

2020-12-28

Numerical Simulations of Current and Temperature Distribution of Symmetrical Double-Cathode Solid Oxide Fuel Cell Stacks Based on the Theory of Electric-Chemical-Thermal Coupling

Cheng-rong YU

Jian-guo ZHU

1. Faculty of Civil Engineering and Mechanics, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China,;
zhujg@uj.edu.cn

Cong-ying JIANG

Yu-chen GU

Ye-xin ZHOU

Zhuo-bin LI

Rong-min WU

See next page for additional authors

Recommended Citation

Cheng-rong YU, Jian-guo ZHU, Cong-ying JIANG, Yu-chen GU, Ye-xin ZHOU, Zhuo-bin LI, Rong-min WU, Zheng ZHONG, Wan-bing GUAN. Numerical Simulations of Current and Temperature Distribution of Symmetrical Double-Cathode Solid Oxide Fuel Cell Stacks Based on the Theory of Electric-Chemical-Thermal Coupling[J]. *Journal of Electrochemistry*, 2020 , 26(6): 789-796.

DOI: 10.13208/j.electrochem.191105

Available at: <https://jelectrochem.xmu.edu.cn/journal/vol26/iss6/9>

This Article is brought to you for free and open access by Journal of Electrochemistry. It has been accepted for inclusion in Journal of Electrochemistry by an authorized editor of Journal of Electrochemistry.

Numerical Simulations of Current and Temperature Distribution of Symmetrical Double-Cathode Solid Oxide Fuel Cell Stacks Based on the Theory of Electric-Chemical-Thermal Coupling

Authors

Cheng-rong YU, Jian-guo ZHU, Cong-ying JIANG, Yu-chen GU, Ye-xin ZHOU, Zhuo-bin LI, Rong-min WU, Zheng ZHONG, and Wan-bing GUAN

Corresponding Author(s)

Jian-guo ZHU(zhujg@uj.edu.cn);
Wan-bing GUAN(wbguan@nimte.ac.cn)

DOI: 10.13208/j.electrochem.191105

Article ID:1006-3471(2020)06-0789-08

Cite this: *J. Electrochem.* 2020, 26(6): 789-796

Http://electrochem.xmu.edu.cn

基于电-化-热耦合理论对称双阴极固体氧化物 燃料电池堆的电流与温度场数值模拟

俞成荣^{1,2}, 朱建国^{1*}, 蒋聪盈^{2,3}, 谷宇晨^{2,3}, 周晔欣⁴,
李卓斌⁵, 邬荣敏⁵, 仲政^{3,4}, 官万兵^{2*}

(1. 江苏大学土木工程与力学学院, 江苏 镇江 212013; 2. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 浙江 宁波 315201; 3. 同济大学航空航天工程与力学学院, 上海 200092; 4. 哈尔滨工业大学(深圳)理学院, 广东 深圳 518055; 5. 浙江浙能技术研究院有限公司, 浙江 杭州 311121)

摘要: 本文基于电-化-热多场耦合理论, 通过有限元方法建立了一个基于对称双阴极结构 SOFC 电堆单元的三维数值模型, 研究了其电堆内部的电流密度分布和温度分布. 研究表明, 气体流动方式以及集流方式影响了电解质上电流密度和温度分布; 在气体进、出气口处有较大的电流密度分布; 在气体共流模式下, 电解质层温度分布却较均匀; 在双阴极结构电池阴极侧的单一集流模式下, 集流侧的电解质的平均电流密度高于另一侧.

关键词: 对称双阴极; 固体氧化物燃料电池; 多场耦合; 共流与逆流; 集流

中图分类号: TM911.4, O646

文献标识码: A

固体氧化物燃料电池(SOFC)是一种高效清洁的发电方式, 其发展对于提高发电系统效率和控制环境污染具有重要意义^[1-2]. 固体氧化物燃料电池的稳定性和可靠性与均衡的电池温度分布、电流分布等结构设计密切相关. 2008年, Hashimoto等^[3]采用实验的方法研究了微管SOFC温度与电流密度的关系, 发现电池温度和电流密度成正比. 2012年, Guan等^[4]同样采用实验的方法研究了SOFC电堆内部温度对电池放电性能的影响, 结果表明电堆的各个组件与加热环境之间存在明显的温差, 电池表面温度分布越不均匀, 电池性能越差. 温度的不均匀分布导致电池内部产生膨胀失配和热应力, 进而对电池放电性能产生不利影响^[5].

