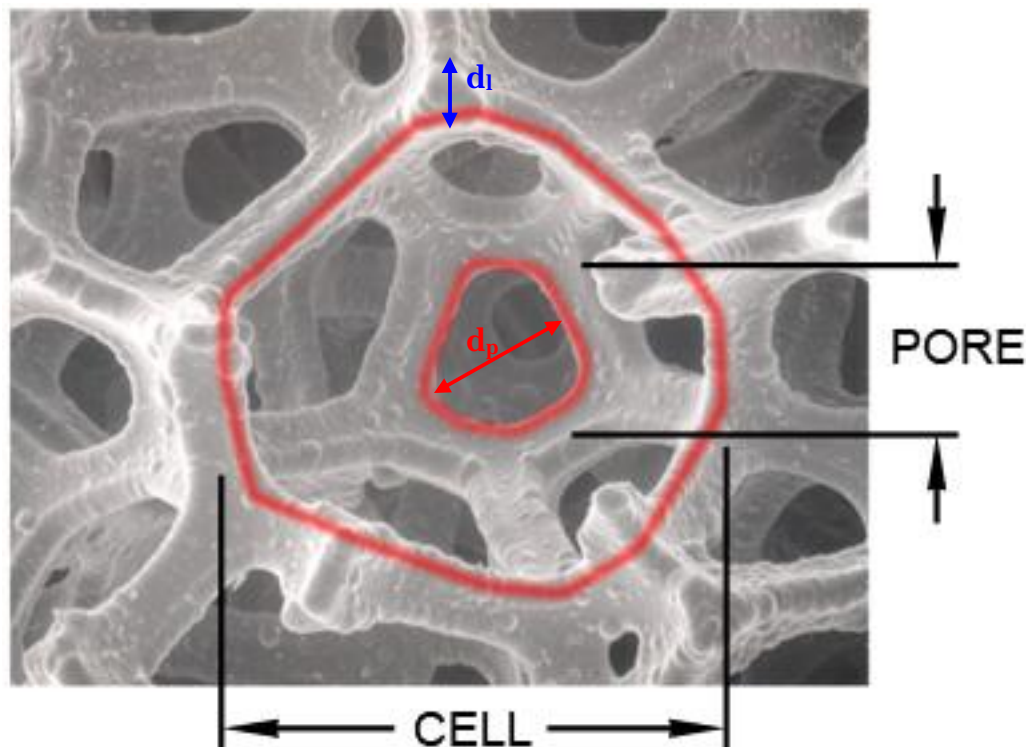


Σχήμα 4-2: Το μαθηματικό μοντέλο WP που προτείνουν οι Weaire και Phelan, (1994) όπως εμφανίζεται στο Surface Evolver (Brakke, 1992).

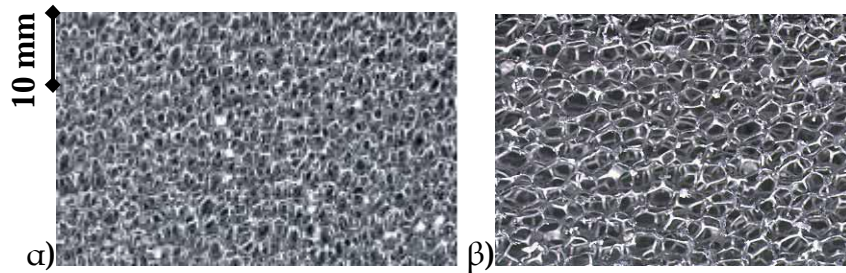
Μέχρι να οδηγηθούν όμως οι ερευνητές στην υιοθέτηση της δομής που προτείνουν οι **Weaire and Phelan, (1994)** για τη γεωμετρία του μεταλλικού αφρού, κατά καιρούς προτάθηκαν διάφορες εκδοχές για τη δομή που παρουσιάζουν τα κελιά που συνιστούν τους μεταλλικούς αφρούς ανοικτής δομής και τα χαρακτηριστικά που παραμετρικά αλλάζουν στη δομή ενός τέτοιου αφρού ανοικτού κελιού συναρτήσει των τιμών κάποιων ιδιοτήτων τους που δίνονται αμέσως ακολούθως. Έτσι, οι **Ozmat et al., (2004)**, (σε δημοσίευση εκ μέρους της κατασκευάστριας εταιρείας μεταλλικών αφρών **ERG**) υποστηρίζουν πως το σχήμα του κελιού του μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής είναι το δωδεκάεδρο, ενώ η ίδια η **ERG (ERG-Duocel ®)** στο διαδικτυακό της τόπο, δηλώνει σαν σχήμα των κελιών για τους μεταλλικούς αφρούς που κατασκευάζει το δεκατετράεδρο.

Εξάλλου από τα βασικά χαρακτηριστικά που αναφέρεται ανωτέρω πως επηρεάζουν και τη δομή των μεταλλικών αφρών ανοικτού κελιού και που καθορίζουν την κατηγοριοποίηση των μεταλλικών αφρών και δίνουν μια τάξη για το μέγεθός τους είναι ο αριθμός των πόρων που διαθέτει ένας μεταλλικός αφρός σε μήκος μιας ίντσας και έχει το ακρωνύμιο **PPI =Pores Per (linear) Inch**. Αυτός ο ορισμός περιέχει αρκετή δόση ασάφειας με τους διάφορους ερευνητές να μην συμφωνούν ως προς το μέγεθος του κελιού που αντιστοιχεί σε δεδομένη τιμή **PPI (Boomsma, 2003, Ozmat et al., 2004 και Boomsma και Poulidakos, 2002)**, (Σχήμα 4-3). Είναι χαρακτηριστικό ότι μέχρι πρόσφατα στη διεθνή βιβλιογραφία το μέγεθος που αναφέρονταν ως «**pore diameter**» έπρεπε ουσιαστικά να είναι το «**cell diameter**» αφού η διαίρεση του αριθμού των κελιών με το μήκος της μιας ίντσας δεν έδινε τη διάμετρο του κελιού που αναφέρονταν στη διεθνή βιβλιογραφία με αποτέλεσμα την παραπλάνηση του ερευνητή (οι αρχικές προσπάθειες μοντελοποίησης της γεωμετρίας στη συγκεκριμένη διατριβή έδωσαν ουσιαστικά τη δομή μεταλλικού αφρού **60 PPI** ενώ πιστευόνταν ότι αντιστοιχούσε σε **10PPI** ακριβώς λόγω αυτής της παραπλάνησης!). Χαρακτηριστικά αναφέρεται ότι η διαίρεση των **10** πόρων ανά μήκος ίντσας

(10PPI) δίνει διάμετρο πόρου **2,54 mm**, ενώ η εταιρεία **ERG** κατασκευάζει στα **10PPI** τεμάχια μεταλλικού αφρού τα οποία μετρήθηκαν υπό τους **Boomsma and Poulidakos, (2002)** δίνοντας την τιμή των **6,9 mm**. Ωστόσο τα PPI είναι από τους πρωταρχικούς τρόπους αναγνώρισης του μεγέθους ενός μεταλλικού αφρού υπό την έννοια ότι ένας μεταλλικός αφρός με πολλούς πόρους ανά ίντσα είναι πιο πυκνός και με μικρότερη διάμετρο κελιού από έναν αντίστοιχο με λιγότερους πόρους ανά ίντσα (Σχήμα 4-3). Έτσι όσο πιο πολλά τα PPI, τόσο πιο πυκνός ο αφρός και με τόσο πιο μικρό μέγεθος ο κάθε πόρος-κελί αυτού (Σχήμα 4-4). Οι διαμέτρους που αναφέρονται ως διάμετρος πόρου σε αυτή την εργασία είναι ουσιαστικά οι διαμέτρους κελιού ακολουθώντας τους (λανθασμένους) έως τώρα χαρακτηρισμούς της διεθνούς βιβ/φίας.



Σχήμα 4-3: Πόρος και κελί μεταλλικού αφρού.



Σχήμα 4-4: α) Μεταλλικός αφρός 40 PPI β) μεταλλικός αφρός 10 PPI.

Δεύτερο βασικό χαρακτηριστικό της κατηγοριοποίησης του μεταλλικού αφρού είναι το πορώδες, ϵ , ($\epsilon = \frac{V_t - V_s}{V_s}$) το οποίο ουσιαστικά αντιστοιχεί στο ποσοστό κενού που περιέχεται στον όγκο που καταλαμβάνει ένα κομμάτι μεταλλικού αφρού. Με το πορώδες συνδέεται ένα άλλο χαρακτηριστικό μέγεθος των μεταλλικών αφρών ανοικτής δομής, η διαπερατότητα K (βλ. και ενότητα 2 & 3). Το πορώδες επηρεάζει και το σχήμα της διατομής των συνδέσμων (**ligaments**) σύμφωνα με τους **Bhattacharya et al., (2002)** και την **ERG**, δίνοντας στενότερη και διαφορετικού σχήματος διατομή όσο το πορώδες αυξάνει (Σχήμα 4-5).

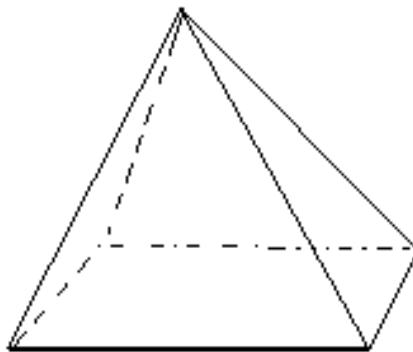


Σχήμα 4-5: Διατομή των συνδέσμων (**ligaments**) για μεταλλικούς αφρούς ανοικτού κελιού με πορώδες $\epsilon = 97\%$, **94-92%**, **90-88%** και **85%** αντίστοιχα, (**ERG**)

Για να δοθεί μια πιο εμπειριστατωμένη εικόνα για τη στερεομετρία που αναφέρθηκε, ακολουθούν κάποια στοιχεία θεωρίας στις αμέσως επόμενες παραγράφους.

4.2.1. Κανονικά και μη κανονικά πολύεδρα-στοιχεία θεωρίας στερεομετρικών σχημάτων

Πολύεδρο, στη γεωμετρία, είναι ένα στερεό που περικλείεται από επίπεδες επιφάνειες με κάθε επιφάνεια να ορίζεται από ευθύγραμμα τμήματα. Με άλλα λόγια πολύεδρο είναι ένα στερεό που περιβάλλεται από πολύγωνα. Κάθε μία από τις επίπεδες επιφάνειες λέγεται έδρα και κάθε ένα από τα ευθύγραμμα τμήματα των πολυγώνων λέγεται ακμή. Το σημείο τομής δύο ακμών λέγεται κορυφή. Στο Σχήμα 4-6 βλέπουμε ένα παράδειγμα πολυέδρου: μια πυραμίδα με μια τετράγωνη έδρα-βάση και τέσσερις τριγωνικές πλευρικές έδρες. (Καλαμαράς, http://nicomedia.math.upatras.gr/~oxy/symmetry/symmetry_chap4.pdf).



Σχήμα 4-6: Παράδειγμα πολυέδρου (πυραμίδα με τετράγωνη βάση)

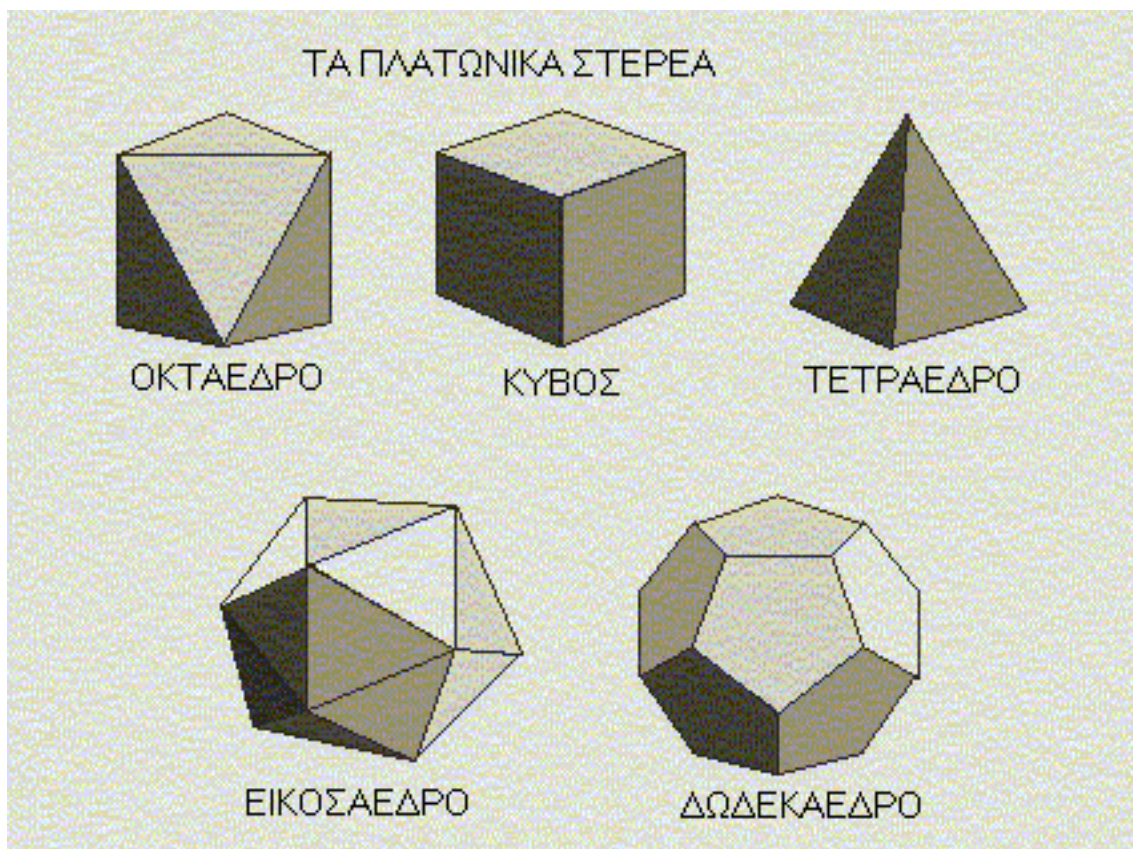
Ένα κυρτό πολύεδρο είναι το πολύεδρο στο οποίο μια ακμή μεταξύ δύο κορυφών περνά μόνο από σημεία που είτε βρίσκονται σε έδρα του πολυέδρου είτε στο εσωτερικό του. Ένα κυρτό πολύεδρο θα λέγεται κανονικό όταν όλες οι έδρες του είναι κανονικά πολύγωνα, ίσα μεταξύ τους. Δηλαδή ένα κανονικό πολύεδρο είναι ένα στερεό που έχει ίσες τις έδρες του, ίσες ακμές, ίσες στερεές γωνίες και επιπλέον εγγράφεται σε σφαίρα. Σε αντίθεση με τα κανονικά πολύγωνα, που είναι άπειρα σε αριθμό αφού για κάθε ακέραιο n μπορούμε να κατασκευάσουμε αντίστοιχο κανονικό n -γωνο, τα κανονικά πολύεδρα είναι πεπερασμένου πλήθους. Τα μόνα κανονικά πολύεδρα, (καλούμενα και «Πλατωνικά», από τον

διάλογο «Τιμαίος» του Πλάτωνα, στον οποίο ο Πλάτων θεωρεί ότι κάθε ένα εκ των συστατικών στοιχείων του κόσμου, δηλ. αέρας, γη, φωτιά και νερό αποτελούνται από μόρια που η μορφή τους αντιστοιχεί σε κάποιο από τα 4 εκ των 5 κανονικών πολυέδρων), είναι πέντε, των οποίων τα ονόματα και οι λεπτομέρειες αναγράφονται πινακοποιημένα (Πίνακας 4-1). Παρατηρούμε ότι ο κύβος έχει έδρες τετράγωνα και το δωδεκάεδρο πεντάγωνα ενώ τα υπόλοιπα τρία έχουν έδρες ισόπλευρα τρίγωνα.

ΠΛΑΤΩΝΙΚΑ ΣΤΕΡΕΑ			
	Κορυφές	Ακμές / ανά κορυφή	Έδρες / ανά κορυφή
Τετράεδρο	4	6 (3 ανά κορυφή)	4 ίσα τρίγωνα (3 ανά κορυφή)
Οκτάεδρο	6	12 (4 ανά κορυφή)	8 ίσα τρίγωνα (4 ανά κορυφή)
Κύβος	8	12 (3 ανά κορυφή)	6 τετράγωνα (3 ανά κορυφή)
Εικοσάεδρο	12	30 (5 ανά κορυφή)	20 ίσα τρίγωνα (5 ανά κορυφή)
Δωδεκάεδρο	20	30 (3 ανά κορυφή)	12 πεντάγωνα (3 ανά κορυφή)

Πίνακας 4-1: Κανονικά Πολύεδρα (Πλατωνικά Στερεά)

Για κανονικά πολυέδρα, η αλγεβρική σχέση που συνδέει τις κορυφές κ , τις ακμές α και τις έδρες ϵ είναι $\kappa + \epsilon = \alpha + 2$. Για παράδειγμα, ο κύβος έχει **6** έδρες, **8** κορυφές και **12** ακμές. Η σχέση αυτή λέγεται χαρακτηριστική **Euler** της επιφάνειας ενός πολυέδρου. Στο παρακάτω σχήμα (Σχήμα 4-7) φαίνονται και τα πέντε κανονικά πολυέδρα:

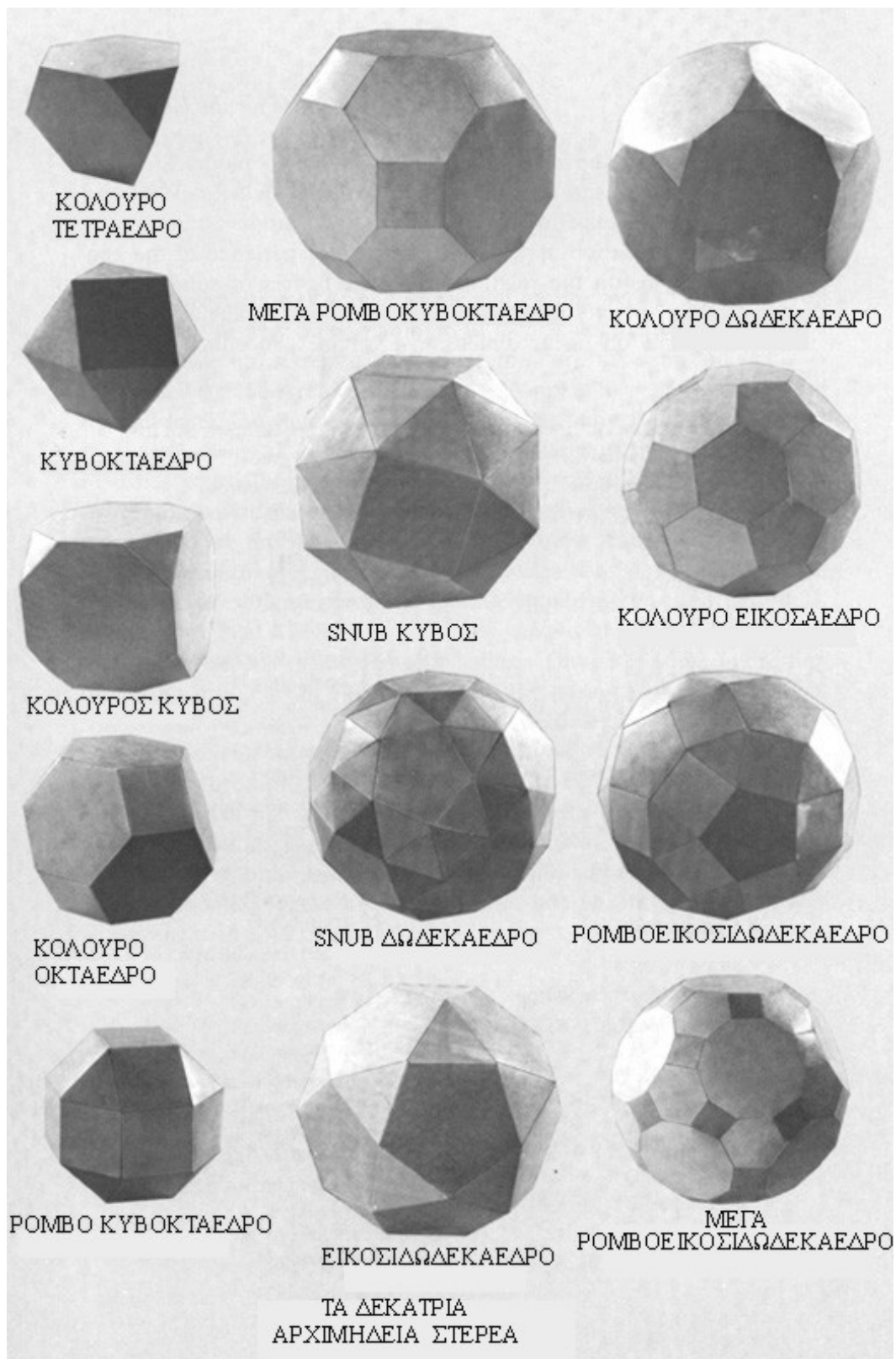


Σχήμα 4-7: Απεικόνιση στον 3-διάστατο χώρο των Πλατωνικών στερεών

Εκτός από τα κανονικά πολύεδρα, που είναι κυρτά και συνεχή υπάρχουν και άλλα πολύεδρα τα οποία είτε είναι ημι-κανονικά είτε δεν είναι κανονικά. Από αυτά όσα μπορούν να κατασκευαστούν από τα 5 κανονικά, επεκτείνοντας τις έδρες τους μέχρι να σχηματίσουν ένα είδος «αστέρα», καλούνται Αστέρες Πολύεδρα. Ένας άλλος τρόπος να δημιουργηθούν μη κανονικά στερεά είναι κόβοντας τις γωνίες των πλατωνικών στερεών. Προκύπτουν έτσι δεκατρία ημι-κανονικά στερεά, τα οποία επίσης εγγράφονται σε σφαίρα, και έχουν έδρες δύο ή τρία διαφορετικά είδη κανονικών πολυγώνων (τρίγωνα, τετράγωνα, πεντάγωνα, εξάγωνα, οκτάγωνα ή δεκάγωνα). Ο Αρχιμήδης μελέτησε τα δεκατρία αυτά ημι-κανονικά πολύεδρα και γι' αυτό φέρουν το όνομά του. Πινακοποιημένα (Πίνακας 4-2) παρουσιάζονται τα χαρακτηριστικά τους ενώ στο επόμενο σχήμα (Σχήμα 4-8) γίνεται η εποπτική τους παρουσίαση.

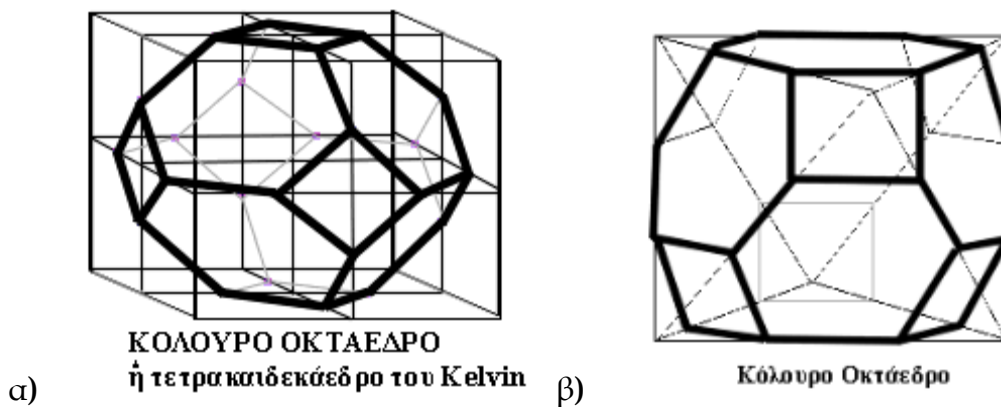
ΗΜΙΚΑΝΟΝΙΚΑ ΑΡΧΙΜΗΔΕΙΑ ΣΤΕΡΕΑ		
Αριθμός Κορυφών	Ακμές / ανά κορυφή	Πλήθος & είδος εδρών
12	18 / 3	4 εξάγωνα, 4 τρίγωνα
12	24 / 4	6 τετράγωνα, 8 τρίγωνα
30	60 / 4	12 πεντάγωνα, 20 τρίγωνα
24	36 / 3	8 εξάγωνα, 6 τετράγωνα
24	36 / 3	6 οκτάγωνα, 8 τρίγωνα
60	90 / 3	20 εξάγωνα, 12 πεντάγωνα
60	90 / 3	12 δεκάγωνα, 20 τρίγωνα
24	48 / 4	18 τετράγωνα, 8 τρίγωνα
60	120 / 4	12 πεντάγωνα, 30 τετράγωνα και 20 τρίγωνα
48	72 / 3	6 οκτάγωνα, 8 εξάγωνα και 12 τετράγωνα
120	180 / 3	12 δεκάγωνα, 20 εξάγωνα και 30 τετράγωνα
24	60 / 5	6 τετράγωνα, 32 τρίγωνα
60	150 / 5	12 πεντάγωνα, 80 τρίγωνα

Πίνακας 4-2: Αρχιμήδεια Στερεά



Σχήμα 4-8: Απεικόνιση των Αρχιμήδειων (μη κανονικών) πολύεδρων.

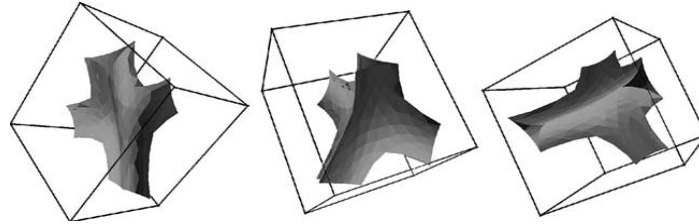
Ιδιαίτερη σημασία για την παρούσα διατριβή έχει το κόλουρο οκτάεδρο ή τετρακαιδεκάεδρο του **Kelvin** το οποίο είναι ένα από τα σημαντικότερα Αρχιμήδεια πολύεδρα (**Ghyka, 1977**). Το κόλουρο Οκτάεδρο ή τετρακαιδεκάεδρο του Κέλβιν ή επταπαράλληλόεδρο του **Fedorov** (συμψωματικά το κυβοκτάεδρο είναι ένα τετρακαιδεκάεδρο που έχει **14** έδρες) έχει **24** κορυφές, **36** ακμές, **14** έδρες από τις οποίες **8** είναι εξάγωνα και **6** είναι τετράγωνα (Σχήμα 4-9). Η **Ghyka (Ghyka, 1977)** αναφέρει ότι είναι το μόνο ανάμεσα στα δεκατρία Αρχιμήδεια στερεά που μπορεί να συμπληρώσει το χώρο με επανάληψη, δηλαδή να καλυφθεί όλος ο χώρος από το ίδιο στερεό σε πυκνή στοιχίση χωρίς κενά, ενώ από τα πέντε πλατωνικά στερεά μόνο ο κύβος έχει την ίδια ιδιότητα. Αυτό το πολύεδρο μπορεί να παραχθεί διαιρώντας κάθε ακμή ενός οκτάεδρου σε τρία ίσα μέρη και ενώνοντας τα σημεία που προκύπτουν, όπως στο σχήμα (Σχήμα 4-9) (Καλαμαράς, http://nicomedia.math.upatras.gr/~oxy/symmetry/symmetry_chap4.pdf).



Σχήμα 4-9: α) Το 14εδρο του **Kelvin**, β) Πρωτογενής αναπαραγωγή του 14εδρου του **Kelvin**

Επομένως, το κόλουρο οκτάεδρο έχει και αυτό την ίδια ομάδα συμμετρίας με τον κύβο και το οκτάεδρο, την οκταεδρική με **48** συμμετρίες. Μία πολύ χαρακτηριστική γεωμετρική ιδιότητα που διαθέτει το συγκεκριμένο στερεομετρικό σώμα, είναι ότι ικανοποιεί τους κανόνες **Plateau, (Boomsma et al., 2003)** οι οποίοι απαντώνται στη φύση στις ενώσεις μεμβρανών αφρών. Αυτοί οι

κανόνες ορίζουν πως οι επιφάνειες που περικλείουν τα κελιά ενώνονται υπό γωνία 120° και οι γραμμές στις ενώσεις των επιφανειών ενώνονται υπό γωνία $\arccos(-1/3)$ η οποία καλείται και «τετραεδρική γωνία» (Weaire και Phelan, 1994), (Σχήμα 4-10).



Σχήμα 4-10: Οι κανόνες **Plateau**, θέλουν τις γραμμές που σχηματίζονται από την ένωση των επιφανειών του δεκατετράεδρου στο χώρο να ενώνονται υπό γωνία $\arccos(-1/3)$

Τέλος, μπορεί κανείς να κατασκευάσει το κόλουρο οκτάεδρο ξεκινώντας από **8** συνενωμένους κύβους, που δημιουργούν ένα μεγάλο κύβο, διαιρώντας σε δύο ίσα μέρη κάθε μια από τις **4** ακμές των μικρών κύβων που συναντώνται στο κέντρο κάθε έδρας του μεγάλου κύβου και ενώνοντας μεταξύ τους τα σημεία που προκύπτουν (Σχήμα 4-9).

4.2.2. Λογισμικό Προσομοίωσης Επιφανειών

Διαμορφούμενων από Επιφανειακές Τάσεις (**Surface Evolver**)

Το **Surface Evolver (Brakke, 1992)** είναι ένα λογισμικό για τη μελέτη επιφανειών που λαμβάνουν το σχήμα τους από την επίδραση των επιφανειακών τάσεων και άλλων μορφών ενέργειας που συνυπάρχουν στην επιφάνεια κάθε σώματος που μελετάται. Κάθε επιφάνεια περιγράφεται σαν σύνολο στοιχειωδών τριγώνων (**facets**).

Η συνολική ενέργεια (κάθε μορφή αυτής) υπολογίζεται σαν συνάρτηση της θέσης κάθε σημείου (**vertex**) που απαρτίζει τις ακμές (**edges**) που περικλείουν

κάθε επιφάνεια. Υπολογίζεται η παράγωγος της συνολικής ενέργειας ως προς κάθε μία από τις συντεταγμένες ($\frac{dE_{ol}}{di}$, $\mathbf{i} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$) και το αρνητικό αποτέλεσμα αυτής της πράξης καλείται «δύναμη» από το πρόγραμμα. Κάθε σημείο λοιπόν μετά το τέλος μιας επανάληψης υπολογισμού αυτής της παραγώγου, μετατοπίζεται σύμφωνα με την δύναμη αυτή ($-\frac{dE_{ol}}{di}$, $\mathbf{i} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$). Η νέα θέση του κάθε σημείου επανακαθορίζει την επιφανειακή ενέργεια της επιφάνειας την οποία ορίζουν συγκεκριμένα σημεία και η ολική ενέργεια εκφράζεται σαν συνάρτηση της θέσης για κάθε σημείο κ.ο.κ. Η διαδικασία σταματάει όποτε θελήσει ο χρήστης, όμως από ένα σημείο και μετά η επιφανειακή ενέργεια του σώματος το οποίο εξετάζεται δεν επηρεάζεται και παραμένει σταθερή (ισορροπούν οι δυνάμεις).

Ο χρήστης ορίζει μια αρχική επιφάνεια (ή επιλέγει μία από τα διαθέσιμα αρχεία περιγραφής επιφανειών/σωμάτων που διαθέτει το **Surface Evolver**) και η αριθμητική μεθοδολογία που περιγράφηκε ανωτέρω την εξελίσσει προς την επιφάνεια με την ελάχιστη ενέργεια με μια μέθοδο μείωσης της παραγώγου της συνολικής ενέργειας (**gradient descent**). Η αρχική αυτή επιφάνεια αποτελεί μια πολλαπλότητα (**varifold**) η οποία δεν είναι δισδιάστατη μαθηματικά, αποτελείται όμως από στοιχειώδεις επιφάνειες οι οποίες είναι δισδιάστατες στον Ευκλείδειο χώρο. Η εξέλιξη λοιπόν της επιφάνειας επέρχεται μέσω της βαθμιαίας μείωσης και εν τέλει ελαχιστοποίησης της επιφανειακής της ενέργειας (με τη βοήθεια και της θεωρίας της μέσης κυρτότητας). Η ενέργεια για το **Surface Evolver** μπορεί να είναι συνδυασμός της επιφανειακής τάσης, της βαρυτικής ενέργειας, της τετραγωνικής μέσης κυρτότητας H^2 , ($H = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$), με \mathbf{k}_1 και \mathbf{k}_2 τις κύριες καμπυλότητες σε δεδομένο σημείο μιας επιφάνειας \mathbf{S} , ήτοι τη μέγιστη και την ελάχιστη εξ'όλων των καμπυλοτήτων που ορίζονται για το συγκεκριμένο σημείο) και διαφόρων επιφανειακών ή κομβικών ενεργειών που ορίζει ο χρήστης, όπως θα αναλυθεί περαιτέρω πιο κάτω. Το λογισμικό είναι γραμμένο σε γλώσσα

προγραμματισμού **portable C**, έχει δε ενσωματωμένο γραφικό περιβάλλον **OpenGL/GLUT** για οπτική επίδειξη της εξέλιξης- μεταβολής μιας επιφάνειας κατά την μείωση της επιφανειακής της ενέργειας.

Τα βασικά γεωμετρικά στοιχεία που χρησιμοποιούνται για να περιγραφεί μια επιφάνεια στο **Surface Evolver** είναι οι «κορυφές» (**vertices**), οι ακμές (**edges**), οι έδρες (**facets**) και τα στοιχειώδη σώματα (**bodies**). Οι «κορυφές» είναι σημεία στον Ευκλείδιο τρισδιάστατο χώρο. Οι ακμές είναι τμήματα ευθειών γραμμών που ενώνουν ζευγάρια «κορυφών». Οι έδρες είναι επίπεδα τρίγωνα οριοθετημένα από 3 ακμές. Μια επιφάνεια είναι ένωση εδρών (στην πραγματικότητα δεν υπάρχει ξεχωριστή οντότητα 'επιφάνεια' στο λογισμικό· όλες οι έδρες αναγκαστικά ανήκουν σε κάποια «λογική» επιφάνεια). Ένα στοιχειώδες σώμα ορίζεται από τις έδρες που το περικλείουν. Ο όρος «επιφάνεια», όταν χρησιμοποιείται για να αναφερθεί η επιφάνεια στην οποία το **Surface Evolver** ενεργεί, αναφέρεται σε όλα τα γεωμετρικά στοιχεία συν τα βοηθητικά δεδομένα όπως περιορισμοί κίνησης, όρια και δυνάμεις. Δεν υπάρχουν περιορισμοί ως προς το πόσες επιφάνειες μπορούν να μοιράζονται μια «κορυφή», ούτε πόσες έδρες μπορούν να μοιράζονται μια ακμή. Έτσι είναι πιθανές και τυχαίες επιφάνειες, περιλαμβανομένων τριπλών ενώσεων όπως εμφανίζονται σε χαρακτηριστικές επιφάνειες μεμβράνης αφρού σαπουνάδας.

Κάθε επιφάνεια θεωρείται ότι έχει κάποια συνολική ενέργεια σαν άθροισμα επιφανειακής τάσης, βαρυτικής ενέργειας και άλλων πιθανών πηγών. Αυτήν ακριβώς την ενέργεια ελαχιστοποιεί το **Surface Evolver** σε μια διαδικασία επαναλήψεων n εξελικτικών βημάτων. Η 'κίνηση' του κάθε σημείου (**vertex**) στο τέλος κάθε βήματος υπολογίζεται ως ακολούθως: Αρχικά υπολογίζεται η «δύναμη» που αντιστοιχεί σε κάθε κορυφή (**vertex**) από την παράγωγο της συνολικής ενέργειας της επιφάνειας στην θέση της κορυφής αυτής ($-\frac{dE_{ol}}{di}$, $\mathbf{i} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$). Η «δύναμη» δίνει την κατεύθυνση της κίνησης. Ωστόσο, αν εφαρμόζονται περιορισμοί σε κάποιους κόμβους, σε αυτούς η διαδικασία αλλάζει: υπολογίζεται

η παράγωγος της ποσότητας που βρίσκεται σε περιορισμό (πχ σταθερός όγκος) και πολλαπλασιάζεται με ένα συντελεστή. Το άθροισμα των γινομένων του συντελεστή αυτού επί την αντίστοιχη παράγωγο της τιμής της ποσότητας δίνει την τιμή της μετατόπισης στους κόμβους που έχουν κάποιο περιορισμό τιμής και δε μπορεί να εφαρμοστεί η απλή διαδικασία, ώστε η τελική τιμή της ποσότητας υπό περιορισμό να παραμένει κατά προσέγγιση η ίδια.

Τέλος στη γενική περίπτωση, η πραγματική κίνηση βρίσκεται πολλαπλασιάζοντας τη «δύναμη» με ένα συνολικό συντελεστή (είτε τον ορίζει ο χρήστης, είτε επιλέγεται αυτόματα).

Η συνολική ενέργεια της επιφάνειας μπορεί να αποτελείται από διάφορες συστατικές επί μέρους ενέργειες, οι κυριότερες των οποίων είναι :

- 1. Επιφανειακή τάση.** Μεμβράνες (αφρού) σαπουνιού και διεπιφάνειες μεταξύ διαφορετικών ρευστών έχουν ενεργειακό περιεχόμενο ανάλογο του εμβαδού τους και συρρικνώνονται ώστε να ελαχιστοποιήσουν την ενέργειά τους. Η ενέργεια ανά μονάδα επιφάνειας ή δύναμη ανά μονάδα μήκους μπορεί επίσης να θεωρηθεί σαν επιφανειακή τάση. Κάθε έδρα (**facet**) έχει αρχικά επιφανειακή τάση ίση με **1** εκτός κι αν ορίζεται διαφορετικά στο αρχείο από το οποίο εισάγεται η αρχική τοπολογία. Διαφορετικές έδρες μπορεί να έχουν διαφορετικές επιφανειακές τάσεις. Η συνεισφορά στη συνολική ενέργεια είναι το άθροισμα των γινομένων του εμβαδού κάθε έδρας επί την αντίστοιχη επιφανειακή τάση. Η επιφανειακή τάση μιας έδρας μπορεί επίσης να εξαρτάται από τη φάση των στοιχειωδών σωμάτων που διαχωρίζει.
- 2. Βαρυτική Δυναμική Ενέργεια.** Αν ένα στοιχειώδες σώμα έχει πυκνότητα , τότε συνεισφέρει τη βαρυτική του ενέργεια στη συνολική. Η επιτάχυνση της βαρύτητας **g** σαν τιμή είναι στην κρίση του χρήστη. Αν είναι ρ η πυκνότητα του στοιχειώδους σώματος, η (βαρυτική) ενέργειά του ορίζεται σαν:

$$E = \iiint_{body} g r z dV$$

(4-1)

Αλλά υπολογίζεται χρησιμοποιώντας το Θεώρημα του **Green** στο χώρο ως εξής

$$E = \iint_{\text{surface}} g r \frac{z^2}{2} \vec{k} \cdot \vec{dS}$$

(4-2)

Η ολοκλήρωση γίνεται για κάθε έδρα (**facet**) που περικλείει ένα στοιχειώδες σώμα. Αν μια έδρα ανήκει σε δύο στοιχειώδη σώματα με διαφορετική πυκνότητα, χρησιμοποιείται η κατάλληλη διαφορά στην πυκνότητα. Οι έδρες που κείνται στο επίπεδο με $z=0$ δε συνεισφέρουν και μπορούν να παραληφθούν. Μπορούν να παραληφθούν και οι έδρες που βρίσκονται σε περιορισμούς αν η συνεισφορά τους σε βαρυτική ενέργεια περιλαμβάνεται στα ενεργειακά ολοκληρώματα των περιοριστικών συνθηκών.

3. Ενέργεια ορισμένη από το χρήστη. Περιλαμβάνει μορφές ενέργειας που για οποιοδήποτε λόγο αφορούν ή ανήκουν σε μια επιφάνεια. Ορίζονται είτε στο αρχείο εισόδου της τοπολογίας ή διαδραστικά από το χρήστη.

4. Ολοκληρώματα ακμών που υπόκεινται σε περιορισμούς. Μια ακμή που υπακούει σε οριακή συνθήκη μπορεί να έχει ενέργεια που δίνεται από την ολοκλήρωση ενός διανυσματικού πεδίου \vec{F} επί της προσανατολισμένης ακμής:

$$E = \int_{\text{edge}} \vec{F} \cdot \vec{dl}$$

(4-3)

Η ολοκλήρωση χρησιμοποιεί τον εγγενή προσανατολισμό της ακμής, οπότε κατά περίπτωση, η τιμή της μπορεί να γίνεται και αρνητική. Αυτό είναι χρήσιμο για προκαθορισμένες γωνίες επαφής σε τοιχώματα (στη θέση εδρών τοιχωμάτων με ισοδύναμη τάση) και για βαρυτική δυναμική ενέργεια που σε άλλη περίπτωση θα απαιτούσε οριακές συνθήκες εδρών.

5. Περιορισμοί κυρτότητας. Ας θεωρηθεί μία μεμβράνη αφρού σαπουνάδας που περιβάλλει έναν κύλινδρο. Η μεθοδολογία πρέπει να προσεγγίσει αυτή την επιφάνεια με ένα σύνολο από έδρες. Οι ευθείες ακμές αυτών των εδρών δεν μπορούν να ακολουθήσουν επακριβώς το κυρτό τοίχωμα και έτσι η υπολογισμένη έκταση της επιφάνειας αφήνει κενά μεταξύ των εξωτερικών ακμών

και του τοιχώματος του κυλίνδρου. Στην προσπάθεια ελαχιστοποίησης της επιφάνειας από το λογισμικό, μετακινούνται οι εξωτερικές «κορυφές» κύκλωθεν αλλά η αύξηση στα κενά που έχουν δημιουργηθεί οδηγεί τελικά στην κατάρρευση κάθε τέτοιας επιφάνειας σε ευθεία γραμμή. Προς αποφυγή του φαινομένου αυτού υπάρχει μέριμνα για ύπαρξη ‘ενεργειακού κενού’. Σε κάθε ακμή με τέτοιο περιορισμό, η ενέργεια υπολογίζεται σαν

$$E = k \left\| \vec{S} \times \vec{Q} \right\| / 6 \quad (4-4)$$

όπου \vec{S} είναι το διάνυσμα της ακμής και \vec{Q} η προβολή της ακμής στο εφαπτόμενο επίπεδο του ορίου στο τέλος του διανύσματος της ακμής. Η σταθερά k καλείτε ως ‘σταθερά κενού’. Σταθερά κενού ίση με 1 δίνει την καλύτερη προσέγγιση στην πραγματική έκταση του κενού. Μεγαλύτερη τιμή για αυτήν ελαχιστοποιεί τα κενά και φέρει τις «κορυφές» σύμμορφα διατεταγμένες κατά μήκος του ορίου. Η ενέργεια κενού μειώνεται με τετραπλάσιο ρυθμό (σε σχέση με τις υπόλοιπες ενέργειες) όσο η επιφάνεια «εξευγενίζεται». Αυτό σημαίνει ότι ένας «εξευγενισμός» (**refinement**) μειώνει την ενέργεια του κενού στο ένα τέταρτο.

6. Συμπιεστά σώματα. Αν είναι ενεργοποιημένη η ιδιότητα ιδανικού αερίου για το σώμα που μελετάται, τότε κάθε στοιχειώδες σώμα συνεισφέρει ενέργεια

$$E = P_{amb} \cdot V_o \cdot \ln(V/V_o) \quad (4-5)$$

Όπου P_{amb} η πίεση περιβάλλοντος, V_o ο όγκος που περιγράφεται στο αρχείο εισόδου (έναρξης) και V ο πραγματικός όγκος του στοιχειώδους σώματος. Για να ληφθεί υπόψιν και το έργο που παράγεται αντίθετα στην πίεση περιβάλλοντος, κάθε στοιχειώδες σώμα έχει μια αρνητική συνεισφορά ίση με:

$$E = - P_{amb} \cdot V \quad (4-6)$$

7. **Προκαθορισμένη πίεση.** Κάθε στοιχειώδες σώμα με προκαθορισμένη πίεση **P** συνεισφέρει ενέργεια

$$E = P \cdot V$$

(4-7)

Όπου **V** ο πραγματικός όγκος του στοιχειώδους σώματος. Από τα συστατικά στοιχεία της συνολικής ενέργειας και με στόχο την ελαχιστοποίησή της, πρέπει να μεταβληθεί το σχήμα του εκάστοτε σώματος, πράγμα που αναλαμβάνει να κάνει η **κίνηση**.

Συμπερασματικά για την κίνηση των κόμβων (**vertex**), μπορεί να αναφερθεί ότι είναι η 'καρδιά' του **Surface Evolver**: το επαναληπτικό βήμα που μειώνει την ενέργεια ενώ υπόκειται στις όποιες οριακές συνθήκες. Η επιφάνεια αλλάζει μετακινώντας τις «κορυφές». Δε γίνονται αλλαγές στην τοπολογία ή την τριγωνοποίηση. Η ιδέα είναι να υπολογιστεί η ταχύτητα (δηλαδή η προαναφερθείσα «δύναμη») σε κάθε «κορυφή» και να μετακινηθεί η «κορυφή» σε αυτή την κατεύθυνση. Η «δύναμη» είναι η αρνητική παράγωγος της ενέργειας όπως προαναφέρθηκε.

Για την περίπτωση του μεταλλικού αφρού που μοντελοποιήθηκε, θεωρήθηκε ότι δεν υφίσταται την επίδραση της βαρύτητας και το τελικό στερεομετρικό σχήμα που προέκυψε είναι προϊόν μόνο της επίδρασης και ελαχιστοποίησης της επιφανειακής τάσης (**ERG, Boomsma et al., 2003**). Η επίδραση της βαρύτητας, σε συνδυασμό και με την αλλαγή της τιμής της επιφανειακής τάσης θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για να ελεγχθεί το πορώδες της τελικής γεωμετρίας, κάτι το οποίο δεν έγινε στην παρούσα μελέτη.

