Министерство образования и науки Российской Федерации

МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

(государственный университет)

Факультет общей и прикладной физики

Учреждение Российской академии наук Институт физики твёрдого тела РАН

На правах рукописи УДК 004.942

Герасименко Антон Вячеславович

Влияние ионного тока на распределение термодинамических и электрохимических параметров твердооксидного топливного элемента

Выпускная квалификационная работа на соискание степени бакалавра

Направление подготовки 010900 «Прикладные математика и физика»

Научный руководитель д.ф.-м.н. Бредихин Сергей Иванович

Содержание

- 1. Введение
 - 1. Краткая информация о ТОТЭ
 - 2. Моделирование реакции
 - 1. Цели
 - 2. Ожидаемые результаты
 - 3. Моделирование батареи
 - 1. Цели
 - 2. Ожидаемые результаты
 - 2) Моделирование батареи
 - а. Постановка задачи
 - і. Мотивация
 - іі. Описание старой модели
 - b. Решение задачи
 - і. Концепция виртуальных тел
 - іі. Реализация
 - 1. Метод реализации
 - 2. Описание системы дифференциальных уравнений
 - 3. Тепловые свойства эффективной среды модели эффективной среды
 - 4. Вспомогательные расчеты
 - ііі. Геометрия задачи
 - iv. Граничные условия
 - v. Оборудование
 - с. Результаты
 - і. Температура
 - іі. Скорость счета и сходимость модели
 - ііі. Итоги
 - 3) Моделирование реакции
 - а. Постановка задачи
 - і. Мотивация
 - іі. Ожидаемые результаты
 - b. Реализация
 - і. Описание системы дифференциальных уравнений
 - с. Геометрия задачи
 - d. Формулирование граничных условий
 - е. Результаты
 - і. Проделанная работа
 - іі. Полученные результаты
 - 4) Выводы
 - 5) Список литературы

1 Введение

1.1 Краткая информация о ТОТЭ

Твердооксидные топливные элементы – разновидность топливных элементов, в которых электролит является твердофазным и обладает высокой проводимостью по ионам кислорода. Эти элементы работают при температуре порядка 850 градусов Цельсия и применяются в стационарных установках мощностью от 1 кВт и выше. Для работы топливного элемента необходимо обеспечить непрерывное снабжение электродов водородом и окислителем. В процессе работы кислород абсорбируется на катоде, диффундируя через мембрану в виде ионов и перенося электрический заряд, а на аноде вступает в реакцию с водородом и угарным газом из топливного потока, образуя воду и углекислый газ (Puc 1).



Так как КПД ограничен не идеальным циклом, а термодинамическими параметрами химической реакции, то применение ТОТЭ более выгодно по сравнению с тепловыми машинами. Окисление топлива происходит каталитически, без взрывов и пламени, делая процесс бесшумным и экологически чистым.

Топливный элемент включает в себя газоплотную мембрану твёрдого электролита, анодный и катодный электроды. Конкретное воплощение топливного элемента в виде физического объекта часто называют мембранноэлектродным блоком (МЭБ). Для устойчивой работы МЭБ его катод должен обдуваться газовой смесью с существенным содержанием кислорода, анод — топливосодержащей смесью, на обоих электродах должен быть хороший токосъёмом со всей площади, а от МЭБ должно эффективно отводиться генерируемое тепло.

1.2 Моделирование реакции

2.1.1 Цели

При помощи моделирования реакции окисления водорода на аноде ТОТЭ основная задача:

• Получение распределений скоростей, давлений и концентраций веществ для лучшего понимания процессов, происходящих на аноде в рабочем режиме

2.1.2 Ожидаемые результаты

• Графики в 1D и 2D распределений концентрации воды на различных участках модели

1.3 Моделирование батареи

3.1.1 Цели

С помощью моделирования батареи из ТОТЭ достигались следующие цели:

- Создание удобного и эффективного инструмента для расчёта карт распределения основных значимых физических величин в батарее ТОТЭ, гибкого по отношению к изменениям геометрии, параметров и граничных условий.
- Получение распределений температуры, скоростей и давлений для лучшего понимания процессов, происходящих в батарее в рабочем режиме
- Оптимизация конструкции батареи на основе полученных данных

