

扩散层孔隙率对 PEMFC 性能影响的模拟研究

刘舜¹, 徐洪涛¹, 张拴羊¹, 屈治国²

(1. 上海理工大学能源与动力工程学院 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室, 上海 200093;
2. 西安交通大学能源与动力工程学院 热流科学与工程教育部重点实验室, 陕西 西安 710049)

摘要: 为了研究扩散层孔隙率对质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 性能的影响, 采用 COMSOL 软件, 通过数值模拟得出气体扩散层不同孔隙率 (0.2, 0.4, 0.6 和 0.8) 时, 单直通道和具有楔形肋片 (长 1 mm, 高 1.5 mm, 宽 2 mm) 的 PEMFC 性能曲线、阴极氧气质量分数分布和水质量分数分布。结果表明: 扩散层孔隙率对燃料电池性能具有较大影响, 随着扩散层孔隙率从 0.2 增大到 0.8, PEMFC 的电流密度逐渐增加, 最大可达 847 mA/cm²; 相对于单直通道, 增加孔隙率比添加楔形肋片更利于提升电池性能; 在孔隙率为 0.6 和 0.8 时, 氧气更易扩散到反应区, 排水效果更好。

关键词: 质子交换膜燃料电池 (PEMFC); 楔形肋片; 孔隙率

中图分类号: TM911.4 文献标识码: B DOI: 10.16146/j.cnki.rndlge.2021.07.020

[引用本文格式] 刘舜, 徐洪涛, 张拴羊, 等. 扩散层孔隙率对 PEMFC 性能影响的模拟研究[J]. 热能动力工程, 2021, 36(7): 122-128. LIU Shun, XU Hong-tao, ZHANG Shuan-yang, et al. Simulation study on the effect of diffusion layer porosity on PEMFC performance[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2021, 36(7): 122-128.

Simulation Study on the Effect of Diffusion Layer Porosity on PEMFC Performance

LIU Shun¹, XU Hong-tao¹, ZHANG Shuan-yang¹, QU Zhi-guo²

(1. Shanghai Key Laboratory of Multiphase Flow and Heat Transfer in Power Engineering, School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China, Post Code: 200093;
2. Key Laboratory of Thermo-Fluid Science and Engineering, Ministry of Education, School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China, Post Code: 710049)

Abstract: To investigate the effect of different gas diffusion layer porosities on the proton exchange membrane fuel cells (PEMFC) performance, the numerical simulation was carried out for the influence of different gas diffusion layer porosities (0.2, 0.4, 0.6 and 0.8) on the PEMFC performance with the single straight channel and wedge-shaped fins (1 mm × 1.5 mm × 2 mm) by COMSOL software. The battery performance curve, the distribution of cathode oxygen mass fraction and water mass fraction is obtained. The simulation results show that the diffusion layer porosity has a significant influence on the performance of the fuel cell. With the increase of diffusion layer porosity from 0.2 to 0.8, the current density of PEMFC gradually increases, and the maximum can reach 847 mA/cm². In comparison with the single straight channel, the increase of porosity improves the PEMFC performance more significantly than the addition of wedge-shaped fins. At the porosity of 0.6 and 0.8, oxygen is easier to diffuse into the reaction zone, and

收稿日期: 2020-08-31; 修订日期: 2020-10-24

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2017YFB0102704)

Fund-supported Project: The National Key Research and Development Program of China (2017YFB0102704)

作者简介: 刘舜 (1997-), 男, 江苏无锡人, 上海理工大学硕士研究生。

通讯作者: 徐洪涛 (1976-), 男, 山东烟台人, 上海理工大学教授。

the drainage effect becomes better.

