质子交换膜燃料电池输出性能的数值模拟

罗鑫，陈士忠，吴玉厚

(沈阳建筑大学机械工程学院，辽宁沈阳110168)

摘要：运用COMSOL软件模拟分析3种流道下的质子交换膜燃料电池输出性能。在相同的操作条件下，比较了单蛇形流道、交指流道以及混合流道之间的性能差异，详细说明了3种流道下质子交换膜燃料电池输出性能差异的原因。由模拟结果分析得出，混合流道输出性能最好，交指流道输出性能其次，单蛇形流道输出性能最差；混合流道的排水能力最好，氧气浓度分布的最均匀；混合流道阴极进出口氧气浓度差最小。模拟结果对质子交换膜燃料电池结构的优化和设计具有一定的指导意义。

质子交换膜燃料电池是一种将储存在燃料和氧化剂中的化学能通过电化学反应直接转化为电能的装置，是新能源领域中具发展前景的一项技术[1-3]。流场板是燃料电池的关键组件之一，其结构是提高催化剂利用效率的关键，为提高燃料电池的输出性能，设计和优化流场板的结构是有必要的[4-5]。合理的流场板设计能更好的分配反应物，防止“水淹”现象发生[6]。

Dawes等[7]建立三维模型来模拟“水淹”现象对电池输出性能的影响。Yazdi等[8]建立了单电池三维模型，主要模拟流道和气体扩散层内的传质，催化层内的电化学反应和质子交换膜内的质子传递，通过改变运行条件预测燃料电池的输出性能。

Ghanbarian等[9]建立了平行流场的三维模型，在平行流道内设置半圆形、正方形和梯形为阻碍模块，发现设置有阻碍模块的流场可以提高燃料电池输出性能。Hao等[10]构建了三维燃料电池模型，研究水在催化剂层中运输阻力。Li等[11]建立了三维燃料电池模型，研究了电流密度、膜内水含量以及质子交换膜局部温度。陈涛等[12]在三维质子交换膜燃料电池模型中，模拟研究了4种不同结构蛇形流道的速度、膜中水含量以及电池功率密度，并对流场的结构进行了优化。

目前，关于流产板的研究基本都围绕着气体分布、流场板结构以及排水能力，但当前所存在的流场板大多都有气体分布不均、“水淹”等问题，为了降低上述问题对燃料电池输出性能的影响。本文建立一种新型流场板，通过COMSOL模拟分析软件，分别对单蛇形流道、交指流道以及

新型流道的输出性能进行研究，模拟结果为当前与流场板相关的科研课题提供了一定的指导意义。

1几何模型

图1为3种流道二维模型结构示意图。燃料电池单体由阳极流道、阳极气体扩散层、阳极催化层、质子交换膜、阴极催化层、阴极气体扩散层以及阴极流道7个部分组成。本文以有效反应面积为3.61cm2、高为2.96mm的燃料电池单体进行模拟研究。利用多物理场直接耦合分析软件COM-SOL Multiphysics中的PEM燃料电池模块来进行求解分析。在模拟分析中，3种模型的气体流动方向如图1中箭头所指方向流动。表1中的数据为质子交换膜燃料电池模型的体积尺寸和网格单元个数，表2中的数据为模拟参数。

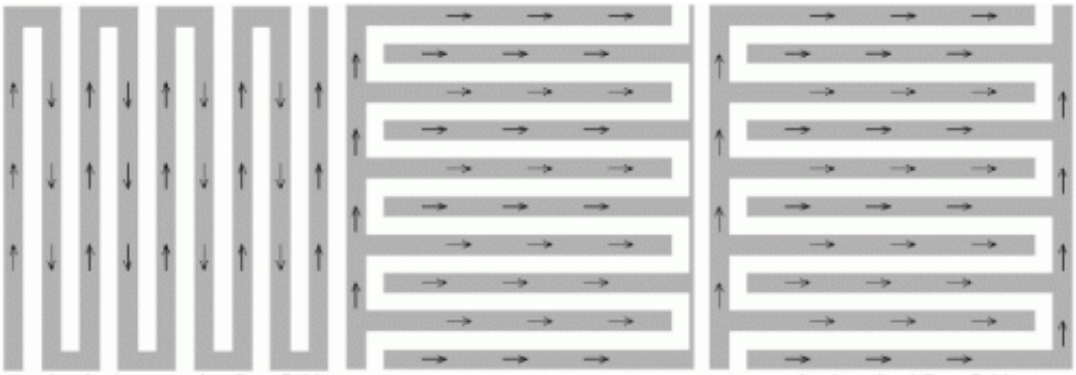

图 1 三种流道结构模型图 A. 单蛇形流道；B. 交指流道；C. 混合流道

Fig. 1 Three kinds of flow field models in proton exchange membrane fuel cell

A. The single serpentine flow field; B. The interdigitated flow field; C. The mixed flow field

表 1 质子交换膜燃料电池模型尺寸和网格单元数

Tab. 1 The model dimensions and mesh numbers in proton exchange membrane fuel cell

