



ТЕХНИЧЕСКИ УНИВЕРСИТЕТ – СОФИЯ

Факултет: Енергомашиностроителен факултет

Катедра: Топлоенергетика и ядрена енергетика

маг. инж. Дилян Йорданов Гавраилов

**ИЗСЛЕДВАНЕ НА ВЪЗМОЖНОСТИ ЗА ПОДОБРЯВАНЕ НА
ЕФЕКТИВНОСТТА НА ЕЛЕКТРОЛИЗНИ И ГОРИВНИ КЛЕТКИ В СИСТЕМИ
ЗА ВОДОРОДНА ЕНЕРГИЯ**

АВТОРЕФЕРАТ

на дисертация за придобиване на образователна и научна степен

"ДОКТОР"

Област: 5. Технически науки

Професионално направление: 5.4 Енергетика

Научна специалност: Термични и ядрени електрически централи

Научен ръководител: Проф. д-р инж. Силвия Василева Бойчева

Дисертационният труд е обсъден и насочен за защита от Разширен катедрен съвет на катедра „Топлоенергетика и ядрена енергетика“ към Енергомашиностроителния факултет на Технически университет – София, на заседание, проведено на 13.02.2026 г.

Публичната защита на дисертационния труд ще се състои на 04.06.2026 г. от 13:00 часа в конферентна зала на БИЦ на Технически университет – София на открито заседание на журито, определено със Заповед ОЖ-5.4-08 от 05.03.2026 г. на Ректора на Технически университет – София в състав:

- 1. доц. д-р инж. Цветелина Петрова– Председател**
- 2. доц. д-р инж. Детелин Марков - Научен секретар**
- 3. проф. д-р инж. Нина Пенкова**
- 4. проф. дн инж. Мартин Божинов**
- 5. проф. д-р инж. Тамара Петкова**

Рецензенти:

- 1. проф. дн инж. Мартин Божинов**
- 2. доц. д-р инж. Детелин Марков**

Материалите по защитата са на разположение на интересуващите се в канцеларията на Енергомашиностроителния факултет на ТУ-София, блок № 2, кабинет № 2344.

Дисертантът е редовен докторант към катедра „Топлоенергетика и ядрена енергетика“ на Енергомашиностроителния факултет. Изследванията по дисертационната разработка са направени от автора, като някои от тях са подкрепени от научноизследователски проект.

Автор: Дилян Йорданов Гавраилов

Заглавие: „Изследване на възможности за подобряване на ефективността на електролизни и горивни клетки в системи за водородна енергия“

Тираж: 30 броя

Отпечатано в ИПК на Технически университет – София

I. ОБЩА ХАРАКТЕРИСТИКА НА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Актуалност на проблема

В условията на енергиен преход и декарбонизация, водородът се разглежда като ключов енергиен носител с потенциал за интеграция на производството му чрез електролиза на вода с възобновяеми енергоизточници. Основен проблем при производството и използването на „зелен“ водород остава ниската ефективност и високите енергийни загуби при електролизни и горивни клетки. Това налага разработване на оптимизирани конструкции на основни компоненти от тези устройства за подобряване на тяхната работа.

Цел на дисертационния труд, основни задачи и методи за изследване

Целта на дисертационния труд е създаване на възможности за повишаване на ефективността на производството на водород чрез подобряване на електродната структура на електролизни клетки и повишаване на ефективността на използване на водорода в горивни клетки чрез подобряване на каналната им конфигурация, както и намаляване на енергийните загуби при интегрирането на фотоволтаични и електролизни системи за производството на “зелен” водород. Поставените научно-изследователски задачи за постигане на дефинираната в дисертационния труд цел са фокусирани в следните направления:

Задача 1: Разработване и валидиране на математически модели на алкални електролизьори в различни конфигурации (съществуваща система, класическа конфигурация, конфигурация с общ катод, конфигурация с общ анод и с перфориран електрод), за оценка на производителност, ефективност и приложимост на отделните конструкционни варианти.

Задача 2: Изследване на възможността за директно свързване на електролизьор с фотоволтаична система (PV-ELY) чрез сравнение на изходните и входните електрически характеристики и изчисляване на коефициент на съвпадение на мощностите (CF_direct_coupled).

Задача 3: Оценка на влиянието на геометрични параметри (дебелина и перфорация на електродите) върху компактността, налягането и електрохимичната производителност на електролизната система.

Задача 4: Моделни изследвания и сравнителен анализ на волт-амперни характеристики на всички електролизни конфигурации, с цел определяне на оптимално инженерно решение по критерии за ефективност и сходимост към данни от реални измервания (валидиране на числен модел с отклонение под 20 %).

Задача 5: CFD моделиране на PEM горивни клетки (PEMFC) с различни конфигурации на каналните структури: серпентини, с прегради в каналите, Тюринг дизайн и комбинирана канална структура) с цел получаване на данни за плътност на тока, контрол на влажността и ефективността на масопренос в каналите.

Задача 6: Изследване на взаимовръзките и извеждане на зависимости между електрохимични и термодинамични параметри, описващи процесите в електролизни и горивни клетки.

Задача 7: Формулиране на научно-приложни заключения за разработване и оптимален дизайн на интегрирани системи фотоволтаичен модул – електролизатор - горивна клетка въз основа на резултати от симулационните изследвания.

Научна новост

Предложена е нова електродна конфигурация с перфорирана структура за алкални електролизатори и е разработен нов хибриден канален дизайн за PEM горивни клетки, които подобряват производителността и намаляват енергийните загуби на изследваните устройства. Изследвани са зависимостите между геометрията, масопеноса и електрохимичната ефективност на електролизни и горивни клетки.

Практическа приложимост

Практическата приложимост на дисертационния труд се изразява в разработването на инженерни решения за повишаване ефективността на реални системи за производство и използване на водород. Получените резултати могат да бъдат директно използвани при проектиране и оптимизация на алкални електролизатори чрез внедряване на перфорирани електродни структури с увеличена на активната площ. Предложената конфигурация позволява намаляване обема на електролизните системи при запазване или повишаване на производителността. Изследванията върху директното свързване на фотоволтаични системи с електролизатори могат да бъдат приложени при изграждане на

автономни системи за производство на „зелен“ водород. Това създава предпоставки за намаляване на инвестиционните разходи чрез елиминиране на допълнителни електронни преобразуватели. Предложеният хибриден дизайн на канални структури в PEM горивни клетки може да бъде използван за повишаване на ефективността и надеждността на енергийни системи с горивни клетки. Резултатите от CFD моделирането подпомагат оптимизацията на масопеноса и управлението на водния баланс в реални устройства. В обобщение, разработките имат потенциал за внедряване в интегрирани енергийни системи, включващи възобновяеми енергийни източници, електролизьори и горивни клетки.

Апробация

Резултатите са апробирани чрез числени симулации и сравнени с експериментални данни от реален електролизьор. Част от изследванията са представени на международни научни конференции. Публикациите в реферирани списания потвърждават научната валидност на разработката.

Публикации

Основните постижения и резултати от дисертационния труд са публикувани в 5 научни статии, от които 2 в списания с импакт фактор и импакт ранг (Q1) и 3 в реферирани издания на сборници от конференции с импакт ранг.

Структура и обем на дисертационния труд

Дисертационният труд е в обем от **167** страници, като включва увод, **11** глави за решаване на формулираните основни задачи, списък на основните приноси, списък на публикациите по дисертацията и използвана литература. Цитирани са общо **210** литературни източници, като **205** са на латиница и **5** на кирилица. Работата включва общо **42** фигури и **11** таблици. Номерата на фигурите и таблиците в автореферата съответстват на тези в дисертационния труд.

II. СЪДЪРЖАНИЕ НА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

ГЛАВА I. Водородът като енергиен носител

В контекста на глобалния енергиен преход и нарастващата необходимост от декарбонизация, водородът се утвърждава като енергиен носител, гориво и средство за съхранение на енергия, с потенциал да интегрира различните сектори на енергийната система, като ВЕИ и горивни инсталации [12], [13], [14]. Водородът е с най-висока гравиметрична енергийна плътност сред известните горива, което позволява съхранение на значителни количества енергия в относително малко тегло [15]. Той е най-разпространеният елемент в свързано състояние и може да бъде получен от различни източници, включително вода и биомаса, което гарантира дългосрочна ресурсна наличност. При използването му като енергиен носител в електрохимични системи, отделеният продукт от окислението му е вода, което представлява съществено предимство спрямо изкопаемите горива, при чието изгаряне се формират емисии на CO₂, NO_x, SO_x, прах, устойчиви органични замърсители и тежки метали. Следва да се отбележи, че общият екологичен ефект от използването на водород зависи от начина на неговото производство [16]. Водородът е екологосъобразен енергиен носител, който е с продължаващо технологично развитие и намаляване на разходите за получаването му, има потенциал за все по-значима роля в глобалния енергиен микс, допринасяйки за постигането на климатичните цели и енергийната сигурност. Въпреки че парният риформинг на природен газ е основен метод за производство на водород, поради по-ниските си разходи и утвърдена инфраструктура, електролизата на вода има значителни екологични предимства. Тя позволява интеграция с ВЕИ и елиминира емисиите на CO₂, което я прави ключов инструмент в прехода към нисковъглеродна енергетика.

I.2 Класификация на водорода според въглеродния отпечатък

Класификацията на водорода според източника на получаване се основава на използваните суровини и енергийни ресурси при неговото производство, като всеки метод се характеризира с различно въздействие върху околната среда. Тази класификация е от съществено значение за оценка на приноса на различните типове водород към климатичните цели, декарбонизацията на икономиката и постигането на

устойчиво развитие. Систематизирането на технологиите за производство на водород по екологични показатели позволява целесъобразен избор на стратегии в енергийния преход и в индустрията [22].

