

螺旋流场设计对 PEM 电解槽性能影响的模拟研究*

穆瑞^{1,2}, 马晓锋², 翁武斌², 何勇^{1,2}, 王智化^{1,2,†}

(1. 浙江大学 浙江省清洁能源与碳中和重点实验室, 杭州 310027;
2. 浙江大学 能源高效清洁利用全国重点实验室, 杭州 310027)

摘要: 为提高质子交换膜 (PEM) 电解槽的性能, 在一定的假设条件下, 通过 Comsol Multiphysics 软件设计并模拟一种基于避免转角设计考虑的 PEM 电解槽阳极螺旋流场, 对比不同形式的流场 (平行流场、蛇形流场) 对达到稳定运行时的电解槽电解电压、膜电机组件的平均温度和多孔传输层 (PTL) 的平均氧气质量分数的影响, 并对新型流场设计的尺寸进行优化。仿真结果表明, 新型螺旋流场设计性能最佳。和平行流场相比, 电解槽的电解电压降低约 0.05 V, 膜电极平均温度降低约 5.6 K, PTL 内的平均氧气质量分数降低约 13.9%, 下降幅度达到 60%。同时探究该螺旋流场的流道宽度和高度对 PEM 电解槽性能的影响。新型螺旋流场设计降低了电解电压和氧气泡堵塞扩散层空隙的可能性, 提高了电解槽运行的稳定性。

关键词: 流场; PEM 电解槽; 电解电压; 膜电极温度; 氧气质量分数

中图分类号: TK91

文献标志码: A

DOI: 10.3969/j.issn.2095-560X.2023.04.001

Simulation Study on the Effect of Spiral Flow Field Design on the Performance of PEM Electrolytic Cells

MU Rui^{1,2}, MA Xiaofeng², WENG Wubin², HE Yong^{1,2}, WANG Zhihua^{1,2,†}

(1. Key Laboratory of Clean Energy and Carbon Neutrality of Zhejiang Province, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China;
2. State Key Laboratory of Clean Energy Utilization, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Abstract: In order to improve the performance of proton exchange membrane (PEM) electrolysis cell, a PEM anode spiral flow field based on avoiding corner design considerations was designed and simulated by Comsol Multiphysics software under certain assumptions. The effects of different configurations of flow fields (parallel flow field and serpentine flow field) on the electrolysis voltage, average temperature of membrane electrode, and average oxygen mass fraction of porous transport layer (PTL) when achieving stable operation were compared. The sizes of the new flow field were also optimized. The results indicated that the new spiral flow field has the best performance. Compared with the parallel flow field, the electrolysis voltage of the electrolytic cell decreased by about 0.05 V, the average temperature of the membrane electrode assembly decreased by about 5.6 K, and the average oxygen mass fraction in the PTL decreased by about 13.9%, with a decrease of up to 60%. At the same time, the influence of the width and height of the flow channel in the spiral flow field on the effects of PEM electrolysis cell was explored. The new spiral flow field reduces the contents of oxygen bubbles blocking the gaps in the diffusion layer and electrolytic voltage, and improves the stability of the electrolytic cell operation.

Keywords: flow field; PEM electrolysis cells; electrolytic voltage; membrane electrode temperature; oxygen mass fraction

0 引言

氢能作为一种清洁无污染的能源, 在面临双碳目标的历史机遇下, 又迎来新一轮发展热潮, 引

起了各国研究人员的关注。质子交换膜 (proton exchange membrane, PEM) 电解水制氢技术相比于碱性电解水制氢、阴离子交换膜制氢和高温固体氧化物制氢具有产氢纯度高、动态响应速度快、负

* 收稿日期: 2023-05-22 修订日期: 2023-06-11

基金项目: 中央高校基本科研业务费项目 (2022ZFJH004)

† 通信作者: 王智化, E-mail: wangzh@zju.edu.cn

引用本文: 穆瑞, 马晓锋, 翁武斌, 等. 螺旋流场设计对 PEM 电解槽性能影响的模拟研究[J]. 新能源进展, 2023, 11(4): 295-302.

Citation: MU Rui, MA Xiaofeng, WENG Wubin, et al. Simulation study on the effect of spiral flow field design on the performance of PEM electrolytic cells[J]. Advances in new and renewable energy, 2023, 11(4): 295-302.