然而, 由于SOFC结构与运行工况较为复杂, 尽管近年来有一些温度分布方面的实验结果报道, 但更多的是基于模拟仿真分析的研究, 特别是对于电流分布而言, 更是如此. 2017年, Zeng等^[6]

使用基于FEM的三维CFD方法研究电池微观结构对SOFC放电性能和力学性能的影响, 结果表明电极材料孔隙率的改变会引起电化学性能和温度的变化, 减小热应力可以提高电池性能和稳定性. Shen等^[7]和Bhattacharya等^[8]通过建模分析了不同流道结构对电池性能的影响, 研究发现合理的流道设计可以显著提高燃料利用率, 降低电池运行温度, 提高电池的稳定性. 2019年, Schluckner等^[9]模拟不同集流对平板型SOFC电流密度分布的影响, 研究发现在阴极进气口处集流可以带来更均匀的电流密度和温度分布, 从而保证电池的耐久性. 从这些研究不难看出, 提高电池的稳定性和可靠性, 优化电极材料和流道结构设计, 使电池的电流和温度分布更均匀是一种有效可行的方式.

为了提高传统SOFC结构的稳定性以及电功率密度, Guan^[10]等提出了一种新型的对称双阴极结构固体氧化物燃料电池. 对于这种新结构固体氧化物燃料电池的商业化开发, 提高电流收集效率

收稿日期: 2019-11-01, 修订日期: 2020-02-18. * 通讯作者, Tel: (86)13951404519, E-mail: zhujg@uj.edu.cn, Tel: (86-574)86324656, E-mail: wbguan@nimte.ac.cn

国家重点研究开发项目 (No. 2018YFB1502600)、国家自然科学基金重点项目 (No. 11932005)、宁波市重大攻关项目 (No. 2018B10048)和浙江省能源集团有限公司科技项目 (No. ZNKJ-2018-008)资助

和设计温度分布均匀的流场结构是最迫切,亟需开发一种可以用于分析这种新结构的数值模型. 本文基于对称双阴极 SOFC 选取电堆单元建立有限元模型,利用电化学模型模拟计算出电堆单元共流侧与逆流侧电解质电流密度,讨论气体浓度梯度对电解质电流密度和温度的影响,同时模拟单侧集流方式下 SOFC 电堆单元的放电性能,为新型结构电池堆设计提供理论参考. 本文使用 COMSOL Multiphysics 多场耦合商业仿真软件进行模拟计算.

1 数值建模

完整的电堆单元电学性能数值模型主要包括几何模型、材料属性、全耦合多物理场和边界条件:

1.1 几何模型

根据 SOFC 电堆单元(图 1A)的实际尺寸建立了其几何模型(图 1B). 其中主要包括含: NiO+3YSZ 阳极支撑体尺寸为 98.6 mm × 46 mm × 4.7 mm,支撑体孔道 13 个(尺寸为 98.6 mm × 2.5 mm × 2.3 mm)(图 1C),对称的 NiO+8YSZ 活性阳极 85.5 mm × 41 mm × 0.02 mm、YSZ 电解质 85.5 mm × 41 mm × 0.01 mm 和 La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-δ} (LSCF)阴极 85.5 mm × 41 mm × 0.02 mm,含有气体通道的对称金属阴极盖板 85.5 mm × 62 mm × 4 mm 和阳极封装夹具 10 mm × 88 mm × 10 mm. 阴极盖板和阳极封装夹具内部流道结构如图 1(D)和图 1(E)所示,SOFC 电堆单元采用一侧与阳极流

场同流,一侧逆流通气方案,其中图 1(E)中上侧为共流,下侧为逆流.

1.2 控制方程

1.2.1 电化学反应模型

SOFC 的整体性能取决于电池工作电压和输出电流. 由于电池内部存在活化极化,欧姆极化和浓差极化,电池工作电压(E)往往低于开路电压,一般可以表示为^[11]:

$$E = E^{OCV} - (\eta_{act} + \eta_{ohm} + \eta_{conc}) \quad (1)$$

其中, η_{act} 是电化学反应的活化过电位, η_{conc} 是由于浓差极化引起的过电位, η_{ohm} 是欧姆过电位, E^{OCV} 是 Nernst 电压. 对于氢气和水蒸气混合燃料, SOFC 的 Nernst 电压计算如下^[12]:

$$E^{OCV} = E^0 + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{C_{ref}^{H_2} (C_{ref}^{O_2})^{0.5}}{C_{ref}^{H_2O}} \right) \quad (2)$$

R 为气体常数, T 是温度, F 为法拉第常数, c_i^{ref} 是组分 i 的参考浓度, E^0 是平衡电位.

活化极化和电流密度之间的关系由 Butler-Volmer 方程给出^[13]:

Anode:

$$i^a = S_{TPB}^a i_0^a \left[\frac{c_{H_2}}{c_{ref}^{H_2}} \exp \left(\frac{\alpha^a n^a F(\eta_{act}^a + \eta_{conc}^a)}{RT} \right) - \frac{c_{H_2O}}{c_{ref}^{H_2O}} \exp \left(\frac{(1-\alpha^a) n^a F(\eta_{act}^a + \eta_{conc}^a)}{RT} \right) \right]$$

Cathode:

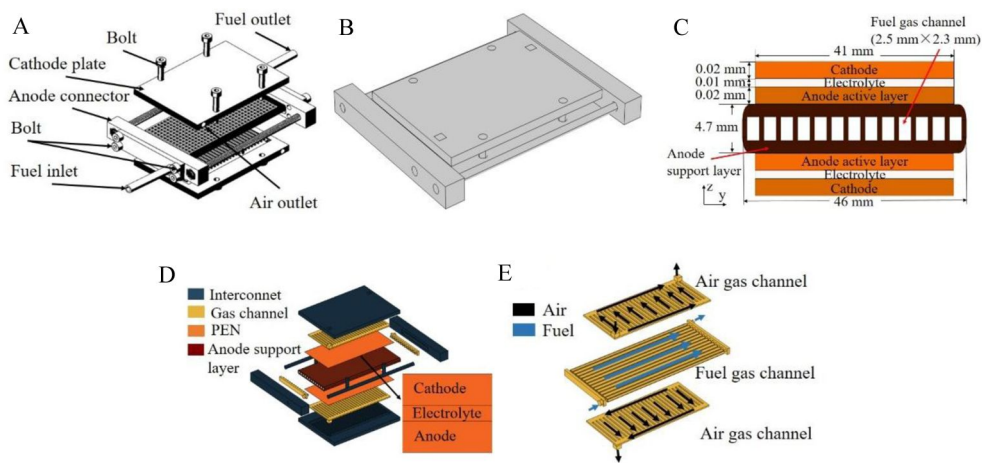


图 1 电堆示意图(A)、单元简化模型(B)、电极截面(C)、组合部分示意图(D),流道和流向示意图(E)

Fig. 1 Stack unit schematic (A), simplified unit model (B), electrode cross-section (C), stack components schematic (D), and gas flow and gas channel schematic (E)

$$i^c = S_{\text{TPB}}^c i_0^c \begin{bmatrix} \exp\left(\frac{\alpha^c n^c F(\eta_{\text{act}}^c + \eta_{\text{conc}}^c)}{RT}\right) \\ -\frac{c_{\text{O}_2}}{c_{\text{ref}}^c} \exp\left(\frac{(1-\alpha^c) n^c F(\eta_{\text{act}}^c + \eta_{\text{conc}}^c)}{RT}\right) \end{bmatrix} \quad (3)$$

S_{TPB} 是三相边界长度, i_0^c 是交换电流密度, α 是电子传导率, n 是反应转移的电子数, 上标 a 和 c 分别代表了阳极和阴极, c^i 是组分 i 的浓度. η_{act}^a 和 η_{conc}^a 是阳极的活化极化和浓差极化, η_{act}^c 和 η_{conc}^c 是阴极的活化极化和浓差极化.

活化极化与离子和电子的输运有关^[12]:

$$\begin{aligned} \eta_{\text{act}}^a &= \Phi_e - \Phi_i - E_{\text{eq}}^a \\ \eta_{\text{act}}^c &= \Phi_e - \Phi_i - E_{\text{eq}}^c \end{aligned} \quad (4)$$

其中, Φ_e 和 Φ_i 是电子和离子的电势, E_{eq}^a 和 E_{eq}^c 是阳极和阴极的平衡电位, 在本模型里面 E_{eq}^a 定义为 0, E_{eq}^c 设置为 E^{ocv} .

浓差极化是由多孔介质的扩散阻力引起的, 可如下式表示^[12]:

$$\begin{aligned} \eta_{\text{conc}}^a &= \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{p_{\text{H}_2\text{O,TPB}} \cdot p_{\text{H}_2,b}}{p_{\text{H}_2\text{O,b}} \cdot p_{\text{H}_2,\text{TPB}}}\right) \\ \eta_{\text{conc}}^c &= \frac{RT}{2F} \ln\left(\frac{p_{\text{O}_2,\text{gc}}}{p_{\text{O}_2,\text{TPB}}}\right) \end{aligned} \quad (5)$$

其中, b 代表阳极表面, gc 代表阴极表面.

电极中离子和电子传输的控制方程表示如下^[14]:

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_i &= \sigma_i^c \nabla \Phi_i \\ \mathbf{i}_e &= \sigma_e^c \nabla \Phi_e \end{aligned} \quad (6)$$

其中, \mathbf{i} 是电流矢量, σ_e 是电导率, Φ 是电子和离子的电势, 公式中的下标 i 和 e 分别代表离子和电子.

表 1 电化学反应模型的输入参数

Tab. 1 Input parameters and their values for the electrochemical reaction model

Parameter	Value
Electronic conductivity of anode ($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)	30300
Electronic conductivity of cathode ($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)	17000
Electronic conductivity of interconnect ($\text{S} \cdot \text{m}^{-1}$)	769000
TPB length per unit volume of anode ($\text{m} \cdot \text{m}^{-3}$)	2.14×10^5
TPB length per unit volume of cathode ($\text{m} \cdot \text{m}^{-3}$)	2.14×10^5
Electronic transfer coefficient of anode	0.5
Electronic transfer coefficient of cathode	0.5

其中各电极的有效离子电导率为:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{anode}}^e &= \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp\left(-\frac{1150}{T}\right) \\ \sigma_{\text{cathode}}^e &= \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp\left(-\frac{1200}{T}\right) \\ \sigma_{\text{electrolyte}}^e &= 33.4 \times 10^3 \exp\left(-\frac{10300}{T}\right) \end{aligned} \quad (7)$$

其中相关参数如表 1 所示^[15].

