

工作条件对质子交换膜燃料电池性能的影响

赵明,李国祥,王桂华,白书战*

山东大学能源与动力工程学院,山东 济南 250061

摘要:采用计算流体力学和有限元的计算方法,建立质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cells, PEMFC)多物理场仿真模型,验证模型的合理性,并分析工作温度、反应物相对湿度、多孔介质孔隙率对燃料电池性能影响。仿真结果表明:仿真模型符合实际且精度较高;在高工作电压下,工作温度、反应物相对湿度、多孔介质孔隙率对 PEMFC 的输出性能影响不大;在低工作电压下,工作温度低、反应物相对湿度低、多孔介质孔隙率大时 PEMFC 的输出性能越好。

关键词:PEMFC;数值模拟;多物理场;极化曲线

中图分类号:TM911.4

文献标志码:A

文章编号:1673-6397(2024)03-0009-07

引用格式:赵明,李国祥,王桂华,等.工作条件对质子交换膜燃料电池性能的影响[J].内燃机与动力装置,2024,41(3):9-15.

ZHAO Ming, LI Guoxiang, WANG Guihua, et al. The impact of operating conditions on the performance of proton exchange membrane fuel cells[J]. Internal Combustion Engine & Powerplant, 2024,41(3):9-15.

0 引言

随着“双碳”战略的提出,发展新能源产业刻不容缓。氢燃料电池以其高效、清洁的特点被广泛关注,发展前景广阔。然而,受限于催化剂成本高昂和质子膜耐久性不足两大主要原因,质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cells, PEMFC)的商业化进程缓慢。

燃料电池仿真研究有利于分析关键参数对电池性能的影响,从而确定合适的工作环境,为提高燃料电池性能、延长燃料电池寿命提供优化方向。仿真模型可以分为零维、一维、二维、三维^[1]。零维模型不考虑几何结构,主要针对电池性能输出和控制策略进行研究;一维模型假设各物理参数在空间上均匀分布,反应物浓度恒定不变;二维模型相当于对燃料电池进行切片,不考虑切片法向的影响,重点研究电池内部的传质传热现象;三维模型综合考虑几何结构和多物理场进行建模,能够深入研究电池运行过程中各物理量的分布,有利于分析燃料电池工作机理,但是需要占用较多的计算资源。

目前,关于燃料电池的研究大多侧重于零维和三维仿真模型。在零维仿真模型方面:徐腊梅等^[2]运用 Simulink 软件建立了燃料电池的电化学模型,分析了温度对电池输出电压和输出功率的影响,研究表明,随温度升高,电池输出电压和输出功率先增高后减小,最适宜的工作温度为 80℃;高建华等^[3]提出了温度波动模型,在燃料电池工作温度为 60℃时,测试进气温度为 43、50、55℃对电池性能的影响,发现随进气温度升高,电池的温度波动趋于平缓;李奇等^[4]将气体流量模型和热力学模型引入燃料电池动态模型中,建立了一个 PEMFC 系统动态模型,并验证了模型的正确性和有效性;王振等^[5]基于经验模型建立了一种 PEMFC 动态特性模型,利用该模型对电池进行仿真分析,并与 Ballard 公司的 MK5-E

收稿日期:2024-04-24

基金项目:山东省重点研发计划项目资助(2020CXGC010404);济南市市校融合发展战略工程项目(JNSX2023006)

第一作者简介:赵明(2000—),男,河南新蔡人,硕士研究生,主要研究方向为燃料电池,E-mail:zhaoming000709@163.com。

*通信作者简介:白书战(1979—),男,山东莘县人,工学博士,教授,主要研究方向为内燃机燃烧与排放控制技术、整机开发与可靠性技术及新能源汽车技术,E-mail:baishuzhan@sdu.edu.cn。