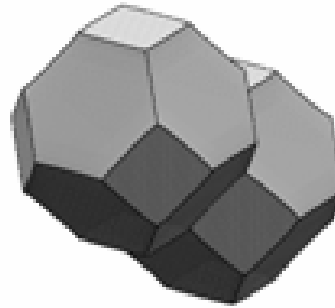
4.2.3. Κατασκευή, επαναληψιμότητα και διαστάσεις γεωμετρικού προτύπου μεταλλικού αφρού

Για την κατασκευή της γεωμετρίας του μεταλλικού αφρού ανοικτού κελιού (**open cell metal foam**) ακολουθήθηκε η διαδικασία που χρησιμοποίησαν και οι

Boomsma et al., (2003) για τον ίδιο σκοπό. Έγινε χρήση του λογισμικού **Surface Evolver**, που έχει αποδειχθεί ότι δίνει τη δομή με τη μικρότερη επιφάνεια στο σύνολο ισόογκων σωμάτων που στοιβάζονται σε δεδομένο χώρο (**Weaire and Phelan,1994**). Αφού η κατασκευάστρια εταιρεία (**ERG**) δηλώνει πως το υλικό αυτό αποτελείται από ισόογκα κελιά και είναι ισότροπο, ακολουθήθηκε η εξής πορεία κατασκευής: περιγράφηκε μαθηματικά η γεωμετρία (**Surface Evolver, Brakke,1992**) και δημιουργήθηκε ένα πρώτο τοπολογικό μοντέλο, το οποίο όμως δεν ήταν άμεσα εξαγωγίμο σε **CAD-CAE** σύστημα για την περαιτέρω επεξεργασία του (καθαρισμός τοπολογικών σφαλμάτων καλούμενως διεθνώς και «**geometry clean-up**» και διακριτοποίηση). Έτσι, με τη βοήθεια του λογισμικού **Surface Evolver, (Brakke,1992)**, χρησιμοποιήθηκε μακροεντολή που δημιουργεί ένα αρχείο που περιέχει κώδικα με εντολές συγκεκριμένου **CAE** συστήματος. Έπειτα, εκτελέστηκε αυτός ο κώδικας στο σύστημα **CAE** για να εξαχθεί σε μορφή ουδέτερου αρχείου (**iges file**), το οποίο εισήχθη τελικά σε πρόγραμμα χωρικής διακριτοποίησης και μοντελοποίησης ροής. Εκεί επιβλήθηκαν οι κατάλληλες γεωμετρικές παράμετροι, οι απαραίτητες οριακές επιφάνειες μετά τη διακριτοποίηση και ετοιμάστηκε γενικότερα το μοντέλο για επίλυση του ροϊκού και θερμοκρασιακού πεδίου, κατά περίπτωση και για το εσωτερικό του υλικού του πλέγματος του μεταλλικού αφρού. Η διαδικασία περιγράφεται αναλυτικά στις αμέσως επόμενες παραγράφους.

Επιστρέφοντας στο θέμα της γεωμετρίας μικροκλίμακας του μεταλλικού αφρού, τονίζεται ότι η κρατούσα αντίληψη για τη γεωμετρία που δίνει την ελάχιστη επιφάνεια σε σχέση με την τακτοποίηση και πλήρωση σωμάτων ίσου όγκου σε δεδομένο χώρο, μέχρι το **1995** ήταν πως αυτή είναι το δεκατετράεδρο (κόλουργο οκτάεδρο) (Σχήμα **4-11** καθώς και Σχήμα **4-9**, Σχήμα **4-8**), το οποίο αποτελείται από **6** τετράπλευρες και **8** εξάπλευρες έδρες. Το συμπέρασμα για το βέλτιστο της γεωμετρίας αυτής οφείλονταν σε μια πραγματεία του Λόρδου Κέλβιν (**W. Thomson, 1887**), ο οποίος μελέτησε το ζήτημα πρακτικά, στοιβάζοντας μπιζέλια σε ένα βάζο και παρατηρώντας την τοπολογία που αυτά

έπαιρναν, καταλήγοντας έτσι στο συμπέρασμα περί δεκατετράεδρου. Ωστόσο το 1994, οι **Weaire** και **Phelan**, απέδειξαν μαθηματικά με τη χρήση του **Surface Evolver (Brakke, 1992)**, ότι η υπόθεση αυτή είναι λανθασμένη.



Σχήμα 4-11: Ένωση δύο δεκατετράεδρων (τετρακαιδεκάεδρο, κόλouro οκτάεδρο) του Κέλβιν

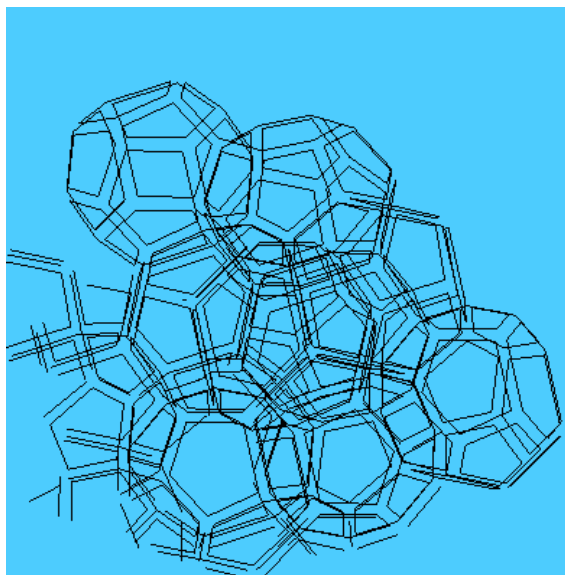
Για τη μοντελοποίηση της τοπολογίας του μεταλλικού αφρού χρησιμοποιήθηκε λοιπόν η γεωμετρία που απέδειξαν οι **Weaire** και **Phelan,1994** ότι είναι κατά **0,3%** μικρότερη σε επιφάνεια από το **14-εδρο** του **Kelvin** και η οποία χάριν συντομίας θα καλείται **WP** (Σχήμα 4-2). Έτσι με το λογισμικό **Surface Evolver (Brakke, 1992)** ύστερα από επαναληπτικές διαδικασίες βαθμωτής μείωσης της παραγώγου της συνολικής επιφανειακής ενέργειας (επιφανειακών τάσεων), σχηματίστηκε αρχικά η γεωμετρία «συμπαγούς αφρού» που ακολουθούσε το γεωμετρικό πρότυπο των **Weaire** και **Phelan,1994** (Σχήμα 4-2, Σχήμα 4-12). Η γεωμετρία αυτή αποτελείται από ένα σύμπλεγμα **8** ισόογκων στερεομετρικών σωμάτων το καθένα των οποίων διαθέτει **6** δεκατετράεδρα και **2** μη κανονικά δωδεκάεδρα.

Θεωρήθηκε ότι ο αφρός των **Weaire** και **Phelan,(1994)** αποτελείται από μια ιδεατή, απειροστού πάχους, μεμβράνη η οποία περικλείει το εν λόγω μόρφωμα. Αυτή η μεμβράνη δίνει πρακτικά πορώδες πολύ κοντά στο **100%** διότι δεν περιέχει καθόλου «υλικό» στο στερεομετρικό αυτό σχήμα, ομοιάζοντας έτσι την κατάσταση των αφρών σαπουνιού οι οποίοι περιέχουν πολύ μεγάλο ποσοστό

κενού στο σύνολό τους σε σχέση με το σαπουνόνερο που διαθέτουν. Αυτή η δομή όμως απείχε από τη δομή του ιδεατού κελιού του μεταλλικού αφρού. Έτσι με μια μακροεντολή που παρέχει το λογισμικό **Surface Evolver (wetfoam2.cmd** και έπειτα από προσωπική επικοινωνία με τον ίδιο το δημιουργό του λογισμικού- **Brakke,1992**- για την αποστολή μακροεντολής που εξάγει τη γεωμετρία από το λογισμικό **Surface Evolver** σε συγκεκριμένο **CAD-CAE** σύστημα, γεγονός που οδήγησε στην ενσωμάτωση της εν λόγω μακροεντολής και τρόπου εξαγωγής της γεωμετρίας στην επόμενη έκδοση του λογισμικού **Surface Evolver**), ουσιαστικά «διεβράχη» ο όγκος των **Weaire** και **Phelan,1994** με την αρχική γεωμετρία του **WP**,δίνοντας μια νέα γεωμετρία (**wetfile**), η οποία διατηρούσε ένα υψηλό ποσοστό πορώδους (**97-98%**) όμως περιελάμβανε ύλη στα δημιουργηθέντα **ligaments** και στις ενώσεις του αφρού ενώ επιπρόσθετα οι έδρες των **12**εδρών και **14**εδρών κελιών εμφανίζονταν διάτρητες, αποτέλεσμα της επίδρασης της επιφανειακής τάσης που συσσωρεύει το υλικό της διαβροχής της αρχικής «μεμβράνης» στις ενώσεις (Σχήμα **4-13**). Η ύλη αυτή βέβαια δεν αντιπροσωπεύει κάποιο συγκεκριμένο υλικό, αφού κατά την περαιτέρω μοντελοποίηση, ο χρήστης δίνει τις ιδιότητες του υλικού. Το αποτέλεσμα αυτής της επέμβασης ήταν ένα μόρφωμα που πιστεύεται ότι προσομοιώνει το πολυμερές εκμαγείο που χρησιμοποιεί ένας τουλάχιστον εκ των κατασκευαστών μεταλλικών αφρών ανοικτών κελιών που χρησιμοποιεί τη μέθοδο της χύτευσης (**Duocel ®, Boomsma et al., 2003, Ashby et al., 2000**).



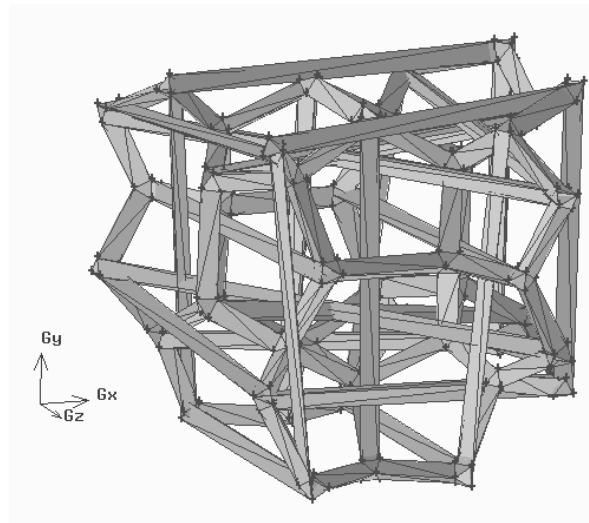
Σχήμα 4-12: Δομή αφρού σαπουνάδας. Η στερεομετρία των σωμάτων (αν και όχι ισόογκα), είναι πολύ κοντά στη δομή WP των Weaire και Phelan, 1994 (βλ. και Σχήμα 4-2)



Σχήμα 4-13: Διαβροχή της αρχικής «σμπαγούς» μεμβράνης του όγκου WP

Η γεωμετρία αυτή εξήχθη με τη μορφή ουδέτερου αρχείου **iges** (αρχείο που χρησιμοποιείται για τη φορητότητα γεωμετριών και κατασκευών και για την επικοινωνία μεταξύ διαφόρων CAD-CAE συστημάτων). Ωστόσο η αρχική

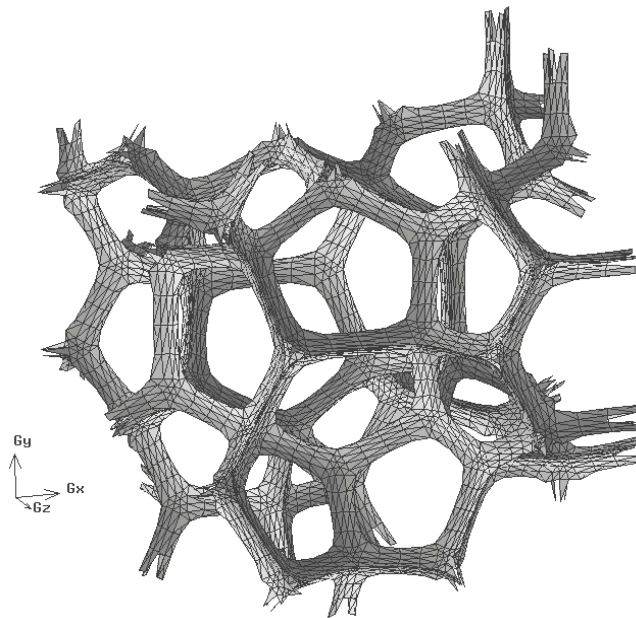
πρωτόγονη κατασκευή που εξήχθη απείχε πολύ από το να χαρακτηριστεί σαν δομή μεταλλικού αφρού: Αποτελούνταν από ένα κεντρικό κελί και τμήματα των οριακών γειτονικών του που συμπλήρωναν το 8-ογκο μάρφωμα των **Weaire** και **Phelan, (1994) (WP)** , ενώ περιείχε και παρένθετους όγκους συνδέσμων οι οποίοι δεν είχαν κανένα λόγο ύπαρξης, σαν αποτέλεσμα της συνεχούς σειριακής εγγραφής των «οντοτήτων» (**entities**) που περιείχε σαν πληροφορία το ουδέτερο αρχείο **iges** (Σχήμα 4-14).



Σχήμα 4-14: Στερεομετρία του σώματος που εξήχθη υπό τη μορφή **iges file**. Σύγκριση με το Σχήμα 4-13 καταδεικνύει τις τοπολογικές ατέλειες και τα εμπόδια που ανακάλυψαν.

Έπρεπε ως εκ τούτου να γίνει κατ' αρχάς ο καθαρισμός της γεωμετρίας από τα τοπολογικά σφάλματα που περιείχε αυτή. Υποβιβάστηκε λοιπόν η γεωμετρία από το επίπεδο του όγκου στο επίπεδο της επιφάνειας, μετά την εισαγωγή του ουδέτερου αρχείου σε **CAD-CAE** σύστημα για την τροποποίηση και διακριτοποίησή του. Η υποβίβαση αυτή ήταν απαραίτητη, διότι όλο το στερεομετρικό σώμα (Σχήμα 4-14) συνιστούσε ένα και μοναδικό όγκο, μη επιτρέποντας έτσι την τμηματική διαγραφή των μερών του (παρένθετοι σύνδεσμοι) που έπρεπε να απαλειφθούν. Έτσι κατέστη δυνατή η διαγραφή εκείνων των επιφανειών που συνιστούσαν τους παρένθετους όγκους αφήνοντας έτσι «καθαρό» το υπόλοιπο τμήμα του ορθού τοπολογικά μάρφωματος (Σχήμα

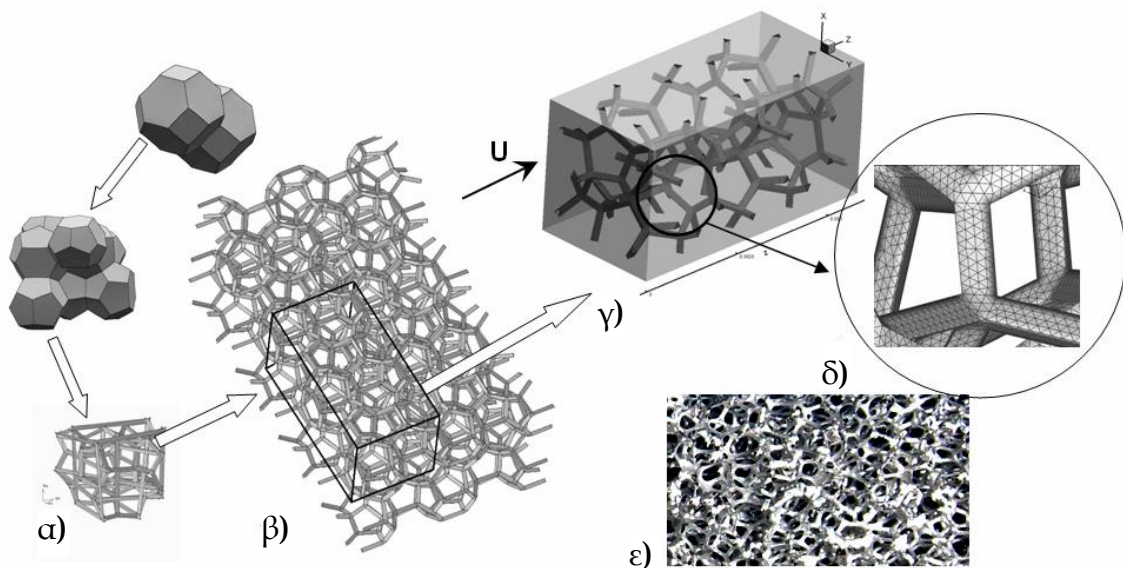
4-15). Επειδή όμως η κατασκευή είχε υποβιβαστεί στο επίπεδο της επιφάνειας και ακόμη στο επίπεδο της μίας διάστασης (ακμής), επανενώθηκε σε επιφάνειες οι οποίες έδωσαν τον καθαρό όγκο τελικά διορθωμένο, «καθαρισμένο» και ενωμένο. Η διαδικασία αυτή (ή παρόμοια) είναι συνήθης στην χρήση CAD-CAE συστημάτων και καλείται διόρθωση γεωμετρίας («**geometry clean-up**»), συνίσταται δε στην απαλοιφή παρένθετων σημείων, ακμών, επιφανειών ή όγκων-με αυξανόμενο βαθμό δυσκολίας συνήθως κατά τη σειρά που αναφέρθηκαν- ή στη διόρθωση γεωμετρικών ή τοπολογικών ανωμαλιών που προκύπτουν για λόγους ανοχής διαστάσεων ή μετατροπής ενός αρχείου όταν αυτό έχει κατασκευαστεί σε ένα CAD-CAE σύστημα και αναγιγνώσκεται από ένα άλλο.



Σχήμα 4-15: Ο αρχικός όγκος όπως τροποποιήθηκε μετά τον καθαρισμό του από τους παρένθετους όγκους (ένα βήμα πριν το τελείωμα του καθαρισμού του).

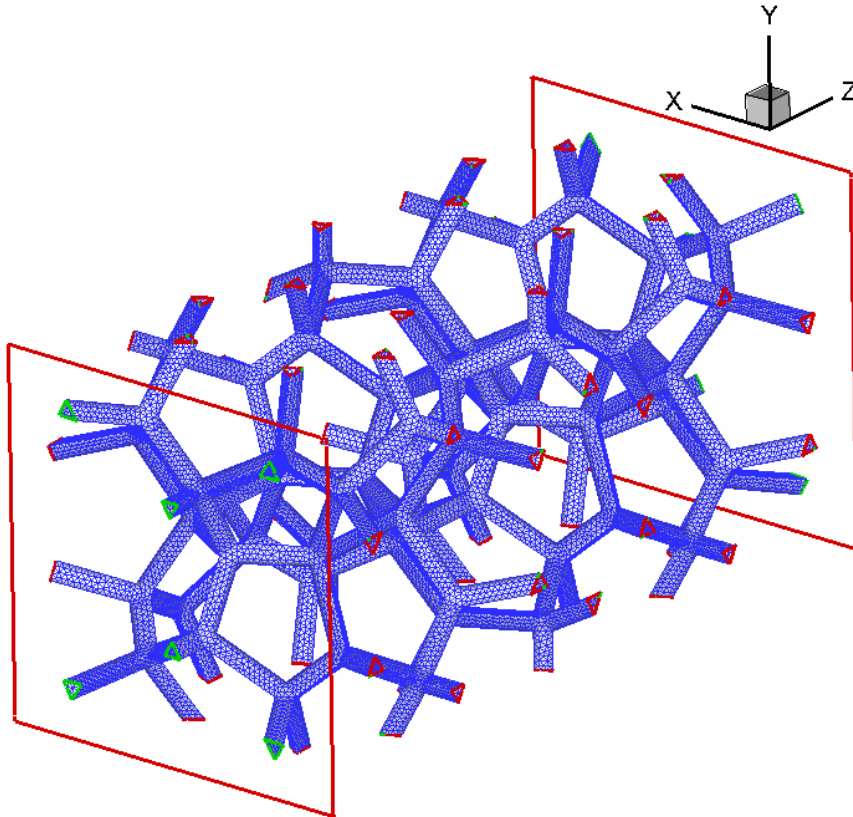
Το επόμενο βήμα για την κατασκευή του μοντέλου μεταλλικού αφρού ήταν η επανάληψη στο χώρο του καθαρού πλέον μορφώματος που χρησιμοποιήθηκε σαν δομικό κύτταρο για τη δημιουργία ενός ευρύτερου συνόλου από κελιά. Εκμεταλλεύοντας την ύπαρξη επιπέδων συμμετρίας και καθρεπτισμών στο

αρχικό μάρφωμα (που αποτελούσε έναν και μοναδικό όγκο όπως έχει ήδη αναφερθεί) έγινε επανάληψη σε όλα τα επίπεδα στις τρεις διαστάσεις περισσότερες από μια φορές. Ωστόσο λόγω τοπολογικών αριθμητικών αποκλίσεων (ανοχές ανάγνωσης ουδέτερου αρχείου από CAD-CAE σύστημα και ακρίβεια σημείων) δεν συνέπιπταν ακριβώς τα όρια τις γεωμετρίας στις συμμετρίες. Ακολούθως πραγματοποιήθηκε διόρθωση και καθαρισμός λαθών της γεωμετρίας σε κάθε επανάληψη που επιχειρούνταν με σκοπό να είναι απαλλαγμένη η προκύπτουσα κάθε φορά οντότητα από γεωμετρικά λάθη για να μπορέσει ο χρήστης να διαγράψει όγκους που διέρχονταν από τα επίπεδα καθρεπτισμού/συμμετρίας και να επανασυνθέσει τα πάντα σε έναν όγκο πάνω στο επιθυμητό επίπεδο κάθε φορά, σε μια διαδικασία που κράτησε περίπου πάνω από τέσσερις μήνες. Το τελικό αποτέλεσμα (Σχήμα 4-16) ήταν ένας όγκος μεταλλικού αφρού, μεγαλύτερος του οποίου δεν έχει παρουσιαστεί ή δημοσιευτεί μέχρι στιγμής, από τον οποίο τελικά αποκόπηκε ένα αρχικό υπολογιστικό χωρίο, το οποίο αργότερα διαφάνηκε ότι παρουσίαζε τοπολογικά προβλήματα (στη διαδικασία διακριτοποίησης διαπιστώθηκαν προβλήματα τα οποία αντιμετωπίστηκαν καταλλήλως σε δεύτερη φάση).



Σχήμα 4-16: Συνοπτική διαδικασία κατασκευής του μοντέλου μεταλλικού αφρού α) β) γ) δ) και σύγκριση με πραγματικό τεμάχιο μεταλλικού αφρού (ε)

Οπότε ο τελικός όγκος ελέγχου (υπολογιστικό χωρίο, Σχήμα 4-16) που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα προσομοίωση προέκυψε από την αποτομή των οριακών επιπέδων του πρώτου εκείνου αξονοσυμμετρικού όγκου που προέκυψε από το τελικό συνολικό μάρφωμα, ώστε μεν παρουσιάζει συμμετρίες αλλά όχι ακριβώς πάνω στο επίπεδο επανάληψης της εσωτερικής κατασκευής (Σχήμα 4-16, Σχήμα 4-17).



Σχήμα 4-17: Το υπολογιστικό χωρίο που τελικά χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση ροής μέσα από μεταλλικό αφρό

Σημειώνεται τέλος πως στο ίδιο ακριβώς χωρίο έγινε μεγέθυνση υπό δύο κλίμακες για να αντιπροσωπεύει με τις κατάλληλες κάθε φορά διαστάσεις τεμάχιο μεταλλικού αφρού **10 PPI** και **40 PPI**, οπότε και η διερεύνηση κάθε φορά του αντίστοιχου ροϊκού πεδίου και πεδίου θερμοκρασίας συγκρίθηκε με πειραματικά αποτελέσματα της αυτής κλίμακας και μεγέθους. Ο συντελεστής μεγέθυνσης (**scale factor**) από τα **40** στα **10 PPI** ήταν **3.41** επειδή τα **10PPI** έχουν,

όπως έχει αναφερθεί, μεγαλύτερο μέγεθος πόρου από τα **40PPI** (είναι αραιότερα) αλλά η αναλογία δεν είναι ακριβώς **1:4**. Η αιτιολόγηση επιλογής της τιμής **3,41** θα γίνει σαφής στην επόμενη παράγραφο.

4.2.4. Πιστοποίηση και αξιολόγηση αριθμητικού προτύπου

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιαστούν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που διέθεταν τα δύο μοντέλα (**40** και **10 PPI**, με τη σειρά που κατασκευάστηκαν) και θα γίνει σύγκριση με αντίστοιχες δημοσιευμένες τιμές από τη διεθνή βιβλιογραφία. Επίσης για κάποιες από τις τιμές υπήρξε και εξαγωγή μέσω μέτρησης σε δείγματα αφρού στα πλαίσια της διατριβής. Συγκεκριμένα για τα **40 PPI** έγινε μέτρηση της διαμέτρου των συνδέσμων από δείγματα που απέστειλε η **ERG** με τη μέθοδο της σάρωσης του δείγματος σε σαρωτή (**Scanner**) και την επεξεργασία σε λογισμικό φωτογραφικής απεικόνισης και τροποποίησης. Μετρήθηκε έτσι ένας μεγάλος αριθμός συνδέσμων (**ligaments**) των δειγμάτων αφρού, ως προς το πάχος τους (διάμετρος) και συγκεκριμένα η προβολή της τριγωνικής τους πλευράς (τα δείγματα είχαν πορώδες **92-94%** εντάσσοντάς τα στην κατηγορία της τριγωνικής διατομής) όντας έτσι σε συμφωνία με τον υπολογισμό της διαμέτρου συνδέσμων του μοντέλου, η οποία ουσιαστικά ήταν το ύψος της (ισόπλευρης) τριγωνικής διατομής των συνδέσμων. Γίνεται αντιπαραβολή των τιμών για το μοντέλο (Πίνακας **4-3**) και για μετρημένες τιμές μεταλλικού αφρού αλουμινίου **40PPI** από τη διεθνή βιβλιογραφία, καθώς και οι αντίστοιχες για τα **10PPI** (Πίνακας **4-4**).

40PPI [x×y×z] = 2,82×2,82×5,82 [mm]	Pore diameter (dp), [mm]	Ligament diameter (dl), [mm]	Porosity (ε), [-]	Specific area (A/V), [m ² /m ³]
Παρούσα προσομοίωση	2,1	0,13	0,97	994,5
Μετρήσεις σε δείγματα	-	0,249	0,92-0,94	-
Boomsma and Poulikakos (2002)	2,3	-	0,92	-
Ozmat et al. (2004)	1,66	0,109	0,97	-
Bhattacharya et al. (2002)	1,8	0,23	0,972	-
Alvarez-Hernandez (2005)	1,7	0,102	0,923	-
ERG, Duocel	-	0,08	0,97	1870

Πίνακας 4-3: Σύγκριση διαστάσεων και χαρακτηριστικών μοντέλου μεταλλικού αφρού ανοικτού κελιού 40PPI με τιμές τις διεθνούς βιβλιογραφίας

10PPI [x×y×z] = 9,61×9,61×19,85 [mm]	Pore diameter (dp), [mm]	Ligament diameter (dl), [mm]	Porosity (ε), [-]	Specific area (A/V), [m ² /m ³]
Παρούσα προσομοίωση	6,9	0,41	0,97	340
Boomsma and Poulikakos (2002)	6,9	-	0,92	-
Ozmat et al. (2004)	5,66	0,53	0,97	-
Bhattacharya et al. (2002)	3,1	0,39	0,949	-
Alvarez-Hernandez (2005)	5,08	0,406	0,914	-
ERG, Duocel	-	0,30	0,97	492

Πίνακας 4-4: Σύγκριση διαστάσεων και χαρακτηριστικών μοντέλου μεταλλικού αφρού ανοικτού κελιού 10PPI με τιμές τις διεθνούς βιβλιογραφίας

Αν και σε μεγάλο βαθμό η κατασκευή του μοντέλου βρίσκεται σε συμφωνία με τις τιμές τις διεθνούς βιβλιογραφίας, υπάρχουν δύο μεγέθη τα οποία αποκλίνουν. Το ένα μέγεθος είναι η ειδική επιφάνεια και το άλλο είναι το σχήμα της διατομής των συνδέσμων του αφρού (**ligaments**) σε σχέση με το παρουσιαζόμενο πορώδες.

Η μεν ειδική επιφάνεια παίζει σπουδαίο ρόλο κυρίως στη μοντελοποίηση του θερμοκρασιακού πεδίου, ενώ η διατομή των συνδέσμων κυρίως σε αυτή του ροϊκού. Ωστόσο δεν είναι άσχετες οι δύο αποκλίσεις μεταξύ τους: Η ανάγκη για οικονομία υπολογιστικής μνήμης και οι δυνατότητες των χρησιμοποιούμενων μέσων επέβαλαν την παραδοχή της τριγωνικής διατομής στα **ligaments** παρά το υψηλό πορώδες $\varepsilon=0,97$ ή **97%** που παρουσίαζαν τα δύο μοντέλα. Σε αυτό το πορώδες σύμφωνα με τους **Bhattacharya et al., (2002)**, και την **ERG**, η διατομή των **ligaments** έπρεπε να είναι κοίλο τρίγωνο (**inner concave triangle**) και όχι τριγωνική. Αυτό ήταν από τις γνωστές παραδοχές εξαρχής, όμως αποστερούσε την τοπολογία του μοντέλου από επιπλέον επιφάνεια που θα έπρεπε αυτό να διαθέτει. Αυτό πιθανότατα συνέβαλε στην απόκλιση της ειδικής επιφάνειας από τη βιβλιογραφικά αναφερόμενη, που σε συνδυασμό ίσως με την ανομοιομορφία που παρουσιάζουν οι σύνδεσμοι (**ligaments**) στα πραγματικά τεμάχια (πολλοί είναι λεπτότεροι ενώ άλλοι πιο παχείς), μπορεί να αποτελεί το λόγο της απόκλισης.

Τέλος, ένα μέγεθος χαρακτηριστικό που απαντάται σε πορώδη υλικά είναι η συστροφή (**tortuosity**), που ορίζεται σαν ο λόγος της συνολικής περιελισσόμενης διαδρομής (συνεστραμμένη) διαθέσιμης για διαβροχή στην αντιπροσωπευτική μονάδα ενός κελιού προς το συνολικό ευθύγραμμο μήκος του κελιού στη διεύθυνση της ροής. Για την περίπτωση δε των μεταλλικών αφρών η συστροφή παίρνει την έκφραση (**Bhattacharya et al.,2002**):

$$c = \frac{e * d_a^2}{A_p}$$

(4-8)

όπου

$$e = \frac{V_t - V_s}{V_s} \quad (4-9)$$

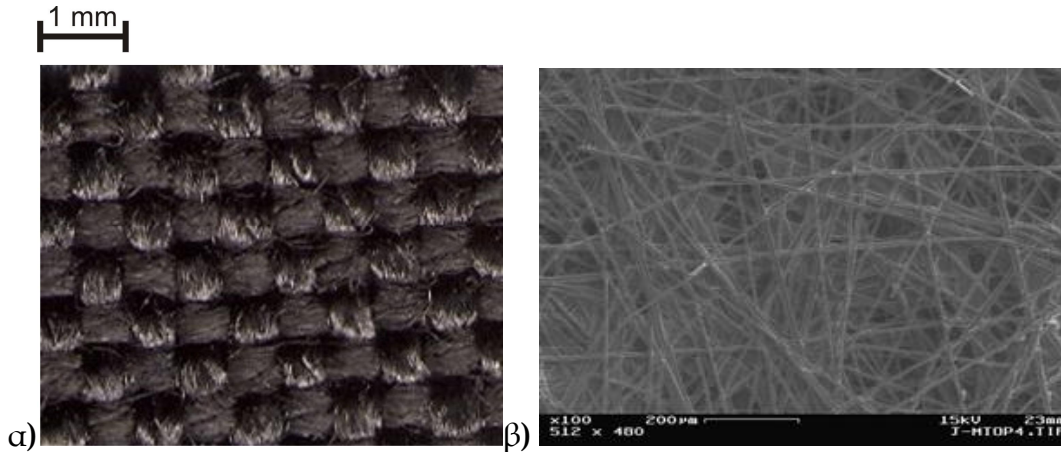
είναι το πορώδες του υλικού (ο λόγος του όγκου της «κενής» φάσης προς το συνολικό όγκο του περιγράμματος του πορώδους υλικού), d_a η διάμετρος του ανοίγματος κάθε έδρας του κελιού (πόρου) και $A_p = \frac{P}{4}(d_a^2 - d_l^2)$ με d_l να υποδηλώνει τη διάμετρο του συνδέσμου (**ligament**), βλ. Σχήμα 4-3. Η τιμή που προκύπτει για το συγκεκριμένο μοντέλο είναι $\chi=1,26$ η οποία έρχεται σε συμφωνία με την τιμή που δίνουν οι **Shen και Chen, (2007)** για πορώδη υλικά με το αυτό μέτρο πορώδους ($\varepsilon = 97\%$) η οποία είναι κατ'αυτούς ίση με $\chi=1,2$ δίνοντας έτσι μια διαφορά της τάξης του μόλις 5%.

4.3. Αριθμητική Προσομοίωση Γεωμετρίας Πορώδους Υλικού Διάχυσης Αερίου (GDL) στις Κυψέλες Καυσίμου PEM

Όπως έχει αναφερθεί και στην ενότητα 2, οι κυψέλες καυσίμου PEM χρησιμοποιούν είτε υφάσμα ανθρακοϊνών είτε χαρτί ανθρακοϊνών σαν μέσο διάχυσης των αντιδρώντων αερίων πριν την είσοδό τους στο καταλυτικό υπόστρωμα και την επαφή τους στη μεμβράνη για την πραγματοποίηση της αντίδρασης. Στις παραγράφους που ακολουθούν γίνεται ανάλυση της θεωρητικής βάσης στην οποία στηρίχθηκε η αριθμητική ανακατασκευή της γεωμετρίας του υφάσματος, η διαδικασία δόμησης του υφάσματος και του καναλιού που το περιβάλλει, η πιστοποίηση των τιμών των διαφόρων ιδιοτήτων του σε σύγκριση με δημοσιευμένες τιμές από τη διεθνή βιβλιογραφία και η πιστοποίηση της ορθότητας της κατασκευής.

Πρέπει εδώ να τονιστεί ότι η αιτία της επιλογής χρήσης και μοντελοποίησης υφάσματος και όχι χαρτιού ανθρακοϊνών ήταν η συντεταγμένη και όχι άναρχη δομή που αυτό παρουσιάζει, δίνοντας έτσι τη δυνατότητα για άμεση και πιστή

αναπαραγωγή της δομής αυτής. Αυτή η δυνατότητα δε θα υπήρχε αν μοντελοποιούνταν χαρτί αντί υφάσματος (Σχήμα 4-18).



Σχήμα 4-18: α) Υφασμα ανθρακονημάτων β) χαρτί ανθρακοϊνών.

Οι ίνες αυτές έχουν την ιδιότητα να αφήνουν ρευστά να τις διαπερνούν τόσο ανάμεσα στα μεταξύ τους κενά, όσο και μέσα από το ίδιο το σώμα της κάθε ίνας το οποίο ουσιαστικά αποτελείται από λεπτότερα ινίδια και επιτρέπει έτσι την διαβροχή και διείσδυση μέσω αυτού για την ομαλότερη κατανομή της μάζας του προς αντίδραση αερίου.

Τέλος σημειώνεται ότι διάφορες εταιρείες κατασκευάζουν τα υλικά αυτά με κυριότερες τις **Toray**, **SGL group** και **BASF (BASF Fuel Cell, Inc., <http://www.jonnycoder.net/aces/home.php>, SGL group, http://www.sglgroup.com/cms/international/products/product-groups/index.html?_locale=en, Toray Carbon Fibers America, Inc., <http://www.toraycfa.com/>).**

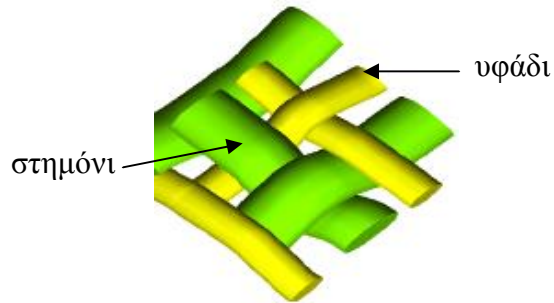
4.3.1. Το λογισμικό WISETEX

Όσον αφορά τη μοντελοποίηση του **GDL**, αυτή περιλαμβάνει 2 βήματα: α) τη μοντελοποίηση της γεωμετρίας (και των ιδιοτήτων) του υφάσματος ανθρακοϊνών (**carbon cloth**) και β) αφού εκτελεστεί το πρώτο βήμα, τη μοντελοποίηση του

καναλιού ροής στην κάθοδο μιας κυψέλης καυσίμου τύπου **PEM**, μέσα στο οποίο βρίσκεται το υφάσμα ανθρακοϊνών που μοντελοποιήθηκε στο πρώτο βήμα. Όσον αφορά τη μοντελοποίηση του υφάσματος πρέπει να ληφθούν υπόψιν τα ακόλουθα:

Τα βιομηχανικά υφάσματα είναι υλικά άκρως δομημένα και η παραλλαγή στη δομή (τοπολογία) της πλέξης του νήματος είναι ένας αποτελεσματικός τρόπος να βελτιστοποιηθεί η ανθεκτικότητά τους. Το **WiseTex** είναι ένα λογισμικό που σαν σκοπό έχει να αντιμετωπίσει αυτό ακριβώς το πρόβλημα: τη σωστή περιγραφή της γεωμετρίας μιας ύφανσης για διάφορες κατηγορίες ινών και νημάτων, την επιβολή διαφόρων συνθηκών σε αυτές της υφάνσεις -όπως συστροφή μεταξύ των νημάτων που είναι πειλεγμένα- και την παραμετρική μελέτη της μηχανικής κυρίως αντοχής τους και δευτερευόντων μεγεθών όπως η διαπερατότητα. Υπενθυμίζεται εδώ ότι η διαπερατότητα (**K**), είναι ένα μέγεθος που, όπως ορίστηκε παραπάνω, έχει μονάδες **m²** και δίνει ένα μέτρο της ικανότητας που έχει κάποιο ρευστό να διεισδύσει/διαπεράσει ένα συγκεκριμένο πορώδες υλικό.

Το **WiseTex** υπολογίζει με τη βοήθεια **CAE** συστήματος τη μετατόπιση και το σχήμα της διατομής κάθε ίνας (Σχήμα 4-19). Για να γίνει αυτό όμως είναι απαραίτητη η γνώση της εσωτερικής γεωμετρίας και ορισμένων ιδιοτήτων της ίνας και της ύφανσης όπως: **1)** όλες οι απαραίτητες ιδιότητες του νήματος (και του μητρικού υλικού αυτού), **2)** η τοπολογία του 'καμβά' των ινών που διαπλέκονται μεταξύ τους και επαναλαμβάνονται στην ύφανση, **3)** το διάστημα μεταξύ των επαναλαμβανόμενων ινών (δηλαδή η μέση απόσταση μεταξύ των ινών του στημονιού-δηλαδή των ινών που αποτελούν την άπλεκτη βάση του υφάσματος- και των ινών του υφαδιού-δηλαδή των ινών που πλέκονται γύρω και ανάμεσα από τη στερεή βάση που συνιστούν οι ίνες στημόνια-).



Σχήμα 4-19: Δομή πλέξης υφάσματος και ορισμός των νημάτων αυτού

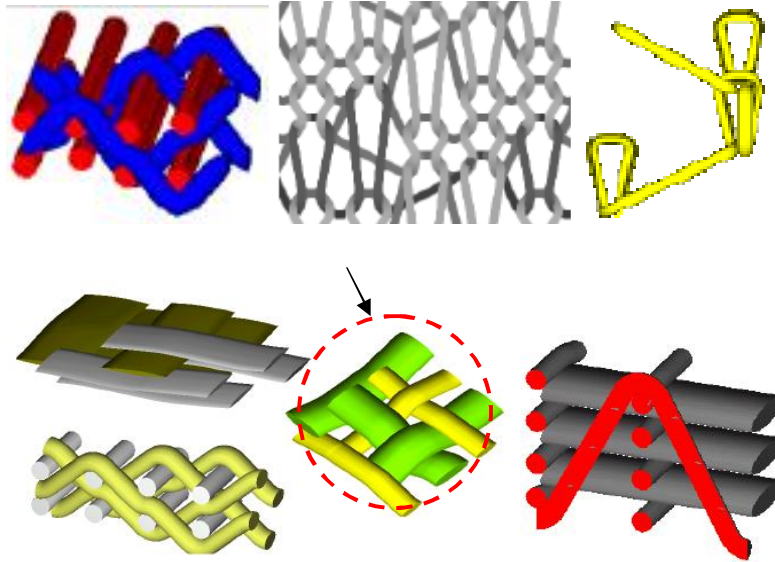
Το πρόβλημα που αντιμετωπίζεται με τη βοήθεια του **WiseTex** είναι να βρεθεί η μετατόπιση του διαστήματος μεταξύ των ινών και η αλλαγή της διατομής της ίνας. Αυτό όμως δεν αφορά στην παρούσα μελέτη, στην οποία γίνεται ωστόσο προεργασία (**pre-processing**) για τη μοντελοποίηση της γεωμετρίας με στόχο την ορθή γεωμετρική αποτύπωση και εξαγωγή του μοντέλου του υφάσματος ανθρακοϊνών.

Τέλος μια από τις υπολογιστικές δυνατότητες που διαθέτει το λογισμικό **WiseTex** πέρα από την καθαρά μηχανική συμπεριφορά των ινών και θα μπορούσε να αφορά την προκειμένη μελέτη, είναι η ανάλυση διαπερατότητας. Αυτή διεξάγεται για ένα υλικό (ύφασμα εδώ) από το **WiseTex** με έναν αριθμό βημάτων: Το πρώτο βήμα είναι ο χαρακτηρισμός της ενίσχυσης της ύφανσης που περιλαμβάνει ανάλυση της εσωτερικής δομής, δεδομένα του κατασκευαστή για τις ίνες, τα νήματα και δεδομένα για τη μηχανική συμπεριφορά των ακατέργαστων ινών που αποτελούν την επένδυση της (κάθε) ίνας. Το βήμα αυτό κορυφώνεται με τη δημιουργία μοντέλου ενός μόνο επιπέδου στρώματος με γεωμετρία «χαλαρή». Η διαπερατότητα επηρεάζεται από τη γεωμετρία της ενίσχυσης της ύφανσης συμπεριλαμβανομένης της γραμμής του νήματος και της διατομής του, το πορώδες μέσα στο ίδιο το νήμα και την κατανομή του λόγου των όγκων κενού/στερεού στο εσωτερικό των ακατέργαστων ινών. Ωστόσο στην περίπτωση της διατριβής δεν έγινε ανάλυση διαπερατότητας μιας και δε χρειάστηκε.

Το επόμενο βήμα σχετίζεται με την ‘παραμορφωσιμότητα’ της επένδυσης και προσεγγίζεται με πειραματική εκτίμηση της συμπεριφοράς της επένδυσης σε συμπίεση, εφελκυσμό και διάτμηση. Αν πρόκειται για τη διαπερατότητα ενός μόνο στρώματος της επένδυσης τα δεδομένα προς εισαγωγή για προσομοίωση της διαπερατότητας ολοκληρώνονται έτσι. Αν ωστόσο το ενδιαφέρον εστιάζεται στη διαπερατότητα πολυ-στρωματικής επένδυσης-όπως γίνεται συνήθως-χρειάζεται και τρίτο, συμπληρωματικό βήμα. Αυτό είναι το λεγόμενο «κτίσιμο της γεωμετρίας του μοντέλου για πολυ-στρωματική επένδυση». Αυτό αποτελεί ένα σύνθετο έργο επειδή μπορεί να υποθεθούν πολλά διαφορετικά μοντέλα σε σχέση με την παραμόρφωση των συστατικών των στρωμάτων επένδυσης και της σχετικής τους τοποθέτησης που χαρακτηρίζεται από μετάθεση και «φώλιασμα» των στρωμάτων.

Συμπερασματικά αναφέρεται ότι το λογισμικό πακέτο **WiseTex**, περιέχει μια σειρά από μοντέλα πεπλεγμένης ύφανσης όπου παρουσιάζεται η γεωμετρία τους και η δομή στην οποία βρίσκονται τόσο σε χαλαρή, όσο και σε εντατική κατάσταση (Σχήμα 4-20). Τα μοντέλα βασίζονται στις ακόλουθες κοινές αρχές:

- Περιγραφή της **2-D** και **3-D** ύφανσης
- Αποδόμηση του πτυχομένου σχήματος των νημάτων με σύνολο απλούστερων στοιχείων ύφανσης (απλών ινών ή υφάνσεων/πλέξεων)
- Υπολογισμό των διαστάσεων σε συμπίεση των διατομών των νημάτων μέσω της ισορροπίας μεταξύ των καθέτων δυνάμεων που παράγονται από την κάμψη του νήματος και την αντίσταση θλίψης των νημάτων
- Υπολογισμό του ύψους των πτυχών μέσω επίλυσης του προβλήματος της ελάχιστης ενέργειας.



Σχήμα 4-20: Παραδείγματα πλέξεων υφασμάτων που μοντελοποιεί το **WiseTex**. Το μαρκαρισμένο αντιστοιχεί σύμφωνα με τη βιβλιογραφία σε αυτό που καλύτερα προσομοιώνει τη γεωμετρία του **GDL**, με παράμετρο το σχήμα της διατομής

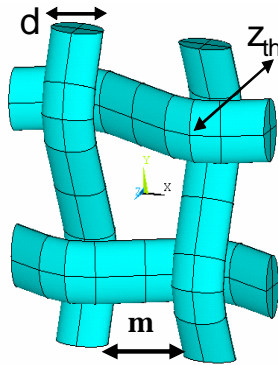
Τέλος αναφέρεται ότι το λογισμικό πακέτο **WiseTex** που χρησιμοποιήθηκε, αποτελείται από τα εξής υποπρογράμματα:

- **FETex**
- **LamTex**
- **WeftKnitDemo**
- **WiseTexDemo**

από τα οποία χρησιμοποιήθηκε το **FETex** κυρίως για την εξαγωγή μακροεντολής που εκτελέστηκε σε άλλο **CAD-CAE** σύστημα και έδωσε την αρχική γεωμετρία του υφάσματος που προσομοιώνει το **GDL**. Αυτή εξήχθη με τη μορφή ουδέτερου (**iges**) αρχείου για να εισαχθεί στη συνέχεια σε πακέτο **CAE** όπου ακολουθεί η χωρική διακριτοποίηση και επιβολή των οριακών συνθηκών στον προς μελέτη όγκο ελέγχου. Η διαδικασία που αναφέρθηκε μόλις, αναλύεται λεπτομερώς, στις αμέσως επόμενες παραγράφους.

