

# МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПАРАМЕТРИЗАЦІЯ ОДНОКАНАЛЬНОГО ПАЛИВНОГО ЕЛЕМЕНТА

Є. С. Мітько<sup>1,а</sup>, С. М. Пономаренко<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Навчально-науковий Фізико-технічний інститут

## Анотація

У статті представлено результати моделювання одноканального паливного елемента з полімерною протонообмінною мембраною у середовищі ANSYS Fluent. Комплексно досліджено вплив ключових експлуатаційних та мікроструктурних параметрів — робочого тиску, температури, пористості газодифузійного шару (GDL) та товщини мембрани — на вольт-амперні характеристики і вихідну потужність комірки. На основі верифікованої математичної моделі визначено оптимальні режими експлуатації та структурні характеристики, що мінімізують омичні й активаційні втрати та забезпечують ефективне управління водним балансом системи.

**Ключові слова:** Паливний елемент, Протонообмінна мембрана, PEMFC, Параметрична оптимізація

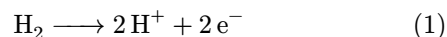
## Вступ

На тлі глобального переходу до стійких енергетичних систем технології водневих паливних елементів набувають стратегічного значення. Полімерні протонообмінні мембранні паливні елементи — це електрохімічні пристрої, що генерують енергію безпосередньо з водню та кисню, виділяючи виключно воду і тепло [1]. Воднева енергетика розглядається як один із найперспективніших напрямів розв'язання проблеми енергетичної безпеки в довгостроковій перспективі, що підтверджується державними програмами багатьох країн світу [1]. Зокрема, парк електромобілів на паливних елементах (FCEV) демонструє стрімке зростання: якщо у 2017 році у світі налічувалося лише 7 000 таких транспортних засобів, то станом на травень 2024 року їх кількість сягнула близько 190 000 одиниць, і ця тенденція стабільно підтримується розширенням ринку комерційного транспорту у 2024–2025 роках [2]. Незважаючи на десятиліття інженерного розвитку, оптимізація сучасних паливних елементів залишається складною мультифізичною задачею [3]. Експериментальні дослідження в цій галузі є технічно обмеженими та дорогавартісними, оскільки інтеграція вимірювальних датчиків у мембранно-електродний блок неминуче спотворює локальні поля течій. Саме тому тривимірне гідродинамічне моделювання (CFD) виступає критично важливим інструментом для глибокого розуміння внутрішніх фізико-хімічних механізмів та визначення оптимальних параметрів для подальшого промислового виробництва [4].

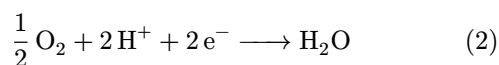
## 1. Математична модель

### 1.1. Принцип роботи та будова паливної комірки

Паливна комірка — це електрохімічний пристрій, який перетворює хімічну енергію палива (водню) в електричну. На аноді відбувається реакція окиснення молекул водню, в результаті якої утворюються протони та електрони [1]:



Оскільки полімерний електроліт не пропускає електрони, вони змушені рухатися по зовнішньому електричному колу до катода, генеруючи корисний струм [1]. Тим часом протони вільно проходять крізь мембрану. На катоді вони зустрічаються з киснем та електронами, утворюючи воду [1]:



Паливний елемент має багатшарову структуру, де кожен рівень виконує специфічну функцію. Зовнішні **струмознімачі з газовими каналами** утворюють фізичний каркас, забезпечують підведення реагентів (водню  $\text{H}_2$  та повітря з  $\text{O}_2$ ), а також відводять згенерований струм і надлишкове тепло. За ними розташовані **газодифузійні шари (GDL)**, що рівномірно розподіляють газові потоки активною площею та відводять утворену воду. Їхню роботу доповнюють **мікропористі шари (MPL)**, які мінімізують контактний опір та полегшують капілярний відтік води. Електрохімічні реакції протікають у **каталітичних шарах (зонах трифазної межі, TRP)**, де водень дисоціює, а кисень бере участь в утворенні води. Серцем комірки є **полімерна електролітна мембрана** — вона вільно транспортує протони, але діє як електронний ізолятор і надійний

<sup>а</sup>mondorin629@gmail.com

бар'єр, що запобігає прямому змішуванню газів. Фізичну схему структури паливного елемента наведено на рис. 1.