型 PEMFC 电池性能进行对比,结果表明,该模型能够较好地反应燃料电池运行参数对性能的影响。在三维仿真模型方面,关于燃料电池的运行参数和流场结构的研究较多:刘训良等^[6]假设燃料电池等温,质子膜充分润湿,电池内部均为气态水,建立了 PEMFC 三维数学模型并对直流道进行仿真,结果表明,增大孔隙率和减小催化剂颗粒有助于提高电池的性能;王楠等^[7]假设气体为单相不可压缩气体,电池内部均为气态水,并且不考虑孔隙率对电导率的影响,搭建 PEMFC 三维稳态模型,研究扩散层孔隙率和厚度对电池性能的影响,并根据电池内部气体的相对湿度分析液态水的生成速度,发现孔隙率和扩散层厚度过大或过小都会造成电池性能下降;赵永豪等^[8]设计了一种双重强化传质流道,研究了横向、纵向双重强化流道对燃料电池性能的影响,结果表明双重强化传质流道能够提高气体向扩散层传输,电池输出性能提高了 28.7%。

通过上述研究可知,零维模型更适用于研究燃料电池的运行控制策略,难以研究运行参数对电池的影响。利用三维模型可以准确分析燃料电池内部水热分布和不同流场对电池性能的影响。但是燃料电池具有非线性、时变性和强耦合的特点,大多燃料电池模型考虑不够充分,模型假设过于理想,难以从机理层级分析电池的运行状态。因此,本文中综合考虑燃料电池中的导电、传热、流动、传质、电化学反应物理现象,截取大极板燃料电池部分流道模型,搭建更加贴合实际燃料电池的多物理场仿真模型,对不同温度、反应物湿度、多孔介质孔隙率下电池的输出性能进行研究,为确定合适的电池工作条件和运行策略提供参考。

1 模型建立

1.1 几何模型与相关参数

PEMFC 组件包括双极板、气体扩散层、催化剂层、质子交换膜等。在双极板上具有圆柱过渡区和沟槽形成的流道,将反应物均匀地运输到催化剂表面。由于单片电池流道数量较多,多物理场耦合计算时间和空间消耗巨大,本文中截取燃料电池部分流道为研究对象,分析温度、反应物湿度、多孔介质孔隙率对电池性能的影响,单片燃料电池计算域及截取位置示意图如图 1 所示,截取流道的计算域示意图如图 2 所示。

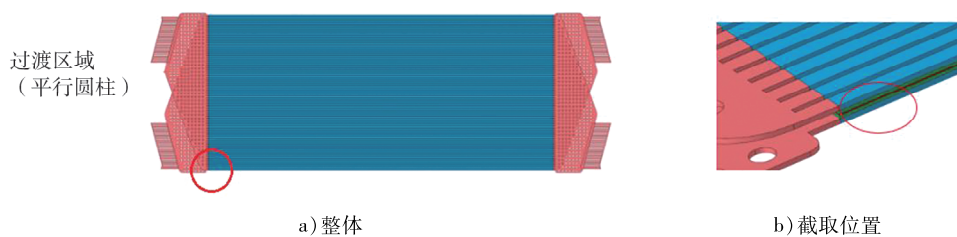


图 1 单片燃料电池计算域及截取位置示意图

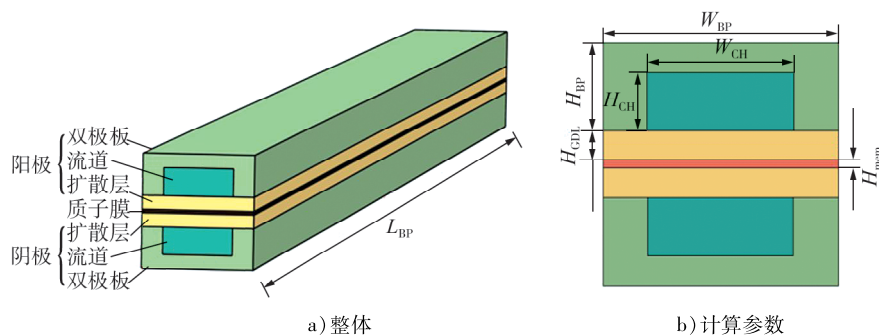


图 2 燃料电池流道计算域示意图

计算域从上到下分别为双极板、阳极流道、阳极气体扩散层、阳极催化剂层、质子交换膜、阴极催化剂层、阴极气体扩散层、阴极流道、双极板。催化剂层厚度仅为 10 μm ,建模时对其进行降维,定义质子膜