4.3.2. Ιδιότητες υφάσματος ανθρακοϊνών

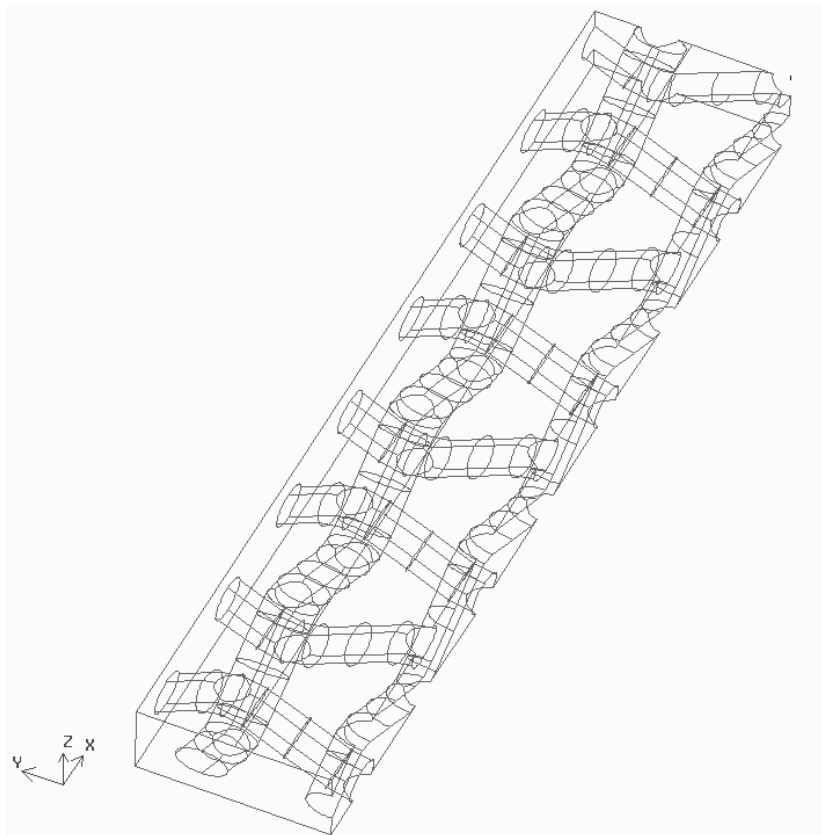
Οι ιδιότητες που είχε η δομή του υφάσματος που κατασκευάστηκε σχετίζονται τόσο με το σχήμα της διατομής, όσο και με τις διαστάσεις-αποστάσεις μεταξύ των διαφόρων ινών και επιπλέον με τα χαρακτηριστικά που παρουσιάζει σε επίπεδο πορώδους μέσου (Σχήμα 4-21). Έτσι συγκεκριμένα οι αποστάσεις μεταξύ των ινών ήταν $m = 0,4 \text{ mm}$, η διάμετρος της κάθε ίνας $d = 0,3 \text{ mm}$, ενώ το πάχος του υφάσματος (πάχος 2 ινών + διάκενου) ήταν $Z_{th} = 0,38 \text{ mm}$.



Σχήμα 4-21: Επεξήγηση των γεωμετρικών όρων στο βασικό όγκο υφάσματος 4 ινών

Το ύφασμα αποτελούνταν τελικώς από μία και μόνη στρώση, αν και αρχικά είχαν κατασκευαστεί δύο στρώσεις, ωστόσο το ύφασμα που χρησιμοποιείται στην πραγματικότητα στις κυψέλες καυσίμου PEM είναι μονής στρώσης (δείγμα που δόθηκε από την εταιρεία **Fluid-Research O.E.**, όπως και **Siegel, 2003**), με αποτέλεσμα να κρατηθεί μονής στρώσης ύφασμα τελικά για εγκιβωτισμό του μέσα στο κανάλι ροής. Επιπρόσθετα οι ίνες θεωρήθηκαν ομαλές και λείες και όχι συνεστραμμένες.

Επιπρόσθετα το πορώδες του υφάσματος μόνο (χωρίς τον επιπρόσθετο κενό όγκο του καναλιού που το περιέβαλε δηλαδή) ήταν $\varepsilon = 0,75$, ήτοι 75% κενή φάση στο πορώδες σύστημα κενού-υφάσματος (Σχήμα 4-22), τιμή που είναι αποδεκτή αφού στη διεθνή βιβλιογραφία αναφέρεται ότι το πορώδες σε υφάσματα **carbon cloth** κυμαίνεται από 0,6 έως 0,9 (**Feser et al., 2006**).

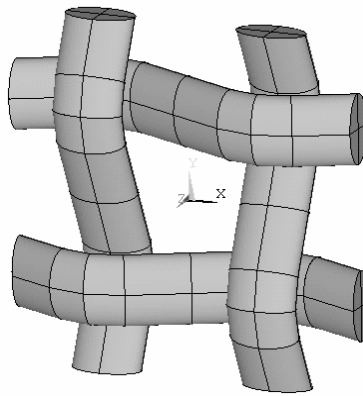


Σχήμα 4-22: Η μέτρηση του πορώδους έγινε με αποκοπή του υφάσματος μόνο και υπολογισμό του κενού όγκου, χωρίς τον επιπρόσθετο όγκο του καναλιού.

4.3.3. Κατασκευή γεωμετρικού προτύπου υφάσματος – καναλιού καθόδου

Όπως και στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού, έτσι και στην περίπτωση του υφάσματος ανθρακοϊνών (**carbon cloth**) του **GDL**, το αρχικό αρχείο που περιείχε πληροφορίες για τη γεωμετρία που επιλέχθηκε ανάμεσα στις διαθέσιμες πλέξεις του **WISETEX** (Σχήμα 4-23) λόγω της συγγένειας και συνάφειάς της με το πραγματικά χρησιμοποιούμενο ύφασμα (Σχήμα 4-20), εξήχθη με τη βοήθεια μακροεντολής από το υποπρόγραμμα **FETex**, σε **CAD-CAE** σύστημα όπου και εκτελέστηκε δίνοντας την πρωτογενή τοπολογία της ύφανσης, η οποία εν συνεχεία εξήχθη με τη μορφή ουδέτερου αρχείου (**iges file**) σε δεύτερο **CAD-CAE** λογισμικό, όπου τροποποιήθηκε και εντάχθηκε στη διάταξη (κανάλι καθόδου κυψέλης καυσίμου PEM), προς διακριτοποίηση.

Σημειώνεται εδώ ότι η κατασκευή της γεωμετρίας βασίστηκε και στα χαρακτηριστικά που μετρήθηκαν από δείγμα πραγματικού υφάσματος **GDL** που παρείχε σε προσωπική επικοινωνία η εταιρεία **Fluid-Research** Ο.Ε. και προέρχεται από γνωστή Ιαπωνική αυτοκινητοβιομηχανία. Αυτό που ήταν ελάχιστα πιο περίπλοκο ήταν το κανάλι που περιέβαλε το ύφασμα και στο οποίο εγχέεται το προς ιονισμό αέριο. Και σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιήθηκαν συμμετρίες που παρουσιάζει η κατασκευή ώστε να γίνει οικονομία μνήμης κατά τη μοντελοποίηση και (κυρίως) κατά την επίλυση.



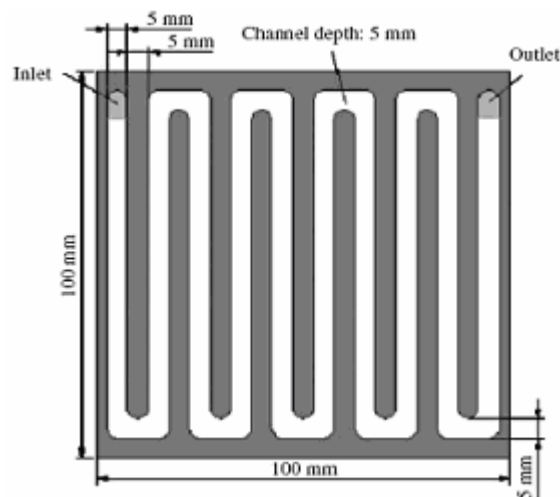
Σχήμα 4-23: Η αρχική τοπολογία της ύφανσης που επιλέχθηκε λόγω της εγγύτητάς της με το πραγματικό ύφασμα **carbon cloth**.

Έπειτα λοιπόν από την εισαγωγή στο λογισμικό πακέτο ρευστομηχανικής του ουδέτερου αρχείου, δημιουργήθηκε ένα σχετικά μεγάλο τμήμα υφάσματος (Σχήμα 4-25), το οποίο έπειτα επεξεργάστηκε κατάλληλα ώστε να αποκτήσει τις ιδιότητες εκείνες που εμφανίζει το αντίστοιχο πραγματικό κομμάτι. Αυτές έχουν να κάνουν: α) με το σχήμα της διατομής (ελλειπτικό αφού λαμβάνεται υπόψιν και η σχετικά σφικτή συναρμογή με την επιφάνεια του καναλιού το οποίο έρχεται σε επαφή με τις ίνες πιέζοντάς τις) β) με το διάκενο μεταξύ των ινών. Το ύφασμα στην πραγματικότητα παρουσιάζει πιο μικρά διάκενα, επιτρέπει όμως τη διαβροχή των ινών, συμβάλλοντας έτσι στο συνολικό υπολογισμό του πορώδους. Οπότε στην περίπτωση του μοντέλου που θεωρούνταν στιβαρές και όχι διαπερατές οι ίνες, προκειμένου να κρατηθεί το πορώδες στην επιθυμητή τιμή

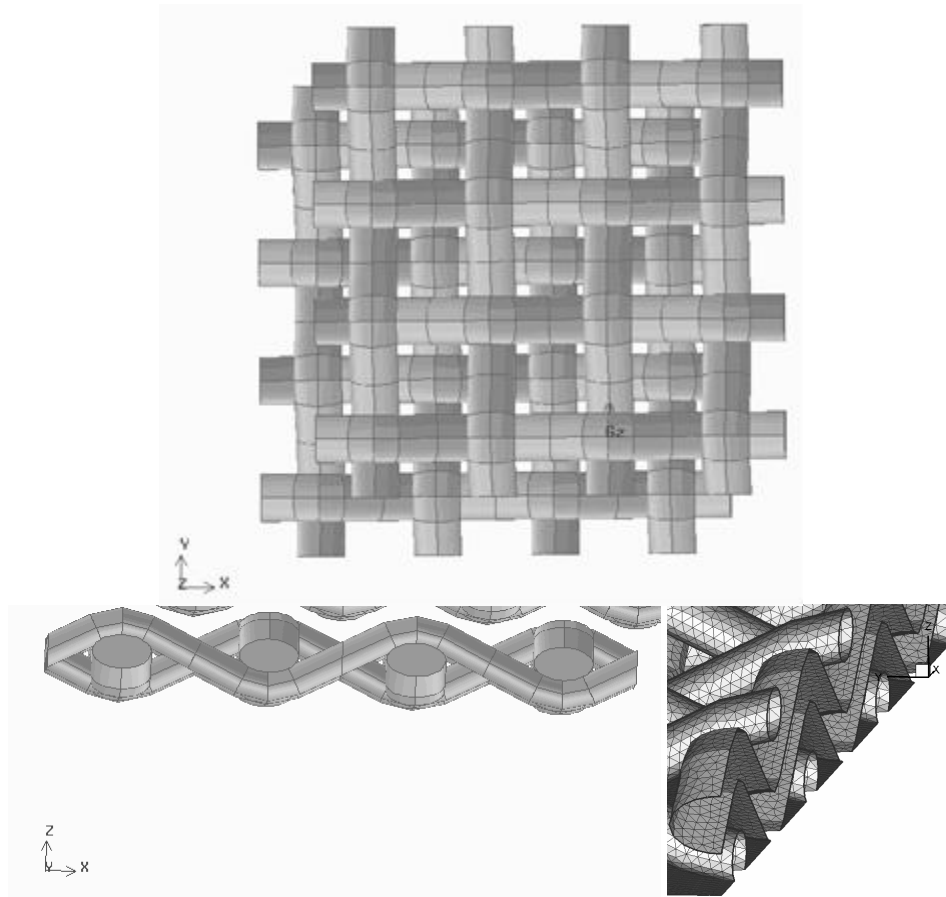
($\epsilon=0.75$) τα διάκενα μεταξύ των ινών ήταν λίγο μεγαλύτερα από ότι αυτά του υφάσματος που εξετάστηκε και με το πάχος του ίδιου του ανθρακονηματίου (Σχήμα 4-25-Σχήμα 4-26). Κατόπιν το πορώδες ύφασμα εγκιβωτίζεται από τον όγκο ελέγχου που σε αυτή την περίπτωση αντιπροσωπεύει το ήμισυ του καναλιού ροής του αερίου (οξυγόνο ή ατμοσφαιρικός αέρας συνηθέστερα) στην κάθοδο του PEM Fuel Cell (Σχήμα 4-27 και Σχήμα 4-26) και κατασκευάστηκε σύμφωνα με τα γεωμετρικά δεδομένα που αντιστοιχούν σε αυτό, κατά τη διεθνή βιβλιογραφία.

Στο Σχήμα 4-24 φαίνεται μια από τις διατάξεις (βλ. και ενότητα 2) που χρησιμοποιούνται ευρέως σε κυψέλες καυσίμου PEM προκειμένου να εισαχθούν τα αντιδρώντα αέρια στην περιοχή της αντίδρασης μέσω των αγωγών που στην προκειμένη περίπτωση σχηματίζουν δομή σερπαντίνας. Αυτή αποτελείται από ευθύγραμμα τμήματα και γωνίες που συνθέτουν ένα ενιαίο κανάλι ροής.

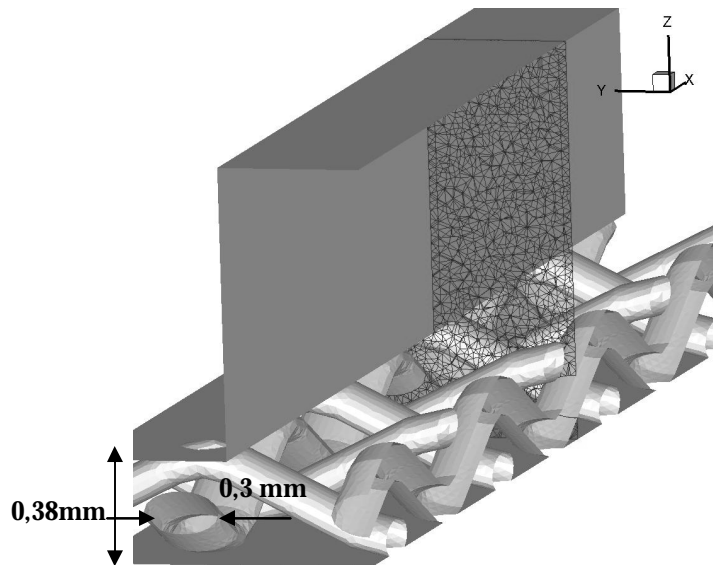
Πρέπει βέβαια να αναφερθεί ότι το μήκος του υπολογιστικού χωρίου που δημιουργήθηκε αποτελεί κλάσμα του πραγματικού μήκους του καναλιού ροής (περίπου $1/8 - 1/12$) για λόγους οικονομίας μνήμης και χρόνου κατά την κατασκευή και επίλυση του μοντέλου (Σχήμα 4-28 και Σχήμα 4-29).



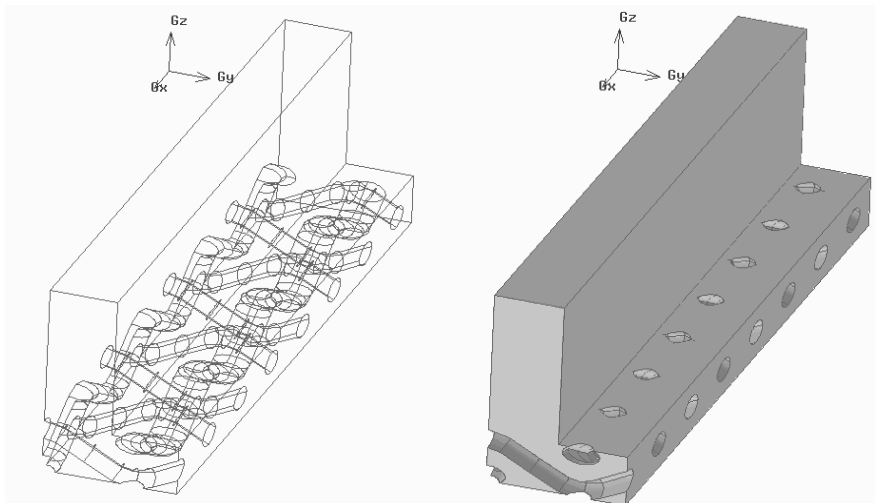
Σχήμα 4-24: Διάταξη καναλιού ροής (Su et al., 2006)



Σχήμα 4-25: Λεπτομέρεια της διατομής της γεωμετρίας των ιών ύφανσης για το ύφασμα του GDL

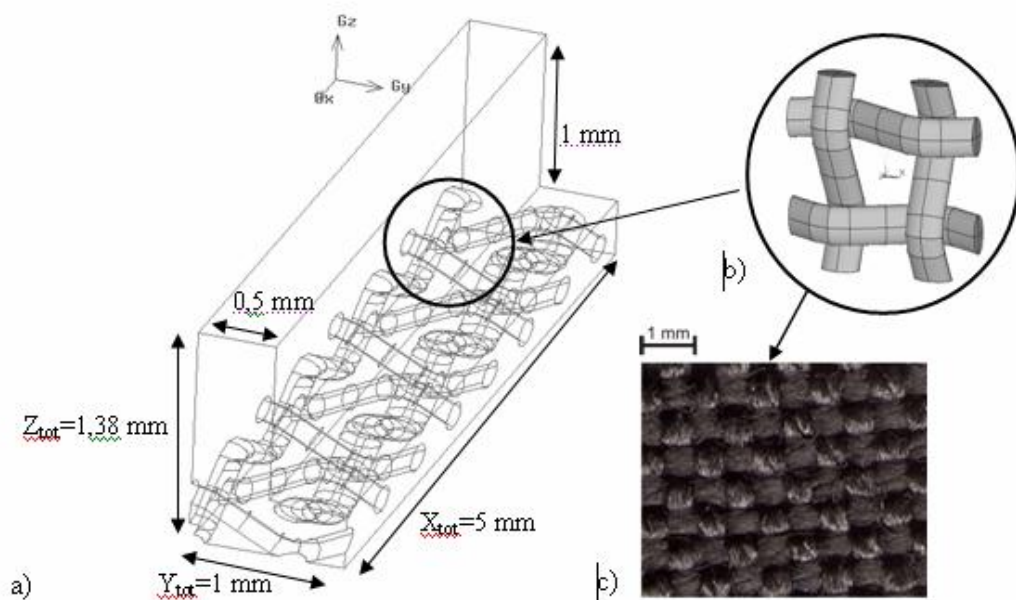


Σχήμα 4-26: Διαστάσεις και τομή υπολογιστικού πλέγματος στη γεωμετρία καναλιού - GDL

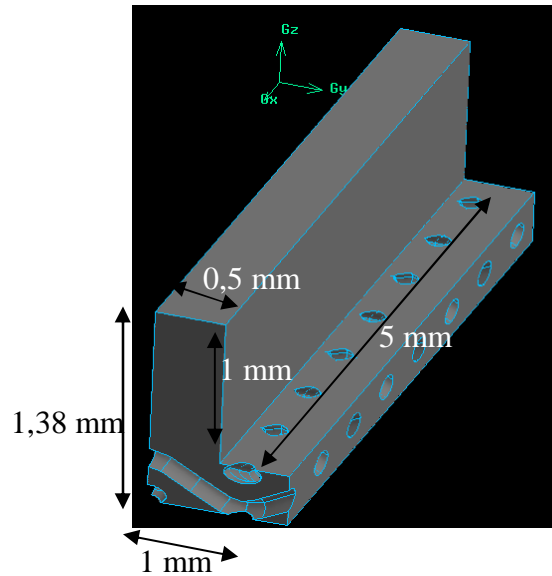


Σχήμα 4-27: Ο όγκος ελέγχου του **GDL** σε **3-D** απεικόνιση

Σημειώνεται δε εδώ ότι έχει ληφθεί μέριμνα ώστε να μην είναι εξιδανικευμένη η τοπολογία στα σημεία επαφής του υλικού του καναλιού με τις ίνες του νήματος. Έτσι, στα σημεία επαφής δεν υπάρχει κενό μεταξύ υφάσματος και καναλιού όπου θα μπορούσε να διέλθει ρευστό και η γεωμετρία του υφάσματος εκεί είναι πεπλατυσμένη (οι ‘τρύπες’ στο Σχήμα 4-27 εκφράζουν στερεά φάση, ο ‘γεμάτος’ χώρος αντιστοιχεί σε κενό από όπου διέρχεται το ρευστό):



Σχήμα 4-28: Σύγκριση της γεωμετρίας του μοντέλου με αυτή του πραγματικού υφάσματος



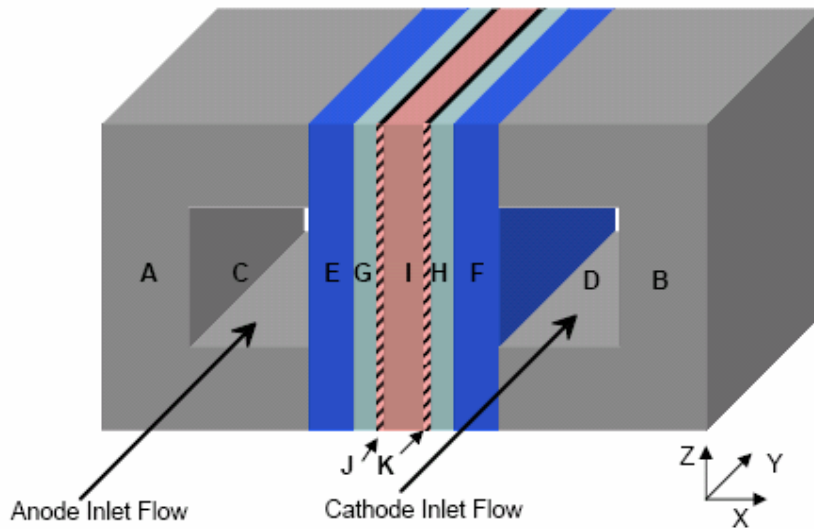
Σχήμα 4-29: Διαστάσεις του όγκου ελέγχου για το GDL.

4.3.4. Πιστοποίηση και αξιολόγηση δομής GDL

Στην προσπάθεια να εξεταστεί η αξιοπιστία του μοντέλου όσον αφορά τη γεωμετρική αναπαράσταση των ινών του υφάσματος, των τοπολογικών ιδιοτήτων του και των διαστάσεων και μορφών του καναλιού-αγωγού που το περικλείουν γίνεται σύγκριση με αντίστοιχες τιμές από δημοσιευμένες στη διεθνή βιβλιογραφία εργασίες και από μετρήσεις δείγματος που διετέθη από γνωστή Ιαπωνική αυτοκινητοβιομηχανία (Σχήμα 4-18α).

Όσον αφορά τις ίνες, η διαστασιολόγηση και η επιλογή του σχήματος της διατομής έγινε κατόπιν μετρήσεων από το δείγμα υφάσματος ανθρακοϊνών που υπήρχε διαθέσιμο (Σχήμα 4-18α) και λαμβάνοντας υπόψιν την κατασκευαστική ιδιομορφία του σχήματος που αυτές λαμβάνουν όταν έρχονται σε επαφή με πλάκα που τις συμπιέζει (το οριζόντιο μέρος του καναλιού-βλ. Σχήμα 4-29) τόσο σε ότι αφορά τη διατομή τους, όσο και σε ότι αφορά την πεπλατυσμένη επιφάνεια που δημιουργείται από την επαφή (συμπίεση) κυλινδρικής ίνας και πλάκας.

Οι δε διαστάσεις του καναλιού επιλέχθηκαν με βάση τιμές από την διεθνή βιβλιογραφία (Siegel, 2003) που απαντήθηκαν και σε άλλους ερευνητές (Su et al., 2006, Shimpalee et al., 2006).

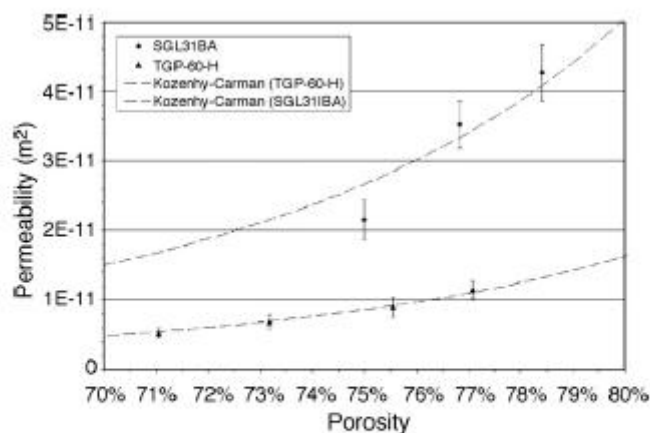


Στοιχείο	Διάσταση X, mm	Διάσταση Y, mm	Διάσταση Z, mm
Πλάκα συλλέκτη ανόδου A	15	60	2
Πλάκα συλλέκτη καθόδου B	15	60	2
Κανάλι αερίου ανόδου C	1	60	1
Κανάλι αερίου καθόδου D	1	60	1
GDL ανόδου E	0,254	60	2
GDL καθόδου F	0,254	60	2
Στρώμα καταλύτη ανόδου G	0,013	60	2
Στρώμα καταλύτη καθόδου H	0,013	60	2
Μεμβράνη I	0,051	60	2
Ειδική επιφάνεια ανόδου J	0,001	60	2
Ειδική επιφάνεια καθόδου K	0,001	60	2
Σύνολο		2,587	60

Σχήμα 4-30: Τρισδιάστατη απεικόνιση των μερών κυψέλης καυσίμου PEM και διαστάσεις αυτών (Siegel, 2003)

Σύγκριση των τιμών που φαίνονται στο Σχήμα 4-29 με τις τιμές που αναφέρονται στο Σχήμα 4-30, καταδεικνύουν την ποινή ακολουθία των αντιστοιχών διαστάσεων του όγκου που κατασκευάστηκε με αυτές της διεθνούς βιβλιογραφίας.

Ένα από τα κύρια χαρακτηριστικά όταν αναφέρεται κανείς σε πορώδη υλικά είναι το πορώδες (ϵ), το οποίο με τη σειρά του επηρεάζει και άλλες ιδιότητες του πορώδους υλικού, όπως τη διαπερατότητα (Σχήμα 4-31) και τη συστροφή. Αυτό για κάποια υφάσματα ανθρακοϊνών (**carbon cloth**) αναφέρεται στη διεθνή βιβλιογραφία (Luo et.al. 2004) ίσο με 0,4 ή 40% (**Fiber volume fraction= 0,4**). Ωστόσο οι Feser et al (2006) αναφέρουν ότι το GDL παρουσιάζει υψηλό πορώδες (μεταξύ 60 και 90%). Η τιμή λοιπόν $\epsilon = 75\%$ που εμφάνιζε η συγκεκριμένη πλέξη ανθρακοϋφάσματος που κατασκευάστηκε θεωρήθηκε αποδεκτή, αφού για το σκοπό αυτό αφέθηκε και η απόσταση $m = 0,4 \text{ mm}$ μεταξύ των ινών, η οποία είναι μεγαλύτερη από τη συνήθη (βλ. και Σχήμα 4-21 και Σχήμα 4-19). Αντισταθμίζεται ωστόσο κατά τον υπολογισμό της κενής φάσης του πορώδους, από το γεγονός ότι οι ίδιες οι ίνες είναι πορώδεις στην πραγματικότητα, ενώ στο μοντέλο θεωρήθηκαν εντελώς συμπαγείς (αφού δεν υπήρχε διαφορετική δυνατότητα), αντισταθμίζοντας το γεγονός αυτό με την ύπαρξη μεγαλύτερων κενών ανάμεσά τους.



Σχήμα 4-31: Διαπερατότητα συναρτήσει του πορώδους ϵ για διάφορα εμπορικά υφάσματα (Feser et al ,2006)

4.4. Χωρική Διακριτοποίηση

Η προσομοίωση που επιχειρήθηκε στην παρούσα διατριβή περιελάμβανε και για τα δύο πορώδη μέσα που μοντελοποιήθηκαν 2 στόχους: τόσο τη διερεύνηση του ροϊκού πεδίου και του θερμοκρασιακού πεδίου που προκύπτει υπό σταθερή θερμοκρασία στο στερεό μέρος κάθε μοντέλου (στις ίνες του υφάσματος και στους συνδέσμους του μεταλλικού αφρού), όσο και με συζυγώς επιλυμένη τη θερμοκρασία στο εσωτερικό των στερεών μερών του πορώδους μέσου. Έτσι και η διακριτοποίηση εκτελέστηκε σε δύο φάσεις: Σε πρώτη φάση μετά την αναπαράσταση και αξιολόγηση της τοπολογίας, έγινε η διακριτοποίηση του χώρου τον οποίο αφήνει κενό κάθε υλικό στο εκάστοτε υπολογιστικό χωρίο χωρίς τη διακριτοποίηση της στερεάς φάσης αφού δε χρειαζόταν υπολογισμός της θερμοκρασίας (θεωρήθηκε σταθερή). Σε δεύτερη φάση έγινε διερεύνηση του θερμοκρασιακού πεδίου για την περίπτωση συζυγούς επίλυσης των εξισώσεων ενέργειας στο στερεό και το ρευστό μέσο του πορώδους συστήματος, οπότε διακριτοποιήθηκε και το εσωτερικό των στερεών μερών(συνδέσμων μεταλλικού αφρού και ινών του υφάσματος **carbon cloth**). Στις επόμενες παραγράφους αναλύεται η διαδικασία διακριτοποίησης του χώρου από τον οποίο διέρχεται το ρευστό (κενή φάση) και του χώρου που καταλαμβάνει το στερεό για τα δύο μοντέλα υλικών που παρουσιάστηκαν νωρίτερα. Παρουσιάζεται η δομή και το μέγεθος του πλέγματος και, παρά το γεγονός ότι η επίλυση του πεδίου ροής και θερμοκρασίας παρουσιάζεται στο επόμενο κεφάλαιο, εδώ γίνεται η ανάλυση περί της ανεξαρτησίας των αποτελεσμάτων από το μέγεθος του πλέγματος.

4.4.1. Διακριτοποίηση γεωμετρικού προτύπου μεταλλικού αφρού

Η διαδικασία διακριτοποίησης για το μοντέλο του μεταλλικού αφρού έγινε από μία φορά για κάθε μέγεθος πλέγματος και μεγεθύνθηκε το ίδιο το πλέγμα κάθε φορά με τον αντίστοιχο συντελεστή που προέκυπε από τη γεωμετρική

αναλογία μεταξύ των μεγεθών που εξετάζονταν ώστε να προκύψουν οι διαστάσεις που ήταν επιθυμητές για τα **40** και τα **10 PPI** αντίστοιχα.

4.4.1.1. Διακριτοποίηση χώρου ρευστής φάσης

Όπως αναφέρθηκε σε πρώτη φάση διακριτοποιήθηκε και στα δύο μοντέλα μεταλλικού αφρού που κατασκευάστηκαν (**40** και **10 PPI**) η κενή φάση για επίλυση των εξισώσεων προσομοίωσης ροής. Αρχικά ορίστηκαν σημεία στο μονοδιάστατο χώρο των ακμών που ορίζουν τον υπολογιστικό χώρο, αντιστοιχώντας στους αρχικούς κόμβους από τους οποίους θα προέρχονταν στη συνέχεια το πλέγμα. Σε δεύτερο βήμα παρήχθη επιφανειακό πλέγμα στις οριακές επιφάνειες του χώρου και στη συνέχεια με τη μορφή μη δομημένων τετραέδρων πεπερασμένων όγκων στο σύνολο της κενής φάσης. Το μέγεθός της πλευράς του κάθε τετραέδρου πεπερασμένου ογκιδίου (**interval size**) ήταν **0.025 mm** με αποτέλεσμα να υπάρχουν **155** κόμβοι κατά μήκος της μεγαλύτερης ακμής κατά μήκος της ροής. Αυτό το μέγεθος ακμής τετραέδρου έδωσε πλέγμα μεγέθους 2.8×10^6 πεπερασμένων όγκων το οποίο χρησιμοποιήθηκε για τους πρώτους υπολογισμούς ενόσω παράλληλα πραγματοποιούνταν η δημιουργία και αξιολόγηση και άλλων πλεγμάτων τα οποία συγκρίθηκαν για εξαγωγή συμπεράσματος όσον αφορά την ανεξαρτησία των αποτελεσμάτων από το μέγεθος του πλέγματος.

Έγινε έλεγχος της ποιότητας του πλέγματος για την διόρθωση ατελειών όπως ανεστραμμένοι και πολύ οξείς/ασύμμετροι (**skewed**) πεπερασμένοι όγκοι

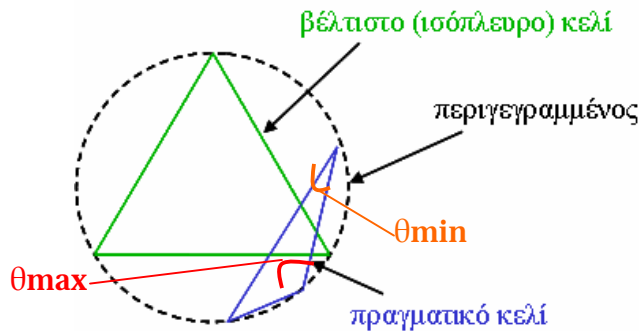
Οι αντιστραμμένοι (**inverted**) πεπερασμένοι όγκοι προκύπτουν από αριθμητικά σφάλματα κατά την κατασκευή του πλέγματος και αντιστοιχούν σε μερική υπερκάλυψη γειτονικών όγκων, οι οποίοι καταλαμβάνουν συγχρόνως τον ίδιο φυσικό χώρο, καθιστώντας έτσι την επίλυση των διακριτοποιημένων εξισώσεων επιρρεπή σε αριθμητικά σφάλματα.

Η οξύτητα/ασυμμετρία (**skewness**), ορίζεται είτε με τη χρήση του ορισμού του μεγέθους (μονο για την περίπτωση τριγωνικών πεπερασμένων στοιχείων στο 2διάστατο χώρο, ή τετραέδρων πεπερασμένων όγκων στον 3διάστατο), είτε με τη χρήση του ορισμού της μέγιστης γωνίας φ_{\max} (Σχήμα 4-32). Έτσι:

$$\alpha) \text{ Ασυμμετρία} = \frac{\text{b\acute{e}l tistom\acute{\eta}koV - pragmatik\acute{o}}}{\text{b\acute{e}l tisto}}$$

$$\beta) \quad \eta \quad \varphi_{\max} = \max \left[\frac{q_{\max} - q_e}{180 - q_e}, \frac{q_e - q_{\min}}{q_e} \right]$$

Σημειώνεται εδώ ότι θ_{\max} και θ_{\min} είναι η μέγιστη και ελάχιστη γωνία που σχηματίζεται μεταξύ των οποιονδήποτε ακμών του τετραέδρου και $\theta_e = 60^\circ$ για τετράεδρα ενώ $\theta_e = 90^\circ$ για ορθογώνια παραλληλεπίπεδα πεπερασμένα στοιχεία (όγκοι).



Σχήμα 4-32: Ασυμμετρία κελιών πεπερασμένων στοιχείων/όγκων

Το κριτήριο που πληρούσε το CAD-CAE σύστημα στο οποίο έγινε η διακριτοποίηση ήταν **0,97** για την φ_{\max} που ορίζει την οξύτητα, κριτήριο που δεν είναι πολύ αυστηρό όσον αφορά την ποιότητα του πλέγματος (για τετράεδρους όγκους ένα πάρα πολύ καλό πλέγμα πρέπει να έχει φ_{\max} που κυμαίνεται μεταξύ **0,4** και **0,6**). Όπως φαίνεται όμως (Σχήμα 4-33), το **91,98%** των στοιχείων του πλέγματος είχε $\varphi_{\max} < 0,4$ καθιστώντας το πλέγμα εξαιρετικής ποιότητας. Ωστόσο η ποιότητα εξαρτάται και από την ομοιομορφία του πλέγματος η οποία λόγω του μεγάλου πλήθους των πεπερασμένων όγκων ήταν σε πολύ ικανοποιητικά επίπεδα, με ομαλές μεταβολές στο μέγεθος των **elements**.

Summarizing EQUIANGLE SKEW of 3D elements measured for 1 meshed volume:
 Volume volume.3335 meshed using Tetrahedral scheme and size of 0.025000.

From value	To value	Count in range	% of total count (2867464)
0	0.1	97094	3.39
0.1	0.2	141481	4.93
0.2	0.3	557120	19.43
0.3	0.4	1186240	41.37
0.4	0.5	655424	22.86
0.5	0.6	182604	6.37
0.6	0.7	41043	1.43
0.7	0.8	6437	0.22
0.8	0.9	21	0.00
0.9	1	0	0.00
0	1	2867464	100.00

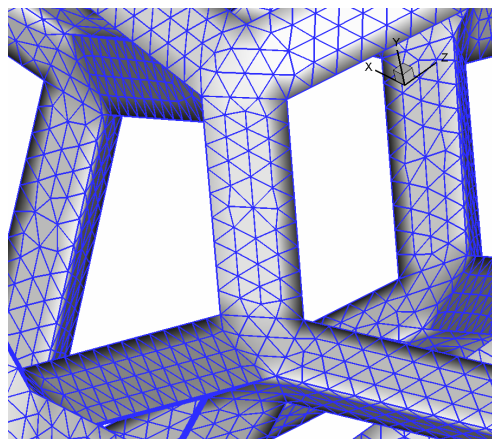
Measured minimum value: 5.05461e-005
 Measured maximum value: 0.817375

0 out of 1 meshed volume failed mesh check for skewed elements (EQUIANGLE SKEW > 0.97).

0 out of 1 meshed volume failed mesh check for inverted elements.

Σχήμα 4-33: Έλεγχος ποιότητας για το αρχικό πλέγμα του όγκου μεταλλικού αφρού

Στο μεταξύ, όπως αναφέρθηκε, πραγματοποιήθηκε μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος (βλ. 4.4.1.3) και το πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε τελικά στις περισσότερες περιπτώσεις (**basecase mesh**) ήταν μεγέθους $1,5 \times 10^6$ τετράεδρων όγκων. Έτσι σε όσα αποτελέσματα παρουσιαστούν όσον αφορά το πεδίο ροής (χωρίς διακριτοποίηση της στερεής φάσης δηλαδή) και δεν αναγράφεται το μέγεθος του πλέγματος, αυτό αντιστοιχεί στην περίπτωση των $1,5E+06$ τετράεδρων όγκων (Σχήμα 4-34).



Σχήμα 4-34 Εποπτική απεικόνιση του διακριτοποιημένου όγκου ελέγχου για επιφανειακό πλέγμα στο μοντέλο μεταλλικού αφρού

4.4.1.2. Διακριτοποίηση χώρου ρευστής-στερεής φάσης

Κατόπιν τούτων και αφού είχε πραγματοποιηθεί ήδη η διερεύνηση του πεδίου ροής και του πεδίου θερμοκρασίας υπό σταθερή θερμοκρασία στους συνδέσμους (**ligaments**), «ξανακόπηκε» ο όγκος ελέγχου από τον αρχικό εκτεταμένο όγκο μεταλλικού αφρού που είχε δημιουργηθεί (Σχήμα 4-16) και συμπεριέλαβε στο εσωτερικό του και ένα δεύτερο ενιαίο όγκο, αυτή τη φορά, τον όγκο της στερεάς φάσης. Στρατηγικό ζήτημα ήταν να ταιριάζουν τα 2 πλέγματα στις διεπιφάνειες στερεού-ρευστού καθώς θα ήταν αδύνατη η επίλυση των εξισώσεων ενέργειας συζυγώς για τις δύο φάσεις (στερεή και αέρια) σε διαφορετική περίπτωση. Το πρόβλημα υπερκεράστηκε με τον τρόπο που έγινε η αποκοπή του όγκου της στερεάς φάσης και η συνύπαρξή της με την αέρια (έγινε **split** και όχι **subtract**). Έτσι δημιουργήθηκε πλέγμα ομοίως τετράεδρων πεπερασμένων όγκων στο εσωτερικό των στερεών συνδέσμων (**ligaments**) του αφρού με μικρότερο όμως μέγεθος πλέγματος (ήτοι μεγαλύτερο **interval size**) με αποτέλεσμα το συνολικό πλέγμα (στερεού και ρευστού) να είναι της τάξης των 8×10^5 τετράεδρων, γεγονός που ήταν αποδεκτό και άνευ σφάλματος σύμφωνα με τη μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος που ακολουθεί.

4.4.1.3. Ανεξαρτησία αποτελεσμάτων από το πλέγμα

Σε κάθε αριθμητική διερεύνηση και προσομοίωση που αφορά μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων ή όγκων, οφείλει να γίνεται αντιπαραβολή των αποτελεσμάτων που προκύπτουν για διαφορετικά μεγέθη πλέγματος και να επιλέγεται, για οικονομία υπολογιστικών πόρων, εκείνο το οποίο είναι το ελάχιστο για την καλύτερη δυνατή ακρίβεια στα αποτελέσματα. Έτσι και στη συγκεκριμένη μελέτη και προκειμένου να διαπιστωθεί το επίπεδο απαγκύρωσης των αποτελεσμάτων από το μέγεθος του πλέγματος μελετήθηκαν τρία διαφορετικά πλέγματα μεγέθους 7×10^5 , $1,5 \times 10^6$ και $2,8 \times 10^6$ πεπερασμένων όγκων (τετράεδρα). Έγινε διερεύνηση της πτώσης πίεσης που προκύπτει με την

ίδια οριακή συνθήκη σταθερής ταχύτητας στην είσοδο του υπολογιστικού χωρίου (**1,538m/s**) και προέκυψαν τα εξής αποτελέσματα που φαίνονται (Πίνακας 4-5).

Ανεξαρτησία Πλέγματος			
Πλέγμα	$\Delta P/L$ [Pa/m]	w-vel (ct) [m/s]	Διαφορά (%)
7,00E+05	1101,616667	1,538	1,6
1,50E+06	1119,566667	1,538	-
2,80E+06	1128,4	1,538	0,78

Πίνακας 4-5: Σύγκριση των διαφορών για τα εξεταζόμενα πλέγματα με αναφορά σε αυτό των **1,50E+06** τετράεδρων πεπερασμένων όγκων.

Ως εκ τούτου θεωρήθηκε πως ακόμη και το αραιότερο πλέγμα παρείχε επαρκή ακρίβεια της λύσης. Για λόγους σύγκρισης αναφέρεται πως οι **Boomsma et al., (2003)** χρησιμοποίησαν τρία διαφορετικά πλέγματα τάξης **$2,2 \times 10^5$, $4,4 \times 10^5$ and $8,3 \times 10^5$ elements** με αντίστοιχες διαφορές **4,37%** και **1,44%** διαδοχικά στα αποτελέσματα της κανονικοποιημένης πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους. Το πυκνότερό τους πλέγμα αντιστοιχεί στο αραιότερο που εξετάστηκε εδώ.

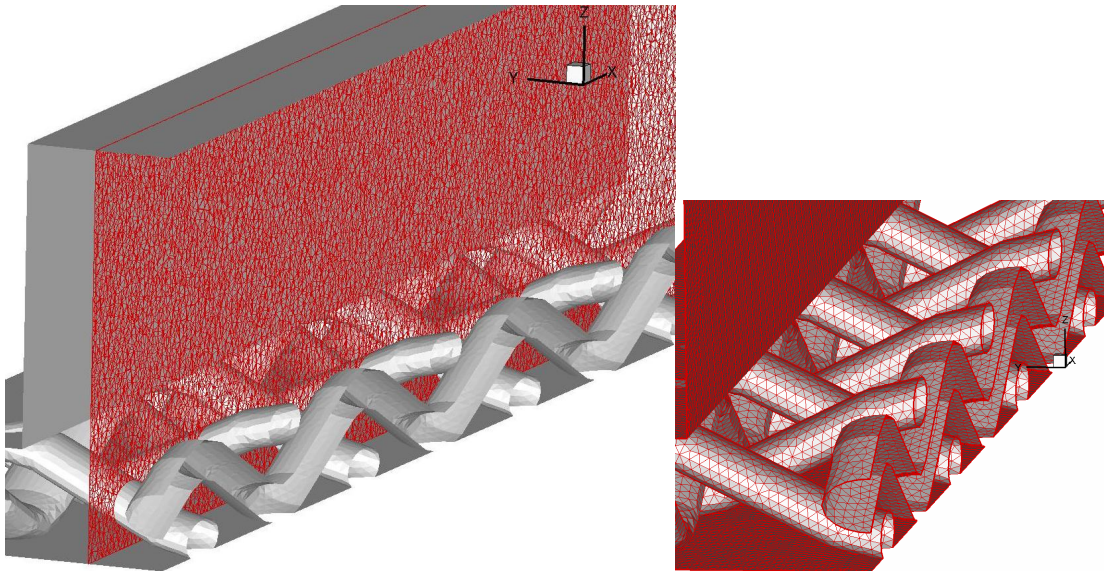
4.4.2. Διακριτοποίηση γεωμετρικού προτύπου GDL

Όσον αφορά το δεύτερο είδος πορώδους υλικού που προσομοιώνεται στην παρούσα διατριβή ακολουθήθηκε η ίδια διαδικασία: διακριτοποίηση κενού όγκου-διερεύνηση ανεξαρτησίας αποτελεσμάτων από το πλέγμα-διακριτοποίηση στερεής φάσης ταυτόχρονα με την κενή. Η διαδικασία ακολουθεί λεπτομερώς παρακάτω.

4.4.2.1. Διακριτοποίηση χώρου ρευστής-στερεής φάσης

Στην πρώτη φάση της διαδικασίας για τον όγκο ελέγχου του διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM, έγινε διακριτοποίηση του κενού χώρου με μη δομημένο πλέγμα τετράεδρων πεπερασμένων όγκων. Έτσι κατασκευάστηκε το βασικό πλέγμα διερεύνησης της ροής το οποίο αριθμούσε περίπου **7×10^5** πεπερασμένους όγκους (τετράεδρα) και το οποίο ελέγχθηκε ομοίως για την ποιότητά του και

βρέθηκε να έχει το **92,61%** των πεπερασμένων όγκων του με $\phi_{\max} < 0,4$ και κανένα αντιστραμμένο τετράεδρο (Σχήμα 4-35). Επιπλέον έγινε παράλληλα η μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος (βλ. 4.4.2.2) και επιλέχθηκε αυτό το πλέγμα χωρίς εκπτώσεις στην αξιοπιστία των αποτελεσμάτων.



α)

β)

Summarizing EQUIANGLE SKEW of 3D elements measured for 1 meshed volume:
Volume volume.132 meshed using Tetrahedral scheme and size of 0.032000.

From value	To value	Count in range	% of total count (672013)
0	0.1	25959	3.86
0.1	0.2	36082	5.37
0.2	0.3	131181	19.52
0.3	0.4	286809	42.68
0.4	0.5	142345	21.18
0.5	0.6	37800	5.62
0.6	0.7	9571	1.42
0.7	0.8	2121	0.32
0.8	0.9	143	0.02
0.9	1	2	0.00
0	1	672013	100.00

Measured minimum value: 0.000459583
Measured maximum value: 0.933257

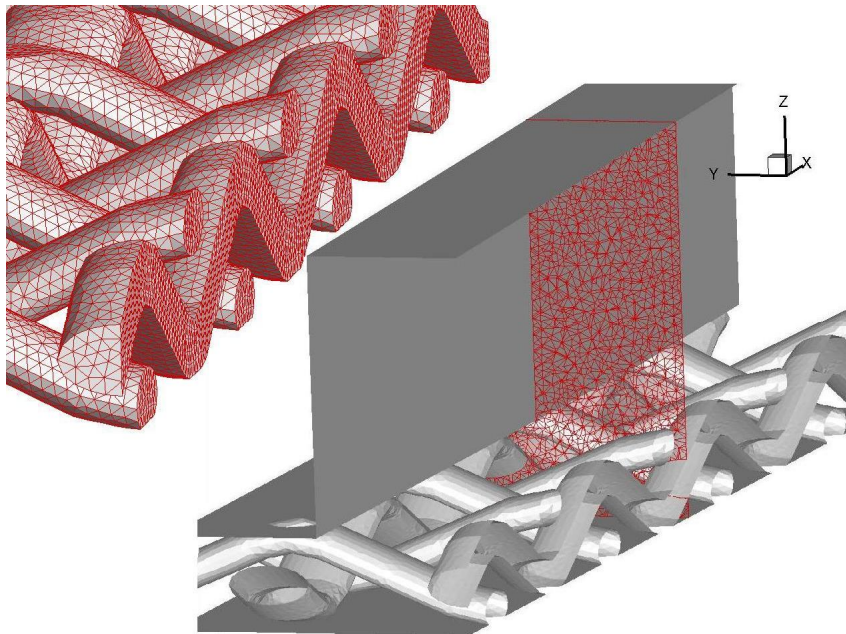
0 out of 1 meshed volume failed mesh check for skewed elements (EQUIANGLE SKEW > 0.97)

0 out of 1 meshed volume failed mesh check for inverted elements.