I.4 Технологии за получаване на водород

Дисоциирането на молекулата на водата на водород и кислород е реакция, която се осъществява чрез носители на заряд [38]. Технологиите за получаване на водород се разделят на:

Термохимични (термолиза) - използват топлина енергия, като директната термолиза на водни молекули не е приложима за практически цели, тъй като се реализира при температури над 2000 °C.

Електрохимични (електролиза) – използват електрическа енергия за разлагане на водните молекули (процесът е обект на проучване в настоящия дисертационен труд).

Фотохимични (фотолиза) – разлагане на молекулата на водата под действие на светлинна енергия и в присъствието на полупроводникови фотокатализатори.

Фотоелектрохимична – дисоциацията на водните молекули протича чрез електрохимичен процес.

I.5 Заключение

Водородът е екологосъобразен енергиен носител, който с продължаващото технологично развитие и намаляване на разходите за получаването му, има потенциал за все по-значима роля в глобалния енергиен микс, допринасяйки за постигането на климатичните цели и енергийната сигурност. Въпреки, че парният риформинг на природен газ е основен метод за производство на водород, поради по-ниските си разходи и утвърдена инфраструктура, електролизата на вода има значителни екологични предимства. Тя позволява интеграция с ВЕИ и елиминира емисиите на CO₂, което я прави ключов инструмент в прехода към нисковъглеродна енергетика. Поради перспективите за развитие на електролизата на вода като водеща технология за устойчиво производство на водород, повишаването на ефективността на електролизните системи е обект на изследване в настоящия дисертационен труд.

Глава II. Получаване на водород чрез електролиза на вода

Разграждането на водната молекула е термодинамично неспонтанен ендотермичен процес, който протича с поглъщане на енергия и положителна енталпия [52]. Химичната трансформация включва едновременно редукция и окисление, като и двата процеса са взаимно свързани. Видът на носителите на заряд, участващи в електрохимичната реакция, зависи от рН на средата. В киселинни условия това са водородните катони (H^+), в алкална среда – хидроксидните аниони (OH^-), докато при твърдооксидната електролиза се използва твърд електролит, проводящ за кислородни аниони (O^{2-}) [53].

II.1 Алкална електролиза (AWE)

Алкалната електролиза е най-утвърдената технология за производство на зелен водород чрез електролиза на вода. Тя използва силно алкален електролит, обикновено калиев (KOH) или натриев (NaOH) хидроксид с концентрация около 30 % и рН=13-14, което осигурява висока концентрация на хидроксидни йони – основните носители на заряд. В системата като сепаратори се използват порести диафрагми или анион-обменни мембрани (AEM), като при класическият дизайн има разстояние между електродите (finite gap), а при подобрените конструкции - електродите са плътно прилепени към мембраната, т.нар. „нулево разстояние“ (zero-gap) [54], [55].

II.2 Електролизьори с протонно обменни мембрани (PEM)

При PEM се използва протоннообмена полимерна мембрана на основата на киселинно-дотиран (най-често с H_3PO_4) полибензомидазол (PBI) като електролит [64], [65]. Клетките са компактни (5-7 mm) [39]. От анодната страна водата се дисоциира от подаденото напрежение, при което се генерира газообразен кислород, водородни йони и електрони.

II.3 Електролизьори с твърдооксидни клетки (SOEC)

AWE и PEM работят при сравнително ниски температури (<180 °C), което води до неефективност на процеса, отчитайки термодинамиката на електролизата [10]. Според

термодинамичните принципи, при по-високи температури част от необходимата за разлагане на водните молекули енергия, може да се достави като топлина, което намалява общото електрическо потребление на системата. Термодинамичните анализи на дисоциацията на водната молекула показват, че свободната енергия на Гибс (ΔG) на реакцията намалява с повишаване на температурата на електролизната клетка [39].

II.4 Основни конфигурации на електролизьори

Съществуват три основни конфигурации при електролизьорите: монополярна, биполярна и биполярна с централен електрод [68]. При монополярната конфигурация всяка електродна плоча е свързана директно към захранването и на двете ѝ страни протича една и съща реакция – или еволюция на водород, или на кислород. Това изисква паралелно свързване на клетките, водещо до висок общ ток, значителни омични загуби и необходимост от масивни тоководещи шини – подходяща е главно за по-малки системи [69].

II.5 Сравнително изследване на получаването на водород чрез различни електролизни системи

AWE, PEM и SOEC са утвърдени технологии за производство на водород чрез разлагане на вода [71]. AWE и PEM електролизьорите работят при сравнително ниски температури, което влияе върху необходимата енергия за процеса на разлагане на водата и върху общата ефективност. Ключов фактор за ефективността е връзката между напрежението в клетката и плътността на тока. PEM клетките, работещи при плътност на тока 2 A/cm^2 , постигат производителност на H_2 от около $8.4 \text{ Nm}^3 \text{ H}_2 / \text{m}^2$, докато при AWE, работещи при 0.45 A/cm^2 , тя е около $1.9 \text{ Nm}^3 \text{ H}_2 / \text{m}^2$. Това показва значителната разлика в капацитета на двете технологии. Въпреки, че PEM, предлага по-висока производителност, AWE технологията е по-утвърдена и е прилагана в по-големи мащаби – до 6 MW, докато PEM все още е ограничена до по-малки мощности [72].

Глава III. Математически модели на процесите в електролизни клетки

III.1 Електрохимични модели на електролизни клетки

Електрохимичната реакция, протичаща в електролизните клетки, се влияе от няколко ключови параметъра: напрежение на клетката (V_{cell}), равновесен потенциал (V_{eq}), активационни пренапрежения ($V_{activation}$) и пад на напрежение от омични загуби (V_{ohmic}). Общото напрежение на клетката се изразява като сума от равновесния потенциал и пада на напрежение от различните загуби, както е показано в уравнение (3.1.1.):

$$V_{cell} = V_{eq} + V_{activation} + V_{ohmic} \quad (3.1.1)$$

Колкото по-ниски са пренапреженията, толкова по-близо е реалното напрежение на клетката (V_{cell}) до термодинамичния минимум (V_{eq}), необходим за стартиране на реакцията. Зависимостта между напрежението и големината на тока, протичащ в електрохимичната клетка, представлява поляризационната крива, която характеризира ефективността на електролизьора. Скоростта на производство на водород (mol/s) се определя от закона на Фарадей и Фарадеева константа (F):

$$n_{H_2} = \frac{I}{2F} \quad (3.1.4)$$

Където: I е големината на тока през клетката (A), който, от своя страна, се дефинира чрез:

$$I = jA_e \quad (3.1.5)$$

Където: j е плътността на тока (A/m^2), а A_e е активната площ на електрода (m^2). От уравнение (3.1.4.) става ясно, че производството на водород е в пряка зависимост от големината на тока в системата, която, от своя страна, зависи от ефективната площ на електродите.

III.2 Масопренос в електрохимични клетки

При електролизата се образуват газови мехурчета (водород и кислород), които значително влияят върху масообмена и върху ефективността на електродите [97]. За описание на масопреноса в електрохимични клетки се прилага модел на двуфазно течение, известен като модел на течението с мехурчета (Bubbly Flow), който описва поведението на газовата фаза в течната среда.

III.2.1 Математически модел на двуфазно течение в електролизни клетки

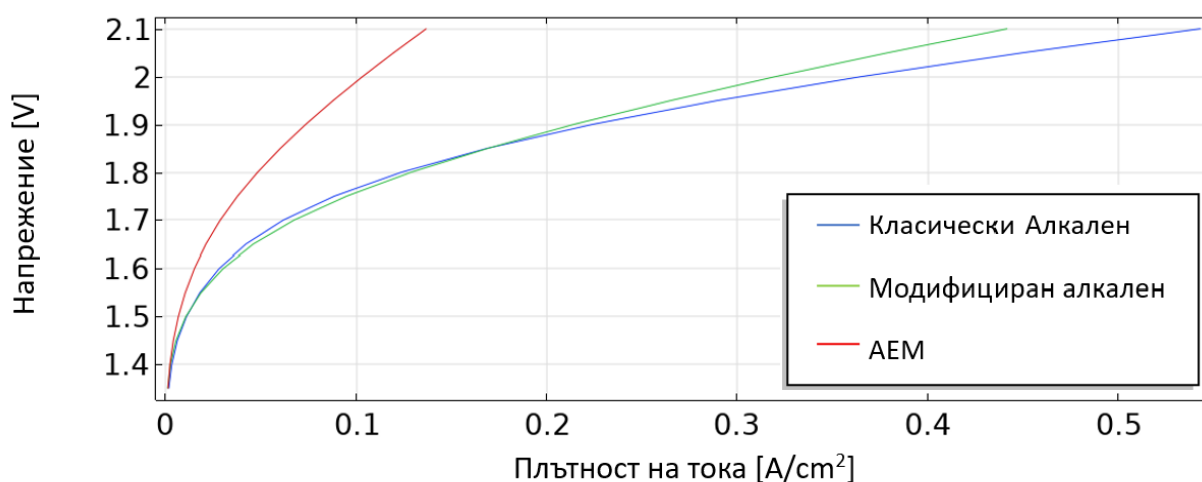
Моделът за двуфазно течение с мехурчета е опростен вариант на двуфлуидния подход Ойлер - Лагранж, при който се проследява разпределението на диспергирана газовата фаза в непрекъснатата течна среда. Движението на газовите мехурчета се определя от градиента на налягане и вискозното съпротивление, породено от силите на триене между мехурчето и течността [98]. Равновеситето между тези сили определя скоростта и посоката на движение на газовите мехурчета. За всяка от фазите се дефинира отделно скоростно поле, а динамиката им се описва чрез уравненията за запазване на масата и импулса.

