

电池与燃料电池模块

简介

电池与燃料电池模块简介

© 1998–2018 COMSOL 版权所有

受 cn.comsol.com/patents 中列出的专利和美国专利 7,519,518、7,596,474、7,623,991、8,457,932、8,954,302、9,098,106、9,146,652、9,323,503、9,372,673 及 9,454,625 的保护。专利申请中。

本文档和本文所述的程序根据 COMSOL 软件许可协议 (cn.comsol.com/comsol-license-agreement) 提供，且仅能按照许可协议的条款进行使用和复制。

COMSOL、COMSOL 徽标、COMSOL Multiphysics、COMSOL Desktop、COMSOL Server 和 LiveLink 为 COMSOL AB 公司的注册商标或商标。所有其他商标均为其各自所有者的财产，COMSOL AB 公司及其子公司和产品不与上述商标所有者相关联，亦不由其担保、赞助或支持。相关商标所有者的列表请参见 cn.comsol.com/trademarks。

版本：COMSOL 53a

联系信息

请访问“联系 COMSOL”页面 cn.comsol.com/contact，以提交一般查询、联系技术支持或搜索我们的联系地址及号码。您还可以访问全球销售办事处页面 cn.comsol.com/contact/offices，以获取地址和联系信息。

如需联系技术支持，可访问 COMSOL Access 页面并填写在线申请表，位于：cn.comsol.com/support/case 页面。其他有用的链接还包括：

- 技术支持中心：cn.comsol.com/support
- 产品下载：cn.comsol.com/product-download
- 产品更新：cn.comsol.com/support/updates
- COMSOL 博客：cn.comsol.com/blogs
- 用户论坛：cn.comsol.com/community
- 活动：cn.comsol.com/events
- COMSOL 视频中心：cn.comsol.com/video
- 技术支持知识库：cn.comsol.com/support/knowledgebase

文档编号：CM021502

目录

简介.....	5
电池建模	8
电池建模物理场接口.....	12
燃料电池建模.....	14
燃料电池建模物理场接口	16
根据空间维度和研究类型排列的物理场接口	18
锂离子电池教程.....	21
模型定义.....	21
结果与讨论.....	22
燃料电池阴极仿真教程	36
模型定义.....	36
结果与讨论.....	38

简介

电池与燃料电池模块用于对电池和燃料电池的电极和电解质中的基本过程进行建模和模拟，包括带电和中性粒子的传递、电流传导、流体流动、传热以及多孔电极中的电化学反应等。

您可以使用本模块研究不同的电极结构、隔膜、正负极集流体、材料以及化学反应的电池和燃料电池在不同工作条件下的性能。由于对涉及的过程和现象进行了非常详细的描述，因此，您可以采用各种不同的假设获得对研究体系的详细理解。可以直接在物理场接口中研究不同电催化剂、孔隙分布、电解质成分及其他基本参数。

您还可以将电化学耦合到其他物理场，例如，传热、流体流、结构力学和化学物质传递，以研究老化、热效应和应力 - 应变关系等现象。

下图列出了**电池与燃料电池模块**的物理场接口，以及 COMSOL Multiphysics 中根据不同模块的许可证而变化的其他物理场接口，如**化学物质传递**分支接口。

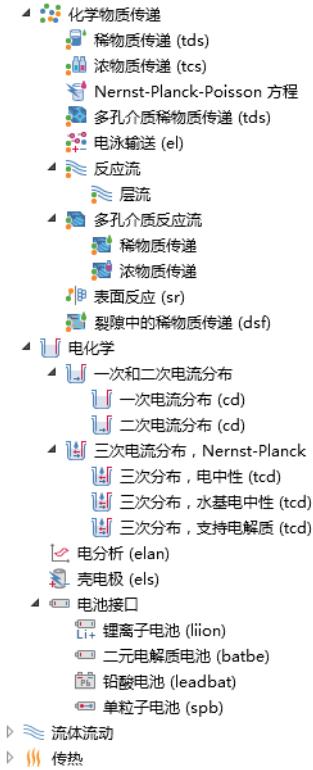


图 1: 三维建模时在**模型向导**中列出的电池与燃料电池模块的物理场接口。

电化学 () 接口基于电流、电荷、化学物质及能量守恒。

二元电解质电池 ()、**铅酸电池** ()、**锂离子电池** () 及**单粒子电池** () 接口构成了电池建模的理论基础。

此外，**一次电流分布** ()、**二次电流分布** () 及**三次电流分布**，**Nernst-Planck** () 接口是对任何电化学电池进行建模的通用物理场接口。

化学物质传递 ()、**流体流动** () 及**传热** () 接口扩展了电池建模的功能，详见**电池建模**。

一次、二次及三次电流分布接口与化学物质传递、流体流动及传热物理场接口结合起来，形成燃料电池建模的理论基础，详见[燃料电池建模](#)。

电池建模

电池与燃料电池模块提供一系列物理场接口用于对电池单元进行建模，通常包含：模拟可充电电池（二次电池）和不可充电电池（原电池）。

- a) 正负极集流体
- b) 多孔或固体金属电极
- c) 阳极和阴极之间的电解质

电池与燃料电池模块可用于研究可充电电池中的充放电过程，如下所述：

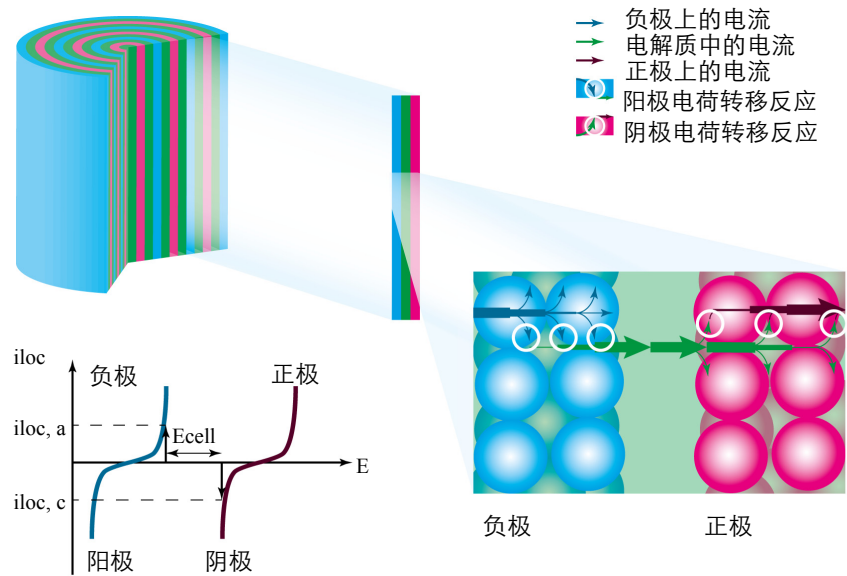


图 2：在放电过程中，电池多孔电极中的电流以及电荷传递电流的方向。

在放电过程中，在阳极和阴极的电荷转移反应将化学能转化为电能，此过程可能包含电化学反应、电流传导、电解质中离子的传递、中性粒子的传递、流体流动中的质量传递，以及不可逆的热能释放等现象，比如欧姆损耗和由于活化能引起的损耗等。

图 2 显示了放电过程的示意图。负极上电流从集流体进入电池，在电极和多孔电极孔隙中的电解质（也称为孔隙电解质）界面处发生电荷转移反应。由于阳极上发生的这种电荷转移反应，使得电极材料上被氧化，其中界面电流用 $i_{loc, a}$ 表示，如图 2 所示。图中两条曲线的形状描述特定电极材料的电极动力学，其中的反应可能还涉及来自孔隙电解质甚至电极的化学物质传递。

来自负极孔隙电解质中的电流通过离子传递的方式，从正极和负极之间的电解质（通过隔膜或贮槽）传导至正极中的孔隙电解质。

在孔隙电解质和多孔电极表面之间的界面上，电荷转移反应将电解质电流转变为正极上电子传导的电流。在该界面上，由于阴极上发生的电荷转移反应，使得电极材料被还原，如图 3 所示的 $i_{loc, c}$ 。同样在这里，电荷转移反应可能涉及电解质中以及电极上的化学物质传递。

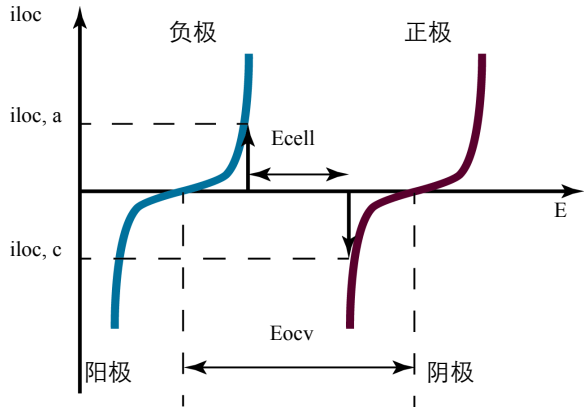


图 3：放电过程中的电极极化。该图与图 2 的插图相同。

电流从集电器中流出。由于欧姆损耗、活化损耗或其他不可逆过程中的热损耗，电流的传导以及电化学电荷转移反应都会释放热量。

图 3 显示的电荷转移电流密度 i_{loc} 是一个与电极电位 E 相关的函数，这些曲线描述了放电过程中电极的极化。

在放电过程中，负极发生阳极极化，正电流由图 3 中的箭头表示，负极电位变大。正极发生阴极极化，负电流也由箭头表示，正极电位减小。

因此，图 3 显示了放电过程中两个电极之间的电位差 E_{cell} ，与开路电池电压 E_{ocv} 相比减小了。如果可以忽略欧姆损耗的电池电压，则 E_{cell} 的值表示在一定电流 i_{loc} 下的电池电压。这种情况在大多数电池中很少出现，因此在多数情况下，电池的电压比图 3 显示的略小一些。

充电过程正好与该过程相反，如图 4 所示，其中电能转变为化学能存储在电池中。

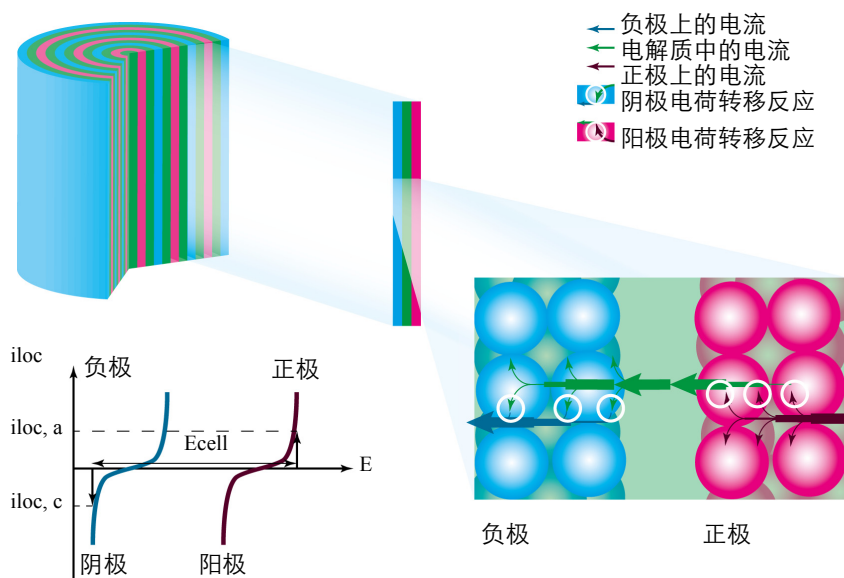


图 4：在充电过程中，正极为阳极，负极为阴极。相比于开路电池电压，（给定电流条件下的）电池电压会变大。注：此处的电流方向相反。

电流从正极流入。充电过程中，阳极电荷的转移反应导致产物被氧化。正极发生阳极极化，产生正电流，电极电位升高。

然后，电流从孔隙电解质通过隔膜（或贮槽）中可区分电极的电解质，传导至负极。

在负极上，发生阴极电荷转移反应，原先的放电反应的产物被还原。负极发生阴极极化，电极电位下降。

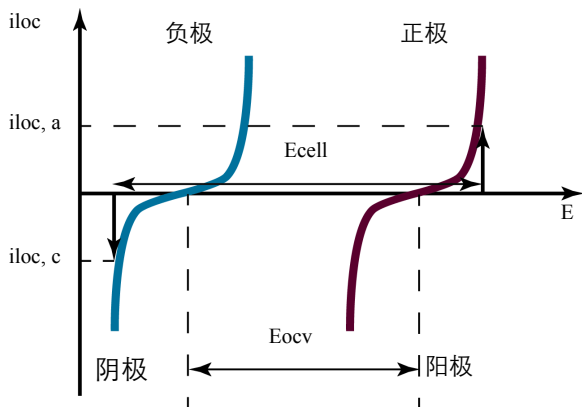


图 5: 充电过程中的电极极化。

在充电过程中，与开路电池电压相比，电极间的电位差（以 E_{cell} 表示），在给定电流 i_{loc} 的条件下会变大，见图 5。忽略欧姆损耗时， E_{cell} 的值等于电池电压。然而在大多数情况下，欧姆损耗不能忽略，因此这部分影响应添加到电池电压。