1.2.2 气体流动模型

SOFC 多孔材料和气体燃料通道中的动量传递采用修正的 Navier-Stokes 方程表示, 并在该方程中引入了 Darcy 项, 考虑孔隙率的影响^[14, 16]:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= S_{\text{mass}} \\ \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} &= -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{v} + \mathbf{v} \nabla) - \frac{2}{3} \mu \nabla \mathbf{v} \right] - \frac{\varepsilon \mu \mathbf{v}}{k} \end{aligned}$$

$$\text{Anode: } S_{\text{mass}} = \frac{(M_{\text{H}_2\text{O}} - M_{\text{H}_2}) i}{2F}$$

$$\text{Cathode: } S_{\text{mass}} = -\frac{M_{\text{O}_2} i}{4F} \quad (8)$$

这里, ρ 是气体密度, \mathbf{v} 是速度矢量, S_{mass} 是质量源项. p 是压力, ε 和 k 分别为电极材料的孔隙率和渗透率, μ 为流体动力粘度, M_i 表示 i 气体的相对分子质量.

1.2.3 物质扩散模型

SOFC 在放电时, 电化学反应主要发生在电极与电解质交界面处. 为了到达反应位置, 气体通过电极的孔隙扩散, 与气体的平均自由程相比, 活性阳极层中的孔较小, 这意味着分子与孔表面的碰撞更频繁, Knudsen 扩散在扩散中起着重要作用^[17-18]. 因此, 采用结合 Knudsen 扩散的 Fick 定律表示物质的扩散行为:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_i &= -\rho D_i^{mK} \nabla \omega_i - \rho \omega_i D_i^{mK} \frac{\nabla M}{M} + \\ &\rho \omega_i \sum_k \frac{M_i}{M} D_i^{mK} \nabla x_i \end{aligned} \quad (9)$$

$$D_i^{mK} = \frac{\varepsilon}{\tau} \left(\frac{1}{D_i^m} + \frac{1}{D_i^k} \right)^{-1}$$

$$M = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (10)$$

其中, ω_i 和 \mathbf{j}_i 分别是组分 i 的质量分数和流量, ε 是孔隙的体积分, τ 是曲折因子, M 是摩尔质量, D_{mk} 是总的扩散系数, 由 Fick 扩散系数 (D_m) 和 Knudsen 扩散系数 (D_k) 确定^[19].

此外,物质扩散模型的质量守恒方程为:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{j}_i + \rho(\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{v} \cdot \nabla) \omega_i &= S_i \\ S_{\text{H}_2} &= M_{\text{H}_2} \frac{i}{2F} \\ S_{\text{H}_2\text{O}} &= -M_{\text{H}_2\text{O}} \frac{i}{2F} \\ S_{\text{O}_2} &= M_{\text{O}_2} \frac{i}{4F} \end{aligned} \quad (11)$$

这里,组分 i 的质量源项 S_i 是由单位时间内单位体积上的电化学反应速率决定.在上式中考虑了由扩散、对流和反应引起的材料数量的变化.

1.2.4 传热模型

电化学反应传热模型中的能量守恒方程为^[20]:

$$\nabla \cdot (-\lambda_{\text{eff}} \nabla T) + \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = Q \quad (12)$$

上式中, Q 是电堆单元的热源项,包括欧姆热源 Q_{ohm} 、活化热源 Q_{act} 和熵热源 Q_{ent} ^[13]:

$$\begin{aligned} Q_{\text{ohm}} &= \frac{i_{\text{el}}^2}{\sigma_{\text{el}}} + \frac{i_{\text{io}}^2}{\sigma_{\text{io}}} \\ Q_{\text{act}} &= i_{\text{el}} \eta_{\text{act}} \\ Q_{\text{ent}} &= i_{\text{el}} \left(\frac{-T\Delta S}{2F} \right) \end{aligned} \quad (13)$$

λ_{eff} 是有效导热系数,由固体材料的导热系数 λ^s 和气体的有效导热系数 λ_g 确定,具体计算公式如下^[13]:

$$\lambda_{\text{eff}} = (1-\varepsilon)\lambda_s + \varepsilon\lambda_g \quad (14)$$

其中参数在表 2 列出^[15].

1.3 边界条件

为了提高模型的有效性,需要一个真实反应电池的运行工况的初始和边界条件.根据电池的实际工作温度,本模型的初始边界以及气体入口温度设定为 1023 K.在流场中,气体入口采用的是层流假设,其平均流入速度根据实际气体流量设

定.气体出口处将压力固定为一个大气压(1.013×10^5 Pa).阳极通入由 3% 摩尔分数的水蒸气和 97% 摩尔分数的氢气组成的燃料,阴极通入由 21% 摩尔分数的氧气和 79% 摩尔分数的氮气组成的空气.