3.1.2 Ожидаемые результаты

- Упрощение более сложной модели, разработанной ранее, отбрасыванием несущественных взаимосвязей для ускорения расчётов и упрощения достижения сходимости решения.
- Трехмерные карты распределения скорости, давления газовых потоков, температуры и градиентов температуры

2 Моделирование батареи

Ранее в ЛСДС ИФТТ РАН была разработана модель батареи, включающая в себя большое количество обратных связей в системе, а именно в старую модель входили модули теплопроводности в телах, потоки газов,

электрический ток и химические реакции. Данные связи приводили к существенным сложностям, которые были связаны с громоздкостью и неповоротливостью модели. Помимо всего прочего, время полного счета такой модели составляло порядка десятков часов, так как приходилось по очереди считать отдельные модули и потом «соединять» их новым счетом.

2.1 Постановка задачи 2.1.1 Мотивация

Для упрощения задачи мы не будем моделировать все процессы, остановимся на рассмотрении основных взаимосвязей. Из трёх связанных задач, тепловой, газодинамической и электрической, оставим первые две. Распределение электрического тока, из которого следует объёмный источник константой, описывать либо упрощённой одномерной тепла, будем аналитической моделью. Активная зона в нашей модели представляется пористым телом с геометрией параллелепипеда. Таким образом нам не нужно моделировать электрохимические процессы, происходящие в активной среде, и мы можем, используя метод виртуальных тел, смоделировать батарею, не решая уравнения для тока и химических реакций, увеличив тем самым сходимость решения и скорость его получения. Однако система будет все равно не простой и потребует большого количества вычислительных мощностей из-за взаимосвязей модулей потока газов и теплопередачи. С помощью компьютерного моделирования возможно выявить проблемные участки батареи и оптимизировать геометрию, материалы, условия работы, оперативно отслеживая последствия вносимых изменений.

Вычисления значительно упростятся, если осуществить переход к модели усреднённой эффективной среды, демонстрирующей аналогичные распределения на масштабах батареи.

2.1.2 Описание старой модели

Ранее моим коллегой Денисом Смирновым была смоделирована батарея [2], решающая три основные задачи, описанные выше.

Стоит отметить минусы старой модели:

- 1) Общее решение получалось путем соединения решений различных процессов, что не может гарантировать высокую точность ответа
- 2) Изменение параметров одного из процессов влечет за собой изменение параметров других процессов, что бы решение было «физичным» и сходилось
- 3) Время счета модели было очень большим
- 4) Модель содержала прикидочные коэффициенты теплопроводности входящих виртуальных тел

2.2 Решение задачи

2.2.1 Концепция виртуальных тел

Существенно упростить геометрическую модель батареи можно, если заменить слоистую структуру батареи на несколько однородных тел, обладающих на масштабах батареи аналогичными свойствами. При этом теряется тонкая структура распределений физических величин на масштабах одного периода батареи, однако нас это не интересует в данной работе. Достаточно минимум четырёх типов таких тел: активная зона реакции, магистральный газовый канал, газораспределитель, внешний пояс (рисунок 2). Активная должна пропускать воздух в строго определённых зона направлениях, генерировать и проводить 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.



Рисунок 2 – концепция виртуальных тел

2.2.2 Реализация

2.2.2.1 Метод реализации

Метод конечных элементов (МКЭ) — это численный метод решения дифференциальных уравнений с частными производными, а также интегральных уравнений, возникающих при решении задач прикладной физики.

Область, в которой ищется решение дифференциальных уравнений, разбивается на конечное число элементов. В каждом из элементов произвольно выбирается вид аппроксимирующей функции. В простейшем случае это полином первой степени. Вне своего элемента аппроксимирующая функция равна нулю. Значения функций на границах элементов (в узлах) неизвестны. Коэффициенты являются решением задачи И заранее аппроксимирующих функций обычно ищутся из условия равенства значения соседних функций на границах между элементами (в узлах). Затем эти коэффициенты выражаются через значения функций в узлах элементов. Составляется система линейных алгебраических уравнений. Количество уравнений равно количеству неизвестных значений в узлах, на которых ищется решение исходной системы, прямо пропорционально количеству элементов и ограничивается только возможностями ЭВМ. Так как каждый из элементов связан с ограниченным количеством соседних, система линейных алгебраических уравнений имеет разрежённый вид, что существенно упрощает её решение.