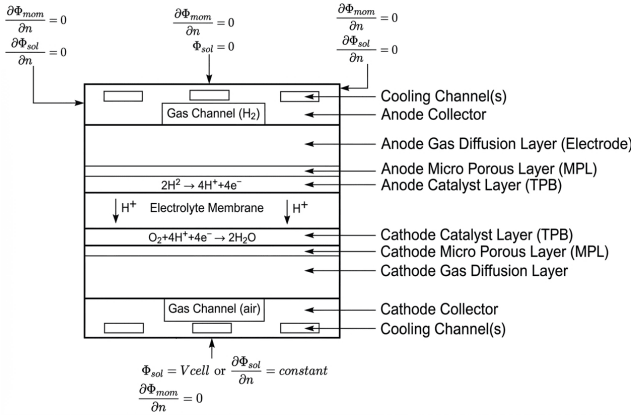


Рис. 1. Повна схема поперечного перерізу багатопаливного елемента

## 1.2. Фізико-хімічна суть процесів та крива поляризації (ВАХ)

Хоча теоретична термодинамічна напруга водневого паливного елемента становить близько 1,23 В, реальна напруга під навантаженням завжди нижча. Це зумовлено різними видами втрат, які формують вольт-амперну характеристику (ВАХ) комірки та є основою обчислювальної гідродинамічної моделі в ANSYS Fluent.

**1. Електрохімічна кінетика (Активізаційні втрати):** Перетворення хімічної енергії на електричну вимагає витрат енергії на запуск і вихід на максимальну ефективність реакції. Рухайною силою є локальна поверхнева перенапруга ( $\eta$ ), що визначається як різниця потенціалів твердої ( $\varphi_{sol}$ ) та мембранної ( $\varphi_{mem}$ ) фаз [1]:

$$\eta_{an} = \varphi_{sol} - \varphi_{mem}, \quad \eta_{cat} = \varphi_{sol} - \varphi_{mem} - V_{oc} \quad (3)$$

Це викликає активізаційну перенапругу — найбільше падіння напруги на старті роботи комірки при малих струмах. Швидкість цих реакцій описується рівнянням Батлера-Фольмера [3]:

$$R_{an} = (\zeta_{an} j_{an}^{ref}) \left( \frac{[A]}{[A]_{ref}} \right)^{\gamma_{an}} \times (e^{\alpha_{an} F \eta_{an} / RT} - e^{-\alpha_{cat} F \eta_{an} / RT}) \quad (4)$$

$$R_{cat} = (\zeta_{cat} j_{cat}^{ref}) \left( \frac{[C]}{[C]_{ref}} \right)^{\gamma_{cat}} \times (-e^{+\alpha_{an} F \eta_{cat} / RT} + e^{-\alpha_{cat} F \eta_{cat} / RT}) \quad (5)$$

де  $R_{an}$  та  $R_{cat}$  — об'ємна густина струму переносу на аноді та катоді,  $\zeta_{an}$  та  $\zeta_{cat}$  — питома активна площа поверхні,  $j_{an}^{ref}$  та  $j_{cat}^{ref}$  — референсна густина струму обміну на одиницю активної поверхні,  $[A]$  та  $[C]$  — локальні молярні концентрації ре-

агентів,  $[A]_{ref}$  та  $[C]_{ref}$  — референсні концентрації,  $\gamma_{an}$  та  $\gamma_{cat}$  — експоненти концентраційної залежності,  $\alpha_{an}$  та  $\alpha_{cat}$  — коефіцієнти переносу заряду,  $F$  — стала Фарадея,  $R$  — універсальна газова стала, а  $T$  — локальна робоча температура.

**2. Транспорт зарядів та закон Ома:** Згенеровані електрони течуть через тверді компоненти (каталізатор, GDL, колектори), а іони (протони  $H^+$ ) — крізь полімерну мембрану. У моделі цей транспорт описується рівняннями збереження заряду за законом Ома (рівняння Пуассона) окремо для електронної та іонної фаз [1]:

$$\nabla \cdot (\sigma_{sol} \nabla \varphi_{sol}) + R_{sol} = 0 \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_{mem} \nabla \varphi_{mem}) + R_{mem} = 0 \quad (7)$$

Природний опір цих матеріалів ( $\sigma$ ) викликає омичні втрати, які лінійно зростають зі збільшенням струму [5].

