

基于 Fluent 的微型直接甲醇燃料电池阳极流场结构分析*

陈观生^{1,2}, 曾毅波^{1,2}, 刘俊^{1,2}, 赵祖光^{1,2}, 林杰^{1,2}, 郭航^{1,2}

(1. 厦门大学 物理与机电工程学院 福建 厦门 361005;

2. 厦门大学 萨本栋微米纳米科学技术研究院 福建 厦门 361005)

摘要: 微型直接甲醇燃料电池中阳极流场结构对电池的性能有着重要的影响。为了合理设计阳极流场结构,改善甲醇燃料在阳极流场中的分布,采用计算流体动力学(CFD)软件 Fluent 对微型直接甲醇燃料电池进行建模并仿真分析。分析比较了点型、平行和蛇形 3 种不同流场图案下得到的压降与流速分布,得出蛇形流场能够更有利于甲醇燃料的均匀分配。在此基础上分别建立不同流道宽度(800, 400, 200, 100 μm)的蛇形流场模型,通过仿真计算甲醇燃料的分布情况来分析其对燃料电池性能的影响,并结合实验结果进行对比得出流道宽度为 200~400 μm 之间为优化值。

关键词: 微型直接甲醇燃料电池; 流场结构; 计算流体动力学; Fluent

中图分类号: TN304105; TM911148 文献标识码: A 文章编号: 1000-9787(2013)03-0017-04

Structure analysis of anode flow field of micro direct methanol fuel cell based on Fluent*

CHEN Guan-sheng^{1,2}, ZENG Yi-bo^{1,2}, LIU Jun^{1,2}, ZHAO Zu-guang^{1,2}, LIN Jie^{1,2}, GUO Hang^{1,2}

(1. School of Physics and Mechanical & Electrical Engineering, Xiamen 361005, China;

2. Pen-Tung Sah Micro Nano Technology Institute, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: Structure of anode flow field is very important for micro direct methanol fuel cell. To optimize the structure of the anode flow field and the distribution of methanol in it, a model of micro direct methanol fuel cell is created and analyzed by using the computational fluid dynamics (CFD) software. The influence of flow field shapes of grid, parallel and serpentine are analyzed and the pressure drop and velocity distribution in the three kinds of flow fields are studied. It shows that the flow field of serpentine is the best for the even distribution of fuel. Based on this, serpentine flow field models with different width (800, 400, 200 and 100 μm) are created. Simulations are taken to analyze the influence of distribution to cell performance and compared with experimental results, it shows that the optimal value of flow channel width is 200~400 μm .

Key words: micro direct methanol fuel cell (μ -DMFC); flow field structure; computational fluid dynamics (CFD); Fluent

0 引言

随着微纳米技术的迅速发展,各类小型便携式产品相继问世,对能源装置的尺寸要求也趋于微型化。微型直接甲醇燃料电池(micro direct methanol fuel cell, μ -DMFC)是通过 MEMS 工艺制作的一种微型能源装置,它直接将化学能转换为电能,具有结构简单、体积和重量比能量密度高、燃料补给方便、储存携带方便、环境污染小等优点,使其在便携式电子设备上具有非常好的前景而成为研究与开发的热点^[1]。对于微型直接甲醇燃料电池,合理的流场设计能够为反应提供从扩散层到催化剂表面的、适当和均匀分布的质量传输,从而提高电池的性能^[2]。

为了研究流场结构对电池性能的影响,本文使用计算流体动力学(CFD)软件 Fluent 对微型直接甲醇燃料电池的流场结构进行仿真分析,以便对微型直接甲醇燃料电池的流场板进行优化设计。

1 直接甲醇燃料电池的工作原理与结构

如图 1 所示,直接甲醇燃料电池主要由阳极流场板、阴极流场板和膜电极组成。其中,膜电极包括质子交换膜、扩散层和催化层。催化层是电化学反应的场所,质子交换膜有传输质子、阻止电子和隔离反应物的作用,扩散层起到支撑催化层、传输反应物和传导电子的作用;阴阳极板有收集电流和分配反应物的作用。

收稿日期: 2012-09-14

* 基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(60936003)

