

PEMFC一维动态机理模型及水含量状态预测

徐领¹

1. 汽车安全与节能国家重点实验室, 清华大学, 北京

简介: 为了提高质子交换膜燃料电池(Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)的效率、延长其寿命, 水管理是必须解决的问题。但原位观测电堆内部水传递状态难度较大, 因此通过机理建模预测电堆内部水传递状态成为一种重要方法。本研究利用COMSOL Multiphysics®建立了沿质子传递方向的PEMFC一维动态机理模型, 仿真了GDL内部无液态水和有液态水两种工况下燃料电池的运行, 结合瞬态仿真结果对PEMFC内部水传递状态进行了预测。

计算方法: 模型将PEMFC划分为阳极GDL、质子交换膜和阴极GDL三个域, 忽略气体流道和催化剂层的厚度, 将其视为边界点。

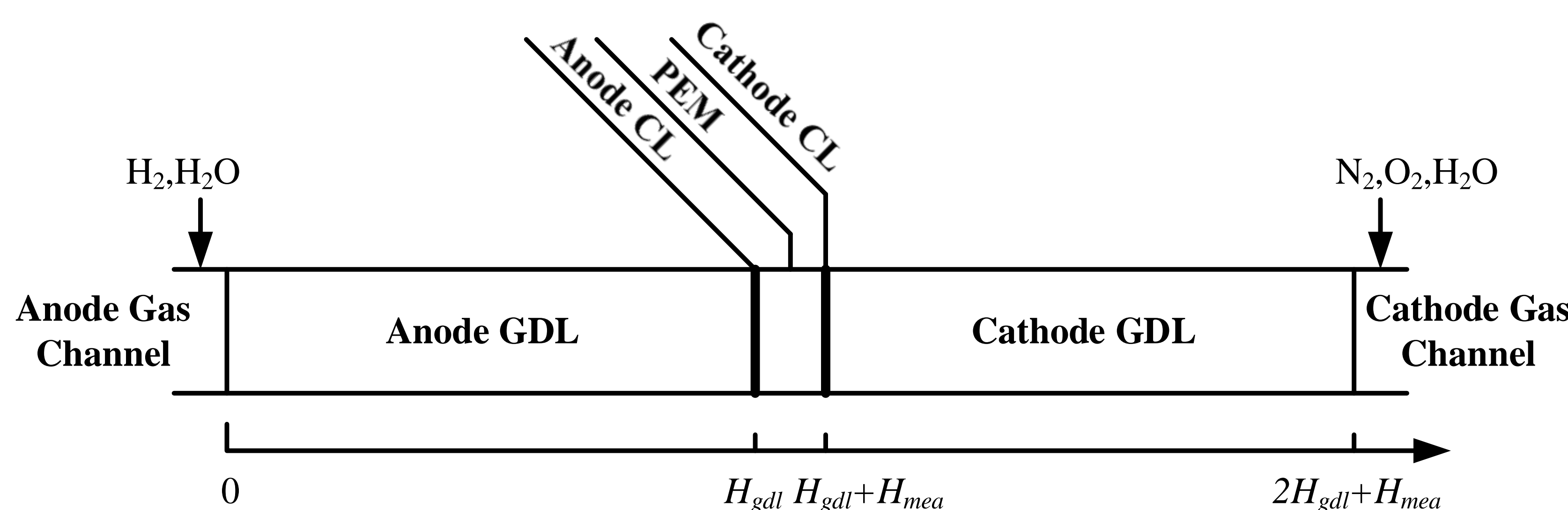


图 1. PEMFC一维动态机理模型简图

使用"数学"物理场接口中的"对流-扩散方程"描述三个域内的物质传递过程; 用"边界常微分与微分代数方程"描述边界点的状态。流道处采用对流传质边界条件; 催化剂层处采用狄氏边界条件。