**3. Управління водним та тепловим балансом (Water Management):** Мембрана потребує зволоження для підтримки протонної провідності, проте надлишок рідкої води ( $s$ ) спричиняє затоплення (flooding) і фізично блокує пори дифузійного шару [3]. Це знижує ефективну дифузію газів, що описується апроксимацією Бруггемана [1]:

$$D_i = \epsilon^{1.5} (1 - s)^{r_s} D_i^0 \left( \frac{P_0}{P} \right)^{\gamma_p} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\gamma_t} \quad (8)$$

де  $D_i$  — ефективний коефіцієнт дифузії газу  $i$ ,  $\epsilon$  — об'ємна пористість,  $s$  — насиченість рідкою водою,  $r_s$  — експонент блокування пор,  $D_i^0$  — масовий коефіцієнт дифузії за еталонних температури ( $T_0$ ) і тиску ( $P_0$ ). Змінні  $T$  та  $P$  позначають локальні температуру й тиск, а  $\gamma_p$  та  $\gamma_t$  — їхні відповідні експоненти. А капілярний рух рідкої води описується  $J$ -функцією Леверетта [1]:

$$P_c = \frac{\sigma \cos \theta_c}{(K/\epsilon)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3) \quad (9)$$

Без ефективного відведення води кисень не може дійти до активних центрів каталізатора, а без відведення тепла мембрана пересохне та зазнає термічної деградації [5].

## 2. Геометрична модель та розв'язувач

Геометричні дані 3D-моделі були взяті зі статті Wang et al. [6]. Паливний елемент довжиною 12,5 см і шириною 3 мм включає дев'ять шарів: мембрану 108 мкм, газодифузійні по 300 мкм та каталітичні по 12,9 мкм шари, газові канали  $1 \times 1$  мм і струмо-знімачі 2 мм. Розрахункова сітка виконана у вигляді гексаедричної сітки, що налічує 425 971 вузлів. Готова сітка можна побачити на рис. 2.

## 3. Результати та обговорення

### 3.1. Валідація моделі

Калібрування CFD-моделі також проводилося на основі даних Wang et al. [6]. Статистичний аналіз

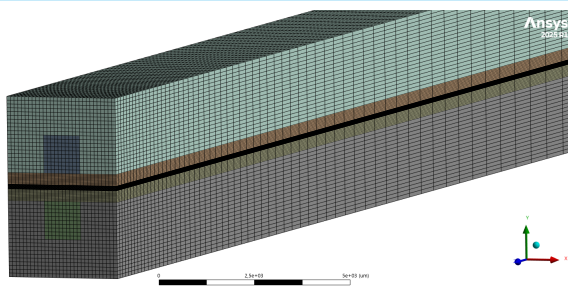


Рис. 2. Наближений ізометричний вигляд сітки на торці моделі

підтвердив високу точність: коефіцієнт детермінації ( $R^2$ ) склав 0,9625, середньоквадратична помилка RMSE — 0,0251 В, а середня абсолютна помилка MAE — 0,0152 В. Графік валідації зображений на рис. 3.

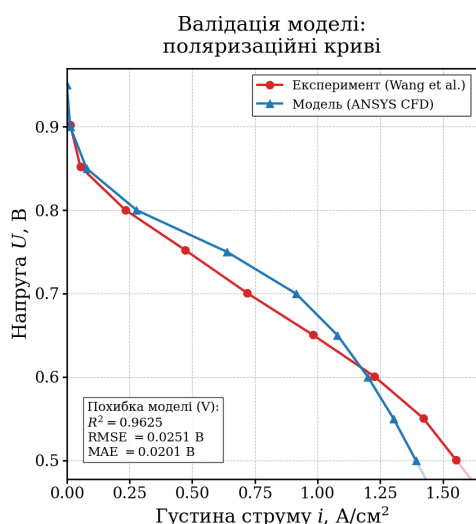


Рис. 3. Графік з порівнянням експериментальних даних та експериментів для валідації моделі

### 3.2. Вплив тиску

Різкий стрибок продуктивності відбувається при підвищенні тиску від 1 до 2 атм: при напрузі 0,6 В густина струму зростає з 0,3656 до 1,1206 А/см<sup>2</sup>, а пікова потужність — з 0,3011 до 0,6723 Вт/см<sup>2</sup>. Це пояснюється зростанням парціального тиску реагентів, що покращує термодинамічний потенціал (за рівнянням Нернста) та масоперенос. Однак при 3–4 атм діє закон спадної віддачі: перехід від 3 до 4 атм дає приріст потужності лише з 0,7205 до 0,7359 Вт/см<sup>2</sup>, а при 5 атм вона сягає межі 0,7400 Вт/см<sup>2</sup> (покращення < 1 %). Таке гальмування зумовлене затопленням катода (flooding) водою та нелінійним зростанням омичного опору мембрани. Через високі енергозатрати компресорів оптимальним інженерним рішенням є діапазон 2–3 атм. Вплив тиску на ВАХ наочно продемонстровано на рис. 4.