III.3 Заключение

Математическото описание на електрохимичните процеси показва, че активната повърхност на електродите е определящ фактор за намаляване на активационните загуби и за повишаване на плътността на тока и добива на водород, поради което повишаването на ефективността на електролизните клетки изисква целенасочена разработка на електродни материали и оптимизация на електродния дизайн. В настоящата работа е избрана алкална електролиза, тъй като към момента тя остава най-утвърдената и най-широко използвана технология и именно върху оптимизирането на електродния дизайн на алкален електролизатор е фокусиран настоящият дисертационен труд.

Глава IV. Моделни изследвания на водородни електролизни клетки

За реализирането на моделните симулации е използван модулът Fuel Cell & Electrolyzer на COMSOL Multiphysics 6.2, който позволява интегриран подход за изследване на електрохимични процеси, топлопренос, движение на флуиди и структурни параметри в единна среда. Изследвани са конфигурации на електрохимични клетки, прилагани за електролиза на вода, класическия алкален електролизатор, електролизатор с твърд електролит и анионообменна мембрана (АЕМ), както и модифициран алкален електролизатор. На Фиг. IV.3 са представени поляризационните криви на трите изследвани електролизатора – класически алкален, АЕМ и модифициран алкален с перфорирани електроди. Моделите са симулирани при еднакви гранични условия в резултат на което, АЕМ електролизаторът показва най-ниска производителност и по-високи загуби при ниски плътности на тока, което е пряко свързано с отсъствието на катализатор. При разработения модифициран алкален електролизатор, се увеличава дебелината на електродите десетократно което, създава оптимални условия за протичане на



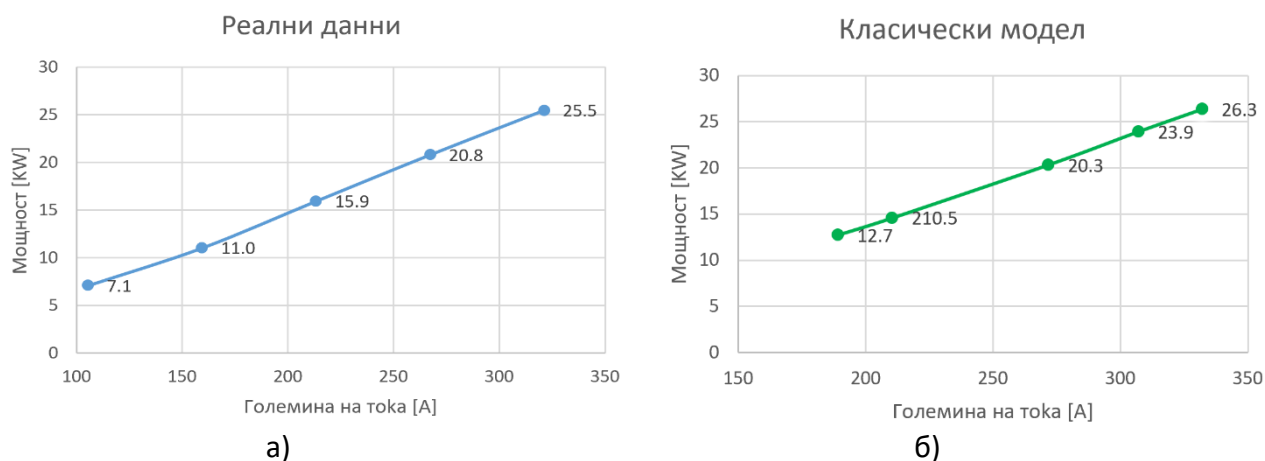
Фиг. IV.3. Поляризационни криви на трите изследвани модела на електролизни клетки електрохимичните реакции без повишаване на активационните или омичните загуби. Постига се същото производство на водород, както при класическия електролизатор, при над 50 % по-малък обем на клетката. По-голямата дебелина на електродите позволява по-равномерно разпределение и отвеждане на топлината, поддържайки максимална работна температура от 21.3 °C при плътност на тока от 100 A/cm².

Глава. V. Валидиране на числения модел с експериментални данни и изграждане на модели на пакети електролизни клетки

За валидиране на използвания числения модел за моделиране на алкален електролизатор са използвани работни характеристики на реален алкален електролизатор с биполярна конфигурация. Електролизаторът съдържа общо 40 електрода, като само крайните два са активни и свързани директно към електрическо захранване, а останалите функционират в биполярен режим. Диаметърът на всеки електрод е 325 mm, като дебелината на пасивните електроди е 1 mm, а на активните – 3 mm. Електролитът е воден разтвор на калиева основа (30 mol % KOH), а работната температура е 80 °C.

V.1 Валидиране на изградения числен модел

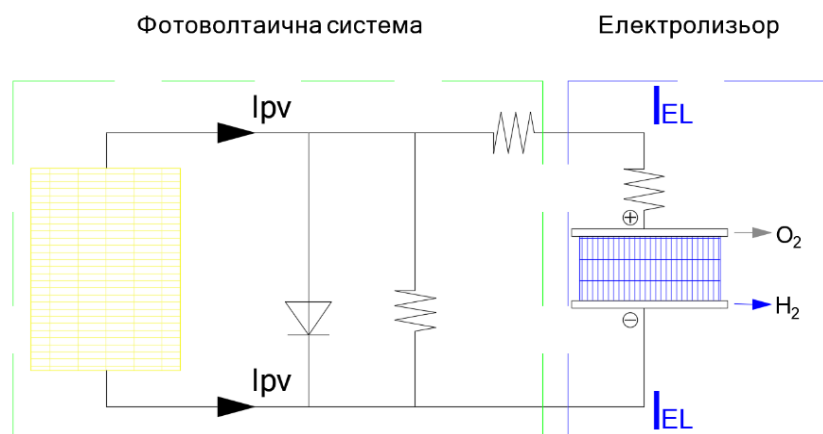
Експерименталната и симулационната волт-амперни характеристики са представени на Фиг. V.2. Най-високата измерена мощност за реалната система е 25.47 kW при ток от 321.2 A и напрежение 79.31 V, като при симулационния модел при 332.1 A и същото напрежение, се постига мощност от 26.34 kW, което представлява отклонение в реалните и симулираните данни от около 0.87 kW или с 3.4 %.



Фиг. V.2 Работни характеристики на: а) реален алкален електролизатор; б) симулационен модел на реална конфигурация

V.2 Изследване на възможностите за съвместяване на електролизатор с фотоволтаична система

Поляризационните характеристики определят ефективността на електролизьора при различни режими на работа, което е критичен фактор при оценката на съвместимостта му с ВЕИ [108]. Изследвано е свързването със соларни фотоволтаични системи (PV), тъй като соларната електроенергия е чист, устойчив източник за производство на зелен водород. Предизвикателство при директната връзка между фотоволтаици и електролизьори се състои в непостоянството на енергопроизводството от PV инсталациите. Това води до несъответствия между моментната мощност на електролизьора и произведената от PV мощност. За съгласуване на натоварването между двете системи е необходимо познаване на поляризационната крива на електролизьора, тъй като тя определят оптималната работна точка на устройството [109]. Директно свързване на PV-електролизьор позволява максимален добив на водород, като едновременно с това се гарантира стабилност в работата на електролизната система и се избягват енергийни загуби, поради неправилно оразмеряване или нестабилно подаване на електроенергия. Както електролизьорът, така и фотоволтаичните (PV) модули работят в постоянен ток режим (DC/DC), което прави директното им свързване по-ефективно и икономически изгодно, тъй като отпада необходимостта от използване на инвертори, трансформатори и изправители (Фиг. V.11) [110]. Изследвана е максималната мощност, която може да бъде генерирана от PV,



Фиг. V.11 Схема на директна връзка между електролизьор и соларна система

използвайки директно-свързана схема (direct-coupled system), при която работната точка на PV съвпада с ($I-V$) характеристика на електролизьора. Изходният ток и напрежение от PV системата (I_{PV} , V_{PV}) са равни на входния ток и напрежение към електролизьора (I_{EL} , V_{EL}) [112].

Глава VI. Водородни горивни клетки

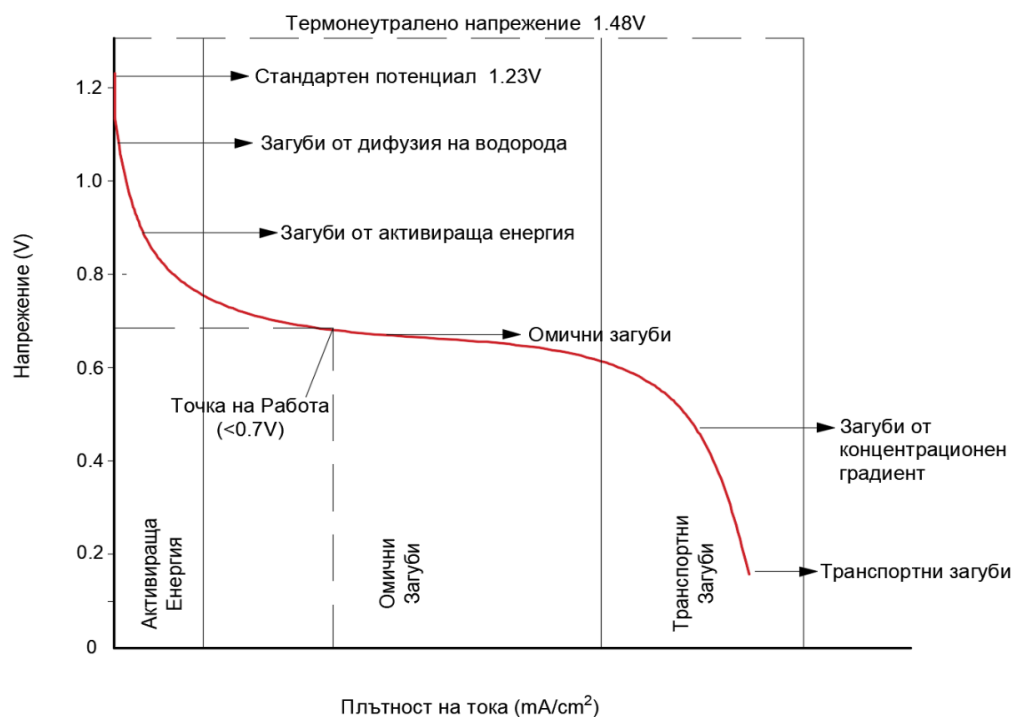
За разлика от електролизата, при която се влага електрическа енергия за предизвикване на електрохимичен процес, при горивните клетки се генерира електрическа енергия от химичните взаимодействия. Горивните клетки се класифицират според вида на използвания електролит и гориво, което определя електродните реакции и вида на транспортните йони, участващи в процеса. Електрохимичната реакция протича на повърхността на електродите, генерирайки напрежение, което се предава за запазване на външен електрически товар [120]. За разлика от батериите, горивните елементи оперират при непрекъснато масово течение на реагентите (редуктор и окислител), които се подават към електродите, което позволява непрекъснато генериране на електрохимична енергия, докато батериите съхраняват химическа енергия в затворена система (заряд-разряден цикъл на функциониране) [121]. Енергийният баланс на горивна клетка включва следните компоненти: енталпия на реагентите, произведена топлина от електрохимичните процеси и загуби на топлина от клетката в околната среда. Максималната топлина, която може да се отдели при реакцията, е равна на HHV на водорода, а максималната извършена работа се определя от стойността на ΔG , като теоретичната електродвижеща сила E° при дадена температура T , ще се изрази като:

$$E^\circ = -\frac{\Delta G(T)}{z \cdot F}, [V] \quad (6.2.3)$$

При определянето на ефективността на горивни клетки се отчита оползотворената енергия под форма на работа (свободната енергия на Гибс ΔG), отнесена към общото количество химична енергия, освободено при реакцията (енталпията ΔH), където броя на електроните, пренасяни в електрохимичната реакция са (z), а F е константата на Фарадей, което дава идеалният коефициент на ефективност:

$$\eta_{ideal} = \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad (6.4.1)$$

Реалното напрежение на горивната клетка (V_{cell}) е винаги по-малко от термонеутралното напрежение, поради различни енергийни загуби в системата. Тези загуби формират т. нар. поляризационна крива на горивната клетка, която описва зависимостта между работното напрежение и плътността на тока [125]. Поляризационните загубите водят до разлика между реалното работно напрежение и идеалното напрежение на клетката, като винаги е валидно $V_{cell} < V_{ideal}$. Освен това, не цялото количество гориво, подавано към анода на горивната клетка, се редуцира на катода, поради което работното напрежение трябва да бъде коригирано с коефициент за ефективно използване на горивото [126]. Този коефициент се отразява в уравнение (6.1.9) за нетната ефективност. Поляризационните загуби, отразени върху поляризационната крива, се делят на три основни зони, показани на Фиг. VI.2.



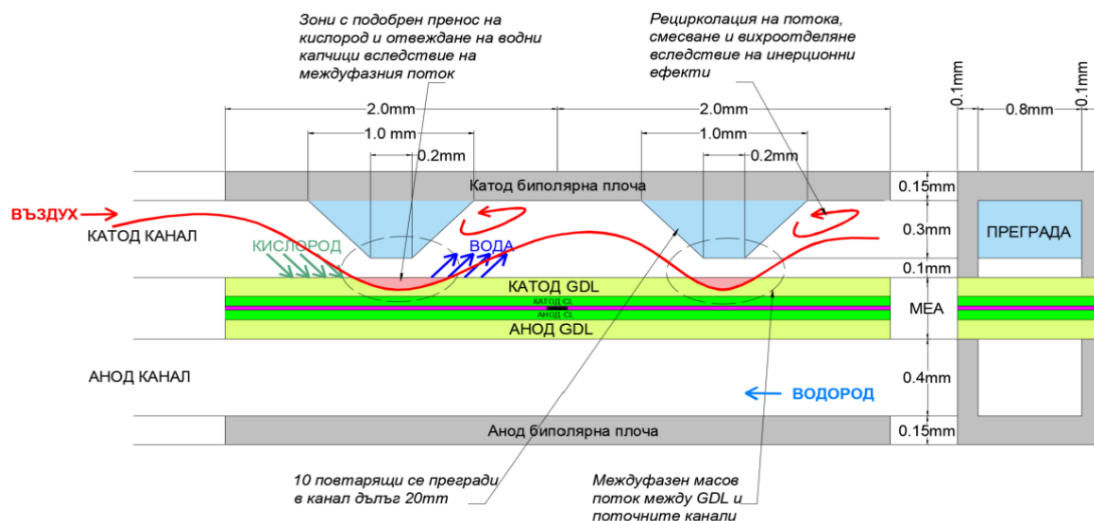
Фиг. VI.2. Поляризационна крива на PEMHFC, отразяваща зоните на загубите при електрохимичния процес

Глава VII. Полимерна протонпроводяща мембранна горивна клетка (PEMFC)

PEMFC имат по-ниска работна температура и бърз старт в съпоставка с другите видове горивни клетки, и висока плътност на мощността при компактни размери, което ги прави подходящи за мобилни и стационарни приложения [138], [101], [139]. Недостатъците им са свързани с тяхната ефективност при високи плътности на тока, експлоатационния живот на мембраната, използването на благородни метали в конструкцията им и управлението на водния баланс [140], [141]. Механичната стабилност на горивната клетка се осигурява от двуполюсни пластини, които изпълняват и функцията на колектори, и осъществяват електрическата връзка с външната верига. Техните канално-оформени повърхности служат за подаване и отвеждане на водород, кислород и образувалата се вода. Пластините се изготвят от графит или полимерни композити, като оребренията им са метални [105, 142]. По-големите клетки имат канални отвори за подаване на охлаждащ агент (най-често вода) за отнемане на генерираната топлина по време на работа. Установено е, че при работа на PEMFC при високи плътности на тока се установява понижена ефективност, обусловено от натрупването на вода, генерирана в резултат на електрохимичния процес, което води до наводняване на мембраната и възпрепятства ефективния транспорт на реагентите [147]. Отчита се също спад в ефективността при ниски плътности на тока и при пресушаване и недостатъчното овлажняване на мембраната, което възпрепятства йонната проводимост и нарушава работата на клетката [148]. Следователно, постигането на максимална ефективност при работа на горивна клетка е пряко свързано с оптималното управление на водния баланс, с цел предотвратяване възникването както на зони на наводняване, така и на пресушаване, които значително нарушават електрохимичната и транспортната ефективност на системата [74]. Конвенционалните канални структури в горивните клетки осигуряват непрекъснатост на течението от входа до изхода, като течението на реагентите се движи паралелно спрямо повърхността на електрода [149].

За разлика от конвенционалната линейна канална структура, триизмерните комплексни полета с повтарящи се прегради, т.нар. "преграден" дизайн, представлява прегради с форма на обърнат трапец в каналната структура, показани в синьо на Фиг. VII.3. Те създават микромащабно течение между газодифузионния слой и каналните полета, генерирайки интензивно кислородно течение, което отстранява излишната вода от газодифузионния слой и подобрява ефективността на горивната клетка. Ъглите на преградите (трапеца) имат съществено значение, като определят ъгъла, под който въздухът прониква в газодифузионния слой. Установено е, че ъгъл на катетите с основата от 45° дава най добри показатели и увеличава с 18.8 % плътността на мощността, като при 30° и 60° също оказва подобрения, но в по-ниска степен [161].

Намаляването на хидравличното съпротивление подпомага ефективното проникване на



Фиг. VII.3 Управление на водния баланс на катодната страна при преграден дизайн

реагентите през порестия слой и по-пълното използване на активната повърхност на електродите. За подобряване на хомогенното протичане на електрохимичната реакция върху цялата електродна повърхност, се прилага модел за структурна оптимизация, вдъхновен от биологични системи и основан на алгоритми, разработени от Алън Тюринг [165, 166].

Глава VIII. Моделни описания на горивни клетки

Наличните в научната литература моделни описания обикновено се ограничават до еднофазни симулации или опростени двуфазни подходи, които не отразяват адекватно сложността на двуфазните течения в геометрията на каналната структура [178]. В този контекст, интегрирането на двуфазния модел на Форхаймер, е от съществено значение за реалистичното симулиране на поведението на течностите в 3D полета на течението. Инсталирането на прегради в каналите на горивни клетки с протонообменна мембрана е технология за създаване на 3D микрорешетки, които способстват за рецикулацията на течението, разширяването, свиването и формирането на вихри, известни като инерционни ефекти (ефект на Форхаймер), представени на Фиг. VII.3 . Електрохимичният потенциал на горивната клетка V_{cell} в уравнение (8.1.3) е функция от плътността на тока (i) и вече споменатите основни видове загуби, които се пораждат [183]:

$$V_{cell} = V_{Nernst} - \eta_{ohm} - \eta_{act} - \eta_{dif} = f(i) \quad (8.1.3)$$

В рамките на това изследване, плътността на тока се сравнява при зададено напрежение от 0.7 V за всички модели. Тъй като уравнението на Нернст дава равновесното потенциално напрежение, което е теоретичното напрежение при отворена верига V_{ocp} , уравнението (8.1.3) може да бъде изразено по следния начин:

$$V_{cell} = V_{Nernst} - \eta_{ohm}(i) - \eta_{act}(i) - \eta_{dif}(i) \quad (8.1.4)$$