荷范围广、输出氢气压力高以及结构紧凑等众多优点。

如何降低 PEM 电解水制氢系统的设备成本和运行成本,并延长其运行寿命是 PEM 电解水技术目前研究的重点之一。国内外学者针对 PEM 电解槽的优化设计做了大量研究,其中降低催化剂 Pt 负载量投入的研究较多,而双极板研究领域投入较少。在电解槽中双极板所占体积最大,质量最重,而且双极板通常采用钛材来抵抗酸性的环境,价格较高,其成本约占堆栈总成本的 48%^[1]。

双极板是 PEM 电解水制氢系统中的重要部分,因其是电解过程中反应物分配的第一阶段。双极板执行许多基本功能,例如向催化剂层提供反应物、为膜电极组件(membrane electrode assembly, MEA)提供机械支撑、为排水提供通道和保持反应物分离等。双极板上的流道的特定功能之一是产生均匀分布在催化层上的流场,流场分布不均匀可能会导致珍贵的催化剂材料使用不平衡,且装置的整体产氢效率低于预期。因此流道形状必须进行正确的设计,以将反应物均匀分布在催化剂表面。

此外,当 PEM 电解槽在高电流密度下运行时,水在阳极侧快速反应生成大量的氧气,长时间运行会导致 PEM 电解槽的阳极扩散层和流道内聚集大量的氧气,若不能将氧气尽快排出,氧气气泡将会堵塞作为多孔介质的阳极扩散层的空隙,阻碍流道内的水穿过阳极扩散层进入催化剂层发生析氧反应,从而降低整个电解槽的效率。同时,电流做功会产生大量的热,大量氧气的聚集增加了电解槽内的传质阻力,会使局部产生过热现象,而 MEA 的温度升高会影响其性能和使用寿命,严重时甚至会导致膜电极破裂,阳极和阴极气体出现交叉,存在严重的安全隐患。因此,进行双极板阳极侧流道结构的优化设计是十分必要的。

关于流道结构的优化设计已有学者开展了一些工作,但是大部分都集中在常见流场的对比。MAJASAN 等^[2]研究了单通道 PEM 电解池的阳极流道深度对电解槽电解性能的影响。NIE 等^[3]对简化的 PEM 电解槽双极板内的速度和温度分布进行三维水流和换热的数值模拟。他们的研究表明,通道内的最高温度出现在双极板的中心,最高温度随着水流速的增大而降低,且流场的入口和出口压降相对较大。RUIZ 等^[4]对高温 PEM 电解槽进行三维数

值分析,并检验了平行、多路径蛇形和单路径蛇形流场下电解槽的性能,提出多蛇形通道设计在制氢、温度均匀性和压降方面具有更好的性能。TIJANI 等^[5]评估了三种流场设计中的压降和速度,包括平行、单路径和双路径蛇形,结果表明,在平行流场中,压降较小,湍流最小。TOGHYANI 等^[6]采用三维模型对阳极侧和阴极侧平行流场和单、双、三和四路径蛇形流场进行分析,从速度分布、压力分布(压降)、温度分布、氢气摩尔质量分布、电流密度分布等五个角度来比较五种不同的流场模式,得出了双路径蛇形流场在这五个角度具有相对最佳的结论。OLESEN 等^[7]对高压 PEM 电解槽阳极双极板上的两相流进行了数值研究,结果表明,在两相流中,由于流场中流动分布不当,不适合使用平行通道。他们提出了一种圆形平面交指型流场,以便更有效地分配反应物。

TOGHYANI 等^[6]提出在蛇形流场中总是不可避免会出现转折点,且蛇形与平行流场是目前使用最为广泛的流场形状。而在蛇形流场的通道转折点处,由于相邻通道之间的压差比其他区域大,因此流速沿着通道减小。同时速度减小导致流体和壁面之间的对流换热能力下降,使通道转弯处温度升高,造成温度分布不均匀。此外,在蛇形流道的转弯处,再循环流产生的剪切应力导致更多的水到达反应表面且在转弯部分的欧姆损耗较低,导致局部电流密度增加,造成了电流密度分布不均匀。

因此,本文考虑避免转角带来的影响,提出一个新型的螺旋流场设计,通过比较在相同的工作电流密度下的电解电压、多孔传输层(porous transport layer, PTL)内的平均氧气质量分数和 MEA 平均温度进行评价分析,同时研究该螺旋流场流道宽度和高度对 PEM 电解槽的影响,为优化电解槽的流场结构设计提供理论依据。

1 模型与参数

1.1 物理模型

图 1(a)为本文研究的 PEM 电解槽阳极几何模型。结构从上到下分别为流道、阳极气体扩散层、阳极气体催化层、质子交换膜、阴极气体催化层以及阴极气体扩散层。为验证螺旋流场的优越性,同时建立了如图 1(b)所示的平行直流道和图 1(c)所

