

数值模拟在质子交换膜燃料电池中的应用研究进展

吴苗苗*, 于 虎, 周安冉, 窦睿然, 胡 泊, 朱爽秋, 马向东

中国矿业大学(北京), 材料科学与工程, 北京
Email: *miaomwu@cumtb.edu.cn

收稿日期: 2021年3月8日; 录用日期: 2021年3月30日; 发布日期: 2021年4月9日

摘 要

质子交换膜燃料电池因其转换效率高、环境污染小的特点, 也成为了未来社会新能源电池中被广泛研究的对象。因其制作成本高, 电池设计周期长等问题, 研究有所受限。通过数值模拟的方法, 可以获得很多工作机理和理论数据, 从而对质子交换膜燃料电池的设计与应用起到指导作用。本文主要阐述了近年来质子交换膜燃料电池在数值模拟方面的研究进展及展望。

关键词

质子交换膜燃料电池, 数值模拟, COMSOL

Research Progress on the Application of Numerical Simulations in Proton Exchange Membrane Fuel Cell

Miaomiao Wu*, Hu Yu, Anran Zhou, Ruiran Dou, Po Hu, Shuangqiu Zhu, Xiangdong Ma

Department of Materials Science and Engineering, China University of Mining & Technology (Beijing), Beijing
Email: *miaomwu@cumtb.edu.cn

Received: Mar. 8th, 2021; accepted: Mar. 30th, 2021; published: Apr. 9th, 2021

Abstract

Proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) has been widely studied as a new energy cell in the future because of its high conversion efficiency and low environmental pollution. Due to its high cost and long battery design cycle, the research has been limited. However, numerical simulation now can play a guiding role in the design and application of proton exchange membrane fuel cell.

*通讯作者。

文章引用: 吴苗苗, 于虎, 周安冉, 窦睿然, 胡泊, 朱爽秋, 马向东. 数值模拟在质子交换膜燃料电池中的应用研究进展[J]. 电力与能源进展, 2021, 9(2): 40-45. DOI: 10.12677/aepe.2021.92005

This paper mainly describes the research progress on the application of numerical simulations in proton exchange membrane fuel cell in recent years.

Keywords

Proton Exchange Membrane Fuel Cell, Numerical Simulation, COMSOL

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

21 世纪以来, 随着人们生活水平的提高, 对于不可再生能源的使用量也日益提升, 加重了我国能源储备的问题。所以, 能源体系的供应也应做出调整, 加速对清洁能源的开发与利用、对储能设备的设计与应用成为了解决能源问题的方案。电池作为新一代的储能设备广受社会瞩目, 对各类电池的研究都有着不同的进展。因为燃料电池对环境的良好特性, 成为发展的重点之一。质子交换膜燃料电池(PEMFC)作为以氢燃料为主的具有高转换效率、低环境污染的特性, 也成为科研人员关注的对象。

2. 质子交换膜燃料电池

质子交换膜燃料电池的结构如图 1 所示, 因为需通入气体作为燃料, 其阴、阳极大多为多孔的气体扩散电极, 中间需有膜电极将两极复合。阳极主要以氢气为燃料, 阴极可以以空气或者氧气为主。所以其机理相对简单, 在两极会分别生成氢离子和水, 其产物简单基本无污染[1]。

但是, 质子交换膜燃料电池内部构建上相对复杂、规格尺度也比较小, 使用传统实验的方法很难针对某一部位的改进或是对内部参数优化所产生的影响进行测量。为了加深对质子交换膜燃料电池机理的研究、提升质子交换膜燃料电池的性能, 通过数值模拟的方法可以建立数学模型模拟电池在运作过程中

