

Компьютерное моделирование процессов сопряженного переноса массы, тепла и заряда в батарее твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ) методом конечных элементов средствами программного пакета COMSOL Multiphysics.

Д.Б. Смирнов<sup>1,2</sup>, Ю.С. Федотов<sup>2</sup>, С.И. Бредихин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup> ИФТТ РАН, 142432, Черноголовка, Моск. обл., ул. Институтская д.2

Твердооксидные топливные элементы – разновидность топливных элементов, электролитом в которых служит керамический материал, обладающий проводимостью по ионам кислорода. Эти элементы работают при высокой температуре (700—1000 °С) и имеют целевое применение в основном в стационарных установках мощностью от 1 кВт и выше. Для работы топливного элемента необходимо обеспечить непрерывное снабжение электродов топливом (водород и/или СО) и окислителем (воздух). В процессе работы кислород из воздушного потока абсорбируется на катоде и в виде ионов диффундирует через мембрану, перенося электрический заряд, а на аноде вступает в реакцию с водородом из топливного потока с образованием воды.

Для задач разработки батарей ТОТЭ критически важна информация о распределении физических параметров, таких как температура, ток, локальный состав топлива и окислителя, в объёме батареи в различных режимах. Экспериментальное исследование таких распределений очень сложно технически реализовать, учитывая необходимость герметизации при высоких температурах; оно требует значительных затрат и может обеспечить очень ограниченную точность и локальность, поэтому актуально компьютерное моделирование. С его помощью становится возможным получить требуемую информацию, выявить проблемные участки батареи и оптимизировать геометрию, материалы, условия работы, оперативно отслеживая последствия вносимых изменений.

Целью данной работы является моделирование температурного, электрического, газового распределений в стеке ТОТЭ. Батарея ТОТЭ, близкая по своей форме к кубу, содержит довольно большое число повторяющихся узлов – 20-30 единиц. Каждый из них включает многослойный МЭБ, биполярную пластину, слой высокотемпературного герметика. Для моделирования газовых потоков, электрохимических реакций, протекающих в электродах МЭБ, процессов транспорта заряда и массы в геометрически точной модели требуются большие вычислительные ресурсы: по нашим оценкам, около

30 Гб оперативной памяти на каждый повторяющийся узел, содержащий ТОТЭ размером 50×50 мм, что даёт примерно 600-900 Гб для небольшой батареи. Такие объёмы данных требуют для своей обработки соответствующей вычислительной процессорной мощности и времени.

Однако можно существенно упростить геометрическую модель батареи (рис. 1), в несколько раз снизив требования к вычислительным ресурсам, что позволит справиться с задачей силами небольшого расчётного сервера и получить адекватную картину распределения токов и температур на масштабе всей батареи. Упрощение состоит в том, что слоистая структура батареи заменяется на несколько виртуальных однородных тел, обладающую на масштабах батареи аналогичными свойствами. Достаточно минимум четырёх типов таких тел: активная зона реакции, магистральный газовый канал, газораспределитель, внешний пояс (рис. 2). Активная зона должна, словно пористое тело, пропускать топливо и воздух в строго определённых направлениях, генерировать ЭДС и тепло при протекании электрохимической реакции, проводить электрический ток и тепло. Магистральный газовый канал служит только для вмещения газового потока, газораспределитель находится между активной зоной и магистральными газовыми каналами и также моделируется пористым телом. Внешний пояс непроницаем для газов, но проводит тепло.