上图中描述的电池过程和现象都能借助于**电池和燃料电池**模块进行研究，其中的物理场接口可用于研究电池性能的影响因素及热管理参数，例如：

- 材料和化学组成的选取
- 正负极集流体的尺寸和结构
- 电极的尺寸和结构
- 组成多孔电极的粒子尺寸

- 多孔电极的孔隙率和比表面积
- 电池单元的结构
- 界面和本体反应的动力学
- 依赖于电势或施加的电流的负载周期
- 电化学电池的老化

电池建模物理场接口

锂离子电池接口 () 专用于模拟锂离子电池，可用于描述带电物质在多孔电极、电解质中的传递、电极中的插层反应、粘结剂、电荷转移反应、内部颗粒扩散、传输物理量的温度依赖性、老化机制以及固体电解质界面 (SEI)。

单粒子电池接口 () 提供简单方法（例如，相比于**锂离子电池接口**）进行电池建模。此接口分别对电池的正负极使用单独的单粒子模型，对电池中的电荷分布进行建模。可解释电极粒子中的固相扩散，插层反应动力学以及使用集总溶液电阻项的分离膜中的欧姆电势降。

二元电解质电池接口 () 可以描述电极中的电流传导、多孔电极中的电荷转移反应、孔隙电解质和电极间电解质中离子的质量传递，以及形成多孔电极的颗粒中物质的嵌入。适用于基本二元电解质电池，包括镍 - 金属氢化物电池和镍 - 镉电池。

铅酸电池接口 () 专用于模拟锂离子电池，可用于描述带电物质的传递、电荷转移反应、充电和放电引起的孔隙率变化，以及孔隙率变化引起的电解质的平均表面速度。

三次电流分布，Nernst-Planck 接口 () 可以描述电解质中的带电粒子通过扩散、迁移和对流等方式进行的传递。此外，还包含预设的多孔和非多孔电极模型，以及电子导体中电荷转移反应和电流传导。

化学物质传递接口 () 可以描述孔隙电解质和电极间电解质的离子传递。除电化学反应外，还可以描述其他反应，如材料的降解。通过耦合**二次电流分布**接口 ()、**浓物质传递**接口 () 及**多孔介质稀物质传递**接口 ()，可用于对带电粒子的转移以及多数电池体系中的电化学反应进行建模。

流体流动接口 () 可以描述一个指定类型电池中多孔电极和自由介质内的流体流动，如某些类型的铅酸电池。

多孔介质传热接口 () 可以描述电池中的传热，包括由于电化学反应活性损耗引起的放热、电极材料和电解质中的焦耳热效应，以及净熵变化。这些物理场接口还可以描述来自其他类型化学反应的热源。

燃料电池建模

本模块包含对燃料电池单元进行建模的功能，燃料电池通常包含：

- 正负极集流体
- 集电器和馈线中沟槽形成的气体通道
- 多孔气体扩散电极 (GDE)
- 隔开阳极和阴极的电解质 (GDE)

图 6 显示了燃料电池单元和一个 GDE 结构的示意图。图中描绘了一个燃料电池单元和阴极 GDE 的局部放大图，它们之间通过电解质连接。

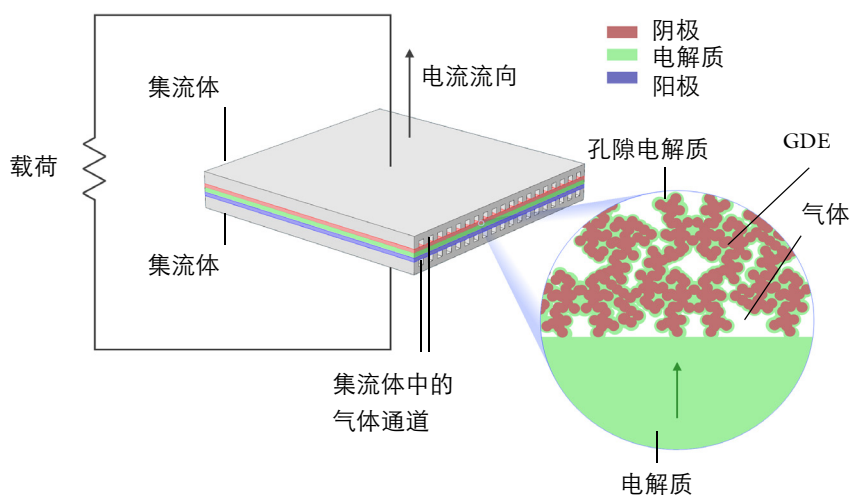


图 6：燃料电池单元，包括局部放大的阴极 GDE 及其与电解质的接触。

氧气和氢气分别通过正负极集流体中的气体通道流入电池。集流体由导电材料制成，并在其中制备可供气体流过的沟槽，它们一般为开放式的通道，其中的开放边界面向 GDE 的表面。

正负极集流体会将电流传导给与负载连接的导线。在电池工作时，它们还能进行冷却，并在电池启动过程中进行加热。

图 6 为放大的燃料电池的 GDE 示意图，其中包含带有酸性电解质的氧气还原阴极，如 PEMFC。在 PEMFC 中，活性 GDE 被局限在由纯气体扩散层 (GDL) 支撑的薄活化层中。

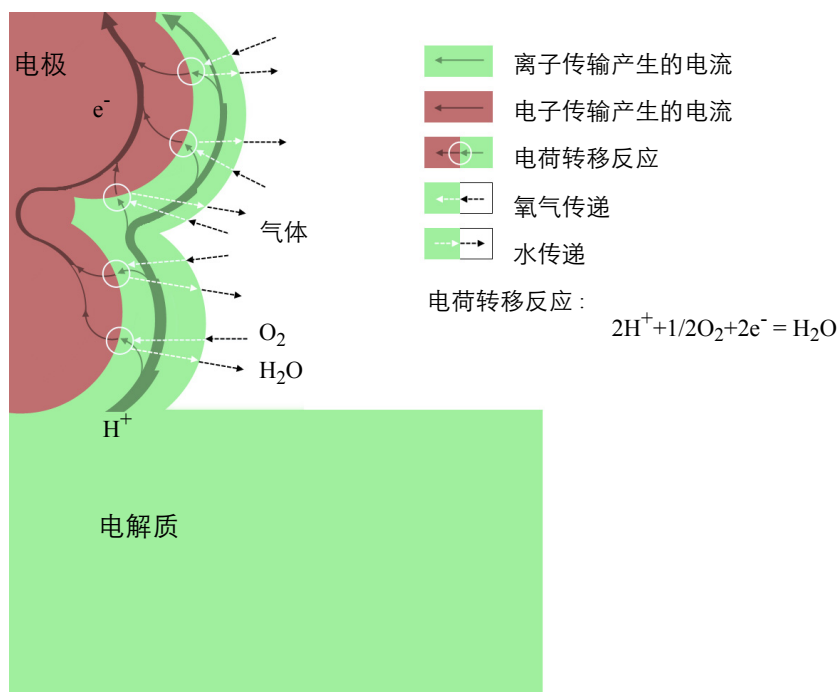


图 7: 氧气还原 GDE 中的反应位置处的氧气，水，质子和电子的释放和传递示意图。

图 7 显示了在电极中的氧气被还原过程的原理。电流借助质子从自由电解质传导至 GDE 中的电解质 (也称为孔隙电解质)，并在反应位置通过电荷转移反应转变为电子流。反应位置位于孔隙电解质和电极材料中电催化剂的接触界面上。

图 7 还描述了电极中电流传输的路径示意图。孔隙电解质中的电流随着距离自由电解质越远而变得越小，原因是它转变为电极中的电子流。电极中的电流方向与电子移动方向相反。

氧气的供给与运动电荷转移反应耦合发生，并且受到气相中以及覆盖在反应位置处的薄层孔隙电解质中的质量传递阻力。

通过在气体孔隙中的蒸发和传递，电极中的水含量保持平衡。

孔隙电解质必须形成一个从阳极和阴极之间的自由电解质到反应位置的不间断路径。此外，电极材料和气体孔隙也必须各自都形成一个指向反应位置或指向覆盖在反应位置的孔隙电解质的不间断路径。

上述过程包含流体流动、化学物质传递、传热，以及集电极、馈电器、电极和电解质中的电流传导和电化学反应。它们耦合到一起，用于确定电池单元的特性。

通过对这些过程进行建模，可以研究一些重要的设计参数，包括：

- 孔隙率，活化表面积，GDE 的孔隙电解质含量
- GDE 几何结构 (活化层和 PEMFC 的 GDL) 以及与气体通道、集电器和馈线相关的电解质
- 形成气体通道沟槽的几何，以及正负极集流体的尺寸

燃料电池建模物理场接口

气体通道中和 GDE 中的流体流动通过**流体流动**接口处理 — **层流** (🌊)、**自由和多孔介质流动** (🏠)，以及**达西定律** (🏠) 接口。

孔隙电解质中的气相物质传递，以及质量传递阻力通过**化学物质传递**接口 (🌈) 处理，其中包含将气相传递与电化学反应耦合的节点。**化学物质传递**接口还与**流体流动**接口 (🌊) 通过气体密度相耦合，密度由气相组分决定。将化学物质传递耦合到流体流动的一个简便方法是使用**反应流**接口 (🌊)，其中包含预定义的多物理场耦合。**传热**接口 (🔥) 处理电解质、孔隙电解质以及电极上的焦耳热效应，其中对于热平衡的贡献来自于活化超电势引起的电化学反应和熵净变化。

自由电解质和孔隙电解质中的离子电流传递、电子电流传递及电荷转移反应可以使用**一次电流分布** (🔌)、**二次电流分布** (🔌) 及**三次电流分布**，**Nernst-Planck** (🔌) 接口。

一次电流分布接口忽略了电解质组分的变化及电荷转移反应的活性损耗，通常适用于具有固定电荷的电解质或混合良好的电解质，并假定活化损耗相对于传导损耗很小。在**二次电流分布**接口中，电解质中的成分变化也被忽略，但考虑了电荷转移反应中的活化损耗。在**三次电流分布**，**Nernst-Planck** 接口中，还考虑了扩散对于离子传递的贡献，以及由此引起的对电解质中电流的贡献。

电极，壳接口 () 可对边界上切向方向的电流传导进行建模，适用于模拟法向电位变化可被忽略的薄层电极。基于该假设，可以使用边界模式的偏微分方程代替薄层电极区域。使用这种方式可以极大地减少待求问题的规模，并可以避免薄层区域潜在的网格各向异性问题。

根据空间维度和研究类型排列的物理场接口

下表列出了 COMSOL 基本许可证提供的物理场接口和**电池与燃料电池**模块中可用的物理场接口。

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
 化学物质传递				
表面反应		sr	所有维度	稳态（二维，二维轴对称和三维）；瞬态
稀物质传递		tds	所有维度	稳态；瞬态
多孔介质稀物质传递		tds	所有维度	稳态；瞬态
裂隙中的稀物质传递		dsf	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
电泳输送		el	所有维度	稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态
浓物质传递		tcs	所有维度	稳态；瞬态
Nernst-Planck-Poisson 方程		tds+es	所有维度	稳态；瞬态； 稳态源扫描； 小信号分析，频域
 反应流				
层流		—	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
 多孔介质反应流				
稀物质传递		rfds	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态

物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
浓物质传递		rfcs	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
 电化学				
一次电流分布		cd	所有维度	稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗
二次电流分布		cd	所有维度	稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗
三次电流分布， Nernst-Planck（电中性，水基电中性和支持电解质）		tcd	所有维度	稳态；带初始化的稳态； 瞬态；带初始化的瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗
电分析		elan	所有维度	稳态；瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗； 循环伏安法
壳电极		els	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
 电池接口				
锂离子电池		liion	所有维度	稳态；瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗

