

ICSC 2019

Core Competence Enhanced by MBD



IDAJ CAE Solution Conference

质子交换膜燃料电池数值模拟及其评价

IDAJ-China
技术部 涂海涛

目录

- PEMFC基本介绍
- PEMFC的性能
- PEMFC的三维模拟工具
- PEMFC三维模拟结果的评价
- PEMFC三维建模需要注意的问题

目录

■ PEMFC基本介绍

■ PEMFC的性能

■ PEMFC的三维模拟工具

■ PEMFC三维模拟结果的评价

■ PEMFC三维建模需要注意的问题

质子交换膜燃料电池及其特点

■使用固体聚合物（质子交换膜）作为电解质

- PEMFC, Proton Exchange Membrane Fuel Cell

- 属于第五代燃料电池

■特点

- 工作温度低（ $<100^{\circ}\text{C}$ ），可低温快速启动

- 不使用液体和腐蚀性电解质

- 能量密度高

- 结构简单

- 环境友好，排放物为 H_2O

■适用于便携式应用和车辆应用

PEMFC的结构及工作原理

■ 结构：膜电极组件(MEA) + 气体流道 + 冷却流道 + 双极板

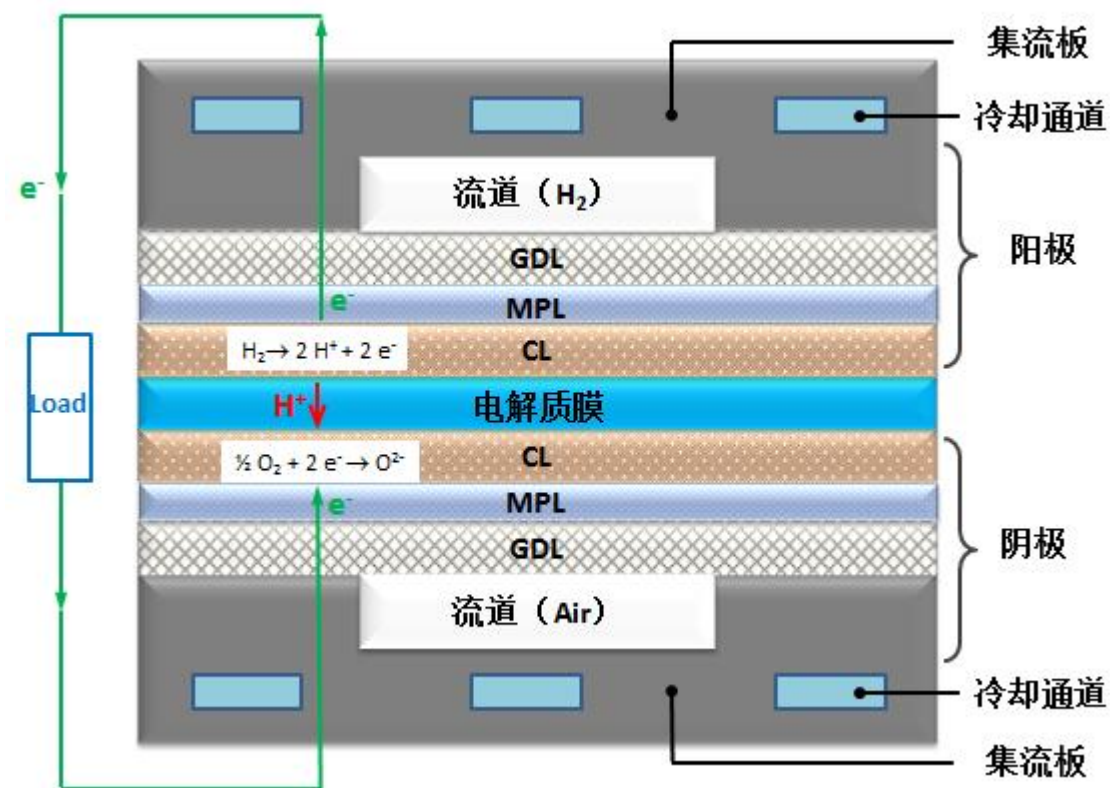
■ 膜电极组件：扩散层、微孔层、催化层、质子膜

■ 三步反应：

阳极： $\text{H}_2 \rightarrow 2 \text{H}^+ + 2 \text{e}^-$

阴极： $\frac{1}{2} \text{O}_2 + 2 \text{e}^- \rightarrow \text{O}^{2-}$

总体： $2 \text{H}^+ + \text{O}^{2-} \rightarrow \text{H}_2\text{O}$



完整的PEMFC单电池

■膜电极组件(MEA)

- PEMFC的核心

■双极板/流场板

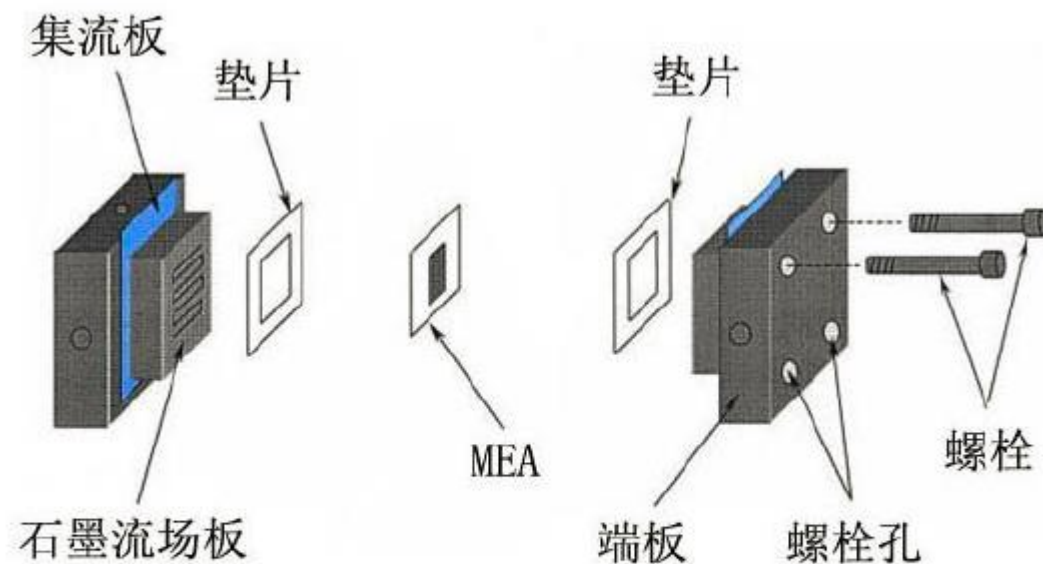
- 电子通道
- 燃料和氧化剂通道

■集流板

- 收集电流(电子)

■其它

- 垫片、螺栓等



完整的 PEMFC 单电池构成

PEMFC的膜电极组件(MEA)-1

■ 质子交换膜(PEM) - 选择透过性膜

- 厚度10-200 μm
- 提供质子和水的通道
- 隔离燃料和氧化剂
- 支撑催化层
- 全氟磺酸型膜目前最为实用(如杜邦公司的Nafion系列膜等)

■ 催化层(CL)

- 包含催化剂、电子导电介质和质子导电介质
- 多孔结构, 提供反应气体和液态水传递通道
- 最大程度决定PEMFC的性能
- 憎水/亲水, 厚层(几十微米)/薄层(几微米)
- Pt(粒径为2~5nm)的利用率是关键

PEMFC的膜电极组件(MEA)-2

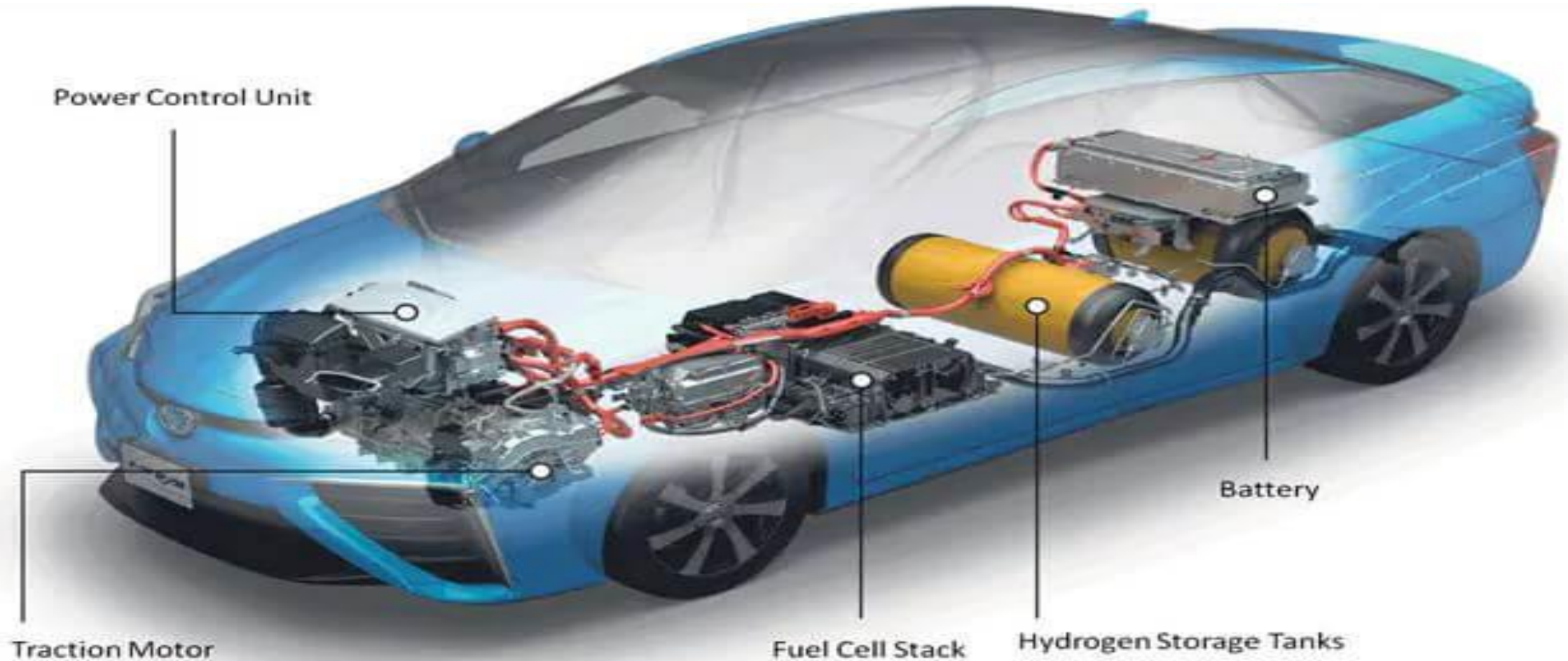
■微孔层(MPL)

- 介于催化层和扩散层之间，孔尺寸比GDL小，比GDL憎水性更强
- 多孔结构，提供反应气体和液态水传递通道
- 提供电子通道
- 支撑催化层
- 强化液态水传递

■扩散层(GDL)