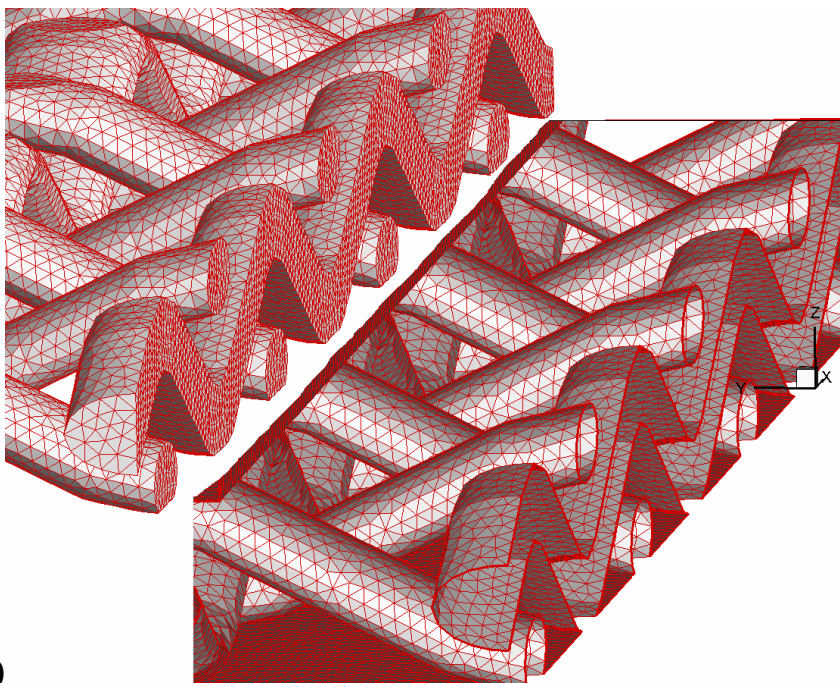
γ)

Σχήμα 4-35: α) Λεπτομέρεια του εσωτερικού του πλέγματος της κενής φάσης β) λεπτομέρεια επιφανειακού πλέγματος στις διεπιφάνειες των ινών γ) ποιοτική κατανομή του πλέγματος για το διαχύτη της κοψέλης καυσίμου

Σε δεύτερη φάση έγινε διακριτοποίηση και των στερεών μερών του διαχύτη **GDL** για τις κυψέλες καυσίμου PEM και συγκεκριμένα αφού επανατροποποιήθηκε η γεωμετρία ώστε να περιλαμβάνει και τις στερεές ίνες του υφάσματος, δημιουργήθηκε πλέγμα και σε αυτές. Ωστόσο ελήφθη πρόνοια ώστε οι συνολικοί πεπερασμένοι όγκοι να είναι της αυτής τάξης μεγέθους με το αρχικό πλέγμα (ουσιαστικά μπήκαν επιπλέον 10^5 τετράεδρα στο εσωτερικό των ινών). Στο παρακάτω σχήμα (Σχήμα **4-36**) μπορεί να γίνει σύγκριση μεταξύ του πλέγματος της ρευστής (κενής) φάσης μόνο και του ομοίου πλέγματος με διακριτοποίηση και του στερεού όγκου. Τονίζεται και πάλι η σημασία της ταύτισης των επιφανειακών πλεγμάτων των ινών από την πλευρά της ρευστής και στερεής φάσης σε κάθε σημείο.



α)



β)

Σχήμα 4-36: α) Πλέγμα στερεής και ρευστής φάσης β) οι ίδιες ίνες με και χωρίς πλέγμα εντός του στερεού

4.4.2.2. Ανεξαρτησία αποτελεσμάτων από το πλέγμα

Όπως και στην περίπτωση του υπολογιστικού όγκου του μοντέλου μεταλλικού αφρού, έτσι και στην περίπτωση του μοντέλου διαχύτη GDL για τις κυψέλες καυσίμου PEM, έγινε παραμετρική μελέτη ανεξαρτησίας των εξαγόμενων κάθε φορά αποτελεσμάτων από το μέγεθος του πλέγματος. Έτσι μελετήθηκαν τρία πλέγματα –πέρα από το βασικό πλέγμα- τετράεδρων μη δομημένων πεπερασμένων όγκων (μόνο ροή), μεγέθους $2,72 \times 10^5$, $8,87 \times 10^5$ και $1,28 \times 10^6$ τετράεδρων. Για την ίδια οριακή συνθήκη σταθερής ταχύτητας στην είσοδο του υπολογιστικού χωρίου ($1,43 \text{ m/s}$) προέκυψε ότι η διαφορά στο ίδιο εξαγόμενο μέγεθος (πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους), ήταν **1,69%** και **1,01%** με αναφορά το μεσαίο πλέγμα των $8,87 \times 10^5$ elements. Ως εκ τούτου θεωρήθηκε πως είχε επιτευχθεί ανεξαρτησία της λύσης από το χρησιμοποιούμενο πλέγμα και πως το βασικό πλέγμα των 7×10^5 εξυπηρετούσε τις ανάγκες της προσομοίωσης από άποψη υπολογιστικής ικανότητας. Παρακάτω (Πίνακας 4-6), γίνεται παρουσίαση των αποτελεσμάτων για τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν με σύγκριση ως προς το πλέγμα που τελικώς χρησιμοποιήθηκε.

Ανεξαρτησία Πλέγματος			
Πλέγμα	$\Delta P/L$ [Pa/m]	w-vel (ct) [m/s]	Διαφορά (%)
2,72E+05	3080,16	1,43	1,77
6,72 E+05	3135,66	1,43	-
8,87E+05	3133,22	1,43	0,08
1,280E+06	3167,8	1,43	1,02

Πίνακας 4-6: Σύγκριση αποτελεσμάτων για τα εξεταζόμενα πλέγματα με αναφορά σε αυτό των $7,0 \text{ E}+05$ τετράεδρων πεπερασμένων όγκων

5. Πεδίο Ροής και Θερμοκρασίας στη Μικροκλίμακα

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται εκτενής αναφορά στα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διερεύνηση του πεδίου ροής, του πεδίου θερμοκρασίας στο ρευστό για σταθερή θερμοκρασία στερεάς φάσης και του πεδίου θερμοκρασίας τόσο στο ρευστό όσο και στη στερεά φάση -για συζυγή επίλυση- των συστημάτων ρευστού-πορώδους που μελετήθηκαν. Επιπρόσθετα, για την περίπτωση της προσομοίωσης διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM παρουσιάζονται και αποτελέσματα από τη διερεύνηση της παραγωγής, κατανομής και τοπικής συγκέντρωσης σχετικής υγρασίας, καθώς και συμπύκνωσής της.

Η αρχική πιστοποίηση της αξιοπιστίας του υπολογιστικού κώδικα που χρησιμοποιήθηκε για τη συζυγή επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου παρουσιάζεται στην πρώτη παράγραφο.

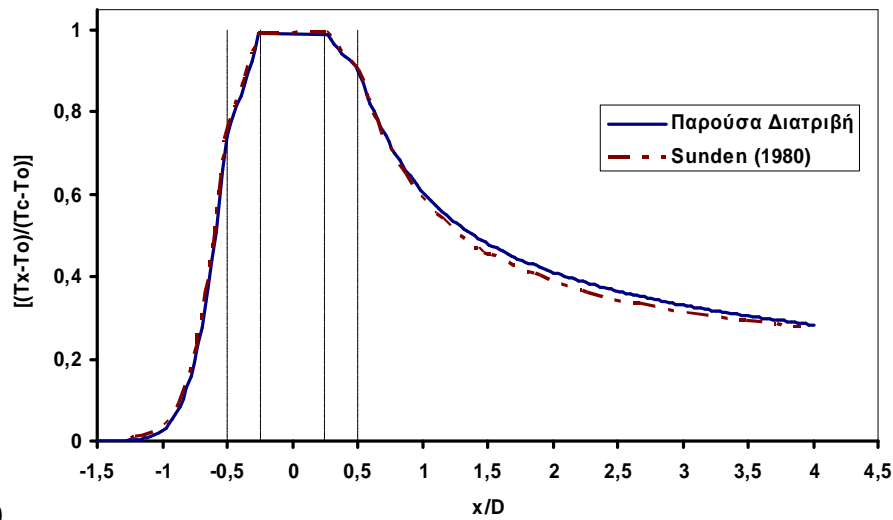
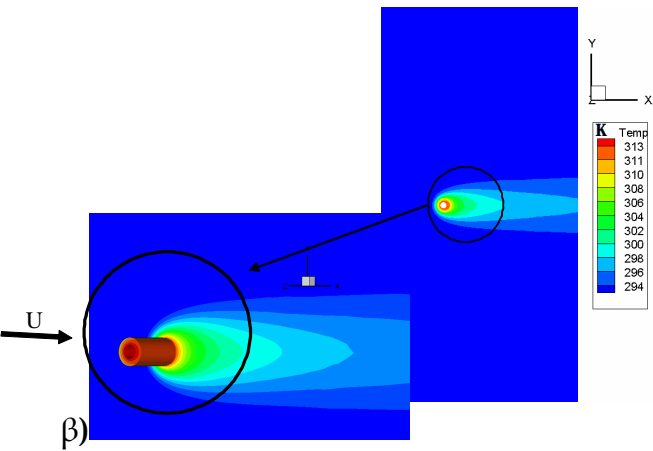
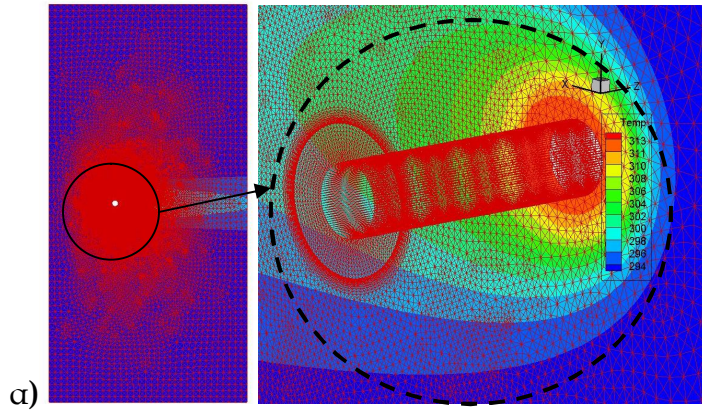
5.1. Πιστοποίηση υπολογιστικού εργαλείου συζυγούς επίλυσης θερμοκρασιακού πεδίου

Η μεθοδολογία που αναπτύχθηκε όσον αφορά τη διερεύνηση του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό της στερεάς φάσης των υλικών περιλαμβάνει τη χρήση υπολογιστικού κώδικα επίλυσης της εξίσωσης ενέργειας για συζευγμένη παρουσία συναγωγής λόγω του ρέοντος ρευστού εξωτερικά της στερεάς φάσης του πορώδους και αγωγής στο εσωτερικό του εκάστοτε υλικού. Σκοπός της μελέτης ήταν η αριθμητική διερεύνηση της θερμοκρασιακής κατανομής τόσο στο περιρέον πεδίο ροής (θερμοκρασίες ρευστού), όσο και στο εσωτερικό της στερεάς φάσης κάθε υλικού (θερμοκρασιακή κατανομή στερεάς φάσης) με τη χωρική διακριτοποίηση και του στερεού μέρους. Επειδή η χρήση της συζυγούς επίλυσης στο υπολογιστικό εργαλείο είναι πρωτογενής και δεν είχε πιστοποιηθεί μέχρι τώρα σε κάποια εφαρμογή η αξιοπιστία της, έπρεπε να επαληθευτεί και να ελεγχθεί η ορθότητα των αποτελεσμάτων. Ωστόσο οι

εφαρμογές που μελετήθηκαν δεν παρουσίαζαν στη διεθνή βιβλιογραφία πειραματικά αποτελέσματα μέτρησης θερμοκρασίας στο εσωτερικό των υλικών ώστε να γίνει με ασφάλεια κάτι τέτοιο.

Για τον σκοπό αυτό, επελέγη διαφορετική και απλοποιημένη εφαρμογή, η οποία ήταν πλήρως καταγεγραμμένη κατά τρόπο που να επιτρέπει την επαλήθευση της ορθότητας των εξαγομένων αποτελεσμάτων από τη συγκεκριμένη αριθμητική μεθοδολογία. Έτσι έγινε αντιπαραβολή αριθμητικής διερεύνησης παραδείγματος με δημοσιευμένη μελέτη (**Sunden, 1980** στο Μπούρης, **1997**) ροής ρευστού εξωτερικά κυλίνδρου με δεδομένο πάχος τοιχώματος, το εσωτερικό του οποίου διατηρείται σε σταθερή θερμοκρασία. Η θερμική αγωγιμότητα του στερεού κυλίνδρου θεωρήθηκε τετραπλάσια της αντίστοιχης του περιέροντος ρευστού, ενώ ο αριθμός **Re** της αδιατάρακτης ροής του με βάση την εξωτερική διάμετρο (**D**) του κυλίνδρου θεωρήθηκε **Re=20**. Επιβλήθηκε σταθερή θερμοκρασία στο εσωτερικό του κυλίνδρου (**T_c**), ενώ η ταχύτητα (**U**) και θερμοκρασία (**T₀**) του ρευστού ανάντι του κυλίνδρου θεωρήθηκαν σταθερές. Ο υπολογισμός έγινε στον 3-διάστατο χώρο με διακριτοποίηση μη δομημένου πλέγματος τετράεδρων πεπερασμένων όγκων τόσο για το χώρο της ροής (**3,5×10⁶** τετράεδρα), όσο και για τα στερεά τοιχώματα του κυλίνδρου (**2,4×10⁵** τετράεδρα, βλ. Σχήμα 5-1α).

Τα αποτελέσματα της προσέγγισης σε σχέση με τη δημοσιευμένη αναλυτική λύση από τον **Sunden (Sunden, 1980)** αφορούν την κατανομή της αδιάστατης θερμοκρασίας $(T_x - T_0)/(T_c - T_0)$, όπου **T_c**, **T_x** είναι η θερμοκρασία στον άξονα του κυλίνδρου και σε απόσταση **x** από τον άξονα κατά την φορά της ροής, αντίστοιχα (Σχήμα 5-1).



γ)

Σχήμα 5-1: Ανισόθερμη ροή γύρω από κοίλο κύλινδρο για $Re = 20$, $Pr = 0,72$, $k_s = 4k_f$. α) Χωρική διακριτοποίηση, β) πεδίο θερμοκρασίας, και γ) Αδιάστατη θερμοκρασία (συζυγής επίλυση) διά του στερεού τοιχώματος και του ρέοντος ρευστού από τον άξονα και κατά την φορά της ροής.

Τα αποτελέσματα φαίνονται σε καλή συμφωνία με τα αντίστοιχα που είναι δημοσιευμένα από το **Sunden (Sunden, 1980)**, καθιστώντας καταρχάς το υπολογιστικό εργαλείο αξιόπιστο.

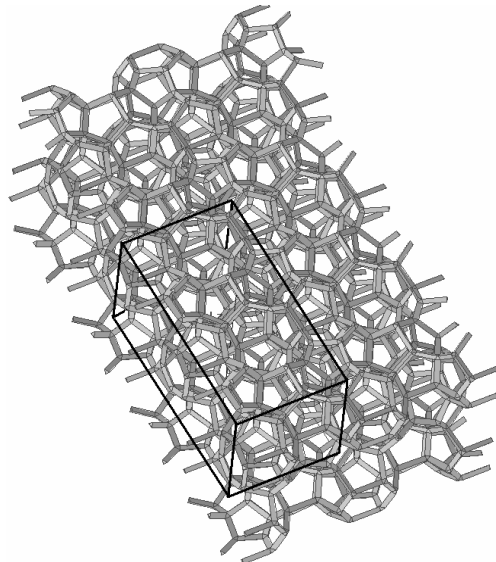
5.2. Μελέτη πεδίου ροής και θερμοκρασίας στη μικροτοπολογία μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής

Η προσομοίωση ροής μέσα από μεταλλικό αφρό ανοικτής δομής, έγινε όπως προαναφέρθηκε, για τρεις οριακές συνθήκες: α) Επιβεβλημένης διαφοράς πίεσης στο υπολογιστικό χωρίο (με σταθερή θερμοκρασία στους κομβοσυνδέσμους/**ligaments**) β) σταθερής ταχύτητας εισόδου (με σταθερή θερμοκρασία στους κομβοσυνδέσμους) και γ) σταθερής ταχύτητας εισόδου (με συζυγώς υπολογισμένη θερμοκρασία στους κομβοσυνδέσμους). Στις **2** πρώτες περιπτώσεις όπως εξηγείται στο **3^ο** κεφάλαιο το κατώτατο επίπεδο αποτελούσε συμμετρικό επίπεδο, ενώ στην **3^η** περίπτωση επιβλήθηκε συνθήκη τοιχώματος με σταθερή θερμοκρασία από όπου ξεκινούσε η μετάδοση θερμότητας στο υπόλοιπο σώμα της στερεάς φάσης του μεταλλικού αφρού. Τόσο στην περίπτωση του πεδίου ροής, όσο και σε αυτή του θερμοκρασιακού πεδίου, γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων με αντίστοιχα διαθέσιμα από τη διεθνή βιβλιογραφία.

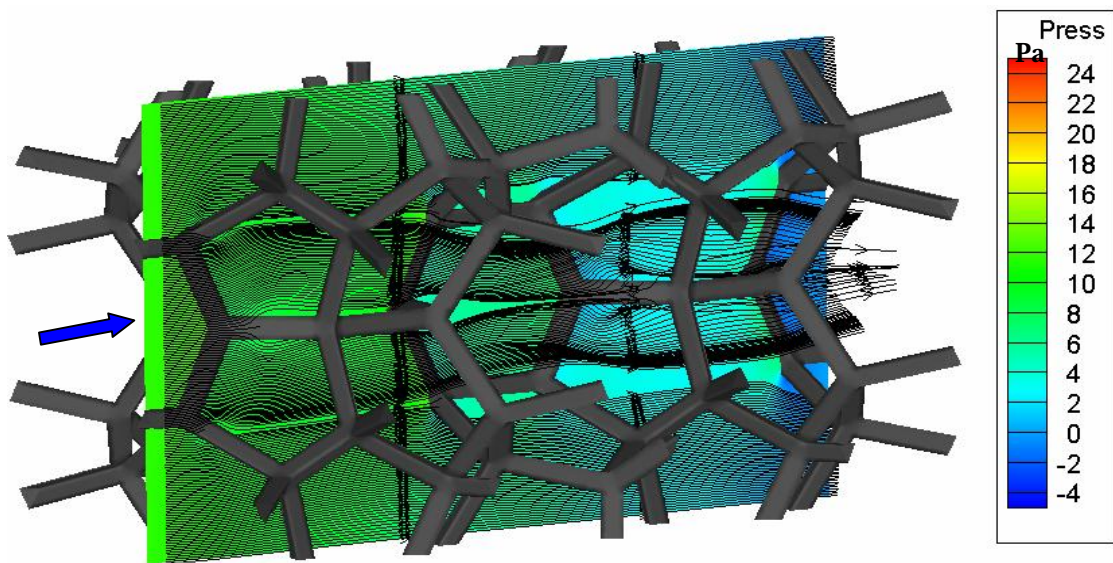
5.2.1. Πεδίο Ροής

Η παραμετρική μελέτη του ροϊκού πεδίου που προκύπτει από τη διέλευση αέρα μέσα από κελιά μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής περιελάμβανε τόσο την περίπτωση πλήρως ανεπτυγμένης ροής, όσο και φαινομένων εισόδου. Στην πρώτη περίπτωση, προκειμένου να προσομοιωθεί η πλήρως ανεπτυγμένη ροή, θεωρήθηκε πως το υπολογιστικό χωρίο αποτελεί ένα κομμάτι μεταλλικού αφρού, το οποίο βρίσκεται κατάντι της περιοχής εισόδου της ροής σε απείρων διαστάσεων αφρό περιοδικής δομής (Σχήμα **5-2**), όπου επικρατεί πλήρως ανεπτυγμένη ροή με σταθερή κλίση πίεσης. Προς τούτο, οι οριακές συνθήκες που

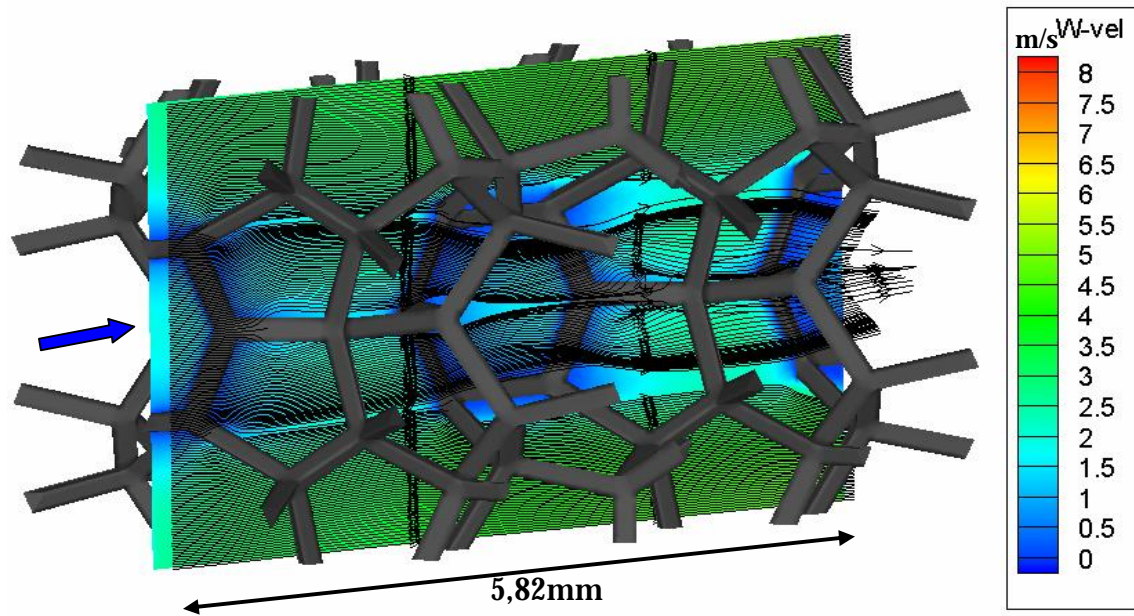
εξετάστηκαν ήταν –όπως αναφέρεται και στο κεφάλαιο 3- επιβεβλημένη διαφορά στατικής πίεσης μεταξύ της εισόδου και της εξόδου του χωρίου και συνθήκες συμμετρίας στα όρια όλων των υπολοίπων επιφανειών που ορίζουν τον υπολογιστικό χώρο. Θεωρείται έτσι ότι η ροή έχει αποκατασταθεί και ότι ο όγκος ελέγχου συνορεύει με καθρεπτικούς αντίστοιχους όγκους, αποτελώντας έτσι μέρος ενός ευρύτερου συνόλου μεταλλικού αφρού (Σχήμα 5-2, Σχήμα 5-3). Στην περίπτωση αυτή, υπολογίστηκε η προκύπτουσα παροχή μάζας που διέρχεται του αφρού με δεδομένη την επιβεβλημένη πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους στην φορά της ροής ενώ έγινε και οπτικοποίηση των ροϊκών γραμμών εντός του πορώδους μέσου . Μόνο η αντιστοιχία πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους και παροχής μάζας ελέγχθηκε και συγκρίνεται μακροσκοπικά με αντίστοιχες πειραματικές τιμές (Haack et al., 2001, Alvarez-Hernandez, 2005, Dukhan, 2006 και ERG-Duocel®), καθώς δεν υπάρχουν μέχρι στιγμής δημοσιευμένες μετρήσεις σε επίπεδο μικροκλίμακας για ταχύτητες ή οπτικοποίηση της ροής στο εσωτερικό μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής (Σχήμα 5-3).



Σχήμα 5-2: Το υπολογιστικό χωρίο (διακρίνεται με μορφή παραλληλεπίπεδου) θεωρήθηκε μέρος μεταλλικού αφρού απείρων διαστάσεων ώστε να διερευνηθεί πλήρως ανεπτυγμένη ροή.



α)



β)

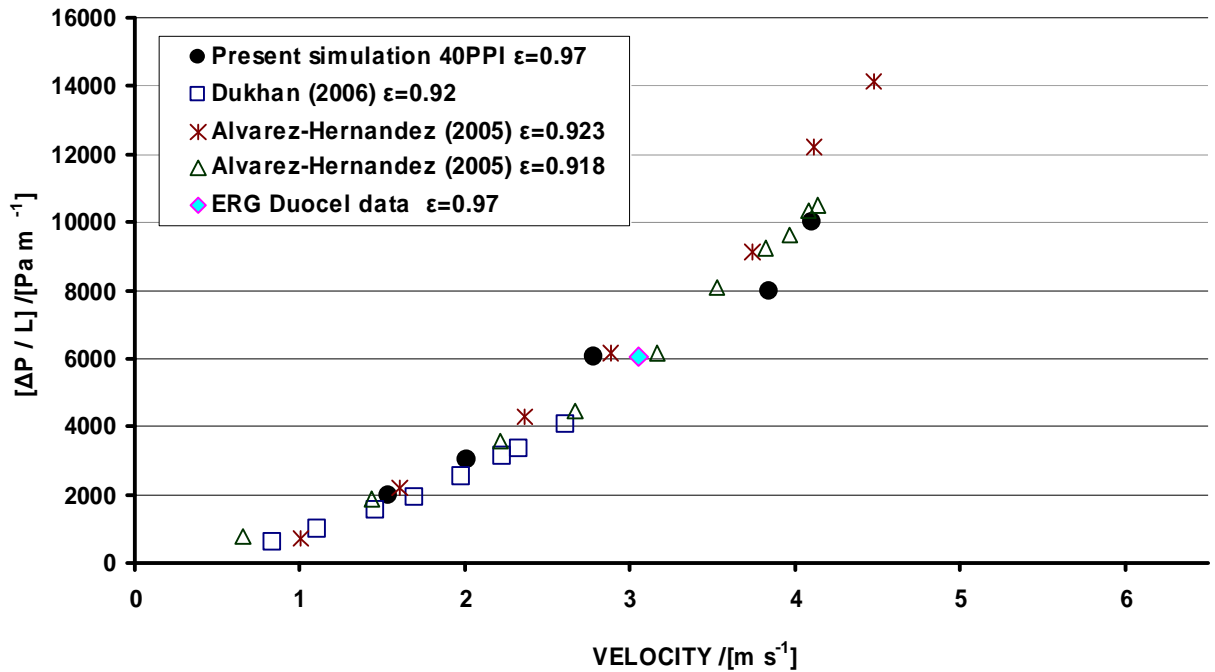
Σχήμα 5-3: Χαρακτηριστική τομή του πεδίου ροής στο εσωτερικό υπολογιστικού χωρίου για τα 40 PPI και επιβεβλημένη πτώση πίεσης 2000 Pa/m με την παρουσία ροϊκών γραμμών για το συγκεκριμένο επίπεδο. α) Ισοϋψείς πίεσης και β) ισοϋψείς ταχύτητας στη διεύθυνση της ροής.

PPI	ΕΠΙΒΕΒΛΗΜΕΝΗ ΔΡ/Λ [Pa/m]							
10	700	1000	1400	2000	3000	6060	8000	-
	ΑΡΙΘΜΟΣ Re							
Re_{dp}	786,6	958,2	1058,8	1281,7	1596,4	2133,7	2592,5	-
Re_{dl}	46,4	56,5	62,5	75,6	94,2	125,9	153	-
Re_K	10,5	12,8	14,1	17,1	21,3	28,5	34,6	-
Re_{Dh}	1096,3	1335,4	1475,7	1786,3	2224,9	2973,7	3613,2	-
PPI	ΕΠΙΒΕΒΛΗΜΕΝΗ ΔΡ/Λ [Pa/m]							
40	-	-	-	2000	3000	6060	8000	10000
	ΑΡΙΘΜΟΣ Re							
Re_{dp}	-	-	-	206,3	269,5	373,5	515,1	550,5
Re_{dl}	-	-	-	12,8	16,7	23,1	31,9	34,1
Re_K	-	-	-	72,6	94,9	131,5	181,3	193,8
Re_{Dh}	-	-	-	275,1	359,3	497,9	686,8	734

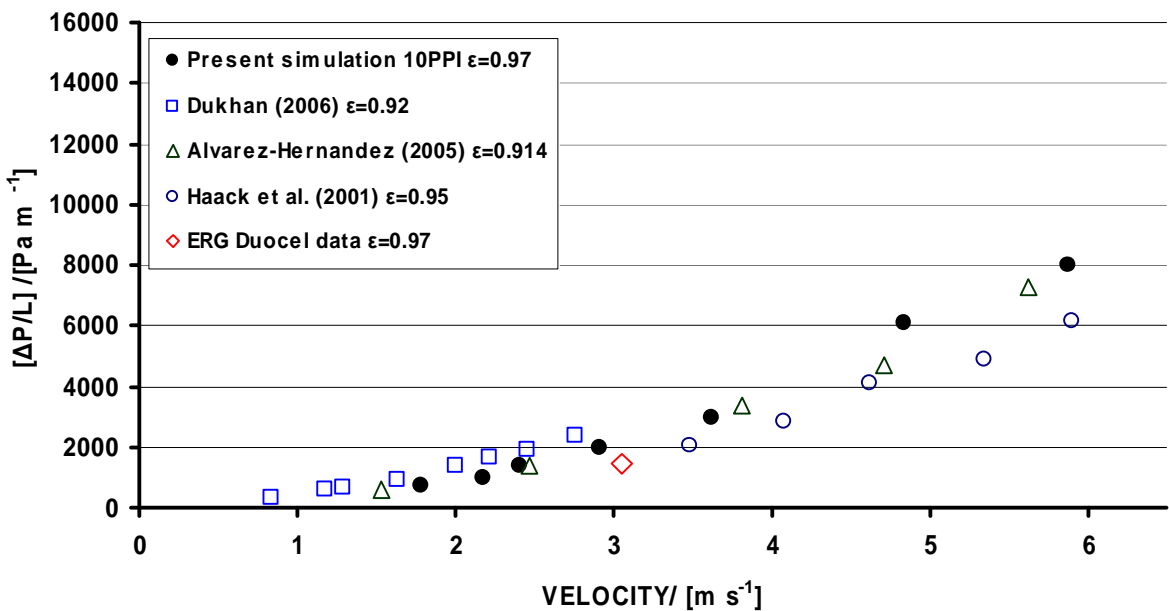
Πίνακας 5-1: Τιμές επιβολής πτώσης πίεσης ανά περίπτωση τεμαχίου προσομοίωσης και προκύπτοντες αριθμοί **Re** ανάλογα με τον ορισμό τους και βάσει της μέσης ταχύτητας ροής.

Έτσι σε αυτή την περίπτωση της διερεύνησης πεδίου πλήρως ανεπτυγμένης ροής μελετήθηκαν τόσο για τα **40PPI** όσο και για τα **10PPI** μεταλλικού αφρού διάφορες τιμές επιβεβλημένης πτώσης πίεσης (Πίνακας 5-1). Η ανάπτυξη του πεδίου ροής στο εσωτερικό του όγκου ελέγχου σε κάθε περίπτωση οδηγούσε στον υπολογισμό της παροχής μάζας που με τη σειρά της χρησιμοποιούνταν για την εξαγωγή της μέσης ταχύτητας ροής. Αυτή ακριβώς η ταχύτητα ροής (**bulk velocity**) χρησιμοποιήθηκε για να αποτυπωθούν τα διαγράμματα πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους συναρτήσει της μέσης ταχύτητας ροής. Οι ταχύτητες που προκύπτουν καλύπτουν σε ένα βαθμό το εύρος των χρησιμοποιούμενων ταχυτήτων προσέγγισης σε σύμπακτους εναλλάκτες θερμότητας (**Boomsma et**

al.,2003 και Kays and London, 1984) Η σύγκριση των διαγραμμάτων αυτών για τα 40 και 10 PPI φαίνεται (Σχήμα 5-4) σε αντιπαράθεση με αντίστοιχες βιβλιογραφικές τιμές. Πρέπει εδώ να τονιστεί πως σε όλες τις περιπτώσεις πλην δύο, το πεδίο ροής ήταν στη στρωτή περιοχή όπως προκύπτει τόσο από τις τιμές των αριθμών **Re** (Πίνακας 5-1 και Pinson et al., 2006), όσο κι από τη συμπεριφορά του ίδιου του πεδίου ροής και του επιλυτή του. Χαρακτηριστικά αναφέρεται πως οι Pinson et al., 2006 δίνουν για τυρβώδη ροή σε πορώδη μέσα, με αριθμό **Re** βασισμένο στην υδραυλική διάμετρο, κατώτατες τιμές της τάξης του 10^4 . Στις τελευταίες 2 περιπτώσεις μόνο για τα 10PPI (δηλαδή για $\Delta P/L=6060$ και $\Delta P/L=8000 \text{ Pa/m}$), η επίλυση του πεδίου φάνηκε να παρουσιάζει αστάθειες και τα υπόλοιπα των επαναληπτικών εξισώσεων του επιλυτή να αυξάνουν με αποτέλεσμα να μην επέρχεται σύγκλιση. Επειδή η κλίμακα μεγέθους στα 10PPI ήταν μεγαλύτερη από την αντίστοιχη των 40PPI (κατά 3,41 φορές), η μετάβαση στην τυρβώδη περιοχή έρχονταν νωρίτερα, όπως προκύπτει από τους αντίστοιχους αριθμούς **Re** οι οποίοι είναι σε αντιστοιχία με τους ορισμούς που γίνονται στην ενότητα 3 και χρησιμοποιούν σαν χαρακτηριστικό μήκος υπολογισμού του αριθμού **Re** τη διάμετρο του πόρου ή του συνδέσμου του κελιού μεταλλικού αφρού, την τετραγωνική ρίζα της διαπερατότητάς του, ή τέλος την υδραυλική διάμετρο του υπολογιστικού όγκου που εξετάζεται (Πίνακας 5-1). Έτσι και ενώ παρατηρήθηκε δυσκολία στη σύγκλιση της λύσης, χρησιμοποιήθηκε μόνο για την περίπτωση των 2 αυτών τελευταίων τιμών στα 10PPI το μοντέλλο τύρβης **k-ε** σε μια προσπάθεια να σταθεροποιηθεί η σύγκλιση. Πρέπει εδώ να αναφερθεί ότι τόσο από τη συμπεριφορά του κώδικα κατά τη σύγκλιση της επίλυσης, όσο και από τις τιμές των αριθμών **Re** (Πίνακας 5-1), οι συγκεκριμένες περιπτώσεις δεν εντάσσονται στην καθαρά τυρβώδη περιοχή, αλλά περισσότερο στη μεταβατική (Pinson et al., 2006).



α)

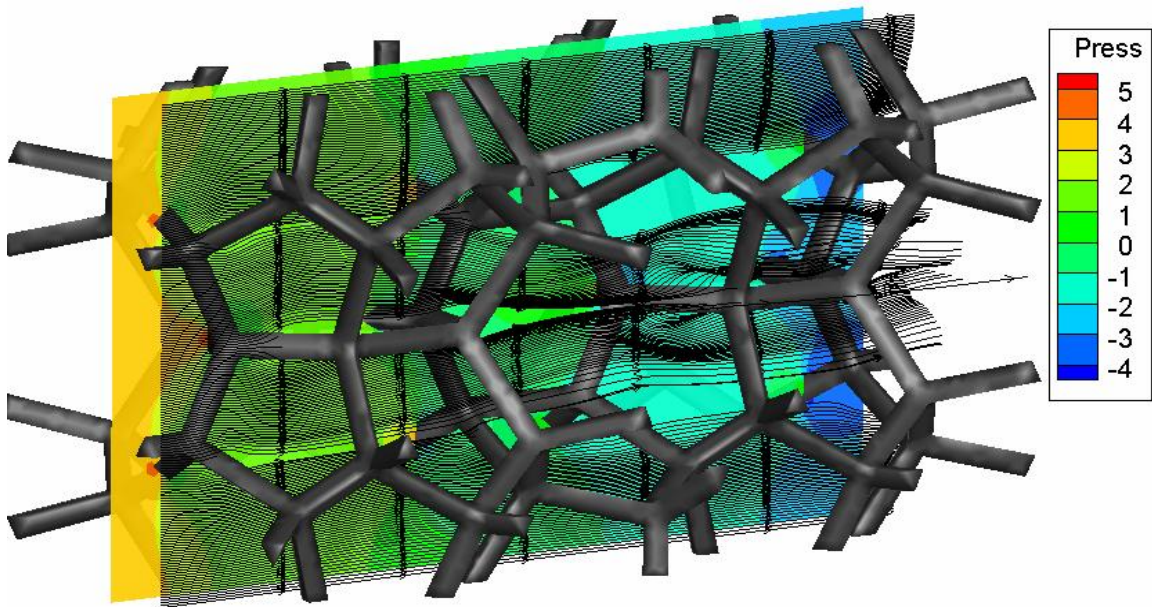


β)

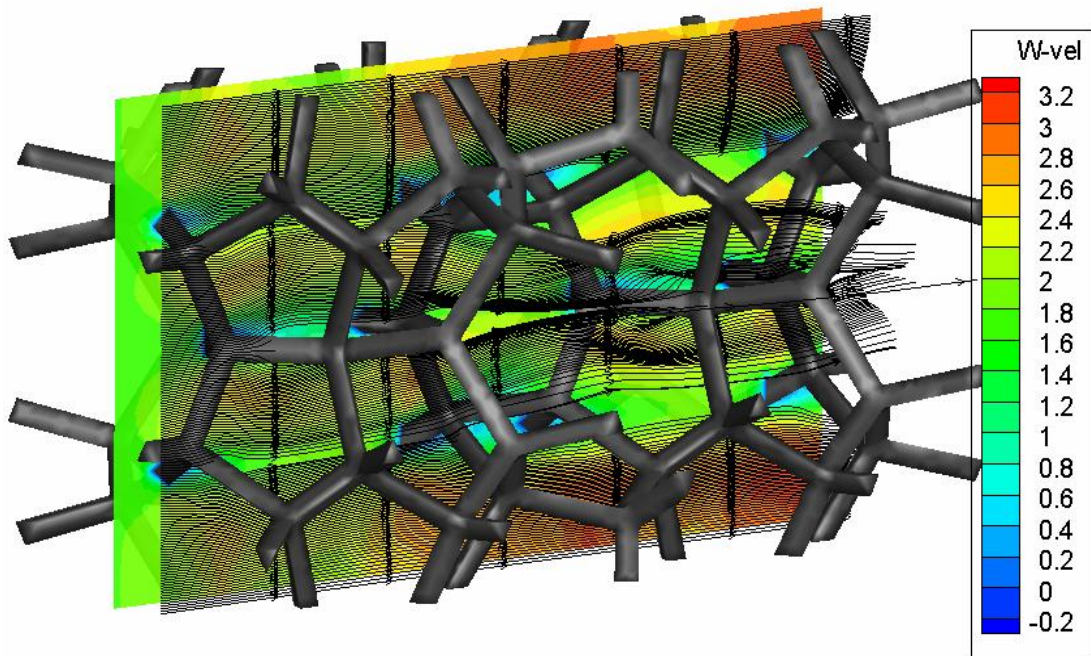
Σχήμα 5-4: Πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους συναρτήσει της μέσης ταχύτητα ροής για μεταλλικό αφρό α) 40 PPI β) 10 PPI και σύγκριση με πειραματικές τιμές.

Όσον αφορά τις ροϊκές εφαρμογές στις οποίες χρησιμοποιείται το υλικό αυτό –τόσο πιλοτικά όσο και εκτεταμένα-, αυτές περιλαμβάνουν –μεταξύ άλλων- εναλλάκτες θερμότητας σε ηλεκτρονικά ισχύος και αεροπορικές κατασκευές.

Στην πλειοψηφία αυτών των εφαρμογών, το μήκος του μεταλλικού αφρού που χρησιμοποιείται στη διεύθυνση της ροής είναι σχετικά μικρό, λόγω και της υπολογίσιμης πτώσης πίεσης που παρουσιάζει η ροή μέσα από το υλικό αυτό (Azzi et al., 2007, Dukhan, 2006 και ERG-Duocel ®). Έτσι η διερεύνηση του πεδίου ροής έπρεπε να λάβει υπόψιν το γεγονός αυτό, απαγκιστρώνοντας τη μελέτη από την υπόθεση τεμαχίου αφρού στην περιοχή πλήρως ανεπτυγμένης ροής και επεκτείνοντας την προσομοίωση περιπτώσεων πρώτης επαφής του μεταλλικού αφρού με αδιατάρακτη ροή, με την θεώρηση σταθερής ταχύτητας εισόδου (Σχήμα 5-5) η οποία διαφέρει ως προς την ανάπτυξη φαινομένων εισόδου (**entrance effects**) σε σχέση με τη θεώρηση πλήρως ανεπτυγμένης ροής. Το μήκος του υπολογιστικού χωρίου που χρησιμοποιήθηκε και στις 2 περιπτώσεις (**19,85 mm** στα **10PPI** ενώ στα **40PPI 5,82 mm**) δεν απέχει πολύ από αντίστοιχες τιμές (**~1 in**) για μήκος ροής εναλλακτών που διαθέτουν μεταλλικούς αφρούς (Klein et al. 2005) και δοκίμια μεταλλικού αφρού σε πειραματικές μετρήσεις (Alvarez- Hernandez, 2006 και Azzi et al., 2007). Για την παραμετρική μελέτη της ροής στην περιοχή εισόδου στον μεταλλικό αφρό, οι επιβεβλημένες τιμές σταθερής ταχύτητας εισόδου προέκυψαν από τις μέσες τιμές της ταχύτητας ροής που εμφανιζόταν από τις επιβεβλημένες τιμές πτώσης πίεσης (βλ. Πίνακα 5-1). Σκοπός ήταν να διαπιστωθεί: α) αν οι προσομοιώσεις πλήρως ανεπτυγμένης ροής και περιοχής εισόδου της ροής οδηγούν στα ίδια ζεύγη τιμών πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους και παροχής και κατ'επέκταση β) η ύπαρξη φαινομένων εισόδου κατά τη μετάβαση της ροής σε πλήρως ανεπτυγμένη ανάλογα με το μήκος του δοκιμίου. Έπρεπε να αποδειχθεί αν η ροή προλαβαίνει να αποκατασταθεί σε μήκος ροής το οποίο είναι μικρότερο από το συνολικό μήκος του υπολογιστικού χωρίου ή αν αυτό συμβαίνει σε μεγαλύτερη απόσταση από την είσοδο, οπότε δε θα μπορούσε να μελετηθεί η μετάβαση.



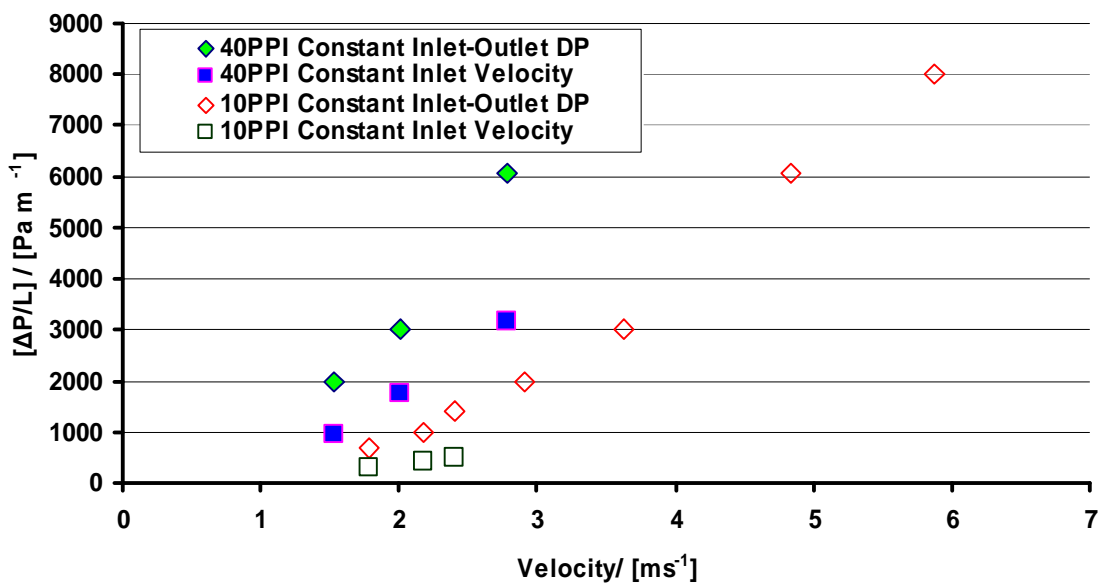
α)



β)

Σχήμα 5-5: Περίπτωση επιβολής σταθερής ταχύτητας εισόδου στα 10PPI. α) Ισούψεις πίεσης β) Ισούψεις ταχύτητας στη διεύθυνση της ροής(εικόνα όχι στην πραγματική κλίμακα).

Σε ότι έχει να κάνει με την πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους που παρουσιάζεται, αυτή είτε επιβλήθηκε με τη μορφή διαφοράς πίεσης μεταξύ εισόδου και εξόδου, είτε προέκυψε από τη διαμορφούμενη ροή μετά την επιβολή σταθερής ταχύτητας ροής στην είσοδο. Έγινε σύγκριση των δύο περιπτώσεων (επιβολή διαφοράς πίεσης ή επιβολή σταθερής ταχύτητας) με τη χρήση διαγραμμάτων πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους συναρτήσει της ταχύτητας ροής. Η ταχύτητα αυτή ήταν η μέση προκύπτουσα ταχύτητα υπολογισμένη από την παροχή που αναπτύσσονταν στην περίπτωση επιβολής διαφοράς πίεσης και η σταθερή ταχύτητα εισόδου στην περίπτωση επιβολής ταχύτητας εισόδου. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται τόσο για τα **40** όσο και για τα **10 PPI** (Σχήμα 5-6):



Σχήμα 5-6: Σύγκριση ζευγών πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους – μέσης ταχύτητας που προκύπτουν από προσομοιώσεις με την επιβολή διαφοράς πίεσης και την επιβολή σταθερής ταχύτητας εισόδου για τις περιπτώσεις **10** και **40PPI**.

