

Üzemanyagcellák modellezése

Izsák Ferenc
ELTE TTK Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai
Tanszék

Tanári Klub, ELTE TTK
2011. november 23.

Mik ezek?

- ▶ Üzemanyagcella = kémiai energia $\rightleftharpoons$ elektromos energia

Mik ezek?

- ▶ Üzemanyagcella = kémiai energia $\rightleftharpoons$ elektromos energia
- ▶ Gyakorlatban:

Mik ezek?

- ▶ Üzemanyagcella = kémiai energia $\rightleftharpoons$ elektromos energia
- ▶ Gyakorlatban:
 - ▶ Üzemanyagcella = hidrogén $\rightleftharpoons$ elektromos energia

Mik ezek?

- ▶ Üzemanyagcella = kémiai energia $\rightleftharpoons$ elektromos energia
- ▶ Gyakorlatban:
 - ▶ Üzemanyagcella = hidrogén $\rightleftharpoons$ elektromos energia
 - ▶ Üzemanyagcella = metanol $\rightleftharpoons$ elektromos energia

Mik ezek?

- ▶ Üzemanyagcella = kémiai energia $\rightleftharpoons$ elektromos energia
- ▶ Gyakorlatban:
 - ▶ Üzemanyagcella = hidrogén $\rightleftharpoons$ elektromos energia
 - ▶ Üzemanyagcella = metanol $\rightleftharpoons$ elektromos energia
- ▶ Lényeges mindkét irány

Mire/hol használhatók?

- ▶ Közlekedési eszközökben:

Mire/hol használhatók?

- Közlekedési eszközökben:



Mire/hol használhatók? (folyt.)

- ▶ További Közlekedési eszközökben:

Mire/hol használhatók? (folyt.)

- További Közlekedési eszközökben:



Mire/hol használhatók? (folyt.)

- ▶ Energiatároló egységekben:

Mire/hol használhatók? (folyt.)

- ▶ Energiatároló egységekben:



Előnyök és hátrányok

- + A kapott energiahordozók ártalmatlanok.

Előnyök és hátrányok

- + A kapott energiahordozók ártalmatlanok.
- + Az energiaátalakítás nem jár semmilyen károsanyagkibocsátással.

Előnyök és hátrányok

- + A kapott energiahordozók ártalmatlanok.
- + Az energiaátalakítás nem jár semmilyen károsanyagkibocsátással.
- Drága előállítás.

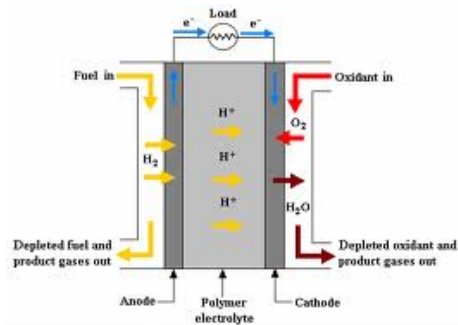
Előnyök és hátrányok

- + A kapott energiahordozók ártalmatlanok.
- + Az energiaátalakítás nem jár semmilyen károsanyagkibocsátással.
 - Drága előállítás.
 - Érzékenység a működés során (hőmérséklet, páratartalom).

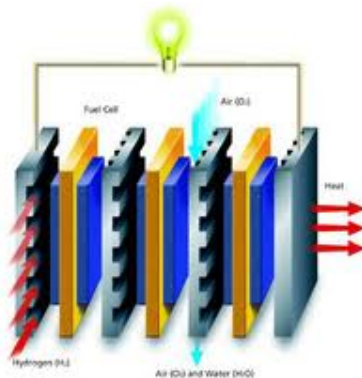
Előnyök és hátrányok

- + A kapott energiahordozók ártalmatlanok.
- + Az energiaátalakítás nem jár semmilyen károsanyagkibocsátással.
 - Drága előállítás.
 - Érzékenység a működés során (hőmérséklet, páratartalom).
 - Kis teljesítmény.

A működés vázlata I.



A működés vázlata II.



