

PEMFC 插指型流道阴极中气体扩散特性的数值分析

刘训良 齐志鹏 谭雅巍 何雅玲 陶文铨

(动力工程多相流国家重点实验室, 西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049)

摘要 本文对 PEMFC 插指型流道阴极扩散层建立了二维单相的多组分物理数学模型, 对 PEMFC 插指型流道的阴极扩散层中气体的扩散特性及反应行为进行了数值研究, 采用有限容积法对模型控制方程进行求解, 比较插指型和平直型流道两类电池的性能曲线, 以及两种流道中氧气的组分摩尔浓度和局部电流密度的分布, 分析了插指型流道结构参数对电池性能的影响。

关键词 PEMFC; 插指型流道; 阴极扩散层; 数学模型; 数值模拟

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2004)Suppl.-0139-04

NUMERICAL SIMULATION OF GASEOUS TRANSPORT BEHAVIOR IN THE CATHODE OF PEM FUEL CELL USING THE INTERDIGITATED GAS DISTRIBUTOR

LIU Xun-Liang QI Zhi-Peng TAN Ya-Wei HE Ya-Ling TAO Wen-Quan

(School of Energy & Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, State Key Laboratory of
Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an 710049, China)

Abstract A two-dimensional, single phase, multi-component model was developed for the cathode of PEM fuel cell using the interdigitated gas distributor. The gaseous transport process and electrochemical reaction were numerically simulated. The governing equations including continuity equation, Darcy's law and the advection-diffusion equations were solved by the finite-volume method. The model was used to investigate the performance of PEM fuel cell using the interdigitated gas distributor and the conventional distributor. The concentration profiles of oxygen in the cathode and the local current density profiles were shown for comparison between the two kinds of distributors. The effect of some structural parameters of the cathode on the cell performance was studied for optimization of the cell design.

Key words PEM; interdigitated gas distributor; cathode; model; numerical simulation

1 引言

质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 作为新一代的发电技术, 以其特有的高效率和环境友好特性而引起了全世界的关注, 当今世界各国都在积极进行紧张的研究与开发工作。为了改善电池性能, 减小浓差极化过电压, 增大电池的极限电流密度, Nguyen 提出了一种新型的气体流道设计 (见图 1), 即所谓

的插指型流道^[1]。传统的流道设计, 通常称之为平直型流道 (或平行流道), 反应气体的进出口通道是相通的, 单纯由于扩散作用到达催化层; 而新型流道的进口和出口通道末端是封闭的, 在压差的驱动下依靠强制对流与扩散的共同作用到达催化层; 同时, 由于强制气流产生的剪切力还可以带走大部分扩散层中滞留的水分, 降低了电极被水淹没的可能。

收稿日期: 2004-02-17; 修订日期: 2004-06-28

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No.50236010)

作者简介: 刘训良 (1973-), 男, 山东嘉祥人, 博士研究生, 主要从事传热强化、计算传热以及质子交换膜燃料电池的数值模拟。

性，因而改善了电池的性能。

Kazim 等曾对 PEMFC 的阴极扩散层部分建立数学模型，比较了插指型流道和平直型流道的氧气浓度的分布以及局部电流密度的分布^[2]。He 等建立了插指型流道 PEMFC 阴极两相流模型，模型中考虑了液态水的存在，分析了运行参数以及电极几何参数对电池性能的影响^[3]。

本文给出了插指型流道 PEMFC 阴极扩散层的物理数学模型，采用连续性方程及 Darcy 定律描述混合气体在扩散层中的流动，采用对流扩散方程描述组分的传递，电流密度根据 Butler-Volmer 方程计算。采用有限容积法对该模型控制方程进行了数值求解，比较了两种流道中氧气和水的组分摩尔浓度和局部电流密度的分布，分析了各参数对插指型 PEMFC 的电池性能的影响，对电极结构和运行参数的优化具有一定的理论参考价值。