膜内水传递:

$$\frac{\rho_{mem}}{M_{eq}} \frac{\partial \lambda}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\rho_{mem}}{M_{eq}} D(\lambda) \frac{\partial \lambda}{\partial x} + \frac{2.5 i_{fc}}{22 F} \lambda \right) = 0$$

GDL内水传递及氧气扩散:

$$\varepsilon_{gdl} \frac{\partial C_w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{TP} \frac{\partial C_w}{\partial x} \right)$$

$$\frac{\partial C_{O_2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{O_2}^{eff} \frac{\partial C_{O_2}}{\partial x} \right) = 0$$

流道边界点:

$$\frac{dC_{gc}}{dt} = \frac{V_{g,in}}{L_{ch}} C_{v,in} - \frac{J_{w|x=GC}}{H_{ch}} - \frac{V_{g,out}}{L_{ch}} C_{gc}$$

$$\frac{dC_{O_2,ch}}{dt} = \frac{V_{g,in}}{L_{ch}} C_{O_2,in} - \frac{V_{g,out}}{L_{ch}} C_{O_2,ch} + \frac{J_{O_2}|_{x=H_{mea}+2H_{gdl}}}{H_{ch}}$$

催化剂层边界点:

$$\frac{dC_{ccl}}{dt} = \frac{1}{H_{cl}} \left(J_{mem} + \frac{i_{fc}}{2F} - J_c \right), \quad \frac{dC_{acl}}{dt} = \frac{1}{H_{cl}} (J_a - J_{mem})$$

将三个域分别划分为10个网格, 由于网格数较少, 采用MUMPS直接求解算法, 将全部方程耦合求解。

结果: 首先仿真了GDL内无液态水出现的工况, 分析了电流阶跃时PEMFC内部的水传递状态的变化及其对电压损失的影响。之后仿真了GDL内有液态水出现的工况, 分析了阴极GDL内液态水的过渡过程。