- 厚度50-200 μm
- 跟双极板/流场板接触
- 多孔结构，提供反应气体和液态水传递通道
- 提供电子通道
- 支撑催化层（无MPL时）

PEMFC的膜电极、单池、电堆及系统展示



目录

- PEMFC基本介绍
- **PEMFC的性能**
- PEMFC的三维模拟工具
- PEMFC三维模拟结果的评价
- PEMFC三维建模需要注意的问题

PEMFC的输出性能-极化曲线

■燃料窜漏

- 开路电压降低

■活化极化

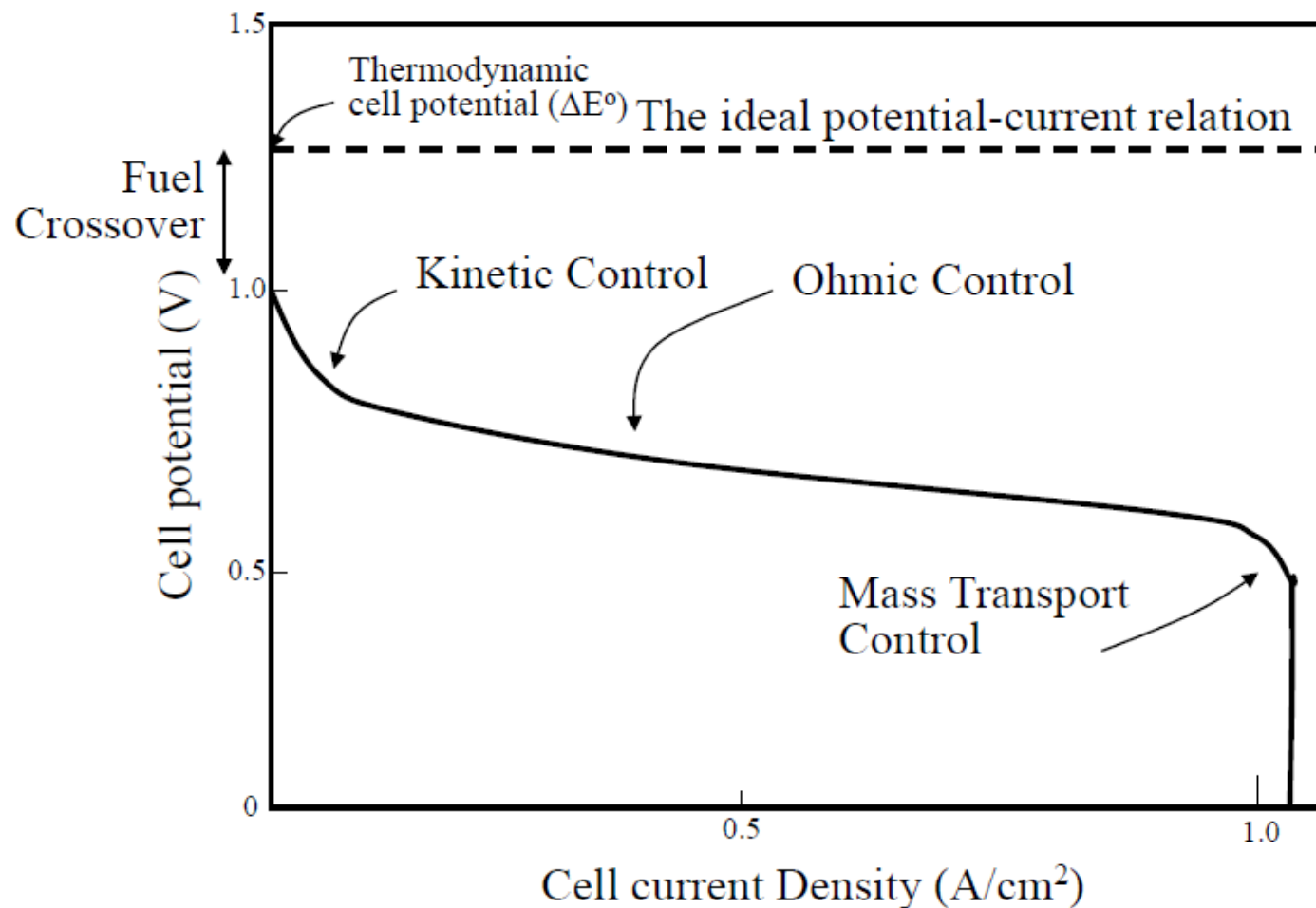
- 电极实际电势跟可逆电势的差
- 电极反应的驱动力
- 绝对值越小，电极反应越容易进行

■欧姆极化

- 欧姆电阻引起的电压损失

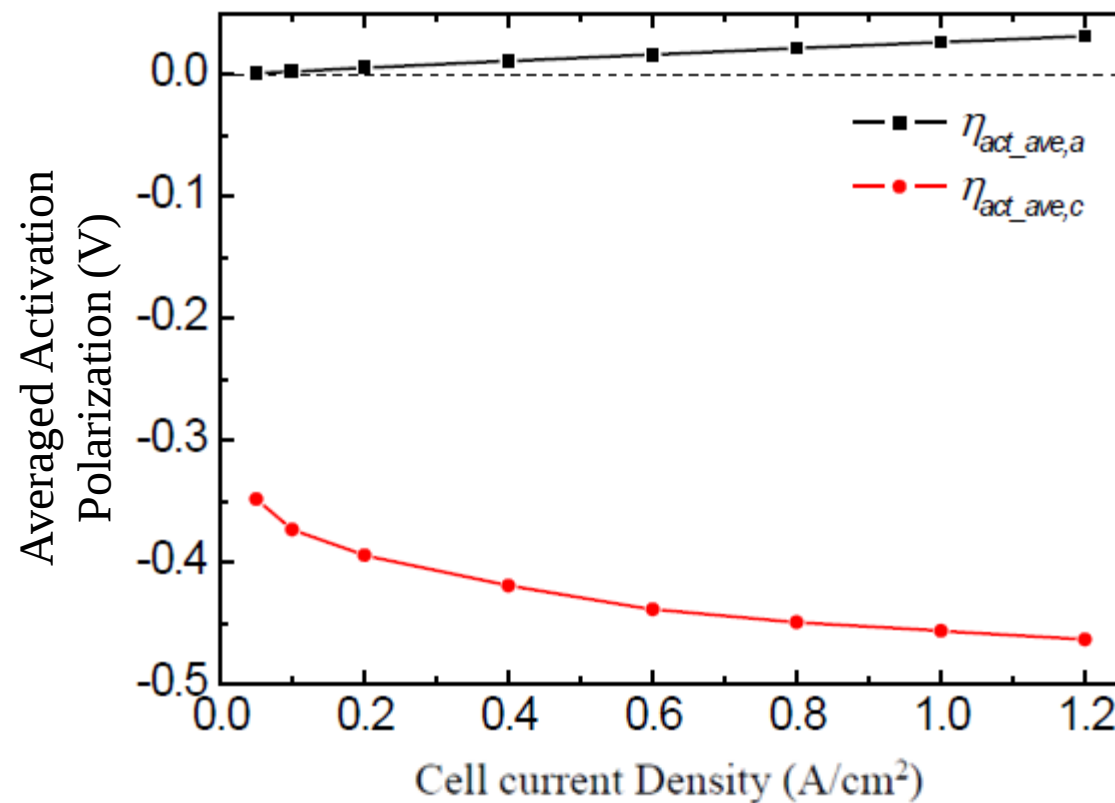
■浓差极化

- 反应气体传递的速率 < 电化学反应的速率



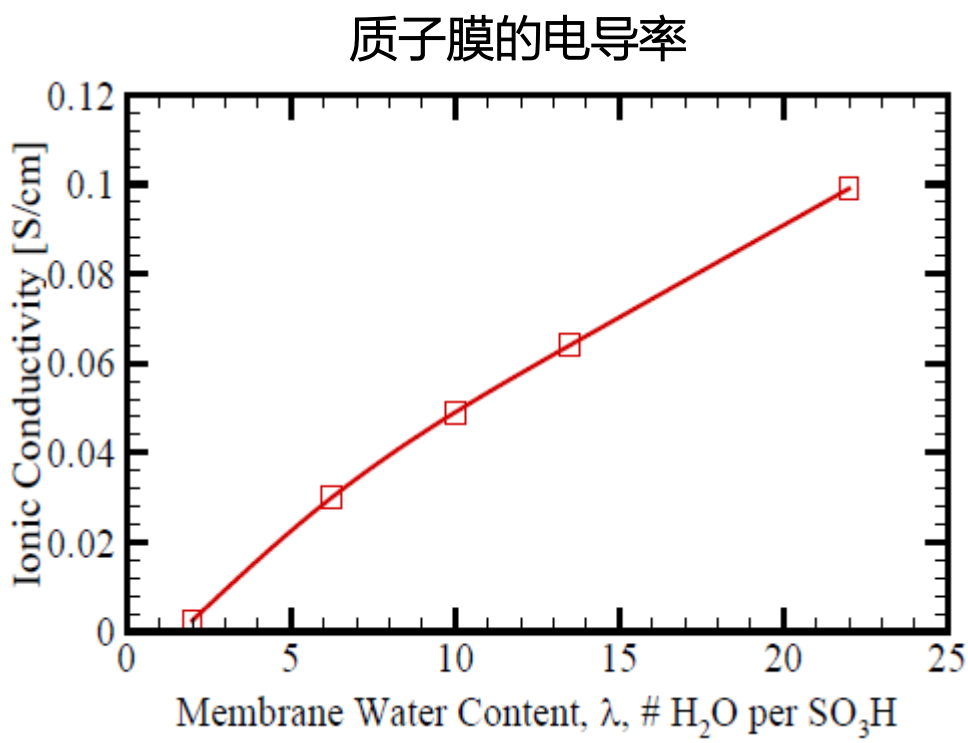
影响PEMFC性能的因素-活化极化

- 阳极活化极化的绝对值始终比较小
- 阴极活化极化的绝对值比较大



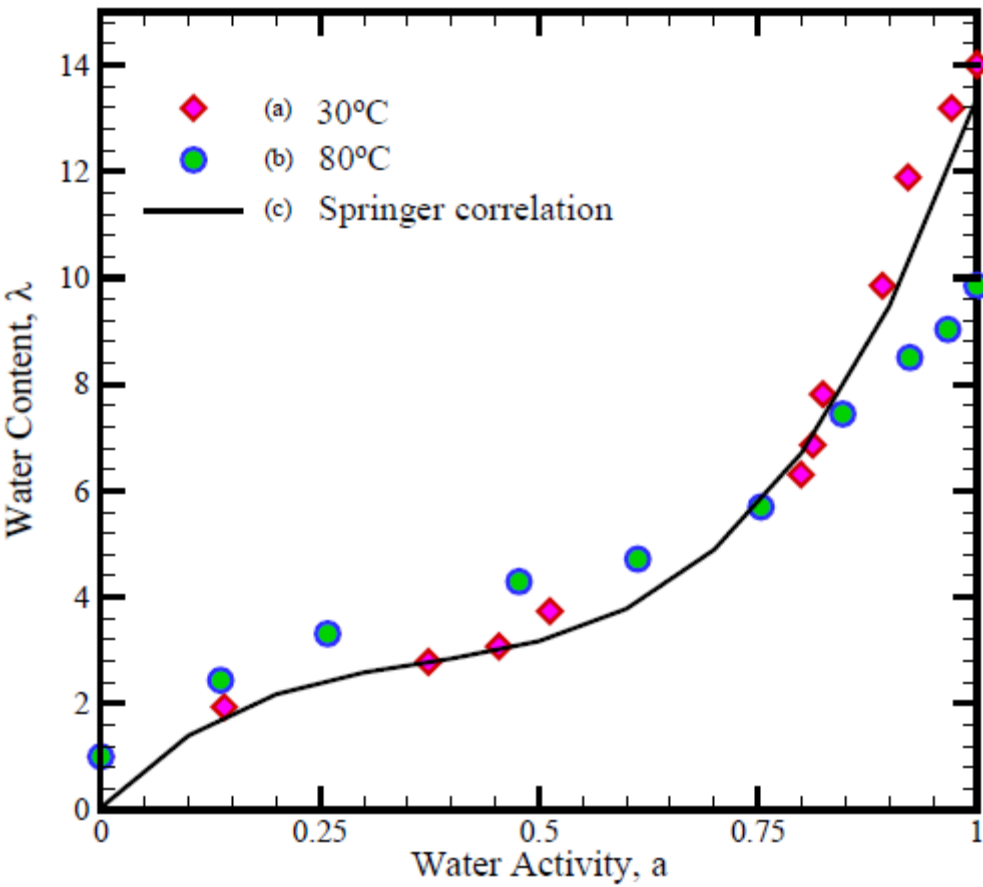
影响PEMFC性能的因素-欧姆极化

■ 质子膜水含量影响质子膜电导率



水管理很重要

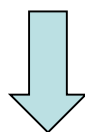
质子膜的吸水性



影响PEMFC性能的因素-浓差极化

■影响反应气体传递的因素

- 多孔介质孔隙率和渗透率的影响
- 液态水含量影响孔隙率→决定渗透率
- 多孔介质内液态水的及时排出很重要



水管理很重要

影响PEMFC性能的因素-催化层的结构

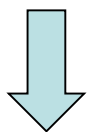
■ 比表面积(ECSA)