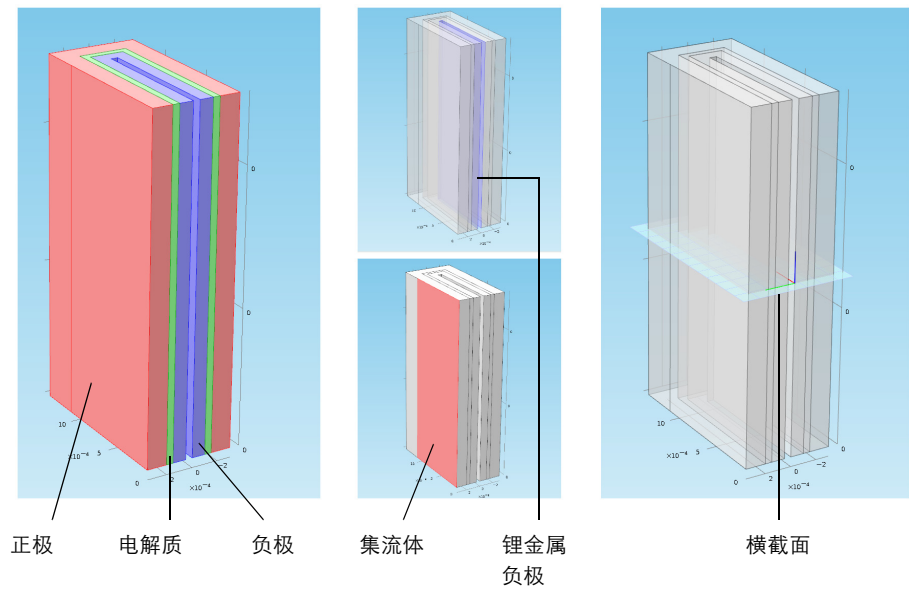
物理场接口	图标	标记	空间维度	可用的预设研究类型
二元电解质电池		batbe	所有维度	稳态；瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗
铅酸电池		leadbat	所有维度	稳态；瞬态； 交流阻抗，初始值； 交流稳态阻抗； 交流瞬态阻抗
单粒子电池		spb	所有维度	瞬态；带初始化的瞬态
 流体流动				
 多孔介质和地下水流				
Brinkman 方程		br	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
达西定律		dl	所有维度	稳态；瞬态
自由和多孔介质流动		fp	三维， 二维， 二维轴对称	稳态；瞬态
 传热				
多孔介质传热		ht	所有维度	稳态；瞬态

锂离子电池教程

下面介绍锂离子电池二维模型。电池的几何是一个实验电池的一小部分，本节只演示如何建立二维模型，电池包含多孔正电极、电解质、负锂离子金属电极和负极集流体。这种电池配置有时称为“半电池”，因为锂离子金属电极通常被视为对电池电压和极化没有太大影响。实际的二维几何结构请参见**绕带式锂离子电池的边效应**案例，可以在**电池和燃料电池**案例库中找到。

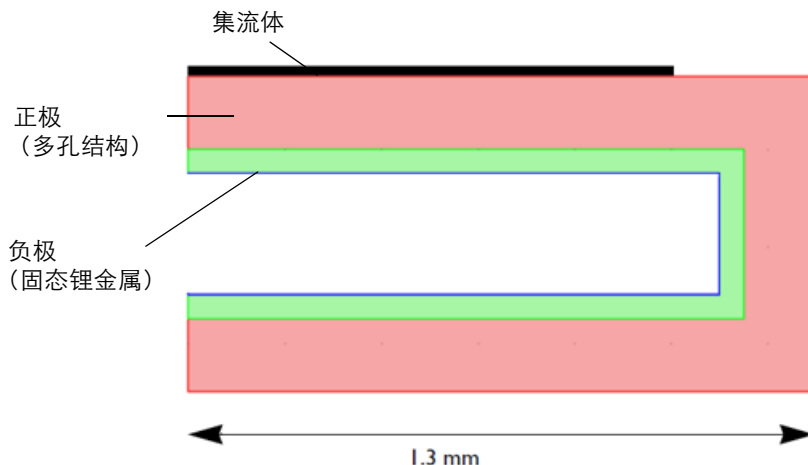
模型定义

下图显示了电池的几何结构。由于沿着电池高度方向的对称性，因此三维几何可以使用二维横截面进行建模。图中显示了正极和负极的位置，以及附加到正电极的负极集流体。正电极为多孔电极，负电极由锂离子金属组成。



建模的二维横截面以绿色显示 (右图)。

由于电化学反应仅发生在与隔膜中的电解质接触的锂离子金属表面，而电子电导率相比于多孔正极来说非常高，因此，金属的厚度在模型几何中可忽略不计。下图显示建模的二维电池几何结构。放电过程中，正极为阴极，而与之接触的金属作为负极集流体。负锂离子金属极为阳极和正极集流体。



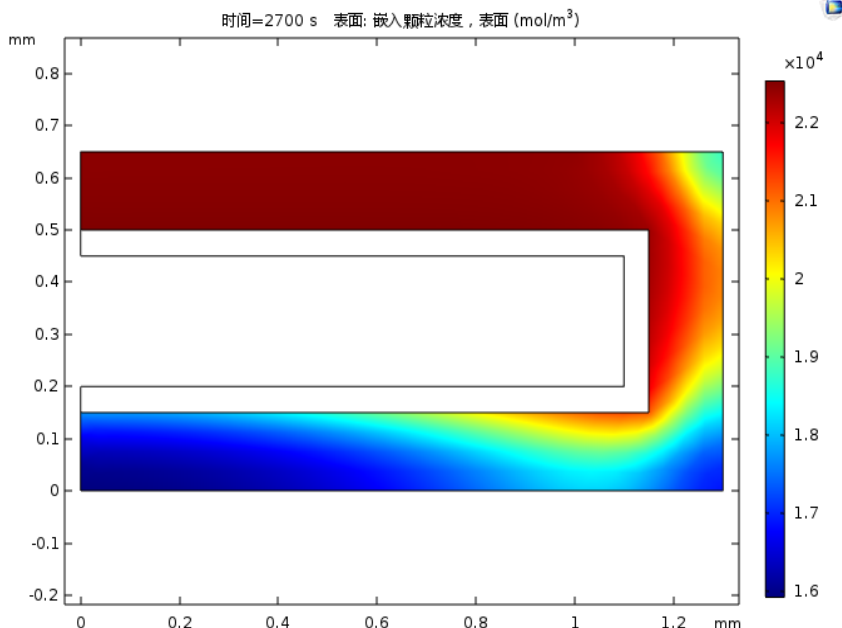
模型定义并求解了锂离子电池中的电流和物质守恒。使用粒子半径作为第四个因变量（ x 、 y 和 t 是其他三个变量）求解正极的颗粒中的锂嵌入。反应动力学和嵌入耦合到颗粒表面的质量守恒和电流守恒。模型方程可以在 *Batteries & Fuel Cells Module User's Guide* 中找到。本模型最初为加州大学伯克利分校的 John Newman 及其合作者建立的一维仿真。

结果与讨论

二维仿真的目的是表征正电极放电深度的分布，以及放电深度随时间的演化。放电深度的分布取决于负极集流体的位置、正电极与电解质层的厚度，以及电极动力学和传递属性。

下图显示了电极中的正电极颗粒经过 0.05 放电 2700 s 以后，表面上的锂浓度。

正极上的高浓度与电极上这些部分的局部放电深度成正比。图中还显示了在相对负极集流体的电极背面区域，放电过程中利用率较少。不过，随着放电过程的延续，这些部分随后也会放电。然而，对于电池的重复循环过程（充电和放电），如果在循环使用过程中电极仅以中等程度放电，则电极的不同部分会发生非均匀老化。



尽管模型被极度简化，但仍深刻揭示：如果没有通过建模和仿真来系统地研究电极、正负集流体的结构，则可能在实际的电池几何中出现问题。

以下说明演示了如何设置、求解及重现此模型。

模型向导

注意：这些操作说明基于 Windows 用户界面，但同样适用于 Linux 和 Mac，只是略有差别。

- 1 双击桌面或计算机开始菜单上的 COMSOL 图标启动软件。当软件打开后，您可以选择使用**模型向导**创建新的 COMSOL 模型或使用**空模型**来手动创建。对于本教程，单击**模型向导**按钮。

如果 COMSOL 已打开，您可以从**文件**菜单中选择**新建** ，然后单击**模型向导**  来启动它。

模型向导会指导您进行模型建立的最初几个步骤。首先选择建模空间的维度。

- 2 在**空间维度**窗口单击**二维**按钮 。
- 3 在**选择物理场**窗口的**电化学 > 电池接口**下，双击**锂离子电池 (liion)** ，将其添加到**选择物理场**列表。
- 4 单击**研究** 。
- 5 在**研究**窗口的**预设研究**下单击**瞬态** 。该研究类型简化了模型，因为它减少了需要在电池接口通过计算的初始电位来设置的初始值数量。
- 6 单击**完成** 。

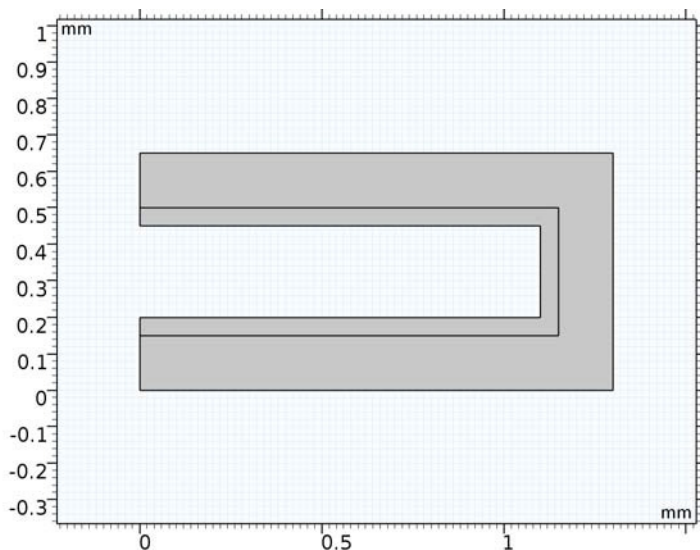
几何 1

从文件导入几何。

从文件插入现有的几何序列。之后可以研究序列中的每个几何步骤。

- 1 在**几何**工具栏上，单击**插入序列**。
- 2 在计算机上的案例库文件夹 Batteries_and_Fuel_Cells_Module\Batteries_Lithium-Ion 中，浏览至 li_battery_tutorial_2d_geom_sequence.mph 文件，对其双击将其打开，或单击**打开**。
- 3 在**几何**工具栏上，单击**全部构建**。

注意：本练习所用文件的位置取决于 COMSOL Multiphysics 的安装。例如，如果安装在硬盘上，则文件路径类似于：C:\Program Files\COMSOL53a\applications\。



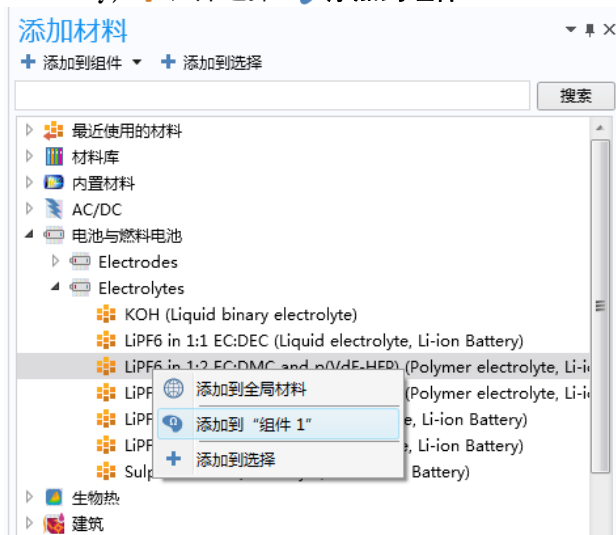
材料

使用电池和燃料电池材料库为电解质和电极（阳极和阴极）域设置材料属性。如果首先添加电解质材料属性，则在默认情况下，所有域都会被赋予该材料属性。

1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)

1 在主屏幕工具栏单击添加材料 。

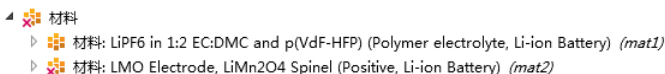
- 转至添加材料窗口。在树中选择**电池与燃料电池**，在 **Electrolytes** 下右键单击 **LiPF₆ in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)** ，并选择  **添加到组件 1**。



LMO Electrode, LiMn₂O₄ Spinel (Positive, Li-ion Battery)

- 转至添加材料窗口。
- 在树中选择**电池与燃料电池**，在 **Electrolytes** 下，单击 **LMO Electrode, LiMn₂O₄ Spinel (Positive, Li-ion Battery)** ，在添加材料窗口单击  **添加到组件**。
- 选择**域 1**，即正电极域。

模型开发器窗口中材料下的节点序列应与下图一致。



注：LMO Electrode, LiMn₂O₄ Spinel (Positive, Li-ion Battery) 现在显示红叉标记。稍后我们在定义**锂离子电池 (liion)** 接口时将解决此问题。

如果您希望的话，现在就可以单击展开**材料**下的节点，查看其中各个属性（cEeqref 表示活性材料中的最大锂浓度）。您下面要定义的物理模型将使用这其中的大部分属性。

锂离子电池接口

默认情况下，**电解质**域节点已添加到模型中，而且随电解质浓度变化的电解质参数由**材料**节点的材料属性指定，因此此节点中无须作进一步的设置。

下面使用多孔电极域节点设置正极的物理场。多孔电极节点定义的域由均匀混合的电极（固体）和电解质（液体）相构成。

多孔电极 1

1 在**物理场**工具栏单击**域** ，并选择**多孔电极**，将其添加到模型。



2 找到**多孔电极**节点的**域选择**栏，然后选择**域 1**。

注意：有许多种方法选择几何实体。知道要添加的几何实体时，如这些练习，便可以单击**粘贴选择**按钮 ，并将相关信息输入到**选择**文本框。有关在**图形**窗口中选择几何实体的更多信息，请参见 *COMSOL Multiphysics Reference Manual*。