Από τα αποτελέσματα αυτά συνάγεται ότι η πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού που εξετάστηκε (**40** και **10PPI**) παρέμενε σταθερά μικρότερη στις περιπτώσεις επιβολής οριακής συνθήκης σταθερής ταχύτητας (περιοχή εισόδου). Η διαφορά μάλιστα στις αντίστοιχες τιμές

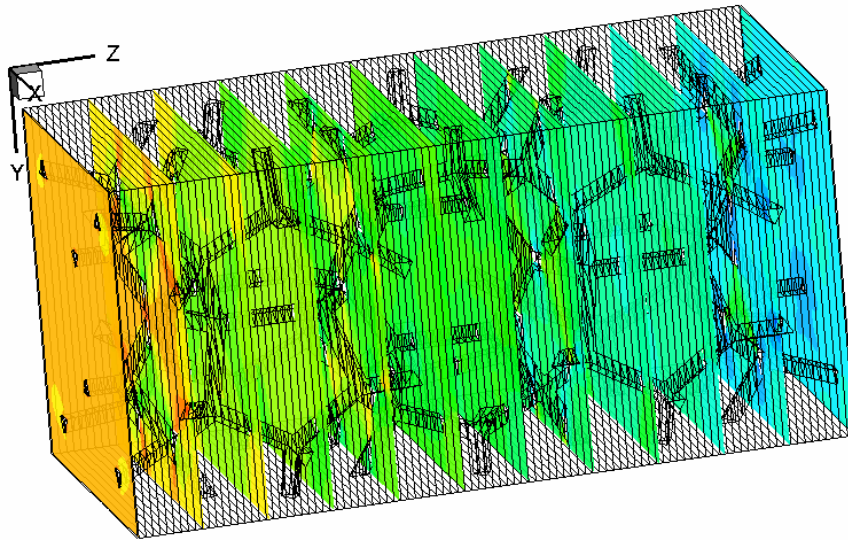
κυμαινόταν από **72%** έως **108%** για τα **40PPI** και έφτανε από **130%** έως και **178%** για τα **10PPI**. Στην προσπάθεια να εξηγηθεί αυτή η διαπίστωση, πρέπει να ληφθούν υπόψιν **2** παράμετροι:

1. Για την ίδια παροχή μάζας, οι μέγιστες τιμές της ταχύτητας ροής στο εσωτερικό του πορώδους μέσου που αντιπροσώπευε το υπολογιστικό χωρίο ήταν σαφώς μεγαλύτερες, όπως προκύπτει από την εξέταση των αποτελεσμάτων (βλ. και Σχήμα **5-3**), για την περίπτωση επιβεβλημένης διαφοράς πίεσης παρά για την περίπτωση επιβολής σταθερής ταχύτητας εισόδου του ρευστού (Σχήμα **5-6**).
2. Η κλίμακα μήκους στην περίπτωση των **10PPI** είναι μεγαλύτερη από ότι στην περίπτωση των **40PPI**. Το γεγονός λοιπόν ότι συγκριτικά το υλικό παρουσιάζει μικρότερο λόγο επιφάνειας προς όγκο στην περίπτωση των **10PPI**, μειώνοντας έτσι τις τριβές κατά τη ροή και εκτονώνοντάς την –για σταθερή ταχύτητα εισόδου- καθιστά την πτώση πίεσης ακόμη χαμηλότερη για σταθερή ταχύτητα εισόδου στα **10PPI** από ότι στην περίπτωση των **40PPI** (Σχήμα **5-6**).

Επιπρόσθετα για να ελεγχθεί κατά πόσο υπάρχουν φαινόμενα εισόδου και πόσο αξιόπιστη είναι η διαπίστωση περί μικρότερης πτώσης πίεσης υπό επιβεβλημένη σταθερή ταχύτητα εισόδου και όχι αποτέλεσμα μεροληψίας λόγω ανάπτυξης της ροής χωρίς να έχει ακόμη αποκατασταθεί, έγινε περαιτέρω διερεύνηση του πεδίου ροής.

Συγκεκριμένα, στις περιπτώσεις ροής με σταθερή ταχύτητα εισόδου και ύπαρξη συνθήκης τοιχώματος (μη ολίσθησης) στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο, όπως ακριβώς μελετώνται και οι πειραματικές ροές που εμπλέκουν μεταλλικούς αφρούς με ύπαρξη πλάκας υπό του αφρού, (οι οποίες είναι και οι πιο δυσμενείς από άποψη πτώσης πίεσης καθώς η εισαγωγή τοιχώματος οδηγεί σε δημιουργία οριακού στρώματος και υψηλότερων μέγιστων ταχυτήτων για την ίδια παροχή μάζας σε σχέση με την απουσία τοιχώματος-βλ. και Σχήμα **5-8α**), εξήχθησαν τιμές τοπικής πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους, για την περίπτωση των **10PPI** που

παρουσίαζε και τις μεγαλύτερες ποσοστιαίες αποκλίσεις στην πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους σε σχέση με την αντίστοιχη περίπτωση επιβολής διαφοράς πίεσης (βλ. και Σχήμα 5-6) και σε σύγκριση με την αντίστοιχη περίπτωση των 40 PPI. Και στα δύο αποτελέσματα (Σχήμα 5-8α) διαφαιίνεται να επέρχεται αποκατάσταση της ροής προς το τέλος του μήκους διαβροχής, με κριτήριο τις διακυμάνσεις της μέγιστης εμφανιζόμενης ταχύτητας προς την ταχύτητα εισόδου. Η μορφή των καμπύλων είναι κοινή για τις δύο περιπτώσεις, υποδεικνύοντας σαφώς ωστόσο πως στην περίπτωση που υπάρχει παρουσία τοιχώματος, εμφανίζονται μεγαλύτερες μέγιστες τιμές για την ταχύτητα ροής στο εσωτερικό του πορώδους. Για το λόγο αυτό λοιπόν, σε κάθε πεδίο ροής που προέκυπε από την επιβολή κάποιας τιμής σταθερής ταχύτητας εισερχομένου αέρα στην είσοδο του υπολογιστικού χωρίου, έγιναν 100 εγκάρσιες τομές σε όλο το μήκος του υπολογιστικού χωρίου (Σχήμα 5-7).



Σχήμα 5-7: Θέσεις των τομών από όπου εξήχθησαν αποτελέσματα σε επίπεδο μικροκλίμακας (διακρίνονται καθαρά μόνο 10 από τις 100)

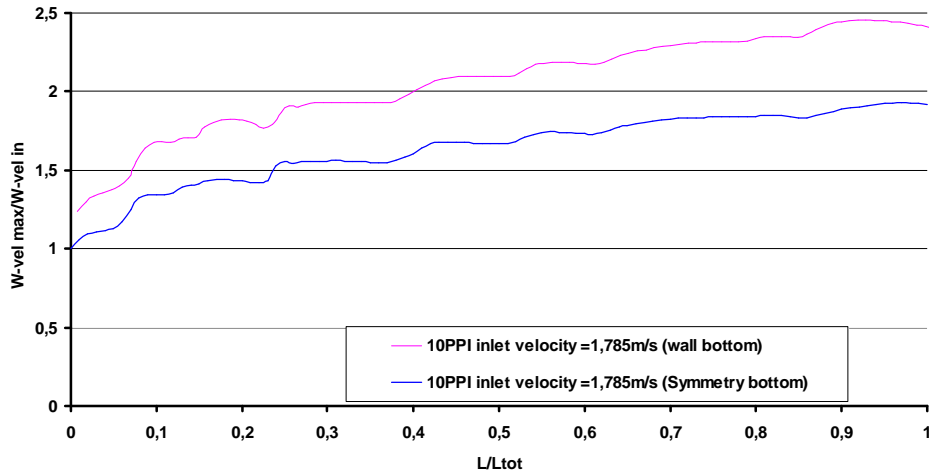
Σε κάθε μία από αυτές τις τομές εξήχθη η μέση πίεση και υπολογίστηκε η διαφορά μέσης πίεσης μεταξύ κάθε δύο διαδοχικών τομών προς τη μεταξύ τους

απόσταση, δίνοντας έτσι μια εικόνα για την τοπική πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους. Από τη μορφή των διαγραμμάτων που δημιουργήθηκαν προκύπτει ότι:

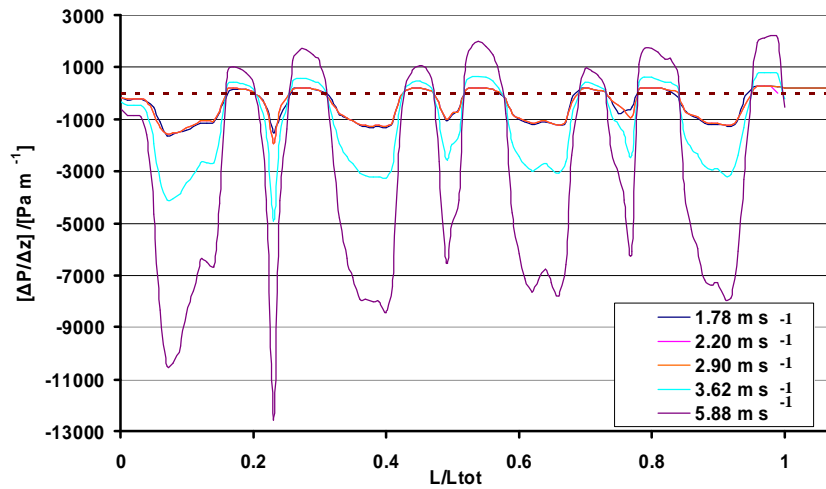
- τα διαγράμματα επαναλάμβαναν τη μορφή τους κατά μήκος ακολουθώντας την κατανομή που είχε και η γεωμετρία με άξονα συμμετρίας σε δύο επίπεδα. (Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο Y επίπεδο και κατά μήκος του Z-άξονα, δηλαδή του άξονα ροής, καθώς οι τομές ήταν στο X-Y επίπεδο κάθετα στον Z-άξονα, Σχήμα 5-7)
- Εμφανίζονταν διαταραχές στην είσοδο οι οποίες οφείλονταν πιθανότατα στην ύπαρξη φαινομένων εισόδου.
- Οι τοπικές διαφορές πίεσης ανά μονάδα μήκους εμφανίζονταν σταθερά μεγαλύτερες, αυξανόμενης της ταχύτητας εισόδου του αέρα στο πορώδες μέσο. Αξιοσημείωτο είναι ότι στην περιοχή εισόδου, η διαφορά πίεσης είναι σταθερά μεγαλύτερη από ότι κατάντι (για την ίδια ταχύτητα), λόγω των απότομων επιταχύνσεων της ροής σε σύντομο μήκος εξαιτίας της ύπαρξης εμποδίων από τη στερεά φάση της μικρογεωμετρίας του πορώδους (για την ίδια παροχή).

Κάτι αντίστοιχο παρατηρήθηκε και στην περίπτωση των **40PPI** όπου έγινε σύγκριση με τα **10PPI** για παρόμοια ταχύτητα εισόδου (Σχήμα 5-8γ). Εκτιμήθηκε λοιπόν ότι ανεξάρτητα μεγέθους του υπό εξέταση μεταλλικού αφρού, η μικροδομή της γεωμετρίας ήταν αυτή που επηρέαζε περισσότερο τη συμπεριφορά της ροής και όχι το μέγεθος του χαρακτηριστικού μήκους κλίμακας του υλικού. Σε μια προσπάθεια να διερευνηθεί αυτό περαιτέρω, συγκρίθηκε η αδιάστατη ταχύτητα που προκύπτει από τη διαίρεση του μέτρου της μέγιστης ταχύτητας στη διεύθυνση της ροής προς το μέτρο της σταθερής ταχύτητας εισόδου για **2** περιπτώσεις παραπλήσιας ταχύτητας εισόδου τόσο στα **10**, όσο και στα **40PPI** (Σχήμα 5-8γ) συναρτήσει του αδιάστατου μήκους του υπολογιστικού όγκου που διατρέχεται στη διεύθυνση της ροής. Από τη συμπεριφορά του μεγέθους που απεικονίζεται, συνάγεται το συμπέρασμα πως ανεξάρτητα του μεγέθους (άρα και του αριθμού **Re**), η ροή αποκαθίστατο στα **3/4** περίπου του

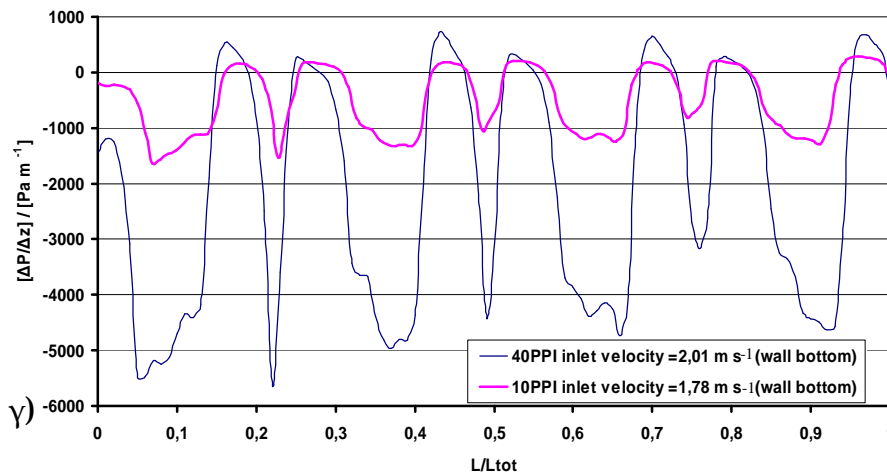
μήκους διαβροχής, δηλαδή σε **3** κελιά περίπου κατά τη διεύθυνση της ροής. Αυτό εξηγεί ικανοποιητικά το γεγονός ότι εμφανίζεται μικρότερη πτώση πίεσης στις περιπτώσεις επιβολής σταθερής ταχύτητας εισόδου (φαινόμενα εισόδου), αφού αυτές περιέχουν τόσο την περιοχή ανάπτυξης της ροής που εμφανίζει επιταχύνσεις λόγω πρώτης επαφής του μετώπου της ροής με τα εμπόδια αρχικά, όσο και περιοχή εξομάλυνσης της ροής. Η διατήρηση σταθερής ταχύτητας είναι μια κατάσταση που δεν ευνοείται από τη φύση στην περίπτωση αυτή, καθώς η επιβολή της αρχικά, γρήγορα μεταπίπτει στην κατάσταση πλήρους ανάπτυξης λόγω της ιδιομορφίας του μέσου και των εμποδίων που συναντά η ροή. Το προφίλ ταχύτητας που αναγκάζεται επομένως να αναπτύξει δεν παραμένει ομοιόμορφο (βλ. και Σχήμα 5-9).



α)

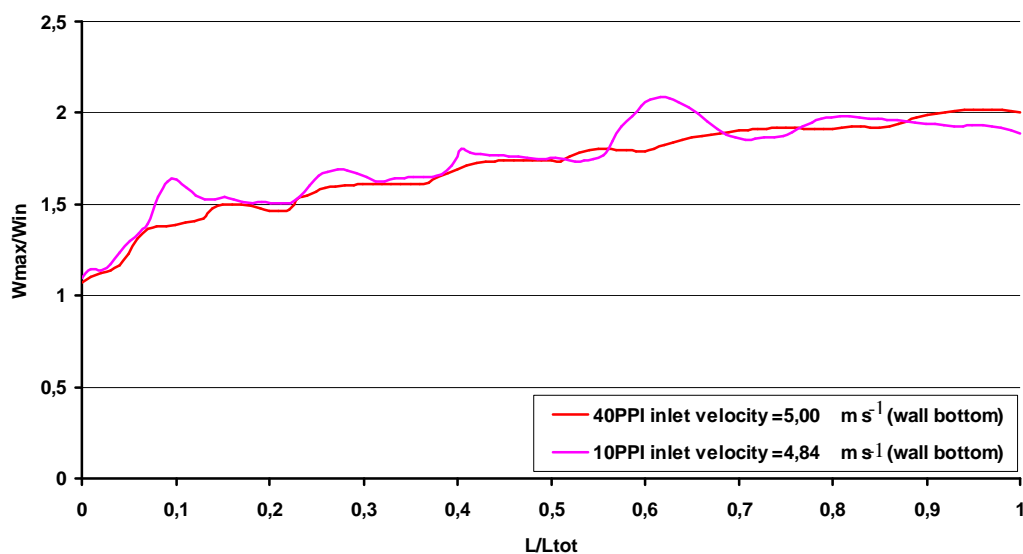


β)



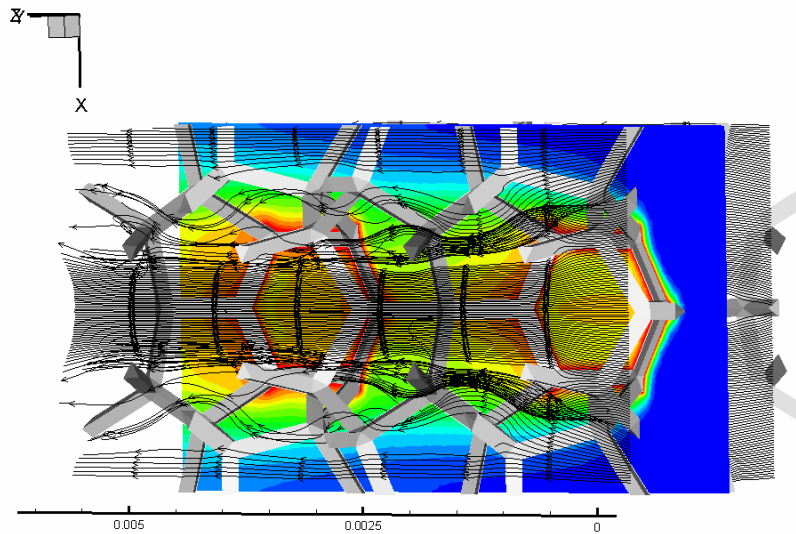
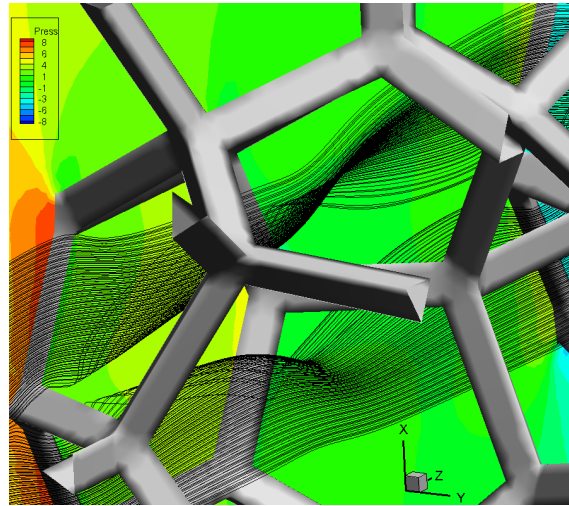
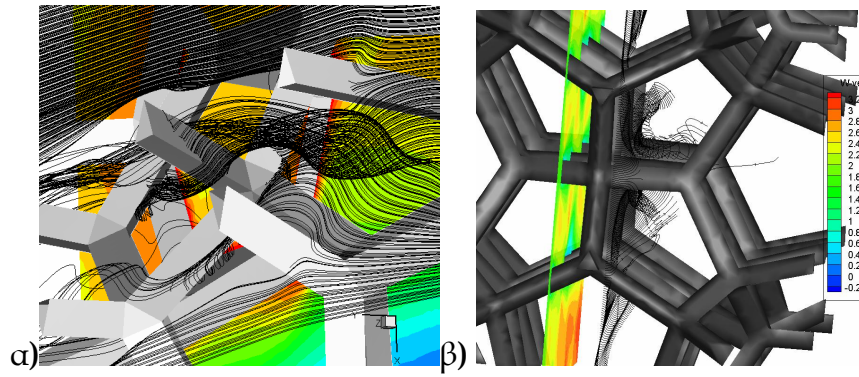
γ)

Σχήμα 5-8: α) αδιάστατη ταχύτητα ροής στα **10 PPI** με την ύπαρξη τοιχώματος ή συμμετρίας για την ίδια ταχύτητα εισόδου β) Τοπική πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους για επιβολή ταχύτητας στην είσοδο (**10PPI**) γ) σύγκριση τοπικής πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους (**10 και 40 PPI**) για παρόμοια επιβεβλημένη ταχύτητα ροής στην είσοδο



Σχήμα 5-9: Σύγκριση αδιάστατης ταχύτητας ροής συναρτήσει αδιάστατου μήκους ροής στον όγκο ελέγχου, για παρόμοια ταχύτητα εισόδου στα 40 και 10PPI

Τέλος, όπως αναφέρεται και στην ενότητα 3, έγινε διερεύνηση της συστροφής (**tortuosity**) που παρουσιάζει η ροή μέσα σε μεταλλικό αφρό ανοικτής δομής με πορώδες $\varepsilon=0,97$, εφόσον οι μεταλλικοί αφροί χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές χημικής μηχανικής και μηχανολογικές, κατάλυσης και εναλλαγής θερμότητας, όπου η ανάμειξη παίζει σπουδαίο ρόλο. Σύμφωνα λοιπόν με τους **Shen και Chen, (2007)**, η συστροφή πορωδών μέσων με πορώδες ίδιο με του μεταλλικού αφρού που εξετάζεται είναι $\chi=1,2$. Οι υπολογισμοί κατά **Bhattacharya et al. (2002)**, δώσαν για το συγκεκριμένο υλικό την τιμή $\chi=1,26$, καταδεικνύοντας έτσι ότι είναι ένα υλικό με υπολογίσιμη τιμή συστροφής και αναμεικτική ικανότητα (αφού έχει τιμή >1) και ότι έρχεται σε συμφωνία με τις τιμές που αναγράφονται στη διεθνή βιβλιογραφία, επαληθεύοντας τοιουτοτρόπως με ένα ακόμα στοιχείο και την ορθότητα της τοπολογίας/γεωμετρίας που κατασκευάστηκε (Σχήμα 5-10)



Σχήμα 5-10: Ροϊκές γραμμές με συνεστραμμένη διαδρομή, αποτέλεσμα και της συστροφής που παρουσιάζει το υλικό. α),β),γ): τοπική εξέταση της συστροφής των ροϊκών γραμμών (40PPI και 2,009 m/s ταχύτητα εισόδου). δ): μεσοσκοπική απεικόνιση (για την περίπτωση των 40PPI και 1,538 m/s ταχύτητα εισόδου).

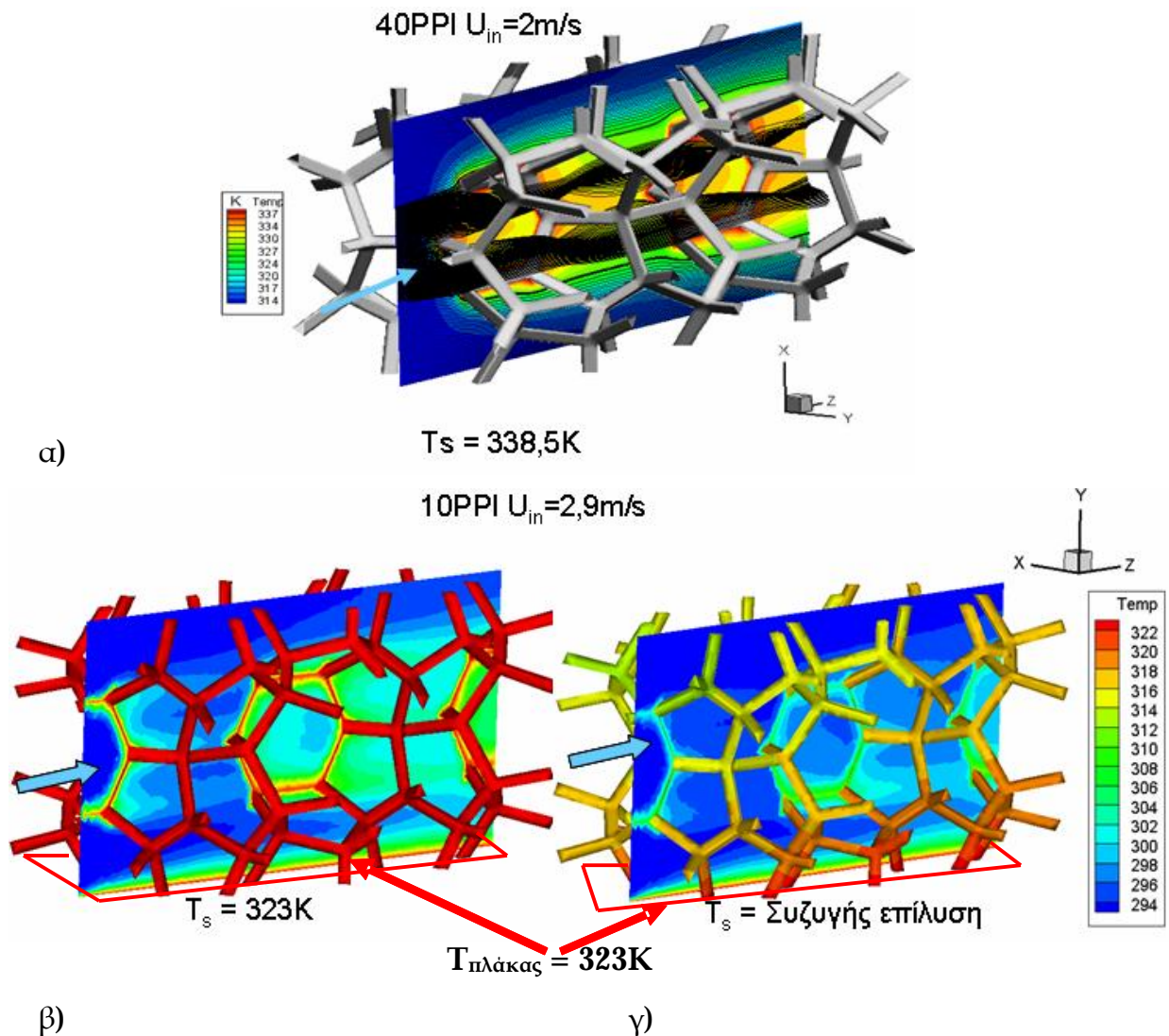
Επιπρόσθετα, για τα αποτελέσματα των **40PPI** και μόνο, έγινε σύγκριση με τα αποτελέσματα προσομοίωσης με το εμπορικό πακέτο επίλυσης **Fluent** (Τζιβανίδου Ε., **2009**). Η προσομοίωση αφορούσε συνθήκες επιβεβλημένης πτώσης πίεσης μεταξύ εισόδου και εξόδου του όγκου ελέγχου και ύπαρξη τοιχώματος στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο για την περίπτωση επίλυσης στο **Fluent**, ενώ στην παρούσα διατριβή θεωρήθηκαν επίπεδα συμμετρίας παντού. Ως εκ τούτου τα αποτελέσματα σε αυτή την περίπτωση έδωσαν λίγο μεγαλύτερες μέσες ταχύτητες ροής από ότι στην περίπτωση της επιβεβλημένης πτώσης πίεσης με επίπεδα συμμετρίας παντού (και στο κατώτατο). Το μέγεθος του πλέγματος στην επίλυση με τον εμπορικό κώδικα ήταν $1,64 \times 10^6$ τετράεδροι πεπερασμένοι όγκοι, ενώ στην περίπτωση της παρούσας $2,8 \times 10^6$, καλυπτόμενα ωστόσο και τα δύο από τη μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος (βλ. και ενότητα **3**).

Από τη σύγκριση προκύπτει ότι τα αποτελέσματα της παρούσας προσομοίωσης έρχονται σε ικανοποιητική συμφωνία και με τα αντίστοιχα προσομοίωσης με τη χρήση ενός εμπορικού πακέτου (οι διαφορές μεταξύ τους κυμαίνονταν από **15,6%** έως **24,8%**), επιβεβαιώνοντας την ορθότητα της διαδικασίας αυτή τη φορά που σε συνδυασμό με την επαλήθευση της ορθότητας της γεωμετρίας μικροδομής που έχει ήδη αξιολογηθεί, οδηγούν στο συμπέρασμα περί ασφαλών αποτελεσμάτων.

5.2.2. Πεδίο Θερμοκρασίας

Όσον αφορά το υπολογιστικό κομμάτι που αποσκοπούσε στην εκτίμηση των παραμέτρων μεταφοράς θερμότητας και κατανομής θερμοκρασίας στο εσωτερικό του μεταλλικού αφρού που διερευνήθηκε, έγιναν προσομοιώσεις **3** καταστάσεων: α) ύπαρξη συμμετρίας σε όλα τα οριακά επίπεδα που περικλείουν τον όγκο ελέγχου και σταθερή θερμοκρασία στους συνδέσμους (**ligaments**) της στερεάς φάσης του μεταλλικού αφρού, θεωρώντας ιδανική θερμική αγωγιμότητα β)

ύπαρξη τοιχώματος στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο του υπολογιστικού όγκου και σταθερή θερμοκρασία στη στερεά φάση του αφρού, θεωρώντας τις πειραματικές μετρήσεις που συγκρίθηκαν με ύπαρξη θερμαινόμενης πλάκας στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο και υπόθεση ισόθερων στερεών μερών του υλικού (όπως γίνεται η αντίστοιχη παραδοχή στα πειράματα Alvarez, 2005) γ) ύπαρξη τοιχώματος στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο του υπολογιστικού όγκου ελέγχου και θερμοκρασία μεταβαλλόμενη σύμφωνα με το αποτέλεσμα της συζυγούς επίλυσης στο εσωτερικό της στερεάς φάσης των συνδέσμων του μεταλλικού αφρού, θεωρώντας τη ρεαλιστικότερη προσέγγιση. Στην πρώτη από τις περιπτώσεις αυτές έγινε μελέτη τόσο για επιβεβλημένη ταχύτητα εισόδου (40PP1) όσο και για επιβεβλημένη πτώση πίεσης (10PP1) με τιμή θερμοκρασίας στους συνδέσμους $T_s = 338,5$ K και θερμοκρασία εισερχόμενου αέρα $T_{air} = 313$ K, ενώ στις περιπτώσεις β) και γ) η ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα κρατήθηκε σταθερή και οι αντίστοιχες τιμές των θερμοκρασιών ήταν $T_s = 323$ K και $T_{air} = 293$ K. Στο παρακάτω σχήμα (Σχήμα 5-11), παρουσιάζεται η ποιοτική κατανομή του θερμοκρασιακού πεδίου για κάθε μια από της προαναφερθείσες περιπτώσεις με ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα κάθε φορά. Η διαφοροποίηση στη θερμοκρασία της στερεάς φάσης είναι αξιοπρόσεκτη κυρίως στην περίπτωση που μελετώνται φαινόμενα εισόδου, όπου ο εισερχόμενος αέρας είναι ακόμη ψυχρός και όπου δεν έχει αποκατασταθεί η θερμοκρασία μακριά από την είσοδο (περίπτωση θεώρησης πλήρως ανεπτυγμένης ροής όσον αφορά τις ροϊκές συνθήκες), γιατί και εξετάστηκε η συζυγής επίλυση του πεδίου θερμοκρασίας σε αυτές τις συνθήκες.

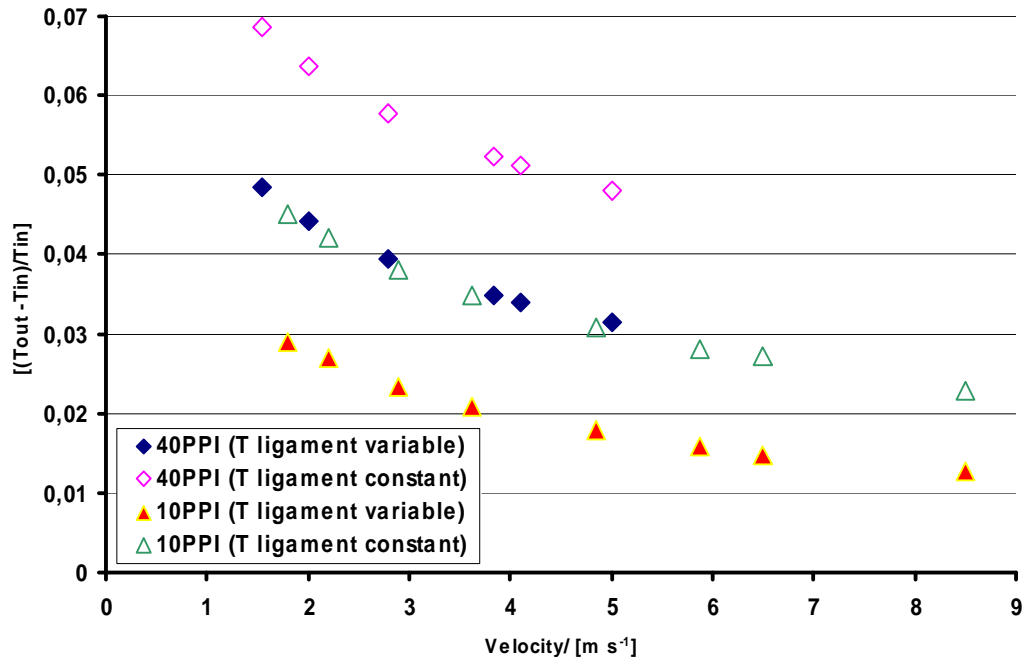


Σχήμα 5-11: Ποιοτική απεικόνιση θερμοκρασιακού πεδίου α) 40PPI με επίπεδο συμμετρίας σε κάθε όριο, $T_s = 338,5\text{K}$ με $T_{\text{air}} = 313\text{K}$ β) 10PPI με τοίχωμα στο κατώτατο επίπεδο, $T_s = 353\text{K}$ με $T_{\text{air}} = 293\text{K}$ γ) 10PPI με τοίχωμα σταθερής θερμοκρασίας 323K στο κατώτατο επίπεδο, συζυγώς υπολογισμένη θερμοκρασία με $T_{\text{air}} = 293\text{K}$, (διαφοροποιείται η εικόνα του πεδίου σημαντικά).

Ο λόγος που έγινε αυτή η μελέτη με 2 διαφορετικές θερμοκρασίες ήταν διότι αυτές εμφανίζονται σε 2 διαφορετικές εφαρμογές της διεθνούς βιβλιογραφίας και προσομοιώθηκαν ακριβώς αυτές για λόγους σύγκρισης. Συγκεκριμένα το πρώτο κομμάτι της προσομοίωσης χρησιμοποίησε τις τιμές που δίνουν οι **Klein et al., (2005)** για χρήση σε αεροπορικούς εναλλάκτες θερμότητας. Ωστόσο αν και

πρόκειται για εφαρμογή αιχμής, οι αφροί που μελετώνται στη συγκεκριμένη δημοσίευση είναι συμπιεσμένοι, με αποτέλεσμα να μην είναι άμεσα συγκρίσιμα τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με αυτά των δημοσιευμένων πειραμάτων. Έτσι έγινε μεν η προσομοίωση με βάση τις συνθήκες λειτουργίας της χρησιμοποιούμενης διάταξης αλλά προκειμένου να πιστοποιηθεί η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων, χρησιμοποιήθηκαν αποτελέσματα μετρήσεων σε μεταλλικούς αφρούς μη συμπιεσμένους (Alvarez- Hernandez,2005). Επιπλέον καμία από τις δύο εφαρμογές δεν έδινε ενόραση σε επίπεδο μικροκλίμακας για την κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό του υλικού. Οπότε πιστοποιήθηκαν μακροσκοπικά τα εξαγόμενα αποτελέσματα με τη σύγκριση μακροσκοπικών τιμών, όπως πιστοποιήθηκε και η αποτελεσματικότητα και αξιοπιστία του υπολογιστικού κώδικα στην παράγραφο 5.1.

Σε ότι αφορά λοιπόν την διαφοροποίηση που επέρχεται στο εσωτερικό της αέριας φάσης του πορώδους μέσου, κατά την επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου θεωρώντας τα κομβοελάσματα (**ligaments**) και εν γένει τη στερεά μεταλλική φάση του υλικού υπό σταθερή θερμοκρασία ή θεωρώντας εναλλακτικά ότι αυτά παίρνουν τη θερμοκρασία που προκύπτει από τη συζυγή επίλυση του πεδίου, γίνεται σύγκριση της αδιάστατης διαφοράς θερμοκρασίας εξόδου-εισόδου του αέρα που διαρρέει το υλικό για διάφορες ταχύτητες (Σχήμα 5-12) , για μεταλλικό αφρό **10** και **40PPI**. Η πρακτική πληροφορία που εξάγεται από την αδιάστατη παράμετρο που απεικονίζεται είναι πως όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της, τόσο πιο κοντά στη θερμοκρασία του τοιχώματος βρίσκεται η τιμή της θερμοκρασίας εξόδου του αέρα από τον υπολογιστικό όγκο που μελετάται, ενώ πρέπει να γίνει και η διαφοροποίηση ανάμεσα στις κλίμακες μήκους των **40PPI** (περίπου **6mm** ροής) και των **10PPI** (περίπου **20mm** ροής), λαμβάνοντας υπόψιν το μήκος που διατρέχει κάθε φορά ο αέρας που διαρρέει το μοντέλο.



Σχήμα 5-12: Αδιάστατη θερμοκρασιακή διαφορά αέρα εισόδου-εξόδου ανάλογα με την σταθερά επιβεβλημένη ή υπολογιζόμενη θερμοκρασία της στερεάς φάσης για μεταλλικό αφρό **10** και **40** PPI.

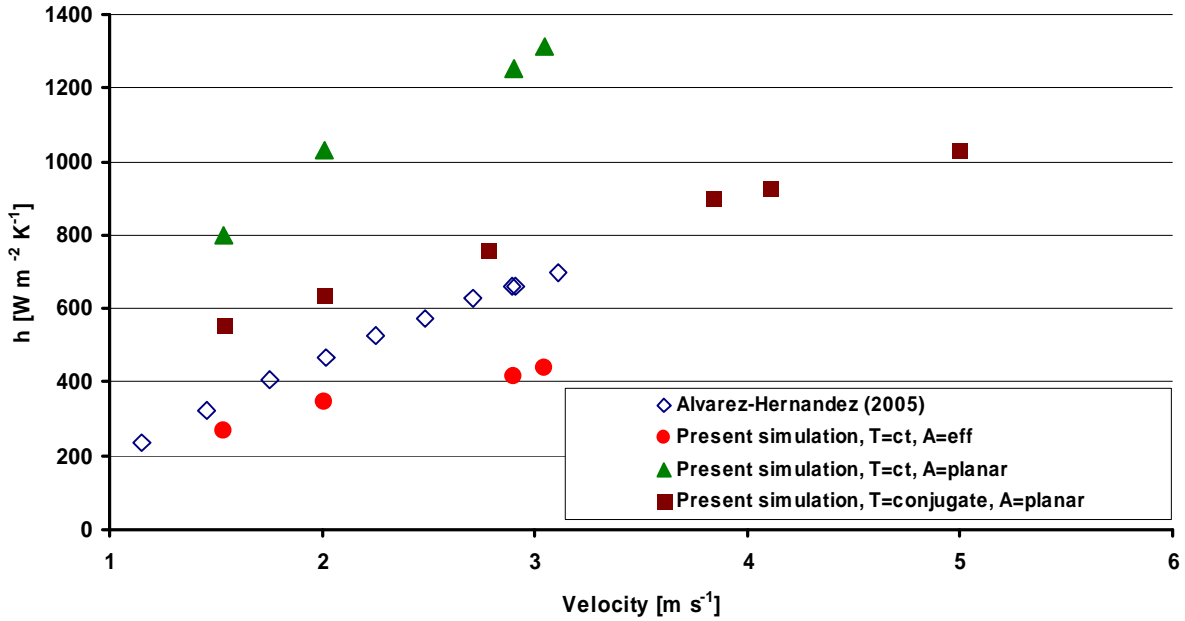
Από το παραπάνω σχήμα (Σχήμα 5-12), συνάγονται τα εξής συμπεράσματα: α) οι τιμές της αδιάστατης διαφοράς θερμοκρασίας εισόδου-εξόδου τείνουν να συγκλίνουν ασυμπτωτικά αυξανόμενης της ταχύτητας εισόδου του αέρα, β) η διαφορά μεταξύ επίλυσης με σταθερή θερμοκρασία στο υλικό και με συζυγώς υπολογισμένη για την ίδια τιμή ταχύτητας εισερχόμενου αέρα φαίνεται να βαίνει ελαφρώς μειούμενη για κάθε τιμή ταχύτητας εισόδου. Έτσι, φαίνεται ότι η υπολογιστική ενόραση που δίνει η συζυγής επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου είναι σημαντική καθώς διαφοροποιείται έντονα η εικόνα του και επιβεβαιώνεται ότι η υπόθεση που κάνουν διάφοροι ερευνητές (Alvarez- Hernandez, 2005, Phanikumar and Mahajan, 2002) περί σταθερής θερμοκρασίας στους κομβοσυνδέσμους της στερεάς φάσης του αφρού, είναι παρακινδυνευμένη.

Προκειμένου να μελετηθεί η ικανότητα του υλικού του μεταλλικού αφρού να μεταδώσει θερμότητα σαν επιφάνεια εναλλαγής ενός μηχανολογικού συστήματος, έχουν γίνει διάφορες παραμετρικές μελέτες από ερευνητές (Alvarez- Hernandez, 2005, Klein et al., 2005, Boomsma et al., 2003, Phanikumar and

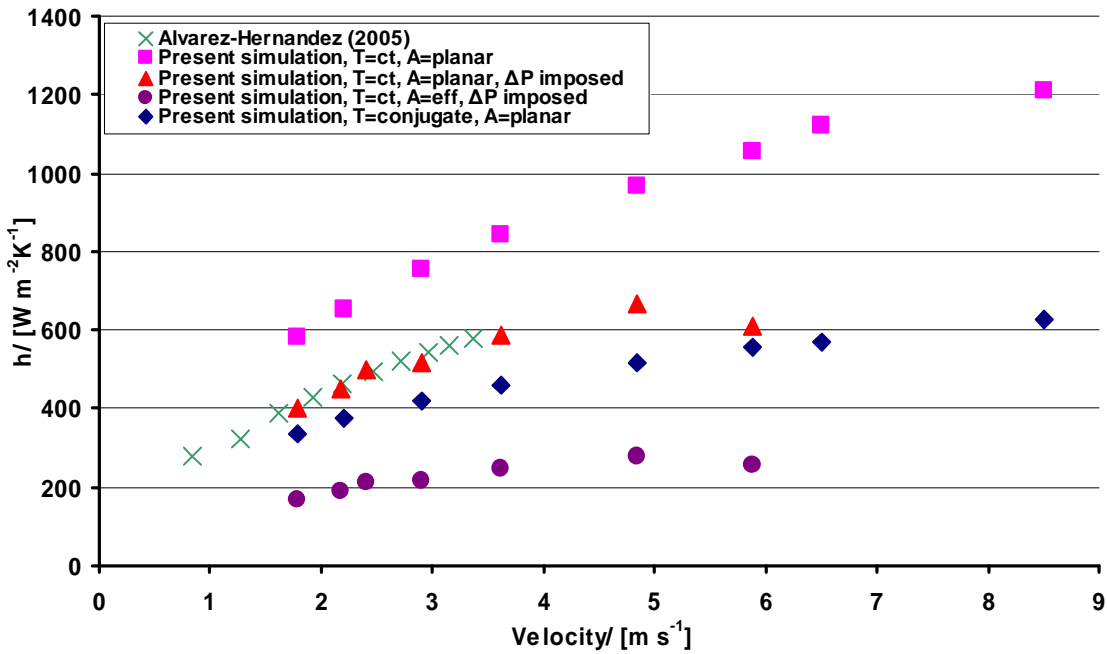
Mahajan, 2002, Lu et al., 1998) και έχουν εξαχθεί κάποια αρχικά συμπεράσματα. Στην παρούσα διατριβή, έπρεπε να αποδειχθεί αν οι παράμετροι του μοντέλου που αναπτύχθηκε συμφωνούσαν με τις αντίστοιχες τιμές για αυτές τις παραμέτρους που παρουσιάζονται βιβλιογραφικά στη διεθνή επιστημονική κοινότητα. Αυτό έπρεπε να γίνει για να διαπιστωθεί αν το μοντέλο ήταν αξιόπιστο για θερμικές εφαρμογές-διαπιστώσεις σε επίπεδο μικροκλίμακας, πέρα από την εποπτική εικόνα του θερμοκρασιακού πεδίου που παρουσιάστηκε. Ως εκ τούτου παρουσιάζονται σε αντιπαραβολή τα αποτελέσματα για το συντελεστή συναγωγής h_{eff} (βλ. και ενότητα 3) που προκύπτουν τόσο για σταθερή θερμοκρασία όσο και για συζυγώς επιλυμένη στα 10 και 40PPI σε σχέση με τα αντίστοιχα αποτελέσματα του Alvarez- Hernandez, (2005) (χρησιμοποίησε δοκίμια αφρού 10 και 40PPI μεγέθους $4 \times 2 \times 9,875$ in), (Σχήμα 5-13). Η επιφάνεια που χρησιμοποιήθηκε στον τύπο (3-49)

$$(h_{eff} = \dot{m} C_p (T_{out} - T_{in}) / A \left[(\Delta T_{out} - \Delta T_{in}) / \ln \left(\frac{\Delta T_{out}}{\Delta T_{in}} \right) \right]) \text{ είναι κατά περίπτωση η}$$

επιφάνεια του οριζοντίου επιπέδου που προσομοιάζει την πλάκα στα πειράματα (A planar) ή η «ενεργός» επιφάνεια που μετρήθηκε στο εσωτερικό του μεταλλικού αφρού και αποτελεί την συνολική επιφάνεια των παρειών των τριγωνικών πρισμάτων που αποτελούν τα ligaments (συνδέσμους) του αφρού.



α)

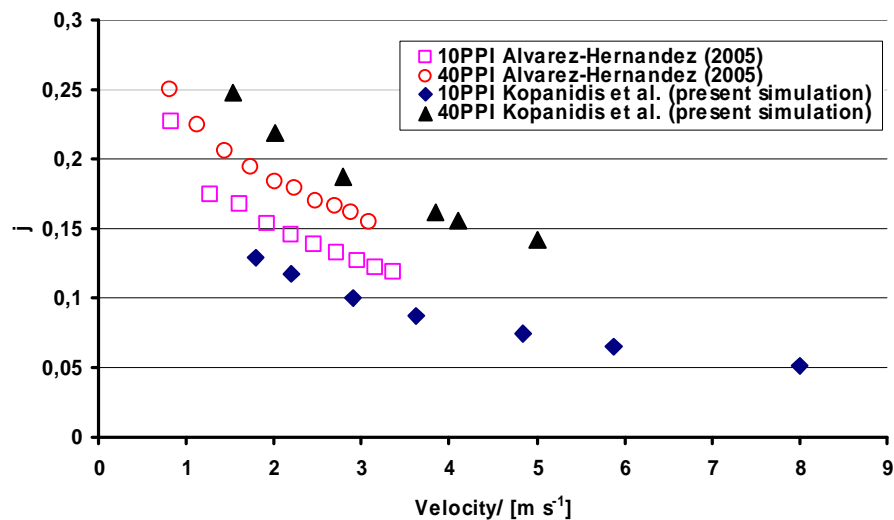


β)

Σχήμα 5-13: Συντελεστής συναγωγής για α) 40PPI και β) 10PPI σε σχέση με την ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα. Μεταβάλλονται παραμετρικά οι οριακές συνθήκες (επιβεβλημένη πτώση πίεσης ή ταχύτητα εισόδου όπου δεν αναφέρεται διαφορετικά) και η επιφάνεια αναγωγής.

Οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν έρχονται σε συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα η οποία μάλιστα είναι αρκετά ικανοποιητική στις περιπτώσεις της συζυγούς επίλυσης με χρήση της οριζόντιας επιφάνειας της πλάκας στους υπολογισμούς, την οποία χρησιμοποιεί και ο **Alvarez- Hernandez, (2005)** στους υπολογισμούς του.

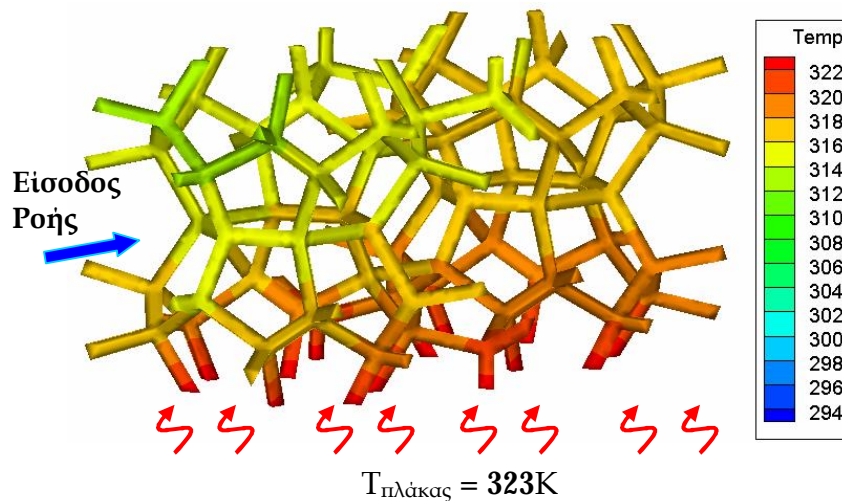
Σε μια προσπάθεια περαιτέρω διερεύνησης της ικανότητας και της αποδοτικότητας της επιτυγχανόμενης μεταφοράς θερμότητας με συναγωγή, υπολογίστηκε ο παράγοντας **Colburn (j)**, με $j = \frac{h}{rC_p U} (\text{Pr})^{2/3}$, βλ. και ενότητα 3, (**Boomsma et al., 2003, Kays and London, 1984**). Έτσι χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές που δίνει ο **Alvarez- Hernandez (2005)** για να υπολογιστούν οι παράγοντες **j** που δεν δίνονται από τον ίδιο. Έγινε η παραδοχή της ίδιας θερμοχωρητικότητας για τα δύο αέρια, όπως και του ίδιου αριθμού **Pr**, πράγμα που δεν απέχει από την πραγματικότητα αφού και στις δύο περιπτώσεις ο αέρας εισέρχεται στο χώρο ελέγχου (πειραματικό και υπολογιστικό) σε θερμοκρασία δωματίου. Η σύγκριση τόσο για τα **10**, όσο και για τα **40 PPI** παρουσιάζεται παρακάτω (Σχήμα 5-14). Τυπικές τιμές του αδιάστατου παράγοντα **j** είναι **0,002** έως **0,09** (**Kays and London, 1984**) σε συμπαγείς εναλλάκτες θερμότητας.



Σχήμα 5-14: Αδιάστατος συντελεστής **Colburn j** σε συνάρτηση με την ταχύτητα εισόδου για τα **10** και **40PPI**. Σύγκριση με υπολογισμένες πειραματικές τιμές.

Η απόκλιση που παρατηρείται οφείλεται στη διαφορά που παρουσιάζουν οι συντελεστές συναγωγής h_{eff} (Σχήμα 5-13). Αυτό συμβαίνει διότι οι συντελεστές αυτοί (υπολογισμένοι με χρήση της επιφάνειας της οριζόντιας πλάκας και για σταθερή θερμοκρασία στη στερεά φάση), υπεισέρχονται στον υπολογισμό του j , οπότε μεταφέρουν τις αποκλίσεις των ιδίων από τα πειραματικά αποτελέσματα. Σημειώνεται πως το h_{eff} για τα 40PPI είναι μεγαλύτερο από το αντίστοιχο των πειραματικών τιμών και το h_{eff} για τα 10PPI είναι χαμηλότερα υπολογισμένο από το αντίστοιχο των πειραματικών τιμών (Σχήμα 5-13), γεγονός που αντανακλάται και στον παράγοντα j .

Τα αποτελέσματα προσφέρουν εστίαση της πληροφορίας σε επίπεδο μικροκλίμακας και χαρακτηρίζονται από τη μακροσκοπική επαλήθευση των παραμέτρων που αφορούν τη συναγωγή. Σημαντική πληροφορία για εφαρμογές μηχανολογικού ενδιαφέροντος (που άπτεται ακόμη και της αντοχής του υλικού με την πρόλεξη τιμών τοπικά αυξημένης θερμοκρασίας, τα λεγόμενα «hot spots») είναι η κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό του υλικού (Σχήμα 5-15).



Σχήμα 5-15: Θερμοκρασιακή κατανομή στο εσωτερικό του στερεού υλικού του μεταλλικού αφρού. Παράδειγμα με 10PPI $U_{in} = 2,9 \text{ m/s}$ και θερμή πλάκα με $T_{in} = 323\text{K}$

Από αυτή την κατανομή είναι εμφανής η ύπαρξη ψυχρών περιοχών τόσο κοντά στην είσοδο (όπου ο εισερχόμενος αέρας είναι ψυχρότερος από τη θερμή πλάκα που βρίσκεται στο κατώτατο οριζόντιο επίπεδο), όσο και μακριά από την πλάκα, όσο αυξάνει η απόσταση του θεωρούμενου σημείου από αυτήν.

Μπορεί εδώ να ειπωθεί πως η διερεύνηση σε επίπεδο μικροκλίμακας επιτρέπει στον ερευνητή-μελετητή να έχει σαφή εικόνα της διαφοροποίησης που εμφανίζεται στην τιμή της θερμοκρασίας τόσο στη φάση του ρευστού, όσο και στο στερεό μέρος του πορώδους υλικού, καθιστώντας έτσι αμφισβητήσιμη την υπόθεση σταθερής θερμοκρασίας στο στερεό υλικό που υιοθετούν διάφοροι ερευνητές (Alvarez- Hernandez,2005, Phanikumar και Mahajan, 2002).

5.3. Μελέτη πεδίου ροής, θερμοκρασίας και υγρασίας στο σύστημα διαχύτη-καναλιού καθόδου κυψέλης καυσίμου PEM

Στις επόμενες ενότητες παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της διερεύνησης που προέκυψαν από τη μοντελοποίηση του διαχύτη ινών ανθρακοϋφάσματος και καναλιού προσαγωγής στην πλευρά της καθόδου κυψέλης καυσίμου PEM (PEM Fuel Cells). Στο πρώτο μέρος γίνεται η επισκόπηση του ροϊκού πεδίου, στο δεύτερο η παρουσίαση του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό των ινών και του καναλιού και τέλος παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για τη διερεύνηση της συμπίκνωσης των υδρατμών που παράγονται κατά τη λειτουργία της κυψέλης καυσίμου στη μεμβράνη (βλ. και κεφάλαιο 2).

5.3.1. Πεδίο Ροής

Η προσομοίωση της ροής στο Στρώμα Διάχυσης Αερίου (**GDL, gas diffusion layer**) και στο κανάλι προσαγωγής των αερίων αντιδρώντων για τα PEM περιελάμβανε παραμετρική μελέτη της ροής με σταθερή ταχύτητα εισόδου του

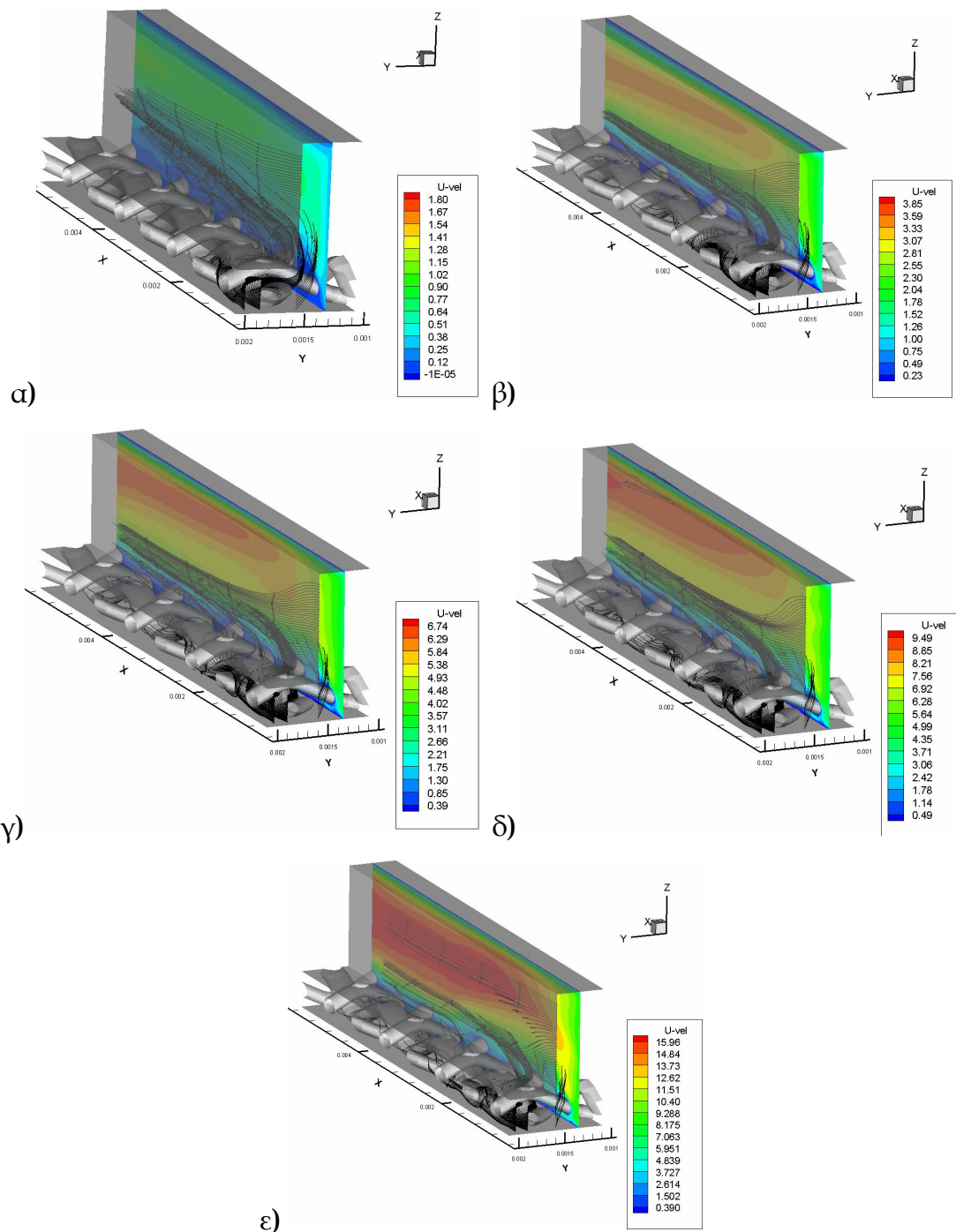
εισερχόμενου αέρα στο υπολογιστικό χωρίο που κατασκευάστηκε. Σκοπός ήταν να διερευνηθεί το πεδίο ροής που αναπτύσσεται στο εσωτερικό του μοντέλου και να εκτιμηθεί εκείνη η συνδυαστική συνθήκη που επιφέρει βέλτιστη συμπεριφορά στο σύστημα πορώδες-κανάλι για την καλύτερη διάχυση-προσαγωγή των αντιδρώντων. Μελετήθηκαν 5 διαφορετικές περιπτώσεις με ταχύτητες εισόδου μεταξύ **0,3** και **8,4 m/s**, που απαντώνται στη διεθνή βιβλιογραφία, όπου αναφέρονται και άλλες χαρακτηριστικές τιμές για τα λειτουργικά μεγέθη των κυψελών καυσίμου PEM (**Quan and Lai,2007, Chang et al.,2006** και **Quan et al.,2005**). Ακολουθώς, (Πίνακας 5-2), παρουσιάζονται οι ταχύτητες εισόδου της ροής που εξετάστηκαν και οι αντίστοιχοι αριθμοί **Reynolds**, βασισμένοι στην υδραυλική διάμετρο του υπολογιστικού χωρίου. Για κάθε περίπτωση προσομοίωσης υπολογίστηκε η πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους που προκύπτει, μακροσκοπικά στο σύνολο του υπολογιστικού χώρου κατά μήκος της διεύθυνσης ροής. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται πινακοποιημένα (Πίνακας 5-2).

Ταχύτητα Εισόδου [m/s]	0,3	1,43	2,86	3,0	4,29	8,4
Αριθμός Re_{Dh}	14,2	67,5	135,1	141,7	202,6	396,8
$\Delta P/L$ [Pa/m]	298,2	3135,7	6525,1	7082,8	12141,7	39191,3

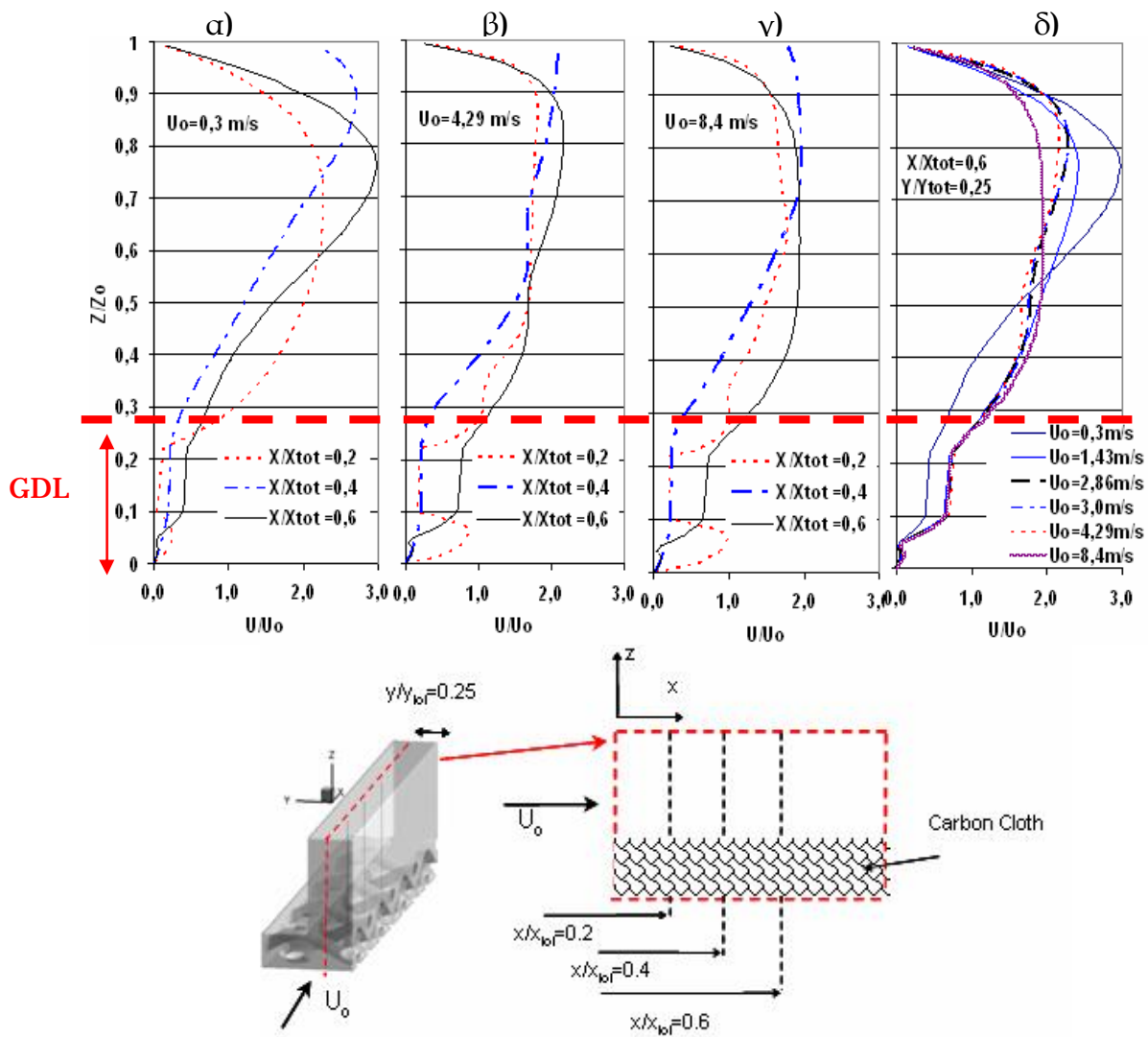
Πίνακας 5-2: Τιμές ταχύτητας εισόδου αέρα καθόδου **PEM**, αντίστοιχοι αριθμοί **Re** και προκύπτουσα πτώση πίεσης σε κάθε περίπτωση.

Από τα αρχικά αποτελέσματα, με χρήση εποπτικών μεθόδων αναπαράστασης της ροής διαφάνηκε η προτίμηση του ρευστού να αποφεύγει το πορώδες υπόστρωμα με τις ίνες του ανθρακοϋφάσματος που προκαλεί αντίσταση στη ροή και να προτιμά την διέλευση από το ελεύθερο κανάλι (Σχήμα 5-16). Όσο αυξανόταν η ταχύτητα ροής στην είσοδο όμως, η ροή διείσδυε όλο και περισσότερο στο κομμάτι της κατασκευής που περιείχε τις ίνες ανθρακοϋφάσματος, πράγμα που

εκτιμάται ότι θα είναι προς όφελος της χημικής κινητικής της αντίδρασης. Σε ότι αφορά όμως αυτό καθαυτό το αποτέλεσμα έγινε προσπάθεια ποσοτικοποίησης αυτής της αύξησης εισροής στο πορώδες μέσο σε συνάρτηση με την ταχύτητα ροής στην είσοδο του υπολογιστικού χωρίου. Έτσι αναπτύχθηκε το προφίλ της αδιάστατης ταχύτητας που προκύπτει σαν λόγος της τοπικής ταχύτητας σε κάθε σημείο προς την ταχύτητα εισόδου για κάθε περίπτωση σε συγκεκριμένες θέσεις (Σχήμα 5-17).



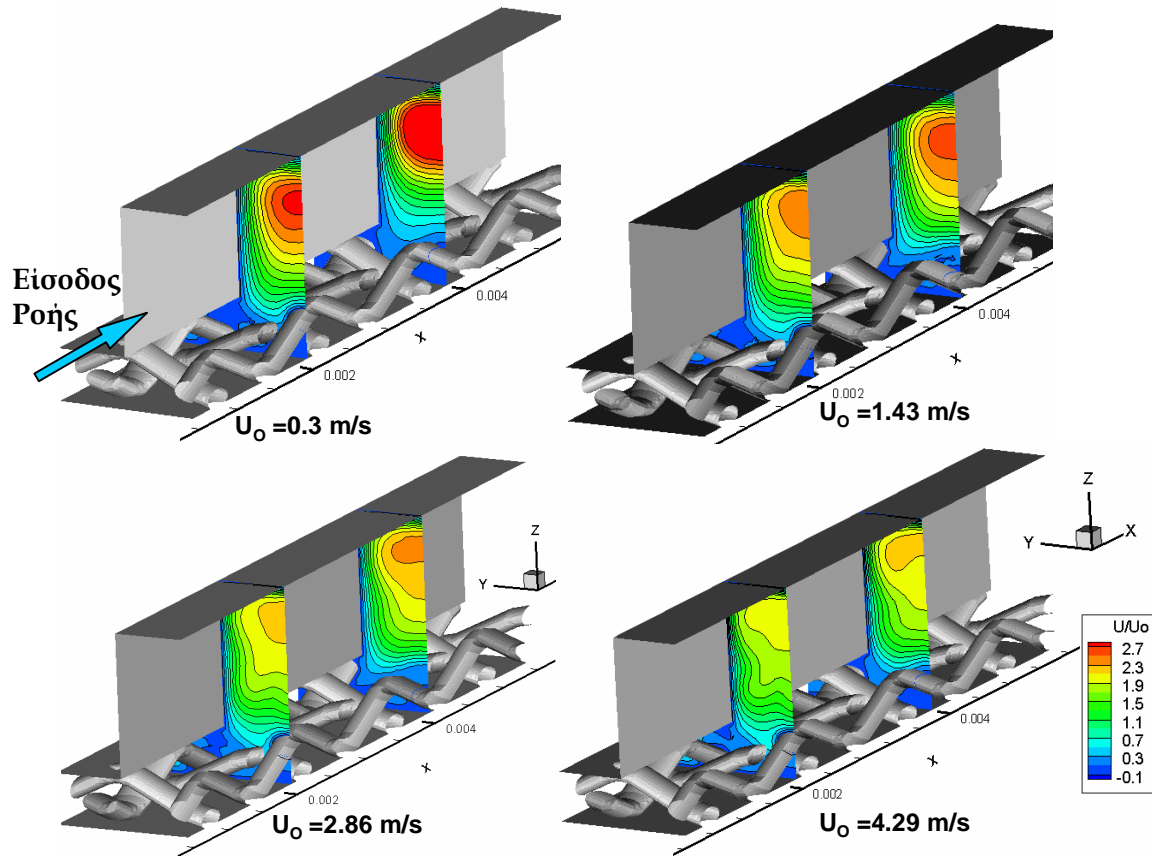
Σχήμα 5-16: Τροχιές ροής και περιοχές ισοταχυτήτων στο σύστημα πορώδες-κανάλι καθόδου για ταχύτητα εισερχόμενου αέρα. α) 0,3m/s β) 1,43m/s γ) 2,86 m/s δ) 4,29 m/s ε) 8,4 m/s.



Σχήμα 5-17: Κάθετες διανομές αδιάστατων ταχυτήτων που διατρέχουν τόσο το κενό κανάλι, όσο και το πορώδες ύφασμα στο **GDL** σε τρεις θέσεις κατά την φορά της ροής α) $U_0=0,3 \text{ m/s}$, β) $U_0= 4,29 \text{ m/s}$, γ) $U_0= 8,4 \text{ m/s}$ και δ) στην ίδια θέση για διάφορες ταχύτητες εισόδου $U=0,3\sim 8,4 \text{ m/s}$.

Από τα εξαγόμενα αποτελέσματα προκύπτει πως όντως η ποσότητα του αέρα που εισέρχεται στο πορώδες υπόστρωμα με τις ίνες του υφάσματος είναι μεγαλύτερη όσο μεγαλύτερη είναι η ταχύτητα εισόδου του ρευστού, αφού φαίνεται η ποσοστιαία αύξηση της ροής μάζας του αέρα στις αδιάστατες διανομές ταχυτήτων για την περιοχή εντός του **GDL** ($Z/Z_0 \leq 0,27$). Η διαφορά μάλιστα μεταξύ των μέγιστων τιμών για τα $0,3$ και $8,4 \text{ m/s}$ φτάνει περίπου τα **214%** για συγκεκριμένη θέση μέσα στο **GDL**. Η εποπτική παρουσίαση των παραπάνω

γίνεται στο ακόλουθο σχήμα (Σχήμα 5-18), όπου εικονίζονται οι ισο-καμπύλες αδιάστατων ταχυτήτων σε τομές εγκάρσιες στη διεύθυνση ροής για θέσεις $X/X_{\text{tot}} = 0,25$ και $0,75$ δίνοντας έτσι πληροφορίες για την τοπική τιμή της κατανομής της ροής μάζας αέρα σε διαφορετική τοποθεσία από ότι το προηγούμενο σχήμα (Σχήμα 5-17).

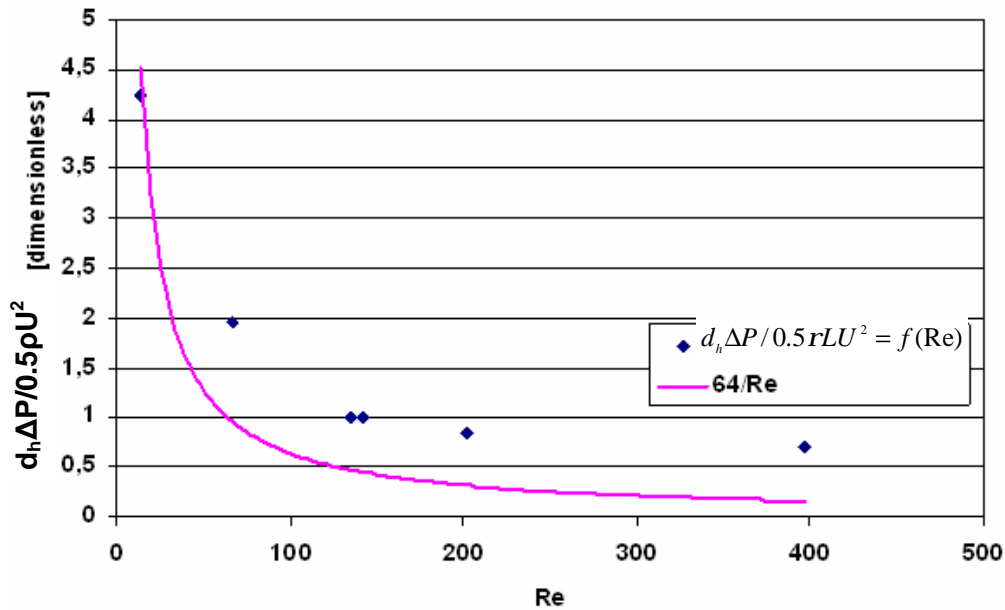


Σχήμα 5-18: Τομές όπου παρουσιάζονται οι ισοϋψείς καμπύλες των αδιάστατων ταχυτήτων. Παρουσιάζονται για τέσσερις τιμές ταχύτητας εισόδου U_0 . α) $U_0 = 0,3 \text{ m/s}$ β) $U_0 = 1,43 \text{ m/s}$ γ) $U_0 = 2,86 \text{ m/s}$ δ) $U_0 = 4,29 \text{ m/s}$

Συμπληρωματικά και αφού είχε διαφανεί η συμπεριφορά αυτή του ρευστού στο σύστημα GDL-κανάλι, έγινε διερεύνηση της κατανομής της πτώσης πίεσης ανά μονάδα μήκους με τη μορφή του αδιάστατου συντελεστή τριβής που προκύπτει σαν :

$$f = \frac{d_h \Delta P}{\frac{1}{2} r L U^2} \quad (5-1)$$

Ο συντελεστής αυτός συγκρίθηκε με τον γνωστό κανόνα $64/Re$ που δίνει τον συντελεστή τριβής στρωτής ροής στην περίπτωση αγωγών με λεία επιφάνεια (Παπαϊωάννου, 2002). Προς επίρρωση των προηγούμενων ευρημάτων, διαφάνηκε ότι στις χαμηλές τιμές ταχυτήτων εισόδου, ο συντελεστής τριβής που ουσιαστικά εκφράζει την αδιάστατη πτώση πίεσης, ακολουθεί τιμές πολύ κοντά στον εμπειρικό κανόνα $64/Re$, όμως όσο οι ταχύτητες εισόδου γίνονται μεγαλύτερες, οι τιμές του f αποκλίνουν από το νόμο $64/Re$ (Σχήμα 5-19).



Σχήμα 5-19: Σύγκριση αδιάστατου συντελεστή τριβής (αδιάστατη πτώση πίεσης) με το εμπειρικό κανόνα $64/Re$ για στρωτή ροή.

Αυτό ερμηνεύεται σχετικά εύκολα, αν ληφθεί υπόψιν και το προηγούμενο αποτέλεσμα το οποίο ουσιαστικά αποδεικνύει ότι για υψηλότερες ταχύτητες εισόδου στο σύστημα πορώδες-κανάλι, η ροή εισέρχεται όλο και περισσότερο στο πορώδες, εγκαταλείποντας το κανάλι. Άρα η συμπεριφορά της ροής στο σύστημα απομακρύνεται από τη συμπεριφορά ροής σε αγωγό, την οποία έχει όμως στις

χαμηλότερες τιμές ταχυτήτων εισόδου, εισάγοντας μεγαλύτερες πτώσεις πίεσης λόγω της μεγαλύτερης διείσδυσης της στο ύφασμα.

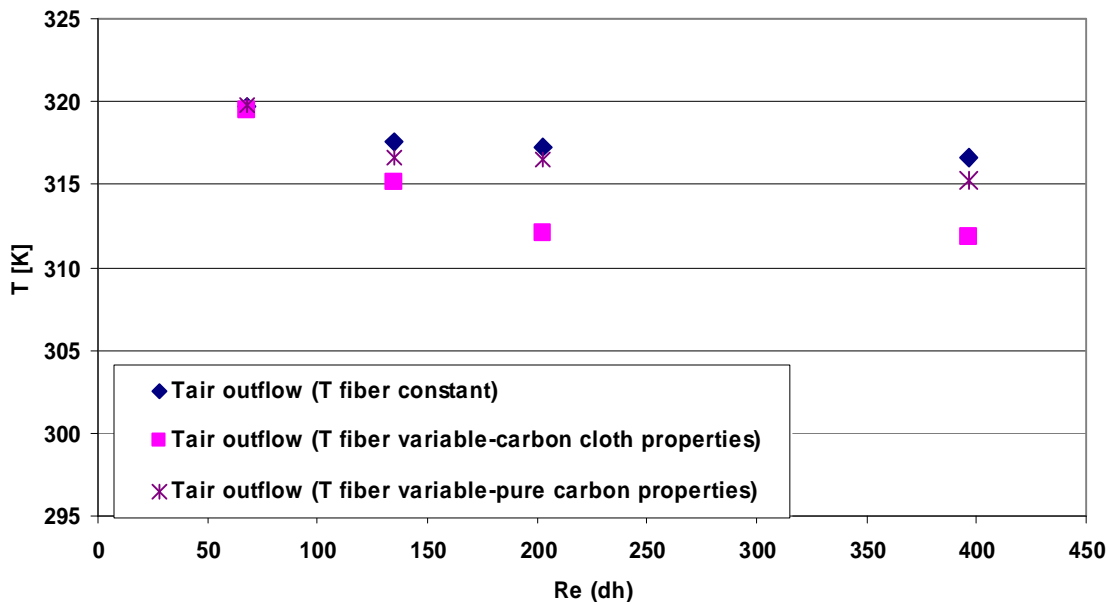
Πέρα από τις μακροσκοπικές πληροφορίες που εξήχθησαν λοιπόν, τα αποτελέσματα δίνουν πληροφορίες και για τη συμπεριφορά του συστήματος και την τοπική κατανομή τόσο της μάζας του αέρα, όσο και της θερμοκρασίας στο εσωτερικό που παρουσιάζεται στην αμέσως επόμενη παράγραφο.

5.3.2. Πεδίο Θερμοκρασίας

Κατά τη λειτουργία των κυψελών καυσίμου PEM οι θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στη μεμβράνη είναι της τάξης των **353K (Siegel, 2003)**, με αποτέλεσμα να υπάρχει ανάγκη διαχείρισης της θερμότητας αυτής για την αποφυγή τοπικών υπερθερμάνσεων, οι οποίες οδηγούν τόσο σε ξήρανση της μεμβράνης και κίνδυνο καταστροφής της, όσο και σε κίνδυνο υποβάθμισης των μηχανικών ιδιοτήτων των υπολοίπων μερών (ανθρακοΐνες - **carbon cloth fibers**). Τα αποτελέσματα λοιπόν που εξήχθησαν, αποσκοπούσαν στη διερεύνηση του θερμοκρασιακού πεδίου τόσο στο ρευστό που διαρρέει το πορώδες μέσο, όσο και στη στερεά φάση των ινών ανθρακοϋφάσματος που έρχονται σε άμεση επαφή με τη μεμβράνη (MEA). Αρχικά θεωρήθηκε ότι η μεμβράνη είχε την ίδια θερμοκρασία με τις ίνες ενώ ο εισερχόμενος αέρας είχε σταθερή θερμοκρασία $T_{air} = 293K$. Έγιναν λοιπόν παραμετρικές μελέτες με παράμετρο την ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα και μαζί με τα αποτελέσματα της συζυγούς επίλυσης απεικονίζεται (Σχήμα 5-20) και η τιμή για τη θερμοκρασία εξόδου του αέρα στην περίπτωση αυτή που οι ίνες του υφάσματος θεωρήθηκαν ισοθερμοκρασιακές με τη μεμβράνη.

Επιπρόσθετα και επειδή η βαρύτητα παίζει σημαντικό ρόλο σε εφαρμογές μεταφορών και μεταφορικών μέσων και επηρεάζει τα αποτελέσματα του ροϊκού πεδίου (αλλά και του θερμοκρασιακού και του πεδίου υγρασίας και γενικότερα μεταφοράς, αφού αυτά συνδέονται) σε επίπεδο μικροκλίμακας, έγινε προσπάθεια

να φανεί η εξάρτηση ή μη των αποτελεσμάτων από την επίδραση της επιτάχυνσης της βαρύτητας. Έτσι –πέρα από τα αποτελέσματα που θα παρουσιαστούν στην παράγραφο 5.3.3- υπολογίστηκε ο αριθμός **Gr** ο οποίος δίνει ένα μέτρο της επίδρασης της βαρύτητας σαν λόγος των δυνάμεων βαρύτητας προς τις δυνάμεις ιξώδους. Αυτός για τη χειρότερη περίπτωση (της πιο θερμής δηλαδή θερμοκρασίας εξόδου του αέρα που υπολογίστηκε), έδωσε τιμή ίση με $1,471 \times 10^{-2}$, αποδεικνύοντας σε συνδυασμό με την ελάχιστη τιμή του αριθμού **Fr** συναγωγής **Fr = 3** (βλ. και παράγραφο 3.2.2) πως η επίδραση της άνωσης είναι ασήμαντη (ASHRAE, 2009). Ως εκ τούτου όλες οι προσομοιώσεις από τούδε και στο εξής είχαν ενεργοποιημένο τον όρο επιτάχυνσης της βαρύτητας που ουσιαστικά δεν είχε διαφορά από τα αντίστοιχα αποτελέσματα χωρίς αυτόν.



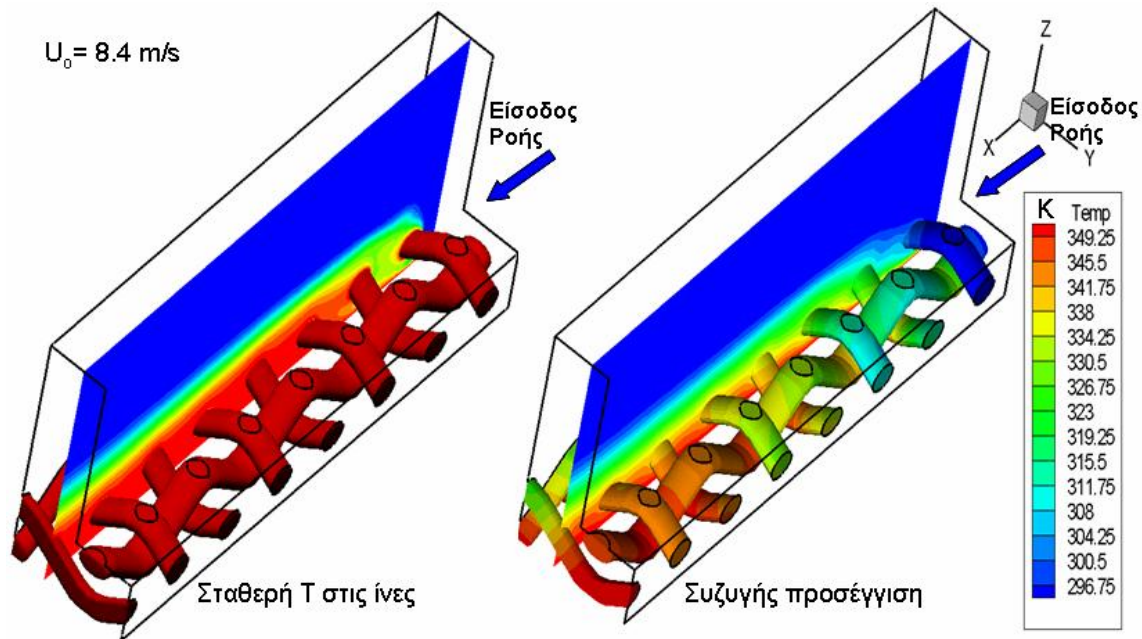
Σχήμα 5-20: Θερμοκρασίες αέρα στην έξοδο από το μοντέλο του PEM για σταθερή θερμοκρασία στις ίνες, συζυγή επίλυση με ιδιότητες εμπορικού υφάσματος (ELAT) ή ιδιότητες γραφίτη αντίστοιχα.

Σε μια περαιτέρω ανάλυση, έγινε χρήση του υπολογιστικού εργαλείου που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 5.1, για να εξαχθεί –όπως και στην περίπτωση

των μεταλλικών αφρών- το αποτέλεσμα της θερμοκρασιακής κατανομής στο εσωτερικό του στερεού υλικού σε συζυγή επίλυση με τη συναγωγή του διαρρέοντος αέρα. Έτσι μελετήθηκαν δύο περιπτώσεις υλικών για τις ίνες του υφάσματος, οι οποίες θεωρήθηκε ότι έχουν είτε τη μία είτε την άλλη δέσμη ιδιοτήτων που περιγράφεται παρακάτω:

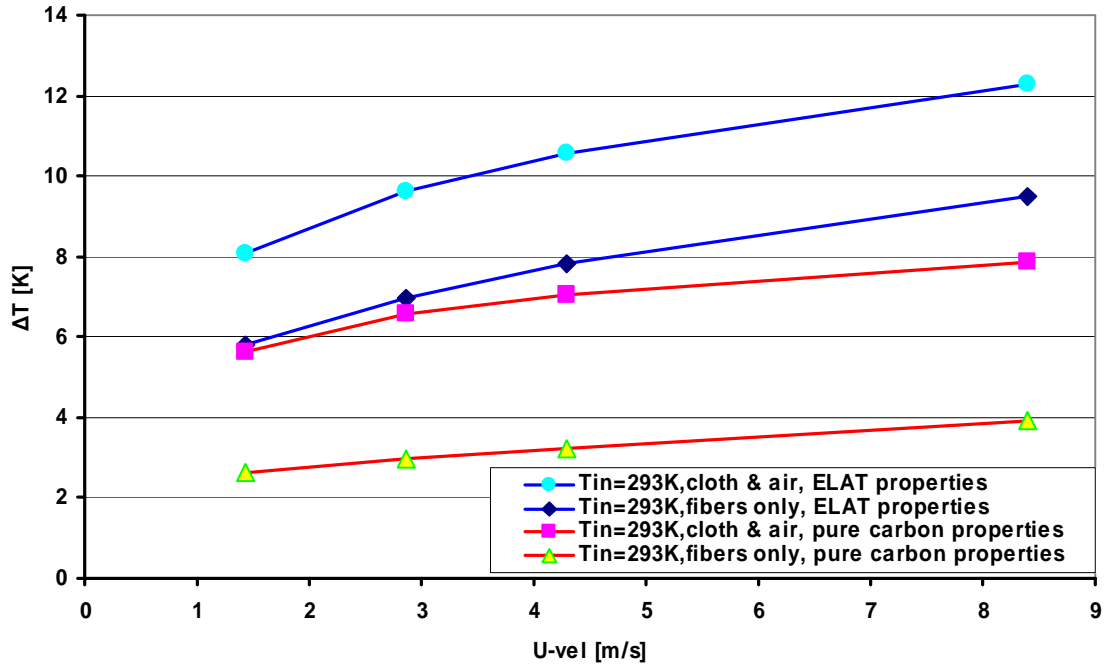
1. Ιδιότητες γραφίτη (καθαρού άνθρακα), $k= 3 \text{ W/mK}$, $\rho= 1225 \text{ kg/m}^3$ και $C_p= 700 \text{ J/kgK}$
2. Ιδιότητες εμπορικού υφάσματος με την επωνυμία ELAT, $k= 0,27 \text{ W/mK}$, $\rho= 330 \text{ kg/m}^3$ και $C_p= 610 \text{ J/kgK}$

Σημειώνεται ότι και οι δύο κατηγορίες υλικών εντοπίστηκαν στη διεθνή βιβλιογραφία και δεν αποτελούν μέρος της ερευνητικής δουλειάς της παρούσας διατριβής μέσω μετρήσεων κλπ., όπως και στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού. Στο παραπάνω σχήμα (Σχήμα 5-20), παρουσιάζονται και τα αποτελέσματα της θερμοκρασίας εξόδου του αέρα για κάθε μία από αυτές τις κατηγορίες υλικών, με συζυγή επίλυση του πεδίου θερμοκρασίας. Όπως φαίνεται, στις περιπτώσεις υψηλότερων ταχυτήτων εισόδου, η θερμοκρασία εξόδου του αέρα από τον όγκο ελέγχου πέφτει, γεγονός αναμενόμενο. Ωστόσο, όσο αυξάνει η ταχύτητα, οι διαφορές μειώνονται με διαφαινόμενη επικράτηση ασυμπτωτικής τάσης. Η γνωσιολογική εστίαση που δίνει η συζυγής επίλυση και η διαφοροποίηση του πεδίου θερμοκρασίας από το αντίστοιχο με θεωρούμενη σταθερή θερμοκρασία στις ίνες (Σχήμα 5-21) αντανακλάται και στο χαρακτηριστικό παράδειγμα πως η διαφορά μεταξύ της μέσης θερμοκρασίας εξόδου από τη θερμοκρασία εισόδου για $U_o = 8,4 \text{ m/s}$ και $U_o = 1,43 \text{ m/s}$ είναι 3K για σταθερή θερμοκρασία στις ίνες, ενώ η αντίστοιχη διαφορά για συζυγώς επιλυμένη θερμοκρασία είναι 8K , γεγονός που παίζει σημαντικό ρόλο όταν η συζήτηση αφορά διαχείριση υγρασίας, ή μηχανική αντοχή ευαίσθητων υλικών.

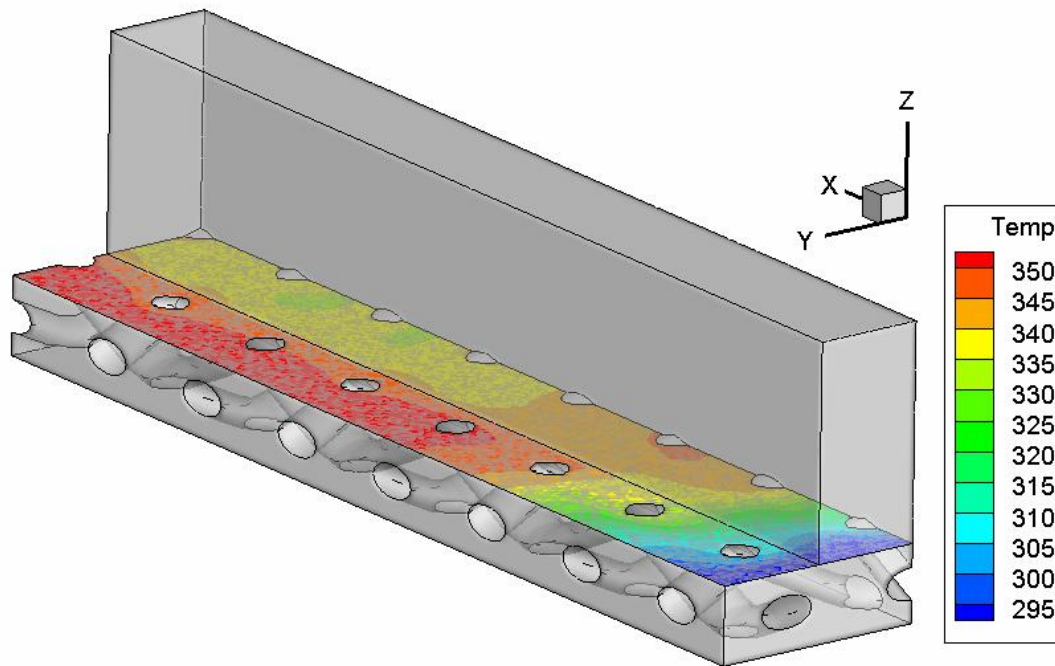


Σχήμα 5-21: Παράδειγμα διαφοροποίησης του θερμοκρασιακού πεδίου μεταξύ σταθερής θερμοκρασίας στις ίνες και συζυγούς επίλυσης στο εσωτερικό τους, $U_0 = 8,4 \text{ m/s}$

Επιπλέον για να διαπιστωθεί κατά πόσο αλλάζει η κατανομή θερμοκρασίας στο εσωτερικό των υλικών και του πεδίου ροής σε σχέση με τις ιδιότητες του θεωρούμενου υλικού, έγινε αντιπαραβολή των τιμών που προκύπτουν από την εξαγωγή του μέσου όρου της θερμοκρασίας στις ίνες του υφάσματος χωρίς την ύπαρξη του αέρα ανάμεσά τους (1 φάση-στερεή), όπως και του αντίστοιχου μέσου όρου για τις ίνες με την παρουσία του αέρα ανάμεσα στο ύφασμα (2 φάσεις-στερεή και αέρια) για τις δύο θεωρούμενες ιδιότητες υλικών που μελετήθηκαν συναρτήσει της ταχύτητας εισόδου της ροής (Σχήμα 5-22). Αυτό έγινε για τιμή θερμοκρασίας εισερχόμενου αέρα ίση με $T_{\text{air}} = 293\text{K}$ (ψυχρή λειτουργία).