Parameter	The single serpentine/Mesh cell number	The interdigitated/Mesh cell number	The mixed/Mesh cell number
Cathode flow field/mm^3	179/685	198/723	197/1653
Cathode GDL/mm^3	137.18/5343	137.18/5167	137.18/5153
Cathode catalyst layer/mm^3	18.05/22326	18.05/22344	18.05/23280
Proton exchange membrane mm^3	36.1/23158	36.1/23311	36.1/23243
Anode catalyst layer/mm^3	18.05/22326	18.05/22344	18.05/23280
Anode GDL/mm^3	137.18/5343	137.18/5167	137.18/5153
Anode flow field/mm^3	179/685	198/723	197/1653

表 2 模型的模拟参数

Tab. 2 The simulated parameters of the model

Parameter	Value	Parameter	Value
Effective battery area/mm^2	361	Anode inlet flow velocity/(m·s^{-1})	0.2
Channel height/mm	1	Cathode inlet flow velocity/(m·s^{-1})	0.5
Channel width/mm	1	Oxygen reference concentration/(mol·m^{-3})	40.88
Rib width/mm	1	Hydrogen reference concentration/(mol·m^{-3})	40.88
GDL width/mm	0.38	Membrane conductivity/(S·m^{-1})	9.825
Porous electrode thickness/mm	0.05	Heat transfer coefficient/(W·m^2·K^{-1})	50
Membrane thickness/mm	0.1	External temperature/K	298.15
GDL porosity	0.5	Reference pressure/Pa	1.01 × 10^5
GDL permeability/mm^2	1.18 × 10^{-5}	Cell temperature/K	343.15
GDL electric conductivity/(S·m^{-1})	222	Cell voltage/V	0.9

1.1模型假设

①反应气体为氢气和理想空气；②反应气体在流道中的流道均为层流；③反应气体不会渗透过质子交换膜；④多孔介质整体各向同性且均匀；⑤电化学反应在催化层表面进行；⑥燃料电池内部运行条件为稳态。

2数学模型

2.1 组分传递方程

$$\nabla(\varepsilon\rho v C_i) = \nabla(J_i) + S_i \quad (1)$$

式(1)中，ε 为多孔系数(无量纲)；ρ 为混合物的密度($kg\cdot m^{-3}$)；v 为流体的本征流体速度($m\cdot s^{-1}$)；C_i 为化学组分 i 的质量分率 ($kmol\cdot m^{-3}$)；J_i 为扩散流量($kg\cdot m^{-2}\cdot s^{-1}$)；$S_i$ 为组分的质量源项(无量纲)。

2.2 动量方程

$$\nabla(\varepsilon\rho vv) = \varepsilon\nabla p + \nabla(\varepsilon\mu^{eff}\nabla v) + S_u \quad (2)$$

式(2)中，ε 为多孔系数(无量纲)；ρ 为混合物的密度($kg\cdot m^{-3}$)；v 为流体的本征流体速度($m\cdot s^{-1}$)；p 为流体的压力(P)；μ^{eff} 为有效粘性系数($Pa\cdot s$)；S_u 为动量源项(无量纲)。

2.3 连续性方程

$$\nabla(\varepsilon\rho v) = S_m \quad (3)$$

式 (3) 中，ε 为多孔系数；ρ 为混合物的密度($kg\cdot m^{-3}$)；v 为流体的本征流体速度($m\cdot s^{-1}$)；S_m 为质量源项(无量纲)。

2.4 温度控制方程

$$\nabla(\rho v C_p T) = \nabla(k^{eff}\nabla T) + S_T \quad (4)$$

式(4)中，ρ 为混合物的密度($kg\cdot m^{-3}$)；v 为流体的本征流体速度($m\cdot s^{-1}$)；C_p 为等压比热容($J\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1}$)；$T$为温度($K$)；$k^{eff}$ 为有效导热系数($W\cdot m^{-2}\cdot K^{-1}$)；$S_T$ 为能量源项(无量纲)。

2.5 热对流能量方程

$$\phi = hA(t_w - t_\infty) \quad (5)$$

式(5)中，ϕ 为热流量(W)；h 为表面传热系数($W\cdot m^{-2}\cdot K^{-1}$)；$A$ 为与流体接触的壁面面积(m^2)；t_w 为固体壁表面温度(K)；t_∞ 为流体温度(K)。

2.6 电化学反应动力学 Butler-Volmer 方程

$$S_a = j_{a,ref}\left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_{2,ref}}}\right)^{\gamma_a}\left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT}\eta_a} - e^{\frac{\alpha_c F}{RT}\eta_c}\right) \quad (6)$$

$$S_c = j_{c,ref}\left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_{2,ref}}}\right)^{\gamma_c}\left(e^{\frac{\alpha_a F}{RT}\eta_c} - e^{\frac{\alpha_c F}{RT}\eta_c}\right) \quad (7)$$