示的蛇形流道作为对比。用到的几何和物理参数见表1和表2^[8-9]。

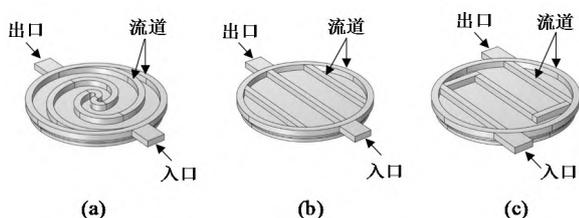


图1 螺旋流场(a)、平行流场(b)和蛇形流场(c)的三维模型

Fig. 1 3D models of spiral flow field (a), parallel flow field (b), and serpentine flow field (c)

表1 模型几何参数

Table 1 Geometric parameters of the model

参数	数值
阴极与阳极极板尺寸/mm	20
膜尺寸/mm	20
流道宽度/mm	1
流道高度/mm	1
入口、出口宽度/mm	3
质子交换膜厚度/mm	0.2
扩散层厚度/mm	0.6
反应面积/mm ²	π

表2 模型物理参数

Table 2 Physical parameters of the model

参数	数值
阴极电荷转移系数 α_c	0.5
阳极电荷转移系数 α_a	0.5
参考交换电流密度 $i_0/(A/m^2)$	0.00
扩散层电导率 $a_s/(S/m)$	5 000
扩散层孔隙率 ϵ_g	0.4
质子交换膜热导率 $K_m/[W/(m \cdot K)]$	0.67
氧气热导率 $K_{O_2}/[W/(m \cdot K)]$	0.204
氢气热导率 $K_{H_2}/[W/(m \cdot K)]$	0.029 6
扩散层热导率 $K_s/[W/(m \cdot K)]$	15.2
活性比表面积 a_v	1×10^9
温度 T/K	353.15
压力 P/MPa	0.1

1.2 模型假设

建立一个同时耦合电化学反应、多组分的流体和多孔介质的流动、固体和流体的传热与传质过程

的 PEM 阳极电解槽三维模型。该模型基于 Comsol 多物理场仿真软件进行建模分析,为简化计算,做如下假设:①参与反应的液态水和产生的气体均为不可压缩流体;②只考虑阳极侧的液态水和氧气两相流体流动,且只在阳极侧有循环水供应,阴极侧的氢气产生后直接排出,不予考虑;③电极的多孔介质(通常为钛粉)为各向同性;④质子交换膜只能透过氢离子,阳极侧产生的氧气与阴极侧产生的氢气不发生交叉扩散。

1.3 模型验证

1.3.1 实验对照

如图2,为了验证模拟数据的准确性,将单通道电解槽模型计算结果与 MARANGIO^[10]实验测得的结果进行对照。平均工作电流密度为 $2 A/cm^2$ 时的误差仅为 3%,模型建立基本正确。

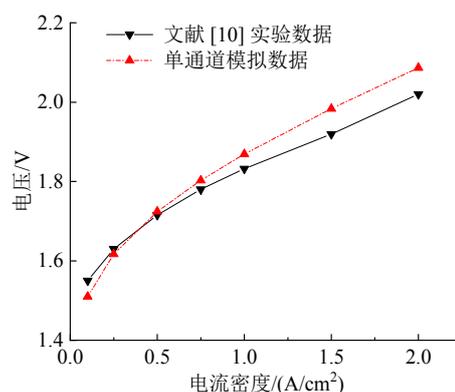


图2 单通道模型仿真结果与文献[10]实验数据对比

Fig. 2 Comparison of single channel model simulation results with experimental data from literature [10]

1.3.2 网格无关性验证

数值计算通常需要进行网格无关性验证,如表3,设计了5种单元数量在单通道电解槽模型中进行比较,发现电压差别几乎可以忽略不计。为兼顾计算时间和准确率,选取模型的单元数为 25 307。

表3 不同单元数量的单通道电解槽电压对比

Table 3 Voltage comparison of single channel electrolytic cells with different number of units

单元数量	电解电压/V
85 592	2.450 191 680 427 605 6
42 647	2.450 191 680 427 604 7
25 307	2.450 191 680 427 605 6
13 547	2.450 191 680 427 606 5
8 310	2.450 191 680 427 605 6

1.4 数学模型

1.4.1 电化学模型

质子交换膜电解水制氢过程中的电解电压 E 由开路电压 E_{eq} 、活化过电势 η_{act} 、欧姆过电势 η_{Ohm} 和扩散过电势 η_{diff} 组成^[9]。

$$E = E_{\text{eq}} + \eta_{\text{act}} + \eta_{\text{Ohm}} + \eta_{\text{diff}} \quad (1)$$