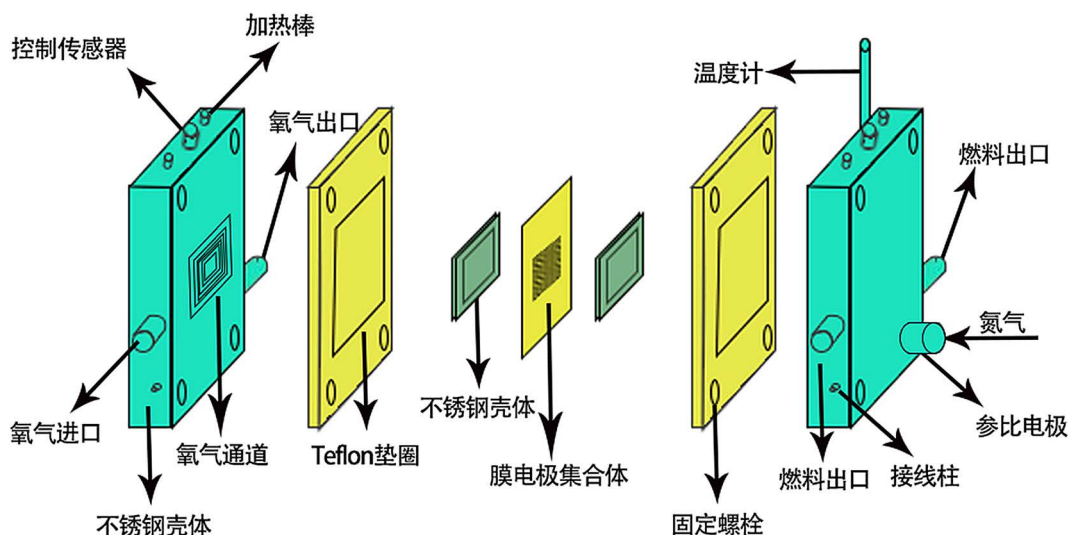


Figure 1. Structure diagram of proton exchange membrane fuel cell

图 1. 质子交换膜燃料电池的结构示意图

的内在现象。通过不同种类数学模型的建立,可以对电池各个部位进行研究,达到改进电池性能的目的。最后,通过建模的方法还可以对实验或使用中的故障加以预测。数值模拟的方法目前广泛的应用于电池的研究之中,随着数值模拟方法的不断完善,可以对实验现象进行分析或者与实际实验结果进行对比提供理论依据,做到与实验相辅相成的目的,此外,还可以做到大幅度缩短实验周期、减少实验费用支出的作用。因此,本文主要对质子交换膜燃料电池在数值模拟方面的研究进展进行介绍。

3. 数值模拟软件

与锂离子电池模拟不同,质子交换膜燃料电池的数值模拟多着重于仿真模拟,常用软件之一便是 COMSOL 软件,该软件是一款可以进行多物理场耦合的仿真软件。数值模拟软件的使用可以帮助解决复杂的实验过程和预测实验的多变性,并使物理场耦合,得到更符合实际情况的数值模拟研究结果[2]。

4. 数值模拟在质子交换膜燃料电池中的应用

4.1. 多物理场中的应用

张馨予等人[2]使用 COMSOL 软件进行模拟,设计了二、三维系统,并且加入了物理模型,探究电池内部温度场的分布。因温度分布不均,在阴极侧温度较高,作者模拟了空气在电池中自然对流和强制对流两种方式。可知,使用自然对流时电池受外界温度因素影响较大。使用强制对流时,强制对流的风速和风温都对电池性能起着显著的影响。

胡桂林等人[3]建立了一个三维的数学模型,研究电池的内传递现象。在该三维模型中,热传递、电化学等被加以考虑。通过数值模拟得到了各物理场的分布情况。同时该文章也做出结论,适当的加大流道的宽度可以增强电池的极化性能。

4.2. 基于一维的数值模拟

Bernardi 等人[4]提出了一个关于质子交换膜燃料电池的一维模型,并利用 Darcy 定律模拟研究了催化膜中的动量传输过程。Verbrugge 等[5]建立了一个可以用来仿真瞬态离子传输的一维数学模型,同时该模型还可以通过使用动量方程研究离子传递过程中的一些情况,进而分析得到了一些具有指导意义的无量纲参数。

4.3. 基于二维的数值模拟

Fuller 等人[6]建立了一个二维的数学模型,以浓溶液理论作为基础,研究电池中催化膜的水热管理。研究发现,催化膜表面是以水蒸气的形式存在,对催化层的冷却是有效果的。