Программный пакет для мультифизического моделирования Comsol

Программное обеспечение пакета COMSOL® предназначено для моделирования любых физических систем. COMSOL Multiphysics® включает в себя графический пользовательский интерфейс (GUI) COMSOL Desktop® и набор предварительно сконфигурированных пользовательских интерфейсов и инструментов моделирования (т.н. физические интерфейсы), которые предназначены для стандартных задач моделирования. Дополнительные мультифизического расширяют возможности платформы модули моделирования, обеспечивая моделирование для специфических областей применения интеграцию c программными пакетами сторонних И разработчиков и их функциями.

Нами использовались следующие физические интерфейсы: free and porous media flow и heat transfer in solids.

2.2.2.2 Описание системы дифференциальных уравнений модели

і. <u>Потоки</u>

Определяемые переменные: p, \vec{u} - давление и скорость газа

В газовых каналах решались уравнения Навье-Стокса для свободного потока (протекающего не в пористом веществе)

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = \nabla \cdot \left(-p\vec{l} + \mu(\nabla\vec{u} + (\nabla\vec{u})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \vec{u})\vec{l}\right)$$
$$\nabla \cdot (\rho\vec{u}) = 0$$
$$\rho = \frac{pM}{RT}$$

 ρ – плотность газа,

µ – динамическая вязкость газа,

 \vec{l} – направление движения газа

Плотность и динамическая вязкость газа рассчитывались на основе известных давлений и температур газа. В пористом теле добавляются переменные, описывающие пористость и проницаемость материала.

Для моделирования потоков, разрешённых только вдоль направления газовых каналов, устанавливались низкие (в 100 раз меньшие) значения проницаемости пористой среды во всех направлениях, кроме разрешённого. В разрешённом направлении проницаемость для анодного и катодного потоков принималась равной 1.10⁻⁸ м². Пористость рассчитывалась, исходя из геометрической доли площади сечения каналов, и составляла 0,156.

В уравнениях Навье-Стокса для пористых тел в двух сериях вычислений использовались различные упрощения: мы пренебрегли инерционным членом для сжимаемого потока в пористой среде.

іі. Температура

Определяемая переменная: *Т* - температура газов и эффективных сред

Уравнение теплопроводности с учётом конвективного переноса газов в пористых телах:

$$\rho C_p \vec{u} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \vec{q} = Q_V$$
$$\vec{q} = -\mathbf{k}_p \nabla T$$

 \mathbf{k}_p – матрица теплопроводности

Задавался объёмный источника тепла.

Теплопроводностью газов в пористых телах можно пренебречь по сравнению с теплопроводностью стали.

В магистральных каналах решалось то же основное уравнение с одним отличием: коэффициент теплопроводности становится изотропным (в них не требуется вводить эффективную среду).

$$\vec{q} = -k\nabla T$$

k – коэффициент теплопроводности

2.2.2.3 Тепловые свойства эффективной среды

Для компьютерного моделирования процессов переноса тепла, происходящих в твёрдых телах, были подготовлены исходные данные по теплофизическим свойствам составных материалов батареи. Коэффициенты теплопроводности материалов, используемых при изготовлении батареи, указаны в таблице в разделе получения теплопроводности активной среды.

2.2.2.4 Вспомогательные расчеты

Расчет коэффициента эффективной теплопроводности анодной сетки.

Модель, представленная на рисунке 1 имеет следующие параметры:

1) Высота: 240 мкм.

2) Основа – квадрат 630 х 630 мкм.