开路电压在不同的温度和压力下有所差别，可以通过能斯特方程计算：

$$E_{\text{eq}} = E_{\text{eq,ref}}(T) + \frac{RT}{nF} \ln \left(\frac{p_{\text{O}_2}^{0.5} p_{\text{H}_2}}{p_{\text{H}_2\text{O}}} \right) \quad (2)$$

式中： R 为气体常数，8.314 J/(mol·K)； F 为法拉第常数，96 485 C/mol； T 为电解水时的工作温度，K； p_i (i 代表 O_2 、 H_2 、 H_2O) 为各组分的平衡压力。

$E_{\text{eq,ref}}(T)$ 可以通过下式计算：

$$E_{\text{eq,ref}}(T) = 1.229 - 0.9 \times 10^{-3} (T - 298.15) \quad (3)$$

活化过电势包括阴阳两极的活化过电势 $\eta_{\text{act,a}}$ 和 $\eta_{\text{act,c}}$ ，可以通过巴特勒-福尔默方程计算：

$$i_{\text{a}} = a_{\text{v}} i_{\text{o,a}} \left\{ \exp \left(\frac{\alpha_{\text{a}} F \eta_{\text{act,a}}}{RT} \right) - \exp \left[\frac{(1 - \alpha_{\text{a}}) F \eta_{\text{act,a}}}{RT} \right] \right\} \quad (4)$$

$$i_{\text{c}} = a_{\text{v}} i_{\text{o,c}} \left\{ \exp \left(\frac{\alpha_{\text{c}} F \eta_{\text{act,c}}}{RT} \right) - \exp \left[\frac{(1 - \alpha_{\text{c}}) F \eta_{\text{act,c}}}{RT} \right] \right\} \quad (5)$$

式中： a_{v} 为活化性比表面积； α_{a} 和 α_{c} 为电荷转移系数； $i_{\text{o,a}}$ 和 $i_{\text{o,c}}$ 分别为阳极和阴极的交换电流密度。

当电子在电解槽之间转移时，会有一部分能量损失，即欧姆损失，主要由各个部分之间的电阻产生。将这几部分组件假设为各向同性的材料，只考虑温度对质子交换膜电阻的影响。质子交换膜的电导率计算公式如下：

$$\sigma_{\text{m}} = 10 \times \exp \left[1268 \left(\frac{1}{303.15} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (6)$$

则总欧姆过电势的计算公式为：

$$\eta_{\text{Ohm}} = i \left(\frac{\phi_{\text{m}}}{\sigma_{\text{m}}} + \frac{\phi_{\text{s}}}{\sigma_{\text{s}}} \right) \quad (7)$$

式中： σ_{m} 和 σ_{s} 分别为质子交换膜和电解槽固相组件的电导率； ϕ_{m} 为电解质电势； ϕ_{s} 为电解槽固相的电势。

由于扩散过电势不足电解槽电势的千分之一，不予考虑。

1.4.2 质量守恒模型

模型定义的流体为不可压缩流体，可以通过麦克斯韦-斯特凡方程描述电解槽内部各组分的对流和扩散，如下所示：

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \omega_i + \nabla \cdot \left\{ -\rho \omega_i \sum_{j=1}^N D_{ij} \left[\frac{M}{M_j} \left(\nabla \omega_j + \omega_j \frac{\nabla M}{M} \right) + \left(x_j - \omega_j \right) \frac{\nabla P}{P} \right] \right\} \omega_i \rho u = q_i \quad (8)$$

式中： ω_i 、 ω_j 为不同组分的质量分数； P 为分压； M 为摩尔质量； q_i 为不同组分的通量，是局部电流密度的函数； D_{ij} 为自由空间的扩散系数； x_j 为摩尔分数； ρ 为气体混合物的密度。

$$q_{\text{H}_2} = \frac{j_{\text{c}}}{2F} M_{\text{H}_2} \quad (9)$$

$$q_{\text{O}_2} = \frac{j_{\text{a}}}{4F} M_{\text{O}_2} \quad (10)$$

$$q_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{j_{\text{a}}}{2F} M_{\text{H}_2\text{O}} \quad (11)$$