Key words: proton exchange membrane fuel cell (PEMFC), wedge-shaped fins, porosity

引 言

燃料电池以氢气和氧气的氧化还原反应为基础,将化学能直接转换为可利用的电能,其中质子交换膜燃料电池(PEMFC)具有高效率、高功率密度、环境友好及启动迅速等优势,已经应用于汽车动力电池、航空发电以及便携式电源等领域^[1]。

压力湿度以及温度等直接影响电池内部气体的传递以及电化学反应的进行^[2-3]。Wang 等人^[4]研究发现增加阳极入口压力可减缓电池电压的下降,而增加阴极压力则会加剧电压的下降,且在阴极相对湿度较低的情况下,增加阴极入口压力还可改善电池的输出性能。Reshetenko 等人^[5]通过研究分段电池系统发现,在蛇形流场电池系统中适当增加操作压力可提高电池性能。Kanani 等人^[6]以单蛇形流道的 PEMFC 为研究对象,通过实验发现最佳的电池性能,阴阳极化学计量、入口温度和相对湿度都存在一个最佳值。Perng 等人^[7]设计了新型气体通道和催化层结构,结果表明具有矩形障碍块的气体扩散层结构和具有凸出表面的催化层结构可改善电池性能。此外,文献[8-9]研究了在气体通道中添加挡板对电池性能提升的效果。文献[10-11]研究了在燃料电池气体通道中安装矩形挡板对电池性能的影响,结果表明矩形挡板能够优化电池性能。

气体扩散层是 PEMFC 的重要组成部分,其功能是将反应气体平均分配到反应区域,并提供生成水的离开路径^[12];连接催化层和集电极,使之形成完整电路;为质子交换膜提供足够的机械支撑^[13]。目前,燃料电池气体扩散层孔隙率可达 0.88^[14]。考虑到 PEMFC 气体扩散层孔隙率直接影响反应气体的传输以及反应生成水的排出,本文基于文献[15],借助 COMSOL Multiphysics 软件,进一步研究气体扩散层孔隙率对单直通道的和具有楔形肋片的 PEMFC 性能的影响。

1 PEMFC 模型及参数

1.1 几何模型

燃料电池结构为常规单直通道的和具有楔形肋片的流道结构,结构参数和物理参数如表 1 和表 2 所示,具有楔形肋片的 PEMFC 结构如图 1 所示。该结构在阴极流道中共有 9 个楔形肋片。

表 1 PEMFC 结构参数(mm)

Tab. 1 Structure parameters of PEMFC (mm)

组成部件	长	宽	高
阴/阳极流道	20	2	2
气体扩散层	20	4	0.3
气体催化层	20	4	0.05
质子交换膜	20	4	0.1
楔形肋片	1	2	1.5

表 2 模型物理参数

Tab. 2 Physical parameters of the model

参 数	数 值
压力/Pa	101 325
工作温度/K	353.15
相对湿度/%	100
扩散层孔隙率	0.2, 0.4, 0.6 和 0.8
扩散层渗透率/ m^2	1.18×10^{-11}
扩散层电导率/ $S \cdot m^{-1}$	222
催化层渗透率/ m^2	2.36×10^{-12}
催化层电导率/ $S \cdot m^{-1}$	1 000
膜电导率/ $S \cdot m^{-1}$	9.825
开路电压/V	0.9
阴极化学计量数	1.2
阳极化学计量数	2
阳极粘度/ $Pa \cdot s^{-1}$	1.19×10^{-5}
阴极粘度/ $Pa \cdot s^{-1}$	2.46×10^{-5}

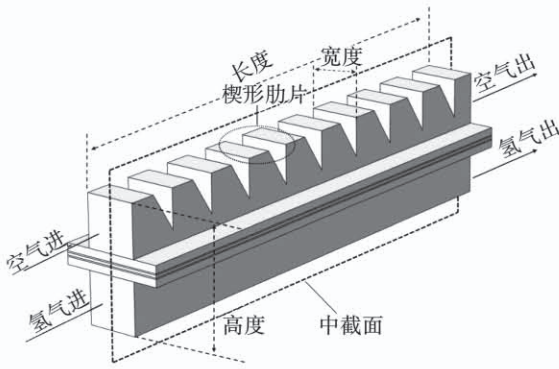


图 1 楔形肋片结构示意图

Fig.1 Structural diagram of the wedge-shaped flow channel

1.2 假设

为了便于计算,采用以下假设^[16-17]:PEMFC 在稳态条件下运行;混合气体为不可压缩的理想气体,并且该流动为层流;忽略重力效应;气体扩散层和催化剂层被视为各向同性的均质多孔材料;电化学反应的产物均为气相;不考虑各部分间的接触电阻。