Valós paraméterek

- ▶ a protonvezető membrán vastagsága: 100-500 μm ,

Valós paraméterek

- ▶ a protonvezető membrán vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ a katalizátorrétegek vastagsága: 20-40 μm ,

Valós paraméterek

- ▶ a protonvezető membrán vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ a katalizátorrétegek vastagsága: 20-40 μm ,
- ▶ anód, katód vastagsága: 100-500 μm ,

Valós paraméterek

- ▶ a protonvezető membrán vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ a katalizátorrétegek vastagsága: 20-40 μm ,
- ▶ anód, katód vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ az egész cella vastagsága: néhány mm,

Valós paraméterek

- ▶ a protonvezető membrán vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ a katalizátorrétegek vastagsága: 20-40 μm ,
- ▶ anód, katód vastagsága: 100-500 μm ,
- ▶ az egész cella vastagsága: néhány mm,
- ▶ „nyugalmi” potenciál az elektródok közt: 0.9 V.

Lényeges tulajdonságok, mennyiségek

- ▶ A membrán szerkezete.

Lényeges tulajdonságok, mennyiségek

- ▶ A membrán szerkezete.
 - ▶ Részecskénagyság/sűrűség a szilárd fázisban

Lényeges tulajdonságok, mennyiségek

- ▶ A membrán szerkezete.
 - ▶ Részecskeméret/sűrűség a szilárd fázisban
- ▶ A pára és víz mennyisége.

Lényeges tulajdonságok, mennyiségek

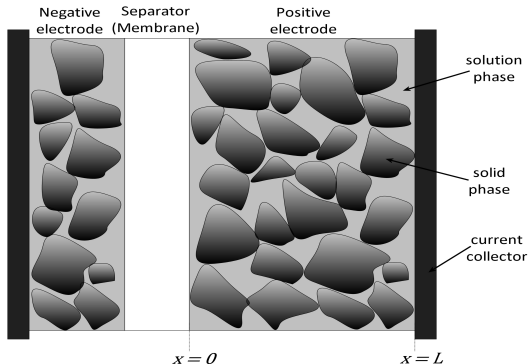
- ▶ A membrán szerkezete.
 - ▶ Részecskenagyság/sűrűség a szilárd fázisban
- ▶ A pára és víz mennyisége.
- ▶ Hőmérséklet.

Lényeges tulajdonságok, mennyiségek

- ▶ A membrán szerkezete.
 - ▶ Részecskénagyság/sűrűség a szilárd fázisban
- ▶ A pára és víz mennyisége.
- ▶ Hőmérséklet.
- ▶ a termelt energia / az üzemanyagcella teljesítményének nagysága

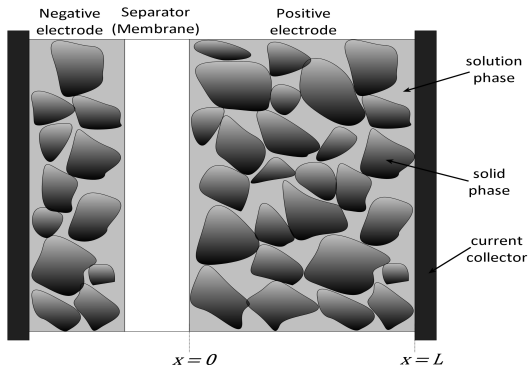
Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség

- Egy dimenziós modellt tekintünk.



Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség

- ▶ Egy dimenziós modellt tekintünk.
- ▶ A szilárd és folyékony fázist egyszerre vesszük figyelembe, mintha párhuzamosan lennének kötve.



Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség (folyt.)

- ▶ Vizsgált mennyiség: az elektromos teljesítmény: $U(t) \cdot I(t)$.

Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség (folyt.)

- ▶ Vizsgált mennyiség: az elektromos teljesítmény: $U(t) \cdot I(t)$.
- ▶ „Ismert” mennyiség: $I(t)$ - a külső körön folyó áram, amelyet

Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség (folyt.)

- ▶ Vizsgált mennyiség: az elektromos teljesítmény: $U(t) \cdot I(t)$.
- ▶ „Ismert” mennyiség: $I(t)$ - a külső körön folyó áram, amelyet
 - ▷ mérünk

Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség (folyt.)