式中： j_{c} 和 j_{a} 为 c、a 组分相对于摩尔平均速度的扩散通量，J/mol。

气体混合物的密度可由下式计算：

$$\rho = \frac{(p + p_{\text{ref}}) M}{RT} \quad (12)$$

$$M = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (13)$$

1.4.3 动量守恒模型

多孔介质区域的动量方程由布林克曼方程描述，其中气体速度由达西定律和连续性方程近似计算，可表示如下：

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \left[(u \cdot \nabla) \frac{u}{\varepsilon} \right] = \nabla \cdot \left[-p + \frac{\mu}{\varepsilon} (\nabla u) - \frac{2\mu}{3\varepsilon} (\nabla \cdot u) \right] - \left(\frac{\mu}{k} + Q \right) u \quad (14)$$

$$\nabla \cdot (\rho u) = Q \quad (15)$$

式中： ε 为电极孔隙率； u 为质量速度； μ 为黏度； k 为电极渗透率； Q 为质量源项，可用下式计算

$$Q = \sum_m \sum_i R_{i,m} M_i \quad (16)$$

式中: $R_{i,m}$ 为不同组分的通量; M_i 为摩尔质量。

综上,利用能斯特方程、巴特勒-福尔默方程、欧姆定律和一些半经验公式建立了电化学模型;利用质量守恒方程、麦克斯韦-斯特凡方程和一些基本的热力学公式建立了质量守恒模型;利用动力学守恒和布林克曼方程建立了动量守恒模型。其中,质量与动量守恒基于 Comsol 软件中的“自由和多孔介质流动”模块进行设定。热量传递模型基于 Comsol 软件中的“固体和流体传热”模块进行设定,将水流入口、出口设为热通量,其余部分为热绝缘。

通过耦合上述三个模型,建立了 PEM 水电解槽的完整数学模型。

2 结果与讨论

液态水进入阳极流道入口后,在流道的分配下进入扩散层,电解水产生的氧气穿过扩散层后与未反应的水经过阳极流道的出口排出电解槽。本文考虑避免转角设计的一种新型螺旋流场对上述 PEM 电解槽的问题起到一定的改善作用,为了体现优化效果,又同时建立了常见的平行流场和蛇形流场模型进行对比。通过比较达到设定的相同电流密度下的电解电压、PTL 内的氧气质量分数以及 MEA 的温度进行综合对比。

在此之后,将绘制三种流场的极化曲线进一步验证分析,同时,将会对具有优势的螺旋流场进行流道高度和宽度的讨论,探讨该流场的流道宽度和高度对 PEM 电解槽性能的影响。

2.1 不同形式流场的对比分析

在入口水流速相同和其他参数不变的情况下,设计不同的流道结构,通过对比体现螺旋流场设计的优越性。阳极入水口的初始温度为 353.15 K,进水流量为 2×10^{-5} kg/s。设置达到稳定运行状态下的电流密度为 2 A/cm^2 。仿真结果如图 3、图 4 所示,与平行流场和蛇形流场相比,采用螺旋设计的流场电压、MEA 温度和 PTL 氧气质量分数均有所下降。

其中,达到 2 A/cm^2 电流密度下稳定运行状态的电解电压从平行流场的 2.269 8 V 降低至 2.218 3 V,降低了约 0.05 V;膜电极组件温度从平行流场的 341.7 K 降低至 336.06 K,下降了 5.64 K;PTL 内的氧气质量分数从平行流场的 0.228 31 降低至 0.089 525,

约降低了 0.139。这可能是由于螺旋流场拉长了反应物反应的距离,避免氧气气泡聚集成大气泡后难以排出。

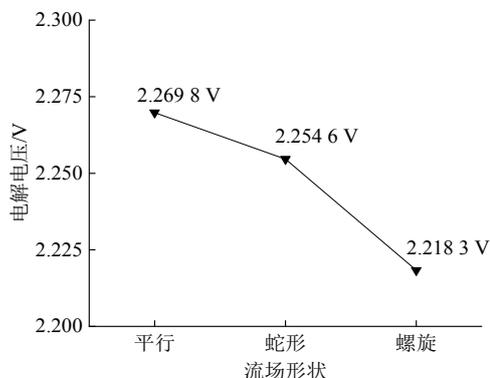


图 3 三种流场达到稳定状态下的电压对比图

Fig. 3 Voltage comparison diagram of three flow fields at stable state

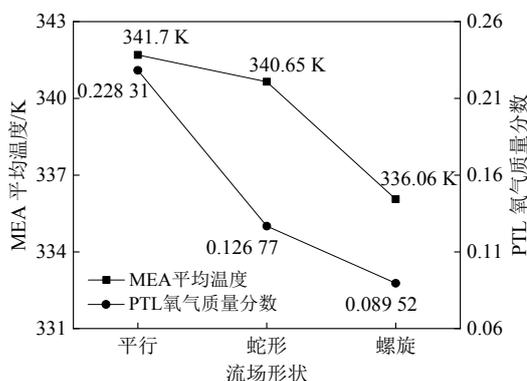


图 4 流场形状对 PEM 电解槽的 MEA 平均温度和 PTL 氧气质量分数的影响

Fig. 4 The effect of flow field shape on MEA average temperature and PTL oxygen mass fraction of PEM electrolysis cell