式(6)和(7)中，η 为活化过电位(V)；j_{ref} 为参考体积交换电流密度($A\cdot m^{-2}$)；C_i、$C_{i,ref}$ 分别为 i 组分的局部摩尔浓度($kg\cdot mol\cdot m^{-3}$)和 i 组分的参考摩尔浓度 ($kg\cdot mol\cdot m^{-3}$)；γ 为浓度指数 (无量纲)；α 为传递系数(无量纲)，下标字母 a、c 分别表示阳极和阴极[13-15]。

3结果与讨论

3.1氧气浓度分布

在相同的模拟条件下，3种方案PEMFC单体阴极流道内氧气浓度变化趋势如图2所示。其阴极流道氧气浓度取值面是沿着电池厚度方向，取电池电压为0。65V时阴极流道的中间界面。分析图2可知，每幅小图的右边都有对应色彩值，色彩值越大颜色越淡，反之越深。色彩值的大小代表反应阴极流道中的氧气含量，当色彩越淡时氧气含量越多，反之越少。

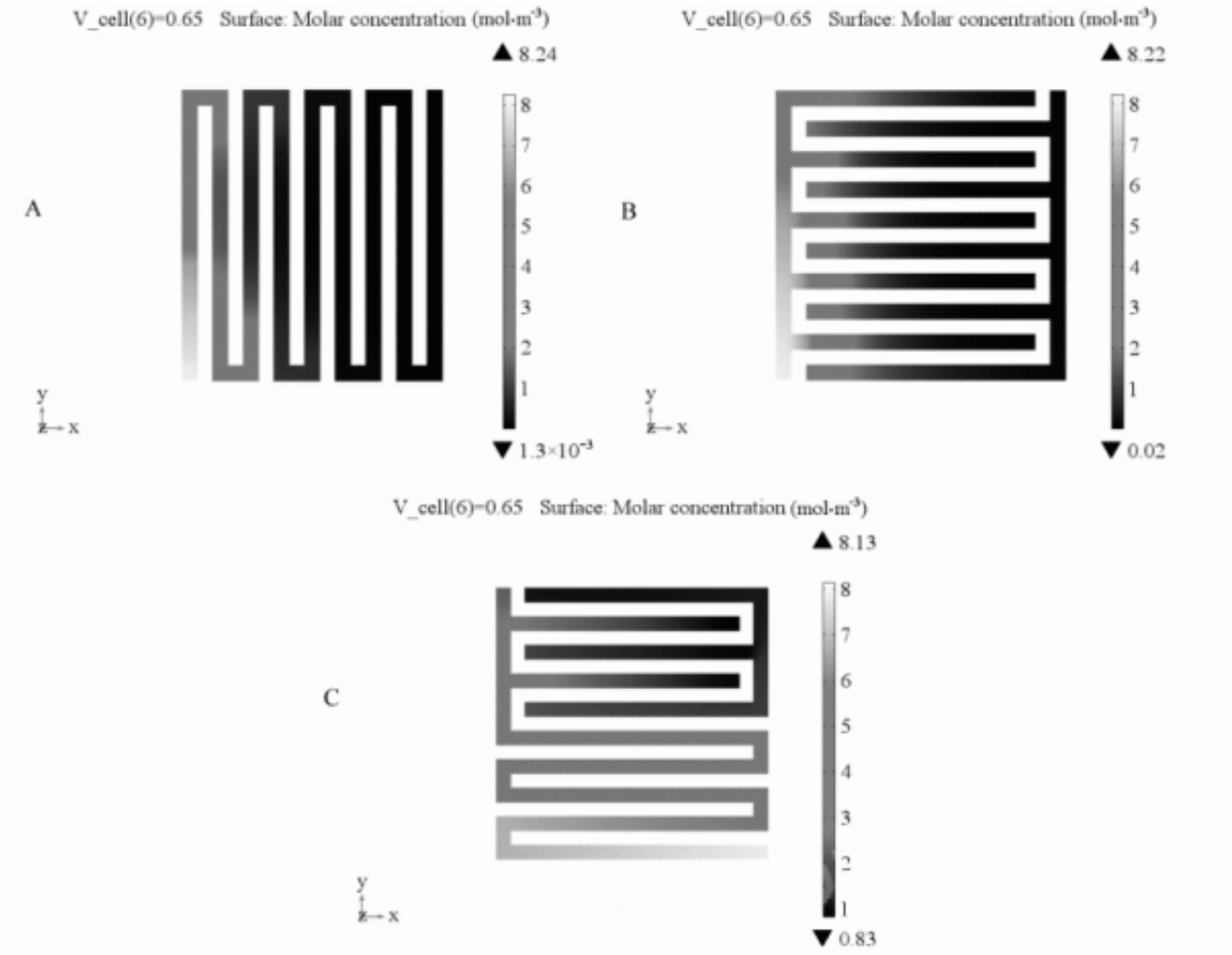

图 2 三种流道下的阴极氧气浓度分布

Fig. 2 The distributions of cathode oxygen concentrations in the three kinds of flow fields