Където V_{Nernst} е потенциалът на Нернст, а $\eta_{ohm}(i) - \eta_{act}(i) - \eta_{dif}(i)$ представляват съответно омични, активационни и дифузионни загуби. Омичните загуби се описват чрез уравнението:

$$\eta_{ohm}(i) = R_{internal} i \quad [V] \quad (8.1.5)$$

Омичните загуби са линейни и $R_{internal}$ е сума от съпротивления на анода, катода и електролита, умножени по токовата плътност (i) A/cm². Активационните загуби се изразяват чрез уравнение (8.1.6):

$$\eta_{act}(i) = \frac{RT}{\alpha F} \ln\left(\frac{i}{i_0}\right) \quad [V] \quad (8.1.6)$$

Където: R е универсалната газова константа (8.314 J/mol.K); T е работната температура, α е коефициентът на пренос на заряд; F е константата на Фарадей (96 485 C/mol); i е работната плътност на тока; i_0 е обменната плътност на тока. Дифузионните загуби са дефинирани чрез уравнение (8.1.7):

$$\eta_{dif}(i) = B \ln\left(1 - \frac{i}{i_{lim}}\right) \quad [V] \quad (8.1.7)$$

Където: η_{dif} е дифузионния свръхпотенциал [V]; B е константата за дифузионно напрежение [V]; i – плътност на тока [A/cm²]; i_{lim} – плътност на ограничаващ ток [A/cm²]. Тези загуби възникват при високи плътности на тока, когато се ограничава масовият пренос и се изчерпват реагентите в близост до електрода B, който е емпиричен коефициент, свързан със свойствата на масопреноса, а i_{lim} е лимитиращата плътност на тока. Лимитиращата плътност на тока се изчислява чрез:

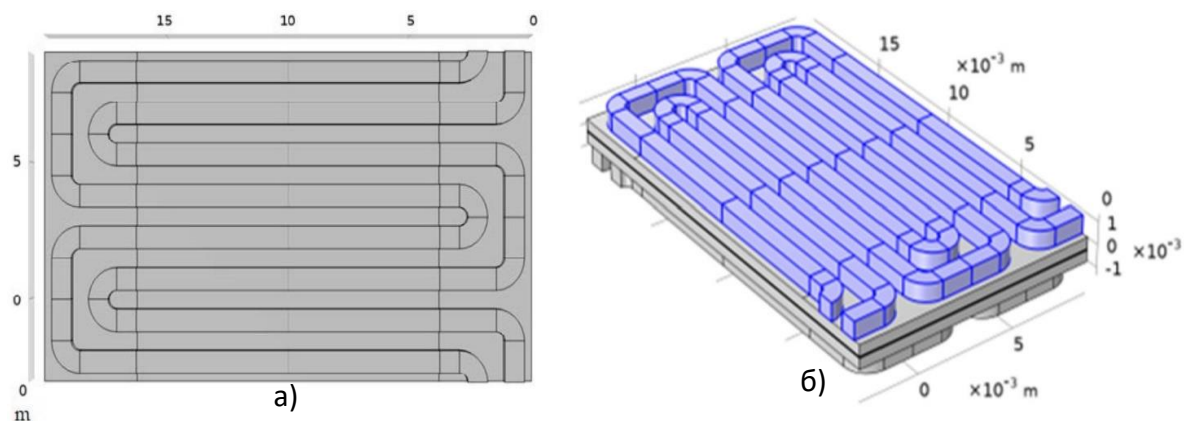
$$i_{lim} = \frac{2FDC_{H_2O}}{L} \quad (8.1.8)$$

Където (F) е константата на Фарадей, C/mol; D е коефициент на дифузия, m²/s; L е дебелината на газодифузияния слой (m); C_{H_2O} - обемна концентрацията на реагента [mol/m³] [185]. Плътността на обменния ток (i_0), спомената в уравнение (8.1.4.), е ключов параметър при моделирането на горивни клетки. В рамките на настоящото изследване са използвани стойности от 10⁻³ A/cm² за плътност на тока на анода и 10⁻⁶ A/cm² на катода, базирани на литературни данни [186].

Глава IX. Моделни изследвания на канална структура в PEM горивна клетка

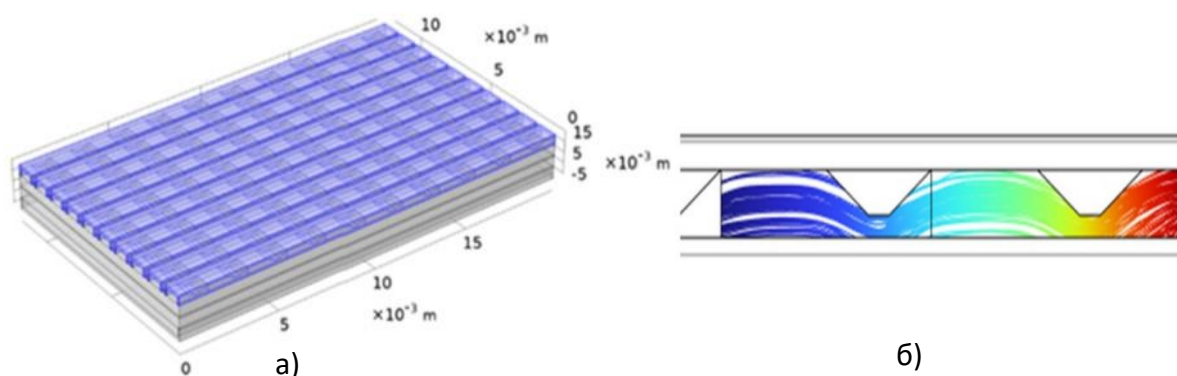
В обхвата на настоящия дисертационен труд са разгледани четири различни конфигурации на поточни канали в PEMFC. При всички варианти изследванията са проведени върху мембранно-електродни пакети (MEA) с идентични размери и материали. Размерите на клетката са ширина 12 mm и дължина 20 mm, като мембраната е протоннообменна с висока йонна проводимост Nafion, подходяща за работа при температури под 100 °C. Газоразпределителният слой е с порьозност 80 % и дебелина 500 μm , а катализаторният слой съдържа платинени микрочастици с диаметър 1 μm . Моделните изследвания са фокусирани върху катодната страна, където се подава въздух и протича реакцията на редукция на кислорода. Този електрохимичен процес е с бавна кинетика и е скоростоопределящ, поради което е обект на изследване за повишаване на ефективността и производителността на водородни горивни клетки [190].

За всички изследвани модели е зададена еднаква масова скорост на входящото течение, с цел сравнение на разпределението на молната концентрация на кислорода в активната зона на клетката, влажността в каналите и мембраната, загубите на налягане за всяка конфигурация и поляризационните криви. Паралелно-серпентинният дизайн на поточни канали представлява хибридна конфигурация, което съчетава предимствата на скоростното поле на течението при паралелен и серпентинен дизайн. Този дизайн включва множество серпентинни канали, подредени паралелно, което позволява по-равномерно разпределение на реагентите и подобро управление на водата в горивната клетка. Паралелно-серпентинният дизайн може да подобри производителността на PEMFC [194]. Установено, че този дизайн осигурява по-добро разпределение на реагентите и по-ефективно отстраняване на водата в сравнение с традиционните конфигурации [195]. Модификации на паралелно-серпентинния дизайн, като включване на прегради или промени в геометрията на каналите, могат да допринесат за по-добро управление на водата и повишена ефективност на горивната клетка [196]. В настоящия дисертационен труд е моделирана конфигурация на течение в серпентина с два паралелни канала, представена на Фиг. IX.1.



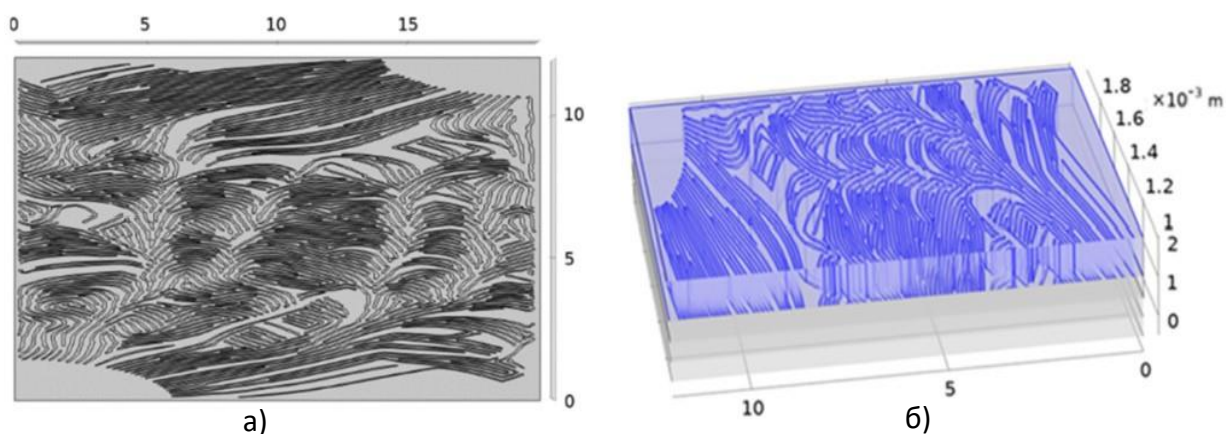
Фиг. IX.1 Паралелно-серпентинен дизайн на поточни канали: а) изглед отгоре; б) триизмерен дизайн

На Фиг. IX.2,а е представена класическа паралелна конфигурация, при която газовите канали са ориентирани в права линия и подредени паралелно един спрямо друг. Този тип геометрия се характеризира с ниско хидравлично съпротивление и минимални загуби на налягане, но има съществени недостатъци по отношение на управлението на водата, особено в крайната част на канала. В съответствие с уравнението на Бернули, понижаването на налягането към изхода води до затруднено изнасяне на водата, което може да причини локално наводняване и неравномерна работа на клетката [199]. За преодоляване на този проблем е представена модифицираната конфигурация с вградени прегради (baffles), разположени по дължината на паралелните канали, представена на Фиг. IX.2,б.