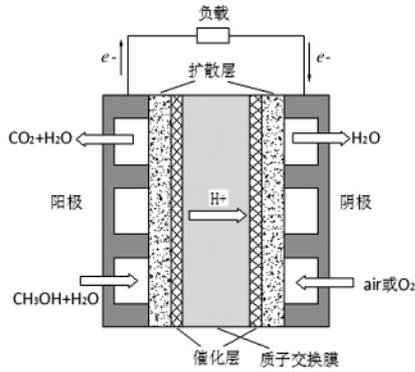
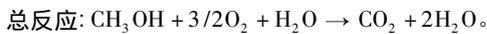
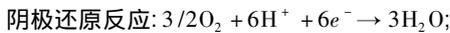
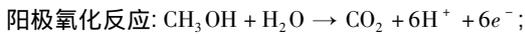


图 1 直接甲醇燃料电池的原理与结构图

Fig 1 Principle and structure diagram of DMFC

当甲醇燃料电池工作时,阳极注入甲醇水溶液,在催化剂作用下发生氧化反应,产生质子(H⁺)、电子(e⁻)和CO₂。产生的电子通过外电路形成电流,而产生的质子则通过质子交换膜传输到阴极,在阴极催化层与通入的O₂和外电路传来的电子发生还原反应生成水,实现燃料电池的循环。其反应如下:



2 流场图案设计

流场板是燃料电池的关键部件之一,在直接甲醇燃料电池中,阳极流场板主要有 2 个作用^[3,4]: 1) 收集燃料电池产生的电流; 2) 使反应物在膜电极表面形成均匀的分布并顺利地排除生成物。流场结构图案直接决定了甲醇燃料能否在膜电极表面分布均匀和顺利排出反应产生的CO₂气体,同时也决定了整个流场的压降,对电池的性能影响很大,因此,流场结构图案的合理设计是非常有必要的。通常使用的流场结构主要有平行流场、蛇形流场和点型流场等,如图 2 所示,平行流场由相互平行的一组流道组成,蛇形流场是单一弯曲的流道,而点型流场则是由点阵分割开的相互交错的流道构成。

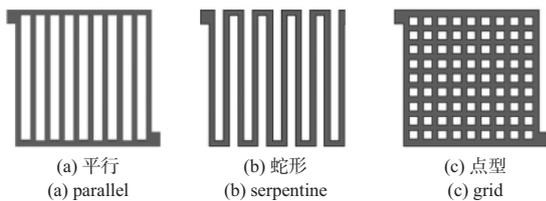


图 2 三种流场结构示意图

Fig 2 Structure diagrams of three kinds of flow fields

2.1 直接甲醇燃料电池阳极数学模型

利用 CFD 软件对图 2 所示的 3 种不同流场图形建立直接甲醇燃料电池阳极模型,模型包含流场沟道、扩散层和催化层,燃料在流道中传输通过扩散层再到达催化层发生电化学反应,其模型内部的控制方程包括溶液在多孔介质中

的质量守恒方程、动量守恒方程、能量守恒方程,分别表示如下

$$\frac{\partial(\epsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho\vec{u}) = S_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\epsilon\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\epsilon\mu\nabla\vec{u}) + S_u, \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\epsilon\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\epsilon\rho C_p \vec{u} T) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}}\nabla T) + S_Q, \quad (3)$$

式中 ϵ 为孔隙率, ρ 为密度, \vec{u} 为速度矢量, S_m 为质量源项, p 为压力, μ 为粘度, S_u 为动量源项, C_p 为定压比热, T 为温度, k_{eff} 为有效导热系数, S_Q 为能量源项^[5]。

2.2 模型参数

模型的几何参数与工作的基本参数如表 1 所示,燃料电池总的反应面积为 10 mm × 10 mm。

表 1 燃料电池的主要参数

| Tab 1 Main parameters of fuel cell | |
|------------------------------------|------------------------|
| 参数 | 数值 |
| 工作温度(°C) | 室温 |
| 流道深度(μm) | 200 |
| 扩散层厚度(μm) | 200 |
| 催化层厚度(μm) | 30 |
| 甲醇燃料浓度(mol/L) | 1 |
| 阳极进口流量(mL/min) | 1 |
| 扩散层孔隙率 | 0.5 |
| 催化层孔隙率 | 0.5 |
| 甲醇在水中的扩散系数(m ² /s) | 2.8 × 10 ⁻⁹ |

由于直接甲醇燃料电池的工作过程非常复杂,因此,建立的模型需要基于一些假设:

- 1) 燃料电池工作稳定;
- 2) 电池内部温度恒定且相等;
- 3) 流道中流体为层流;
- 4) 不考虑渗透通过质子交换膜的甲醇;
- 5) 忽略重力的影响;
- 6) 所有气体为理想气体;
- 7) 甲醇在阳极的消耗通过设置源项来实现。