上、下表面为扩散层,在三维模型中不再体现催化剂层。

PEMFC 各组件模型尺寸如表 1 所示。

表 1 PEMFC 各部件尺寸

双极板			流道		气体扩散层高度	质子膜厚度
长度 L_{BP}/mm	宽度 W_{BP}/mm	高度 H_{BP}/mm	宽度 W_{CH}/mm	高度 H_{CH}/mm	H_{GDL}/mm	H_{mem}/mm
1.6	0.6	50.0	1.0	0.4	0.2	0.05

1.2 网格模型

仿真区域结构方正规整,适合采用结构化网格。结构化网格可以降低计算网格单元数,提高计算时间和精度。网格模型如图 3 所示。

1.3 数学模型

PEMFC 模型包括机理模型、经验模型和半经验模型。本文采用质量守恒、能量守恒、动量守恒、电荷守恒等建模理论建立燃料电池的机理模型,使用 COMSOL Multiphysics 软件对燃料电池物理场进行仿真。COMSOL Multiphysics 软件具有丰富的附加模块,对流动、传热、电磁等多物理场仿真具有较好的效果。本文中综合考虑燃料电池中的导电、导热、流动、传质、电化学反应多个物理现象,建立多物理场模型对电池进行仿真。

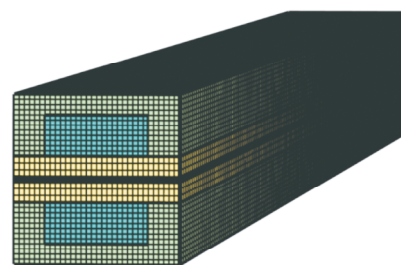


图 3 计算域网格模型

1.3.1 控制方程

燃料电池中的物理现象可通过质量守恒、动量守恒、能量守恒、组分守恒、电荷守恒 5 个基本方程进行控制^[9-13]。

质量守恒方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

式中: ρ 为气体密度; $\mathbf{v}$ 为速度矢量; 方程右边为质量源项, 质量源项为 0。

动量守恒方程为:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot p + \nabla \cdot (\mu \nabla \cdot \mathbf{v}) + S_m, \quad (2)$$

式中: p 为流体压力, μ 为混合物平均黏度, S_m 为动量源项。

能量守恒方程为:

$$(\rho c_p) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c_p) \cdot (\mathbf{v} \nabla \cdot T) = \nabla \cdot (k \nabla \cdot T) + S_e, \quad (3)$$

式中: c_p 为混合物平均比热容, T 为混合物热力学温度, k 为有效热导率, S_e 为能量源项。

组分守恒方程为:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho w_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \varepsilon \rho w_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla \cdot w_i) + S_{si}, \quad (4)$$

式中: w_i 为各组分气体的质量分数, D_i 为各组分气体的有效扩散系数, ε 为孔隙率, S_{si} 为组分源项。

电荷守恒方程为:

$$\nabla \cdot (-k_{eff} \nabla \cdot \varphi) = S_\varphi, \quad (5)$$

式中: k_{eff} 为电导率, φ 为电势, S_φ 为电荷源项。

1.3.2 模型参数和边界条件

模型参数和边界条件设置对计算结果影响很大。模型主要参数和边界条件如表 2、3 所示。

表 2 模型主要参数

阳极参考交换电流密度 $i_{a-ref}/(A \cdot m^{-2})$	阴极参考交换电流密度 $i_{c-ref}/(A \cdot m^{-2})$	阳极交换因数 α_a	气体扩散层孔隙率 ε
100	0.000 1	0.5	0.3, 0.5, 0.7
阳极参考浓度 $c_{a-ref}/(kmol \cdot m^{-3})$	阴极参考浓度 $c_{c-ref}/(kmol \cdot m^{-3})$	阴极交换因数 α_c	催化层比表面积 α_v/m^{-1}
1	1	3	200 000

表 3 模型边界条件

工作温度/ $^{\circ}C$	背压/MPa	阴极(湿空气)进气相对湿度/%	阳极(湿氢气)进气相对湿度/%
60, 70, 80	0.1	30, 50, 70	30, 50, 70

2 模型验证

2.1 网格无关性

网格无关性验证能够在保证精度的同时,减小计算所需要的资源。本文中通过计算输出电压为 0.6 V 时对应的电流密度验证网格无关性,验证结果如图 4 所示。由图 4 可知:在网格数量约达到 20 万时,计算网格能够保证较高的计算精度和较少的计算资源消耗。