A. The single serpentine flow field; B. The interdigitated flow field; C. The mixed flow field

由图2可知，氧气含量最多的是混合流道，氧气浓度差值为7.30mol · m^{-3}。其次是交指流道，氧气浓度差值为8.20mol · m^{-3}。氧气含量最少的是单蛇形流道，氧气浓度差值为8.24 mol · m^{-3}。氧气浓度差值的含义是流道中氧气含量最大值与最小值之差，其大小可以反映出氧气在流道中分布的均匀状况。即方案C混合流道中氧气分布最为均匀，其次是方案B交指流道，最差的是方案A单蛇形流道。

3.2进出口氧气浓度差

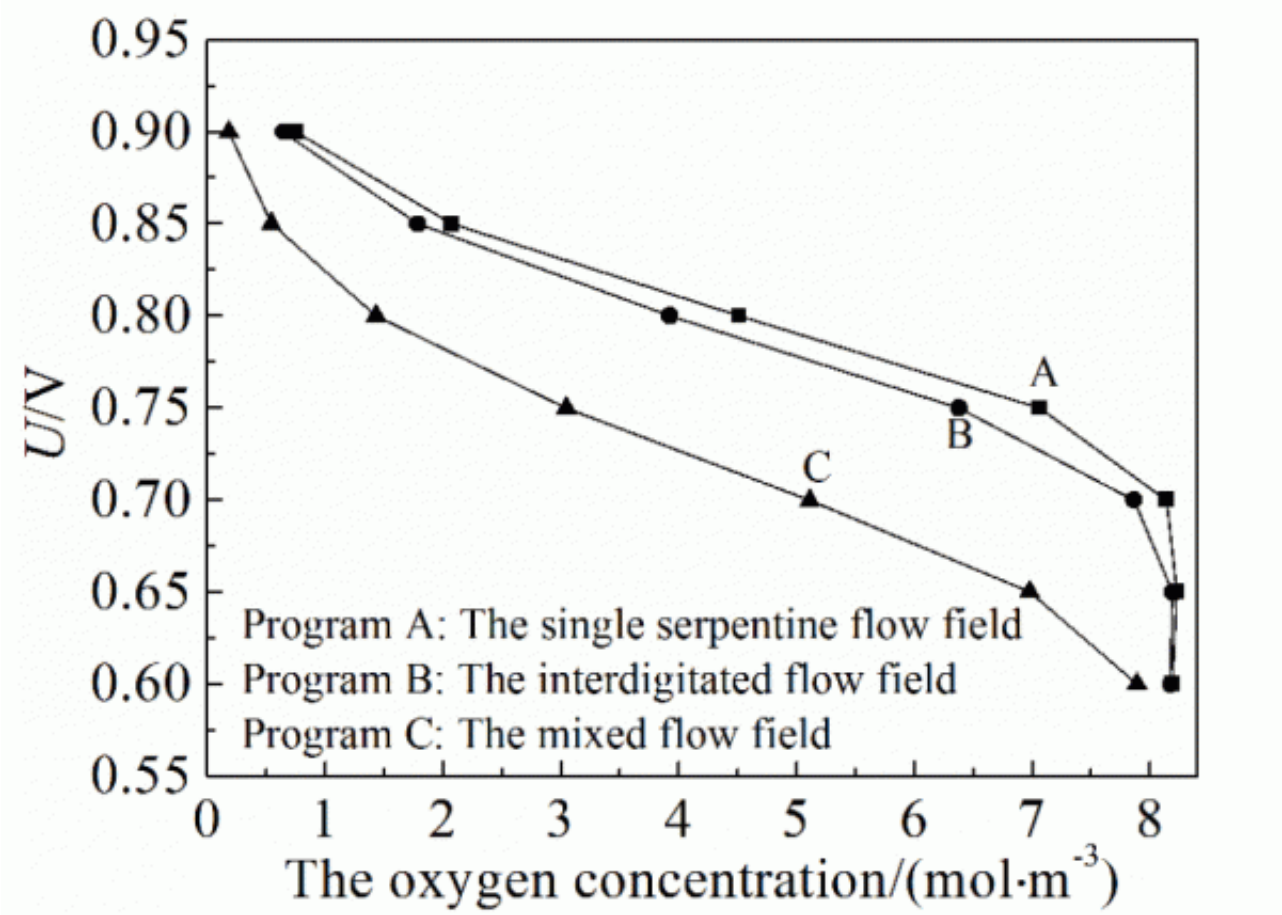

图 3 三种流道的进出口氧气浓度差

Fig. 3 The differences of oxygen concentration between the inlet and outlet in the three kinds of flow fields