- ▶ Vizsgált mennyiség: az elektromos teljesítmény: $U(t) \cdot I(t)$.
- ▶ „Ismert” mennyiség: $I(t)$ - a külső körön folyó áram, amelyet
 - ▷ mérünk
 - ▷ paraméterként adunk a számoláshoz.

Egyszerűsítés, a vizsgált mennyiség (folyt.)

- ▶ Vizsgált mennyiség: az elektromos teljesítmény: $U(t) \cdot I(t)$.
- ▶ „Ismert” mennyiség: $I(t)$ - a külső körön folyó áram, amelyet
 - ▷ mérünk
 - ▷ paraméterként adunk a számoláshoz.
- Cél: $U(t)$ minél nagyobb legyen.

A potenciál kiszámítása

- ▶ A fentiek ismeretében a cella 2 vége közti $U(t)$ feszültséget (potenciálkülönbséget) kell meghatározni.

A potenciál kiszámítása

- ▶ A fentiek ismeretében a cella 2 vége közti $U(t)$ feszültséget (potenciálkülönbséget) kell meghatározni.
- ▶ Kirchhoff-törvény: ennek értéke a nyugalmi potenciál és az egyes részeken vett potenciálveszteségek különbsége:

$$U(t) = U_{OC}(t) - \eta^a(t) - \frac{W_{\text{mem}}}{\kappa_{\text{mem}}} I(t) - U^*(t), \quad (1)$$

ahol

Mely tagokat ismerjük?

- Potenciálesés az anódon: $\eta^a(t)$

$$I(t) = i_0^A(t) \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^A F}{RT} \eta^a(t) \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c^A F}{RT} \eta^a(t) \right) \right], \quad (2)$$

ahol a többi fizikai paraméter ismert.

Mely tagokat ismerjük?

- Potenciálás az anódon: $\eta^a(t)$

$$I(t) = i_0^A(t) \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^A F}{RT} \eta^a(t) \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c^A F}{RT} \eta^a(t) \right) \right], \quad (2)$$

ahol a többi fizikai paraméter ismert.

- $\frac{W_{\text{mem}}}{\kappa_{\text{mem}}} I(t)$ - a membránon mért potenciálás, ahol W_{mem} a vastagság és a κ_{mem} vezetőképesség.

Mely tagokat ismerjük?

- ▶ Potenciálesés az anódon: $\eta^a(t)$

$$I(t) = i_0^A(t) \left[\exp \left(\frac{\alpha_a^A F}{RT} \eta^a(t) \right) - \exp \left(-\frac{\alpha_c^A F}{RT} \eta^a(t) \right) \right], \quad (2)$$

ahol a többi fizikai paraméter ismert.

- ▶ $\frac{W_{\text{mem}}}{\kappa_{\text{mem}}} I(t)$ - a membránon mért potenciálesés, ahol W_{mem} a vastagság és a κ_{mem} vezetőképesség.
- ▶ $U^*(t)$ - potenciálesés a katódon, ezt elemezzük részletesen.

$U^*(t)$ kiszámítása

- Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:

$U^*(t)$ kiszámítása

- ▶ Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:
 - ▶ Szilárd fázis

$U^*(t)$ kiszámítása

- ▶ Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:
 - ▶ Szilárd fázis
 - ▶ vezetőképessége σ , a benne mért potenciál U_1^* .

$U^*(t)$ kiszámítása

- ▶ Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:
 - ▶ Szilárd fázis
 - ▶ vezetőképessége σ , a benne mért potenciál U_1^* .
 - ▶ Oldat fázis

$U^*(t)$ kiszámítása

- ▶ Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:
 - ▶ Szilárd fázis
 - ▶ vezetőképessége σ , a benne mért potenciál U_1^* .
 - ▶ Oldat fázis
 - ▶ vezetőképessége: κ , a benne mért potenciál U_2^* .