- 电化学反应面积/体积

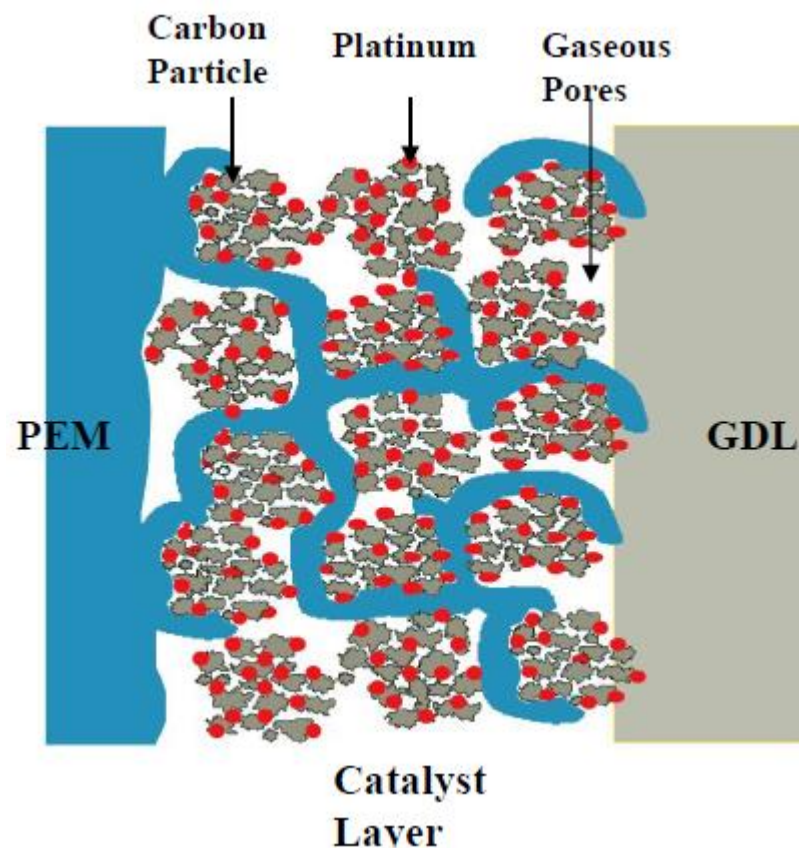
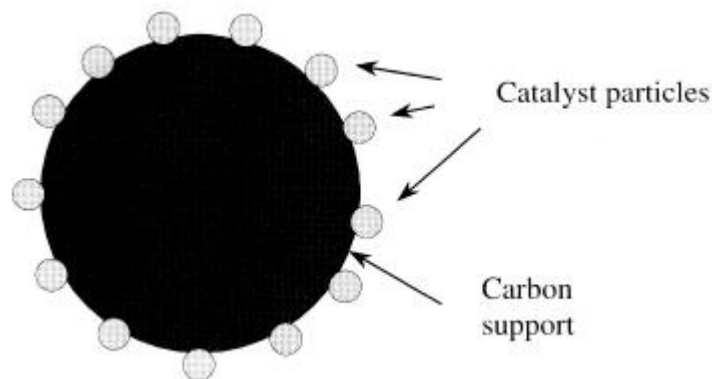
■ 三相界面

- 气体
- 液体
- 电解质

■ 及时排出液态水，保证反应通道



水管理很重要



PEMFC的水管理和热管理

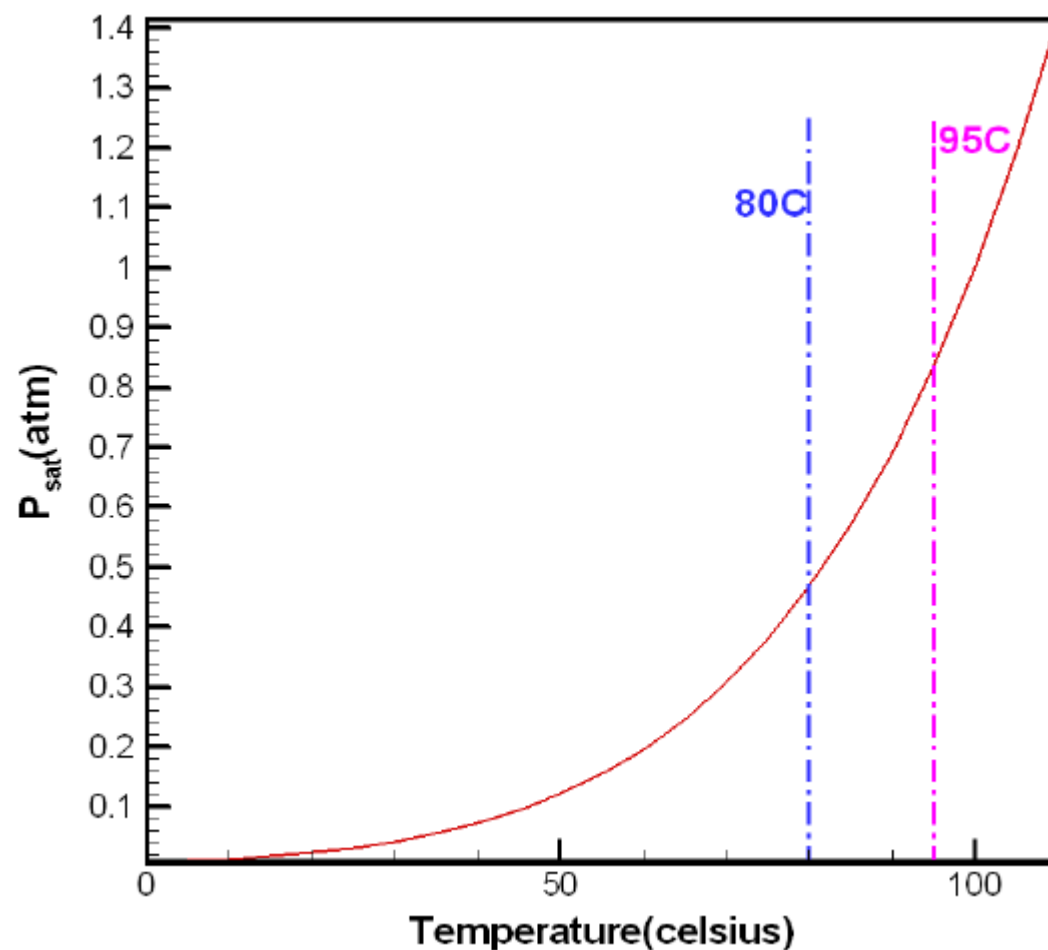
■原则

- 保证多孔介质内液态水的排出
- 保证质子膜的水含量

■影响因素

- 多孔介质的物理特性，如孔隙率、渗透率和憎水性等
- 饱和蒸气压

■水管理和热管理不可分割



目录

- PEMFC基本介绍
- PEMFC的性能
- **PEMFC的三维模拟工具**
- PEMFC三维模拟结果的评价
- PEMFC三维建模需要注意的问题

PEMFC中的基本物理化学过程

■催化层内的电化学反应

- 三相（固相-传导电子、电解质相-传导质子、气相-传递反应气体）界面发生反应

■流道及多孔介质中的气体组分传递

■流道及多孔介质中水的相变及液态水传递

■电解质（质子膜和催化层）内的质子传递和水传递

■导电介质（碳、集流板）内的电子传递

■电池内的热量传递

PEMFC开发中的问题总结

- PEMFC工作的关键，在于保证电子、质子和反应气体通道的畅通

- 质子通道

- 质子通过电解质传递，而质子电导率跟电解质中的水含量相关 → 水管理

- 反应气体通道

- 反应气体通过流道和多孔介质到达催化层的三相界面

- 液态水的生成和传递，可能导致孔隙被堵塞 → 水管理

- 多孔介质的属性，如孔隙率、渗透率和憎水性等对水传递的影响 → 水管理

- 电子通道

- 固体导电率、接触电阻等

- 热的传递影响以上过程，从而影响电池性能 → 热管理

PEMFC三维模拟的意义

■实验研究的限制

- PEMFC中的物理化学过程非常微观。催化层只有几微米或十几微米厚度，扩散层只有一两百微米，哪怕是特征尺度最大的流道，其截面一般也在1mm*1mm左右
- 实验需要用到昂贵的仪器，而且很多只能做电池在非工作状态下的分析
- 即便如此，有些参数及过程的实验测量，仍是很难或不能实现的