1.3 数学模型

基于假设,建立控制方程^[18]。

连续性方程:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \tag{1}$$

式中: ∇ —哈密顿算子; ρ —密度, kg/m^3 ; \vec{v} —速度矢量, m/s 。

动量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\varepsilon \nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon \mu \nabla \vec{v}) + S_n \tag{2}$$

式中: p —流体压力, Pa ; μ —动力粘度, $\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$; S_n —动量源项;在流道中 $\varepsilon = 1$ 。

组分守恒方程:

$$\nabla \cdot (\vec{v} \varphi X_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla X_i) + S_k \tag{3}$$

式中: φ —孔隙率; X_i —气体组分的质量分数, $i = 1, 2, 3 \dots$; D_i —组分有效扩散系数, m^2/s ; S_k —组分源。

电荷守恒方程:

$$\nabla \cdot (K \nabla \Phi) = S \tag{4}$$

式中: K —电导率, S/cm ; Φ —电势, V ; S —体积转移电流的源项,在催化层 $S = j$,其余 $S = 0$ 。

交换电流密度 j 由 Butler-Volmer 方程给出:

$$j = a i_0^+ \left\{ \exp \left[\frac{-\alpha F \Delta V_{\text{act}}}{RT} \right] - \exp \left[\frac{(1 - \alpha) F \Delta V_{\text{act}}}{RT} \right] \right\} \tag{5}$$

式中: a —单位体积的电催化表面积, m^{-1} ; i_0^+ —每单位电催化表面积的交换电流密度, A/m^2 ; α —转移系数。

1.4 网格无关性及模型验证

网格无关性及模型验证如图 2、图 3 所示。

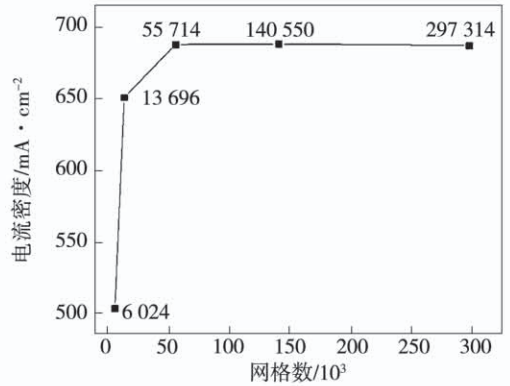


图 2 网格无关性验证

Fig.2 Grid independence test

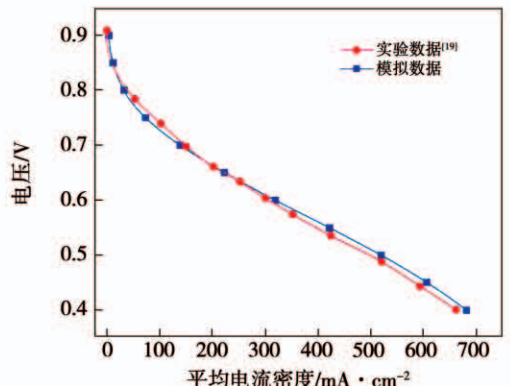


图 3 模拟结果与实验数据对比验证

Fig.3 Comparison and verification between numerical simulation data and experimental data

设置 6 024, 13 696, 55 714, 140 550 和 297 314 五种不同的网格数,对网格的独立性进行验证,结果如图 2 所示。为平衡计算资源和精确度之间的关系,最终采用网格数 55 714 进行模拟。

为验证本文数值模型的合理性,将单直通道的模拟结果与文献[19]的实验数据进行对比验证,两者具有良好的一致性,因此模拟结果可靠。

1.5 性能评价标准

电池性能曲线是燃料电池性能的重要评价标准。为了研究扩散层孔隙率对电池性能的影响,以电池性能曲线对应的电流密度作为性能评价标准。此外,为便于定量分析,选取电流密度增长率 δ 对比电池性能。

$$\delta = \frac{I - I_0}{I_0} \times 100\% \quad (6)$$

式中: I —孔隙率变化后的电流密度, mA/cm^2 ; I_0 —孔隙率变化前的电流密度, mA/cm^2 。

2 结果及分析

2.1 电池性能

图 4 为气体扩散层孔隙率分别为 0.2, 0.4, 0.6 和 0.8 时的电池性能曲线。可以看出,当 PEMFC 在高电位工作时,电流密度随孔隙率的变化不大;但在低电位工作时,随着孔隙率的增大,电流密度也随之增大。相同孔隙率下,具有楔形肋片的 PEMFC 电流密度略大于单直流通道的,说明添加楔形肋片可提高 PEMFC 的性能,且孔隙率越大 PEMFC 输出性能越好。在电池电压为 0.4 V,具有楔形肋片且孔隙率为 0.8 时,电流密度可达 $847 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 。