Фиг. IX.2 Схема на канална структура: а) паралелно-поточна канална структура с 10 канала, разположени паралелно, с вградени прегради; б) визуализация на течението в напречно сечение на каналната структура

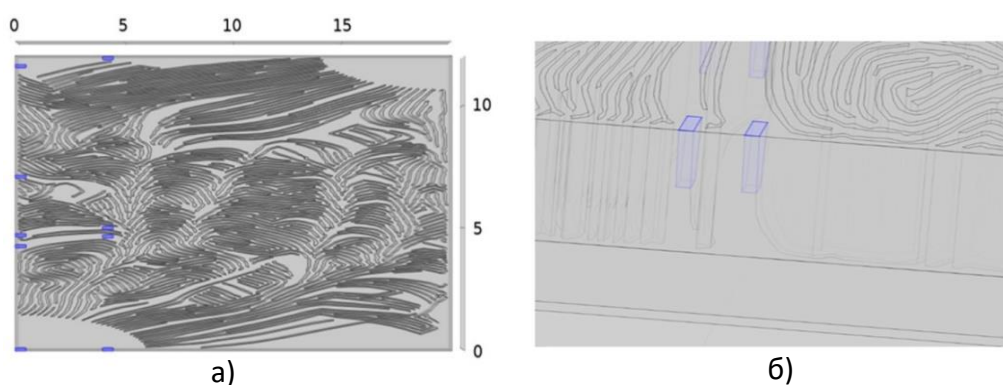
Третият изследван модел представлява нетрадиционна конфигурация на флуидните канали, базирана на Тюринг дизайн, вдъхновен от биологични структури. При този дизайн се създават сложни, но структурирани канали, наподобяващи разпределението на естествени канали, като тези в листа или на кръвоносна система. Целта на този подход е да се постигне равномерно разпределение на реагентите и да се подобри електрохимичната активност в активната зона на горивната клетка [202]. Тюринг дизайнът балансира налягането от входа до изхода на канала, осигурявайки адекватна скорост на течението, като същевременно минимизира съпротивлението в каналите. Този баланс е от съществено значение за ефективното управление на водата и предотвратяване на локално наводняване, което може да влоши производителността на горивната клетка [203]. Визуализацията на този модел, представена на Фиг. IX.3, включва както изглед отгоре, така и триизмерна перспектива, позволявайки детайлен преглед на конфигурацията на каналите.



Фиг. IX.3 Тюринг дизайн на полето на течението: двумерен (а) и триизмерен изглед (б) на разпределението на течението в сечението на канала.

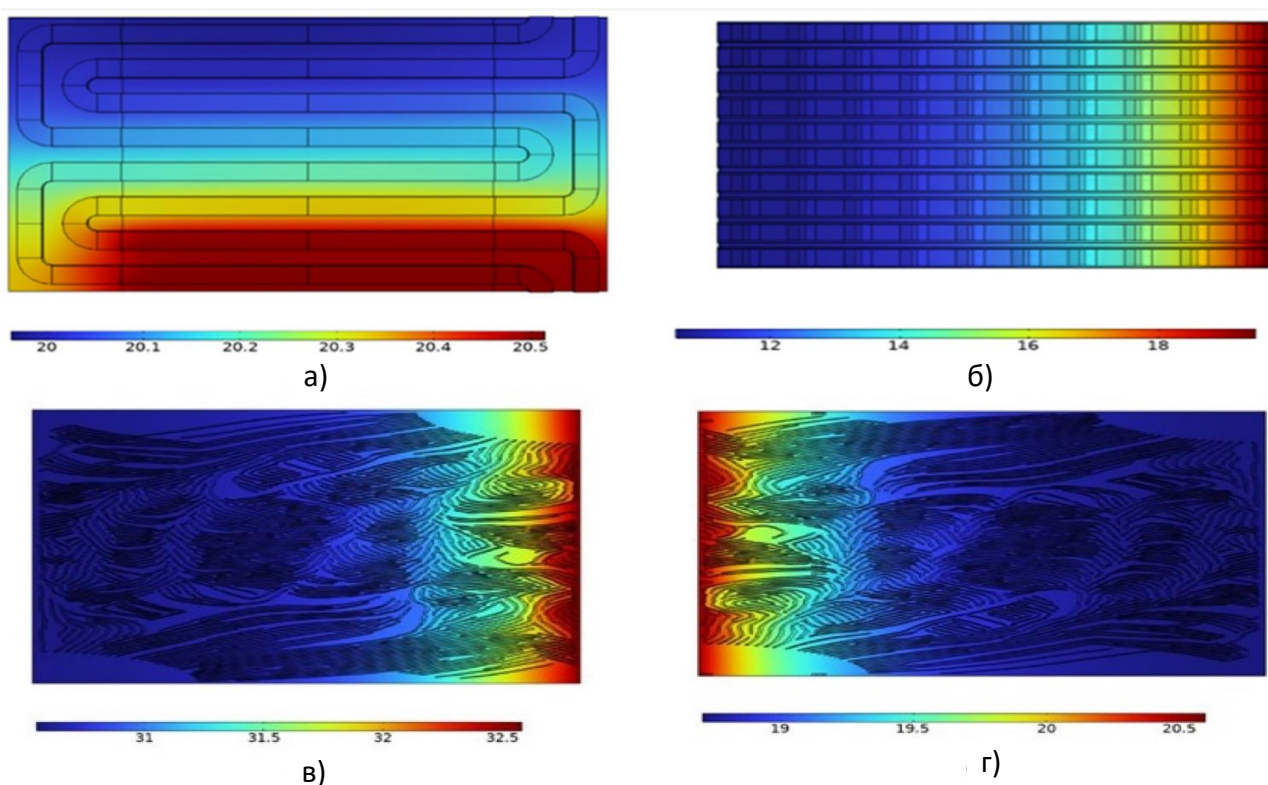
Въпреки че Тюринг дизайнът предлага предимства по отношение на равномерното разпределение на течението и повишената ефективност, той все още среща предизвикателства, свързани с управлението на водата. За да се преодолеят тези ограничения, е разработен иновативен подход представен на Фиг. IX.4., който интегрира

конфигурация с прегради, известна със своята ефективност в управлението на водата, с предимствата в разпределение на течението на Тюринг дизайна.



Фиг.IX.4 Хибриден дизайн с прегради: а) двумерно изображение на полето на течението; б) Триизмерно изображение на полето на течението и на преградите

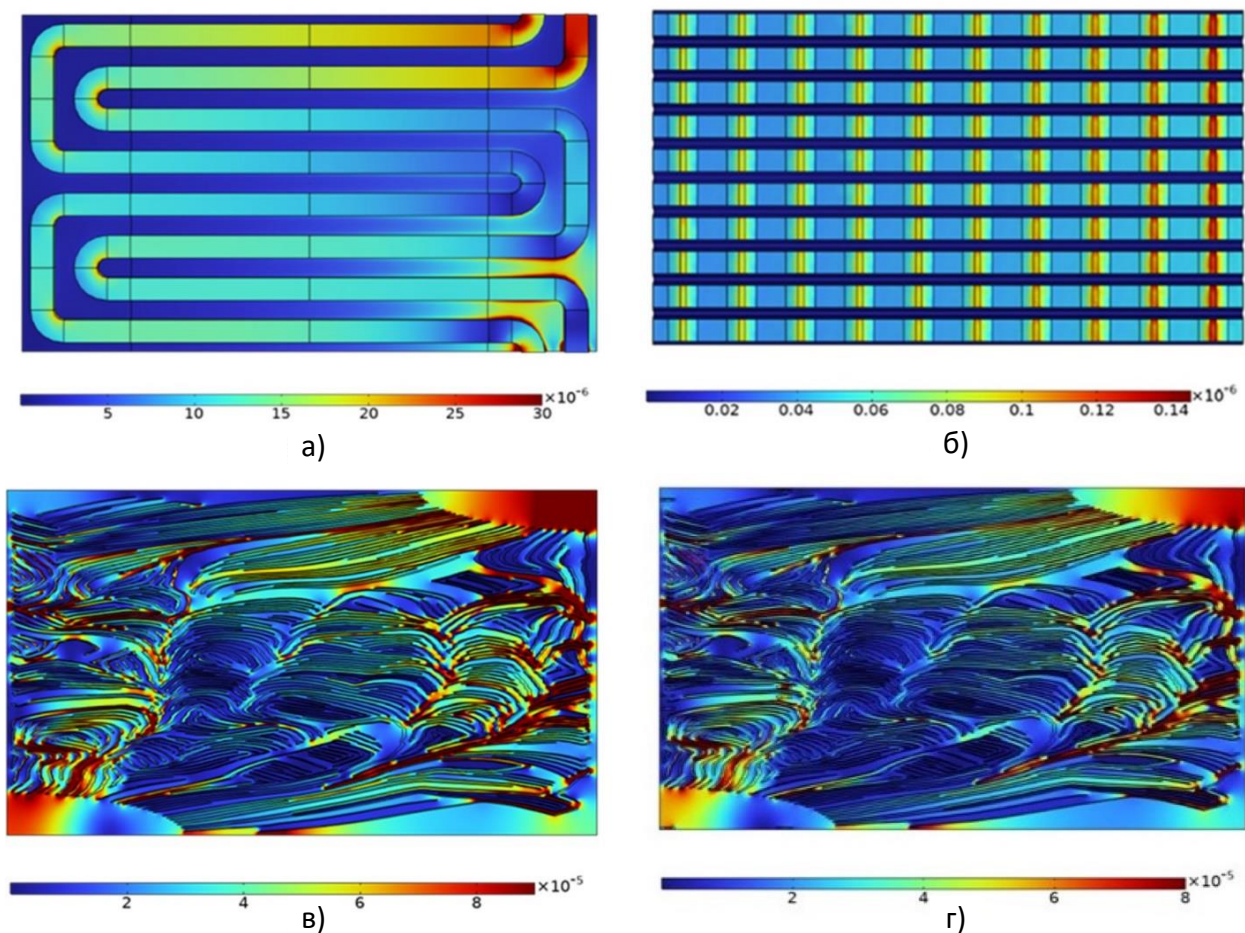
Изследвано е разпределението на молната концентрация на кислорода при четирите различни конфигурации на флуидните канали на PEMHFC – серпентинен, с прегради, Тюринг и хибриден – Фиг.IX.5



Фиг.IX.5. Разпределение на молната фракция на кислород (mol.% O₂) при: а) паралелно-серпентин дизайн (вход от отдолу нагоре); б) дизайн с прегради (вход отдясно наляво); в) Тюринг дизайн (вход отдясно наляво); г) хибриден дизайн (вход отляво надясно).