$U^*(t)$ kiszámítása

- ▶ Szilárd fázis További mennyiségek a fenti egy dimenziós modellben:
 - ▶ Szilárd fázis
 - ▶ vezetőképessége σ , a benne mért potenciál U_1^* .
 - ▶ Oldat fázis
 - ▶ vezetőképessége: κ , a benne mért potenciál U_2^* .
- ▶ Az ezek közt mért potenciálkülönbség:

$$\eta(t, x) = U_1^*(t, x) - U_2^*(t, x) \geq 0, \quad x \in (0, L), t \in (0, t_{\max}),$$

azaz

$$U^*(t) = \eta(t, L) = U_1^*(t, L) - U_2^*(t, L), \quad t \in (0, t_{\max}).$$

Egyenlet $\eta(t, x)$ -re

- Ez az következő parciális differenciálegyenletre vezet:

$$aC_{dl}(x)\partial_t\eta(t, x) = \partial_x \left(\frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \right) (-I(t) + \sigma\partial_x\eta(t, x)) + \frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \partial_x (\sigma\partial_x\eta(t, x)) - a i_0 g \left(\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x) \right), \quad (3)$$

amelynek egyértelmű megoldásához adottak:

Egyenlet $\eta(t, x)$ -re

- Ez az következő parciális differenciálegyenletre vezet:

$$aC_{dl}(x)\partial_t\eta(t, x) = \partial_x \left(\frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \right) (-I(t) + \sigma\partial_x\eta(t, x)) + \frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \partial_x (\sigma\partial_x\eta(t, x)) - ai_0g \left(\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x) \right), \quad (3)$$

amelynek egyértelmű megoldásához adottak:

- Kezdeti érték: $\eta(0, x) = 0, x \in (0, L)$.

Egyenlet $\eta(t, x)$ -re

- Ez az következő parciális differenciálegyenletre vezet:

$$aC_{dl}(x)\partial_t\eta(t, x) = \partial_x \left(\frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \right) (-I(t) + \sigma\partial_x\eta(t, x)) + \frac{\kappa}{\kappa + \sigma} \partial_x (\sigma\partial_x\eta(t, x)) - ai_0g \left(\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x) \right), \quad (3)$$

amelynek egyértelmű megoldásához adottak:

- Kezdeti érték: $\eta(0, x) = 0, x \in (0, L)$.
- Peremfeltételek (Neumann típusúak):

$$\begin{aligned} \partial_x\eta(t, 0) &= -\frac{1}{\kappa(t, 0)}I(t), \quad t \in (0, t_{\max}) \\ \partial_x\eta(t, L) &= \frac{1}{\sigma(t, L)}I(t), \quad t \in (0, t_{\max}). \end{aligned} \quad (4)$$

$U^*(t)$ kiszámítása - utolsó lépés

- Innen egyszerűen adódik a keresett $U^*(t)$ mennyiségre:

$$\begin{aligned}
 U^*(t) &= \eta(t, L) + U_2^*(t, L) \\
 &= \eta(t, L) + \int_0^L -\frac{\sigma(t, s)}{\kappa(t, s) + \sigma(t, s)} \partial_s \eta(t, s) + \frac{1}{\kappa(t, s) + \sigma(t, s)} I(t) \, ds
 \end{aligned}$$

(5)

Az (3) egyenlet megoldásáról

- ▶ Nem tudjuk felírni képletekkel a megoldását, azt valamilyen módszerrel közelítjük.

Az (3) egyenlet megoldásáról

- ▶ Nem tudjuk felírni képletekkel a megoldását, azt valamilyen módszerrel közelítjük.
- ▶ Ehhez számítógépes programot kell írni, amely a közelítést ténylegesen végrehajtja.

További vizsgálatok

- ▶ A modell kiterjesztése 3 dimenzióra.

További vizsgálatok

- ▶ A modell kiterjesztése 3 dimenzióra.
 - ▶ Ekkor nem is tudtuk egyetlen egyenlettel leírni a potenciál változását.

További vizsgálatok

- ▶ A modell kiterjesztése 3 dimenzióra.
 - ▶ Ekkor nem is tudtuk egyetlen egyenlettel leírni a potenciál változását.
- ▶ Összetettebb modellre volna szükség, amely az oxigén eloszlását, a pára eloszlását is ismeretlenként figyelembe veszi.