■ 模拟可以得到实验没法得到的三维细节以及各参数的影响规律，为电池设计和工况优化等提供指导

IDAJ的三维仿真工具- FLUENT

■ FLUENT具有PEMFC专用模块

■ 特点

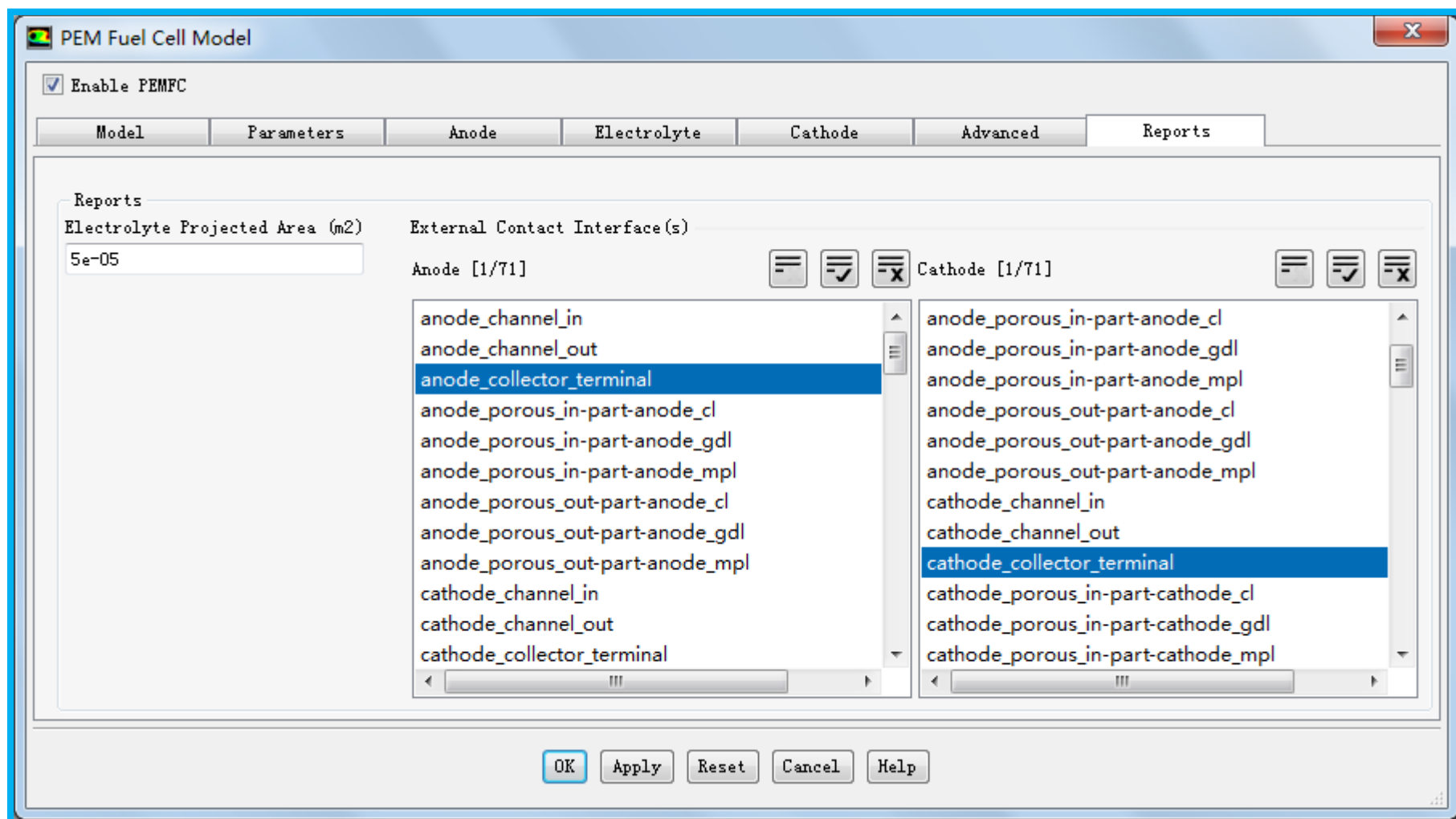
- 有专用GUI，使用方便，设定过程相对简单

■ 物理模型

- 电化学反应动力学
- 质子和电子传递
- 气态组分传递
- 液态水传递
- 动量、热量传递

IDAJ的三维仿真工具- FLUENT

reports设置



IDAJ的三维仿真工具- M2

- 最专业最全面的燃料电池设计分析工具
- 由美国 EC Power 公司和宾夕法尼亚州立大学的王朝阳教授团队开发
 - 王教授团队从事燃料电池的研究工作20余年，在业界具有广泛的知名度
 - EC Power公司由王朝阳教授创建，总部位于宾夕法尼亚州立大学，为汽车电气化、可再生能源存储以及电网管理等提供燃料电池和可充电电池等电化学能源系统的设计和开发
 - M2软件是专门针对质子交换膜燃料电池（PEMFC）开发的模拟工具
- M2软件一直作为丰田、本田、日产和GM等汽车厂商的独家专用程序使用
- 今年M2软件首次进入国内市场

M2跟Fluent中PEMFC模块的区别

■ M2软件覆盖FLUENT的PEMFC模块功能，除此之外还有以下特点：

- PEMFC中最全面的两相传递和电化学反应处理
- 是唯一可用于真实电堆工况模拟的工具
- 是可以预测电堆实际工作中普遍存在的干-湿过渡的唯一代码
- 可进行质子膜和催化剂的老化模拟
- 模型经过广泛实验验证

■ M2的模型

- GDL/流道界面的水覆盖模型
- 流道内的两相流模型-将流道考虑为结构化的多孔介质
- GDL-MPL 饱和度跳跃/连续模型
- H₂、O₂ 和N₂通过质子膜窜漏模型
- 其它

目录

- PEMFC基本介绍
- PEMFC的性能
- PEMFC的三维模拟工具
- **PEMFC三维模拟结果的评价**
- PEMFC三维建模需要注意的问题

PEMFC模拟结果评价的关键点

- 极化曲线-各种物理化学过程的综合体现
- 电流密度分布
- 气体组分浓度分布
- 质子膜水含量
 - 决定质子电导率，影响电池性能；影响膜厚度方向温度梯度，影响膜的寿命
- 温度分布
 - 质子膜温度；GDL的温度影响液态水含量，影响电池性能
- 多孔介质内的液态水饱和度分布
- 流道压降

模拟结果评价案例

■ 单电池信息

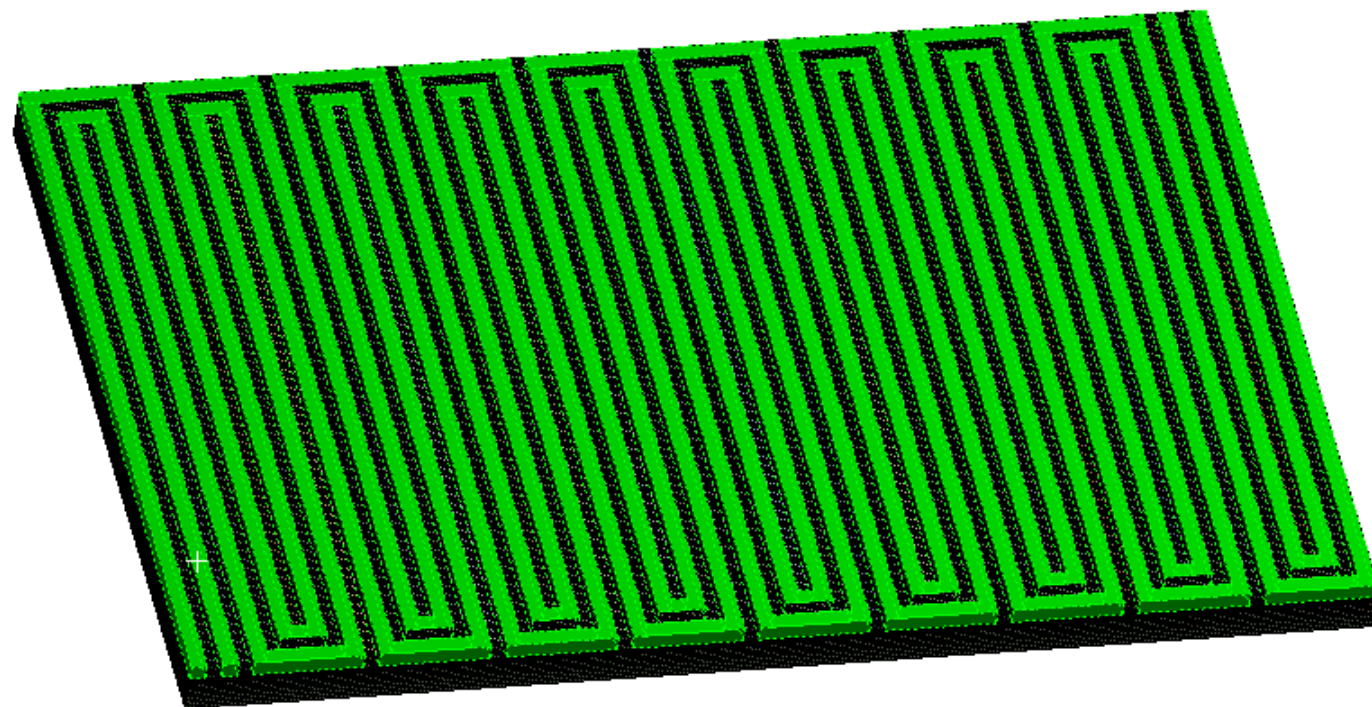
- 双通道蛇形流道
- 单通道截面积: $1\text{mm} \times 1\text{mm}$
- 电极面积: 40cm^2

■ 网格信息

- 网格类型: 全部六面体网格
- 网格数量: 约450万

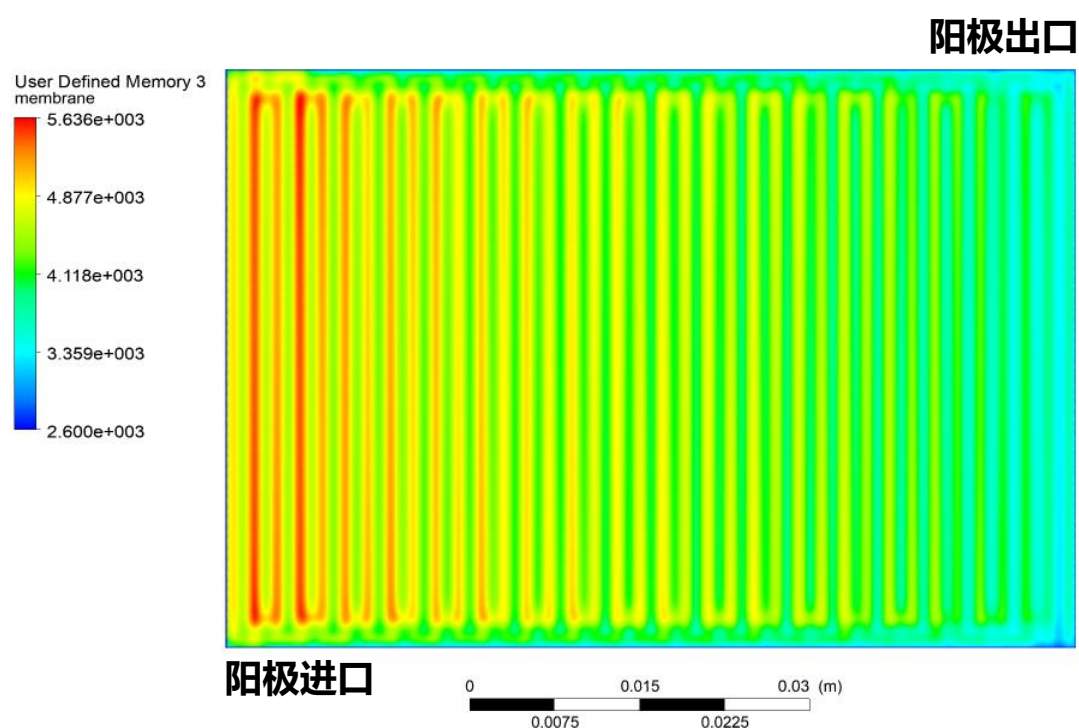
■ 工况信息

- 阴、阳极操作压力: 1.5atm
- 阴、阳极操作温度: 80°C
- 阴、阳极进气100%加湿

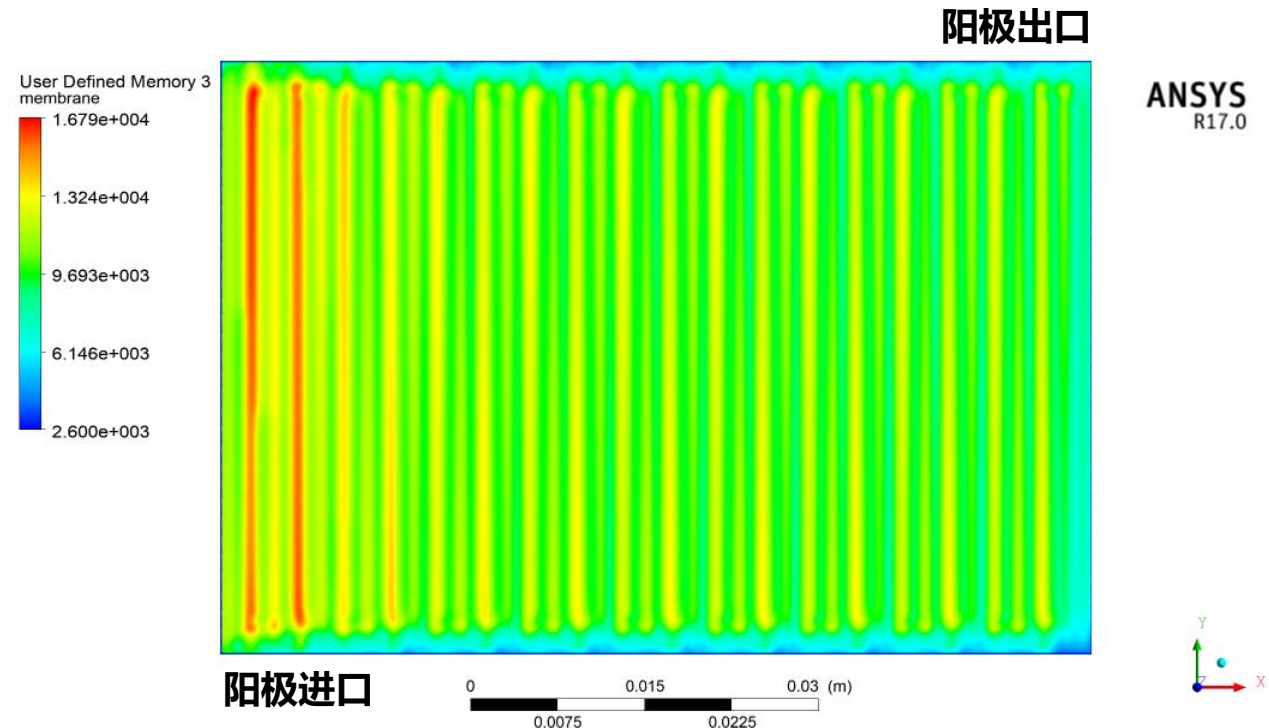


电流密度分布

质子膜中心截面电流密度分布[A/m²]