Въпреки че повишаването на молния дял на кислорода в катодния канал е от съществено значение, то само по себе си не представлява надежден индикатор за оптималната работа на горивната клетка. За по-прецизна оценка на реалната ефективност на масопеноса и реакционната активност, следва да се разгледат не само разпределението на концентрационните полета, но и количеството кислород, който реално достига до единица площ на активната зона за единица време. Кислородното масово течение, нормализирано по активната площ, което е надежден показател за оценка на захранването с реагент и потенциала за генериране на ток, е представено на Фиг. IX.6.

На Фиг. IX.10 са представени поляризационните криви на четирите конфигурации –

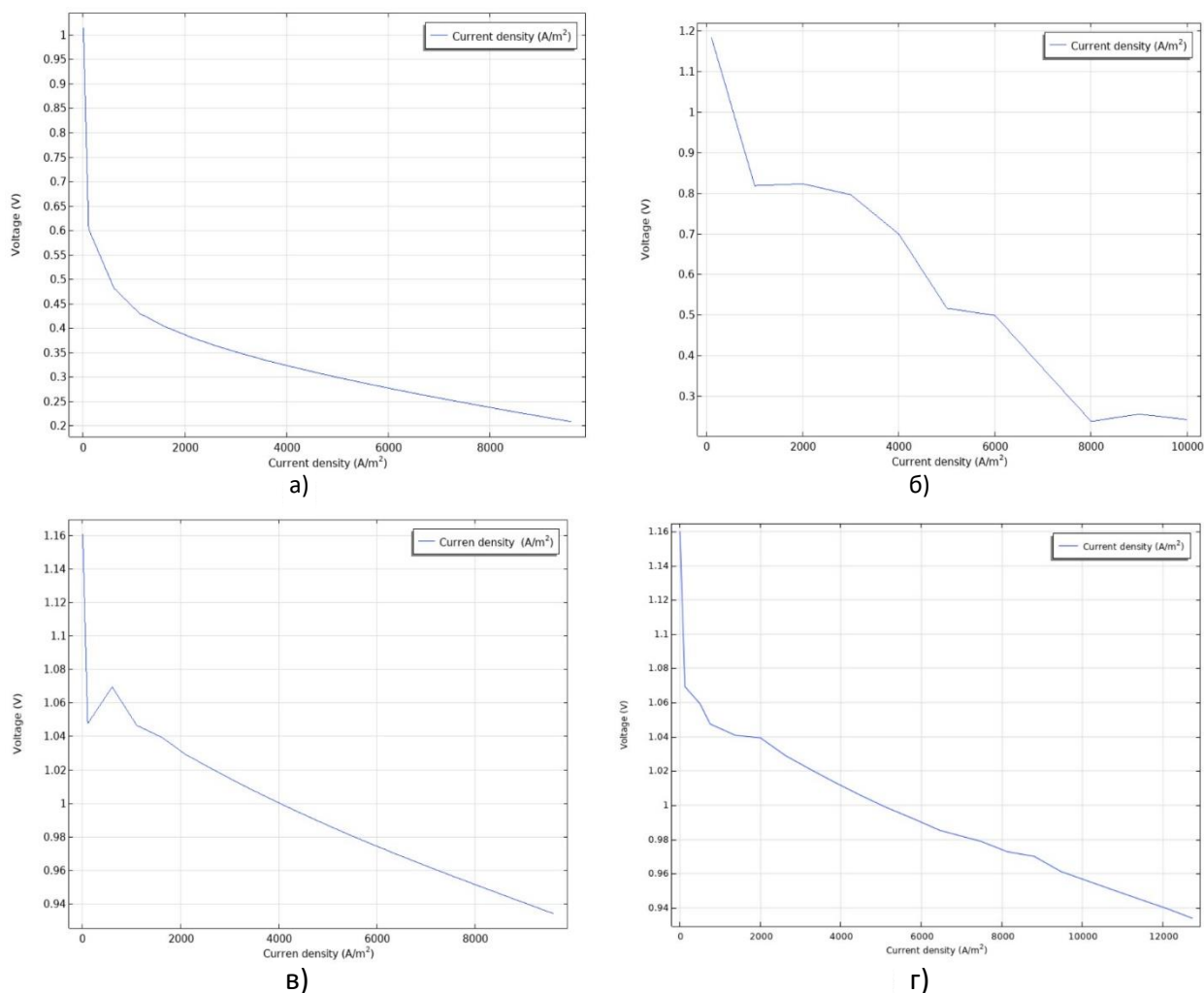


Фиг. IX.6 Разпределение на масовия дебит на кислорода по площ в каналите (kg/s) за следните конструкции: а) паралелно-серпентинен дизайн (вход отгоре надолу); б) дизайн с прегради (вход отдясно наляво); в) Тюринг дизайн (вход отдясно наляво); г) Хибриден модел (вход отдясно наляво)

паралелно-серпентинна, преградна, Тюринг и Хибридна при еднакъв масов дебит на течението на вход от 2.53×10^{-7} kg/s. Установяват се значителни разлики между отделните

моделите в плътността на тока и степента на оползотворяване на реагентите. Сравнителният анализ по отношение на производителността е направен в типичния работен диапазон за PEMFC от 0.6 до 0.8 V, в който обикновено се постига най-висока ефективност. Резултатите за Тюринг и хибридният дизайн показват минимално напрежение от 0.9 V, което показва способността им да поддържат висока плътност на тока в условия на повишено натоварване.

Сред изследваните конфигурации, хибридният дизайн показва най-висока обща производителност, достигайки плътност на тока от 1.2 A/cm² при напрежение от 0.9 V, с изходящ масов дебит въздух от 1.26×10^{-7} kg/s и степен на оползотворяване на кислорода от 50.20 %. Тези стойности показват ефективен баланс между кинетиката на електрохимичните реакции и равномерното разпределение на реагентите. Тюринг



Фиг. IX.10 Поляризациялни криви напрежение (V)-плътност на тока (A/m²) за: а) паралелно-серпентинен ; б) с прегради; в) Тюринг ; д) хибриден дизайн.

конфигурацията показва плътност на тока от 1.0 A/cm², масов дебит от 1.23×10^{-8} kg/s и

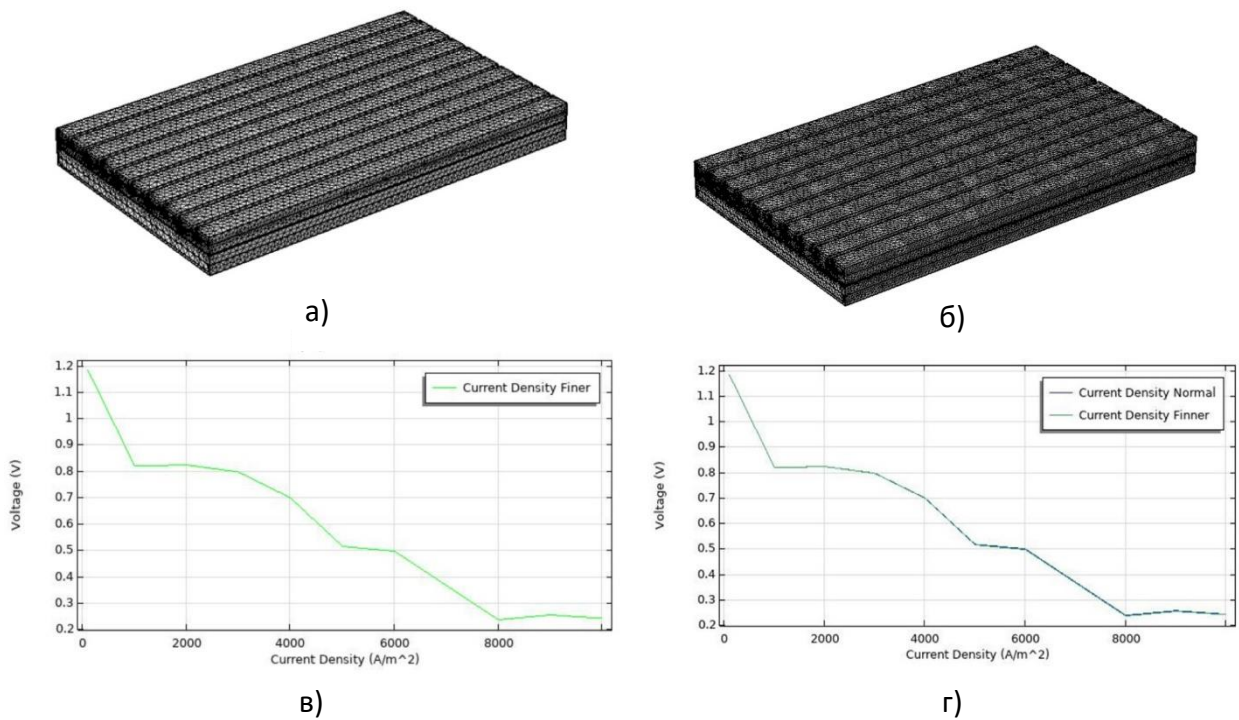
висока степен на оползотворяване на кислорода – 95.14%, което означава ефективно използване на реагентите, въпреки по-ниския ток. Дизайнът с прегради показва по-ниска плътност на тока от 0.4 A/cm^2 и масов дебит от $2.26 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$, като също достига ефективност на използване на кислорода от 91.05 %. Това предполага добър контрол на влагата, но ограничена електрохимична активност. За разлика от тях, серпентинната конфигурация започва да генерира ток при по-ниско напрежение от около 0.6 V , което индикира значителни активационни загуби. При нея се достигат едва 0.5 A/cm^2 при напрежение от 0.35 V и изходен дебит от $3.64 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$, както и оползотворяване на кислорода – 85.61 %. Въпреки че Тюринг конфигурацията показва най-висока степен на оползотворяване на кислорода, това не води автоматично до по-добра електрохимична ефективност при високи мощности. В случая на хибридният дизайн, приблизително 50 % от кислорода се използва ефективно, което води до най-висока плътност на тока при еднаква активна площ. Това показва значението на ефективното управление както на кинетичните процеси, така и на разпределението на реагентите. Хибридният дизайн се отличава с по-добри показатели по отношение на електрохимичната ефективност и управлението на реагентите, като показва най-добри експлоатационни характеристики от изследваните варианти. Конфигурациите на полетата на течението с биологично вдъхновени геометрии осигуряват равномерно разпределение на газовите потоци, с което се намалява пада на налягане, но остава риска от изсушаване или наводняване на мембраната.