Рисунок 1 – Сетка, смоделированная в Comsol

На рисунках 2 и 3 показана модель части сетки и для сравнения на рисунке 4 – сама сетка:

На рисунке показана часть, которая может быть оттранслирована, и, таким



Рисунок 2 – Сетка, смоделированная в Comsol, плоскость XZ

образом, получена вся сетка. Значит мы анализируем элементарный объем сетки, получая искомый коэффициент. Расчет был выполнен в программе Comsol Multiphysics.



Рисунок 3 – Сетка, смоделированная в Comsol, плоскость YX



Рисунок 4 – Реальная сетка под микроскопом

Все составляющие сетки выполнены из обожженного никеля при температуре T = 1123 K, 74.49 Bt/(м*K). Измерение теплопроводности сетки мы проводили следующим образом:

- 1) Выбирали направление вдоль которого хотели рассчитать теплопроводность
- Перпендикулярно этому направлению строили две плоскости небольшой толщины из материала с высокой теплопроводностью, в нашем случае из меди, заключая между этими плоскостями сетку, сохраняя симметрию задачи
- На построенных плоскостях задавали разную температуру (с разностью в 1 градус Кельвина) и запускали счет модели
- 4) Получив решенную модель, считали поток тепла через любую из пластин и получали ответ.

Было рассмотрено 2 различных модели:

1) Модель без излучения:

Общие уравнения, описывающие модель:

$$\nabla \vec{q} = 0$$
$$\vec{q} = -k\nabla T$$

Уравнение описывающее тепловой поток по внешней поверхности, на которой не задана температура:

$$-\vec{n}\vec{q}=0$$

2) Модель с излучением:

Помимо общих уравнений, описывающих модель, данный случай дополняется уравнениями для теплового излучения: $J = \varepsilon e_b(T)$

$$e_b(T) = n^2 \sigma T^4$$

Уравнение описывающее тепловой поток по внешней поверхности, на которой не задана температура:

$$-\vec{n}\vec{q}=0$$

В обоих случаях касание сетки и плоскостей, ее окружающих, показано на рисунке 5:



Рисунок 5 – касание сетки и плоскостей



Рисунок 6 – Распределение температуры в трёхмерной модели части анодной сетки

Полученные значения удобно свести в таблицу (очевидно, что вдоль осей Оz и Ох значения будут одинаковые, так как в плоскости ZX фигура симметрична):

	С излучением	Без излучения
Ось Оz	1.13 Вт/(м*К)	1.12 Вт/(м*К)
Ось Ох	6.06 Вт/(м*К)	5.96 Вт/(м*К)

Расчет коэффициента эффективной теплопроводности активной зоны ТОТЭ.

Модель, представленная на рисунке 1 имеет следующие параметры:

- 1) Основа прямоугольный блок 9 х 9 х 0.79, [A]* Вт/(м*К)
- 2) Токовые гребни прямоугольные блоки 9 х 1 х 1 вдоль оси Ох, [A] Вт/(м*К) (9 х 1 х 0.5 вдоль оси Оу, [A] Вт/(м*К) в количестве 8 штук (крайние гребни имеют толщину 0.5, чтобы вся модель являлась периодом большой модели)
- Сетка, замененная пластиной прямоугольный блок 9 х 9 х 0.24, 27.14 Вт/(м*К)
- 4) Анод прямоугольный блок 9 x 9 x 0.04, 3 Вт/(м*К)
- 5) Катод прямоугольный блок 9 x 9 x 0.06, 3 Вт/(м*К)
- 6) Электролит прямоугольный блок 9 х 9 х 0.15, 1.7 Вт/(м*К) [A]*=15.34869 + 0.02167 * Т – 2.39646Е-5 * Т^2 + 1.06304Е-8 * Т^3 + 1.47535Е-12 * Т^4



Рисунок 1 – Распределение температуры в трёхмерной модели участка активной зоны батареи ТОТЭ

Вычисления производились в программе Comsol Multiphysics и сравнивались с аналитическими оценками, сделанными ранее. Было рассмотрено 2 различные физики моделей (без учёта передачи тепла излучением и с её учётом) и в каждой получено три результата для трех перпендикулярных осей — Ох, Оу и Оz.