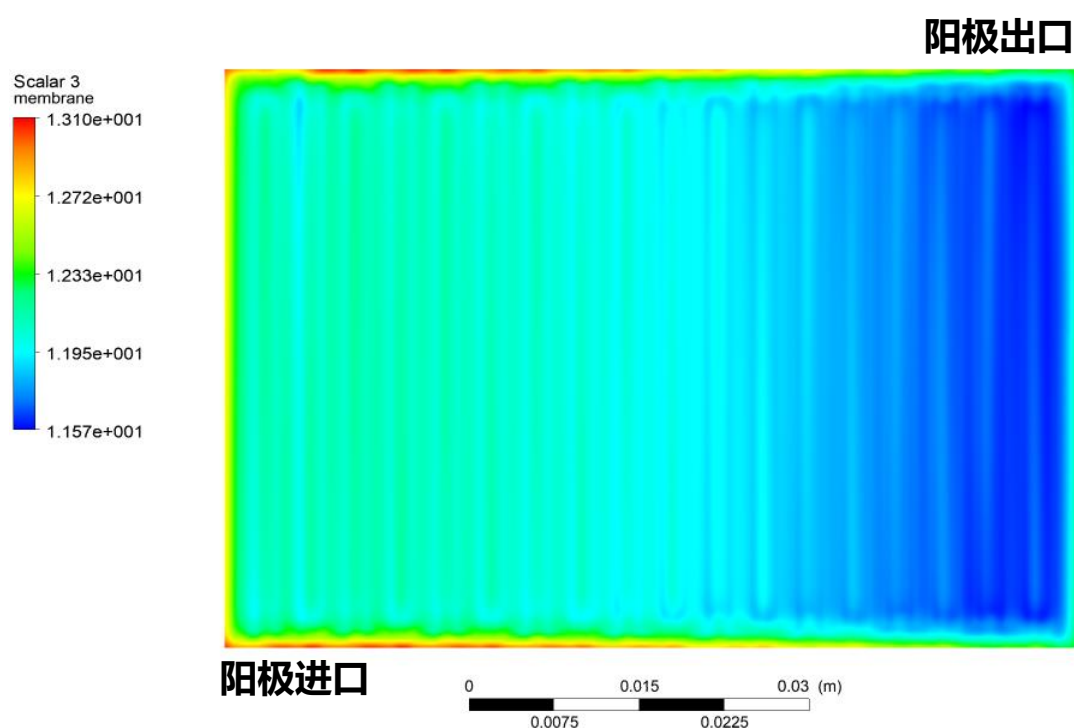
$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$



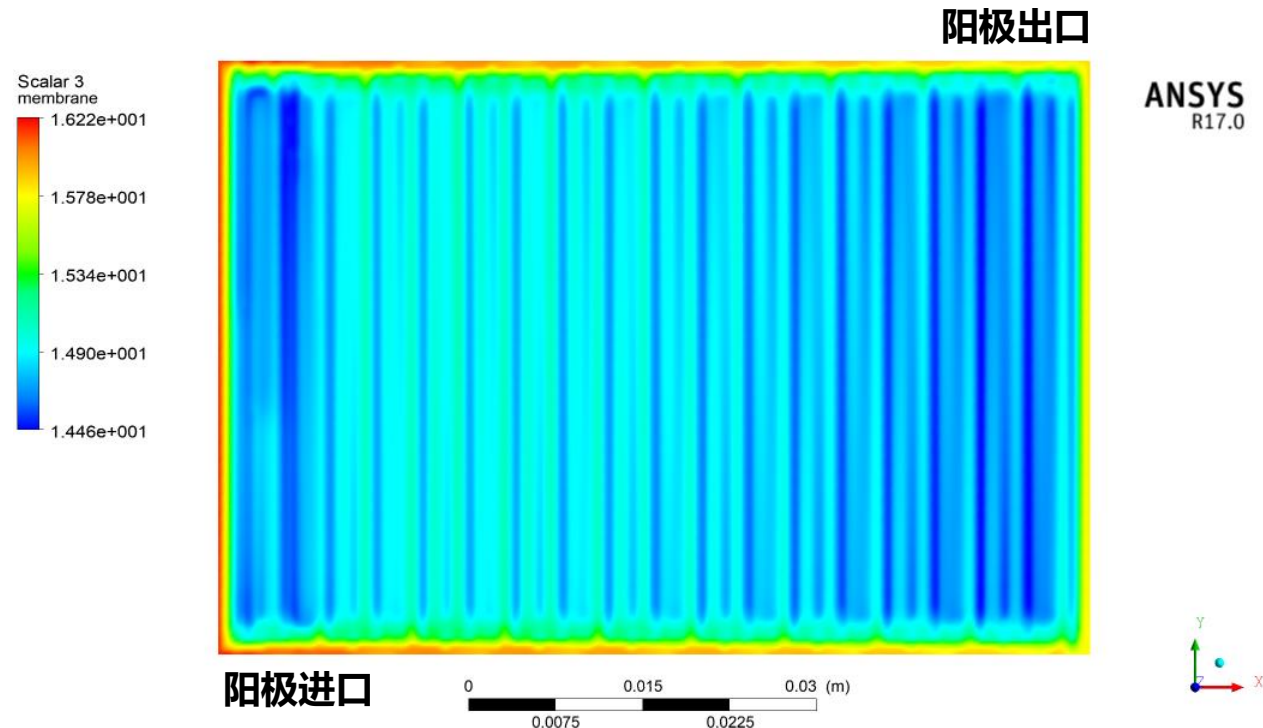
$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$

质子膜内水含量分布

质子膜中心截面水含量分布[-]



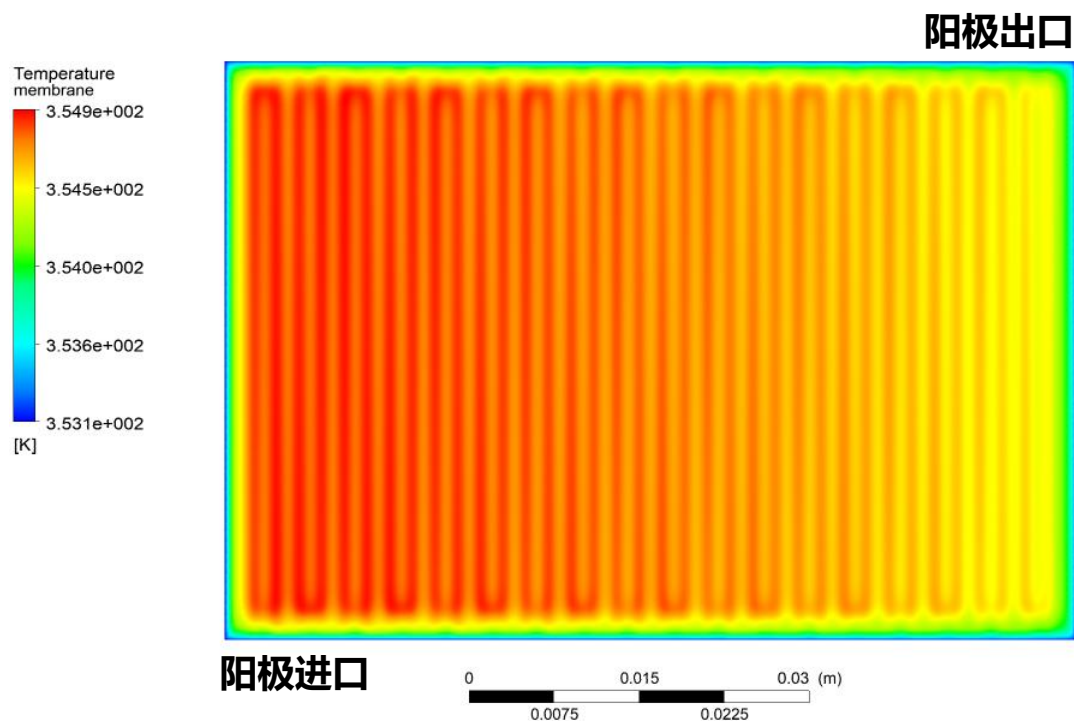
$$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$$



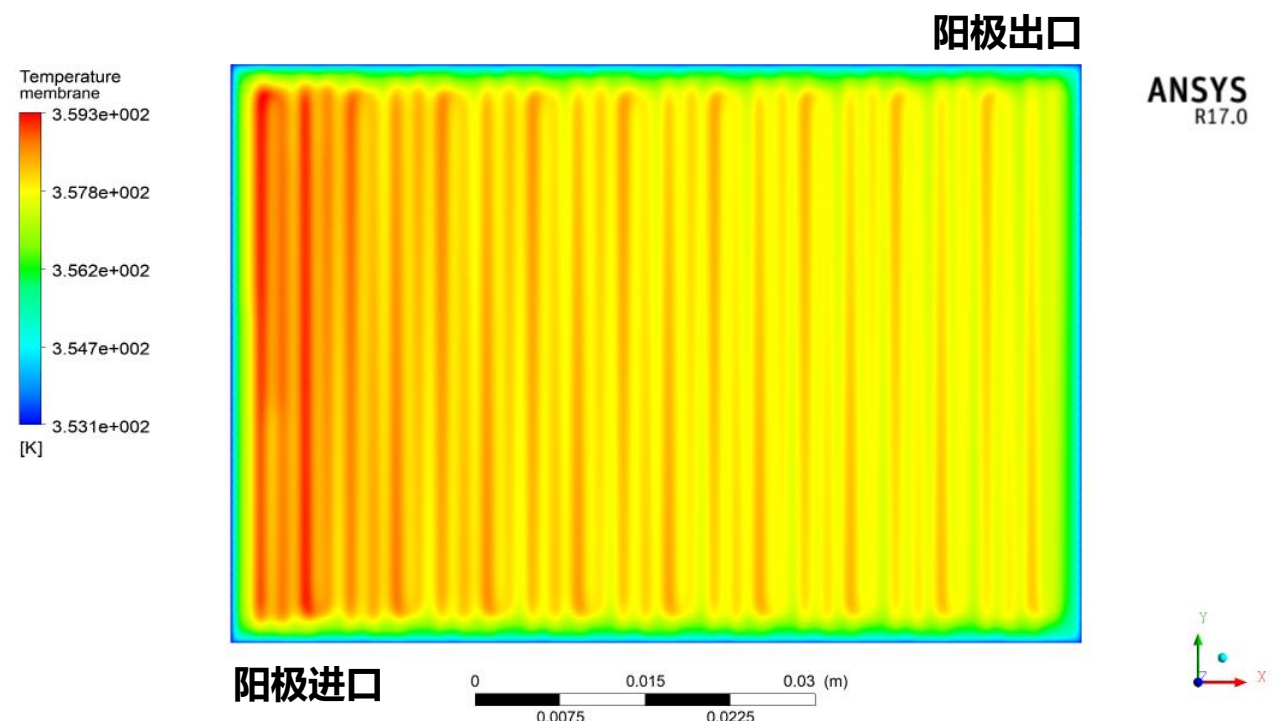
$$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$$