4.4. 基于三维的数值模拟

胡桂林等人[7]建立了一个三维的数学模型用于解释质子交换膜燃料电池的动态过程,该工作设计了一对蛇形流道,模拟了电池工作全过程,记录了电池的阴极温度和电流密度等物理参数;最后,还仿真模拟了电池电压阶跃变化后电池的动态响应,得知该响应时间的长度为秒的数量级。林鸿[8]对整个单电池进行了三维数值的仿真模拟,其研究结果与实际相比输出电压仅存在 10% 以内的偏差;同时还计算了单电池模型与典型单元模型局部电流分布的差异,推测是因为边界条件设置的问题电流密度存在小部分差异,该研究对质子交换膜燃料电池的电化学过程数值研究工作提供了指导作用。李兵[9]实验中使用镍金属作为主要材料设计的四种不同尺寸的泡沫流道和传统蛇形流道进行比较,记录电压值和电流值,从结果可知,使用金属泡沫流道与传统蛇形流道相比有不同程度的提高,当设计尺寸为 580 μm 时提升效果最佳。

通过上述可知,目前对三维模型的数值模拟居多,并且主要是对流道的结构以及尺寸设计进行模拟。对于传统蛇形流道来说胡桂林已经做了详尽的研究,但李兵使用了金属泡沫流道在性能上与传统蛇形流道有很大的提升,说明流道结构对电池性能的影响巨大。

4.5. 关于性能的模拟

罗鑫等人[10]也是基于三维模拟,比较了蛇形流道、交指流道和混合流道的性能,同时分析三种流道对电池性能影响的差异。研究发现,混合流道中的氧气浓度分布最好,比另外两种流道中更均匀,而且其排水性能也有着显著的优势;混合流道在输出性能上更为出色,同时混合流道的化学反应强度也相对较好。陈超等人[11]利用模拟方法对直流道质子交换膜燃料电池进行了优化,其实验的创新点在于用了 Kriging 代理对流道宽度、流道高度和岸宽进行了优化,并得出了最优的结果,研究表明优化后的电池输出性能有了显著的提升。刘郭存[12]也使用了 COMSOL 软件对燃料电池结构进行模拟,分别设计了 U 型和 Z 型结构电池堆对气体、电流密度等分布情况进行模拟,可得知 Z 型结构电池堆分布情况更均匀;并且在参数也进行模拟,可得知提高扩散层孔隙率、电导率对电池性能有较大的提升。孟庆然[13]基于 COMSOL 软件,对扩散层孔隙率沿厚度方向梯度变化对电池性能的影响,可以得知扩散层孔隙率使用梯度结构时,电池性能更强,且孔隙率越高,排水能力越强。孟庆然[14]等人也使用 COMSOL 软件对直流流道的宽度和脊宽度之间的关系对电池性能的影响做了研究,通过研究可知,当流道宽度和脊宽度达到 1:1 时尺寸最为理想,对电池性能影响最大。

对电池流道、电池堆以及对扩散层孔隙率结构的改进,可以对质子交换膜燃料电池的性能起到一定作用。适当的加大流道宽度并且与脊宽度达到 1:1 的比例时可以很好的提升电池性能,此外适当提高扩散层孔隙率且当扩散层孔隙率为梯度结构时,电池性能也有一定的提升。

5. 基于其他方法的模拟

除了 COMSOL 软件外,还有诸多相关软件可以开展质子交换膜燃料电池的计算模拟研究工作。如廖晋杨[15]将质子交换膜电池在车中的应用进行了模拟,其使用的是 Matlab 环境。建立了一个三维的直流道的模型,针对负载工况,充分考虑电池体的温度,分析了电池从启动阶段到负载阶段的响应。蒙先攀[16]基于 FLUENT 模拟方法,对电池的单体工作进行模拟,分析了工作电压差异和燃料气体的流法对水生成的分布及整个电池工作性能的影响。此外,作者还对不同形状流道对电池工作的影响进行了模拟,对电池的设计起到了指导作用。