1) Аналитические оценки. Излучение не учитывается

а. Ось Ог

Описывается получение коэффициента, если разность температур задается на больших основаниях (то есть вдоль оси Oz).

Тепловой поток связан с разностью температур соотношением - $P = \mu \frac{S\Delta T}{l}$, где P – мощность теплового потока, S – площадь поверхности, на которой задана температура, l – длина ребра блока, на торцах которого задана разность температур. В случае, когда мы ищем коэффициент теплопроводности вдоль оси Oz, тепловой поток последовательно протекает через все слои модели, поэтому эффективно суммируются величины, обратные теплопроводности каждого слоя:

$$\frac{l}{S}\mu^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \mu_i^{-1} \frac{l_i}{S_i}$$

Где n – число компонент. Выражение позволяет рассчитать



z x→y

Рисунок 2 – Распределение теплового потока в плоскости XZ

теплопроводность нескольких, прилегающих друг к другу однородных слоёв. В нашем случае два слоя токовых гребней не являются однородными, а потому для расчёта необходимо использовать приближения. Мы использовали два разных приближения для оценки верхней и нижней границ точного значения теплопроводности:

1) Пренебрегаем распределением теплового потока, то есть мы считаем, что распределение теплового потока в каждом слое равномерно.

2) Токовые гребни в разных слоях лежат перпендикулярно друг другу, а толщина МЭБа много меньше расстояния между гребнями, поэтому для оценки теплопроводности снизу можно учитывать только часть площади МЭБ, зажатую сразу между двумя наборами гребней. Это значит, что нужно учитывать только ту площадь, через которую идет тепловой поток от одного торца, до второго. На рисунках 2 и 3 синими линиями показан тепловой поток (плотность линий пропорциональна плотности потока).



Рисунок 3 – Распределение теплового потока в плоскости YZ

Заметим, что токовые гребни занимают не всю площадь слоя, поэтому, при расчете теплопроводности, это обстоятельство учитывалось в виде коэффициента, отражающего долю указанной площади.

Таким образом аналитически было получено два оценочных значения эффективной теплопроводности конструкции в направлении оси Х: 6.71 Вт / (м * K) и 2.11 Вт / (м * K). Такая большая разница объясняется тем, что общая теплопроводность чрезвычайно чувствительна к распределению тепловых потоков в МЭБ, как наихудшем проводнике тепла. При этом аналитические оценки, выполненные для двух крайних случаев –



Рисунок 4 – Распределение теплового потока в плоскости ZY

(равномерное распределение по всей площади и равномерное же, но только по области пересечения токовых гребней) задают только границы, в которых лежит точный результат.

б. Ox и Oy

Вдоль осей Ох и Оу формула для вычисления искомой величины отличается от предыдущей - тепловой поток параллельно протекает через все слои модели, поэтому эффективно суммируются теплопроводности каждого слоя:

$$\frac{S}{l}\mu = \sum_{i=1}^{n} \mu_i \frac{S_i}{l_i}$$

Аналитически были получены числа 14.94 Вт / (м * К) для оси Ох и 13.69 Вт / (м * К) для оси Оу. Как и в случае выше (вдоль оси Оz) сложно правильно оценить эффективную площадь, так как тепловой поток имеет неравномерное распределение и было посчитано заведомо меньшее число, без учета гребней,

перпендикулярным тепловому потоку. На рисунке 5 видно, что через токовые гребни, расположенные перпендикулярно потоку, стрелки не идут, а значит и тепловой поток там очень маленький, что позволяет надеяться на достаточно высокую точность аналитической оценки.