2.3 流场图案选择

将建立好的燃料电池模型导入 CFD 软件中,设定甲醇溶液的进料速度为 1 mL/min,浓度为 1 mol/L,燃料电池工作温度为室温等参数,并计算。

图 3 所示为 3 种不同图形结构的流场得到的静压分布图,由图中可以看出 3 种流场的进出口压力差分别为:平行流场为 36.8 Pa,点型流场为 27.3 Pa,蛇形流场为 589 Pa;可以看出平行流场与点型流场的进出口压力差相差不大,且远小于蛇形流场的压降。从压降的角度来讲,流道中的压降小,即流道内的静压力较小时,会减少甲醇从阳极渗透到

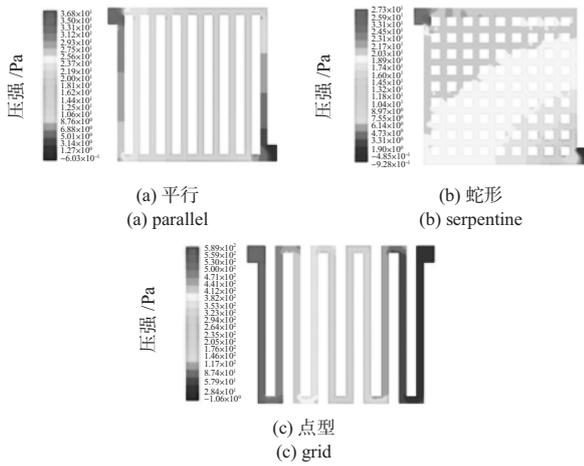


图 3 三种流场图形结构的压强分布

Fig 3 Distribution of intensity of pressure of three kinds of flow field

阴极, 从而减少混合电势的产生, 提高电池性能, 同时能减少对寄生泵的要求, 从整体上有助于提高燃料电池的效率。

通过模拟计算还可以得出 3 种流场的速度分布图, 如图 4 所示, 平行流场的最大流速为 0.167 m/s, 点型流场的最大流速为 0.157 m/s, 蛇形流场的最大流速为 0.330 m/s; 可以看出平行流场与点型流场的最大流速相差不大, 而蛇形流场的最大流速为平行流场与点型流场的 2 倍, 流速越快越有利于燃料的输入和生成物的排出。同时, 从图中的速度分布可以看出: 平行流场与点型流场的速度分布都不是很均匀, 而蛇形流场的速度分布很均匀; 而均匀的速度分布能够使燃料同时输送到流场各个部分, 以及时供给反应所需的燃料; 不均匀的速度分布会造成局部区域的燃料耗尽形成反应死区, 导致电池性能的降低。相对于传统大型的燃料电池, 微型直接甲醇燃料电池整体结构很小, 所以,

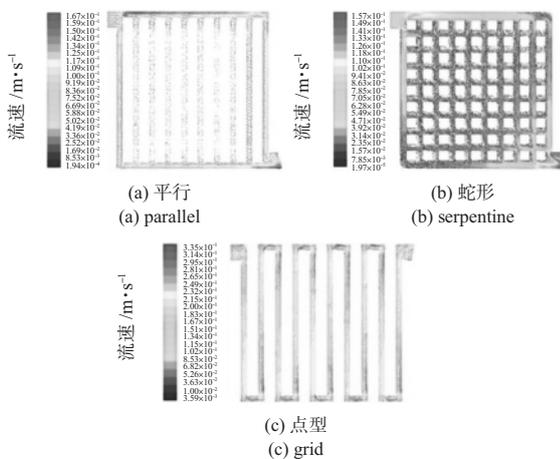


图 4 三种流场结构的速度矢量分布

Fig 4 Velocity vector distribution of three kinds of flow field structure

在其实际工作中压降带来的影响相对较小, 对于寄生泵的要求也不高, 而燃料的均匀分布直接决定了电池的输出性

能, 因此, 综合考虑压降与速度分布的影响, 蛇形流场图形性能优于平行流场和点型流场。

3 蛇形流场尺寸的优化

通过讨论流场图案对燃料电池的性能的影响, 分析得出了蛇形流场相对于平行和点型流场是较优的流场图案。而对于蛇形流场来说, 其几何参数也同样影响着燃料电池的性能, 因此, 有必要对其几何尺寸进行优化。为了讨论蛇形流场的流道宽度对电池性能的影响, 选用不同流道宽度的蛇形流场进行仿真计算分析, 其流道几何尺寸如表 2 所示。