胡弦[17]利用 VOF 方法对两相流动问题进行了研究,设计了新型的蛇形流道,当流道的内外弯壁均有一定倾斜时,对排水效果有所提升,且角度不宜过大,容易影响气体集中导致对排水增加负担。苏国萍[18]等利用了 CFD 方法模拟计算了电池阴极的传质过程,得出交指流场可以加强阴极的传质过程,并且在流道的出口处水蒸气浓度会达到最大值,还指出气体扩散层的设计会对电池的性能有所影响。余正锟[19]利用 CFD 方法分析了燃料电池中波浪形流道的结构对电池性能的影响,通过分析波长和波幅尺寸可得知,设计为较小的波长和较大的波幅时,在低氧区气体流速更快,对电池的传质性能有所提升。李萌[20]建立了质子交换膜燃料电池的静态反应机理模型,通过控制输入输出为变量并基于 XGBoost 为方法,预测了电池的不同参数。该方法可以提高电池参数预测的精度,此外还通过算法分析得出 LSTM 对电池的参数预测也有很高的精度。阎瀚章[21]使用了 ANSYS 软件研究了流道截面的差异对电池性能的影响,并且在梯形截面上做了更为详尽的研究。当梯形截面宽度降低时,可以加强气体均匀分布,提高气体传输能力,为电池的流道设计提供了新的思路。刘浩[22]还能通过引入自动机器学习的方法对质子交换膜燃料电池的寿命进行了预测分析,通过自动机器学习对 ANFIS 参数进行自动调节,进而还做了对

RUL 估计方法和混合失效预测方法的研究,得知通过机器自动学习调节的 ANFIS 参数可以使结果有更高的精度和收敛性。

对于质子交换膜燃料电池来说可进行的模拟手段非常丰富,对于不同模拟方法可以进行综合考虑,起到相辅相成的目的。在上述中,可以得知对于流道设计时需要充分考虑水和气体在电池中的分布和排出问题,并且流道截面也对电池性能起到一定影响。对蛇形流道的内外弯壁设计加上一定倾斜、使用交指流场可以对加强阴极纯质或是对波浪形流道的波长和波幅加以改进,都会对电池性能起到一定的提升。

6. 质子交换膜燃料电池研究存在的问题

由上述可见,目前对于质子交换膜燃料电池的数值模拟方法众多,并且在很多方面均开展了研究工作,并得到了一定的研究结果。但是,运用数值模拟的方法也存在着诸多的问题,比如不论是利用 COMSOL 或是 Fluent 等方法仿真,都是建立在假设的情况下,并不能做到实验的状态[23] [24]。又或是对于特殊工况或者特殊情况,例如传热过程并没有加以过多的考虑[25],使得仿真模拟还有进一步提升的可能。对于电池来说,更多的时候是在非使用工况下考虑的,动态模拟对于电池来说是至关重要的,目前对能进行自主学习的文献研究存在的还不是很多[22]。

7. 总结与展望

7.1. 总结

截至目前,对于数值模拟在质子交换膜燃料电池的应用已经十分广泛,逐渐地已经可以揭示许多复杂物理场的情况下对电池性能的影响。包括现阶段可使用的模拟方法也很丰富,已经不局限于其中的一种,甚至有学者使用多种模拟方法相结合的形式意在分析电池在工况下的性能。综合考虑来说,应根据需求对流道种类进行确定,然后再对流道结构、尺寸进行改进,提高扩散层孔隙率,可以更好地提升燃料电池的性能,为电池设计提供了指导思路。

7.2. 展望

对于现阶段的模拟来说,既要考虑传热的影响,还要考虑三维两相流的动态模拟[26],甚至于还要考虑多种工况的使用,成为了现在数值模拟在质子交换膜燃料电池的阻碍。但随着研究的深入,学者们也在逐步解决所遇到的问题。通过模拟的方法尽可能地反应实际工况中的相互影响和电池性能。甚至自动机器学习的方法也被运用到了这里,可以不断地学习实现复杂工况的模拟,研究电池的参数性能及寿命的预测,为电池设计提供更新、更有意义的设计思路。

基金项目

国家重点研发计划项目资助(2017YFB0601904); 国家自然科学基金项目资助(11404395); 中央高校基本科研业务费专项基金项目资助(2020YQJD05); 国家大学生创新训练项目资助(C201904542)。

参考文献

- [1] 刘志祥, 钱伟, 郭建伟, 等. 质子交换膜燃料电池材料[J]. 化学进展, 2011, 23(2): 487-500.
- [2] 张馨予. 质子交换膜燃料电池多物理场数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 长春: 吉林建筑大学, 2016.
- [3] 胡桂林, 刘永江, 樊建人, 等. 质子交换膜燃料电池内传递现象的数值模拟[J]. 工程热物理学报, 2004, 25(5): 828-830.
- [4] Bernardi, D.M. and Verbrugge, W.M. (2018) Mathematical Model of a Gas Diffusion Electrode Bonded to a Polymer Electrolyte. *AIChE Journal*, 37, 1151-1163. <https://doi.org/10.1002/aic.690370805>