2) Расчёты в СОМЅОL

Программа Comsol Multiphysics позволяет моделировать различные физические явления. В нашем случае нас интересует распространение тепла в твердом теле, учитывая тепловое излучение, между поверхностями. Была построена (как видно на рисунке 1) геометрическая модель рабочего образца, с указанием материалов для каждой составляющей модели. Далее выбирается интересующая нас физика и задаются граничные условия. В нашем случае необходимо задать градиент температур на изучаемых поверхностях (например, если поток тепла идет вдоль оси Ox, то температуры будут заданы на крайних торцах, которые перпендикулярны оси Ox). Нас интересует 6 случаев (3 случая на модель в которой учитывается излучение) задания потока (вдоль каждой из осей). Уравнения для решения модели следующие:

Излучение не учитывается

Общие уравнения, описывающие модель:

$$\nabla \vec{q} = 0$$
$$\vec{q} = -k\nabla T$$

Уравнение описывающее тепловой поток по поверхности, на которой не задана температура:

$$-\vec{n}\vec{q}=0$$

Учитывается излучение

Уравнения, описывающие тепловое излучение: $J = \varepsilon e_b(T)$ $e_b(T) = n^2 \sigma T^4$

В модели, где есть излучение мы задаем диффузные поверхности (те, через которые идет излучение), которые находятся внутри нашей модели (поверхности смежные токовым гребням). Задав все эти данные, на выходе мы можем получить общий поток тепла через любую поверхность, а значит и искомую эффективную теплопроводность.

Результаты можно свести в 1 таблицу:

Таблица 1 — Результаты вычисления компонент эффективного тензора теплопроводности активной зоны батареи ТОТЭ

	Ox	Оу	Oz
Аналитика	14.94	13.69	2.11 - 6.71
Без излучения	15.45	14.22	2.54
С излучением	16.20	14.96	2.97

3) Краткие выводы

По результатам можно сделать несколько основных выводов:

- Необходимо использовать именно компьютерное моделирование для вычисления искомой величины в направлении оси Оz в силу невозможности достаточно точно её оценить. Это ярко выражено в начале работы, где вдоль оси Oz можно получить числа от 2.11 до 6.71 в зависимости от приближений, тогда как точное значение, полученное с помощью компьютерного моделирования – 2.54. В направлении двух других осей оценки получаются довольно точными.
- 2) Аналитически рассчитать модель с излучением не представляется возможным, что дополнительно увеличивает погрешность оценки.
- 3) В то же время полученные результаты демонстрируют, что при температуре 850°С учёт излучения не вносит сильных изменений в полученные коэффициенты.

2.2.3 Геометрия задачи

Виртуальное тело	Размеры (Д×Ш×В), мм
Активная зона реакции	98×98×82.5
Магистральный газовый канал	98×6×82.5
Газораспределитель	98×10×82.5
Внешний пояс	108×10×82.5
Концевая пластина	108×108×10

2.2.4 Граничные условия

Активная зона реакции и газораспределители моделируются пористыми телами, а все остальное – сплошные твердые тела.

Таблица 5 Граничные условия для моделирования газовых потоков

ВНЕШНЯЯ ТЕМПЕРАТУРА, °С РАСХОД ГАЗА, Л/С	50 0,11
ТЕМПЕРАТУРА НА ВХОДЕ, °С	750
ДАВЛЕНИЕ НА ВЫХОДЕ, АТМ	1

Граничные условия для расчета температурного распределения

В качестве граничных условий задавалась температура газов на входе, равная 750 °C, и конвективный закон теплообмена на внешних поверхностях:

 $Q_s = \sigma_{SB}(T_{ex} - T),$

Q_s — входящий поток тепла,

 σ_{SB} — постоянная Стефана — Больцмана,

T_{ex} — температура снаружи батареи

Т — температура батареи

2.2.5 Оборудование, используемое для расчётов

Таблица 1 - Оборудование, используемое для расчётов

НАИМЕНОВАНИЕ	ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОНЕНТЫ
КОМПОНЕНТЫ	
ПРОЦЕССОР	2x Intel® Xeon® CPU E5-2630 v2 @2.60 GHz
	(12 физических или 24 виртуальных ядра)
ОПЕРАТИВНАЯ ПАМЯТЬ	256 Gb DDR3
ЖЕСТКИЙ ДИСК	4 Tb
ВИДЕОКАРТА	GeForce GX 750 2Gb DDR5
МАТЕРИНСКАЯ ПЛАТА	Z9PE-D16 Series

2.3 Результаты

2.3.1 Температура

В результате проведенного компьютерного моделирования получена карта распределения температурного поля в батареи из ТОТЭ. В качестве иллюстрации на рисунке 12 изображена температурное распределение на поверхности батареи. На основании проведенного моделирования показано, что максимум температуры наблюдается вблизи выхода воздушного канала,



Рисунок 12 - Распределение температуры в батарее в градусах Кельвина

что объясняется большим потоком воздуха, переносящим тепло от центра батареи, выделяющего тепло.