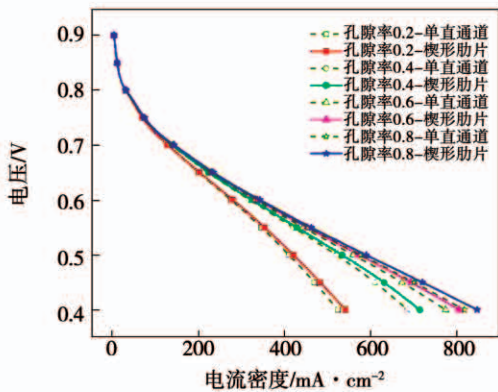


图 4 不同工况下的电池性能曲线

Fig. 4 Performance curves of PEMFC at different working conditions

表 3 为电流密度增长率。从中可以看出,孔隙率为 0.2 ~ 0.4 时,电流密度增长率最大,可达 31.90%。具有楔形肋片的 PEMFC 增长率与单直流通道的增长率相近,随着扩散层孔隙率的增大,不同工

况的 PEMFC 电流密度增长率均呈减小趋势。其原因在于:在低电压下 PEMFC 的浓差极化严重,反应气体浓度对电池性能影响较大;而在高电压下,PEMFC 性能下降的主导原因是活化极化。此外,孔隙率增加到一定值后,楔形肋片对电池的影响效果减弱,其原因为孔隙率较大时氧气更容易扩散到电池内部反应区域,此时添加肋片的强化传质效果并不明显。孔隙率的增加使电池性能明显提高,增加孔隙率比添加肋片更有利于电池性能的提升。

表 3 电流密度增长率

Tab. 3 Growth rate of current density

电池结构	孔隙率	电流密度增长率/%
楔形肋片	0.2 ~ 0.4	31.90
	0.4 ~ 0.6	12.79
	0.6 ~ 0.8	5.25
单直通道	0.2 ~ 0.4	30.75
	0.4 ~ 0.6	12.85
	0.6 ~ 0.8	5.66

2.2 阴极氧气质量分数分布

图 5 为工作电压为 0.4 V 时,单直通道与楔形肋片 PEMFC 在不同孔隙率条件下,阴极氧气质量分数分布。随着氧气从进口向出口流动,氧气质量分数逐渐降低,因为氧气在界面处参加反应而被消耗。添加肋片后,氧气质量分数变化规律与未添加肋片的情况保持一致。在孔隙率为 0.2 时,流道出口处氧气质量分数约为扩散层的 2 倍。说明,在低孔隙率下氧气不易扩散到化学反应区,其对电化学反应起到阻碍作用。原因是,在扩散层低孔隙率工况下,扩散层含水率较高,氧气遇到较高的物理阻力,不易扩散催化层发生化学反应。在孔隙率为 0.6 ~ 0.8 时,出口氧气质量分数明显低于孔隙率为 0.2 时。说明,在高孔隙率下氧气更容易扩散到化学反应区,更多的氧气到达反应界面,提高了电流密度。在高孔隙率工况下氧气出口浓度相似,这是由于内部的化学反应所需的物质基本达到要求,强化传质对电池性能的提升效果就逐渐降低。