- [5] Verbrugge, W.M. and Hill, R.F. (2018) Ion and Solvent Transport in Ion-Exchange Membranes. *Journal of The Electrochemical Society*, **137**, 886-893. <https://doi.org/10.1149/1.2086573>
- [6] Fuller, T.F. and Newman, J. (2018) Water and Thermal Management in Solid-Polymer-Electrolyte Fuel Cells. *Journal of The Electrochemical Society*, **140**, 1218-1225. <https://doi.org/10.1149/1.2220960>
- [7] 胡桂林, 樊建人, 岑可法. 质子交换膜燃料电池动态过程的数值模拟[J]. 化工学报, 2006, 57(11): 2693-2698.
- [8] 林鸿, 陶文铨. 质子交换膜燃料电池的三维数值模拟[J]. 西安交通大学学报, 2008, 42(1): 41-45.
- [9] 李兵. 金属泡沫流场对车用质子交换膜燃料电池性能影响的研究[D]: [硕士学位论文]. 杭州: 浙江科技大学, 2020.
- [10] 罗鑫, 陈士忠, 吴玉厚. 质子交换膜燃料电池温度场数值模拟[J]. 电化学, 2018, 24(2): 182-188.
- [11] 陈超, 王硕, 兰海兵, 等. 基于代理模型的直流通质子交换膜燃料电池优化设计[J]. 大连理工大学学报, 2020, 60(3): 244-250.
- [12] 刘郭存. 质子交换膜燃料电池堆多物理场数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 武汉: 武汉理工大学, 2019.
- [13] 孟庆然, 陈海伦, 田爱华, 等. 基于 COMSOL 的质子交换膜燃料电池梯度扩散层的数值模拟[J]. 吉林化工学院学报, 2020, 37(1): 47-51.
- [14] 孟庆然, 田爱华, 陈海伦, 等. 质子交换膜燃料电池流道尺寸的数值模拟[J]. 吉林化工学院学报, 2020, 37(3): 49-52.
- [15] 廖晋杨. 车用质子交换膜燃料电池建模与仿真研究[D]: [硕士学位论文]. 南宁: 广西大学, 2019.
- [16] 蒙先攀. 质子交换膜燃料电池工作过程的数值模拟与实验研究[D]: [硕士学位论文]. 南宁: 广西大学, 2020.
- [17] 胡弦. 基于 VOF 模拟的 PEMFC 流道的数值模拟研究[D]: [硕士学位论文]. 南宁: 广西大学, 2020.
- [18] 苏国苹, 韩吉田. 质子交换膜燃料电池阴极传质过程的数值模拟[J]. 节能, 2007(7): 14-17.
- [19] 余正锬. 质子交换膜燃料电池波浪形流场设计及优化[D]: [硕士学位论文]. 长沙: 湖南理工学院, 2020.
- [20] 李萌. 质子交换膜燃料电池建模与参数预测研究[D]: [硕士学位论文]. 大连: 大连理工大学, 2020.
- [21] 阎瀚章. 质子交换膜燃料电池流场数值计算与优化设计研究[D]: [硕士学位论文]. 岳阳: 湖南理工学院, 2020.
- [22] 刘浩. 质子交换膜燃料电池的寿命预测研究[D]: [博士学位论文]. 杭州: 浙江大学, 2019.
- [23] 胡桂林, 林江. 质子交换膜燃料电池数值模拟的研究进展[J]. 浙江科技学院学报, 2006, 18(3): 167-169.
- [24] 刘志祥, 钱伟, 郭建伟, 等. 质子交换膜燃料电池材料[J]. 化学进展, 2011, 23(2): 487-500.
- [25] 孙世梅, 孙天航, 秦汉林. 质子交换膜燃料电池温度场数值模拟[J]. 吉林建筑大学学报, 2016, 33(4): 55-58.
- [26] 郭玉宝, 朱红, 魏永生, 等. 质子交换膜燃料电池三维稳态数值模拟[J]. 计算机与应用化学, 2014, 31(2): 135-139.