2.2 模型准确性

为了验证模型的准确性,建立与文献[14]相同的计算域,将搭建的多物理场耦合模型应用在该计算域,模型的边界条件、初始条件和相关参数采用文献给定数据。仿真所得极化曲线与文献中的极化曲线进行对比,结果如图 5 所示。由图 5 可知:在电压为 0.5 V 时电流密度误差最大,最大相对误差为 4.9%,在允许范围之内,仿真结果基本与文献[14]中的结果吻合,多物理场耦合模型合理。

3 计算结果及分析

3.1 温度对电池输出性能的影响

电池工作条件为:反应物相对湿度为 50%,多孔介质孔隙率为 0.5,工作温度为 60、70、80 $^{\circ}C$ 。通常,增加温度会加快反应的速率,提高燃料电池的输出性能。不同温度下电池的极化曲线如图 6 所示。由图 6 可知:高工作电压下,温度对电流密度影响较小,随着工作电压下降,温度对电流密度的影响逐渐增大,表现为随温度的增大,电流密度减小,电池输出性能下降。

工作电压为 0.4 V 时,不同温度下膜的电流密度和阴极扩散层中水的摩尔分数分别如图 7、8 所示。由图 7、8 可知:在较高的温度下,反应速率加快,阴极扩散层中的氧气迅速被消耗并生成大量的水,这些水难以及时从扩