- 3 在同一窗口的**电解质属性**下，从**电解质材料**列表中选择 **LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery)**。
- 4 在**电解质体积分数**文本框中，找到**体积分数**栏，输入 1-0.4-0.172。该值表明电解质体积分数取决于电极体积分数 (0.4) 和多孔电极中的填料或电子导体 (0.172)。

▼ 电解质属性

电解质材料:

材料: LiPF6 in 1:2 EC:DMC and p(VdF-HFP) (Polymer electrolyte, Li-ion Battery) (r ▼

电解质电导率:

σ_l 来自材料 ▼

电解质盐扩散系数:

D_l 来自材料 ▼

传递数:

t_+ 来自材料 ▼

活性依赖性:

$\frac{\partial \ln f}{\partial \ln c_l}$ 来自材料 ▼

▼ 电极属性

电极材料:

碱材料 ▼

电导率:

σ_s 来自材料 ▼

▼ 粒子属性

插层粒子 ▼

▼ 体积分数

电极体积分数:

ϵ_s 0.4 1

电解质体积分数:

ϵ_l 1-0.4-0.172 1

▼ 有效传递参数校正

由电解质电导率:

多孔电极反应 1

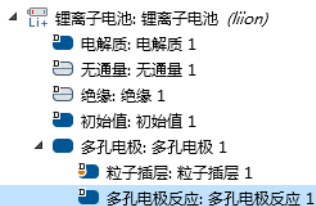
默认情况下，**多孔电极反应**及**粒子插层**子节点已添加到**多孔电极**节点中（另外，**多孔电极反应**节点以及**多孔双电层电容**也可以添加到**多孔电极**节点中）。

粒子插层子节点包含的设置与原子锂到固体电极粒子中的传递相关。对于此模型，我们将保留**粒子插层**节点的默认设置。

下面定义默认**多孔电极反应**节点的**平衡电位**，其值基于之前添加的材料。

多孔电极反应 1

- 1 在模型开发器窗口中，展开多孔电极 1 节点，并单击多孔电极反应 1 节点 。
- 2 在平衡电位栏下，对平衡电位和平衡电位温度导数均选择来自材料。



将多孔电极反应节点的电极动力学和化学当量保留为默认值。

电极电流 1

下面定义电池放电电流。

- 1 在物理场工具栏上单击边界 ，并选择电极电流 。



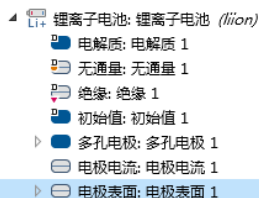
- 2 仅选择边界 10。

3 在**电极电流的设置**窗口中，在总电流文本框中输入 $-0.05[\text{A}]$ 。

电极表面 1

最后定义负极，完成模型设置。由于锂金属的电导率非常高，因此定义锂金属域（模型几何中未包含）和电解质域（模型几何中已包含）之间的电极表面已足够。

1 在**物理场**工具栏上单击**边界** ，并选择**电极表面** 。



2 仅选择边界 5、7 和 12。

默认情况下金属电极电位接地（设为 0 V ），因此此节点上无须作进一步设置。

与**多孔电极**节点类似，**电极表面**节点默认附带了**电极反应子**节点。您可以展开**电极表面**节点，查看此节点的各项设置，不过无须作进一步设置，因为默认值适用于锂金属表面。

网格 1

在本例中，使用自动生成的网格。无需手动设置网格。

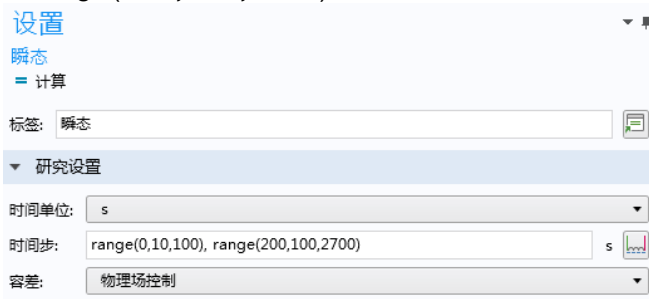
研究 1

设置 2700 秒的瞬态求解器，以存储前 100 秒中间隔为 10 秒的解，以及最后 2600 秒中间隔为 100 秒的解。然后求解该问题。

步骤 2: 瞬态

1 在**模型开发器**窗口，展开**研究 1**节点，并单击**步骤 2: 瞬态** .

- 2 在**研究设置**栏的**时间**文本框中输入（或复制粘贴）`range(0,10,100), range(200,100,2700)`。



- 3 在**主屏幕**工具栏单击计算 。

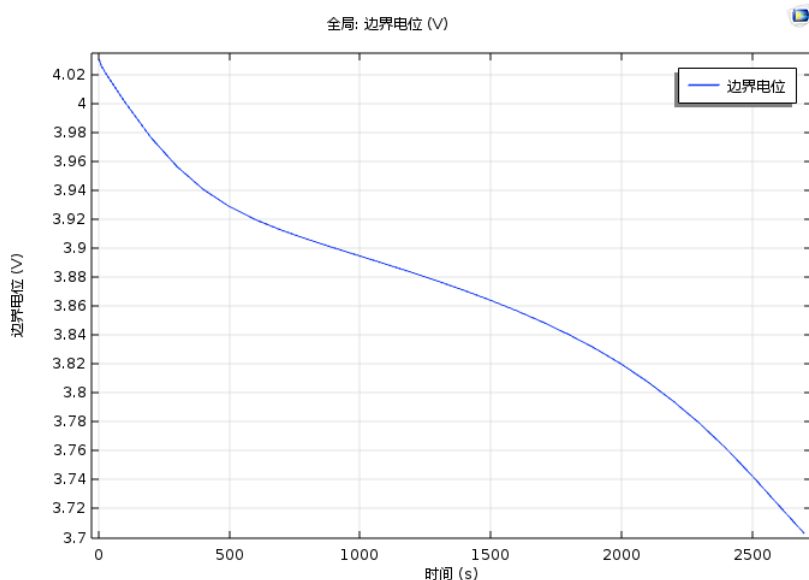
结果

边界电极电位 vs 接地 (liion)

默认情况下会根据设置的电极电流条件绘制电极电压。由于另一个电极接地，因此仿真过程中两个电极间即为电池电压。

- 1 在**模型开发器**窗口的**结果**下，单击**边界电极电位 vs 接地 (liion)**。

2 重命名绘图组，在**设置窗口**的**标签**文本框中输入**电池电压**，单击**绘图** 。



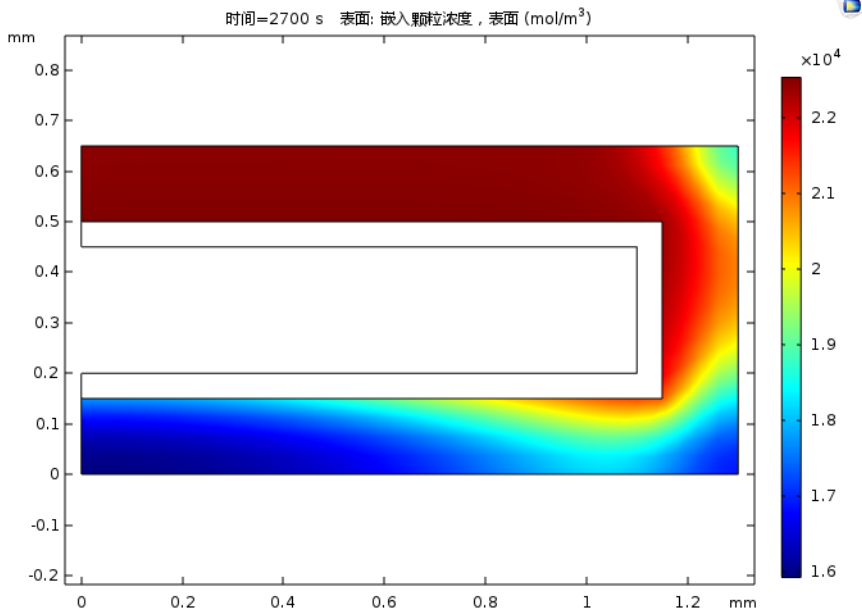
还可以浏览创建的其他默认绘图。对于二维绘图，您可以在**数据**栏选择要绘制的时间。

二维绘图组 8

接下来的步骤是创建 2700 秒之后电极颗粒表面的固态锂浓度分布图。

- 1 在**主屏幕**工具栏单击**添加绘图组** , 并选择**二维绘图组** 。
- 2 重命名该绘图组，方法是在**设置窗口**的**标签**文本框中键入**粒子表面的锂浓度**。
- 3 在**粒子表面的锂浓度**工具栏上单击**表面** 。
- 4 在**表面**设置窗口，单击**替换表达式**  (在表达式栏的右上角)，选择**插入粒子浓度**，**表面 (liion.cs_surface)**。在**二维绘图组**工具栏，单击**绘图**。
- 5 在**粒子表面的锂浓度**工具栏上单击**绘制** 。

6 在图形工具栏，单击**缩放到窗口大小**按钮 。



数据集

锂离子电池接口中通过使用额外维度可求解正多孔电极域中插入的固态锂浓度。要在粒子维度绘制这一浓度，需要先创建一个解数据集来表示额外维度，这一维度源自**多孔电极**节点。

- 1 在**结果**工具栏，单击**更多数据集** ，并选择**解** 。
- 2 在**解**的**设置**窗口，在**解**栏的**组件**列表中选择**额外维度来自多孔电极 1** (liion_pcel_pin1_xdim)。

一维绘图组 9

先对绘制阴极电极中的固态锂浓度进行设置。

- 1 在**结果**工具栏，单击**一维绘图组** 。
- 2 重命名该绘图组，在**设置**窗口的**标签**文本框中键入**正多孔电极粒子中的锂浓度**。
- 3 在**一维绘图组**的**设置**窗口，从**数据**栏的**数据集**列表中选择**无**。

4 在正多孔电极粒子中的锂浓度工具栏，单击线图 。

5 在线图的设置窗口中，在数据栏找到数据集列表，然后选择研究 1/ 解 1 (3)。

6 在时间选择列表中选择最后一个，绘制最后一个时间步长的解。

7 在选择栏的选择列表中选择所有域。

8 `atxd2()` 算子用于设置电池几何中 x 和 y 的坐标，以及绘制的变量。在 y -轴数据栏的表达式文本框中，键入 `comp1.atxd2(5e-4,1e-4,liion.cs_pce1)`。