2 结果与讨论

SOFC 在工作过程中,需要同时通入燃料和空气两种气体.在电堆内,气体流动一般可以区分成共流、逆流和交叉流三种.对于本文研究的电池而言,由于其独特的对称双阴极的结构,在同一个电堆单元上即可实现共流和逆流的设计如图 1(E)所示.本研究中,对 SOFC 电堆单元的二次电流分布、气体流动方式、物质扩散和传热进行了仿真模拟.

2.1 模型验证

本文采用实验中共流的气体流动方式,模拟计算了电池在 1.15 V ~ 0.5 V 不同工作电压下的电解质表面电流密度 (I - V 曲线常被用来直观描述 SOFC 电化学性能).由图 2 中可以看出,实验和模拟的 I - V 曲线具有很高的一致性,从而验证了本文所建立的 SOFC 电堆单元模型的有效性.

2.2 共流和逆流对 SOFC 电解质电流密度的影响

通过观察电化学、气体流动和物质扩散模型的计算结果(如图 3 所示)可以发现,在相同集流位置下,共流和逆流下电解质层电流密度的极值差(最大值与最小值之差)均随着电压的降低而增大,逆流下具有较均匀的增大趋势.选取放电电压 (0.6 V),对 SOFC 的放电状态进行模拟.不同的气体流动方式下的电解质电流密度分布如图 4(A)和 (B)所示,图 4(C)和(D)为 0.6 V 工作电压下共流和逆流的阴极氧摩尔分数分布图.从图中可以看

表 2 材料属性

Tab. 2 Materials properties

Parameters	Porosity	Permeability/ m^2	Thermal conductivity/ ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	Thermal capacity/ ($\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)
Anode active layer	0.23	1×10^{-12}	11	450
Anode support layer	0.46	1×10^{-10}	11	450
Electrolyte	-	-	2.7	550
Cathode layer	0.3	1×10^{-12}	6	430
Interconnect	-	-	20	550

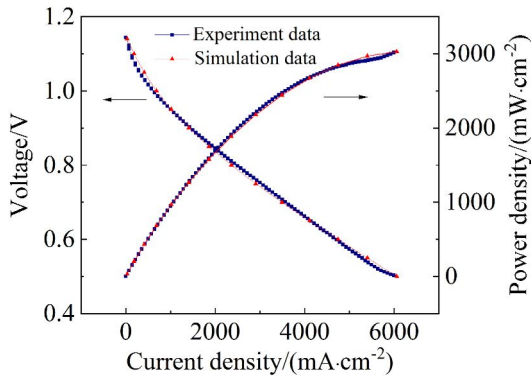


图 2 I - V 曲线和电功率密度

Fig. 2 I - V characteristics and power density

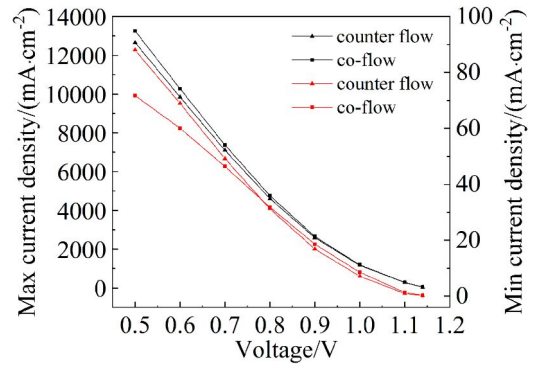


图 3 不同电压下的电解质电流密度

Fig. 3 Current density in electrolyte with different operation voltages

出, 阴极氧摩尔分数和电解质电流密度有较一致的分布趋势, 在气体流动两端, 即气体进出口处附近具有较高浓度的分布. 气体组分的分布不均匀造成了电池电极上电化学反应速率的不同, 进而使得电解质层上的电流密度分布不均匀. 由于该模型是对称结构, 电堆单元上两侧电池共用一个阳极流道, 其阳极气体组分分布相同, 因此阴极气体组分影响电解质电流密度分布.

电流密度分布不同是由电极上相应组分分布不同引起的. 电化学反应相对剧烈的区域, 对应的电极上离子或电流较大. 这种由离子或电子运动产生的欧姆热会造成 SOFC 内部温度不均匀, 从而导致电极结构上产生热应力, 影响着 SOFC 的运行寿命. 为了减少欧姆热, 基于电解质层上的电流密度分布, 可以把集流位置设置在气体进出口处.