表 2 蛇形流场的几何参数

Tab 2 Geometry parameters of serpentine flow field

| 方 案 | 流道宽度(μm) | 岸宽度(μm) | 流道深度(μm) |
|-----|-----------------------|----------------------|-----------------------|
| 1 | 800 | 800 | 200 |
| 2 | 400 | 400 | 200 |
| 3 | 200 | 200 | 200 |
| 4 | 100 | 100 | 200 |

建立直接甲醇燃料电池的阳极模型, 在计算过程中采用质量源项来模拟甲醇在催化层的消耗, 其余基本工作参数如表 1 所示。图 5 所示为电流密度为 100 mA/cm^2 时, 不同流道宽度下得到的甲醇在扩散层与催化层交界面的分布图(图中左下角为流道入口, 右上角为流道出口)。从图 5(a) 中可以看出: 甲醇燃料的分布从流道入口至流道出口逐渐减少, 这是由于在入口处, 流道中的甲醇含量较高, 可以及时地补充催化层中消耗的甲醇, 而在靠近出口处, 流道中的甲醇含量相对较低, 在高电流密度的工作环境下不能及时地补充甲醇的消耗。当流道从 $800 \mu\text{m}$ 减少到 $400 \mu\text{m}$ 时, 甲醇在交界面的分布效果差别不大, 而当流道宽度进一步减少为 $200 \mu\text{m}$ 时, 甲醇燃料在交界面处明显扩大, 在流道宽度进一步减少到 $100 \mu\text{m}$ 时, 可以看出甲醇在催化层与扩散层的交界处分布更均匀。随着流道宽度的减少, 单个流道与扩散层触的面积减小, 但总的接触面积增大, 使得扩散层中有更多的区域与流道接触, 从而加快了燃料从流道向催化层的扩散。

图 6 为通过计算得到的不同流道宽度下的流道中甲醇燃料速度分布图, 从 $800 \mu\text{m}$ 的流道到 $100 \mu\text{m}$ 的流道的最大流速依次为 0.141 、 0.234 、 0.425 m/s 和 0.24 m/s ; 可以看出最大流速是发生在 $200 \mu\text{m}$ 的流道宽度中。在相同的进液条件下, 流道较宽时, 流速就会相对较小, 随着流道宽度的减小, 速度逐渐增大, 同时随着宽度的减少, 流道中的压降也在增大, 当流道宽度减少到一定程度时, 流道中的压降过大使得流速变慢, 同时也增加了对风机的要求。所以, 流道的宽度不能一直减少, 而是存在一个优化值。综合考虑对甲醇燃料的分布的影响和在流道中的传输速率, $200 \mu\text{m}$ 宽度的流道为相对较优的蛇形流道宽度尺寸。

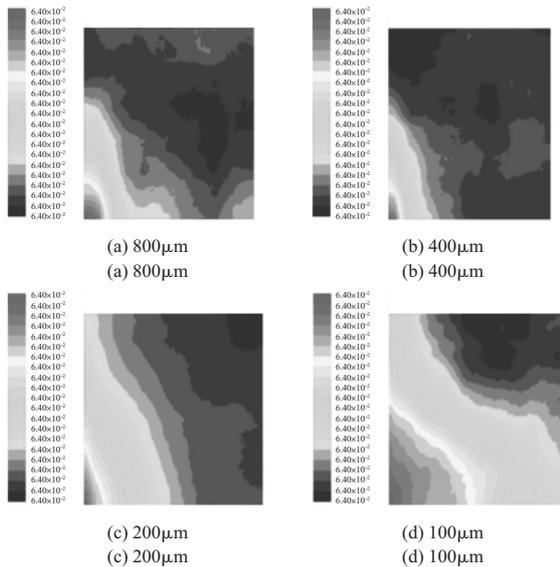


图 5 不同流道宽度下催化层与扩散层交界面处的甲醇质量分数分布

Fig 5 Mass fraction distribution at the interface of catalyst layer and diffusion layer with different flow channel width