9 在绘图中创建图例：

10 单击以展开图例栏，并选中显示图例复选框。

11 从图例列表中，选择手动，并在表格中输入 $x=0.5\text{ mm}$ ， $y=0.1\text{ mm}$ 。

12 右键单击线图 1 并选择生成副本，在正电极的其他位置绘制浓度。

13 在线图的设置窗口中，找到 y 轴数据栏。

14 在 y 轴数据栏的表达式文本框中键入 `comp1.atxd2(5e-4,5.5e-4,liion.cs_pce1)`。

15 单击以展开图例栏，将表中的文本替换为 $x=0.5\text{ mm}$ ， $y=0.55\text{ mm}$ 。

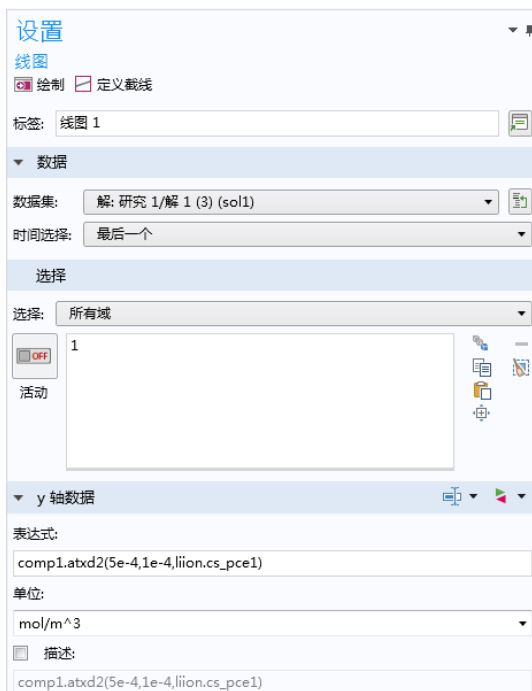
16 要完成绘图组，在模型开发器中单击正多孔电极粒子中的锂浓度工具栏  节点。

17 在一维绘图组的设置窗口中，单击展开标题栏，并从标题类型列表中选择手动。

18 在标题文本区域，输入正电极粒子中的锂浓度， $t=2700\text{ s}$ 。

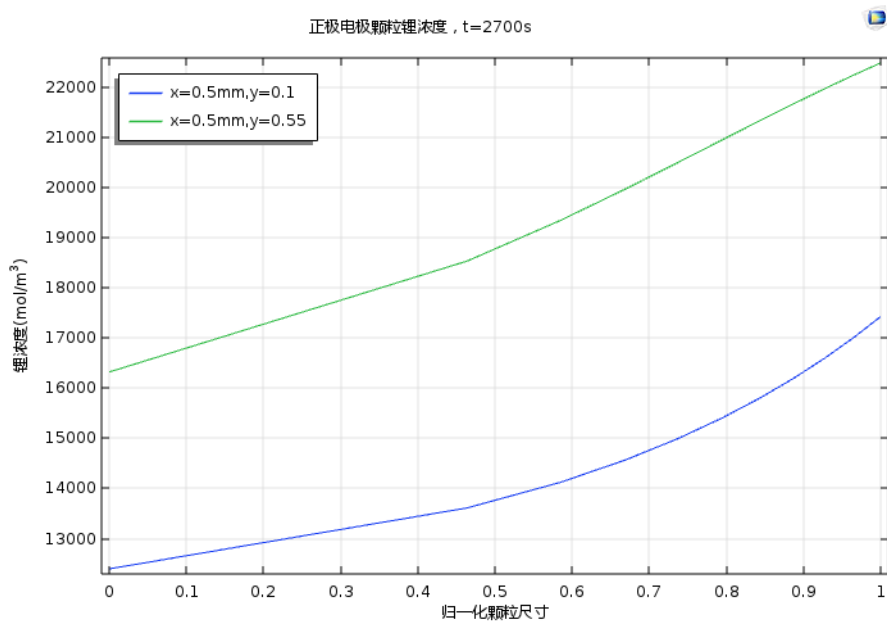
19 在绘图设置栏：

- 选中 x 轴标签复选框，并在关联的文本框中键入归一化的粒子维度。
- 选中 y 轴标签复选框，并键入锂浓度 (mol/m^3)。



20 单击展开图例栏，并在位置列表中选择左上。

21 在图形工具栏单击缩放至窗口大小  按钮，然后在正多孔电极粒子中的锂浓度工具栏上单击绘制 。



燃料电池阴极仿真教程

最重要也最难模拟的现象是通过燃料电池中气体扩散和反应层的质量传递。气体浓度通常很大，并受到所发生反应的显著影响，因此不适合使用 Fick 扩散假设对质量传递建模。

图 8 显示了具有穿孔集流体的燃料电池阴极的三维几何模型。这种模型常见于自呼吸式阴极或小型实验电池。由于穿孔结构，需要建立一个三维模型来研究质量传递，电流和反应分布。

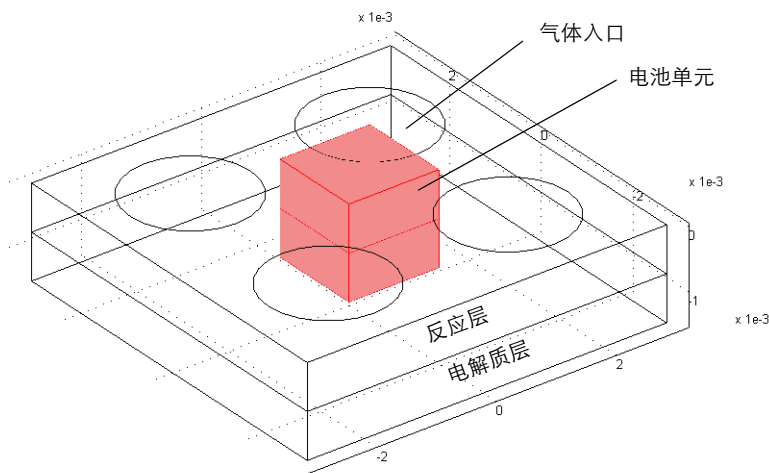


图 8: 具有穿孔集流体的燃料电池阴极

本模型研究如上图所示的几何结构，通过 Maxwell-Stefan 扩散形式考虑其中的质量传递，并与阴极反应项中的 Tafel 电动力学相耦合。

模型定义

图 9 显示了图 8 所示电池阴极中的一个电池单元。气体通过集流体中的圆孔进入建模域，气体的成分已知。上部的长方体域是反应区电极，是一个多孔结构，其中包含进料气体混合物、涂覆有电极催化剂的导电材料以及电解质。下部域为离子自由电解质，将燃料电池中的两个电极连接起来。在该域

没有发生任何反应，也没有气体流动的气孔或电子传导介质 — 电流通过离子形式传导。

反应区域厚度为 0.075mm，与电解质层厚度相同。单元表面尺寸为 1.5 mm x 1.5 mm，气体入口半径为 1.0 mm。

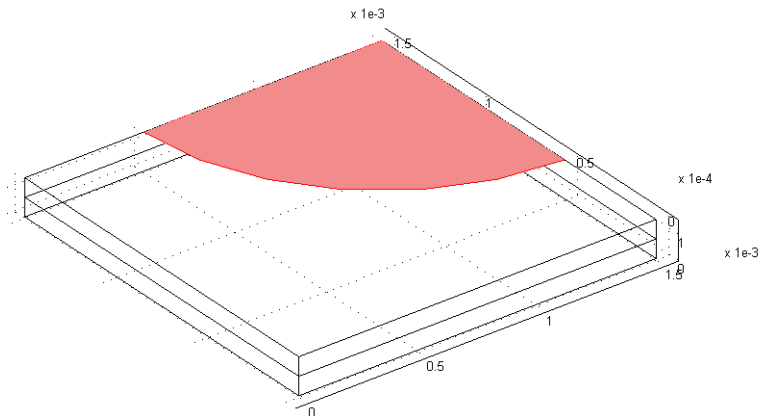


图 9：燃料电池阴极单元模型。红色标记区域为阴极气体进料口，上表面其余部分与集流体相接。在电池单元中，上部域为多孔阴极，底部域为自由电解质。

使用二次电流分布接口对电子和离子电流的平衡进行建模。

使用浓物质传递接口的 Maxwell-Stenfan 方程对氧气（物质 1）和水的物质（质量）传递进行建模。只需求解电极域中的质量传递。

使用**达西定律**接口来求解速度矢量。

结果与讨论

图 10 显示了总的电位降为 190mV 时建模域的氧气浓度。图中显示了对于这个相对较小的电流沿着阴极厚度方向浓度变化很小，而沿着电极宽度方向则要大很多。

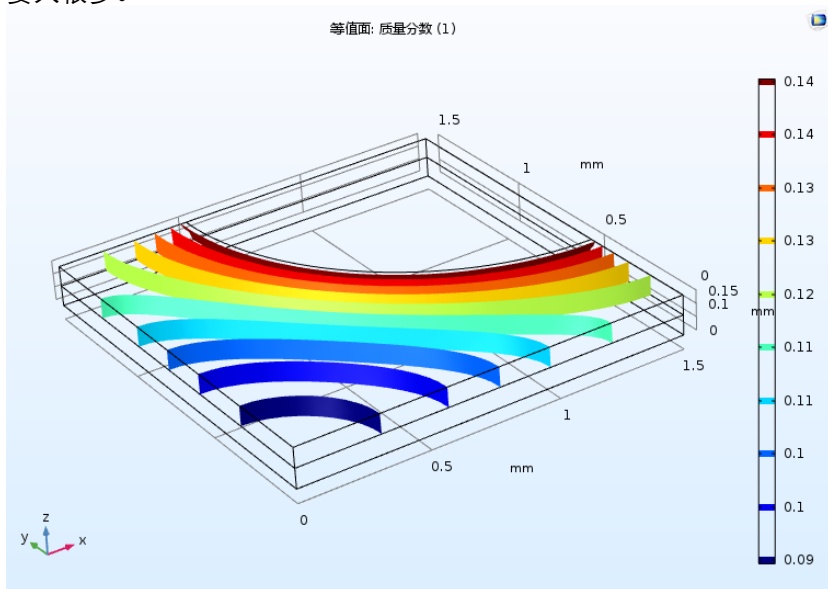


图 10: 总电位降为 190mV 时建模域的氧气质量分数等值面。

图 11 显示了多孔阴极中的气体速度，在进气口边缘具有非常明显的峰值。这是由集流体下的反应层引起的，因为在该区域质量传递主要受对流通量控制。因此，对速度场正确建模非常重要。在本例中，由于采用圆形进气口和方形电池单元的组合，因此不能使用旋转对称模型来简化几何

电化学反应速率以局部电流密度表示，与局部过电位和氧气浓度相关。图 12 显示了局部过电位，在整个阴极区域的变化很小。这是因为多孔材料具有很

高的导电率。还可以观察到最大的过电位值为 -180 mV ，这意味着电解质层中的电压损失为 10 mV 。

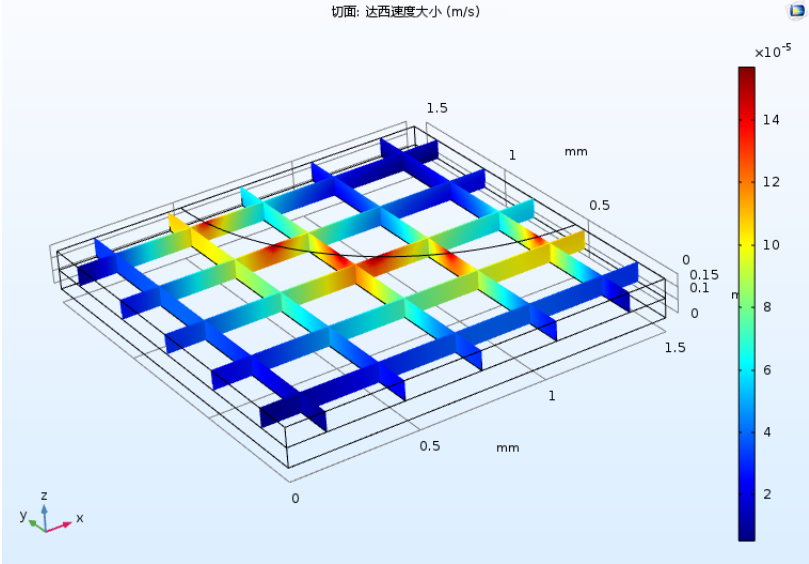


图 11: 阴极多孔反应层中的气相速度场。

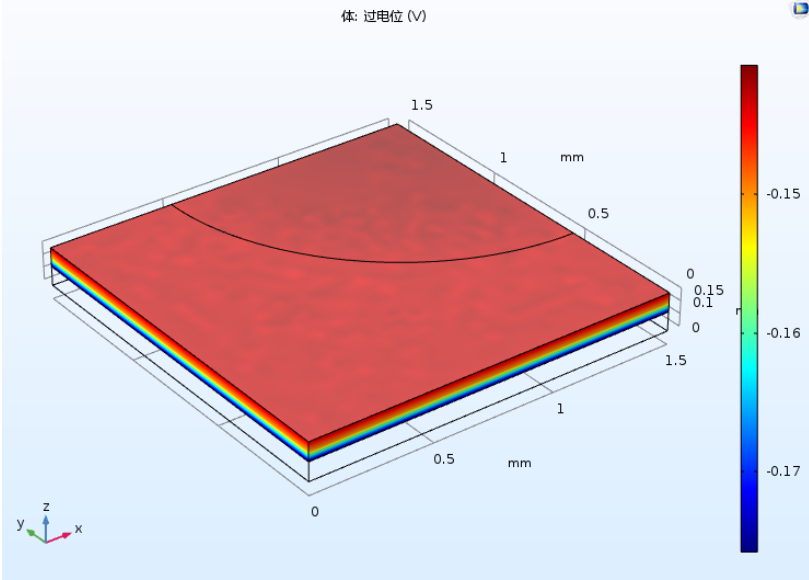


图 12: 阴极反应层的局部过电位。

尽管局部过电位的分布相对均匀，但氧气浓度却并非如此。这意味着在反应层中的反应速率并不均匀。研究反应速率分布的一种途径是绘制自由电解质底部边界的离子电流密度，如图 13 所示。

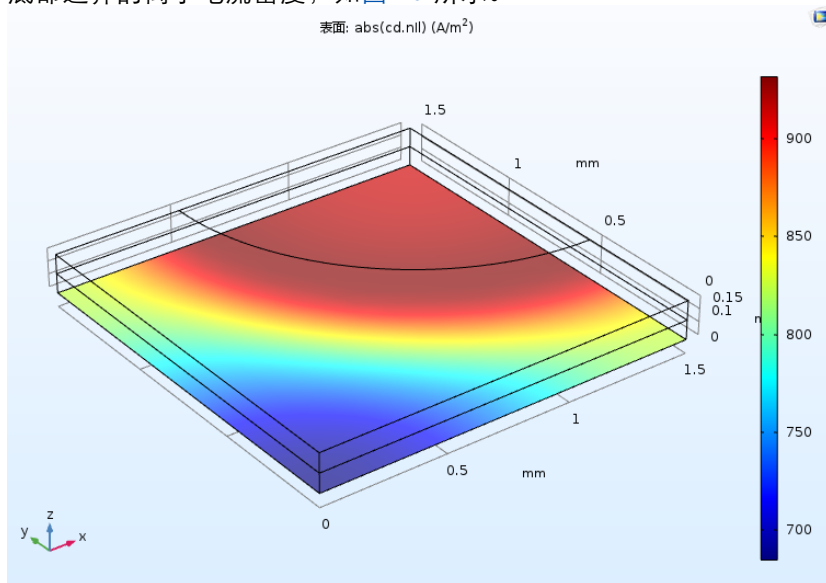


图 13: 底部自由电解质边界法向上的电流密度。

电流密度分布图显示了它的变化非常大。在进气口的下方，反应速率和电流密度较高，而在距离进气口较远的区域逐渐减小。这意味着在这些特定条件的设计下，反应物的质量传递决定了电极发电效率。