2 阴极扩散层模型控制方程

在建模中假设：将反应气体（空气）和反应产物水当成理想气体来处理；忽略压力扩散及热扩散，只考虑由于浓度梯度引起的质量扩散；质子交换膜中由于电渗作用和反扩散引起的水净迁移系数是恒定的；电池内部的温度分布均匀；忽略阳极的过电压，MEA 的电阻认为是常数；催化层非常薄，体积可以忽略。空气在阴极扩散层内的运动满足连续性方程

$$\nabla \bullet (cu) = 0 \quad (1)$$

式中 c 代表空气的摩尔浓度， u 代表空气的速度。

空气在多孔扩散层的流动遵循 Darcy 定律

$$u = -\frac{K}{\eta} \nabla p \quad (2)$$

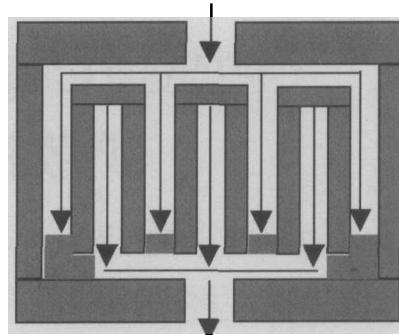
式中 K 为多孔电极的渗透率， η 为空气的粘度， p 为压力。

组分之间的扩散过程可由扩散微分方程描述如下

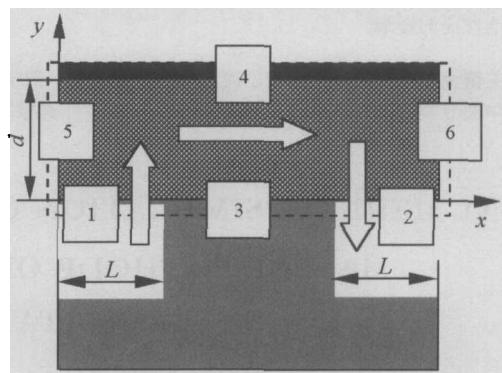
$$u \bullet \nabla(cx_i) = \nabla \bullet (cD_i \nabla x_i) \quad (3)$$

式中 x_i 为组分如氧气、水蒸气等的摩尔分数， D_i 为该组分在空气中的质量扩散率。

计算区域为图 1 中虚线框所围区域，边界条件由于篇幅限制不再列出。



(a) 流道俯视图



(b) 流道截面图

图 1 插指型流道示意图

3 阴极扩散层模型控制方程的求解

采用有限容积法对控制方程进行离散，方程的求解采用 TDMA 算法和交替方向扫描线迭代方法 (ADI)^[4]。首先求解压力，由 Darcy 定律求得速度，然后求解组分扩散方程，根据收敛后的氧气的摩尔分数，计算局部电流密度，然后计算平均电流密度及其他参数。

4 计算结果和分析

4.1 电池的极化性能曲线

图 2 给出了两种流场板的电池电压与电流密度的关系曲线（即电池的极化性能曲线）的数值模拟结果。由图可见，在电流密度较小时，两种流场板的电池性能相差较小，近乎相同，但在高电流密度下，插指型流场板电池的性能明显优于平直型。这是由于在高电流密度时燃料电池的反应速度是由反应物的传质速度控制的，而插指型流场板能促进反应物即氧气的输运，从而得到更大的极限电流密度。