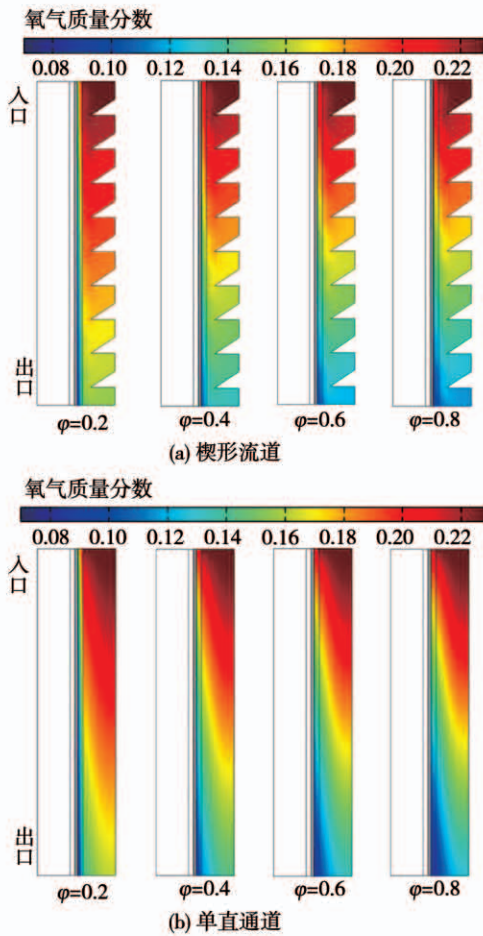


图 5 中截面氧气质量分数分布

Fig. 5 Oxygen mass fraction contour distribution of the middle cross-section

随着气体扩散层孔隙率的增加,添加楔形肋片后,其氧气质量分数的变化规律与未添加肋片时保持一致;在 PEMFC 出口处氧气质量分数明显下降,特别是靠近电池内部反应区域。提高孔隙率有利于氧气扩散到反应区,使反应效率和电池性能提升。

2.3 水质量分数分布

图 6、图 7 分别为工作电压 0.4 V 时,不同孔隙率下阴极扩散层与流道交界面水的质量分数分布和中截面水的质量分数分布。由图 6 可知,阴极扩散层水的质量分数沿着流道的流向逐渐增大。这是由于随着阴极化学反应的进行,沿着流动方向,化学反应生成的水也随之增加,从而导致其质量分数增加。由图 7 可知,水质量分数沿着流道出口方向逐渐增加,随着孔隙率的增大,扩散层出口处水质量分数明显降低。原因在于随着 PEMFC 内部电化学反应的

持续进行,产生了更多的水,在高孔隙率的作用下,水分更容易从扩散层扩散到流道中。在单直流道且孔隙率为 0.4, 0.6 和 0.8 工况下,扩散层出口水质量分数明显高于楔形肋片结构,说明添加楔形肋片有助于水扩散到流道中。

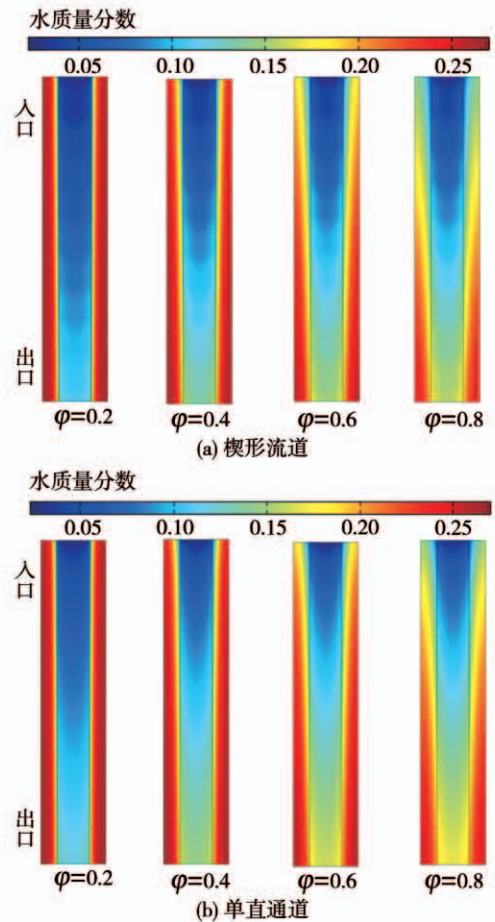


图 6 阴极扩散层与流道交界面水质量分数分布
Fig. 6 Water mass distribution contour of the interface between cathode diffusion layer and flow channel