质子膜内温度分布

质子膜中心截面温度分布[K]



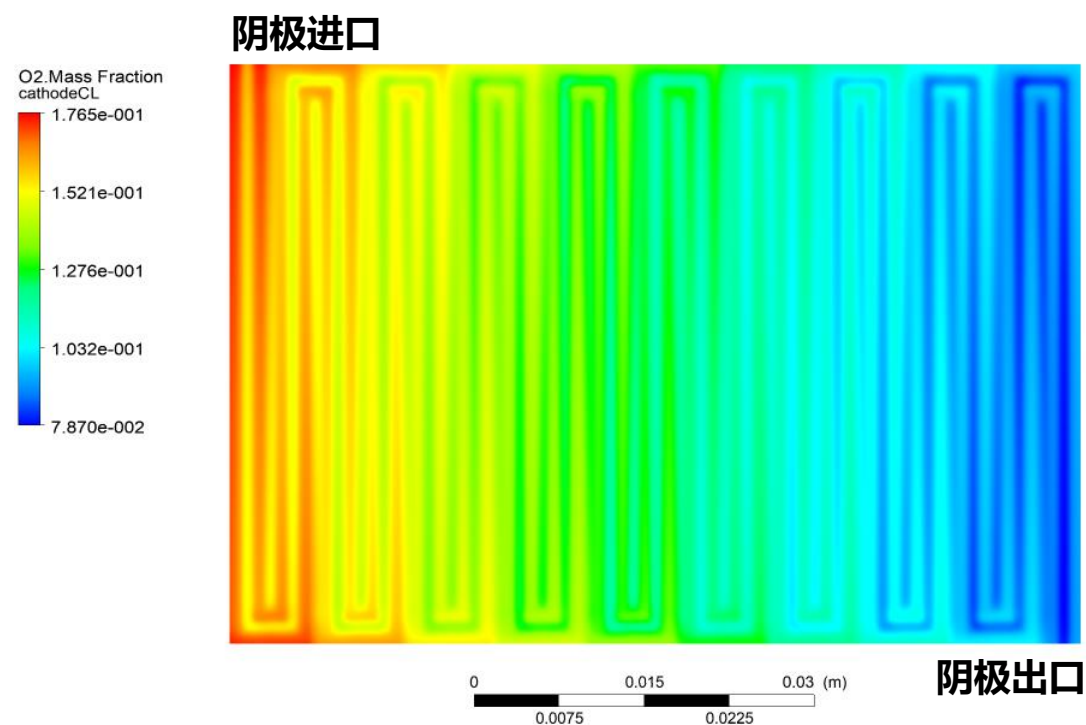
$$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$$



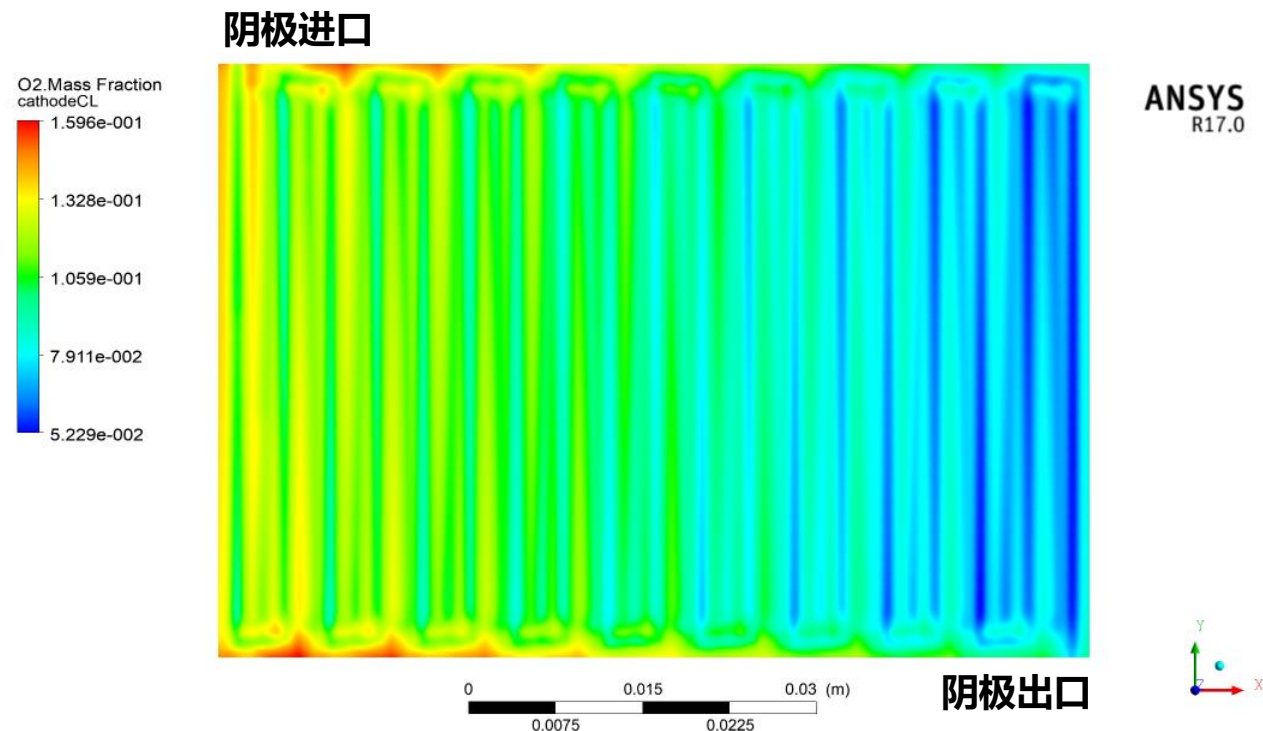
$$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$$

阴极催化层内的O₂含量分布

阴极催化层中心截面O₂质量分数分布[-]



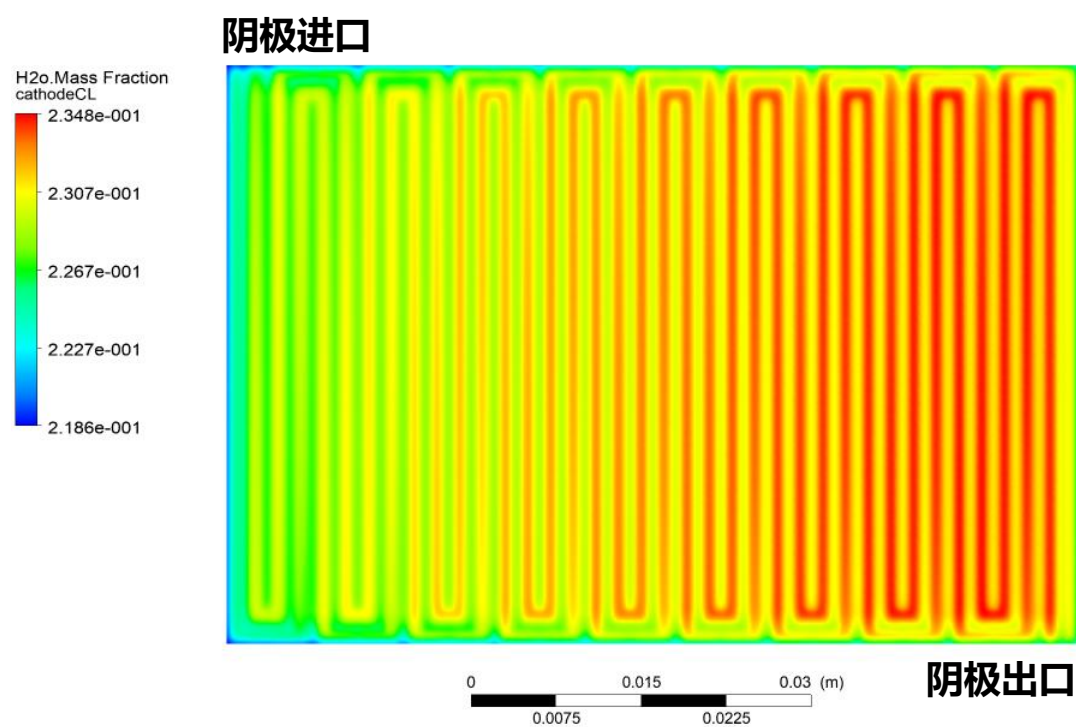
$$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$$



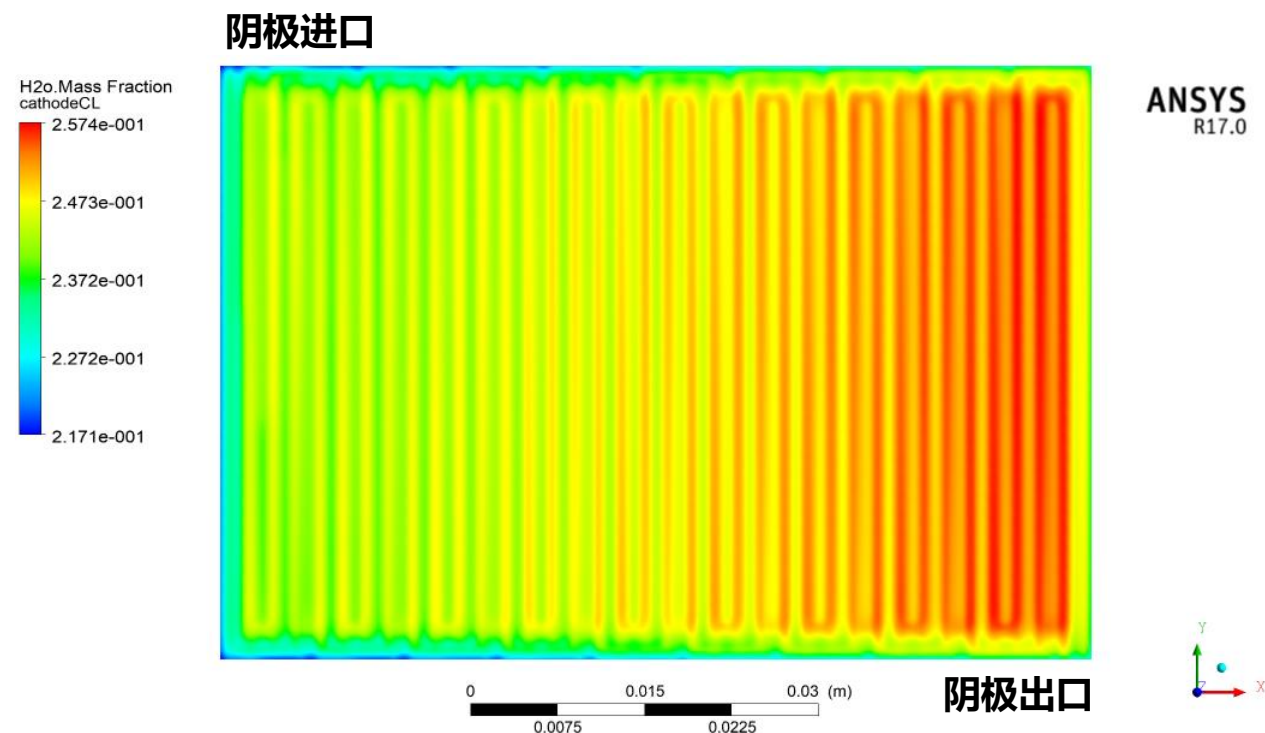
$$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$$