4.2 压力和速度分布

反应气体的压力降主要集中在流道的脊部上方区域，同时此区域的速度值较大，进口和出口靠近

肩部处的速度值最大，而在对称面（界面 3 和 4）附近区域压力变化较小，因而速度也比较小。

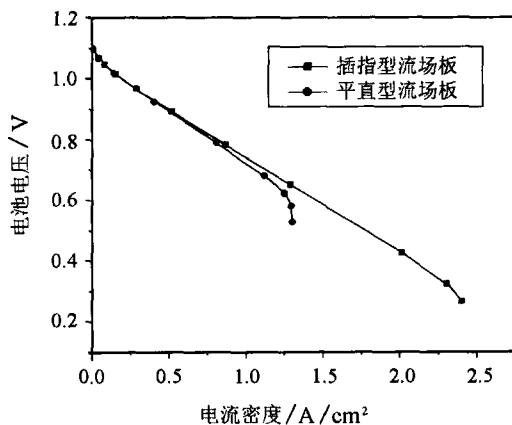


图 2 电池的极化性能曲线

4.3 氧气浓度的局部分布

图 3 给出了过电压为 0.1 V 时插指型流道和平行流道内的氧气浓度分布，结果显示，插指型流道内的氧气浓度在各种运行状况下都有比较均匀的分布，出口处的浓度较小，而平行流道内在肩部上方的大部分区域浓度都相对比较小。这是由于插指型流道内强制对流的作用，促进了氧气的运输，浓度趋于均匀化，而平行流道内只有扩散作用因而传质速率比较慢，导致肩部上方区域内氧气的浓度较小。因此可以推论，插指型流道的氧气利用率高于平直型流道，这与试验结果吻合^[3]。同时分析得出，过电压较小时，靠近反应层界面上的氧气浓度较大，由电流密度与过电压的关系式可知，此时电流密度较小；而随着过电压的增大，电流密度也将增大，反应层界面上的氧气浓度趋于减小。当它接近于零时，氧气的传质速率已经不能满足电化学反应速率的需要，电流密度趋近最大极限值，通常称之为极限扩散电流密度，即使过电压进一步增大，它也不会改变。这一规律对两种流道都适合。

4.4 局部电流密度分布和功率密度

图 4 给出了两种流道内反应界面上过电压分别为 0.05 V、0.10 V 和 0.15 V 时沿 x 方向局部电流密度的分布（过电压的大小反映电化学反应的速度快慢）。可以看出，插指型流道的局部电流密度分布较均匀，因而平均电流密度比平行流道大。计算表明，电流密度较小时，两种电池的性能差别不大，而当电流密度升高时，平直型流道电池达到极限电流密度，而插指型电池工作电流密度可以继续升高，功率密度逐渐增加至最大值，然后衰减。

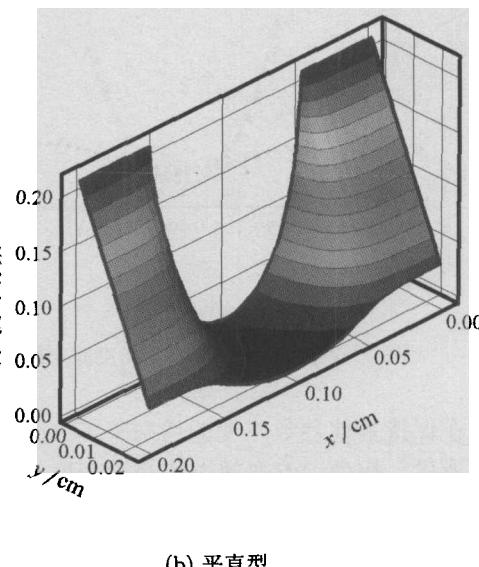
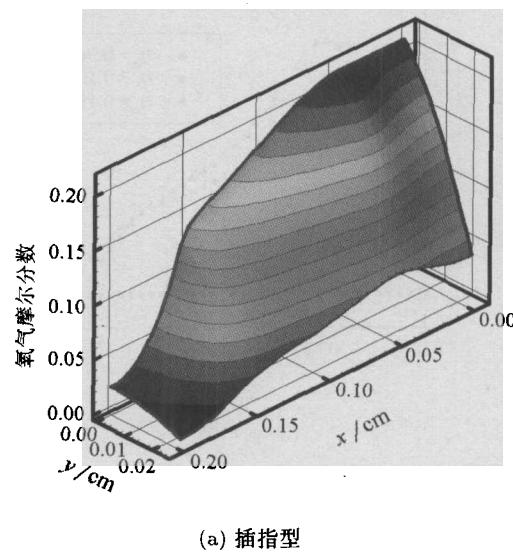


图 3 插指型和平行流道内的氧气浓度分布

4.5 反应压力和进出口压差对电池性能的影响

反应压力升高，空气浓度增大因而氧气的浓度也增大，但是气体的质量扩散系数减小，两者的综合效果是电池的性能增加。进出口压差增加将改善电池性能，极限电流密度也增大，这是由于压力升高时强制对流作用增强，增大了氧气的传质速率，因而提高了电化学反应速率，电流密度增加。

4.6 插指型流道结构参数对电池性能的影响

在反应层面积不变的情况下，研究了气体通道总宽度（包括进口和出口）与脊部宽度比对电池性能的影响。该比值增大时，即脊部的相对宽度减小时，能改善电池的性能。但是脊部宽度减小增加了电极板的接触电阻（模型未考虑），因此应综合考虑。