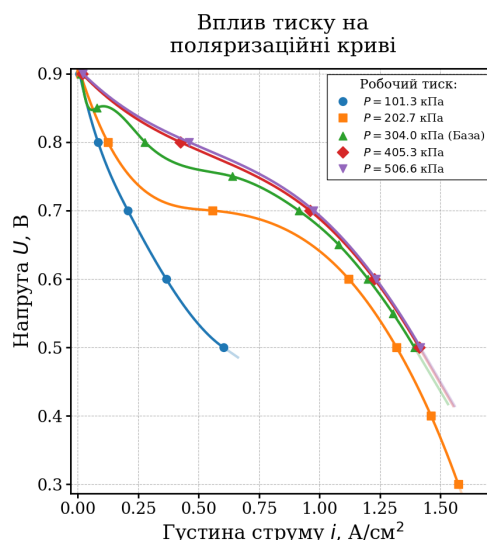


Рис. 4. Вплив робочого тиску на продуктивність паливного елемента

### 3.3. Вплив пористості

Дослідження пористості GDL у діапазоні  $\epsilon = 0,3$ – $0,9$  показало, що в зоні активаційної поляризації (понад 0,8 В) вплив макроструктури відсутній: струм стабільно тримається на рівні  $\sim 0,01$  А/см<sup>2</sup>. Однак у зоні високих струмів (нижче 0,5 В) її роль стає критичною. Зокрема, при напрузі 0,4 В збільшення пористості з 0,3 до 0,7 запобігає капілярному затопленню (flooding) і підвищує густина струму з 1,1272 до 1,6818 А/см<sup>2</sup> (на 50 %). Хоча екстремальна пористість  $\epsilon = 0,9$  дає рекордну теоретичну потужність 0,7761 Вт/см<sup>2</sup> та струм 1,7246 А/см<sup>2</sup> (при 0,45 В), вона катастрофічно збільшує омичний опір матриці. Тому оптимальний інженерний баланс між масопереносом та електропровідністю лежить у межах 0,4–0,6, що гарантує стабільну пікову потужність 0,68–0,72 Вт/см<sup>2</sup>. Відповідний графік залежності наведено на рис. 5.

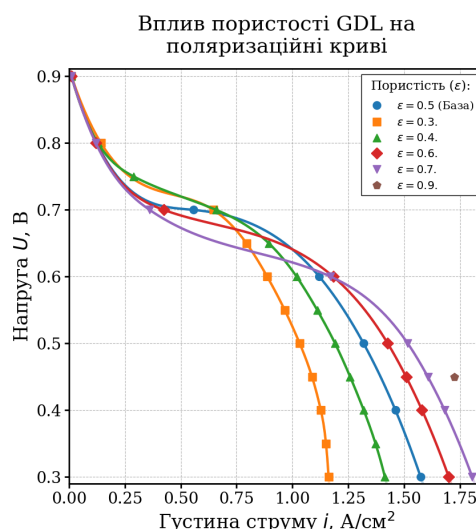


Рис. 5. Вплив пористості газодифузійного шару на продуктивність

### 3.4. Товщина мембрани

Зменшення товщини мембрани з 200 до 15 мкм підвищує пікову потужність з 0,4587 до 1,0960 Вт/см<sup>2</sup>. В ультратонких мембранах зворотна дифузія повністю компенсує електроосмос, створюючи ефект «самозволоження». Оптимум для стабільної роботи становить 20–50 мкм для запобігання кросоверу газів [7]. Графік залежності продуктивності від товщини мембрани наведено на рис. 6.