由图 6 和图 7 可知,在具有楔形肋片且孔隙率为 0.2 的工况下,扩散层表面水质量分数最高,出口处质量分数约为 0.25,中间流道水质量分数最低,约为 0.1,扩散层出口与流道出口的质量分数之差约为 0.15。随着孔隙率的增大,扩散层出口水质量分数明显降低,流道出口水质量分数在逐渐增加。孔隙率为 0.8 时,扩散层出口水质量分数约为 0.19,中间流道水质量分数约为 0.15,扩散层出口与流道出口水质量分数差约为 0.04。具有楔形肋片且孔隙率为 0.8 的工况下,扩散层出口水质量分数小于

孔隙率为 0.2 时,说明在低孔隙率下可能发生水淹现象。燃料电池性能降低,孔隙率的增加使更多的水分扩散到流道中,进而提高排水效果,更有利于提高电池性能;当孔隙率为 0.2 时,出口处水的质量分数小于孔隙率为 0.8 时水的质量分数,说明孔隙率越大流道中水分越多,孔隙率提高明显使排水能力提升;在低孔隙率下,扩散层出口与流道出口水质量分数差明显高于高孔隙率,高孔隙率工况下阴极出口水质量分数与扩散层相近,说明在高孔隙率下生成水的分布更加均匀。

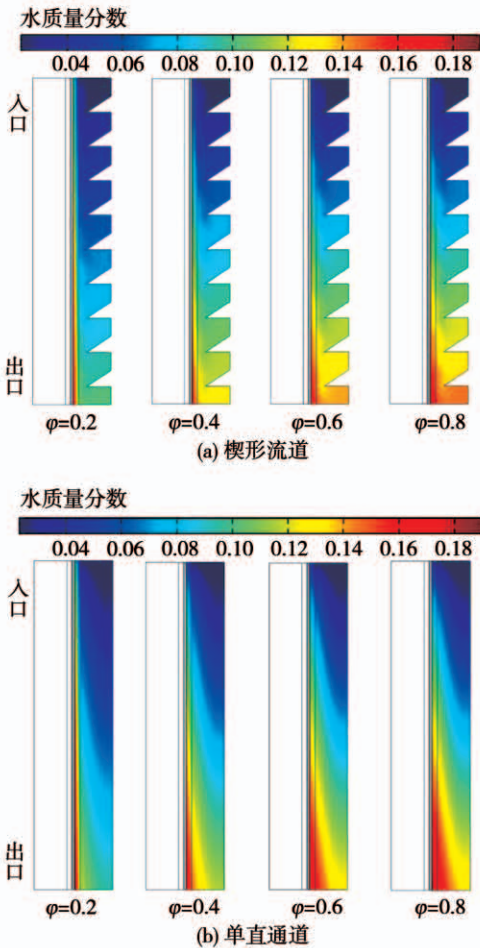


图7 中截面水质量分数分布

Fig.7 Water mass fraction distribution contour of the middle cross-section

3 结论

(1) 扩散层孔隙率对燃料电池性能具有较大影响。随着孔隙率的增大,PEMFC 电流密度逐渐增

加。相对于单直通道,增加孔隙率比添加肋片更有利于电池性能的提升。

(2) 随着气体扩散层孔隙率的增加,添加楔形肋片后,氧气质量分数的变化规律与未添加肋片保持一致;提高孔隙率有利于降低扩散阻力及氧气扩散到反应区,提高反应效率。

(3) 添加楔形肋片有助于水扩散到流道中,孔隙率为 0.2,0.4,0.6 和 0.8 时,随着孔隙率的增加,流道内出口处水质量分数逐渐增加,排水效果更好。

参考文献:

- [1] STAFFELL I, SCAMMAN D, ABAD A V, et al. The role of hydrogen and fuel cells in the global energy system[J]. *Energy & Environmental Science*, 2019, 12(2): 463 - 491.
- [2] HAN I S, PARK S K, CHUNG C B. Modeling and operation optimization of a proton exchange membrane fuel cell system for maximum efficiency[J]. *Energy Conversion and Management*, 2016, 113: 52 - 65.
- [3] SALVA J A, IRANZO A, ROSA F, et al. Optimization of a PEM fuel cell operating conditions: Obtaining the maximum performance polarization curve[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41(43): 19713 - 19723.
- [4] WANG B W, WU K C, XI F Q, et al. Numerical analysis of operating conditions effects on PEMFC with anode recirculation[J]. *Energy*, 2019, 173: 844 - 856.
- [5] RESHETENKO T V, BENDER G, BETHUNE K, et al. Systematic study of back pressure and anode stoichiometry effects on spatial PEMFC performance distribution[J]. *Electrochimica Acta*, 2011, 56(24): 8700 - 8710.
- [6] KANANI H, SHAMS M, HASHEMINASAB M, et al. Model development and optimization of operating conditions to maximize PEMFC performance by response surface methodology[J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, 93: 9 - 22.
- [7] PERNG S W, WU H W, WANG R H. Effect of modified flow field on non-isothermal transport characteristics and cell performance of a PEMFC[J]. *Energy Conversion and Management*, 2014, 80: 87 - 96.
- [8] AFSHARI E, MOSHARAF-DEHKORDI M, RAJABIAN H. An investigation of the PEM fuel cells performance with partially restricted cathode flow channels and metal foam as a flow distributor[J]. *Energy*, 2017, 118: 705 - 715.
- [9] POURRAHMANI H, MOGHIMI M, SIAVASHI M, et al. Sensitivity

- analysis and performance evaluation of the PEMFC using wave-like porous ribs[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2019, 150:433-444.
- [10] TISS F, CHOUIKH R, GUIZANI A. A numerical investigation of reactant transport in a PEM fuel cell with partially blocked gas channels[J]. *Energy Conversion and Management*, 2014, 80: 32-38.
- [11] 沈俊. 基于强化传质的燃料电池流场优化及水热管理研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2018.
- SHEN Jun. Study on optimal design of flow field and water-heat management of PEMFC based on mass transfer enhancement[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2018.
- [12] SHI Z Y, WANG X, DRAPER O. Effect of porosity distribution of gas diffusion layer on performance of proton exchange membrane fuel cells[J]. *ECSTrans*, 2007, 11(1): 637-646.
- [13] 王科. 质子交换膜燃料电池双极板流场的研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2007.
- WANG Ke. Research on flow field on bipolar plates for proton exchange membrane fuel cell[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2007.
- [14] 弗朗诺·巴尔伯. PEM 燃料电池: 理论与实践[M]. 第2版. 李东红, 连晓峰, 等译. 北京: 机械工业出版社, 2016.
- FRANO Barbir. PEM fuel cells: theory and practice, second reserved[M]. 2nd Edition. LI Dong-hong, LIAN Xiao-feng, et al Trans. Beijing: China Machine Press, 2016.
- [15] 高强, 张拴羊, 徐洪涛, 等. 肋片结构对质子交换膜燃料电池性能影响模拟研究[J]. *热能动力工程*, 2020, 35(7): 215-222.
- GAO Qiang, ZHANG Shuan-yang, XU Hong-tao, et al. Simulation study on the effect of fin structure on the performance of proton exchange membrane fuel cell[J]. *Journal of Engineering for Thermal Energy and Power*, 2020, 35(7): 215-222.
- [16] 陈磊. 基于 Fluent 燃料电池流道结构模拟与优化[D]. 郑州: 华北水利水电大学, 2018.
- CHEN Lei. Simulation and optimization for flow channel structure of fuel cell based on fluent[D]. Zhengzhou: North China University of Water Resources and Electric Power, 2018.
- [17] FAN L, NIU Z, ZHANG G, et al. Optimization design of the cathode flow channel for proton exchange membrane fuel cells[J]. *Energy Conversion and Management*, 2018, 171: 1813-1821.
- [18] 罗鑫. PEM 燃料电池流场传质模拟分析[D]. 沈阳: 沈阳建筑大学, 2018.
- LUO Xin. Simulation analysis of mass transfer on PEM fuel cell flow field[D]. Shenyang: Shenyang Jianzhu University, 2018.
- [19] YAN Q G, TOGHIANI H, CAUSEY H. Steady state and dynamic performance of proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) under various operating conditions and load changes[J]. *Journal of Power Sources*, 2006, 161(1): 492-502.

(王治红 编辑)