综上所述,螺旋流场相较于常见的平行流场和蛇形流场具有更好的性能。螺旋流场的使用有效降低了电解水过程中的电量消耗、膜电极组件的温度,降低了氧气气泡阻塞阳极气体扩散层的可能性,提高了电解槽系统稳定运行的时间。

2.2 不同形式流场极化曲线的对比

在恒定的操作温度和压力下绘制的极化曲线(电压与电流密度曲线)通常被认为是研究流场设计性能的重要方法。电流密度反映了产氢量,电流密度越大产氢量越大;电压显示了电解槽的能量使用情况,达到相同电流密度所需的电势越低,电解槽产生相同数量氢气消耗的电量就越少,也就越具有经济性。

图 5 显示了螺旋流场、平行流场和蛇形流场的极化曲线对比情况。图中可见,相较于平行流场和蛇形流场,螺旋流场达到相同电流密度时所需的电压更低,消耗的电量更少,这一点在高电流密度区尤为明显。可见螺旋流场具有更佳的性能。

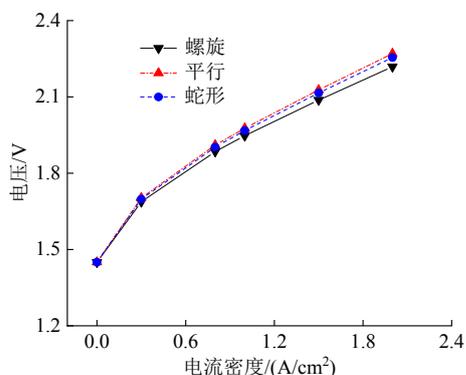


图 5 不同形式流场的极化曲线对比图

Fig. 5 Comparison of polarization curves of different forms of flow fields

2.3 螺旋流场通道宽度对 PEM 电解槽性能的影响

螺旋流场被设计为流道宽度 1 mm、流道高度 1 mm。而流道的宽度和高度对流场造成的影响是未知的。因此,分别从宽度和高度角度进行研究,探究该螺旋流场宽度和高度的变化对 PEM 电解槽性能的影响。

在控制入口水流速相同和其他参数不变的情况下,设计不同宽度的流道,研究流道宽度对电解槽性能的影响。设计五种流道宽度分别为 1 mm、1.25 mm、1.5 mm、1.75 mm、2 mm,阳极入水口的初始温度为 353.15 K,电解槽的工作电流密度设置为 2 A/cm^2 。仿真结果如图 6 和图 7 所示。

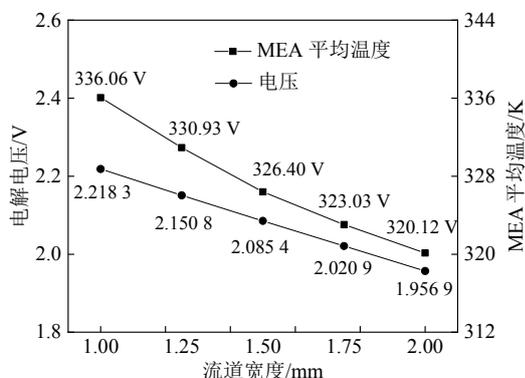


图 6 流道宽度对 PEM 电解槽电压和 MEA 平均温度的影响

Fig. 6 The effect of flow channel width on the voltage and MEA average temperature of PEM electrolysis cell

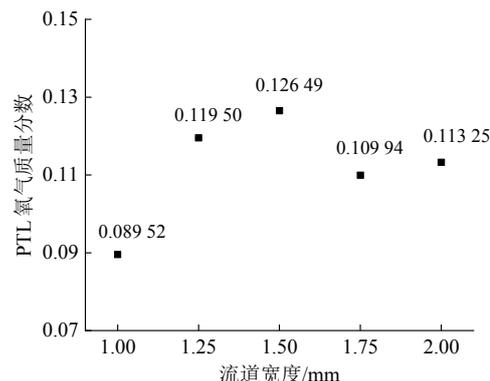


图 7 流道宽度对 PEM 电解槽 PTL 中氧气质量分数的影响

Fig. 7 The effect of flow channel width on the oxygen mass fraction of PTL in PEM electrolysis cell