α)



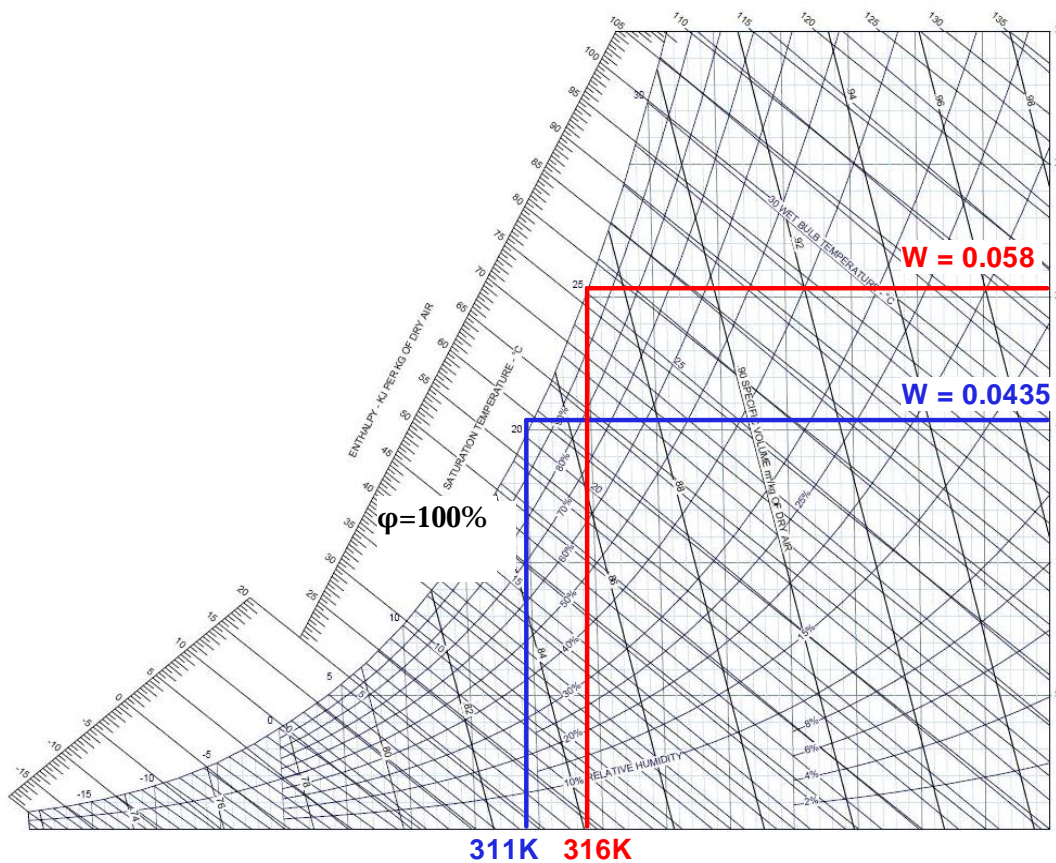
β)

Σχήμα 5-22: α) Μέσες διαφορές θερμοκρασίας μεταξύ μεμβράνης ($\Delta T = T_{\text{μεμβρ}} - T_{\text{air}}$, $T_{\text{μεμβρ}} = 353\text{K}$) και άνω ορίων των ανθρακοϊνών ή άνω επιπέδου υφάσματος για τις 2 ιδιότητες υλικών ($T_{\text{air}} = 293\text{K}$, ψυχρή λειτουργία κοψέλης). β) Το άνω επίπεδο υφάσματος και οι τομές των ινών από τα οποία εξήχθησαν οι συγκεκριμένες τιμές.

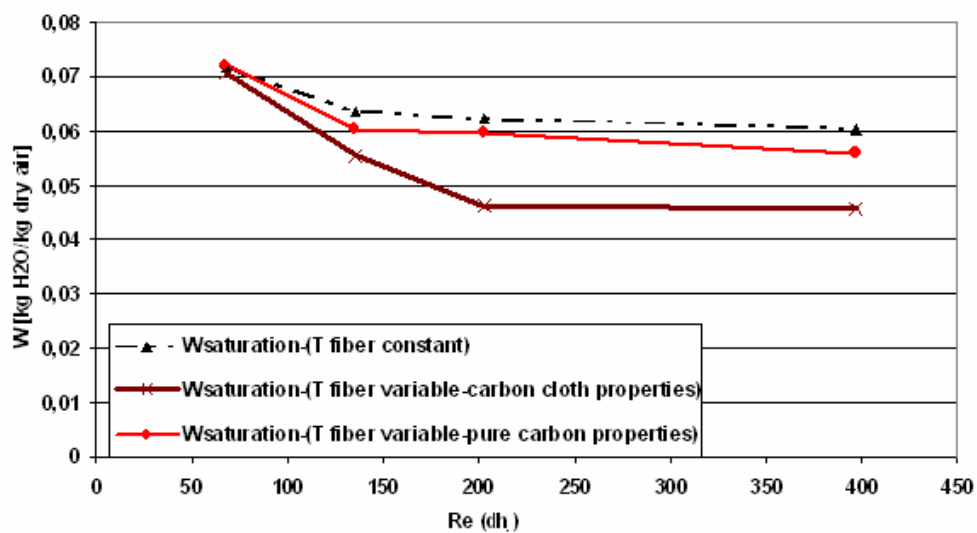
Η αντίστοιχη τιμή που δίνουν –από υπολογισμούς και όχι μετρήσεις- για τη διαφορά θερμοκρασίας στο **GDL** οι **Khandelwal** και **Mench, (2006)** είναι από **1-2 K**, μέχρι και **4-5 K** για διαφορετικά εμπορικά υφάσματα **carbon cloth** με θερμοκρασία λειτουργίας ομοίως στους **353K**. Ωστόσο από την παρούσα εργασία διαφαίνεται πως υπάρχουν και θερμοκρασιακές διαφορές μεγαλύτερες από αυτές που δίνουν οι **Khandelwal** και **Mench, (2006)**, κάτι που πιθανόν να σημαίνει πως υπάρχουν περιοχές με μεγαλύτερη πιθανότητα συμπύκνωσης υγρασίας.

Έτσι, η τοπική θερμοκρασία και η θερμοκρασία εξόδου που μελετήθηκε συμβάλλει στην πρόλεξη ενός φαινομένου, το οποίο όμως ακολουθεί αναλυτικά στην επόμενη παράγραφο: αυτό της συγκέντρωσης και της πιθανής συμπύκνωσης της υγρασίας που παράγεται με τη μορφή υδρατμών στη μεμβράνη, λόγω της οξειδοαναγωγικής αντίδρασης, αλλά και εισέρχεται μέσω του ατμοσφαιρικού (συνήθως) αέρα που συμμετέχει σαν αντιδρών στη διαδικασία. Επομένως, η θερμοκρασία τοπικά είναι από τους παράγοντες που καθορίζουν αν για συγκεκριμένη τιμή συγκέντρωσης υδρατμών θα σχηματιστεί συμπύκνωμα ή αντίστροφα ποιος είναι εκείνος ο λόγος υγρασίας στον αέρα ο οποίος δίνει συμπύκνωση των υδρατμών, δηλ. σχετική υγρασία **100%**. Γραφικά κάτι τέτοιο υπολογίζεται με τη χρήση του ψυχομετρικού χάρτη (Σχήμα **5-23**), όπου με τη χρήση της θερμοκρασίας που επικρατεί (εξόδου από τον υπολογιστικό όγκο στη συγκεκριμένη περίπτωση), γίνεται εκτίμηση του λόγου υγρασίας που οδηγεί σε σχετική υγρασία (βλ. ενότητα **3.3**) **100%**.

Σε αυτή την κατεύθυνση της πρόλεξης, πριν την προσομοίωση της κατανομής υγρασίας κινείται η απεικόνιση των τιμών του λόγου υγρασίας (**W**, βλ. και ενότητα **3.3**) στον οποίο επέρχεται κορεσμός για κάθε θερμοκρασία εξόδου, που εμφανίζεται (Σχήμα **5-24**). Στο εν λόγω σχήμα απεικονίζεται ο λόγος υγρασίας για $\varphi=100\%$ που προκύπτει για κάθε θερμοκρασία εξόδου στις περιπτώσεις σταθερής θερμοκρασίας στις ίνες του υφάσματος ή μεταβλητής (συζυγώς επιλυμένης) για δύο είδη ιδιοτήτων.



Σχήμα 5-23: Παράδειγμα χρήσης ψυχομετρικού χάρτη για την πρόλεξη του απαιτούμενου λόγου υγρασίας για συμπύκνωση.



Σχήμα 5-24: Λόγος υγρασίας που οδηγεί σε $\phi=100\%$ για κάθε θερμοκρασία εξόδου που υπολογίστηκε συναρτήσει του αριθμού Re_{dh} .

Χαρακτηριστικό παράδειγμα της σημασίας που έχει η σωστή τιμή της θερμοκρασίας εξόδου που υπολογίζεται είναι το γεγονός ότι –ειδικά για τις περιπτώσεις υψηλών ταχυτήτων εισόδου όπου η διαφορά θερμοκρασίας στην έξοδο είναι μεγαλύτερη μεταξύ σταθερής τιμής και συζυγώς επιλυμένης στις ίνες- υπάρχει μεγάλη απόκλιση - μέχρι και **33%** - μεταξύ της τιμής του λόγου υγρασίας που οδηγεί σε συμπύκνωση (πάντα για ατμοσφαιρικές συνθήκες πίεσης) (Σχήμα 5-23).

Ως εκ τούτων φαίνεται η ανάγκη περαιτέρω εμβάθυνσης στο ζήτημα της συμπύκνωσης και της κατανομής γενικότερα της υγρασίας στην περίπτωση της μικροδομής του **GDL** στις κυψέλες καυσίμου PEM, γεγονός που πραγματεύεται η παρούσα εργασία στην επόμενη ακριβώς παράγραφο.

5.3.3. Κατανομή Υγρασίας

Κατά τη λειτουργία των κυψελών καυσίμου PEM, η αντίδραση που λαμβάνει χώρα στη μεμβράνη (βλ. και κεφάλαιο 2), δίνει σαν άμεσο παραγόμενο προϊόν το σχηματισμό νερού υπό τη μορφή υδρατμών (**Larminie και Dick, 2003**). Ωστόσο η διαχείριση της υγρασίας είναι μια διαδικασία πολύ σημαντική για την απόδοση του συστήματος της κυψέλης καυσίμου (**Nam et al., 2009, Quick et al., 2009**), εφόσον αν ξεραθεί η μεμβράνη (αφυδατωθεί) κινδυνεύει με καταστροφή, ενώ αν πλημμυρίσει το **GDL**, γίνεται ανάσχεση της μεταφοράς αντιδρώντων στη μεμβράνη και πέφτει η απόδοση της κυψέλης, έως ότου αυτή διακόψει τελείως τη λειτουργία της (αδυναμία εκτέλεσης της αντίδρασης-**stall**). Τα αποτελέσματα λοιπόν που παρουσιάζονται στο εξής αφορούν την κατανομή της παραγόμενης υγρασίας στο **GDL** και στο κανάλι, την συγκέντρωσή της τοπικά και την πιθανότητα συμπύκνωσης που παρουσιάζουν συνδυασμοί συνθηκών λειτουργίας και θέσεων.

Κατά τη μελέτη αυτή χρησιμοποιήθηκαν τιμές που εμφανίζονται στη διεθνή βιβλιογραφία σε ότι αφορά την παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη (βλ. και κεφάλαιο 3), με ρυθμό παραγωγής $\dot{m}_w = 4,66 \times 10^{-4} \text{ kg}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{s}\cdot\text{m}^2$ οι οποίες προέκυψαν από εργαστηριακές μετρήσεις λειτουργίας κυψέλης καυσίμου PEM (GSRT-MDG, 2006-2008). Η ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα, η θερμοκρασία προσαγωγής του, η σχετική υγρασία του και το είδος του υλικού κατασκευής των ινών του ανθρακούφασματος χρησιμοποιήθηκαν ως παράμετροι, ενώ σε κάθε περίπτωση ρυθμιστικό ρόλο έπαιξε και ο λόγος αέρα λ (συσχετιζόμενος άμεσα με την ταχύτητα εισόδου) για τον υπολογισμό του οποίου θεωρήθηκε διαφορά δυναμικού παραγόμενη στο κελί $V_c = 0,65 \text{ V}$ (εκλογή) και ισχύς $P_e = 1,6215 \text{ W}$. Η τιμή αυτή προκύπτει ως εξής: Οι Larminie και Dick, (2003), δίνουν για την παραγόμενη ισχύ και την παραγωγή υγρασίας σε μια κυψέλη καυσίμου PEM τη σχέση που τις συνδέει ως $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}} = 9.34 \times 10^{-8} \frac{P_e}{V_c}$, με το V_c να κυμαίνεται μεταξύ 0,6 και 0,7 V. Έτσι με την εκλογή που γίνεται παραπάνω για το V_c , υπολογίζεται η ισχύς αν κανείς λάβει υπόψιν ότι η παραγωγή υγρασίας είναι $\dot{m}_w = 4,66 \times 10^{-4} \text{ kg}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{s}\cdot\text{m}^2$ και από την επιφάνεια που θεωρείται στην παρούσα υπολογίζεται η $\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}$.

Έτσι, από τους Larminie και Dick, (2003) δίνεται ότι η στοιχειομετρική κατανάλωση οξυγόνου σε μια κυψέλη καυσίμου PEM είναι $\frac{Pe}{V_c \times n} \text{ mol/sec}$ ή

$\dot{m}_{\text{O}_2} = \frac{32 \times 10^{-3} Pe}{V_c F}$, όπου F η σταθερά του Faraday και αν ληφθεί υπόψιν ότι το

M.B. του O_2 είναι 32. Έτσι τελικά η στοιχειομετρική κατανάλωση οξυγόνου είναι

$\dot{m}_{\text{O}_2} = 8,29 \times 10^{-8} \frac{Pe}{V_c} \text{ [kg/sec]}$. Αν ληφθεί τώρα υπόψιν ότι το ποσοστό του

οξυγόνου στον ατμοσφαιρικό αέρα είναι περίπου 21% και το M.B. του αέρα περί το 28,97 η κατανάλωση οξυγόνου μετατρέπεται σε κατανάλωση αέρα ως:

$$\dot{m}_{air} = \frac{28,97 \times 10^{-3} Pe}{0,21 \times 4 \times V_c \times F} = 3,57 \times 10^{-7} \times \frac{Pe}{V_c} \quad [\text{kg/sec}], \quad \text{η οποία είναι επίσης}$$

στοιχειομετρική. Σε περίπτωση ωστόσο που ο αέρας δεν είναι σε στοιχειομετρική αναλογία αλλά έχει λόγο αέρα λ (δηλαδή λόγο **mol/sec** αέρα που υπάρχουν προς **mol/sec** αέρα που χρησιμοποιούνται στην αντίδραση), η ποσότητα αέρα που εισέρχεται στην κυψέλη είναι $\dot{m}_{air} = 3,57 \times 10^{-7} \times l \times \frac{Pe}{V_c}$. Οπότε, εξάγεται ο

$$\text{λόγος αέρα από τη σχέση } m'_{out} = (3,57 \times 10^{-7} \times \lambda - 8,29 \times 10^{-8}) \times \frac{Pe}{V_c}, \quad \text{η οποία}$$

προκύπτει από την ποσότητα του αέρα που εισέρχεται αφαιρουμένης της ποσότητας που καταναλώνεται. Επειδή η ποσότητα που καταναλώνεται είναι τουλάχιστον μια τάξη μεγέθους μικρότερη ($8,29 \times 10^{-8}$) από αυτή που εισέρχεται στο θεωρούμενο χωρίο ($3,57 \times 10^{-7} \times \lambda$), στην παρούσα εργασία θεωρήθηκε όλη η μάζα εξόδου που προέκυπτε και ήταν φυσικά ίση με τη μάζα του εισερχόμενου αέρα στο χωρίο (παραδοχή αμελητέας κατανάλωσης αέρα). Την κατάταξη όλων των συνδυασμών προσομοίωσης καθώς και την παρατηρούμενη συμπεριφορά σε σχέση με την υπέρβαση σχετικής υγρασίας $\phi=100\%$ παρουσιάζει συγκεντρωτικά ο παρακάτω πίνακας (Πίνακας 5-3).

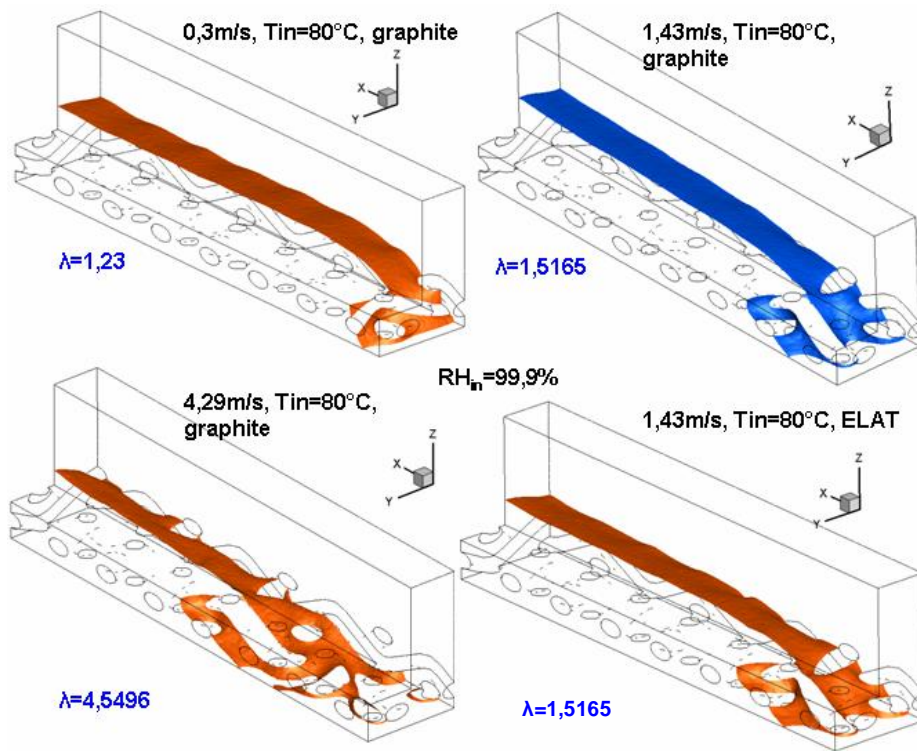
U_{in} [m/s] 1,43 λ=1,5165, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης)		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99,9	333	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 98,68%)
99,9	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 98,95%)
99,9	353	Χωρίς παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη, με g= 0
99,9	353	Χωρίς παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη, με g= -9,81
99	353	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 99,82%)
99	333	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 97,79%)
99	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 98,06%)
40	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 41,45%)
Ιδιότητες : ELAT		
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99,9	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (φ _{max} = 98,95%)
U_{in} [m/s] 4,29 λ= 4,5496, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης)		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99,9	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (φ _{max} = 98,85%)
U_{in} [m/s] 0,3 λ= 1,23, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης)		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99,9	293	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (φ _{max} = 99,73%)

Πίνακας 5-3: Αποτελέσματα παραμετρικής μελέτης συγκέντρωσης υγρασίας, θερμοκρασίας εισόδου και ιδιοτήτων ανθρακοινών στο **GDL**

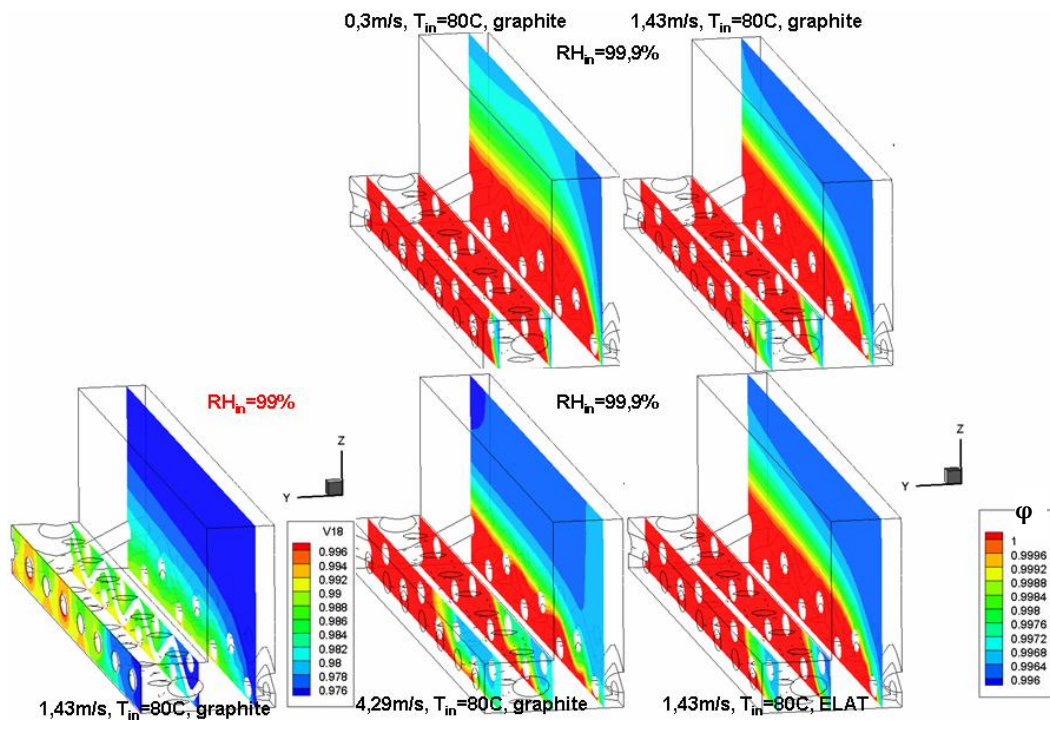
Συμπληρωματικά για λόγους επεξήγησης πρέπει να ειπωθεί πως έγινε διερεύνηση της επίδρασης της βαρύτητας στο αποτέλεσμα της συμπύκνωσης και του ροϊκού πεδίου εν γένει (βλ. και κεφάλαιο 3) με ενεργοποίηση ή όχι αντιστοίχως του όρου βαρύτητας στην επίλυση των εξισώσεων (Πίνακας 5-3).

Ζητούμενο σε αυτή τη μελέτη ήταν τόσο η μορφή του μετώπου συμπύκνωσης όπως αυτό δημιουργείται και εμφανίζεται κατά τη μόνιμη ροή στο κομμάτι της κυψέλης καυσίμου που μοντελοποιήθηκε μέσα στο **GDL**, όσο και οι περιοχές

υψηλής συγκέντρωσης υγρασίας και άρα πρώτης εμφάνισης σταγονιδίων υγρού νερού στον όγκο ελέγχου. Για τον λόγο αυτό οι τιμές της σχετικής υγρασίας εισερχόμενου αέρα ήταν αρκετά υψηλές, με την έννοια ότι **99,9%** σχετική υγρασία, ο ξηρός αέρας αποκτά μόνο αφού έχει διανύσει **1,1428 m** στη χειρότερη περίπτωση των **4,29 m/s** ($\lambda=4,5496$) που μελετήθηκε, σύμφωνα με υπολογισμούς, για αυτή την παραγωγή υγρασίας ($4,66 \times 10^{-4} \text{ kg}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{s} \cdot \text{m}^2$) που πραγματοποιήθηκαν οι υπολογισμοί. Στο (Σχήμα 5-25) λοιπόν εμφανίζονται τα μέτωπα συμπύκνωσης για τις 4 περιπτώσεις (Πίνακας 5-3) που εμφανίστηκε συμπύκνωση στο **GDL**, καθώς και οι τομές με την κατανομή της σχετικής υγρασίας (ϕ ή **R.H.**).



α)

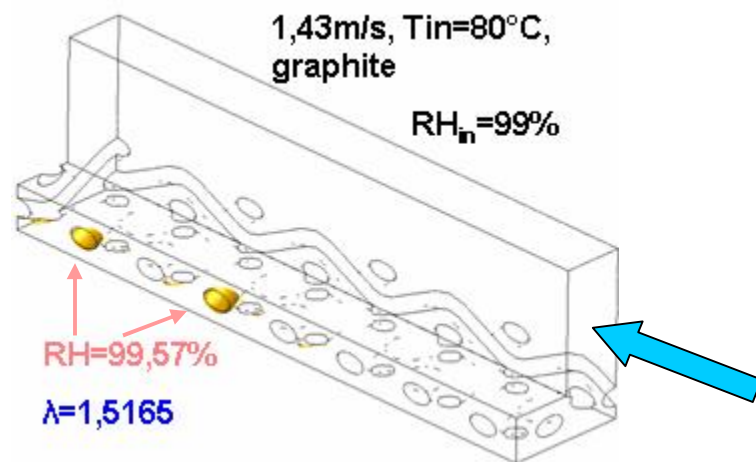


β)

Σχήμα 5-25: α) Απεικόνιση του μετώπου συμπύκνωσης ($\phi=1$ ή **100%R.H.**) για τις περιπτώσεις των προσομοιώσεων που εμφάνισαν συμπύκνωση. β) Τομές για τις ίδιες περιπτώσεις και την περίπτωση μη συμπύκνωσης (**1,43 m/s** και $\phi_{in}=99\%$ με $T_{in}=353K$).

Η εποπτική παρουσίαση δίνει αβίαστα το συμπέρασμα ότι όσο μικρότερη είναι η ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα, τόσο νωρίτερα επέρχεται συμπύκνωση, γεγονός που καταδεικνύει για άλλη μια φορά ως βέλτιστη συνθήκη λειτουργίας την υψηλή ταχύτητα εισόδου του αέρα (βλ. και Σχήμα 5-18). Χαρακτηριστική είναι η περίπτωση που εμφανίζεται στο (Σχήμα 5-26) όπου προλέγονται οι περιοχές όπου είναι πιθανότερο (σχεδόν βέβαιο) ότι θα σχηματιστούν συμπυκνώματα μέσα στο **GDL**, καθώς σε αυτό το σχήμα παρουσιάζονται οι περιοχές με μέγιστη τιμή σχετικής υγρασίας (**R.H. =99,57%**).

Επιπρόσθετα οι περιοχές πρώτης συμπύκνωσης (Σχήμα 5-25, Σχήμα 5-26) φαίνεται ότι βρίσκονται σε σημεία μακριά σχετικά από την είσοδο, όπου έχει ήδη παραχθεί αρκετή υγρασία και όπου οι ίνες του υφάσματος βρίσκονται πολύ κοντά στη μεμβράνη και επιπρόσθετα συνορεύουν με επίπεδα τοιχώματος, όπου η ταχύτητα ροής φθίνει (άνω και κάτω επίπεδα τοιχώματα).



Σχήμα 5-26: Τοπικά μέγιστες τιμές συσσώρευσης σχετικής υγρασίας, προπομπός συμπυκνώματος.

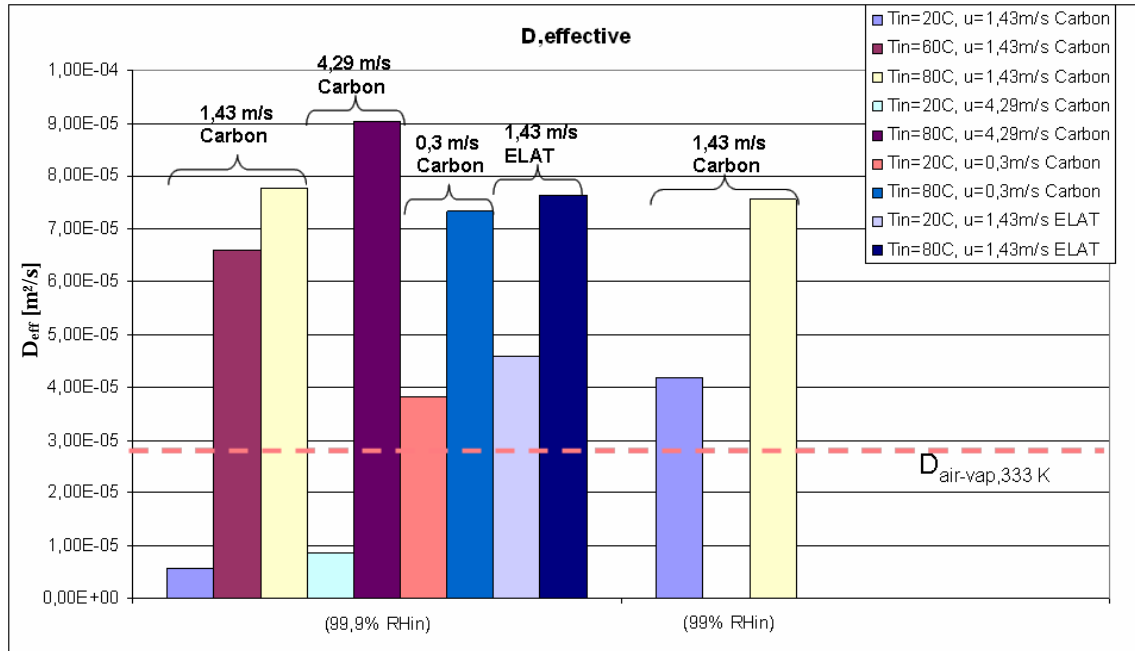
Επιπλέον για την εκτίμηση της διάχυσης των υδρατμών στο πορώδες μέσο και ως εκ τούτου την ευκολία απομάκρυνσής τους από το κανάλι-που είναι και από τα κύρια στοιχεία μιας σωστής διαχείρισης υγρασίας- υπολογίστηκαν οι ισοδύναμοι (ή ενεργοί) συντελεστές διάχυσης που προκύπτουν από την

κατανομή της συγκέντρωσης υγρασίας στο πορώδες υλικό, οι οποίοι παρουσιάζονται (Σχήμα 5-27). Η εξίσωση υπολογισμού του συντελεστή αυτού είναι

$$D_{\text{eff-vap}} = \frac{\dot{m}_{\text{vap}} / A_{\text{cell}}}{\frac{(r_{\text{mix}} * C_V)_{\text{GDL}} - (r_{\text{mix}} * C_V)_{\text{memb}}}{d_{\text{GDL}}}} \quad (5-2)$$

με \dot{m}_{vap} να συμβολίζει την παραγωγή υγρασίας στη μεμβράνη υπό τη μορφή υδρατμών, r_{mix} είναι η πυκνότητα του μίγματος, C_V η συγκέντρωση των υδρατμών και d_{GDL} το πάχος του **GDL** (η απόσταση από τη μεμβράνη έως το άνω οριζόντιο τοίχωμα που περιορίζει τις ίνες του υφάσματος στο μοντέλο της παρούσης διατριβής), βλ. και ενότητα **3.3**.

Ο χαρακτηρισμός των συντελεστών διάχυσης ως «ισοδύναμοι» ή «ενεργοί», έγκειται στο γεγονός ότι αυτοί έχουν υπολογιστεί με την ύπαρξη όλων των φαινομένων που συνυπάρχουν στο εσωτερικό του πεδίου και μεταβάλλουν τόσο την πυκνότητα, όσο και την συγκέντρωση των υδρατμών στο μίγμα. Για το λόγο αυτό και γίνεται ο διαχωρισμός από τον αντίστοιχο συντελεστή διάχυσης υδρατμών σε καθαρό οξυγόνο ή αέρα ($D_{\text{air-vap}}$), ο οποίος υπολογίζεται συνήθως με **ex-situ** μεθόδους που αφορούν ένα σύστημα όπου συνυπάρχουν ατμοσφαιρικός αέρας (ή σπανιότερα καθαρό οξυγόνο) και υδρατμοί (υγρασία), **Quick et al., (2009)** με τον οποίον όμως γίνεται και η σύγκριση, ελλείψει αντιστοιχών δεδομένων υπό τις ίδιες (ή παρεμφερείς) λειτουργικές συνθήκες.



Σχήμα 5-27: Ισοδύναμοι συντελεστές διάχυσης για τις συνθήκες λειτουργίας των προσομοιώσεων και σύγκριση με θεωρητική τιμή για καθαρό αέρα. (Quick et al., 2009). Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται κατά αύξουσα ταχύτητα εισερχόμενου αέρα και θερμοκρασία για κάθε ταχύτητα.

Από τη σύγκριση με την τιμή $D_{\text{air-vap}} = 2,93 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ στους 60°C που δίνουν οι Quick et al., (2009), συνάγεται ότι στις υψηλότερες θερμοκρασίες παρά στις υψηλότερες ταχύτητες, οι τιμές που υπολογίστηκαν είναι μεγαλύτερες, γεγονός λογικό, αφού αύξηση της θερμοκρασίας οδηγεί σε αύξηση της κινητικής ενέργειας ενός αερίου, ενώ αύξηση της ταχύτητας εισόδου του αέρα, οδηγεί σε μείωση της κλίσης της συγκέντρωσης της υγρασίας στο πορώδες μέσο, αφού αυτή παρασύρεται από την αυξημένη μάζα αέρα που εισέρχεται σε αυτό.

Κλείνοντας το κεφάλαιο των αποτελεσμάτων πρέπει να τονιστεί η σημαντική πληροφορία που αποκομίζεται σε τοπικό επίπεδο μικροκλίμακας για όλα τα μεγέθη που εμπλέκονται στις συγκεκριμένες παραμετρικές μελέτες.

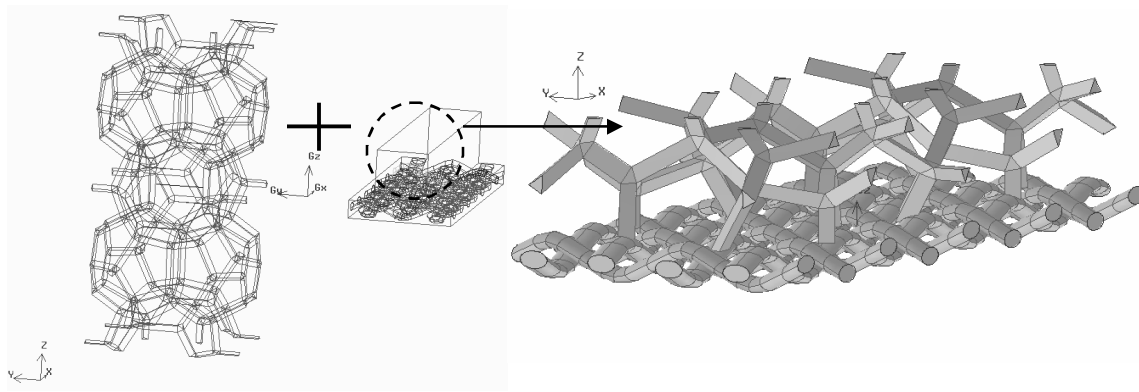
5.4. Χρήση μεταλλικού αφρού ως διανομέα καθόδου κυψέλης καυσίμου PEM

Στην παράγραφο αυτή επιχειρείται η σύζευξη των προηγουμένως εξετασθέντων υλικών εντάσσοντας το μεταλλικό αφρό σε μηχανολογική διάταξη για την επισκόπηση της βελτίωσης ή όχι της απόδοσης λειτουργίας μιας κυψέλης PEM όσον αφορά τη συμπύκνωση υγρασίας και την προσαγωγή μεγαλύτερης ποσότητας αντιδρώντων στο ύφασμα ανθρακοϊνών, αντικαθιστώντας το ενεργοβόρο κανάλι (λόγω της τριβής που εισάγουν τα τοιχώματά του). Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα της ύπαρξης δευτέρου πορώδους υλικού στο **GDL** σε σχέση με τα εξαγόμενα της αρχικής τοπολογίας υφάσματος-καναλιού, επιχειρήθηκε να διαπιστωθούν σχετικές διαφοροποιήσεις που διαφαίνονται χρήσιμες και προλέγονται εύκολα από τη μέχρι τούδε διερεύνηση. Μια από αυτές είναι η διείσδυση μεγαλύτερης μάζας αέρα στο ύφασμα πιθανότατα, όταν το υπερκείμενο κανάλι δεν είναι ελεύθερο στη ροή αλλά έχει σώματα που προβάλλουν αντίσταση στη ροή. Ο 3^{ος} στόχος που επιχειρείται να επιτευχθεί με τη σύζευξη των δύο υλικών είναι η ανάδειξη της μεθοδολογίας απευθείας μοντελοποίησης στον τρισδιάστατο χώρο της μικροκλίμακας σαν ένα συνδυαστικό εργαλείο, που εύχρηστα και αποτελεσματικά δίνει στον ερευνητή μηχανικό τη δυνατότητα να μελετήσει φαινόμενα ροής μάζας και θερμότητας σε ποικίλους συνδυασμούς πορώδων υλικών.

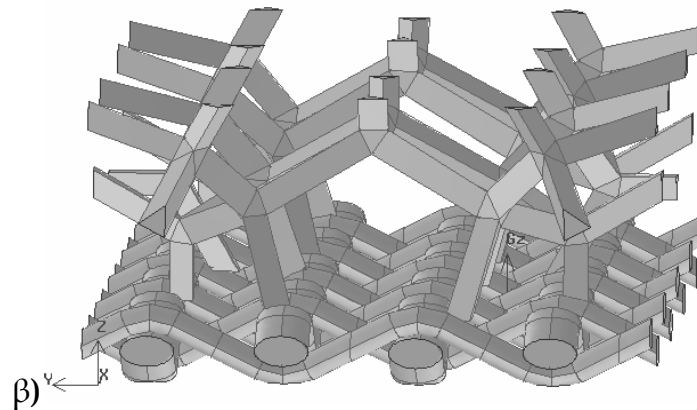
Η επιλογή αυτή δικαιολογείται και από το γεγονός πως τελευταία έχει γίνει αντικείμενο επισταμένης έρευνας η χρήση μεταλλικού αφρού σε κυψέλες καυσίμου, τόσο σαν υλικό διάχυσης στο **GDL**, όσο και ως υλικό ηλεκτροδίου μεταφοράς της παραγόμενης ενέργειας (**Arisetty et al., 2007** και **Kumar & Reddy, 2003**).

Έτσι δημιουργήθηκε ένα εκτεταμένο μοντέλο γεωμετρίας **GDL** το οποίο συνδύαζε την ύπαρξη υφάσματος ινών ανθρακονήματος στο κάτω επίπεδο του

όγκου ελέγχου με την ύπαρξη μεταλλικού αφρού 40PPI στο άνω επίπεδο (Σχήμα 5-28), με σκοπό την αντικατάσταση του ενεργοβόρου -καθώς προκαλεί τριβές- καναλιού υπεράνω του υφάσματος, το οποίο όμως δε συμβάλλει στη διείσδυση του αέρα στο ύφασμα, καθώς η ροή σε χαμηλές ιδίως ταχύτητες, όπως αποδείχθηκε προτιμά το κανάλι αντί του πορώδους υφάσματος. Η τοποθέτηση δεύτερου πορώδους υλικού υπεράνω του υφάσματος, με μεγαλύτερο ωστόσο πορώδες από ότι του υφάσματος, ήταν πιθανό να οδηγήσει σε ομαλότερη κατανομή της διερχόμενης μάζας του αέρα.



α)

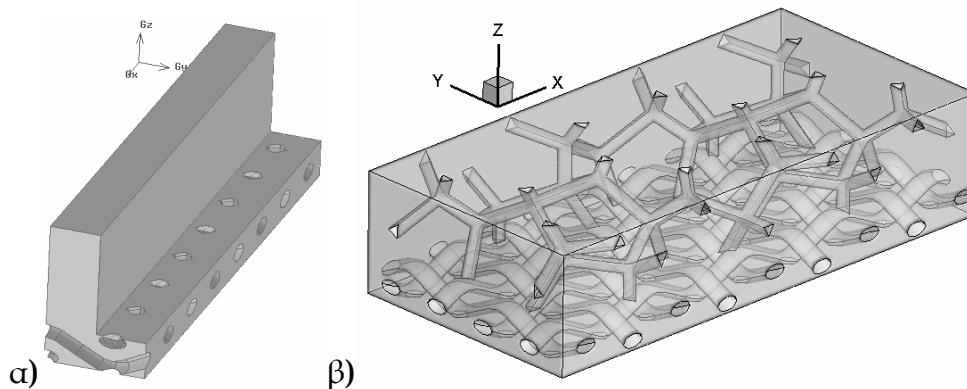


Σχήμα 5-28: α) Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας συνδυασμού μεταλλικού αφρού και GDL β) ο όγκος ελέγχου που προκύπτει (στερεά φάση).

Θεωρήθηκε ότι ο μεταλλικός αφρός όμως αποτελείται από το ίδιο υλικό από το ύφασμα των ινών του GDL, θεωρήθηκε δηλαδή αφρός γραφίτη (Azzi et al., 2007, Phanikumar & Mahajan, 2002) με τις ίδιες γεωμετρικές ιδιότητες, που ωστόσο

παρασκευάζει κατά δήλωσή της η ίδια εταιρεία που παρασκευάζει και τον αρχικό μεταλλικό αφρό που μελετήθηκε (**ERG co., Duocel**). Αν και ένα βήμα πριν την υιοθέτηση της συγκεκριμένης διάταξης βρισκόταν η πρόταση των **Kumar & Reddy (2003)**, για απευθείας χρήση μεταλλικού αφρού σαν **GDL** στη θέση του υφάσματος, η διάταξη που προτείνεται εδώ σαν υπολογιστικό χωρίο, συνδυάζει την ύπαρξη του υφάσματος και του αφρού γραφίτη σε μια προσπάθεια να κρατήσει τα πλεονεκτήματα που παρουσιάζουν και τα δύο υλικά, όπως η αναμικτική ικανότητα και το υψηλό πορώδες της δομής του αφρού καθώς και η ομοιομορφία και απλότητα της δομής του υφάσματος. Ο συνδυασμός **2** πορωδών υλικών διαφορετικού διαμετρήματος πόρων στο **GDL** εξάλλου, παρουσιάζει πλεονεκτήματα όσον αφορά στη διαχείριση της υγρασίας και αποτελεί αντικείμενο έρευνας στις μέρες μας (**Nam et al., 2009, Wang et al., 2006**).

Το εν λόγω υπολογιστικό χωρίο διέθετε επίπεδα συμμετρίας πλευρικά ($Y_{tot}=0$ και $Y_{tot}=0,00282$), ενώ τα ανώτερα ($Z_{tot}=0,00136$) και κατώτερα ($Z_{tot}=0$) επίπεδα θεωρήθηκαν στερεά (βλ. και Σχήμα 5-28β). Το πλάτος του ήταν υπερδιπλάσιο του αντίστοιχου πλάτους του όγκου ελέγχου **L** μορφής που είχε εξεταστεί στο **GDL**-κανάλι των κυψελών καυσίμου (Σχήμα 5-22β και Σχήμα 5-28), ώστε να εμπεριέχει ολόκληρο κατά πλάτος το τεμάχιο του αφρού που μελετήθηκε στο υπολογιστικό χωρίο των **40PPI**. Επιβλήθηκε σταθερή ταχύτητα ροής στην είσοδο (παράμετρος) και σταθερή θερμοκρασία στην κατώτατη πλάκα, ενώ η θερμοκρασία εισόδου του διερχόμενου αέρα στο χωρίο και η σχετική υγρασία αυτού ήταν σταθερές. Στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας 5-4 και Σχήμα 5-29) παρατίθενται οι διαστάσεις του μοντέλου που κατασκευάστηκε, οι τιμές της ταχύτητας εισόδου που διερευνήθηκαν και οι αντίστοιχες πτώσεις πίεσης σε αντιπαραβολή με τις τιμές που προκύπτουν για το ίδιο μέγεθος για την περίπτωση πάντα $T_{in}=353K$ και $\phi_{in} = 99,9\%$.

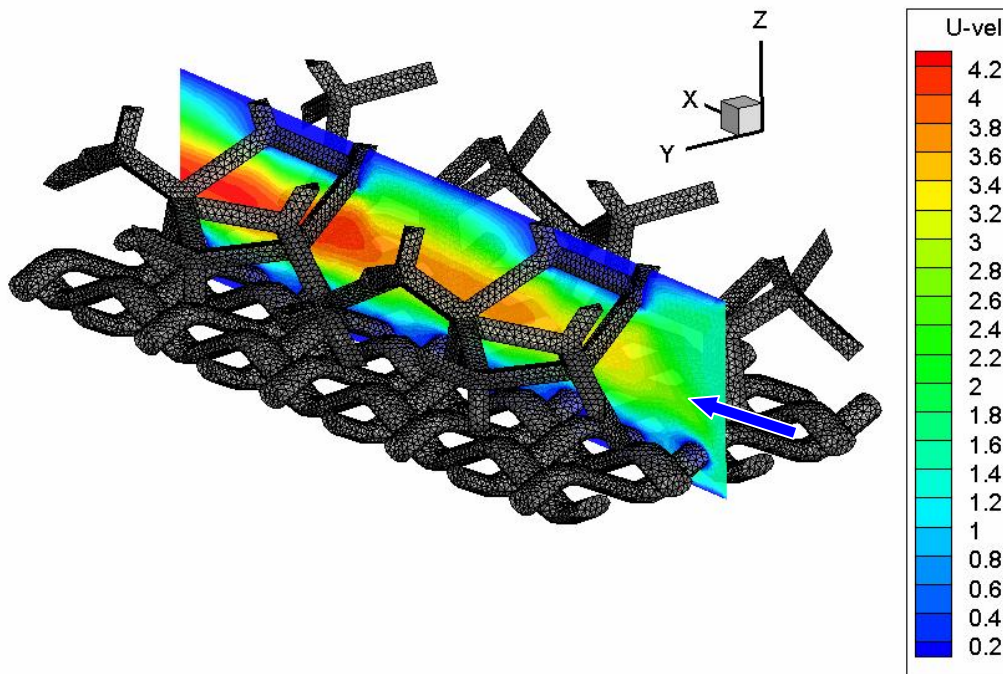


Σχήμα 5-29: Τα δύο υπολογιστικά χωρία α) χωρίς παρουσία και β) με παρουσία αφρού

$X \times Y \times Z$ [m]	U_{in} [m/s]	$\Delta P/L$ [Pa/m]	$\Delta P/L$ [Pa/m]
0,005815×0,00282×0,00136			
T_{in} [K]= 353		Συμμετρία	Μεταλλικός αφρός
φ_{in} [%]= 99,9%		(L μορφής)	στην κυψέλη
(Σχήμα 5-29β)		(Σχήμα 5-29α)	(Σχήμα 5-29β)
	0,3	579,8632	410,1634
	1,43	3401,0813	2761,599
	4,29	14952,3661	15342,047

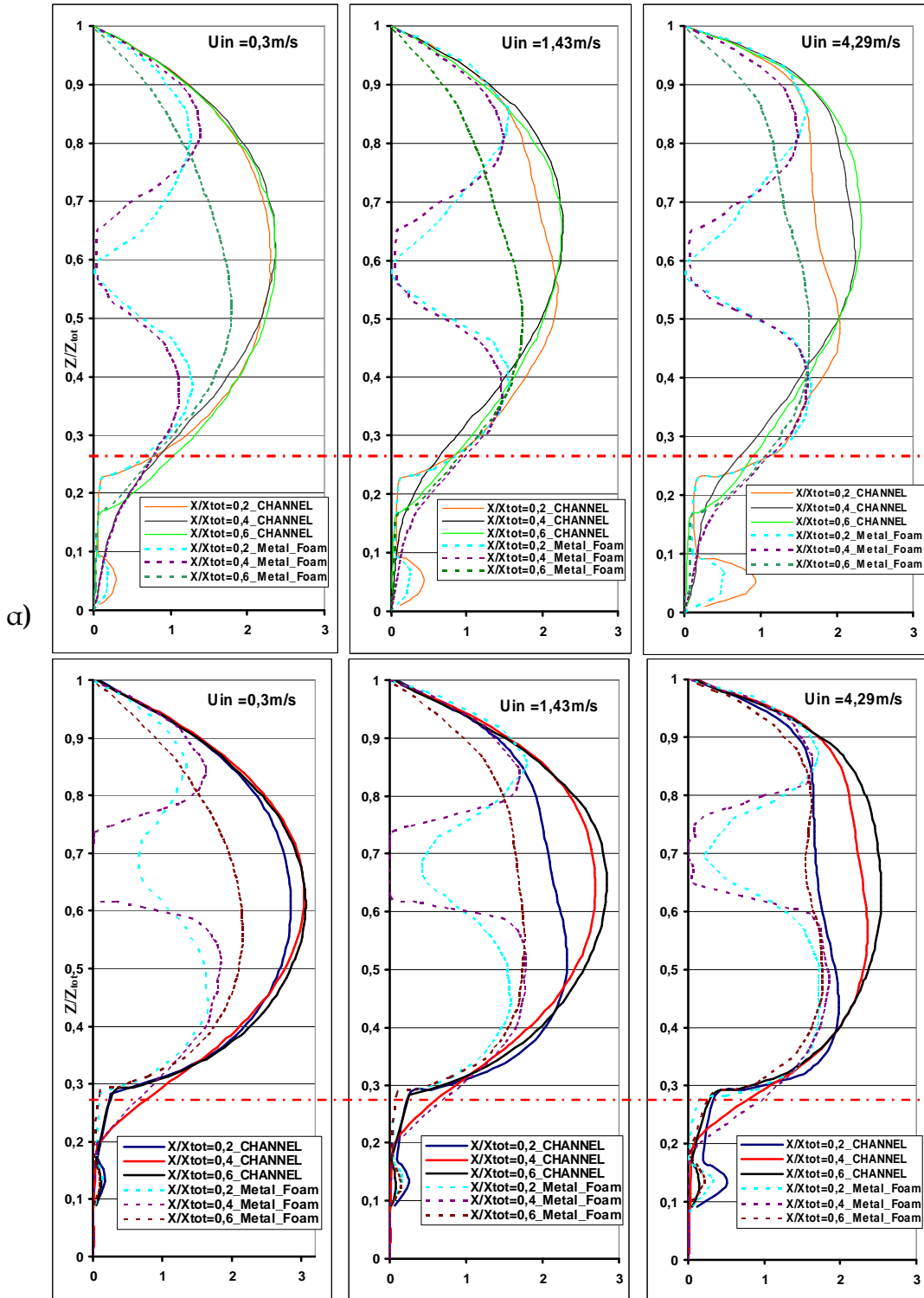
Πίνακας 5-4: Οριακές συνθήκες εισόδου και πτώση πίεσης στους 2 τύπους GDL

Απλή σύγκριση δείχνει ότι η κατανομή της ροής στην περίπτωση της ύπαρξης μεταλλικού αφρού στο GDL είναι ομαλότερη αφού οι κλίσεις ταχύτητας στα οριζόντια οριακά στρώματα φαίνεται να μειώνονται αν ληφθεί υπόψιν η μείωση στην πτώση πίεσης που παρουσιάζεται στην περίπτωση ύπαρξης μεταλλικού αφρού στο GDL. Αυτό σε μεγάλο βαθμό οφείλεται στην απουσία πλευρικού τοιχώματος στο νέο μοντέλο με το συνδυασμό υφάσματος-αφρού γραφίτη και στην αντικατάστασή του με επίπεδο συμμετρίας. Ωστόσο η ύπαρξη οριζόντιων (άνω και κάτω) επιπέδων τοιχώματος οδηγεί στη δημιουργία οριακών στρωμάτων στο ανώτατο και κατώτατο επίπεδο αντίστοιχα με αποτέλεσμα την επιτάχυνση της ροής στο μέσον του ύψους του χωρίου (Σχήμα 5-30).