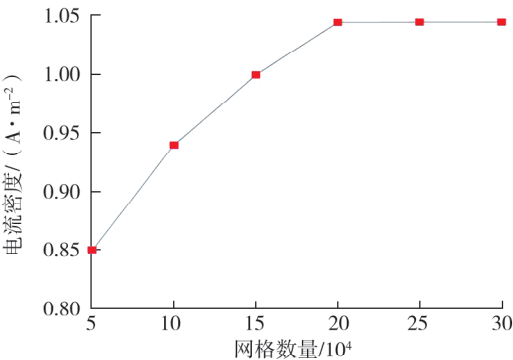


图 4 网格无关性验证

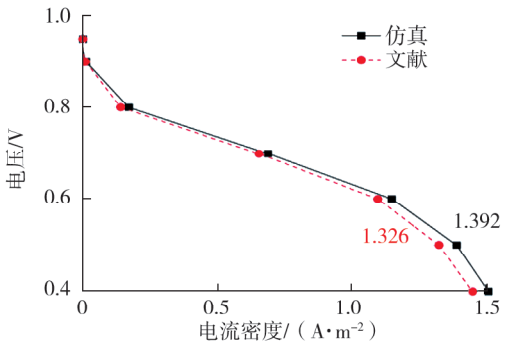


图 5 模型精确性验证

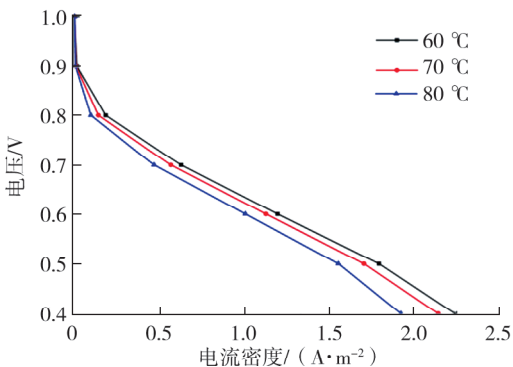


图 6 不同温度下电池的输出性能

散层中排出,阻碍氧气传输,造成电池电流密度下降;当温度为 60 ℃ 时,扩散层中的水含量少,氧气传输阻碍小,反应更均匀,电流密度分布更均匀,性能更好。

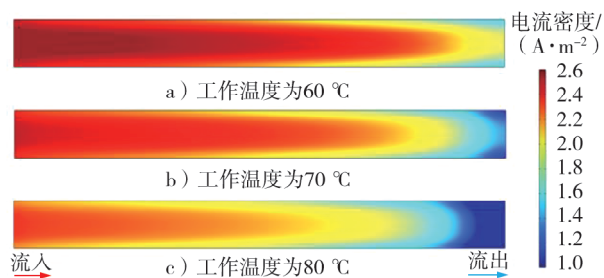


图7 电压为 0.4 V 时不同温度下膜的电流密度

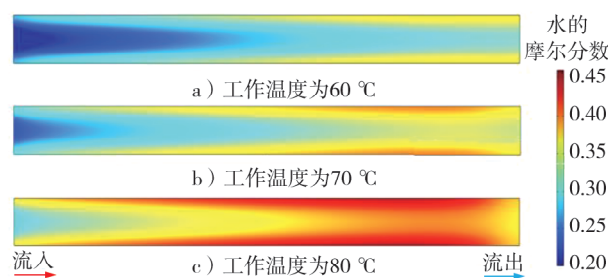


图8 电压为 0.4 V 时不同温度下阴极扩散层中水的摩尔分数

3.2 反应物相对湿度对电池输出性能的影响

在多孔介质孔隙率为 0.5、工作温度为 60 ℃ 条件下,进气相对湿度为 30%、50%、70% 时电池的输出性能如图 9 所示。由图 9 可知:在中高工作电压下,进气相对湿度对电流密度的影响不大,相对湿度为 30% 时电流密度最大,相对湿度为 70% 的电流密度最小;在工作电压为 0.4 V 时,进气相对湿度对电流密度影响显著,相对湿度为 30% 时电流密度最大。

工作电压为 0.4 V 时,不同进气相对湿度下膜的电流密度和阴极扩散层中水的摩尔分数分别如图 10、11 所示。由图 10、11 可知:工作电压为 0.4 V 时,提高进气相对湿度,靠近出口处电流密度下降,这是由于在高进气湿度和高电流密度下,水在电池内部积聚,气体扩散层中水的摩尔分数增大,阻塞反应气体的传输所造成的。

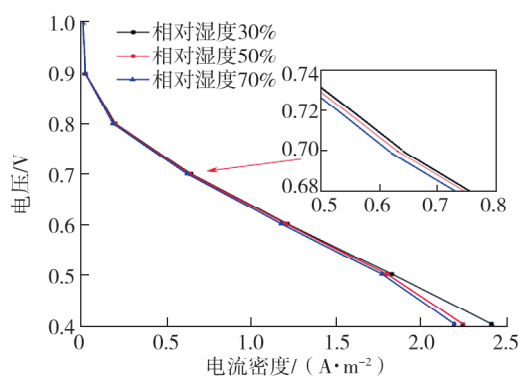


图9 不同进气湿度下电池的输出特性

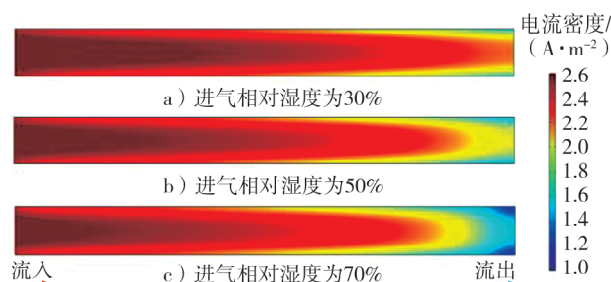


图10 工作电压为 0.4 V 时不同进气湿度下膜的电流密度

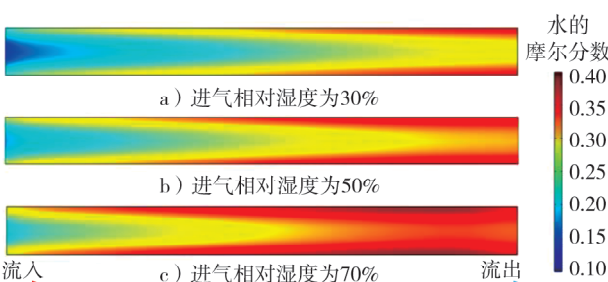


图11 工作电压为 0.4 V 时不同进气湿度下阴极扩散层中水的摩尔分数

3.3 多孔介质孔隙率对电池输出性能的影响

反应物相对湿度为 50%、工作温度为 60 ℃ 条件下,多孔介质孔隙率分别为 0.3、0.5、0.7 的燃料电池输出性能如图 12 所示。由图 12 可知:在工作电压为 0.7~1.0 V 时,多孔介质孔隙率对电流密度基本无影响;工作电压由 0.7 V 降至 0.4 V 的过程中,孔隙率对电流密度的影响作用逐渐增大,在电压为 0.4 V 时,孔隙率对电流密度影响最大。