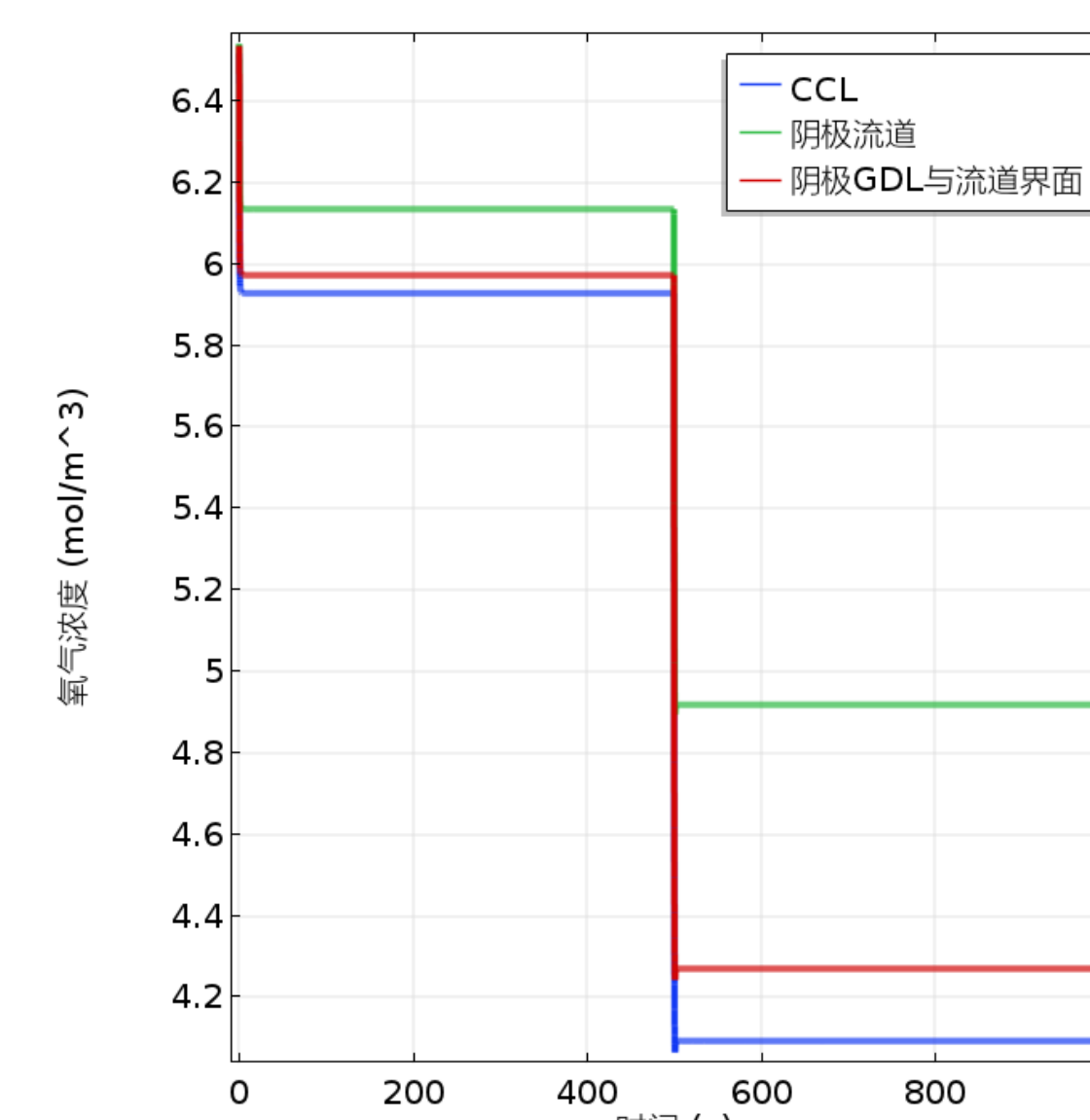


图 2. 单相流工况下氧气浓度随时间的变化

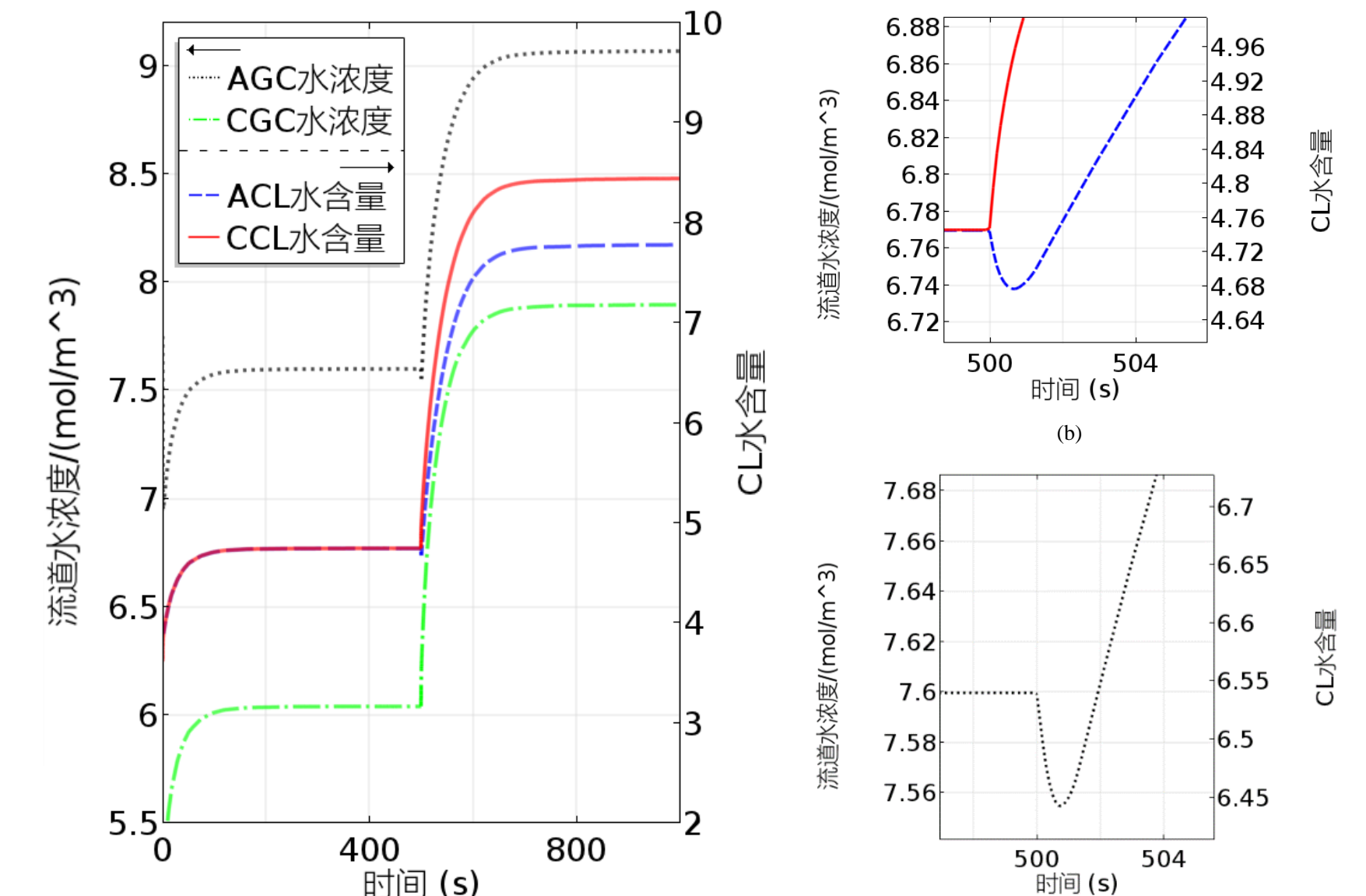


图 3. 单相流工况下流道水浓度及催化剂层水含量随时间的变化

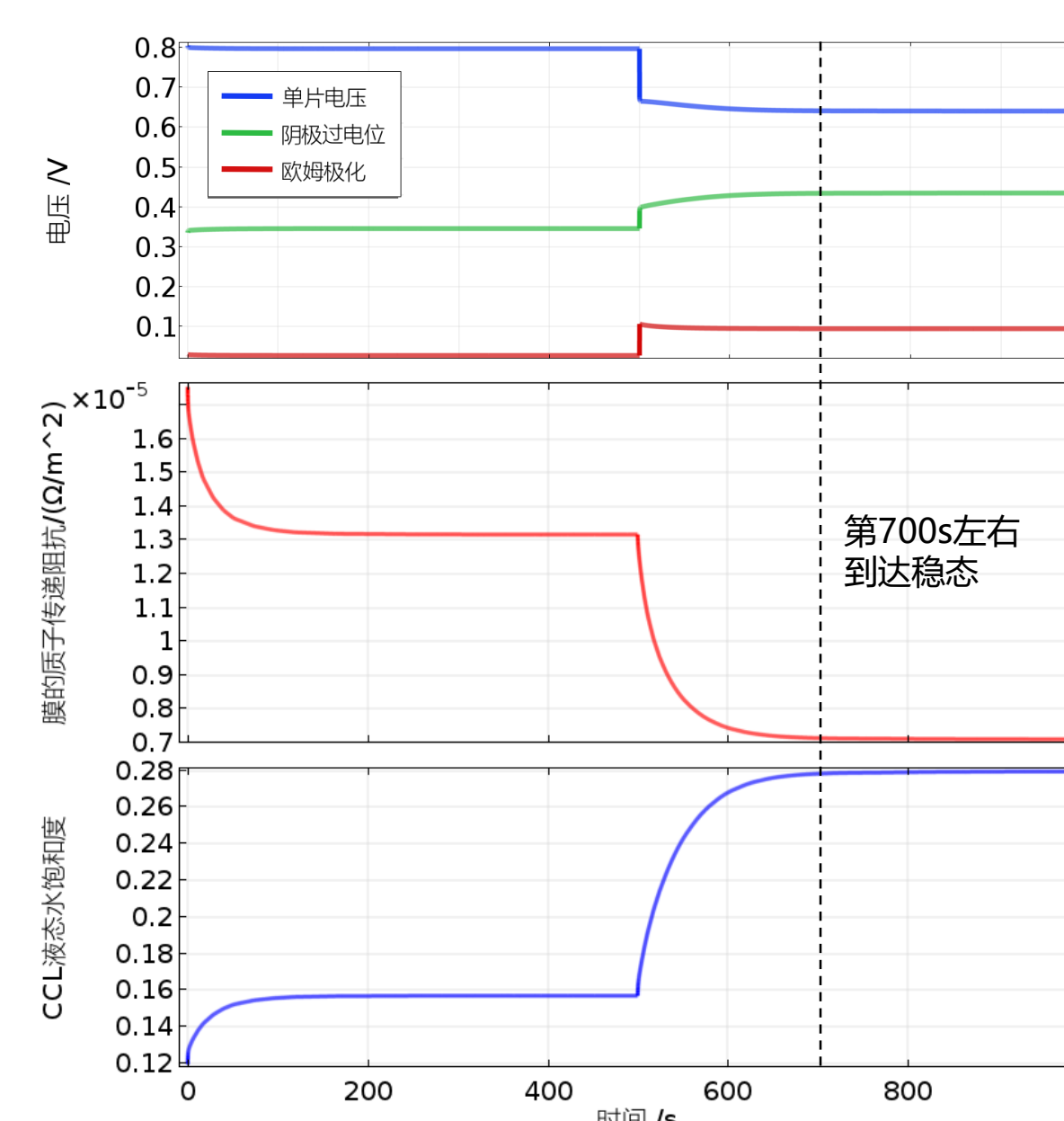


图 4. 单相流工况下水传递状态变化对PEMFC电压的影响

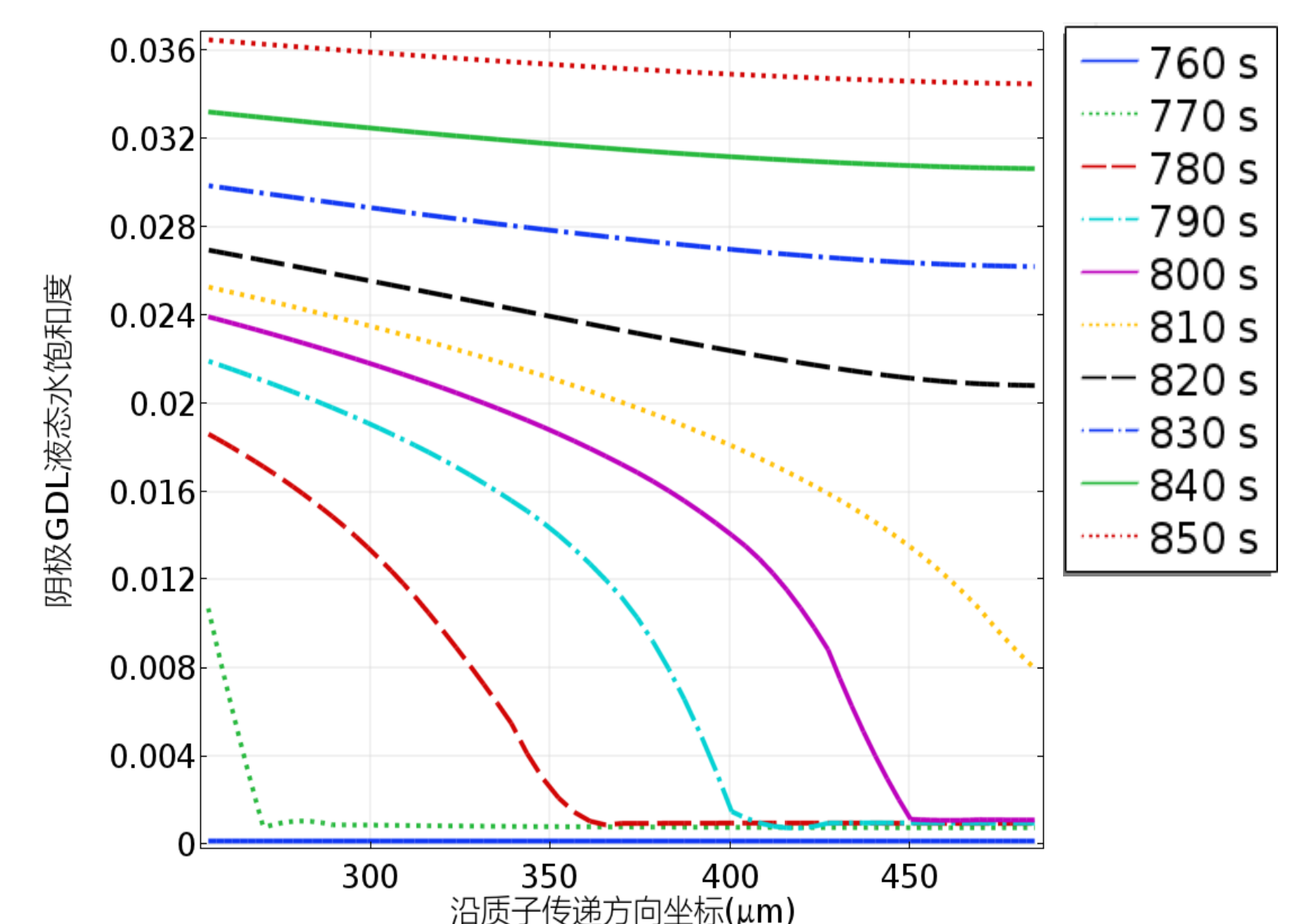


图 5. 两相流工况下阴极GDL内液态水饱和度分布随时间的变化

结论: 通过对仿真结果的分析, 可以得出以下结论