阴极催化层内的水蒸气含量分布

阴极催化层中心截面水蒸气质量分数分布[-]



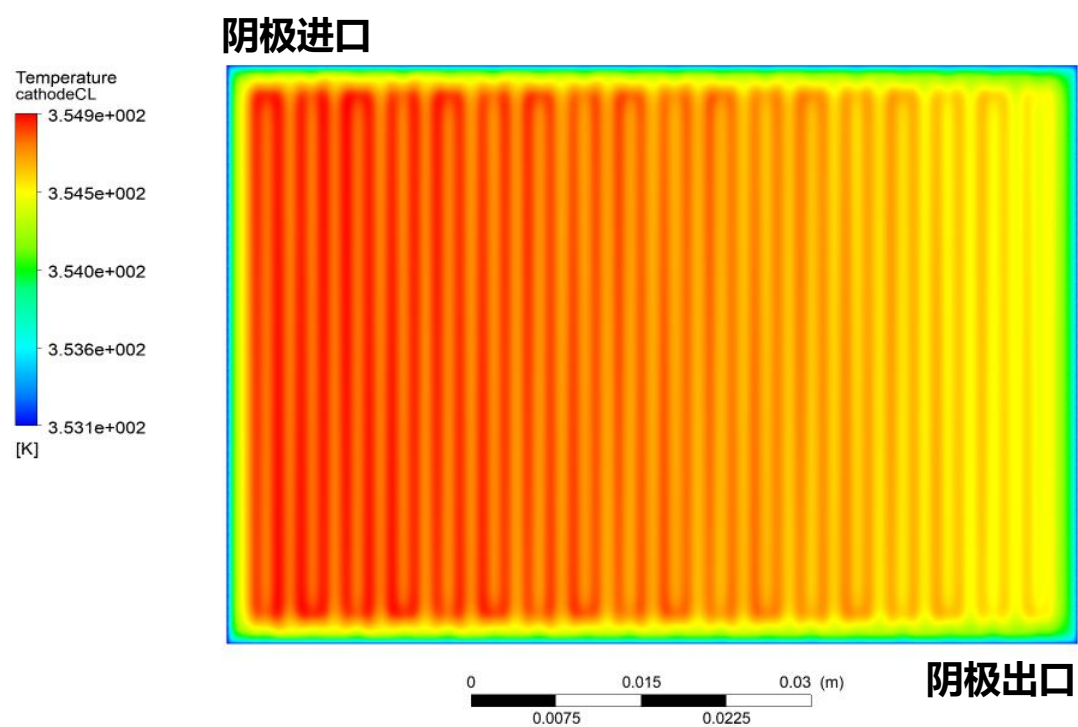
$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$



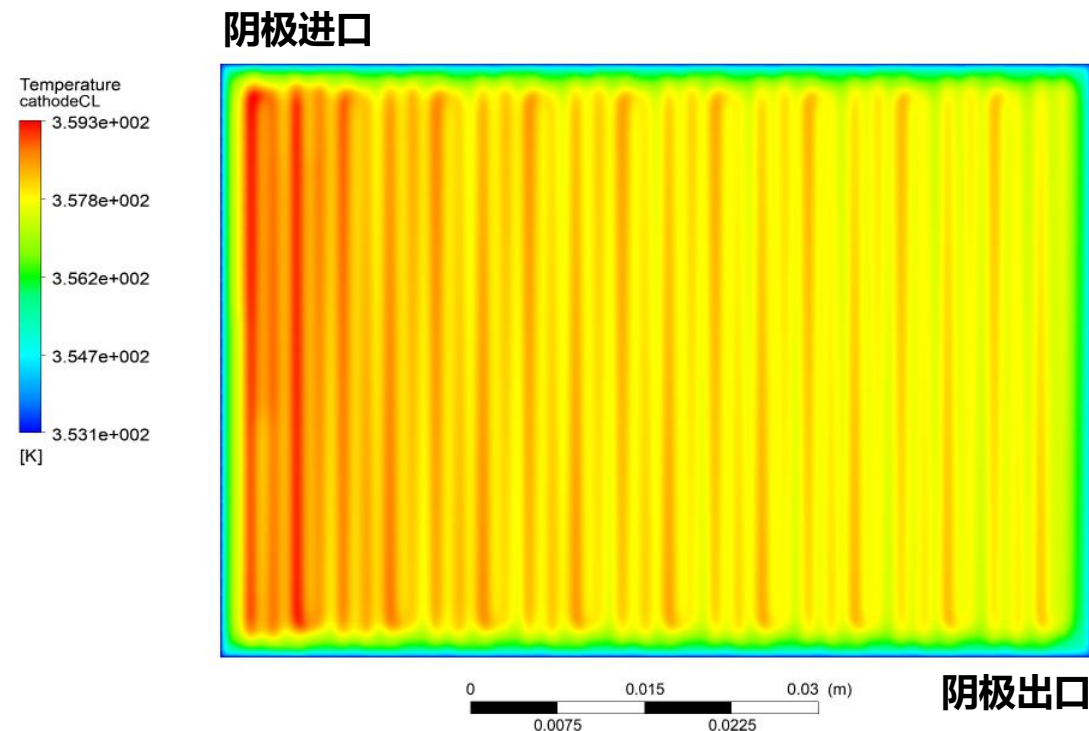
$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$

阴极催化层内的温度分布

阴极催化层中心截面温度分布[K]



$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$



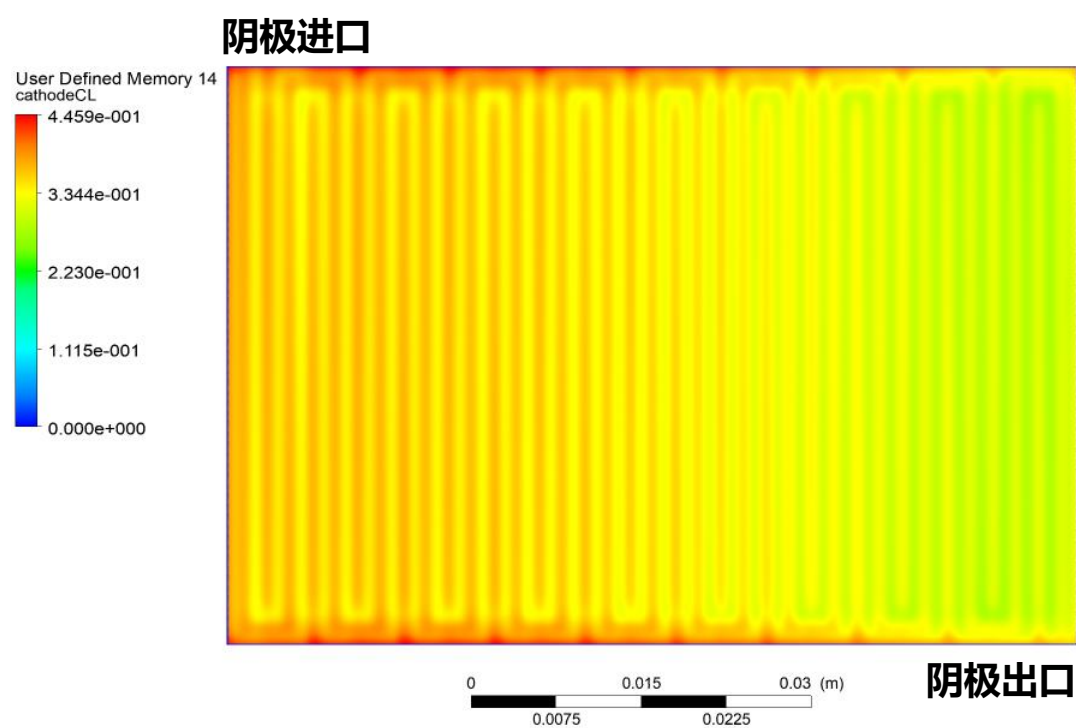
$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$

ANSYS
R17.0

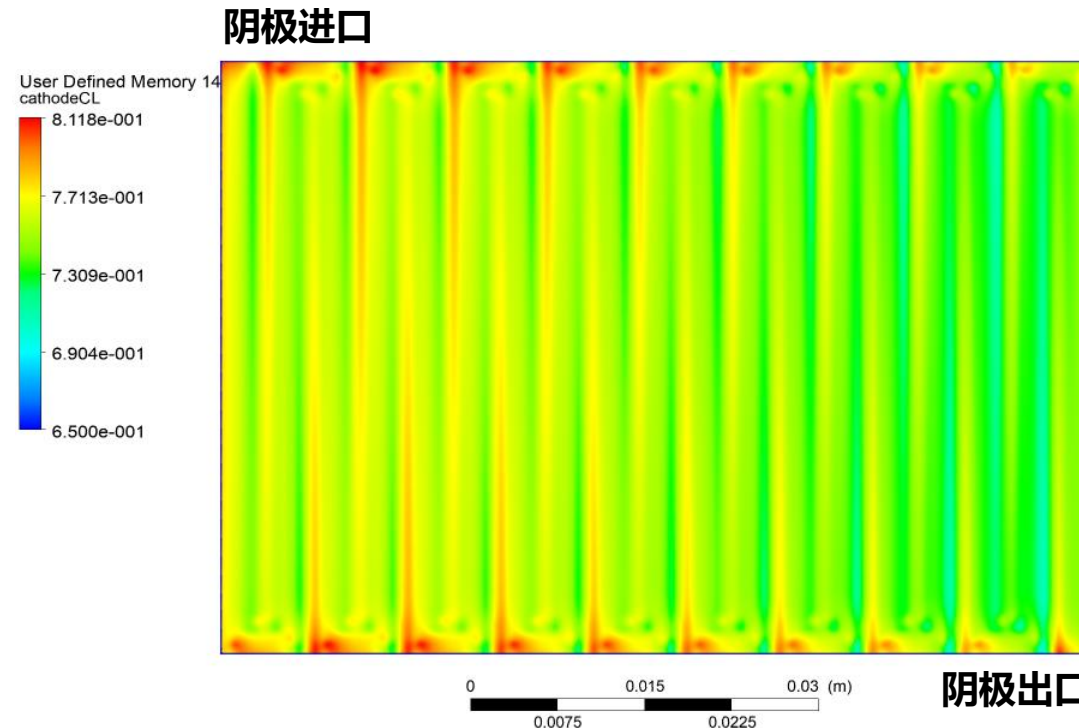


阴极催化层内的液态水分布

阴极催化层中心截面的液态水饱和度分布[-]