通过传热模型计算可以得出 0.6 V 工作电压

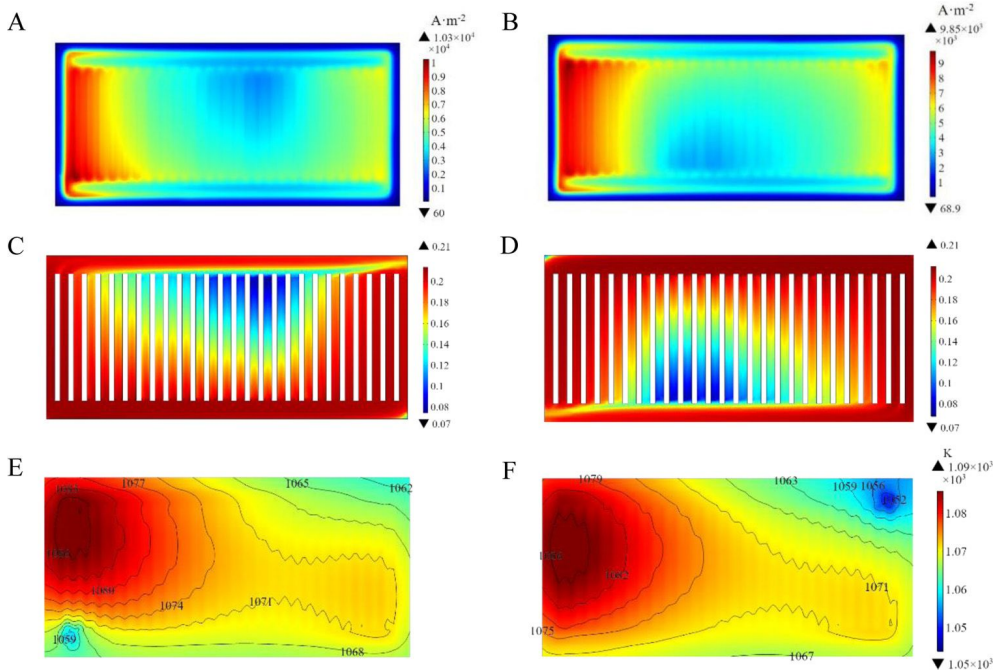


图 4 电解质层电流密度 ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), 共流侧(A), 逆流侧(B); 氧气摩尔分数 ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), 共流侧(C), 逆流侧(D); 电解质层温度 ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), 共流侧(E), 逆流侧(F)

Fig. 4 Distributions of current density in electrolyte ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), co-flow (A), counter flow (B); Molar fractions of oxygen in cathode layer ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), co-flow (C), counter flow (D); Distributions of temperature in electrolyte ($V_{\text{cell}}=0.6\text{ V}$), co-flow (E), counter flow (F)

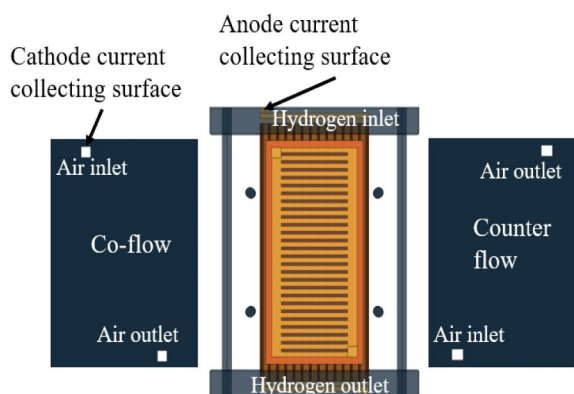


图 5 集流设计示意图
Fig. 5 Current collecting position diagram

下 SOFC 共流和逆流时的温度分布,如图 4(E)和(F)所示. 结果可以看到, 共流时的平均温度为 1073 K, 其中最高为 1088 K, 最低为 1059 K; 逆流时的平均温度为 1073 K, 其中最高为 1088 K, 最低为 1050 K. 共流时和逆流时的高温区都集中在阳极气体入口处, 且共流时的温度分布较逆流时均匀, 这是因为阴极共流时气体入口离高温区近, 导致入口处的空气得以快速加热. 通过对 SOFC 阴极气体共流和逆流的流动方式的模拟可以发现, 在气体进出气口处具有较高的电流密度分布, 共流的流动方式可以带来更均匀的温度分布.

2.3 集流方式对电堆输出性能的影响

进行如图 5 所示的集流设计. 通过电化学反应模型计算得到 0.6 V 的工作电压下共流时平均

电解质电流密度为 $2691 \text{ A}\cdot\text{m}^{-2}$, 逆流时平均电解质电流密度为 $2491 \text{ A}\cdot\text{m}^{-2}$, 具体分布如图 6(A)和(B)所示. 显然共流时(阴极集流侧)的电解质电流密度平均值高于逆流时. 图 6 中(C)和(D)为 SOFC 阴极盖板上的电流密度分布和电流密度矢量分布, 电流密度矢量线的流向跟电子流向相反. 从图中可以看出, 两个阴极金属盖板间的电子是通过螺栓进行移动. 集流侧盖板上电子密度高于另一侧, 这会影响着集流侧的电化学反应速率, 从而使得两侧电流密度有明显的不同. 结合前面的分析, 电流密度的不同会影响着电极上的温度分布. 在这种电子集流方式下, 温度在 SOFC 两侧分布不同, 会对 SOFC 成堆后的电堆温度分布产生影响, 导致电堆内部因温度分布不均匀而产生热应力, 进而影响 SOFC 电堆的运行寿命.