在相同的实验模拟条件下，由图3可知，方案A单蛇形流道进出口氧气浓度差值最大，其次是方案B交指流道，方案C混合流道进出口氧气浓度差值最小。从图2中的结果可知，混合流道中氧气浓度分布最均匀，其次是交指流道中的氧气浓度分布，最差的是单蛇形流道中的氧气浓度分布。当氧气浓度分布均匀时，会降低浓差极化的影响，进而提高PEMFC输出性能。所以浓度差值越小时，氧气浓度分布越均匀，单电池输出性能越好。

3.3阴极水浓度分布

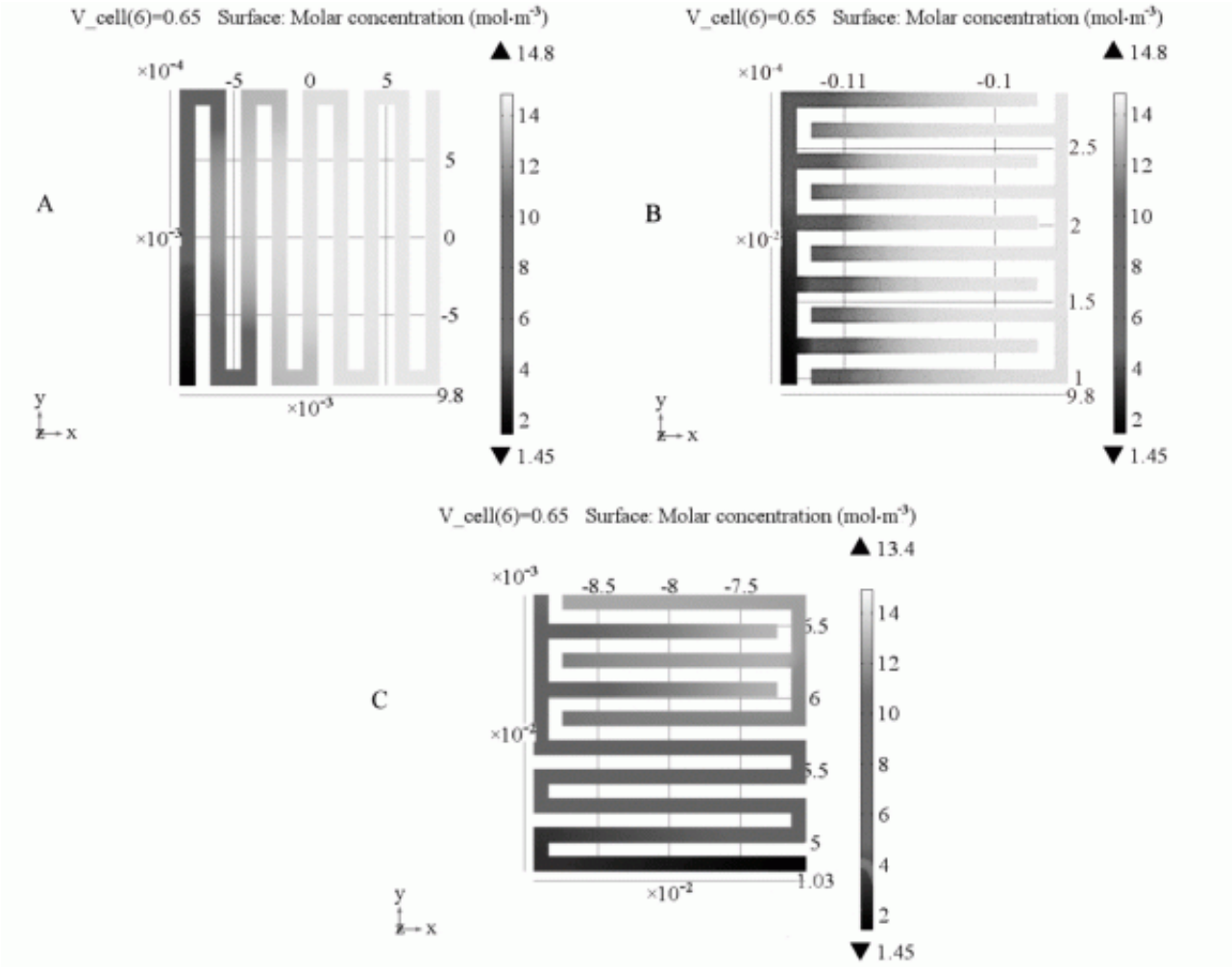

图 4 三种流道下的阴极水浓度

Fig. 4 The distributions of cathode water concentrations in the three kinds of flow fields