Карты распределения температурного градиента в активной зоне

Contour: Pressure (Pa)

96.4 91.3 86.3 81.3 76.3 71.3 66.2 61.2 56.2 51.2 46.2 41.1 36.1 31.1 26.1 21.1 16 11 6.01 0.99



Рисунок 14 — Карта распределения давления

Выводы:

- выполнено компьютерное моделирование температурных полей в батареях из ТОТЭ
- получена карта температурных полей в батареи из ТОТЭ, установлено, что зона максимальной температуры расположена вблизи центра области выходов воздушных каналов;

2.3.2 Скорость счета и сходимость модели

Построенная модель требует ресурсов и времени для получения результатов в несколько раз меньше, чем модель, решенная моим коллегой ранее. Из-за уменьшения количества связей в системе сходимость решения улучшилась и адекватность полученных данных была проверена подсчетом теплового и массового баланса.

2.4 Итоги

Для устранения вышеуказанных недостатков было решено проводить дальнейшее изучение модели, а именно:

- 1) Изменение температуры на входе потока
- 2) Изменение скорости входящего потока

3 Моделирование реакции

3.1 Постановка задачи

3.1.1 Мотивация

Необходимо смоделировать реальный физический эксперимент, который проводил мой коллега Федор Цыбров [1], чтобы теоретически обосновать экспериментальные результаты. Для упрощения рассматривается модель в двух измерениях. Молярные источники (или стоки) умножаются на молярные массы видов для получения соответствующих источников массы. Поток газов ламинарный.

3.1.2 Ожидаемые результаты

Ожидаемые результаты выполненных работ – график зависимости концентрации воды от тока на границе анода и электролита.

3.2 Реализация

3.2.1 Описание системы дифференциальных уравнений (i) <u>Потоки</u>

Определяемые переменные: *p*, *u* - давление и скорость газа

В трубке решались уравнения Навье-Стокса для свободного потока (протекающего не в пористом веществе)

$$\rho(\vec{u} \cdot \nabla)\vec{u} = \nabla \cdot \left(-p\mathbf{I} + \mu(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \vec{u})\mathbf{I}\right)$$
$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

 ρ – плотность газа,

μ – динамическая вязкость газа,

I – единичная матрица

Плотность и динамическая вязкость газа рассчитывались на основе известных давлений, составов и температур газов. Их формулы приведены в разделе, описывающем изменение химических составов газов.

(ii) <u>Химия</u>

Определяемые переменные:

*ω*_i - массовые доли веществ, образующих газы

Уравнения, описывающие изменения состава газовых смесей:

$$\nabla \cdot \vec{j_i} + \rho(\vec{u} \cdot \nabla)\omega_i = R_i$$

$$\overrightarrow{N_{l}} = \overrightarrow{J_{l}} + \rho \overrightarrow{u} \omega_{i}$$

$$\overrightarrow{J_{l}} = -(\rho D_{e,i}^{mK} \nabla \omega_{i} + \rho D_{e,i}^{mK} \omega_{i} \frac{\nabla M_{n}}{M_{n}})$$

$$D_{e,ik} = f_{e}(\epsilon_{p}, \tau_{F}) D_{ik}$$

$$D_{i}^{mK} = (\frac{1}{D_{i}^{m}} + \frac{1}{D_{i}^{K}})^{-1}$$

$$D_{i}^{m} = \frac{1 - \omega_{i}}{\sum_{k \neq i} \frac{X_{k}}{D_{e,ik}}}$$

$$f_{e}(\epsilon_{p}, \tau_{F}) = \frac{\epsilon_{p}}{\tau_{F}}$$

$$x_{k} = \frac{\omega_{k}}{M_{k}} M, \qquad M = \left(\sum_{i} \frac{\omega_{i}}{M_{i}}\right)^{-1}$$