以下操作说明显示如何设置、求解和重现此模型。

模型向导

首先，添加**二次电流分布**接口和**稳态研究**，设置并求解电池的电流分布模型。随后，可以再添加更多的物理场以对质量传递和动量传递进行建模。

- 1 如果 COMSOL 已打开，可以从文件菜单中选择**新建** ，然后单击**模型向导**  来启动它。
- 2 在**选择空间维度**窗口中单击**三维** 。
- 3 在**选择物理场树**的**电化学 > 一次和二次电流分布**下，单击**二次电流分布 (cd)** 。
- 4 单击**添加按钮**，然后单击**研究**  按钮。
- 5 选择**预设研究 > 稳态** 。
- 6 单击**完成** 。

几何 1

现在，绘制模型几何。首先使用长方体定义电解质和多孔电极域，然后使用工作平面在多孔电极上绘制进气口。通过启用**创建选择**并重命名几何对象，可使之后的几何选择（设置物理场时）更加容易。

首先将默认长度单位设为毫米。

- 1 在**模型开发器**窗口的**组件 1**下，单击**几何 1** 。
- 2 在**几何**的**设置**窗口的**单位**栏，从**长度单位**列表中选择 **mm**。

创建第一个长方体

- 1 在**几何**工具栏单击**长方体** 。



- 2 在**模型开发器**窗口的**几何 1**下单击**长方体 1** 。

3 在长方体的设置窗口中找到大小栏。

- 在宽度文本框中输入 1.5。
- 在深度文本框中输入 1.5。
- 在高度文本框中输入 0.075。

4 找到结果实体的选择栏。选中产生的对象选择复选框。从在物理场中显示，选择域选择。这使几何在稍后设置物理场时可被选为域（与显式类似）。

5 右键单击长方体 1 并选择重命名（或按 F2）。

6 在重命名长方体对话框的新标签文本框中键入电解质。单击确定。

7 单击构建选定对象按钮 .

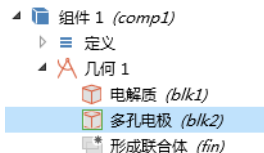
复制长方体并更改 z 位置

1 右键单击电解质 ，并选择生成副本 .

2 在长方体的设置窗口中找到位置栏。在 z 文本框中，键入 0.075。

3 单击电解质 1 节点 ，并按 F2 键。

- 4 转至**重命名长方体**对话框，并在**新标签**文本框中键入**多孔电极**。单击**确定**。



创建工作平面，绘制入口孔

- 1 在**几何**工具栏上单击**工作平面** 。



- 2 在**模型开发器**窗口中单击**工作平面 1** 。
- 3 在**工作平面**的**设置**窗口中，找到**面定义**栏。在 **z-** 坐标框中键入 **0.15**。
- 4 找到**结果**实体的选择栏。选中**产生的对象****选择**复选框。从在**物理场**中显示**选择边界**选择。这使几何在稍后设置物理场时可被选作边界（与**显式**类似）。
- 5 右键单击**工作平面 1** ，并选择**重命名**（或单击节点并按 F2）。
- 6 在**重命名工作平面**对话框的**新标签**文本中键入**进口**。单击**确定**。

绘制入口孔

- 1 在**模型开发器**窗口的**几何 1**> **入口**下，右键单击**平面几何**，并选择**圆** 。



2 在圆的设置窗口中，找到大小与形状栏。

- 在半径文本框中键入 1。
- 在扇形角文本框中键入 90。

3 找到位置栏：

- 在 xw 文本框中键入 1.5。
- 在 yw 文本框中键入 1.5。

4 找到旋转角栏。在旋转文本框中键入 180。

5 单击构建选定对象按钮 。



设置

 构建选定对象 ▾  全部构建

标签: 圆 1 

▼ 对象类型

类型: 实体 ▾

▼ 大小和形状

半径: 1 mm

扇形角: 90 deg

▼ 位置

基: 居中 ▾

xw: 1.5 mm

yw: 1.5 mm

▼ 旋转角度

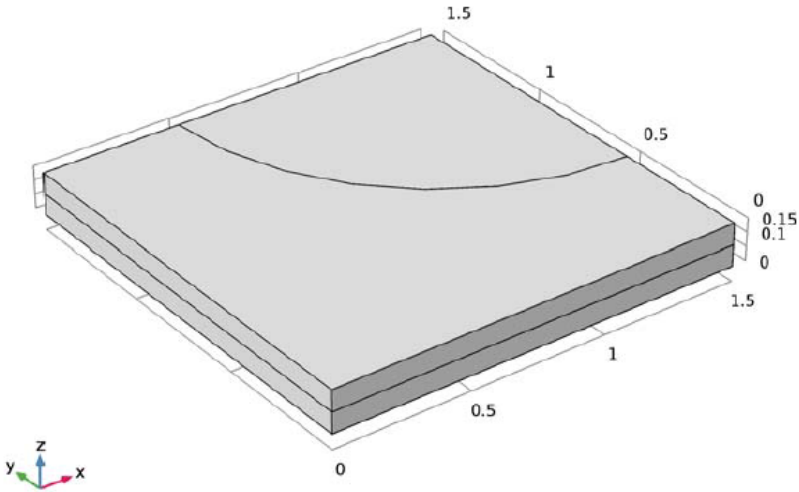
旋转: 180 deg

形成组合体以完成几何建模

1 在模型开发器窗口中，单击形成联合体节点 ，然后单击构建选定对象按钮 。

2 单击图形工具栏上的缩放到窗口大小按钮 。

完成的几何应如下图所示：



全局定义

从文本文件加载模型参数和变量。

参数

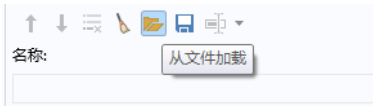
1 在主屏幕工具栏上单击参数 P_i 。



注意：在 Linux 和 Mac 下，主屏幕工具栏是指 Desktop 顶部附近的一组特定控件。

2 在模型开发器窗口的全局定义下，单击参数 P_i 。

3 在参数的设置窗口找到参数栏。单击从文件加载 。



4 在案例库文件夹 applications\Batteries_and_Fuel_Cells_Module\Fuel_Cells中, 双击文件 fuel_cell_cathode_parameters.txt 以导入参数。注意, 文件位置取决于 COMSOL Multiphysics 的安装。例如, 如果安装在硬盘上, 则文件的位置可能如下:

C:\Program Files\COMSOL53a\applications\.

选择

现在, 手动添加底部电解质和上部集流体边界的选择。

1 在定义工具栏的选择栏中, 单击显式 。



2 在模型开发器窗口中的组件 1 > 定义下, 单击显示 1 。

3 在显式的设置窗口中找到输入实体栏。从几何实体层列表中选择边界。

4 仅选择边界 3。

5 单击显式 1  并按 F2 键。

6 在重命名显式对话框的新标签文本框中键入电解质边界。
单击确定。

以相同的方式添加关于集流体的选择。

1 在定义工具栏中的选择栏单击显式 。

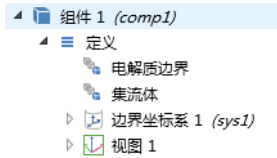
2 在模型开发器窗口中单击显式 2 。

3 在显式的设置窗口找到输入实体栏, 从几何实体层列表中选择边界。

4 仅选择边界 7, 例如通过使用粘贴选择 。

5 单击显式 2  并按 F2 键。

- 6 在**重命名显式**对话框的**新标签**文本框中键入**集流器**。
单击**确定**。



二次电流分布

现在开始定义电流分布模型的物理场接口。添加一个多孔电极并指定电极反应参数，然后分别为电解质和电极相添加电位边界节点。注意，在默认情况下，软件已自动添加电解质节点。

多孔电极 1

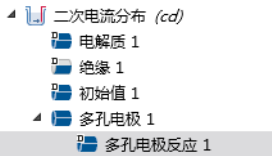
- 1 在**物理场**工具栏上单击**域** ，并选择**多孔电极** 。
- 2 在**模型开发器**窗口的**二次电流分布**下，单击**多孔电极 1** 。
- 保持节点中关于电导率的默认材料设置（稍后指定**材料**节点）。

- 3 在**多孔电极**的设置窗口中找到**域选择**栏，并选择**多孔电极**。
- 4 从**有效传导系数**列表中，在**电解质电流传导**和**电极电流传导**栏中均选择**无修正**。



多孔电极反应 1

- 1 在**模型开发器**窗口中，展开**多孔电极 1**节点，并单击**多孔电极反应 1** 。
- 2 在**多孔电极反应**的设置窗口中，找到**模型输入**栏，在 **T** 编辑框输入 **T**。



3 找到电极动力学栏。

- 从动力学表达式类型列表中选择 **Butler-Volmer**。

- 在 i_0 文本框中键入 i_0 。

4 在活性表面积栏的活性表面积 a_v 文本框中键入 S 。

电解质电势 1

1 在物理场工具栏上，单击边界 ，并选择电解质电位 。

2 在模型开发器的二次电流分布下，单击电解质电位 1 。

3 在边界选择栏，从选择列表中选择电解质边界。

▼ 电极动力学

动力学表达式类型:
Butler-Volmer

交换电流密度:
 i_0 A/m²

阳极传递系数:
 α_a 1

阴极传递系数:
 α_c 1

$$i_{loc} = i_0 \left(\exp\left(\frac{\alpha_a F \eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c F \eta}{RT}\right) \right)$$

☐ 极限电流密度

▼ 活性比表面积

活性比表面积:
用户定义

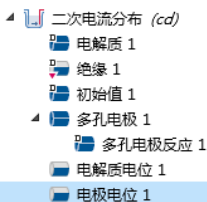
a_v 1/m

$i_v = a_v i_{loc}$

电势 1

1 在物理场工具栏单击边界 ，并选择电势 。

2 在模型开发器窗口的二次电流分布下单击电势 1 。



3 在电势的设置窗口中，找到边界选择栏，从选择列表中选择集流体。

4 找到电势栏，在 $\phi_{s,bnd}$ 文本框中键入 E_{pol} 。

初始值 1

还需指定电势的初始值，这能有效地减少求解时间。

1 在模型开发器窗口的组件 1 > 二次电流分布 (sicc) 下，单击初始值 1 。

2 在初始值的设置窗口找到初始值栏。在 ϕ_{his} 文本框中键入 E_{pol} 。

材料

材料节点标记为红色，这表示在模型中缺少材料参数。为电解质和多孔电极分别定义两个不同的材料节点，并指定电导率。

材料 1（电解质）

- 1 在模型开发器中，右键单击材料 ，并单击空材料 .
- 2 在材料的设置窗口中找到几何实体选择栏。从几何实体层选择域。从选择列表中选择电解质。
- 3 找到材料属性目录栏。在表中输入以下设置：

属性	名称	值
电解质电导率	sigmal	5[S/m]