理论上,当入口水的流速不变时,流道的宽度越大,进入流场的水流量越大,电解产生的氧气和电流做功产生的热量应该更快地被带走。如图 6 所示,随着流道宽度的增加,稳定运行时达到 2 A/cm^2 工作电流密度时的电解电压和膜电极的平均温度逐渐降低。当流道宽度为 2 mm 时,稳定运行时达到 2 A/cm^2 的工作电流密度所需的电解电压最低,膜电极的平均温度升高最小。所需电解电压从 2.2183 V 降低至 1.9569 V,降低了 0.2614 V,降低幅度接近 12%。膜电极平均温度从 336.06 K 降低至 320.12 K,降低了约 16 K。

由图 7 可发现,PEM 电解槽 PTL 氧气质量分数并不符合上述规律,随着流道宽度的增加呈现先上升后下降再上升的趋势。这可能是流道宽度较小时,氧气气泡不容易在流道内形成大气泡聚集在一起,有利于氧气排出;当流道宽度增加时,流道变得扁平化,容易使得氧气团聚成大气泡,不易排出;而随着进入流道的水越来越多,电解产生的氧气又被更快地带走。该现象可能是以上原因共同作用的结果。

综上所述,控制电解槽阳极流场的流道宽度会影响电解槽内部的氧气和水的物质传递过程以及传热过程,从而影响电解槽运行时所需的电解电压。随着流道宽度的增加,氧气有难以排出的趋势,可知电解电压并不会随着宽度的增加无限地下降。因此,该螺旋流场的宽度并不是越宽越好,宽度的增加虽然降低了电解电压和 MEA 的平均温度,但不能无限地下降,同时会使得氧气难以排出。在实际操作中,应适当选取合适的宽度。

2.4 螺旋流场通道高度对 PEM 电解槽性能的影响

保持入口水流速相同和其他参数不变,设计不同高度的流道,研究流道高度对电解槽性能的影响。设计五种流道高度分别为 1、1.5、2、2.5、3 mm,阳极入水口的初始温度为 353.15 K,电解槽的工作电流密度为 2 A/cm²。仿真结果见图 8 和图 9。

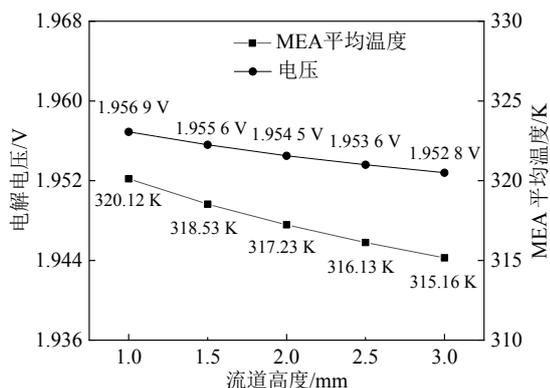


图 8 流道高度对 PEM 电解槽电压和 MEA 平均温度的影响
Fig. 8 The effect of flow channel height on the voltage and MEA average temperature of PEM electrolysis cell

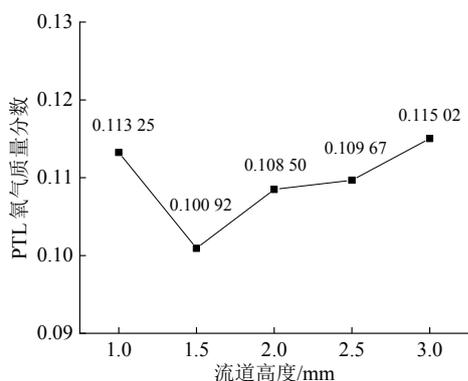


图 9 流道高度对 PEM 电解槽 PTL 氧气质量分数的影响
Fig. 9 The effect of flow channel height on the oxygen mass fraction of PTL in PEM electrolysis cell

观察图 8 发现,随着流道高度的增加,稳定运行时达到 2 A/cm² 工作电流密度时的电解电压和膜电极的平均温度逐渐降低。但流道高度对电解槽性能影响较小。流道高度从 1 mm 增加到 3 mm,稳定运行状态下的电解电压只下降了 0.0041 V,MEA 的平均温度下降约 5 K。而 Nafion 膜通常在 80 °C 以上的温度才有降解的可能^[1],此时设计的 MEA 平均温度本身较低,因此温度的影响较弱。观察图 9 发现,随着流道高度的增加,PTL 氧气质量分数呈现先下降后上升的趋势。流道高度为 1.5 mm 时,PTL

氧气质量分数最低。这可能是通道高度过低时,水流量较小,能够带走的氧气有限,使得氧气质量分数较高;当通道高度过高时,排气性变差,也会影响氧气排出。鉴于双极板为钛材,价格较为昂贵,而流道高度越高,消耗的钛材越多,使得电解槽的成本提高。因此,实际操作中需要考虑流道高度对排气性的影响。