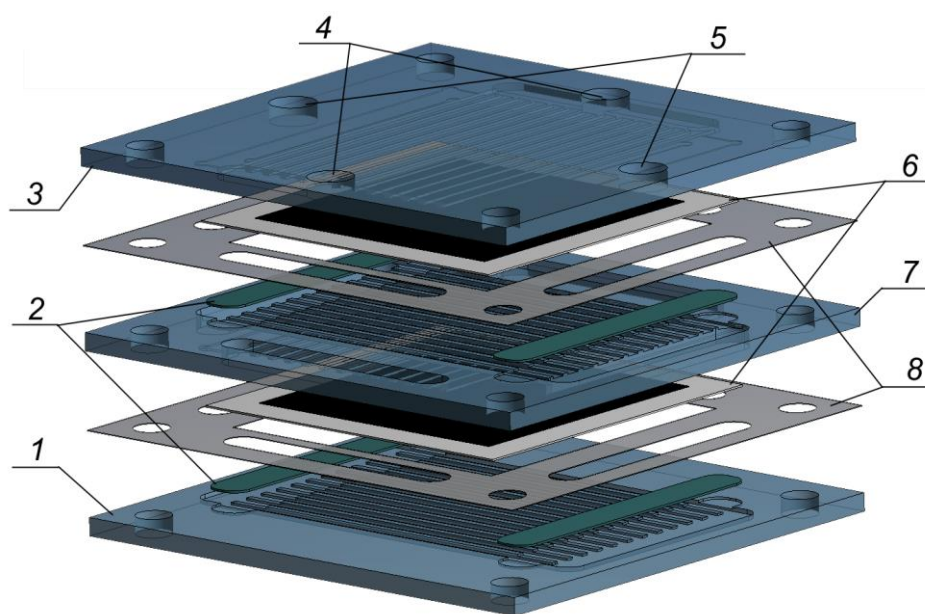


Рис. 1. Конструкция минимальной батареи из двух ТОТЭ, батарея с большим числом элементов может быть получена умножением повторяющегося узла: 1 – анодная концевая пластина, 2 – разделительные вкладыши, 3 – катодная концевая пластина, 4 – воздушные магистральные отверстия, 5 – топливные магистральные отверстия, 6 – топливный элемент, 7 – биполярная пластина, 8 – высокотемпературный герметик

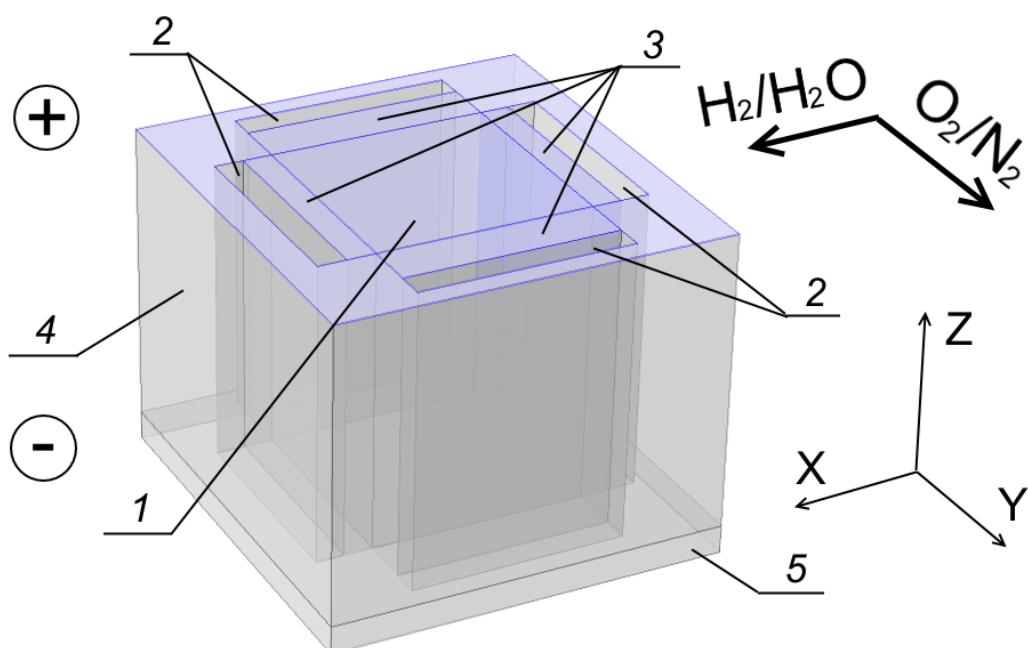


Рис. 2. Модель батареи ТОТЭ в представлении виртуальных тел: 1 – активная зона реакции, 2 – магистральные газовые каналы, 3 – газораспределители, 4 – внешний пояс, 5 – концевая пластина. Указаны полярность и направления течения газовых смесей в активной зоне реакции относительно осей координат

#### Выводы

1. Выполнено компьютерное моделирование распределения токов в батарее из ТОТЭ 50x50 мм<sup>2</sup> при разных коэффициентах утилизации топлива. Распределение по высоте батареи равномерное, неравномерность по длине топливных каналов возрастает с ростом тока и коэффициента утилизации.
2. Выполнено компьютерное моделирование температурных полей в батарее из ТОТЭ 50x50 мм<sup>2</sup>. Зона максимальной температуры имеет форму, близкую к шару и расположена вблизи центра области выходов воздушных каналов.