$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$



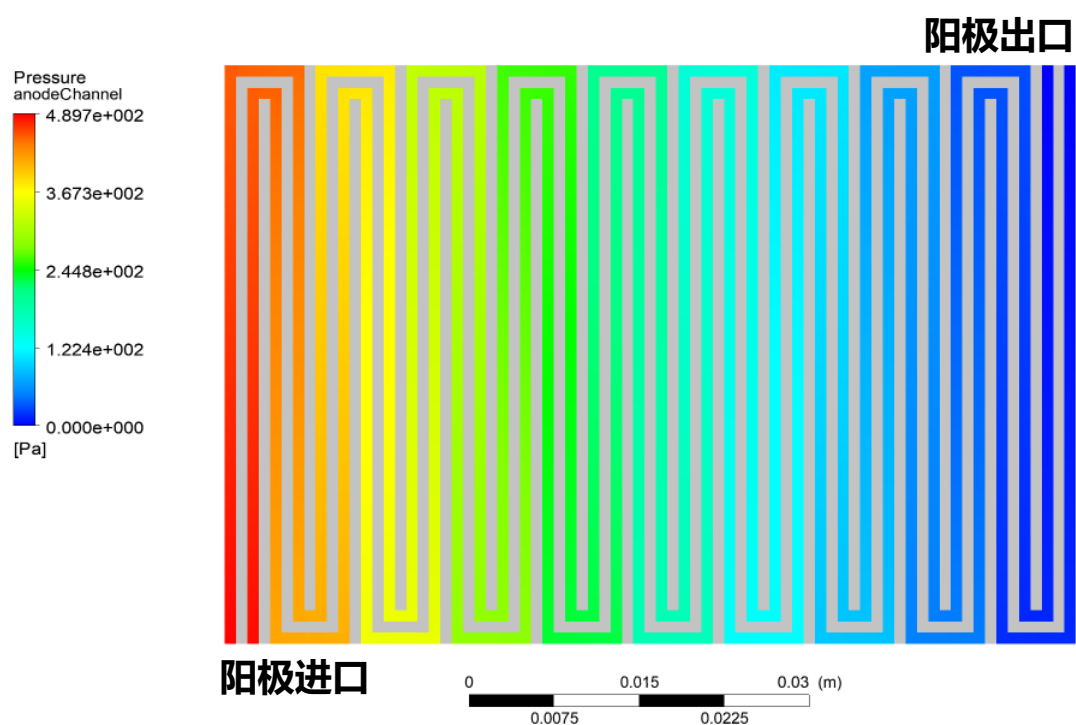
$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$

ANSYS
R17.0

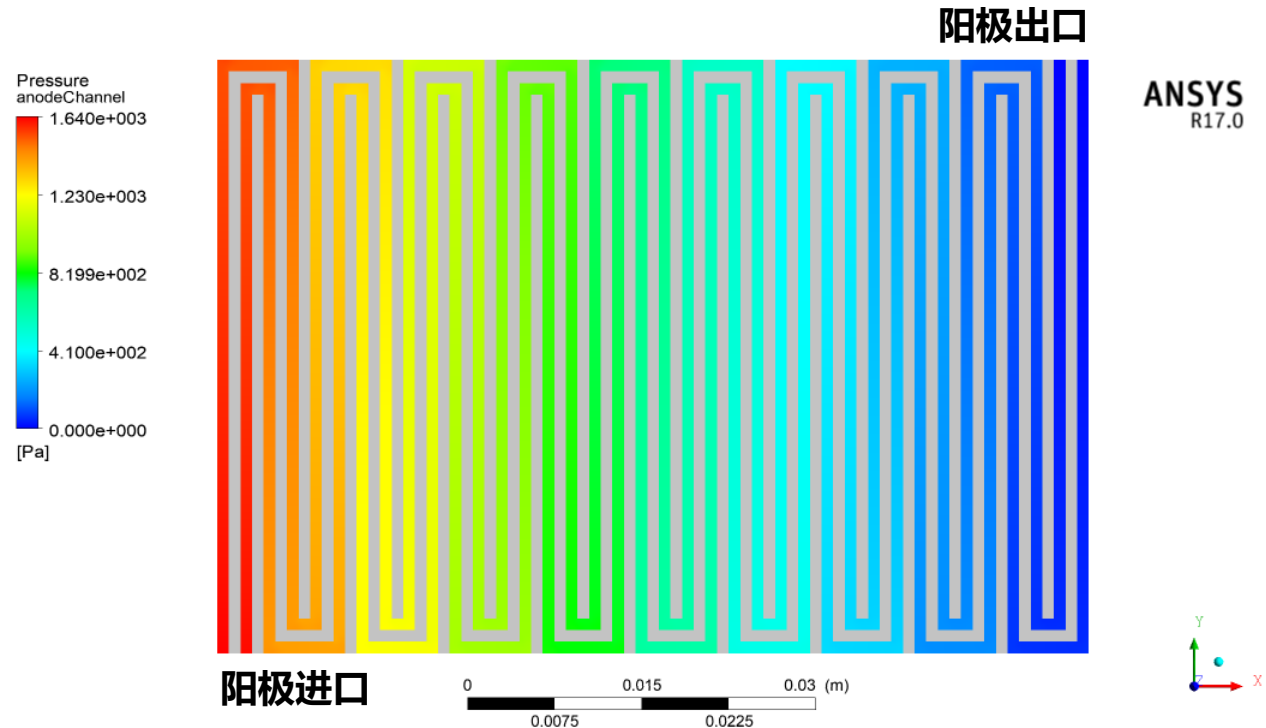


阳极流道压力分布

阳极流道中心截面的表压分布[Pa]



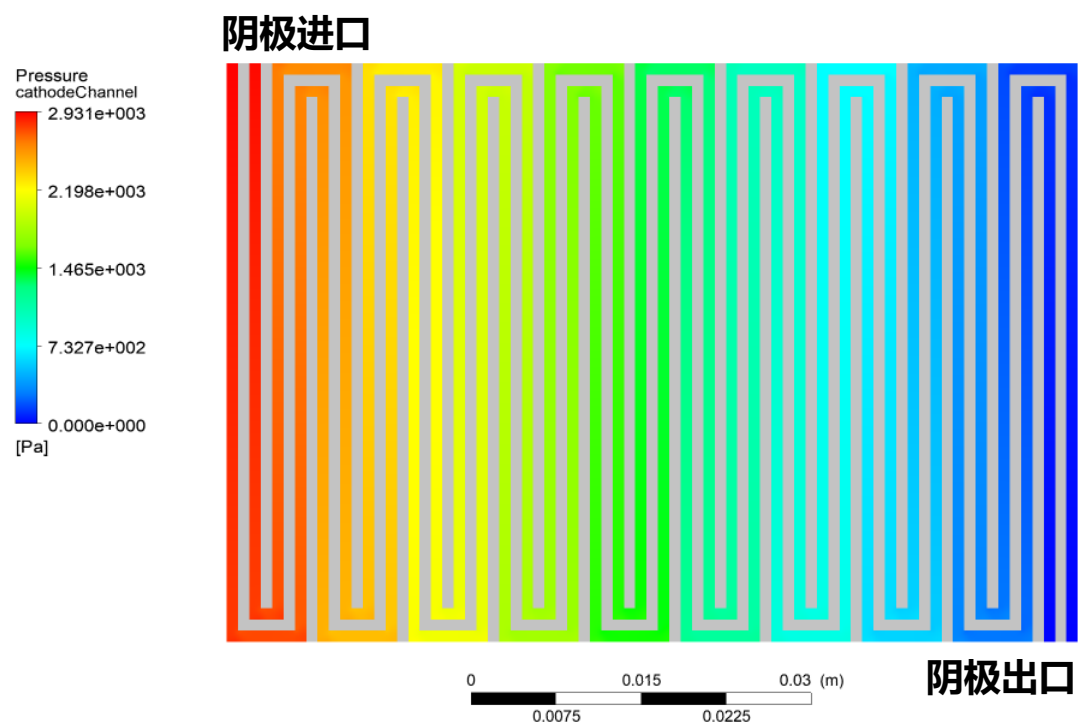
$$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$$



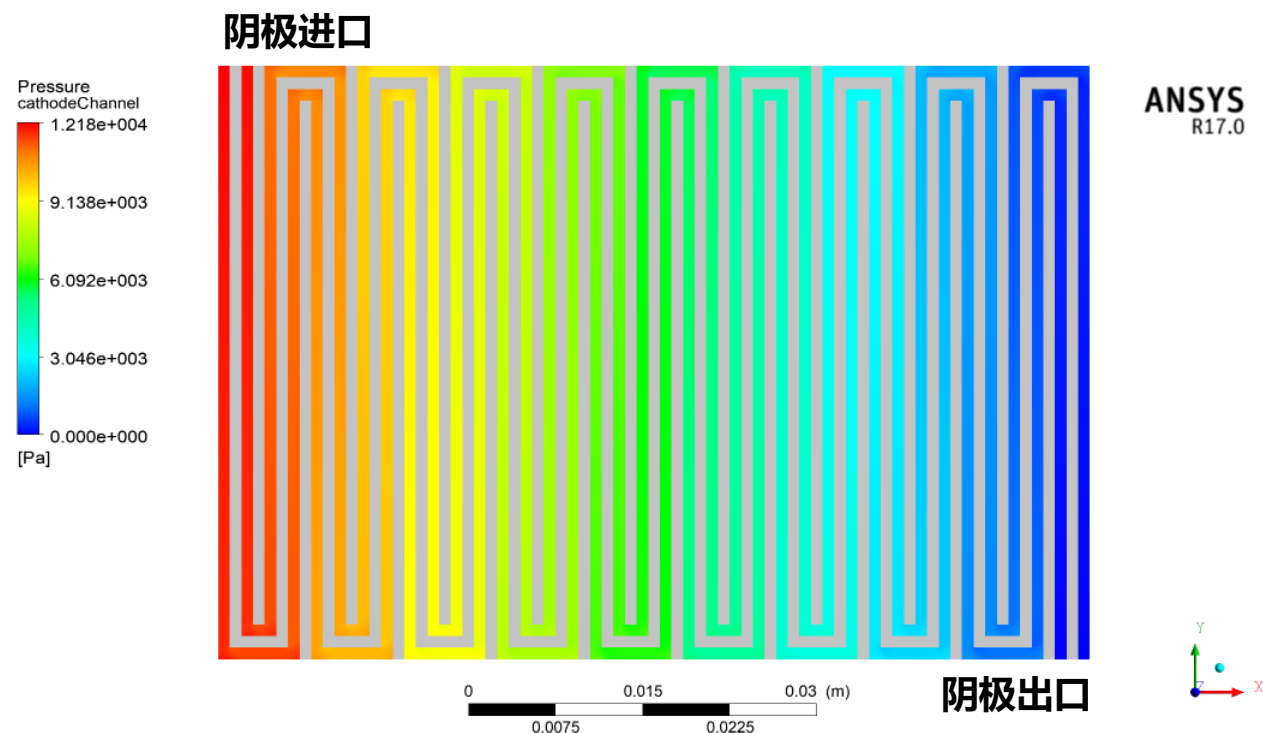
$$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$$

阴极流道压力分布

阴极流道中心截面的表压分布[Pa]



$I_{\text{output}}=0.45\text{A}/\text{cm}^2$



$I_{\text{output}}=1.0\text{A}/\text{cm}^2$

目录

- PEMFC基本介绍
- PEMFC的性能
- PEMFC的三维模拟工具
- PEMFC三维模拟结果的评价
- **PEMFC三维建模需要注意的问题**

■ PEMFC三维建模需要注意的问题总结

■ 前处理

■ 网格类型

- MEA部分：六面体
- 其它部分：灵活处理

■ 网格界面

- 不同网格区域之间的界面一定要联通

■ 模型设定

■ 边界条件

■ 求解设定：松弛因子、代数方程求解参数

■ 模型标定及debug

■ 计算结果异常

■ 计算发散

谢谢!