3 结 论

提出一种避免转角设计的螺旋 PEM 电解槽阳极侧流场新设计,耦合了电化学反应、多组分的流体和多孔介质的流动以及固体和流体的传热与传质多个物理场,建立 PEM 电解槽的三维模型进行仿真分析,并与平行流场和蛇形流场进行对比分析。此外,还研究了螺旋流场的宽度和高度对 PEM 电解槽的性能影响。结论如下:

(1) 平行流场和蛇形流场中存在转折点,在转折点处会产生速度、温度和电流密度的突变,使其分布不均匀。相比于平行流场与蛇形流场,螺旋流场避免了转角设计,且达到稳定电流密度下所需的电解电压下降了约 0.05 V,膜电极平均温度下降约 5.6 K,多孔扩散层内的氧气质量分数下降 13.9%,下降幅度到达 60%。提高了电解槽运行的稳定性,具有更好的性能。

(2) 流道宽度并不是越宽越好,流道宽度的增加有利于达到稳定运行时的电解电压和 MEA 平均温度的下降,提高电解槽的稳定性,但并不会无限制地降低。同时流道宽度增加会导致 PTL 氧气质量分数的升高。

(3) 流道高度的增加对到达稳定运行时的电解电压与 MEA 平均温度影响较小,但流道高度的增加会使得 PTL 的氧气质量分数明显升高,影响电解槽的排气性。

参考文献:

- [1] LÆDRE S, KONGSTEIN O E, OEDEGAARD A, et al. Materials for proton exchange membrane water electrolyzer bipolar plates[J]. International journal of hydrogen energy, 2017, 42(5): 2713-2723. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2016.11.106.
- [2] MAJASAN J O, CHO J I S, MAIER M, et al. Effect of anode flow channel depth on the performance of polymer electrolyte membrane water electrolyser[J]. ECS transactions, 2018, 85(13): 1593-1603. DOI: 10.1149/08513.1593ecst.
- [3] NIE J H, COHEN S, CHEN Y, et al. Velocity and temperature distributions in bipolar plate of PEM

- electrolysis cell[C]//ASME 2007 International Mechanical Engineering Congress and Exposition. Seattle: ASME, 2008: 197-204. DOI: 10.1115/IMECE2007-42622.
- [4] RUIZ D D H, SASMITO A P, SHAMIM T. Numerical investigation of the high temperature PEM Electrolyzer: effect of flow channel configurations[J]. ECS transactions, 2013, 58(2): 99. DOI: 10.1149/05802.0099ecst.
- [5] TIJANI A S, BARR D, RAHIM A H A. Computational modelling of the flow field of an electrolyzer system using CFD[J]. Energy procedia, 2015, 79: 195-203. DOI: 10.1016/j.egypro.2015.11.462.
- [6] TOGHYANI S, AFSHARI E, BANIASADI E, et al. Thermal and electrochemical analysis of different flow field patterns in a PEM electrolyzer[J]. Electrochimica acta, 2018, 267: 234-245. DOI: 10.1016/j.electacta.2018.02.078.
- [7] OLESEN A C, RØMER C, KÆR S K. A numerical study of the gas-liquid, two-phase flow maldistribution in the anode of a high pressure PEM water electrolysis cell[J]. International journal of hydrogen energy, 2016, 41(1): 52-68. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2015.09.140.
- [8] 王华, 马晓锋, 何勇, 等. 流场结构对 PEM 电解槽性能影响模拟[J]. 洁净煤技术, 2023, 29(3): 78-84. DOI: 10.13226/j.issn.1006-6772.H23010901.
- [9] 郑金松, 莫景科. PEM 水电解池反应特性参数的三维模型数值模拟[J]. 电源技术, 2021, 45(11): 1401-1404, 1504. DOI: 10.3969/j.issn.1002-087X.2021.11.006.
- [10] MARANGIO F, SANTARELLI M, CALÌ M. Theoretical model and experimental analysis of a high pressure PEM water electrolyser for hydrogen production[J]. International journal of hydrogen energy, 2009, 34(3): 1143-1158. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2008.11.083.
- [11] FIGOLI A, LI Y D, BASILE A. Current trends and future developments on (Bio-) membranes[M]. Amsterdam: Elsevier, 2020: 171-202.

作者简介:

穆 瑞 (1999-), 男, 硕士研究生, 主要从事质子交换膜电解水制氢技术流场优化设计研究。

王智化 (1977-), 男, 博士, 教授, 主要从事污染物治理、激光燃烧诊断、新能源制氢方面的研究。