3 结 论

通过模拟计算对称双阴极结构 SOFC 电堆单元的电化学性能, 分析得出: 1) 在相同的集流条件下, 共流和逆流下电解质层电流密度的极值差均随着工作电压的降低而增大, 且在气体进出口处具有较高的电流密度. 电解质电流密度分布受阴极气体组分影响, 共流时电解质层上具有较均匀的温度分布; 2) 在单侧集流条件下, SOFC 电堆单元金属连接件上的电流分布造成了在共流流动方式下(阴极集流侧)的平均电解质电流密度高于逆流时. 在气体进出口处进行集流和采用共流的流动设计可以使电解质层的温度更均匀分布, 能有

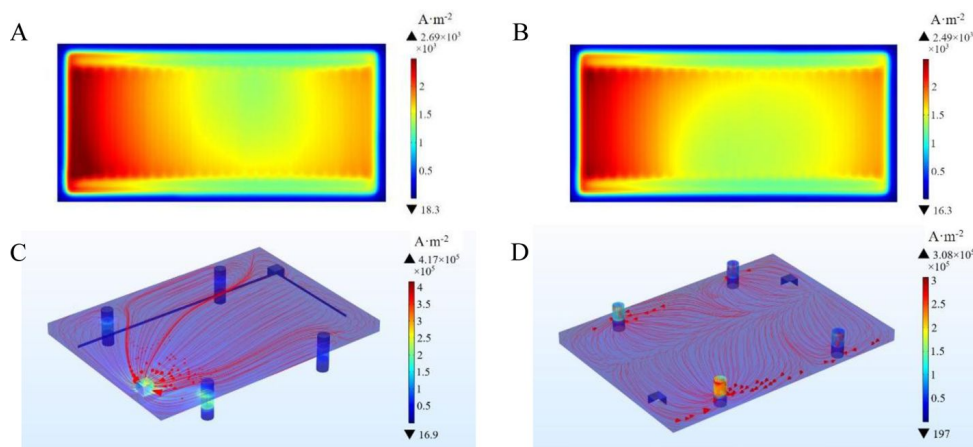


图 6 电解质电流密度 ($V_{\text{cell}} = 0.6 \text{ V}$), 共流侧(A), 逆流侧(B); SOFC 阴极金属盖板上电流密度分布图和电流密度矢量线 ($V_{\text{cell}} = 0.6 \text{ V}$), 共流侧(C), 逆流侧(D)

Fig. 6 Distributions of current density in electrolyte ($V_{\text{cell}} = 0.6 \text{ V}$), co-flow (A), counter flow (B); current density distribution diagrams and current density vector lines on SOFC cathode metal cover plate ($V_{\text{cell}} = 0.6 \text{ V}$), co-flow (C), counter flow (D)

效的减小由温度梯度产生的热应力。另外通过减小阴极金属盖板电阻和优化集流位置以使得电子移动路径减小,可以有效提高电解质电流密度,对共流时与逆流时电解质温度不均匀分布进行改善。这项工作对提高 SOFC 电堆单元电功率密度和运行寿命具有一定的参考价值。

参考文献(References):