A. the single serpentine flow field; B. the interdigitated flow field; C. the mixed flow field

在相同的模拟条件下，3种方案PEMFC单体阴极流道内水浓度变化趋势如图4所示。其阴极水浓度取值面是沿着流道厚度方向，取电池电压为0.65V时阴极流道的中间界面。

由图4结果分析可知，在每幅小图的右边都有色彩值，其颜色越浅色彩值越大，反之色彩值越小。其中方案A单蛇形流道浅色面积最大，水浓度差值为13.35mol · m^{-3}
。其次是方案B交指流道，水浓度差值为13.35mol · m^{-3}
。方案C混合流道中浅色面积最小，水浓度差值为11.95
mol · m^{-3}
。由水浓度的差值可知，混合流道的排水能力要强于方案A、B。相对方案A、B来说，方案C不易发生“ 水淹 ”现象
。这是由于，方案C混合流道是由单蛇形流道和交指流道组合构成，由图2可知，交指流道的氧气分布要优于单蛇形流道，而单蛇形流道有较强的排水能力。混合流道是结合两者的优点，实现氧气均匀分布和较强排水能力。

3.4伏安特性曲线

在气体压强为1个大气压以及气体流量相同的条件下。对3种不同流场(单蛇形流道、交指流道、混合流道)的单电池进行模拟研究，其3种单电池的伏安特性曲线见图5。

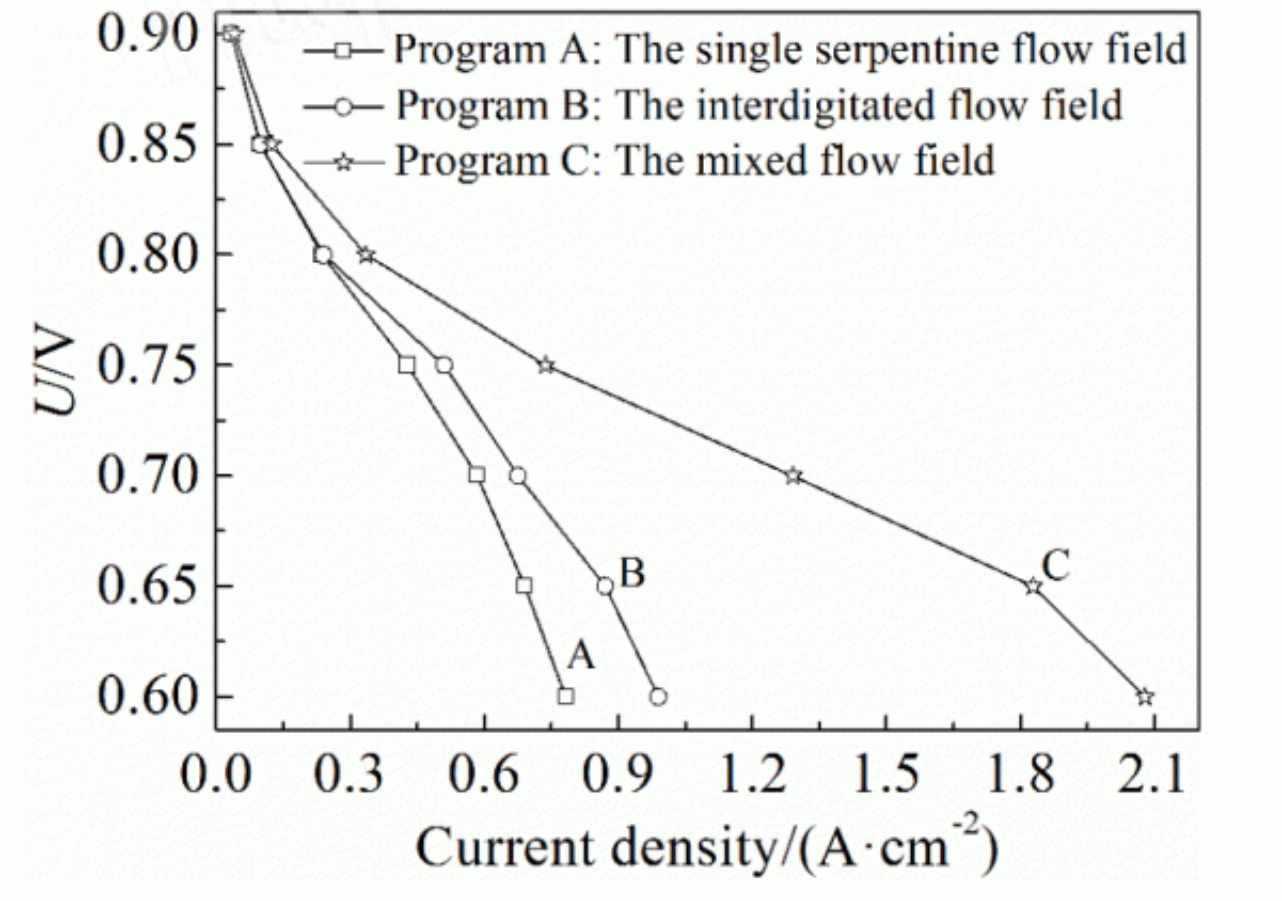

图 5 三种流场对燃料电池伏安特性的影响

Fig. 5 The influences of three kinds of flow fields on the fuel cell volt-ampere characteristic

