

用于储能的碱性锌铁液流电池充放电模拟

谈鹏¹, 陈梓硕¹

1. 工程科学学院热科学和能源工程系, 中国科学技术大学, 合肥, 安徽, 中国

简介: 这项工作运用COMSOL建立了一个瞬态二维的碱性锌铁液流电池充放电模型。该模型针对电解液流速及电极几何参数对电池电化学性能的影响进行了数值分析和理论优化。

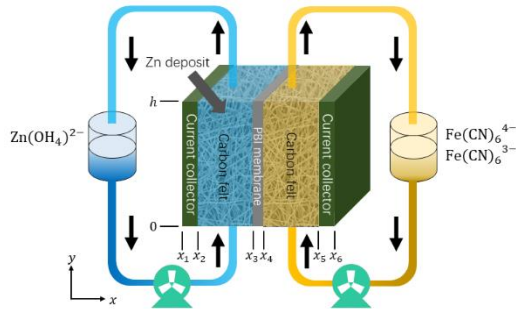


图 1. 碱性锌铁液流电池示意图

计算方法: 该模型参考了案例库中的钒氧化还原液流电池、可溶性铅酸氧化还原液流电池和锌-氧化银电池一维等温模型三个案例。模型耦合了电化学模块中的三次电流分布接口与全局常微分和微分代数方程接口, 用于刻画电池的电化学反应过程与电池及外部电解槽的质量平衡, 考虑了电化学反应所导致的电极中的孔隙率和物质浓度的变化。

$$\vec{N}_i^e = -D_i^{eff} \nabla c_i^e - z_i u_i^e c_i^e F \nabla \phi_i^e + \vec{v}_g c_i^e$$

$$\frac{V}{h_{cell}} \frac{d}{dt} (c_i^{in}) = \int_{outlet} (\vec{N}_i \cdot \vec{n}) dS - \int_{inlet} (\vec{N}_i \cdot \vec{n}) dS$$

$$c_i^{in}(0) = c_i^0$$

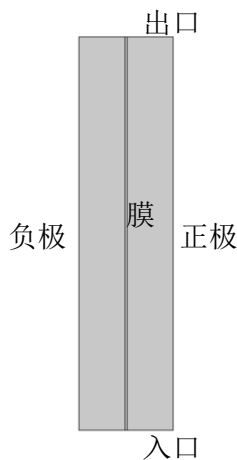


图 2. 模型几何

结果: 高流速可促进活性物质传递, 降低浓差过电位, 从而提高电解质利用率。厚电极的活性比表面积更大, 放电容量增大, 但由于电子和离子传输路径更长, 放电电压略有降低。高孔隙率电极的比表面积增大, 其能量密度高, 效率高。根据以上结论, 采用50 mL min⁻¹的流速, 7mm负极和10mm正极的不对称电极, 和0.98的孔隙度, 计算得到电解液利用率, 库仑效率和能量效率分别为98.62%, 99.18%, 和92.84%, 均高于初始设计。

设计	孔隙度	电极厚度 (mm)	体积流速 (mL min ⁻¹)	充电容量 (Ah L ⁻¹)	放电容量 (Ah L ⁻¹)
初始	0.94	7	15	26.00	22.92
优化	0.98	7/10	50	26.65	26.43

电解液利用率 (%)	库伦效率 (%)	充电能量 (Wh L ⁻¹)	放电能量 (Wh L ⁻¹)	能量效率 (%)
85.53	88.16	48.45	39.84	82.23
98.62	99.18	49.20	45.68	92.84

表 1. 初始和优化设计的电池性能对比

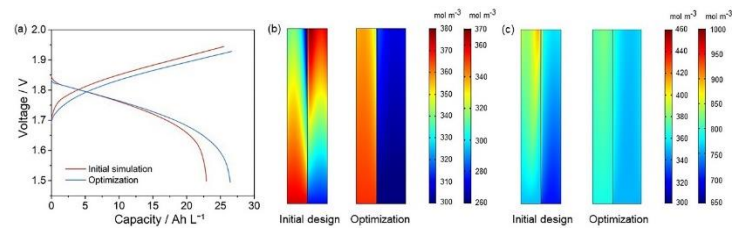


图 3. 初始和优化设计的电池充放电曲线和浓度分布对比

结论: 高流速、高电极厚度和高孔隙率有利于电池性能的提高, 优化后的电池电解液利用率、能量效率及库仑效率均得到较大的提升。这项作为碱性锌铁液流电池的实际设计与性能优化提供了有效的参考。针对电池的大规模储能模型及进一步细化研究也在进行中。

请注意:

所有摘要, 论文, 海报和演示文稿必须遵守 COMSOL 版权声明, 并受其限制:
www.comsol.com/conference/copyright-notice

参考文献:

1. Z. Chen, W. Yu, Y. Liu, Y. Zeng, Q. He, P. Tan, M. Ni, Mathematical modeling and numerical analysis of alkaline zinc-iron flow batteries for energy storage applications, Chemical Engineering Journal, 405, 126684 (2021)