1. 电流阶跃增大时, 阳极流道水浓度及催化剂层水含量呈现先短暂减小后增大的趋势, 表明PEMFC在负荷突然增大时, 阳极容易发生短暂的膜干。
2. 电流阶跃增大时, 阴极催化剂层氧气浓度降低最多, GDL与流道界面其次, 流道内部降低幅度最小。表明PEMFC负荷增大时, 阴极催化剂层容易发生缺氧现象。
3. GDL内有液态水出现的工况下, 液态水经历了: 从阴极催化剂层出现且前锋面向流道方向移动; 前锋面到达流道且液态水饱和度分布向线性分布过渡; 液态水饱和度线性分布这三个阶段。

本一维模型有助于我们更加深入地理解PEMFC内部的水传递现象, 对PEMFC的设计和控制优化都具有一定的参考价值。未来可以增加沿流道方向和流道-流道方向的维度, 搭建多维的PEMFC机理模型。

参考文献:

1. Springer, T. E., Zawodzinski, T. A., & Gottesfeld, S. (1991). Polymer electrolyte fuel cell model. *Journal of the electrochemical society*, 138(8), 2334-2342.
2. Hu, J., Li, J., Xu, L., Huang, F., & Ouyang, M. (2016). Analytical calculation and evaluation of water transport through a proton exchange membrane fuel cell based on a one-dimensional model. *Energy*, 111, 869-883.
3. Pasaogullari, U., & Wang, C. Y. (2005). Two-phase modeling and flooding prediction of polymer electrolyte fuel cells. *Journal of The Electrochemical Society*, 152(2), A380-A390.