材料 2（多孔电极）

- 1 在主屏幕工具栏上单击材料 .
- 2 在材料的设置窗口中找到几何实体选择栏。从选择列表中选择多孔电极。
- 3 找到材料属性明细栏。在表中输入以下设置：

属性	名称	值
电解质电导率	sigmal	1[S/m]
电导率	sigma	sigma_s

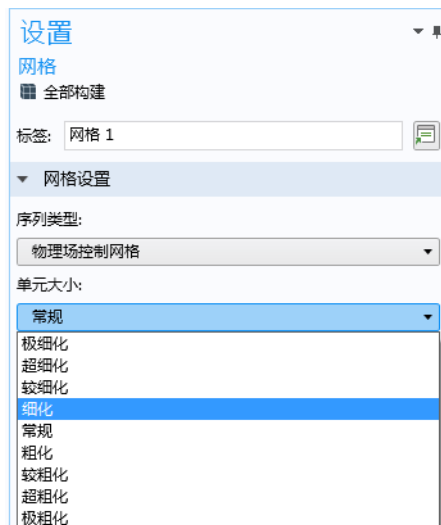
注意：可以在表中直接键入值或使用参数节点下定义的参数来提供电导率。

网格 1

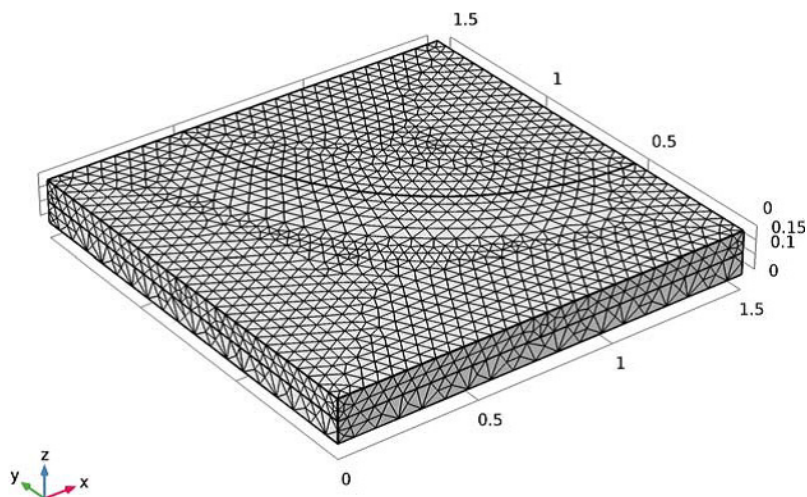
使用默认的物理场控制网格序列，但单元大小需要更细化。

- 1 在模型开发器中单击网格 1 .
- 2 在网格的设置窗口中找到网格设置栏。从单元大小列表中选择细化。

3 单击全部构建按钮 。



完成的网格应如下图所示：



研究 1

电流分布模型已准备好进行求解。

- 1 在**主屏幕**工具栏上单击**计算** 。

结果

默认会创建**电解质电位图**。现在，通过添加一个体图来表示局部过电位。

三维绘图组 5

- 1 在**主屏幕**工具栏中单击**添加绘图组** ，并选择**三维绘图组** 。

- 2 在**三维绘图组 5** 工具栏上单击**体** 。

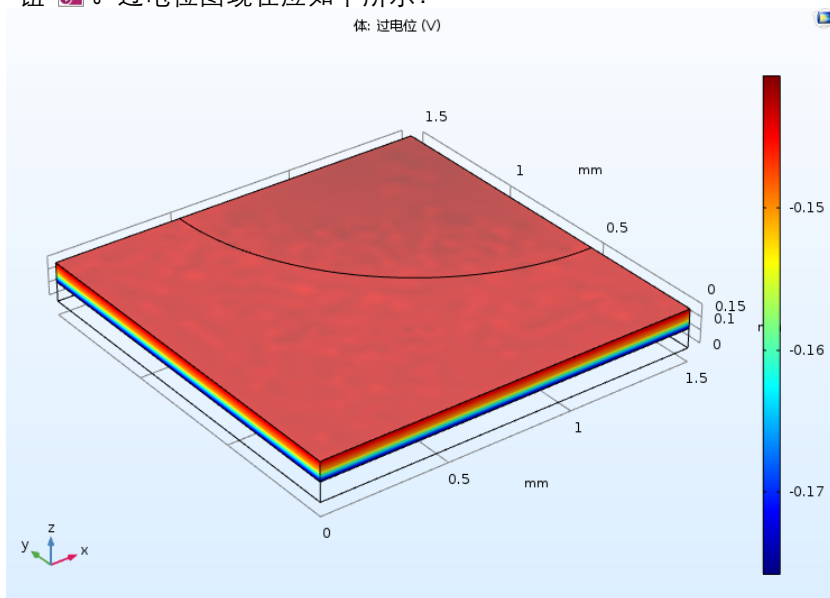


- 3 单击**体 1** 。



- 4 在**体**的设置窗口中，单击**替换表达式**  (在表达式栏的右上角)，选择**二次电流分布 > 电极动力学 > 过电位 (cd.eta_per1)**。

- 5 在**三维绘图组**上，滚动到**颜色图例**并从**位置**菜单中选择**右**。单击**绘制**按钮 。过电位图现在应如下所示：



- 6 在**模型开发器**窗口中，右键单击**三维绘图组 5** ，并选择**重命名**。
- 7 在**重命名三维绘图组**对话框的**新标签**文本框中键入**局部过电位**。单击**确定**。

三维绘图组 6

- 1 在**主屏幕**工具栏上单击**添加绘图组** ，并选择**三维绘图组** 。
- 2 单击**三维绘图组 6** 。



- 3 在**三维绘图组 6** 工具栏上，单击**表面** 。

- 4 在**表面**的设置窗口中单击**替换表达式** ，并选择**法向电解质电流密度 (cd.nI1)**。

可以使用算子修改任意后处理变量。在本例中，使用 `abs()` 函数绘制电流密度绝对值图。

- 5 找到**表达式**栏。在表达式文本框中键入 `abs(cd.nI1)`。

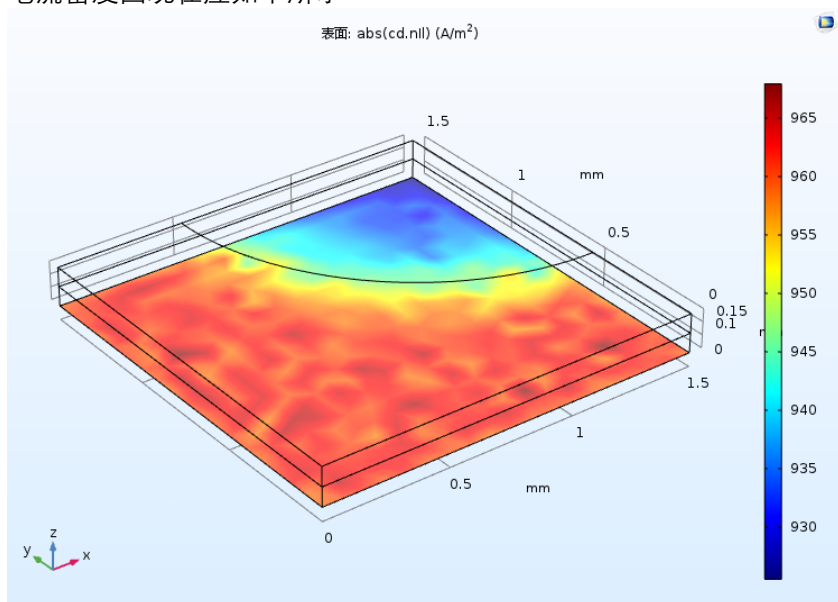
选择 1

- 1 右键单击**结果 > 三维绘图组 6 > 表面 1**并选中**选择**。

- 2 仅选择**边界 3**。

- 3 在**三维绘图组**工具栏上单击**绘制** 。

电流密度图现在应如下所示：



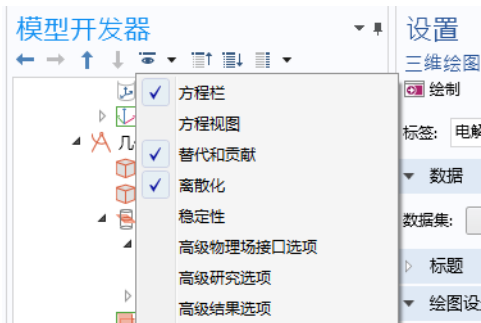
- 4 单击**三维绘图组 6** ，并按 F2。

- 5 在**重命名三维绘图组**对话框的**新标签**文本框中键入**电解质电流密度**。单击**确定**。

更改单元阶次并重新计算

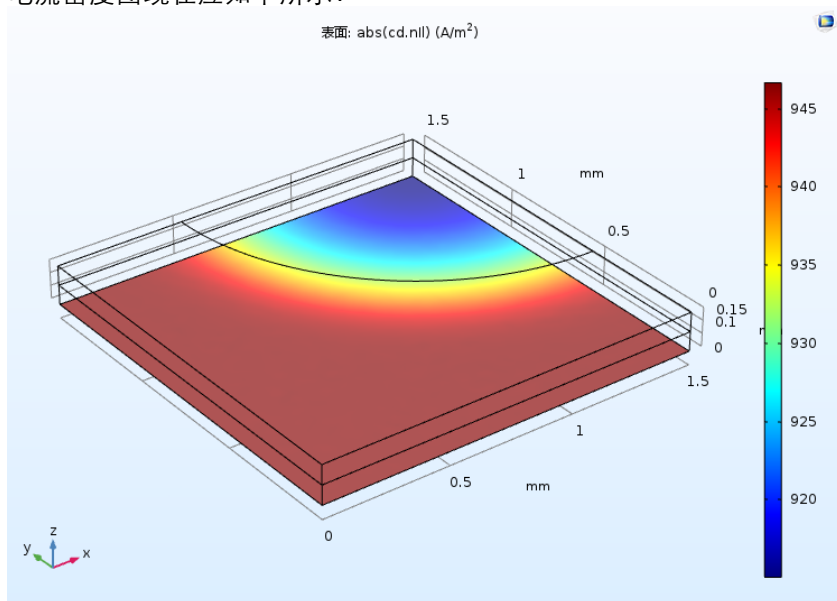
现在，更改为有限元离散化过程中的二阶单元。这会提高解的精度，并渲染更为平滑的绘图（此外，也可以增加网络的解析度）。

- 1 在**模型开发器**窗口的工具栏中，单击**显示**  按钮，并选择**离散化**。



- 2 在**二次电流分布**的**设置**窗口中，单击展开**离散化**栏。
- 3 从**电解质电位**列表中选择**二次**。
- 4 在**电势**列表中选择**二次**。
- 5 在主屏幕工具栏上单击**计算**  。

电流密度图现在应如下所示：



在模型中添加质量传递和流体流动物理场特征

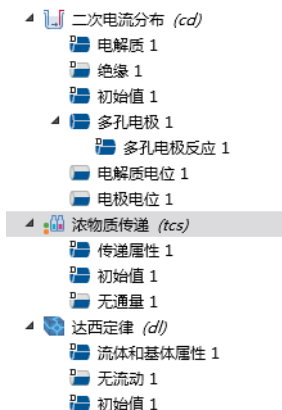
接下来，在模型中添加**浓物质传递**接口描述气相质量传递，以及**达西定律**接口描述流体流动。

- 1 在主屏幕工具栏上单击**添加物理场** .
- 2 转至**添加物理场**窗口，在**添加物理场树**的**化学物质传递**下，单击**浓物质传递 (chcs)** .
- 3 单击展开**因变量**栏，在**物质数**文本框中键入 3。在**质量分数**表中，输入 w_{n2} 、 w_{o2} 及 w_{h2o} 。
- 4 在**添加物理场**窗口单击**添加到组件** .
- 5 再次转至**添加物理场**窗口。在**物理场树**的**流体流动** > **多孔介质和地下水**流下，单击**达西定律 (dl)** .
- 6 在**添加物理场**窗口中单击**添加到组件** .

浓物质传递

接下来定义氮、氧和水的质量传递。

1 在模型开发器中，单击浓物质传递 。



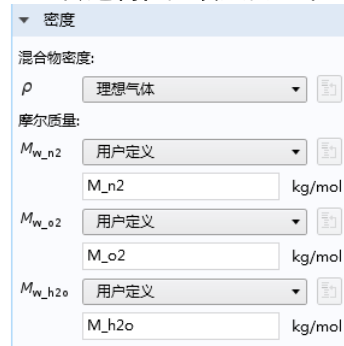
2 找到域选择栏。从选择列表中选择多孔电极。

3 找到传递机理栏。从扩散模型列表中选择 Maxwell-Stefan 模型。

传递属性 1

1 在模型开发器中展开浓物质传递节点，然后单击传递属性 1 。

2 在传递属性的设置窗口中找到密度栏。



- 在 $M_{w,n2}$ 文本框中键入 M_n2。
- 在 $M_{w,o2}$ 文本框中键入 M_o2。
- 在 $M_{w,h2o}$ 文本框中键入 M_h2o。

3 找到**扩散**栏。在 D_{ik} 表中输入以下设置：

1	D_o2n2_eff	D_n2h2o_eff
D_o2n2_eff	1	D_o2h2o_eff
D_n2h2o_eff	D_o2h2o_eff	1

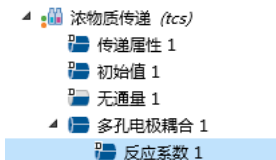
4 速度和压力场都与达西定律接口相耦合。稍后我们将使用**流动耦合**多物理场特征实现。找到**模型输入**栏。

- 定位到**模型输入**栏。在温度 T 文本框中键入 T 。
- 定位到**对流**栏。从 u 列表中选择**达西速度场 (dl/dlm1)**。
- 在**模型开发器**窗口，单击**浓物质传递 (tcs)**。
- 在**浓物质传递 (tcs)** 的设置窗口，定位到**传输机理**栏。
- 选中**多孔介质的质量传递**复选框。

将氧气反应速率与电化学电流耦合

使用多孔电极耦合创建域质量汇项，对应于电化学反应中减少的氧气。

- 1 在**物理场**工具栏上单击**域** ，并选择**多孔电极耦合** 。
- 2 单击**多孔电极耦合 1** 。
- 3 在**多孔电极耦合**的设置窗口中，找到**域选择**栏。从**选择**列表中选择**多孔电极**。
- 4 展开**多孔电极耦合**节点，并单击**反应系数 1** 。