Σχήμα 5-30: Επιφανειακό πλέγμα και περιοχές ισο-ταχυτήτων κατά τη φορά της ροής (1,43 m/s).

Εν προκειμένω για περισσότερο επισταμένη σύγκριση μεταξύ των δύο τοπολογιών που αφορούσαν στο **GDL**, εξήχθησαν διαγράμματα αδιάστατης ταχύτητας (όμοια με αυτά του Σχήμα 5-17) τα οποία όμως περιέχουν πληροφορίες για την ίδια σύσταση μίγματος ξηρού αέρα- υγρασίας ($\varphi=99,9\%$) όπως στον παραπάνω πίνακα. Ωστόσο δε μπορούσε να γίνει σύγκριση με προϋπάρχοντα αποτελέσματα ύπαρξης υγρασίας (όπως στο Σχήμα 5-17), αλλά με αποτελέσματα που αφορούσαν αποκλειστικά ξηρό αέρα (βλ. Σχήμα 5-17, Σχήμα 5-31). Από τη μεταξύ τους σύγκριση δεν επαληθεύεται η αρχική εκτίμηση περί ομαλότερης ροής στο εσωτερικό του όγκου ελέγχου καθώς οι τιμές της αδιάστατης ταχύτητας ακολουθούν την ίδια περίπου κατανομή στο εσωτερικό του υφάσματος του **GDL**, ενώ δεν εμφανίζεται τόσο έντονη η διαφορά στη ροή μάζας στο κανάλι και το ύφασμα.



Σχήμα 5-31: Αδιάστατη ταχύτητα στην κάθοδο PEM FC με κανάλι και με μεταλλικό αφρό. α) $Y/Y_{tot} = 0,75$ β) $Y/Y_{tot} = 1,0$

Έτσι διαφαίνεται πως η επίδραση του 2^{ου} πορώδους υλικού στο χωρίο δεν επιδρά ευεργετικά- όπως αρχικά αναμενόταν- για την διείσδυση του αέρα στο εσωτερικό του **GDL** και συγκεκριμένα στο χώρο όπου λαμβάνει χώρα η αντίδραση, κρίνοντας τη διερεύνηση που επιχειρήθηκε ωστόσο θετικά λόγω της διαλεύκανσης αυτής της υπόθεσης έστω και με τρόπο που τελικώς δεν την επιβεβαίωσε.

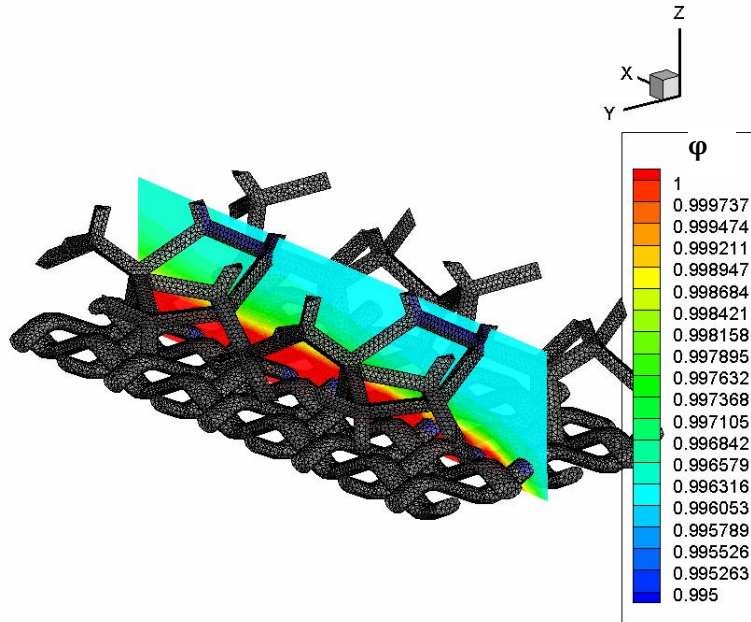
Όσον αφορά στη διερεύνηση της κατανομής της υγρασίας στο εσωτερικό του νέου μορφώματος που αντικαθιστά το κανάλι ροής στο **GDL** με την παρουσία αφρού άνθρακα (γραφίτη), ο Πίνακας 5-5 παρουσιάζει τα αποτελέσματα της σχετικής υγρασίας που εμφανίζεται στην περίπτωση παραμετρικής μελέτης που εκτελέστηκε με διαφοροποίηση της εισερχόμενης υγρασίας αέρα και θερμοκρασίας εισόδου του στο υπολογιστικό χωρίο.

U_{in} [m/s] 1,43 λ=1,5165, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης), ύπαρξη αφρού υπεράνω του GDL		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99,9	333	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
99	353	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 99,87%)
99	333	Δεν παρατηρείται συμπύκνωση (μέγιστη τιμή φ= 97,79%)
U_{in} [m/s] 4,29 λ=1,5165, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης), ύπαρξη αφρού υπεράνω του GDL		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL
U_{in} [m/s] 0,3 λ=1,5165, Ιδιότητες : Άνθρακα (γραφίτης), ύπαρξη αφρού υπεράνω του GDL		
φ_{in} [%]	T_{in} [K]	Παρατηρήσεις
99,9	353	Συμπύκνωση μέσα στο GDL

Πίνακας 5-5: Αποτελέσματα παραμετρικής μελέτης συγκέντρωσης υγρασίας, θερμοκρασίας εισόδου και ιδιοτήτων ανθρακοινών στο **GDL**

Σύγκριση (Πίνακας 5-3), οδηγεί στο χαρακτηρισμό του νέου συνδυασμού υλικών που εξετάζεται ως δυσμενέστερου όσον αφορά την πιθανότητα συμπύκνωσης

υγρασίας στο εσωτερικό του, καθώς τόσο κατά την περίπτωση των **1,43 m/s** με **99,9%** εισερχόμενη σχετική υγρασία και **333 K** θερμοκρασία εισόδου (Σχήμα 5-32) εμφανίζεται συμπύκνωση (ενώ στην περίπτωση καναλιού χωρίς αφρό δεν εμφανίζονταν κάτι τέτοιο), όσο και οι τοπικά μέγιστες τιμές σχετικής υγρασίας είναι μεγαλύτερες όταν εξετάζονται περιπτώσεις που δεν παρατηρείται συμπύκνωση (**1,43 m/s, R.H. = 99% T_{in} = 353 K**).



Σχήμα 5-32: Συμπύκνωση υγρασίας στην περίπτωση **1,43 m/s, R.H. = 99,9% T_{in} = 353 K**, για το νέο υπολογιστικό χωρίο που συνδυάζει τα δύο πορώδη υλικά.

6. Συμπεράσματα

Στην παρούσα ενότητα σταχυολογούνται τα συμπεράσματα που προκύπτουν από όλη τη διαδικασία και προτεινόμενη μεθοδολογία. Δεν περιορίζονται στα συμπεράσματα που αφορούν στα αποτελέσματα και μόνο, αλλά επιπλέον γίνεται και μια προσπάθεια να αποτιμηθεί η επίτευξη των στόχων που ετέθησαν αρχικά καθώς και η πρωτοτυπία της όλης προσπάθειας στο επιστημονικό πεδίο.

6.1. Αποτελέσματα μεθόδου-Αξιοπιστία και ευχέρεια.

Σε ότι αφορά τα αποτελέσματα της διατριβής αυτής, παρουσιάστηκαν τρεις ξεχωριστές τοπολογίες που κατασκευάστηκαν σε επίπεδο μικροκλίμακας: μεταλλικός αφρός ανοικτού κελιού σε διαστάσεις των **40** και **10** PPI σαν εκτεταμένη επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας, ύφασμα ανθρακοϊνών που χρησιμοποιείται στο διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM, καθώς και ο συνδυασμός των δύο σε μια διάταξη που αποσκοπεί στο να συνδυάσει τα πλεονεκτήματα των δύο υλικών λαμβάνοντας υπόψη και τα ευρήματα της διερεύνησης για το διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM.

Σε όλες τις περιπτώσεις έγινε επίλυση των εξισώσεων **Navier-Stokes** και ενέργειας σε μη δομημένο πλέγμα τετράεδρων πεπερασμένων όγκων.

Στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού έγιναν παραμετρικές μελέτες όπου είτε επιβάλλονταν σταθερή διαφορά πίεσης μεταξύ εισόδου και εξόδου στον όγκο ελέγχου, είτε θεωρούνταν σταθερή ταχύτητα εισερχόμενου αέρα στην είσοδο του χωρίου, ενώ η θερμοκρασία στη στερεά φάση των υλικών είτε θεωρούνταν σταθερή, είτε επιλύονταν σε συζυγία με τη θερμοκρασία του εξωτερικού πεδίου (αέρια φάση).

Διερευνήθηκε η επίδραση των φαινομένων εισόδου και φάνηκε να έχει αρκετή επιρροή σε μακροσκοπικά χαρακτηριστικά όπως η πτώση πίεσης και ο (ενεργός) συντελεστής μετάδοσης θερμότητας. Σε εφαρμογές όπου το μήκος του

αφρού στη διεύθυνση της ροής επιβάλλεται να είναι μικρό λόγω περιορισμών στην πτώση πίεσης, οι ονομαστικές τιμές πτώσης πίεσης που έχουν ευρεθεί σε πειραματικές μετρήσεις μεγαλύτερου μήκους δειγμάτων ίσως πρέπει να αναπροσαρμόζονται.

Σε ότι αφορά τη μετάδοση θερμότητας σε μεταλλικούς αφρούς, τα φαινόμενα εισόδου, τα φαινόμενα εγγύτητας σε τοιχώματα και η αγωγή μέσα από το στερεό υλικό, οδηγούν σε σημαντικές διαφοροποιήσεις σε σχέση με την παραδοχή που γίνεται συχνά από ερευνητές για σταθερή θερμοκρασία στο στερεό υλικό και πλήρως ανεπτυγμένη ή/και περιοδική ροή.

Στην περίπτωση του υφάσματος ανθρακοϊνών που χρησιμοποιείται στο διαχύτη κυψέλης καυσίμου PEM και εγκιβωτίστηκε στο κανάλι προσαγωγής αέρα της καθόδου με διαστασιολόγηση από τη διεθνή βιβλιογραφία και μετρήσεις στο ύφασμα, έγινε παραμετρική μελέτη με παράμετρο την ταχύτητα του εισερχόμενου αέρα και τη θερμοκρασία και τις ιδιότητες στο υλικό των ινών.

Υψηλότερες ταχύτητες εισόδου οδηγούν σε μεγαλύτερη διείσδυση του αέρα στο πορώδες ύφασμα, αυξάνοντας ωστόσο και την πτώση πίεσης. Όταν οι ταχύτητες εισόδου είναι χαμηλές, το μεγαλύτερο ποσοστό της μάζας του αέρα διέρχεται από το υπερκείμενο κανάλι και η συμπεριφορά του συστήματος δεν αποκλίνει πολύ από το γνωστό κανόνα $64/Re$ για την αδιάστατη πτώση πίεσης που εμφανίζεται σε λείους αγωγούς για στρωτή ροή.

Τόσο η επιρροή της θερμοκρασίας, όσο και η επιρροή των ιδιοτήτων των ινών σε αυτή, φαίνεται να είναι σημαντικές. Βρέθηκε πως, σε υψηλές ταχύτητες ιδιαίτερα, η διαφορά θερμοκρασίας του εισερχόμενου αέρα με τον εξερχόμενο είναι αρκετά μεγαλύτερη όταν επιλύεται η θερμοκρασία στις ίνες σε σχέση με την θεώρηση της σε ίδια τιμή με αυτή της μεμβράνης. Αυτό μεταφράζεται σε μέχρι και **30%** διαφορά στο περιεχόμενο υγρασίας που μπορεί να δεχτεί το χωρίο έως ότου εμφανιστεί συμπύκνωση.

Η πρόλεξη των περιοχών που μπορεί να εμφανιστούν συμπυκνώματα είναι σημαντική από άποψη διαχείρισης, αφού σχετίζεται και με την αντίστοιχη ταχύτητα εισόδου του αέρα στον υπολογιστικό όγκο.

6.2. Αποτίμηση της εργασίας

6.2.1. Επιτευξιμότητα στόχων

Οι στόχοι (όπως είχαν τεθεί στην ενότητα 1) επιτεύχθηκαν στο σύνολό τους και χαρακτηρίζονται από επιτυχή έκβαση. Έτσι χαρακτηριστικά μπορεί να υποστηριχθεί ότι:

Η προσομοίωση της ροής σε επίπεδο μικροκλίμακας με απευθείας αριθμητική αναπαράσταση της τοπολογίας των πορωδών υλικών είναι εφικτή. Τυχόν αριθμητικές αποκλίσεις λόγω της ύπαρξης απότομων κλίσεων στις τιμές των μεγεθών εξαιτίας της μη ομαλής τοπολογίας σε πολλές περιπτώσεις, αντιμετωπίζονται και χωρίς τη χρήση επιβοηθητικών μεθόδων (πχ αριθμητικών φίλτρων) με σωστή ποιοτική κατανομή των παραμέτρων του μοντέλου (πχ με καλής ποιότητας πλέγμα, εξευγενισμένη γεωμετρία κ.λπ.).

Τα εξαγόμενα αποτελέσματα μπορούν με ασφάλεια να αναχθούν από το επίπεδο της μικροκλίμακας σε μακροσκοπικό επίπεδο. Έτσι, η πτώση πίεσης ανά μονάδα μήκους σε κάθε περίπτωση-είτε αυτή αφορούσε ελάχιστα χιλιοστά υλικού, είτε μερικές εκατοντάδες σε πειραματικές μελέτες ροών- έπαιρνε πληροφορίες από το επίπεδο της μικροκλίμακας και τις ανήγαγε, με συμφωνία σε σχέση με τις πειραματικές τιμές, στο επίπεδο του μακρόκοσμου. Επιπλέον, τα μακροσκοπικά μεγέθη που αφορούσαν τη μετάδοση θερμότητας και συγκρίθηκαν με αντίστοιχα πειραματικά (συγκεκριμένα ο συντελεστής συναγωγής και ο παράγων **Colburn**), απέκλιναν από τα πειραματικά εξαγόμενα ανάλογα με την τιμή των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν κατά τους υπολογισμούς (επιφάνεια εναλλαγής, συζυγής επίλυση ή σταθερή θεώρηση για

τη θερμοκρασία στη στερεή φάση). Οι μικρότερες αποκλίσεις παρατηρήθηκαν για τον συντελεστή συναγωγής στην περίπτωση επιβεβλημένης διαφοράς πίεσης και με θεώρηση σταθερής θερμοκρασίας στους συνδέσμους του μεταλλικού αφρού και στην περίπτωση σταθερής ταχύτητας εισόδου με συζυγή επίλυση της μεταφοράς θερμότητας, θεωρώντας κάθε φορά σαν επιφάνεια εναλλαγής μόνο την επιφάνεια της πλάκας του υπολογιστικού χωρίου. Η διερεύνηση συμπύκνωσης υγρασίας αν και δε συγκρίθηκε με πειραματικά αποτελέσματα (δεν βρέθηκαν αντίστοιχα), έδωσε μια εικόνα του φαινομένου χρήσιμη για περαιτέρω εστίαση σε αυτό.

Σε επίπεδο μοντελοποίησης, οι συγκρίσεις τόσο για γεωμετρικές ιδιότητες της μικρο-μορφολογίας των υλικών, όσο και για το πεδίο ροής και θερμοκρασίας στο εσωτερικό τους, με αντίστοιχες τιμές πειραματικών μετρήσεων από κατασκευαστές και ερευνητές που απαντώνται στη διεθνή βιβλιογραφία, καταδεικνύουν την ορθότητα, τόσο της επιλεχθείσας μεθοδολογίας, όσο και του εξαγόμενου εξ αυτής αποτελέσματος.

Εξειδικεύοντας την αποτίμηση με εστίαση στους ιδιαίτερους στόχους που τέθηκαν για κάθε περίπτωση υλικού ξεχωριστά, έγινε διερεύνηση της ικανότητας χρήσης του μεταλλικού αφρού ανοικτής δομής σε εφαρμογές εναλλαγής θερμότητας, με έμφαση στην υπολογιστική ικανότητα θεώρησης διαφόρων σεναρίων (διαφορά πίεσης εισόδου-εξόδου ή σταθερή ταχύτητα ροής, σταθερή θερμοκρασία ή συζυγώς επιλυμένη στη στερεά φάση) ως προς τους χαρακτηριστικούς αριθμούς που χρησιμοποιήθηκαν ως κριτήρια για το πρόκριμα χρήσης. Η εξαγωγή και σύγκριση των μακροσκοπικών μεγεθών δείχνει ότι κάποιες από τις συνήθεις παραδοχές που γίνονται κατά την πειραματική μελέτη των εν λόγω υλικών είναι αμφισβητήσιμες, ενώ σε επίπεδο μικροκλίμακας διαφαίνεται η γρήγορη ανάπτυξη και αποκατάσταση της ροής σε περίπτωση που επιβάλλεται σταθερή ταχύτητα εισόδου του ρευστού. Στην τελευταία περίπτωση μάλιστα, το φαινόμενο είναι ανεξάρτητο του μήκους της θεωρούμενης κλίμακας, σαφώς επηρεαζόμενο από τη μορφή της τοπολογίας του υλικού, αφού και στις

δύο κλίμακες, η ροή φαίνεται να τελειώνει την ανάπτυξή της σε μήκος 3 κελιών και να ομαλοποιείται κατάντι από εκείνη τη θέση.

Όσον αφορά στο ύφασμα ανθρακοϊνών, έγινε η παραμετρική μελέτη που προσχεδιάστηκε, με σκοπό τη βέλτιστη εκλογή συνθηκών λειτουργίας τόσο για τη μεταφορά μάζας αέρα στη διεπιφάνεια μεμβράνης-καταλύτη, όσο και για την κατανομή του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό του πεδίου ροής και του υλικού του υφάσματος. Επιπρόσθετα έγινε μελέτη των περιοχών και των συνθηκών υπό τις οποίες εμφανίζεται συμπύκνωση στο εσωτερικό του **GDL** προκειμένου να επιλεγούν οι κατάλληλες συνθήκες που θα επέτρεπαν την απρόσκοπτη λειτουργία της διάταξης PEM και βρέθηκε ότι στο τέλος του μήκους του χωρίου και σε μικρά διάκενα μεταξύ ινών και μεμβράνης είναι πιθανότερη η αρχική εμφάνιση συμπύκνωσης υδρατμών.

Από τις ανωτέρω παραγράφους φανερώνεται η επιτευξιμότητα ενός εκάστου εκ των στόχων που είχαν τεθεί ευθύς εξαρχής σε αυτή τη διατριβή, τόσο σε επίπεδο στρατηγικής προσέγγισης, όσο και σε τοπικό-μικροσκοπικό επίπεδο.

6.2.2. Πρωτοτυπία στο επιστημονικό πεδίο

Οι πρωτοτυπίες της εργασίας εντοπίζονται στα παρακάτω σημεία:

- Αριθμητική αναπαράσταση τριδιάστατης γεωμετρίας στην κλίμακα πόρου των εξεταζόμενων υλικών. Η κατασκευή των αριθμητικών προτύπων στηρίχτηκε στην προσομοίωση των φυσικών διεργασιών που λαμβάνουν χώρα κατά την κατασκευή των υλικών και πιστοποιήθηκε συγκρίνοντας με μετρήσεις σε πραγματικά υλικά.
 - ο Στην περίπτωση των μεταλλικών αφρών, η προσομοίωση βασίστηκε σε δημοσιευμένη εργασία αλλά ο αντιπροσωπευόμενος όγκος του αφρού έφτασε σε έκταση που δεν έχει εμφανιστεί ως τώρα στην βιβλιογραφία.

- Για τις κυψέλες καυσίμου PEM, είναι η πρώτη εμφάνιση τριδιάστατου αριθμητικού προτύπου σε επίπεδο μικροκλίμακας για το σύστημα αγωγός -διαχύτης ανθρακοϋφάσματος.
- Η πλήρης αριθμητική αναπαράσταση σημαντικού όγκου των υλικών, ενσωματωμένων στις διατάξεις τους, και η απευθείας επίλυση των εξισώσεων **Navier-Stokes** και ενέργειας στην μικροκλίμακα των υλικών δεν έχει παρουσιαστεί ως τώρα. Πιο συγκεκριμένα, πρωτότυπα στοιχεία της αριθμητικής προσέγγισης είναι:
 - Η επίλυση ισοθερμοκρασιακών ροών και η ποσοποίηση των αποτελεσμάτων πτώσης πίεσης για δύο μεταλλικούς αφρούς υψηλού πορώδους, διαφορετικών πυκνοτήτων.
 - Ο αναλυτικός υπολογισμός μετάδοσης θερμότητας σε μεταλλικούς αφρούς και η ποσοποίηση των υπολογιζόμενων συντελεστών συναγωγής, συγκρίνοντας με πειραματικές μετρήσεις.
 - Η συζυγής επίλυση του θερμοκρασιακού πεδίου στο στερεό υλικό και στο ρευστό που διαρρέει τον μεταλλικό αφρό. Υπολογισμός και ποσοποίηση συντελεστών συναγωγής.
 - Επίλυση πεδίου ροής και μετάδοσης θερμότητας μέσα από τμήμα της καθόδου κυψέλης καυσίμου **PEM**, συμπεριλαμβάνοντας την γεωμετρία του καναλιού και της μικροδομής του υφάσματος-διαχύτη.
 - Τριδιάστατη αριθμητική προσομοίωση σχηματιζόμενης υγρασίας εντός του διαχύτη και πρόλεξη των σημείων σχηματισμού συμπυκνώματος. Χρήση συζυγούς επίλυσης μετάδοσης θερμότητας για την αξιολόγηση της επίδρασης του υλικού του υφάσματος.
- Αξιοποίηση της αναπτυχθείσας αριθμητικής μεθοδολογίας και τεχνογνωσίας ως εργαλείο σχεδιασμού. Εφαρμογή στην εξέταση προτεινόμενης πρωτότυπης διάταξης καθόδου κυψέλης καυσίμου **PEM** με ενσωμάτωση μεταλλικού αφρού. Η προτεινόμενη διάταξη εξετάστηκε με βάση την τριδιάστατη

μικροδομή, με επίλυση του πεδίου ροής και της μετάδοσης θερμότητας στο ύφασμα (διαχύτης) και στον μεταλλικό αφρό (σύστημα διανομής αέρα). Έγινε πρόλεξη του σχηματισμού συμπύκνωσης εντός του διαχύτη και δόθηκαν εξηγήσεις για την ανεπαρκή συμπεριφορά της διάταξης.

Και οι δύο γενικοί στόχοι που τέθηκαν (η σωστή μοντελοποίηση της τοπολογίας για τη σε βάθος επισκόπηση των φαινομένων και η πιστοποίηση της μεθοδολογίας τρισδιάστατης μοντελοποίησης με απευθείας επίλυση των εξισώσεων **Navier-Stokes** και ενέργειας), χαρακτηρίζονται από πρωτοτυπία αφού στις μεν κυψέλες καυσίμου PEM δεν έχει εμφανιστεί μέχρι τώρα μοντέλο τρισδιάστατης προσομοίωσης σε επίπεδο μικροκλίμακας για το σύστημα αγωγός-διαχύτης ανθρακούφασματος. Στη δε περίπτωση των μεταλλικών αφρών έχει παρουσιαστεί εργασία με προσομοίωση παρόμοιας μεθοδολογίας, οι περιπτώσεις όμως που διερευνούνταν περιορίζονταν σε ισόθερμη ροή με επιβολή περιοδικών οριακών συνθηκών για τη ροή και σε μικρότερο αντιπροσωπευτικό όγκο υλικού.

Το μέγεθος του όγκου του μεταλλικού αφρού που κατασκευάστηκε δεν έχει παρουσιαστεί από κάποιον ερευνητή έως τώρα. Αυτό σε συνδυασμό και με το τυχαίο κομμάτι που επιλέχθηκε να αποκοπεί σαν υπολογιστικό χωρίο ενισχύουν τόσο την πρωτοτυπία όσο και την καινοτομία της εργασίας αυτής.

Τέλος για τη γενική περίπτωση, καινοτόμα αποτελέσματα είναι αυτά της παρουσίασης του θερμοκρασιακού πεδίου στο εσωτερικό των υλικών (στερεά φάση) που εξήχθησαν με τη μέθοδο της συζυγούς επίλυσης του θερμοκρασιακού πεδίου για το σύστημα ρευστό-στερεό σε κάθε πορώδες μέσο που μοντελοποιήθηκε και πραγματοποιήθηκε με τη διακριτοποίηση και της στερεάς φάσης του υλικού.

Σε επίπεδο επιπλέον των υλικών, μπορεί να ειπωθεί ότι τόσο οι οριακές συνθήκες που μελετήθηκαν στην περίπτωση του μεταλλικού αφρού, όσο και η διαπίστωση ορισμένων αποτελεσμάτων με τη χρήση του εργαλείου συζυγούς επίλυσης εισέρχονται σε μια περιοχή από την οποία ακόμη δεν είχε επιδειχτεί κάποιο εξαγόμενο στη διεθνή επιστημονική κοινότητα.

Όσον αφορά το ύφασμα ανθρακοϊνών του **GDL**, τόσο ο καθορισμός δύο διαφορετικών υλικών προς θεώρηση των ινών, όσο και η χρήση του εργαλείου της συζυγούς επίλυσης σε συνδυασμό με την πρόλεξη πρώτης πιθανής εμφάνισης συμπύκνωσης αποτελούν στοιχεία που ενισχύουν την καινοτομία ένα επίπεδο περαιτέρω από την μοντελοποίηση της τοπολογίας και της απευθείας επίλυσης των εξισώσεων για το πεδίο ροής και την κατανομή θερμοκρασίας στην αέρια φάση του πορώδους συστήματος.

Τέλος, ο συνδυασμός των δύο υλικών σε ένα σύστημα ενεργειακής μετατροπής που εκτελεί τη λειτουργία του κλασικού **GDL** σε PEM κυψέλες καυσίμου αποτελεί την πιο προχωρημένη πράξη πρωτοτυπίας με την επίδειξη εφαρμογής της αριθμητική προσέγγισης ως εργαλείο σχεδιασμού. Η χρήση της μεθοδολογίας υποδεικνύει πως είναι εύκολο να βελτιωθεί, να τροποποιηθεί ή να συνδυαστεί η τοπολογία διαφόρων πορώδων υλικών με την απευθείας αναπαράσταση της δομημένης γεωμετρίας τους, για την επίτευξη παραμετρικών μελετών και εστίαση πληροφορίας σε βάθος, με μικρό κόστος.

6.3. Προτάσεις για μελλοντική εργασία

Λόγω αρκετών πρακτικών προβλημάτων δεν κατέστη δυνατή η διερεύνηση διαφόρων τομέων που θα μπορούσαν να αποτελούν τροποποιημένες εκδόσεις των προς μελέτη συστημάτων.

Όσον αφορά το μεταλλικό αφρό λοιπόν μπορεί να υποθεί ότι:

Η επέκταση της κλίμακας μεγέθους σε άλλες διαστάσεις πέραν των **40** και **10** PPI (πχ **5, 20, 30, 60** PPI κλπ) που εμφανίζονται σε εμπορική/βιομηχανική κλίμακα και η συμφωνία ή όχι των μακροσκοπικών παραμέτρων που εξάγονται από το επίπεδο της μικροκλίμακας με αυτά των πειραματικών εξαγομένων μπορεί πολύ εύκολα να γίνει για το μοντέλο του μεταλλικού αφρού που κατασκευάστηκε.

Για το ίδιο υλικό, η κατασκευή διάταξης τμήματος εναλλάκτη παραλλήλων πλακών-αφρού, μπορεί να πραγματοποιηθεί έχοντας σαν βάση την τοπολογία που δημιουργήθηκε σε αυτή τη διατριβή.

Επιπλέον, η ύπαρξη σωματιδίων στη ροή ώστε να διαπιστωθούν περιοχές προτίμησης επικάθισης θα μπορούσε να είναι ακόμα ένα βήμα σε μια επόμενη μελέτη πάνω στα ήδη υπάρχοντα δύο μοντέλα.

Όσον αφορά το ύφασμα ανθρακοϊνών στο **GDL**, η διατομή των ινών, η πυκνότητα της ύφανσής τους και η συνύπαρξη μικρών και μεγάλων διάκενων που έχει αρχίσει να μελετάται για το πορώδες υλικό του **GDL** από ερευνητές μπορεί να αποτελέσει μια επιπλέον παραμετρική αλλαγή με σκοπό τη διερεύνηση του βαθμού στον οποίο επηρεάζονται τα αποτελέσματα από τις παραμέτρους αυτές.

Δημοσιεύσεις

Μέρος των πρωτότυπων στοιχείων της εργασίας έχουν ήδη δημοσιευτεί σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά και συνέδρια:

Επιστημονικά περιοδικά:

1. A. Kopanidis, A. Theodorakakos, E. Gavaises, D. Bouris (2009) «3D Numerical Simulation of Flow and Conjugate Heat Transfer Through a Microscale Model of Open Cell Metal Foam», *International Journal of Heat and Mass Transfer*, (υποβληθείσα, στο στάδιο απόκρισης των συγγραφέων στις παρατηρήσεις των κριτών)

Δημοσιεύσεις σε διεθνή συνέδρια του εξωτερικού:

1. A. Kopanidis, D. Bouris, A. Theodorakakos, M. Gavaises (2008) “Direct Modelling of the Microscale Flow through a PEM Fuel Cell GDL and Channel”. 1st European Conference on Microfluidics, *Microfluidics 2008 (μFlu’08)*, December 10-12, 2008, Bologna, Italy [μFLU08-180].
2. A. Kopanidis, E. Gavaises, A. Theodorakakos, D. Bouris (2008) “Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat Transfer with Direct Modeling of Microscale Geometry”, 5th European Thermal Sciences Conference, 18-22 May 2008, Eindhoven, The Netherlands.

Ανακοινώσεις σε εθνικές ημερίδες:

1. A. Κοπανίδης, Σ. Μαυρίδου, Κ. Ορδουμποζάνης, Μ. Πετρίδου, Θ. Θεοδοσιού, Δ. Μπούρης (2008) «Ανάπτυξη Υποδομών και Δραστηριοτήτων στην Έρευνα και Μελέτη του Θερμικού Περιβάλλοντος» ΡΟΗ 2008, 6η Συνάντηση «Ερευνητικές Δραστηριότητες στα Φαινόμενα Ροής Ρευστών στην Ελλάδα», Παν/μιο Δυτικής Μακεδονίας, Κοζάνη, 28 Νοεμβρίου, 2008.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Alvarez- Hernandez A.R, 2005, Combined flow and heat transfer characterization of open cell Aluminum foams, M.Sc. thesis University of Puerto Rico
- Adler P.M., 1992, "Porous Media: Geometry and Transports", Butterworth, London
- Adler P. M., Jacquin C. G., Thovert J.-F., 1992, *Water Resour. Res.* 28, 1571
- Arisetty S., Prasad A. K., Advani S. G., 2007, Metal foams as flow field and gas diffusion layer in direct methanol fuel cells, *Journal of Power Sources* 165, 49-57
- Ashby M.F., Evans A.G., Fleck N.A., Gibson L.J., Hutchinson J.W., Wadley H.N.G., 2000, *Metal Foams: A Design Guide*, Butterworth-Heinemann
- Ashrae Handbook, 2009, Fundamentals SI Edition, ASHRAE, ISBN 978-1-933742-55-7
- Azzi W., Roberts W. L., Rabiei A., 2007, A study on pressure drop and heat transfer in open cell metal foams for jet engine applications, *Materials and Design* 28 (2), 569–574
- Baldwin C.A., Sederman A.J., Mantle M.D., Alexander P. , Gladden L.F., 1996, *J. Colloid Interface Sci.* 181, 79
- BASF Fuel Cell, Inc., (<http://www.jonnycoder.net/aces/home.php>)
- Bhattacharya A., Calmidi V.V., Mahajan R.L., 2002, Thermophysical properties of high porosity metal foams, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45, 1017-1031
- Boomsma K., 2002, Metal foams as novel compact high performance heat exchangers for the cooling of electronics, PhD thesis, ETH, Zurich, Switzerland

- Boomsma K., Poulikakos D., 2001, On the effective thermal conductivity of a three-dimensionally structured fluid-saturated metal foam, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 44, 827-836
- Boomsma K., Poulikakos D., 2002, The effects of compression and pore size variations on the liquid flow characteristics in metal foams, *Journal of Fluids Engineering-Transactions of the ASME* 124, 263-272
- Boomsma K., Poulikakos D., Ventikos Y., 2003, Simulations of flow through open cell metal foams using an idealized periodic cell structure, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 24, 825-834
- Boomsma K., Poulikakos D., Zwick F., 2003, Metal foams as compact high performance heat exchangers, *Mechanics of Materials* 35, 1161-1176
- Brakke K., 1992, The Surface Evolver, *Experimental Mathematics* 1, 141-165
- Brothers A. H., Dunand D.C., 2006, Amorphous metal foams, *Scripta Materialia* 54, 513-520
- Cengel Y., 2005, Μεταφορά Θερμότητας Μια πρακτική προσέγγιση, Εκδόσεις Τζιόλα
- Chang M.H., Chen F., Teng H. S., 2006, Effects of two-phase transport in the cathode gas diffusion layer on the performance of a PEMFC, *J. of Power Sources*, 160, 268-276
- Crowe C., Sommerfeld M., Tsuji Y., 1998, *Multiphase flows with droplets and particles*, CRC Press LLC, ISBN 0-8493-9469-4
- Du Plessis P., Montillet A., Comiti J., Legrand J., 1994, Pressure drop prediction for flow through high porosity metallic foams, *Chemical Engineering Science*, Vol. 49, No. 21, 3545-3553
- Dukhan N., (2006), Correlations for the pressure drop for flow through metal foam, *Exp Fluids*, 41:665-672
- Dukhan N., Ramos P. D. Q., Ruiz E. C., Reyes M.V., Scott E. P., 2005, One-dimensional heat transfer analysis in open-cell 10-ppi metal foam, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 48, 5112-5120

- Dullien F.A.L., 1992, "Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure", Academic Press, San Diego
- Dupuit J., 1863, Etudes Theoriques et Pratiques sur le Mouvement des Eaux. Dunod, Paris.
- ERG co., Duocel Metal Foams, (<http://www.ergaerospace.com>)
- Fatt I., 1956, Trans. AIME 207, 44
- Ferziger J. H., Peric M., 1996, Computational Methods for Fluid Dynamics, Berlin Heidelberg, Springer-Verlag
- Feser J. P., Prasad A. K., Advani S. G., 2006, Experimental characterization of in-plane permeability of gas diffusion layers, Journal of Power Sources 162, 1226-1231
- Fluid-research co., (<http://www.fluid-research.com/toc.htm>)
- Ghyka M., 1977, The Geometry of Art and Life, Dover Publications, ISBN: 0486235424
- Grujicic M., Chittajallu K. M., 2004, Optimization of the cathode geometry in polymer electrolyte membrane (PEM) fuel cells. Chemical Engineering Science, 59, 5883-5895
- Haack D.P., Butcher K.R. , Kim T. , Lu T.J., (2001), Novel Lightweight Metal Foam Heat Exchangers, American Society of Mechanical Engineers, Process Industries Division (Publication) PID 6, pp. 141-147
<http://www.whnet.com/4x4/fuelcell.html>
- Jasak H., 1996, Error analysis and estimation for finite volume method with applications to fluid flows, Ph.D Thesis, Imperial College of Science Technology & Medicine, University of London
- Jones W.P. and Launder B.E., 1972, The Prediction of Laminarization with a Two Equation Model of Turbulence. Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 15, pp. 301-314

- Kadar Cs., Maire E., Borbely A., Preix G., Lendvai J., Rajkovits Zs., 2004, X-ray tomography and finite element simulation of the indentation behavior of metal foams, *Materials Science and Engineering A* 387–389, 321–325
- Kainourgiakis M.E., Kikkinides E.S., Stubos A.K., 2002, *J. Porous Mater.* 9, 141
- Kays W.M., London A.L., 1984, *Compact Heat Exchangers*, Krieger Publ.
- Khandelwal M., Mench M. M., 2006, Direct measurement of through-plane thermal conductivity and contact resistance in fuel cell materials. *J. of Power Sources*, 161, 1106-1115
- Klein J.F., Arcas N., Gilchrist G., Shields W., Yurman R., Whiteside J., 2005, Thermal Management of Airborne Early Warning and Electronic Warfare Systems Using Foam Metal Fins, *Technology Review Journal*, 103-127
- Kumar A., Reddy R. G., 2003, Polymer electrolyte membrane fuel cell with metal foam in the gas flow-field of bipolar/end plates, *Journal of new materials for electrochemical systems* 6, 231-236
- Larminie J., Dick A., 2003, *Fuel Cell Systems Explained*, Wiley, ISBN 0470 84857X
- Leong K. C., Jin L.W., 2005, Effect of oscillatory frequency on heat transfer in metal foam heat sinks of various pore densities, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 49 (3-4), 671-681
- Lin C., Cohen M.H., 1982, *J. Appl. Phys.* 53, 4152
- Lu T.J., Stone H.A., Ashby M.F., 1998, Heat transfer in open-cell metal foams, *Acta mater.* Vol. 46, No. 10, pp. 3619-3635
- Luo R., Liu T., Li J., Zhang H., Chen Z., Tian G., 2004, Thermophysical properties of carbon/carbon composites and physical mechanism of thermal expansion and thermal conductivity, *Carbon*, Volume 42, Issue 14, Pages 2887-2895
- Nam J. H., Lee K. J., Hwang G. S., Kim C. J., Kaviany M., 2009, Microporous layer for water morphology control in PEMFC, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52, 2779-2791

- Nguyen P.T., Berning T., Djilali N., 2004, Computational model of a PEM fuel cell with serpentine gas flow channels, *J. Power Sources*, 130, 149–157
- Nicholson D. , Petropoulos J.H., 1984, *J. Chem. Soc. Farad. Trans. I.* 80, 1069
- Nowicki S.C., Davis H.T. , Scriven L.E., 1992, *Drying Technology* 10(4), 925
- Ozmat B., Leyda B., Benson B., 2004, Thermal Applications of Open-Cell Metal Foams, *Materials and Manufacturing Processes*, 839-862
- Papadakis G. and Bergeles G., 1995, "A Locally Modified 2nd-Order Upwind Scheme for Convection Terms Discretization." *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 5(1): 49-62
- Phanikumar M.S., Mahajan R.L., 2002, Non-Darcy natural convection in high porosity metal foams, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 45, 3781-3793
- Pinson F., Gregoire O., Simonin O., 2006, $k-\varepsilon$ Macro-scale modeling of turbulence based on a two scale analysis in porous media, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 27, 955-966
- Quan P., Lai M.C., 2007, Numerical study of water management in the air flow channel of a PEM fuel cell cathode. *J. of Power Sources*, 164, 222-237
- Quan P., Zhou B., Sobiesiak A., Liu Z., 2005, Water behavior in serpentine micro-channel for proton exchange membrane fuel cell cathode. *J. of Power Sources*, 152, 131-145
- Quick C., Ritzinger D., Lehnert W., Hartnig C., 2009, Characterization of water transport in gas diffusion media, *J. of Power Sources* 190 (1), 110-120
- Rintoul M.D. et al., 1996, *Phys. Rev. E* 54, 2663
- Selley, R. C., 1998, *Elements of petroleum geology: 2nd edition*, Academic Press, Toronto, ISBN: 978-0-12-636370-8
- SGL group, (http://www.sglgroup.com/cms/international/products/product-groups/index.html?__locale=en)
- Shen L., Chen Z., 2007, Critical review of the impact of tortuosity on diffusion, *Chemical Engineering Science* 62, 3748-3755

- Shimpalee S., Greenway S., Van Zee J. W., 2006, The impact of channel path length on PEMFC flow-field design, *Journal of Power Sources* 160, 398–406
- Shimpalee S., Ohashi M., Van Zee J.W., Ziegler C., Stoeckmann C., Sadeler C., Hebling C., 2009, Experimental and numerical studies of portable PEMFC stack, *Electrochimica Acta*, 54 (10), 2899-2911
- Shinko Wire Company –Alporas metal foam, <http://www.shinko-wire.co.jp/product/alporas-eng.pdf>
- Siegel N.P., 2003, Development and validation of a computational model for a proton exchange membrane fuel cell, PhD thesis, Virginia Polytechnic Institute and State University.
- Singh R., Kasana H.S., 2004, Computational aspects of effective thermal conductivity of highly porous metal foams, *Applied Thermal Engineering* 24, 1841–1849
- Stemmet C.P., Jongmans J.N., Schaaf J. vd, Kuster B.F.M., Schouten J.C., 2005, Hydrodynamics of gas–liquid counter-current flow in solid foam packings, *Chemical Engineering Science* 60, 6422 – 6429
- Su A., Weng F. B., Hsu C. Y., Chen Y. M., 2006, Studies on flooding in PEM fuel cell cathode channels, *Int. J. of hydrogen energy* 31, 1031-1039
- Sunden B., 1980, Conjugated heat transfer from circular cylinders in low Reynolds number flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 23 1787-1806
- Surface Evolver, Mathematical software, <http://www.susqu.edu/brakke/evolver/evolver.html>
- Thomson W., Lord Kelvin, 1887, On the division of space with minimum partial area, *Phil. Mag.* 24, 503
- Toray Carbon Fibers America, Inc., <http://www.toraycfa.com/>

- Ubbink O., 1997, Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces, PhD Thesis, Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science, Technology & Medicine, University of London
- Understanding Microscale Mechanisms in the Cathode Gas Diffusion Layer of Proton Exchange Membrane Fuel Cells (2006-2008). General Secretariat for Research and Technology-Ministry of Development Greece-USA Collaboration. Final Report.
- Wang X.L., Zhang H. M., Zhang J. L., Xu H. F., Tian Z. Q., Chen J., Zhong H. X., Liang Y. M., Yi B. L., 2006, Micro-porous layer with composite carbon black for PEM fuel cells, *Electrochimica Acta* 51, 4909–4915
- Weaire D., Phelan R., 1994, A counter-example to Kelvin's conjecture on minimal surfaces, *Philosophical Magazine Letters* 69, 107–110
- Wertz J., Schneiders I., 2009, Filtration media: Advantages of nanofibre coating technology, *Filtration & Separation*, Volume 46, Issue 4, 18-20
- WISETEX textile simulation software package (Leuven University): <http://www.mtm.kuleuven.ac.be/Research/C2/poly/software.html>
- Zhang W. H., Xue X. H., 2009, Primary study of permeability of porous media, *Rock and Soil Mechanics*, V30, Issue 5, 1357-1361
- Zong Y., Zhou B., Sobiesiak A., 2006, Water and thermal management in a single PEM fuel cell with non-uniform stack temperature. *J. Power Sources*, 161,143–159
- Καλαμαράς Δ., Συμμετρία: «Από τον Τίμαιο ως τον Felix Klein και το πρόγραμμα του Erlangen», (<http://dimitris.apeiro.gr/math/>)
- Μπεργελές Γ. ,2000, «Υπολογιστική Ρευστομηχανική», Εκδόσεις Συμμεών
- Μπούρης Δ. ,1997, «Αριθμητική διερεύνηση πεδίου ροής και επικαθίσεων σε εναλλάκτες θερμότητας» , διδακτορική διατριβή, ΕΜΠ
- Παπαϊωάννου Α., 2002, «Μηχανική των Ρευστών», τόμος II,Β' έκδοση, Εκδόσεις Κοράλι,

- Παπαϊωάννου Α., **2003**, «Ανύσματα και Τανυστές, θεωρία και εφαρμογές στις φυσικές επιστήμες», Εκδόσεις Κοράλι
- Πλάτων, Τιμαιο, μετάφραση: Βασίλης Κάλφας, **1998**, Πόλις, σελ.563, **ISBN 960-7478-11-8, ISBN-13 978-960-7478-11-5**
- Στρωτός Γ. , **2007**, «Αριθμητική διερεύνηση της εξάτμισης σταγόνων μιας ή δυο συνιστωσών», διδακτορική διατριβή, ΕΜΠ
- Τζιβανίδου Ε., **2009**, «Αριθμητική Εκτίμηση απόδοσης μεταλλικού αφρού σε εναλλάκτες θερμότητας», διπλωματική εργασία, Παν/μιο Δυτικής Μακεδονίας