伏安特性曲线中有3种极化现象，分别为活化极化、欧姆极化以及浓差极化。随着电流密度的增加，3种单体电池电压都处于下降的趋势。其中方案C的下降趋势最为缓和，而方案A的下降趋势最为陡峭。在电池电压为0.6V时，方案A和方案B在电流密度增至1A · cm^{-2}
后停止增加。而方案C在电池电压为0.6V时
，电流密度可以增至2.1A · cm^{-2}
。这是由于方案C中的混合流道可以使气体更加均匀地分布在流道内，降低浓差极化对燃料电池输出性能的影响，推迟了电流密度极限值的出现。由图2知，方案B中的交指流道对气体分布的均匀性要高于方案A的单蛇形流道，从而使得方案B中的电流密度极限值大于方案A中的电流密度极限值。当电流密度极限值越大时，燃料电池地输出性能越好。即输出性能最优的是方案C，其次是方案B，最差的是方案A。

3.5阳极催化层与交换膜交界面处温度变化

在相同的实验条件下，阳极催化层与质子交换膜交界面处温度变化如图6所示。方案C的极限温度值最大，其次是方案B的极限温度，极限温度值最小的是方案A。这是因为方案C的输出性能最大，当输出性能大时PEMFC单体内发生的电化学反应会加剧。由图2可知，方案C中阴极氧气浓度分布最为均匀，当方案C发生电化学反应时，对H+的需求量将会增大，使得阳极催化层处电化学反应加剧，产生的热量也会增加。方案A在电池电压为0.75V之后产生的温度要小于方案B，是因为在0.75V之后发生浓差极化，使得方案A中的电化学反应受阻，影响方案A的输出性能。