- [1] Lü Y(吕尧), Huang B(黄波), Gu X Z(顾习之), et al. Fabrication and characterization of the Ni-ScSZ composite anodes with a Cu-LSCM-CeO₂ catalyst layer in the thin film SOFC[J]. *Journal of Electrochemistry(电化学)*, 2014, 20(5): 470-475
- [2] Chen H L(陈华林), Wang Z Y(王志勇), Jin X B(金先波), et al. An ionic diffusion model for the solid oxide cathode and its verification by the electrolysis of Ta₂O₅ in molten CaCl₂[J]. *Journal of Electrochemistry(电化学)*, 2014, 20(3): 266-271.
- [3] Hashimoto S, Nishino H, Liu y, et al. The electrochemical cell temperature estimation of micro-tubular SOFCs during the power generation[J]. *Journal of Power Sources*, 2008, 181(2): 244-250.
- [4] Guan W B, Zhai H J, Jin L, et al. Temperature measurement and distribution inside planar SOFC stacks[J]. *Fuel Cells*, 2012, 12(1): 24-31.
- [5] Guk E, Venkatesan V, Sayan Y, et al. Spring based connection of external wires to a thin film temperature sensor integrated inside a solid oxide fuel cell[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 2161.
- [6] Zeng S, Xu M, Parbey J, et al. Thermal stress analysis of a planar anode-supported solid oxide fuel cell: Effects of anode porosity[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(31): 20239-20248.
- [7] Shen Q, S L, Wang B W. Numerical simulation of the effects of obstacles in gas flow fields of a solid oxide fuel cell[J]. *International Journal of Electrochemical Science*, 2019, 14(2): 1698-1712.
- [8] Bhattacharya D, Mukhopadhyay J, Biswas N, et al. Performance evaluation of different bipolar plate designs of 3D planar anode-supported SOFCs[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 123: 382-396.
- [9] Schluckner C, Subotic V, Preissl S, et al. Numerical analysis of flow configurations and electrical contact positions in SOFC single cells and their impact on local effects[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(3): 1877-1895.
- [10] Liu W, Zou Z W, Miao F X, et al. Anode-supported planar solid oxide fuel cells based on double-sided cathodes[J]. *Energy Technology*, 2019, 7(2): 240-244.
- [11] Andersson M, Yuan J L, Sundén, et al. SOFC modeling considering hydrogen and carbon monoxide as electrochemical reactants[J]. *Journal of Power Sources*, 2013, 232: 42-54.
- [12] Zeng S, Yu G S, Parbey J, et al. Effect of the electrochemical active site on thermal stress in solid oxide fuel cells[J]. *Journal of The Electrochemical Society*, 2018, 165(2): F105-F113.
- [13] Li J Y, Lin Z J. Effects of electrode composition on the electrochemical performance and mechanical property of micro-tubular solid oxide fuel cell[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37(17): 12925-12940.
- [14] Xu H R, Chen B, Liu J, et al. Modeling of direct carbon solid oxide fuel cell for CO and electricity cogeneration[J]. *Applied Energy*, 2016, 178: 353-362.
- [15] Jiang C Y, Gu Y C, Guan W B, et al. 3D thermo-electro-chemo-mechanical coupled modeling of solid oxide fuel cell with double-sided cathodes[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 45(1): 904-915.
- [16] Liu X, Hao X h, An A, et al. Numerical simulation and analysis of plate solid oxide fuel cell[J]. *Acta Energetica Solaris Sinica*, 2014, 35(10): 1869-1875.
- [17] Saied M, Ahmed K, Ahmed M, et al. Investigations of solid oxide fuel cells with functionally graded electrodes for high performance and safe thermal stress[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(24): 15887-15902.
- [18] Chan S H, Khor K A, Xia Z T. Complete polarization model of a solid oxide fuel cell and its sensitivity to the change of cell component thickness[J]. *Journal of Power Sources*, 2001, 93(1): 130-140.
- [19] Yakabe H, Hishinum M, Uratani M, et al. Evaluation and modeling of performance of anode-supported solid oxide fuel cell[J]. *Journal of Power Sources*, 2000, 86(1): 423-431.
- [20] Xu M, Li T S, Yang M, et al. Modeling of an anode supported solid oxide fuel cell focusing on thermal stresses[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41(33): 14927-14940.

Numerical Simulations of Current and Temperature Distribution of Symmetrical Double-Cathode Solid Oxide Fuel Cell Stacks Based on the Theory of Electric-Chemical-Thermal Coupling

YU Cheng-rong^{1,2}, ZHU Jian-guo^{1*}, JIANG Cong-ying^{2,3}, GU Yu-chen^{2,3}, ZHOU Ye-xin⁴,
LI Zhuo-bin⁵, WU Rong-min⁵, ZHONG Zheng^{3,4}, GUAN Wan-bing^{2*}

(1. Faculty of Civil Engineering and Mechanics, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China;

2. Ningbo Institute of Material Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315201, China; 3. School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China;

4. School of Science, Harbin Institute of Technology, Shenzhen 518055, China; 5. Zhejiang Energy Technology Research Institute Company Co. Ltd, Hangzhou 311121, China)

Abstract: Solid oxide fuel cell (SOFC) is a high-efficient clean conversion device for future energy management. Because of the low antioxidant reduction ability and complex thermal stress, the structure of traditional asymmetrical thin anode-supported planar SOFC is easily to be broken under stack operating conditions. To overcome these defects, a new complete symmetrical SOFC based on double-sided cathodes was developed. To study the influences of gas flow direction and current collection mode on the cell performance inside stack, a numerical model was established by finite element method based on the theory of electro-thermo-chemo multiphysical coupling. By applying this model, the molar fraction of gas components, current density distribution and temperature distribution in the co-flow side and the counter flow side inside a stack are calculated, and the influences of the cathodic flow mode on the gas components and cell performance are discussed. In addition, the current distribution of the cell under the unilateral current collection mode is simulated, and its effect on the cell performance inside a stack is analyzed. The results show that the current density and temperature distribution on the electrolyte are affected by the flow direction and the current collection model. Large current density distributions are observed at gas inlet and outlet. The temperature distribution on the electrolyte layer under the co-flow model is more uniform than that under the counter flow direction. The average current density on the current collecting side is higher than that on the other side under the single current collection mode. It is also found that the current density and temperature distribution on the electrolyte layer can be effectively improved by reducing the resistance of cathodic cover plate. Moreover, the current collecting position will affect the path of electrons. Thus, optimization of the current collecting position can also contribute to improve the cell output performance inside a stack. This work provides a reference for improving the electric power density and operation life of the double-sided SOFC stack.

Key words: double-sided cathodes; solid oxide fuel cell; multi-physics coupled; co-flow and counter flow; current collection