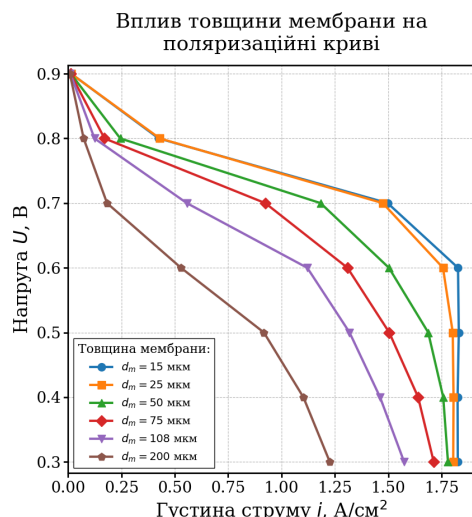


Рис. 6. Вплив товщини протонобмінної мембрани на вольт-амперні характеристики

### 3.5. Вплив температури

Вплив температури поділяється на режими кінетичного прискорення та термічної деградації. У діапазоні 323,15 К — 343,15 К прискорюється кінетика реакцій: пікова потужність сягає максимуму 0,6755 Вт/см<sup>2</sup> при 333,15 К, а густина струму зростає до 1,5742 А/см<sup>2</sup> при 343,15 К. Перевищення 353 К спричиняє термодинамічний колапс: при 383,15 К (110 °С) потужність обвалюється на 61 % — до 0,2612 Вт/см<sup>2</sup>. Це зумовлено висиханням мембрани (ростом омичного опору) та «кисневим голодуванням», коли розширена пара фізично витісняє газ-реагенти з пор. Вплив температури на вольт-амперні характеристики продемонстровано на рис. 7.

### Висновки

Верифікована CFD-модель ( $R^2 = 0,9625$ ) довели, що підвищення робочого тиску доцільне лише до 2–3 атм, оскільки подальше стиснення є енергозатратним і дає менше 3 % приросту потужності. Для уникнення капілярного затоплення електродів водою оптимальна пористість газодифузійного шару має становити 40–60 %. Перехід до мембран товщиною 20–50 мкм є ключовим фактором максимізації потужності завдяки зниженню омичного опору та

механізму самозволоження. Температурний режим вимагає жорсткого контролю в межах 60–70 °С: нагрівання понад 80 °С призводить до фазової блокади

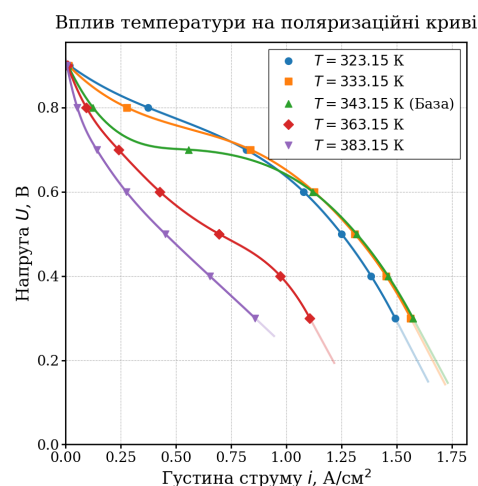


Рис. 7. Вплив робочої температури на продуктивність паливного елемента

реагентів парою та колапсу потужності на 61 %. Загалом, комплексна оптимізація цих параметрів дозволяє наблизити ідеальний ККД комірки до 40, 5 %, підтверджуючи високий потенціал технології [1].

### Перелік використаних джерел

1. Fan L., Tu Z., Chan S. H. Recent development of hydrogen and fuel cell technologies: A review // Energy Reports. — 2021. — Т. 7. — С. 8421—8425. — DOI: [10.1016/j.egy.2021.08.003](https://doi.org/10.1016/j.egy.2021.08.003).
2. Hydrogen Council, McKinsey & Company. Hydrogen Insights 2024 : тех. звіт. / Hydrogen Council. — 09.2024. — URL: <https://hydrogencouncil.com/wp-content/uploads/2024/09/Hydrogen-Insights-2024.pdf>.
3. Fuel Cell Fundamentals / R. O'Hayre, S.-W. Cha, W. Colella, F. B. Prinz. — John Wiley & Sons, 2016. — DOI: [10.1002/9781119191766](https://doi.org/10.1002/9781119191766).
4. A new procedure for rapid convergence in numerical performance calculations of electrochemical cells / S. B. Beale [та ін.] // Electrochimica Acta. — 2023. — Т. 472. — С. 143275. — DOI: [10.1016/j.electacta.2023.143275](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.143275).
5. Larminie J., Dicks A. Fuel Cell Systems Explained. — 2nd. — John Wiley & Sons, 2003.
6. A parametric study of PEM fuel cell performances / L. Wang, A. Husar, T. Zhou, H. Liu // International Journal of Hydrogen Energy. — 2003. — Т. 28, № 11. — С. 1263—1272. — DOI: [10.1016/S0360-3199\(02\)00284-7](https://doi.org/10.1016/S0360-3199(02)00284-7).
7. Lim T., Park K. Pinhole formation in PEMFC membrane after electrochemical degradation and wet/dry cycling test // Korean Journal of Chemical Engineering. — 2011. — Т. 28. — С. 487—491.