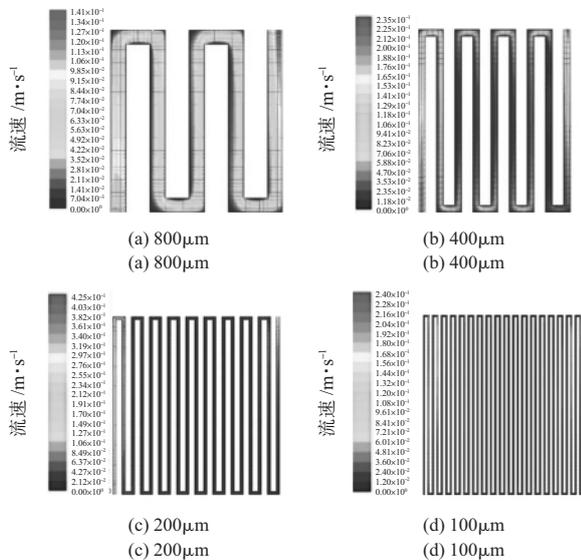


图 6 不同流道宽度下甲醇燃料的速度分布图

Fig 6 Velocity distribution of methanol with different flow channel width

在前期实验研究中制备了基于透明的不同流道宽度的微型直接甲醇燃料电池,并进行了测试分析,图 7 所示为不同流道宽度下的微型直接甲醇燃料电池的输出功率密度,测试在常温常压下进行,甲醇溶液为 1 mol/L,流速为 1 mL/min。

由图 7 可以看出:在电流密度较低时,微型直接甲醇燃料电池的输出功率密度受流道宽度的影响很小,而随着电流密度的增加,输出功率密度的变化明显。实验的测试结果显示:流道宽度分别为 800、400、200 μm 和 100 μm 时,其输出功率密度分别为 4.11、4.62、3.87 mW/cm^2 和 3.14 mW/cm^2 。从中可以看出:流道宽度为 400 μm 时,输出功率密度最大,与

仿真得出的结果有一些差别,这是因为燃料电池在实际工作中影响因素很多,但从实验结果的趋势来看,流道从 100 μm 增加到 200 μm 时,输出功率密度增大的幅度最大,而当流道宽度增加到 800 μm 时,输出功率密度反而降低,这与仿真结果相符合。结合仿真与实验的结果分析,可以得出流道宽度在 200 ~ 400 μm 之间是较优的尺寸。

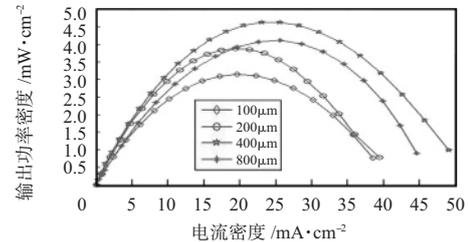


图 7 不同流道宽度 DMFC 的输出功率密度

Fig 7 Output power density of the DMFC with various flow channel widths

4 结论

建立了直接甲醇燃料电池阳极模型,通过仿真分析对比了平行、点型和蛇形 3 种不同流场图案对燃料电池的性能的影响,得出蛇形流场能够更有利于燃料的均匀分配,在此基础上对蛇形流场的结构参数进行优化,对比了不同流道宽度下的蛇形流场结构对燃料运输的影响,分析其对甲醇燃料在催化层与扩散层交界处的分布影响,得出流道宽度的减少有利于提高燃料输送到催化层的效率,同时考虑了不同流道宽度下的流速,得到流道宽度的过小会阻碍溶液传输的速度,从而影响传输效率。最后,与实验测试的不同流道宽度的微型直接甲醇燃料电池的输出功率密度进行对比,综合分析得出:蛇形流道的宽度的优化尺寸介于 200 ~ 400 μm 之间。

参考文献:

- [1] Heinzl A, Hebling C, Müller M. Fuel cells for low power applications [J]. Journal of Power Sources, 2002, 105: 250 - 255.
- [2] 赵天寿. 微型燃料电池原理与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2011: 218 - 221.
- [3] Watkins D S, Dircks K W, Epp D G. Novel fuel cell fluid flow field plate: US #988583 [P]. 1991-01-29.
- [4] Lu G Q, Wang C Y. Development of micro direct methanol fuel cells for high power applications [J]. Journal of Power Sources, 2005, 144: 141 - 145.
- [5] 奥海尔. 燃料电池基础 [M]. 王晓红, 等, 译. 北京: 电子工业出版社, 2007: 318 - 320.

作者简介:

陈观生 (1988 -), 男, 江西抚州人, 硕士研究生, 研究方向为微型直接甲醇燃料电池。