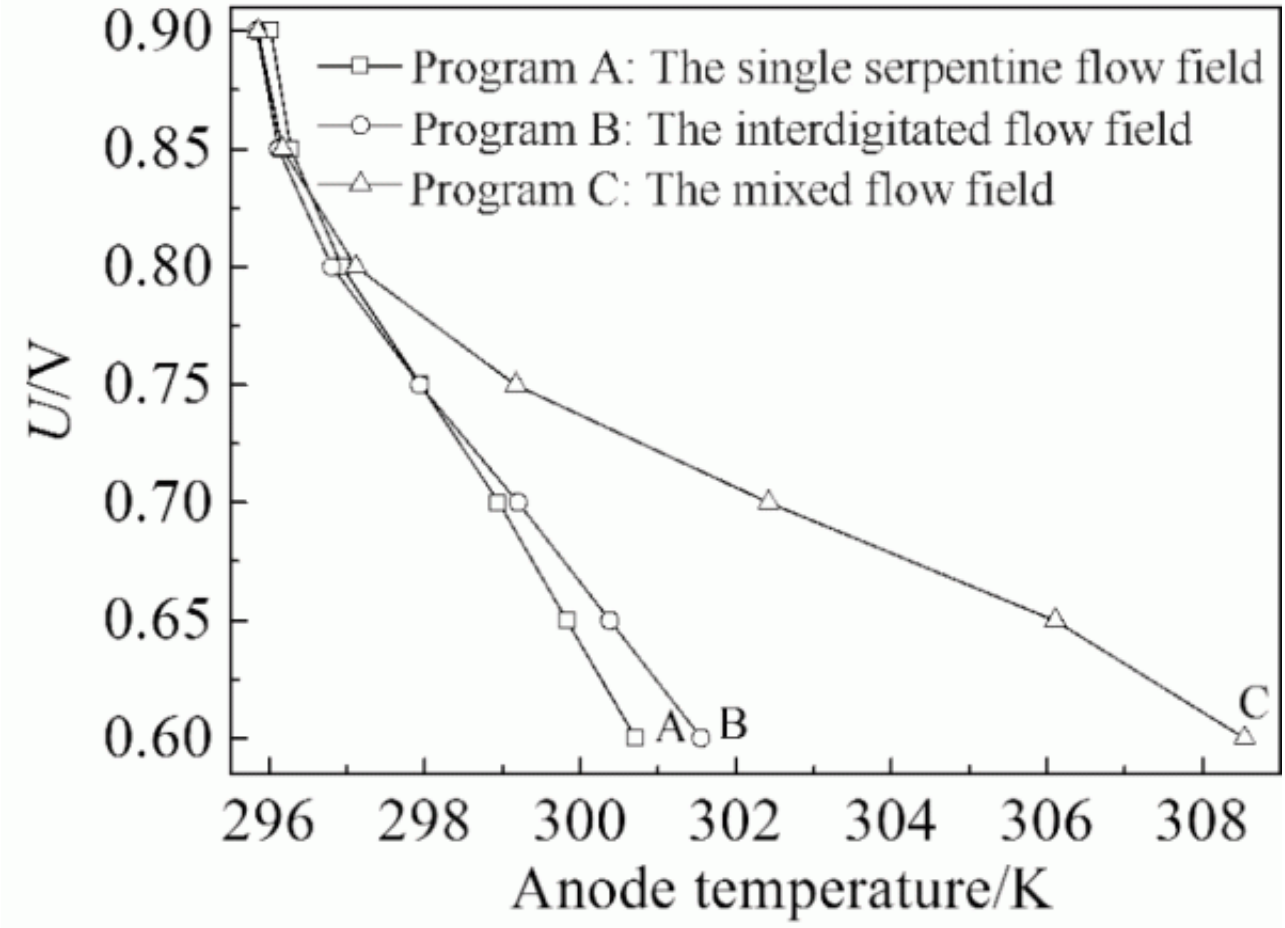

图 6 阳极温度变化

Fig. 6 Variation of voltage with anode temperature

4结论

本文使用多物理场直接耦合COMSOL分析软件，研究了流场结构对质子交换膜燃料电池输出性能的影响，得到主要结论如下：1）流场板结构直接影响到燃料电池氧气浓度分布，混合流道中氧气浓度分布最均匀且排水性能最好。2）流场板结构对燃料电池输出性能有着显著影响。其中混合流道的输出性能最优，其次为交指流道，最差为单蛇形流道。3）混合流道的阳极催化层与交换膜交界面处温度最高，发生电化学反应的强度最大。4）单蛇形流道在电池电压为0.75V之后，受到浓差极化的影响，发生电化学反应的强度要低于交指流道和混合流道。

参考文献(References):

[1] Wang Y, Chen K S, Mishler J, et al. A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research[J]. Applied Energy, 2011, 88(4): 981-1007.

[2] Wu H W. A review of recent development: Transport and performance modeling of PEM fuel cells[J]. Applied Energy, 2016, 165: 81-106.

[3] Li S(李赏), Zhou F(周芬), Chen L(陈磊), et al. Dynamic simulation of oxygen reduction reaction in Pt/C electrode for proton exchange membrane fuel cells[J]. Journal of Electrochemistry(电化学), 2016, 22(2): 129-134.

[4] Ramesh P, Duttagupta S P. Effect of channel dimensions on micro PEM fuel cell performance using 3D modeling [J]. Renewable Energy, 2013, 3(2): 353-358.

[5] Wang X D, Yan W M, Duan Y Y, et al. Numerical study on channel size effect for proton exchange membrane fuel

cell with serpentine flow field[J]. Energy Conversion and Management, 2010, 51(5): 959-968.

[6] Wang X D, Duan Y Y, Yan W M, et al. Local transport phenomena and cell performance of PEM fuel cells with various serpentine flow field designs[J]. Power Sources, 2008, 175(1): 397-407.

[7] Dawes J E, Hanspal N S, Family O A, et al. Three-dimensional CFD modeling of PEM fuel cells; an investigation into the effects of water flooding[J]. Chemical Engineering Science, 2009, 64(12): 2781-2794.

[8] Yazdi M Z, Kalbasi M. A novel analytical analysis of PEM fuel cell[J]. Energy Conversion and Management, 2010, 51 (2): 241-246.

[9] Ghanbarian A, Kermani M J. Enhancement of PEM fuel cell performance by flow channel indentation[J]. Energy Conversion and Management, 2016, 110: 356-366.

[10] Hao L, Moriyam K, Gu W B, et al. Modeling and experimental validation of Pt loading and electrode composition effects in PEM fuel cells[J]. Journal of The Electrochemical Society, 2015, 162(8): F854-F867.

[11] Li Y S, Han Y, Zhan J M. Uniformity analysis in different flow-field configurations of proton exchange membrane fuel cell[J]. Journal of Fuel Cell Science And Technology, 2013, 10(3): Article number: 031003.

[12] Chen T, Qiao Y Q, Li C P, et al. Research on performance of serpentine flow field in PEMFC[J]. Renewable Energy Resources, 2012, 30(3): 87-96.

[13] Chen S Z(陈士忠), Luo X(罗鑫), Xia Z X(夏忠贤), et al. Simulation of effects of intake air velocity on the performance of interdigital HT-PEM fuel cells[J]. Journal of Shenyang Jianzhu University(Natural Science)(沈阳建筑大学学报(自然科学版)), 2017, 33(3): 529-536.

[14] Zhou X F, Chen X Y, Xu Y, et al. 3D multiphysics numerical simulation of PEMFC with serpentine flow field [J]. Chinese Battery Industry, 2010, 15(6): 367-371.

[15] Chen S Z, Wang Y C, Zhang X Y, et al. Temperature distribution simulation of fourport serpentine flow field PEMFC[J]. Renewable Energy Resources, 2016, 34(6): 921-925.

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/166311.html