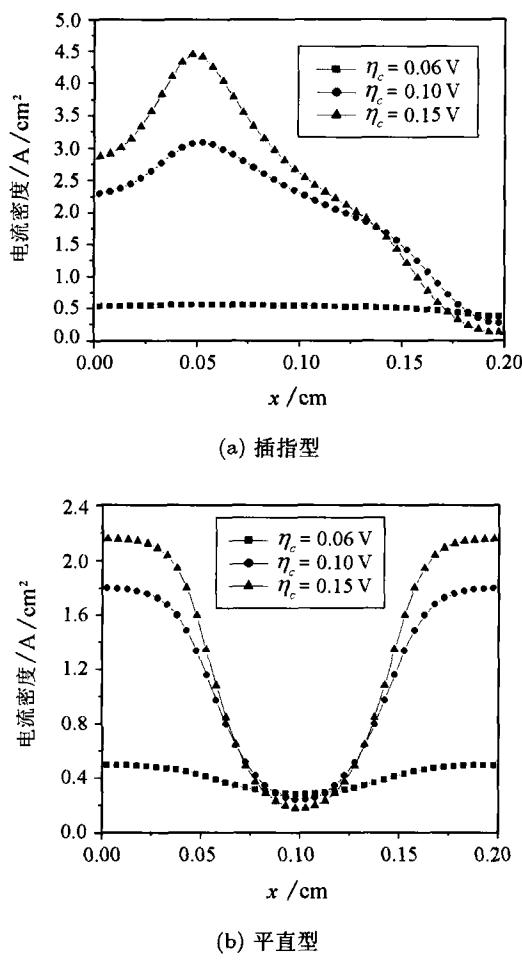


图4 两种流道内局部电流密度的分布

在保持其他参数不变的情况下，只改变扩散层的总宽度，相当于改变通道的布置密度，对电池性能有一定的影响。总宽度减小即布置密度增加时，电池性能有明显改善，反之则降低电池的性能。扩散层厚度减小能提高扩散至反应层的氧气浓度，增加反应速率；而扩散层厚度过小将导致电池反应层上的局部电流密度分布不均匀，因此应对其进行优化以使电池性能最佳。以上分析结果与文献[2, 3]中结论一致。

在脊部宽度和反应层面积不变的情况下，研究

了进口与出口宽度比对电池性能的影响。进口和出口宽度比增加时，电池的性能变优，这是由于该情况下进一步改善了流道下游区的氧气浓度分布，由局部电流密度的分布可以发现，电流密度最大值的发生区域向下游偏移，但是仍然对应于速度最大的区域，即脊部与进口毗邻处的部位，脊部和出口对应的反应层区域的局部电流密度增大，因而平均电流密度增大。该参数的影响文献中未见讨论。

5 结 论

本文提出了 PEMFC 阴极扩散层的数学模型，应用该模型对插指型与平直型流道的电池性能进行了比较，并分析了插指型流道结构参数对性能的影响，得到如下结论：

- (1) 插指型流道电池性能优于平直型，电极扩散层内氧气的浓度分布均匀，局部电流密度也比较均匀，平均电流密度比平直型流道大。
- (2) 插指型流道内的进出口压力降增加或者运行压力增加，电池性能提高。
- (3) 较窄的脊部宽度、较小的出口通道宽度和较密的通道布置对提高插指型电池的性能有利，扩散层厚度对应于最优的电池性能存在一个最佳值。

参 考 文 献

- [1] T V Nguyen. A Gas Distributor Design for Proton-Exchange-Membrane Fuel Cells. *J. Electrochem. Soc.*, 1999, 143: L103-L105
- [2] A Kazim, H T Liu, P Forges. Modeling of Performance of PEM Fuel Cells with Conventional and Interdigitated Flow Fields. *Journal of Applied Electrochemistry*, 1999, 29: 1409-1416
- [3] Wensheng He, Jung S Yi, T V Nguyen. Two-Phase Floe Model of the Cathode of PEM Fuel Cells Using Interdigitated Flow Fields. *AICHE Journal*, 2000, 46(10): 2053-2064
- [4] 陶文铨. 数值传热学(第二版). 西安: 西安交通大学出版社, 2001