- $\vec{j_l}$ относительный поток массы і компоненты газа
- *D_{ik}* коэффициенты диффузии Фика
- *D*^{*K*}_{*i*} коэффициенты диффузии Кнудсена
- $f_e(\epsilon_p, \tau_F)$ коэффициент tortuisity
- x_k мольные доли веществ
- *М*_{*i*} молярные массы веществ, образующих газ

Уравнение состояния, связывающее плотность с давлением и температурой, соответствует уравнению состояния идеального газа:

$$\rho = \frac{p}{RT} \sum_{i} x_i M_i$$

R - универсальная газовая постоянная

Система уравнений, определяющая химическую реакцию в аноде:

$$R_{i} = M_{i} \sum_{m} R_{i,m} - \omega_{i} \sum_{i} M_{i} \sum_{m} R_{i,m}$$
$$R_{i,m} = \frac{\alpha_{i}i}{nF}$$

 R_i – Поток массы газа

 α_i – Стехиометрический коэффициент

і – ионный ток

n - количество электронов в реакции

F – постоянная Фарадея

3.3 Геометрия задачи

Задача максимально упрощается, если рассмотреть двумерный случай. Есть трубка, по которой продувается топливо, и анод, где происходит объемная реакция взаимодействия водорода с ионами кислорода. Геометрические данные представлены в таблице:

Трубка	20 мкм / 1 мм
Анод	20 мкм / 10 мкм

Вход	Трубка	Выход
	Анод	

Рисунок 1 – геометрия задачи

3.4 Формулирование граничных условий

Граничные условия берутся из реального эксперимента, который проводил мой коллега Федор Цыбров, а именно разность давлений на входе и выходе трубки (100 Па), температура газов (1073 К). Для упрощения задачи мы будем считать температуру постоянной.

3.5 Результаты

3.5.1 Проделанная работа

Смоделирован физический эксперимент, поставленный моим коллегой, который был упрощен. Упрощения состояли в уменьшении размерности системы и уменьшении количества учитываемых роцессов.

3.5.2 Полученные результаты

По результатам моделирования были получены распределения скоростей и давлений в модели, концентрации веществ на различных участках модели.



Рисунок 2 – зависимость молярной концентрации воды от координаты для разных значений ионного тока

На рисунке 2 показана концентрация воды вдоль красной линии (рисунок 3).



Рисунок 3 – модель с указанием линии вдоль которой строится зависимость.

На рисунке 4 показана зависимость концентрации воды в точке соприкосновения анода с электролитом в зависимости от тока.



Рисунок 4 – Зависимость концентрации воды от ионного тока на границе с электролитом

Все данные на рисунках по ионному току представленны в А/м^3.

4 Выводы

Модель батареи включает в себя несколько взаимосвязанных физик, поэтому изменяя одно из граничных условий модели, мы глобально действуем на все результаты. Возможно несколько решений оптимизации батареи, которые можно без больших затрат времени и средств получить на компьютере. Мы получили мощный инструмент, с помощью которого начинаем лучше понимать конкретные места увеличения нагрузок на батарею. Варьируя температуру и скорость входящего потока охлаждающего воздуха планируется получить оптимальные параметры батареи для дальнейшей реализации ее в жизни.

Теоретическая модель реакции не смогла описать результаты, полученные в ходе реального эксперимента, что объясняется, простотой построенной модели, не учитывающей всех физических явлений, протекающих в ходе

реального эксперимента. Принято решение уменьшить количество упрощений и улучшить точность вычислений в аноде.

5 Список литературы

1. Цыбров Ф. М. Исследование токогенерирующих реакций в композитных анодах твердооксидных топливных элементов методом спектроскопии комбинационного рассеяния света – Магистерская диссертация, Черноголовка, 2017

2. Смирнов Д. Б. Изучение процессов сопряженного переноса массы, тепла и заряда в батарее твердооксидных топливных элементов – Магистерская диссертация, Черноголовка, 2016