- 5 在**反应系数**的设置窗口中，找到**模型输入**栏。从 i_p 中选择**局部电流源，多孔电极反应 1 (cd/pce1/per1)**。

6 找到化学当量系数栏。

- 在 n 文本框中键入 4。
- 在 V_{w_o2} 文本框中键入 -1。

定义初始值节点

1 单击**初始值 1** 节点 。

2 在**设置**窗口的**初始值**栏下，在 $w0,wo2$ 框中输入质量分数值 w_o2_ref ，在 $w0,wh2o$ 框中输入 w_h2o_ref 。

定义流入节点

1 在**物理场**工具栏上单击**边界** ，并选择**流入** 。

2 在**模型开发器**窗口下单击**流入 1** 。

3 在**流入**的**设置**窗口中找到**边界选择**栏。从**选择**列表中选择入口。

4 找到**流入**栏。

- 在 $w0,wo2$ 文本框中键入 w_o2_ref 。
- 在 $w0,wh2o$ 文本框中键入 w_h2o_ref 。

达西定律

接下来，设置**达西定律**物理场接口，同样这里也要考虑电化学反应中氧消耗所形成的质量汇项。

1 在**模型开发器**窗口中单击**达西定律** 。



2 在**达西定律**的**设置**窗口中找到**域选择**栏。从**选择**列表中选择**多孔电极**。

3 找到**物理模型**栏。在 **p_{ref}** 文本框中键入 **p_{atm}**。

定义流体和基体属性

1 展开**达西定律 (dl)** 节点 ，然后单击**流体和基体属性 1**。

2 找到**流体属性**栏。

- 从 ρ 列表中选择**密度 (tcs/cdml)**。(密度来自**浓物质传递**接口)。
- 从 μ 列表中选择**用户定义**。在关联文本框中键入 **mu**。

3 找到**基体属性**栏。

- 从 ε_p 列表中选择**用户定义**。在关联文本框中键入 **e_{por}**。
- 在 κ 列表中选择**用户定义**。在关联文本框中键入 **perm**。

多孔电极耦合 1

1 在**物理场**工具栏上单击**域** ，并选择**多孔电极耦合 1** 。

2 在**达西定律**下，单击**多孔电极耦合 1** 。

3 找到**域选择**栏，并从**选择**列表中选择**多孔电极**。

4 找到**物质**栏。单击两次**添加**。

5 在**物质**表中输入以下设置：

物质	摩尔质量 (KG/MOL)
1	M _{n2}
2	M _{o2}
3	M _{h2o}

反应系数 1

1 在**模型开发器**窗口中展开**多孔电极耦合 1**节点，然后单击**反应系数 1** .



2 在**模型输入**栏，从耦合反应的 i_p 列表中选择**局部电流源**，多孔电极反应 (cd/pcel/per1)。

3 在**化学当量系数**栏的**参与电子数 n** 框中输入 4，在 2 框中输入 -1。

入口 1

1 在**物理场**工具栏上单击**边界** ，并选择**入口** .

2 在**模型开发器**窗口中单击**入口 1** .

3 在入口的**设置**窗口中找到**边界选择**栏。从**选择**列表中选择**入口**。

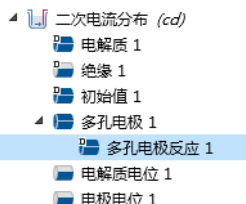
4 找到入口栏。在 U_0 文本框中键入 $-p \cdot \text{perm} / \mu / 1 [\text{mm}]$ 。

二次电流分布

通过将多孔电极反应电流密度修改为取决于氧气浓度，来完成物理场接口的设置。

浓度相关的电极反应

1 在模型开发器窗口的组件 1 > 二次电流分布 > 多孔电极 1 下，单击多孔电极反应 1 。



2 在多孔电极反应的设置窗口中，找到电极动力学栏。从动力学表达式类型列表中选择浓度依赖动力学。

3 在 C_O 文本框中键入 $chcs.c_w_o2/c_o2_ref$ ($chcs.c_w_o2$ 为摩尔浓度变量，由浓物质传递接口定义)。

多物理场耦合

最后，设置流动耦合。

流动耦合 1

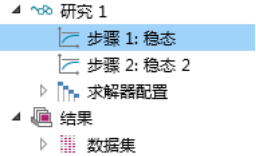
在物理场工具栏上，单击多物理场耦合  并选择全局 > 流动耦合 。

添加新研究并重新计算

添加另一个研究步骤来求解所有物理场接口。修改第一个研究步骤使其只求解二次电流分布接口（尽管就本简单案例而言没有必要，但先求解电位，然后再求解整个问题，对于复杂物理场的求解非常有利）。

步骤 1: 稳态

- 1 在研究工具栏中，单击研究步骤 ，并选择稳态 。
- 2 在模型开发器窗口的研究 1 下，单击步骤 1：稳态。



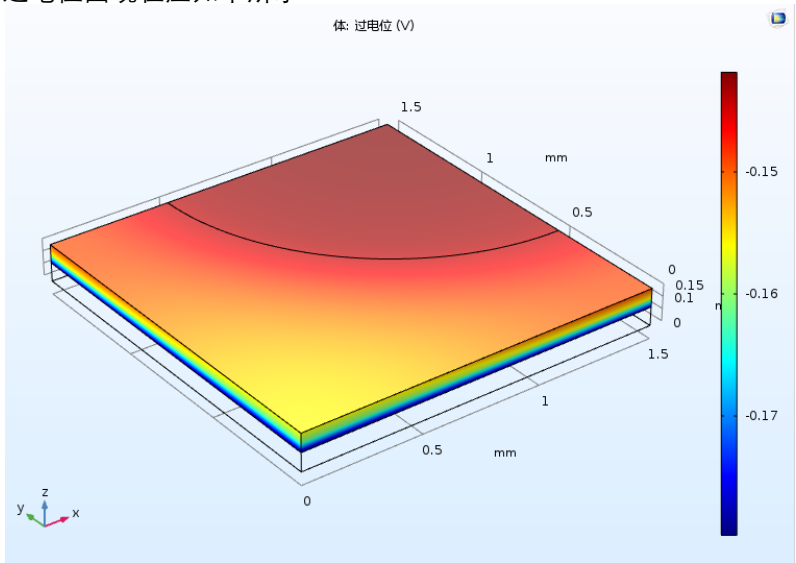
- 3 在稳态的设置窗口中，找到物理场和变量选择栏。
- 4 在表中输入以下设置：

物理场接口	求解
二次电流分布	
浓物质传递	×
达西定律	×

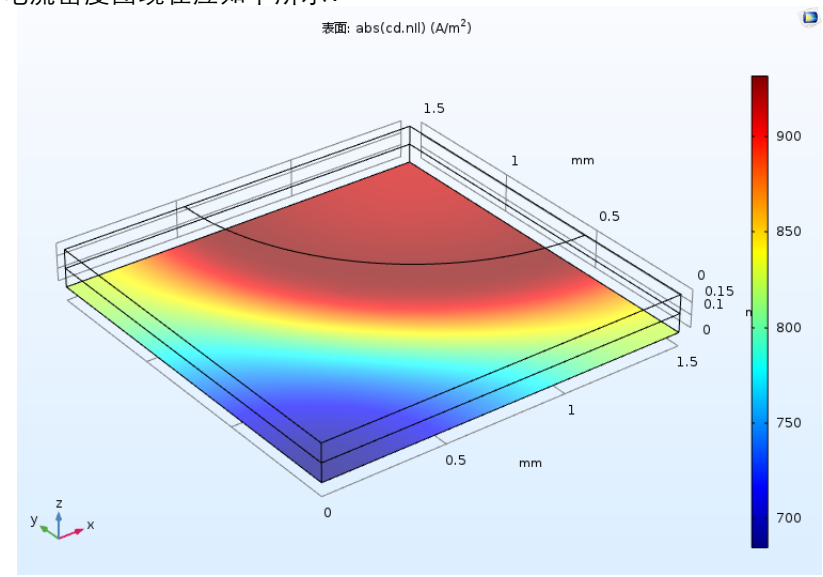
- 5 在主屏幕工具栏上，单击计算 。

浓度相关问题的结果

过电位图现在应如下所示：



电流密度图现在应如下所示：

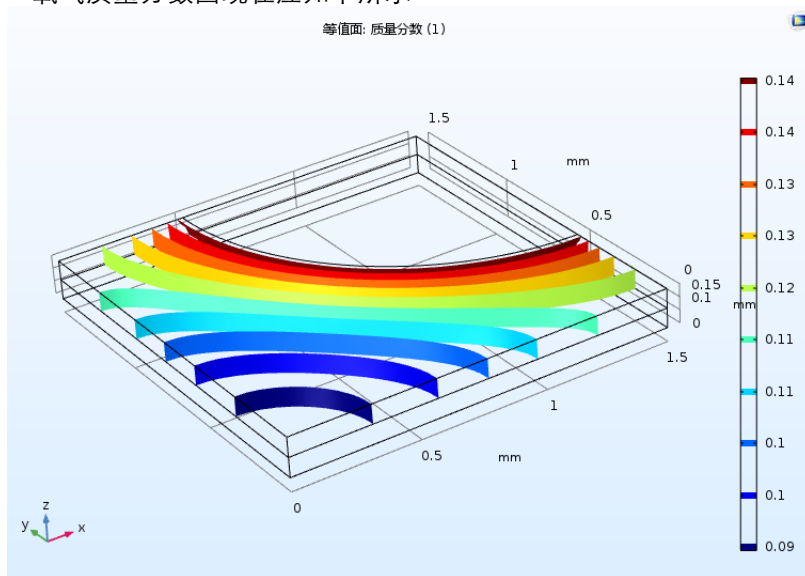


等值面 1

按如下步骤创建氧气质量分数图：

- 1 在主屏幕工具栏上单击添加绘图组 ，并选择三维绘图组 。
- 2 在三维绘图组 7 工具栏上单击等值面 。
- 3 在等值面的设置窗口中，单击表达式栏右上角的替换表达式 ，并选择质量分数 (w_o2)。在级别栏的总级别文本框中键入 10。
- 4 在三维绘图组工具栏上单击绘制 。

氧气质量分数图现在应如下所示：



- 5 右键单击三维绘图组 7 ，并选择重命名。
- 6 在重命名三维绘图组对话框的新标签文本框中键入氧气质量分数。单击确定。

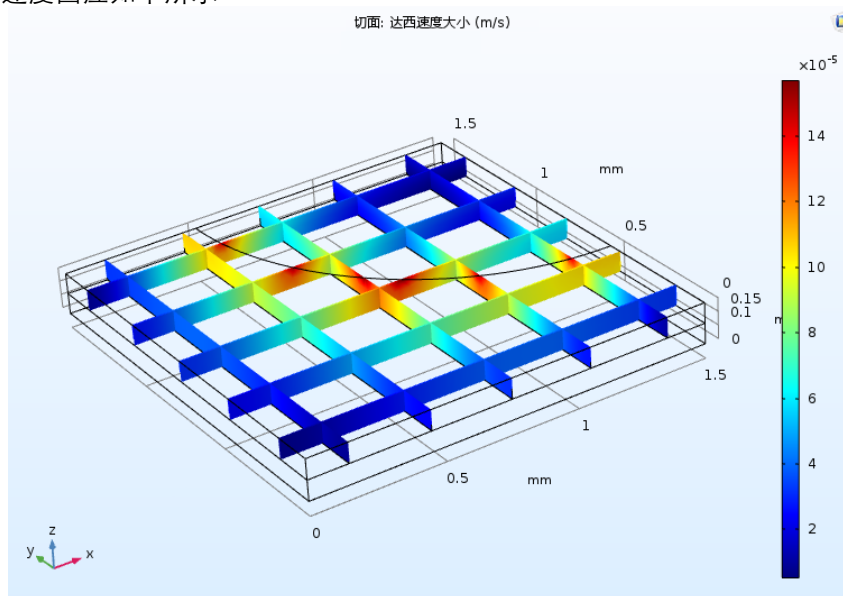
切面图 1

按如下步骤创建气体速度场图：

- 1 在主屏幕工具栏，单击添加绘图组 ，并选择三维绘图组 。
- 2 在三维绘图组 8 工具栏，单击切面 。

- 3 在切面的设置窗口中单击**替换表达式** ，并选择 **Darcy 速度场模 (dl.U)**。
- 4 右键单击**切面 1** ，并选择**生成副本** 。
- 5 在切面的设置窗口中找到**平面数据**栏。从平面列表中选择 **zx- 平面**。
- 6 单击展开**继承样式**栏。从绘图列表中选择**切面 1**。
- 7 在**三维绘图组**工具栏上单击**绘制** 。

速度图应如下所示：



- 8 右键单击**三维绘图组 8** ，并按 F2 键。
- 9 在**重命名三维绘图组**对话框的**新标签**文本框中键入**速度大小**。单击**确定**。