工作电压为 0.4 V 时,不同多孔介质孔隙率下膜的电流密度和阴极扩散层中氧气的摩尔分数分别如图 13、

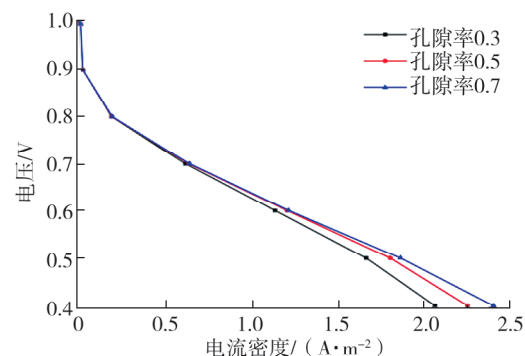


图12 不同孔隙率下电池的输出特性

14所示。由图13、14可知:当孔隙率为0.3时,在扩散层边缘出现低电流密度区域,如图中13a)中的红圈所示区域,这是由于孔隙率小,流道中反应气向扩散层扩散阻力大,扩散层边缘区域氧气浓度不足造成的;随着孔隙率的增大,扩散层中氧气含量增大,电流密度随之增大;在图c)红圈所示区域出现电流密度下降现象,这是由于孔隙率大,入口处反应物充足,反应速率快,反应生成的水在出口处积聚,导致电流密度出现反常。

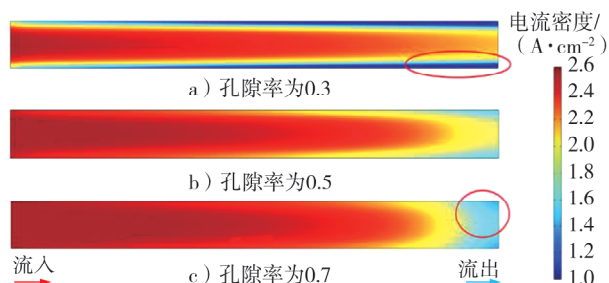


图13 电压为0.4 V时不同孔隙率下膜的电流密度

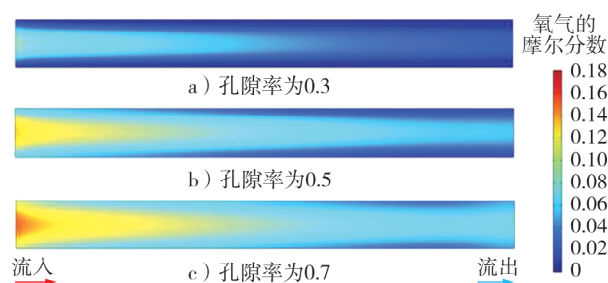


图14 电压为0.4 V时不同孔隙率下阴极扩散层中氧气的摩尔分数

4 结论

综合考虑燃料电池中的导电、传热、流动、传质、电化学反应等物理现象,搭建燃料电池多物理场仿真模型,对不同温度、反应物相对湿度、多孔介质孔隙率下电池的输出性能进行研究。

1) 高工作电压下,温度对燃料电池电流密度的影响不显著;随着工作电压降低,温度对电流密度的影响逐渐显著,原因为较高的温度会加快反应速率,导致扩散层中的水难以及时排出,影响氧气传输,造成电流密度下降。

2) 中、高工作电压下,反应物相对湿度对电流密度影响不显著;在0.4 V时,反应物相对湿度对电流密度影响作用显著,表现为相对湿度降低,电流密度增大。

3) 在高工作电压下,多孔介质孔隙率对电流密度影响不显著;当电压从0.7 V降至0.4 V时,孔隙率对电流密度的影响作用逐渐增大,表现为孔隙率增大,电流密度增大。

参考文献:

- [1] 刘祥荣,蒋宇,张雪霞,等. 质子交换膜燃料电池三维数值仿真研究综述[J]. 中国电机工程学报,2021,41(21): 7352-7370.
- [2] 徐腊梅,肖金生,潘牧,等. 基于电化学模型的 PEM 燃料电池建模与仿真[J]. 武汉理工大学学报(交通科学与工程版),2008(5):933-936.
- [3] 高建华,刘永峰,裴普成,等. 温度波动对质子交换膜燃料电池的影响[J]. 可再生能源,2017,35(8):1150-1155.
- [4] 李奇,陈维荣,贾俊波,等. 一种改进的质子交换膜燃料电池动态建模[J]. 系统仿真学报,2009,21(12):3588-3591.
- [5] 王振,康兴娜,韩吉田,等. 质子交换膜燃料电池动态特性仿真[J]. 山东大学学报(工学版),2008(5):50-56.
- [6] 刘训良,温治,陶文铨,等. 直流通 PEMFC 的综合三维数学模型及其性能模拟[J]. 沈阳建筑大学学报(自然科学版),2008(2):306-310.
- [7] 王楠,袁弘勋,周苏. 质子交换膜燃料电池阴极扩散层若干参数仿真研究[J]. 汽车工程学报,2014,4(4):285-291.
- [8] 赵永豪,袁伟,周飞鲲,等. 基于双重强化传质流道的 PEMFC 性能研究[J]. 电源技术,2022,46(12):1433-1437.
- [9] 张馨予. 质子交换膜燃料电池多物理场数值模拟研究[D]. 长春:吉林建筑大学,2016.
- [10] 刘小波. 质子交换膜燃料电池热分布及性能研究[D]. 重庆:重庆理工大学,2019.
- [11] 钱彩霞. 高温质子交换膜燃料电池的模拟与优化[D]. 武汉:武汉理工大学,2010.
- [12] 姬峰,郑博文,罗若尹,等. 高温质子交换膜燃料电池电堆稳定性分析与优化[J]. 化工进展,2022,41(10): 5325-5331.

[13] 宋佳桐. 高温高压下质子交换膜燃料电池的数值模拟研究[D]. 武汉:华中科技大学,2022.

[14] 官镇. 基于多物理场的氢燃料电池极板优化设计[D]. 济南:山东大学,2024.

The impact of operating conditions on the performance of proton exchange membrane fuel cells

ZHAO Ming, LI Guoxiang, WANG Guihua, BAI Shuzhan^{*}

School of Energy and Power Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China

Abstract: Using computational fluid dynamics and finite element methods, a multiphysics simulation model of proton exchange membrane fuel cells (PEMFC) is established to verify the rationality of the model, with a focus on analyzing the effects of operating temperature, relative humidity of reactants, and porosity of porous media on the performance of the fuel cell. The research results indicate that the simulation model is in line with reality and has high accuracy; Under high operating voltage, the working temperature, relative humidity of reactants, and porosity of porous media have little effect on the output performance of PEMFC; At low operating voltage, the output performance of PEMFC is better when the operating temperature is low, the relative humidity of reactants is low, and the porosity of porous media is high. This study can provide reference for the operation strategy of fuel cells.

Keywords: PEMFC; numerical simulation; multiphysics; polarization curve

(责任编辑:臧发业)

(上接第8页)

Modal analysis of nonlinear collision data based on generalized transfer function

QIN Zhenshan¹, LU Shihao¹, RUAN Junwu¹, LI Siyuan^{2*}, SONG Hanwen^{3*}

1. Engineering R&D Institute, Guangxi Yuchai Machinery Co., Ltd., Yulin 537000, China;

2. School of Energy and Power Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China;

3. School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China

Abstract: In order to investigate the collision phenomenon caused by the gap between various parts of the mechanical system, a collision test with sinusoidal excitation is designed for an unilaterally constrained cantilever beam. The generalized transfer function is constructed based on the measured acceleration response of each discrete point of the cantilever beam and the collision internal force. Meanwhile, the modal distributions of the generalized transfer function under chaotic response and cyclic response are analyzed by simulation. The results show that the transfer function under chaotic response contains accurate modal frequency information, and this generalized transfer function is independent of the amplitude of the horizontal excitation to the system. Comparing the identified modal parameters modeled after the ERA-NExT method with the cantilever beam modal shapes, it is found that the modal shapes obtained from the chaotic response are in overall consistency with those of the cantilever beam model, and the first four orders of the modal shapes are in good accordance with each other.

Keywords: nonlinear vibration; cantilever beam; unilateral collision; chaotic motion; modal identification

(责任编辑:刘丽君)