Включването на преградна структура в този дизайн допринася за значително за подобряване на управлението на влагата и повишаване на общата ефективност. Тюринг и преградните конфигурации предлагат стабилна, но не максимална производителност, докато паралелно-серпентинният дизайн изостава значително, демонстрирайки важността на полето на течение в оптимизацията на горивните клетки.

IX.1. Изчислителна мрежа и верификация на числените модели

Процесът на дискретизация включва последователност от операции, които определят размерите, разпределението и степента на детайлност на елементите в цялостен и локален мащаб. Докато общите настройки на модела влияят върху цялата изчислителна

област, локалните позволяват по-прецизен контрол в определени зони. Предварително дефинираните мрежови размери варират от „нормален“ до „изключително фин“, като изборът между тях е съобразен с геометричната и физическата сложност на конкретната конфигурация. В рамките на настоящото изследване, за преградните модели и за паралелно-серпентинна геометрия е използвана нормална по дискретизация мрежа, тъй като тя осигурява добър баланс между изчислителна натовареност и точност на резултатите. На Фиг. IX.11 е представена изчислителната мрежовата структура за модела с прегради, като са съпоставени нормална (Фиг. IX.11а) и фина (Фиг. IX.11б) изчислителна мрежа с цел оценка на влиянието на гъстотата на мрежата.



Фиг. IX.11 Изчислителна мрежа за дизайна с прегради: а) нормална; б) фина; в) поляризационна крива за фина мрежа; г) сравнение на поляризационните криви при нормална и фина мрежа.

ГЛАВА X. Изводи

Въз основа на резултатите от проведените изследвания в дисертационния труд могат да бъдат направени следните изводи:

Чрез математическо моделиране е изследвана електродна конфигурация на алкален електролизьор с перфорирана структура и увеличена дебелина, чрез която се постига над 50 % намаляване на обема на електролизьора при запазване на производителността на водород. В съпоставка с класическия електролизьор от 110 cm³, перфорираният модел е със същата активна повърхност на електродите (365 cm²), но с почти двойно по-малък обем (52.5 cm³) със съизмеримо производство на водород – 1.32 l/min при 2.1 V. Резултатите показват над 52 % повишаване на производителността за единица обем;

Валидирана е изчислителна мрежа на специализиран софтуер, чрез която е изследвано влиянието на електродната геометрия на алкални електролизьори върху скоростта на формиране на газови мехурчета с цел намаляване на омичните загуби на електролизната клетка. Софтуерно изчислената максимална мощност на алкален електролизьор с перфориран електрод е 102 kW при 1298 A, което съответства на технологично реалистични стойности, като значително повишаване на плътността на тока и ефективността при същата активна площ.

Изследвана е възможността за директно свързване на електролизьора към PV система източник с променлива мощност, като симулационното изследване потвърждава възможност за синхронизиране на работните характеристики на системите за осигуряване на устойчивост на производителността на електролизьора при динамика в мощността на фотоволтаичната система. Това доказва възможността за ефективно производство на водород чрез електролиза на вода при хранване с възобновяеми енергийни източници.

Проведени са симулационни изследвания на различни конфигурации на канални структури в протонообменни мембранни в горивни клетки: класически серпентинен, биоинспириран Тюринг дизайн, конфигурацията с прегради и е предложен нов хибриден

дизайн, обединяващ предимствата на Тюринг и преградният дизайн. Проведените сравнителни изследвания показват, че предложеният хибриден дизайн показва най-добра ефективност, с плътност тока 1.2 A/cm^2 и 50.2 % ефективност на използване на кислород, в съпоставка с класическият дизайн с плътност на тока при същите параметри от 0.3 A/cm^2 .

Създадени са и са валидирани изчислителни модели за описание на електродните конфигурации на алкални електролизьори и на каналните структури на горивни клетки, като проведеното изследване показва, че численото моделиране в среда на COMSOL предоставя надежден инструмент за софтуерно-базирано проектиране и оптимизация на електролизни и на горивни клетки.

Съпоставката с реални данни и валидирането на резултатите показват, че софтуерно проектирани конфигурации на алкален електролизьор с перфорирани електроди и на протонообменна горивна клетка с хибриден дизайн на полето на течение са с реален потенциал за приложение.

Анализът показва необходимост от технологични компромиси при алтернативните конфигурации, като общ анод и общ катод, които осигуряват по-добро охлаждане, пониски електрични загуби и организирано отделяне на газовете, но дават значителни отклонения в реалната от проектната мощност.

НАУЧНО-ПРИЛОЖНИ И ПРИЛОЖНИ ПРИНОСИ

Научно - приложни приноси

Предложена е и е изследвана нова електродна конфигурация с перфорирани отвори и е доказан потенциал за миниатюризация на системи за алкална електролиза с постигане на по-голяма ефективната активна повърхност и по-висока скорост на електрохимичната реакция.

Изградена е и е валидирана изчислителна процедура на електродни повърхности и реакционни зони на алкални електролизьори като основа за симулационно-базирано проектиране и мащабиране на електролизни системи.

Предложена и изследвана е нова хибридна геометрия от типа Тюринг дизайн с прегради за повишаване на енергийната ефективност на горивни клетки с протонообменни мембрани. Чрез моделни изследвания е доказано значението на хибридната конфигурация за минимизиране на омичните загуби чрез разпределението на реагентните потоци и ефективното отвеждане на водата като реакционен продукт за устойчивото функциониране на горивната клетка.

Изградена е и е валидирана изчислителна процедура на протонномембранни горивни клетки, която позволява симулационно-базирано проектиране на различни конфигурации и оптимизиране на режимни параметри.

Приложни приноси

Предложен е подход за директно интегриране на алкален електролизьор с фотоволтаична система при синхронизиране на работните им характеристики и чрез конфигуриране на броя на паралелно и серийно свързаните клетки за постигане на максимално ефективно производство на зелен водород.

СПИСЪК НА ПУБЛИКАЦИИТЕ ПО ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Публикации в реферирани издания с импакт фактор и импакт ранг

Multi-objective optimization of high-temperature PEMFC considering gas distribution quality via surrogate models,

Caizhi Zhang, Xu Cao, Shutong Deng, Xin Gao, Dilyan Gavrailov, Lang Cai, Fuli Li, Peng Liu,

Applied Thermal Engineering,

Volume 269, Part B,

2025, 126108, ISSN 1359-4311,

<https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2025.126108>.

Impact Factor (IF) 6.9, квантил: Q1

Comparative Studies of Three-Dimensional Complex Flow Field Designs in a Proton Exchange Membrane Hydrogen Fuel Cell

D Y Gavrailov and S V Boycheva, Energies 2025, 18(9), 2165 Impact Factor (IF) 3.2 , квантил: Q1; <https://doi.org/10.3390/en18092165>

Публикации в реферирани издания с импакт ранг

Study assessment of water electrolysis systems for green production of pure hydrogen and natural gas blending

D Y Gavrailov and S V Boycheva

Published under licence by IOP Publishing Ltd
[IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, Volume 1234, Innovations in Energy and Environment - InnoEE 2023 17/05/2023 - 19/05/2023 Sofia, Bulgaria](#)

A direct coupled photovoltaic - electrolyser system for producing green hydrogen D Y Gavrailov, S V Boycheva and Xin Gao

Published under licence by IOP Publishing Ltd
[IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, Volume 1380, 29th Conference of the Faculty of Power Engineering and Power Machines: Innovations in Energy and Environment 2024 14/05/2024 - 15/05/2024 Sofia, Bulgaria](#)

Improved Alkaline Electrode Configuration and CFD Modeling Comparison between Different Electrolysers

D. Gavrailov, N. Ibrahim and S. Boycheva, *5th International Conference on Communications, Information, Electronic and Energy Systems (CIEES)*, Veliko Tarnovo, Bulgaria, 2024, pp. 1-6, doi: 10.1109/CIEES62939.2024.10811289.

SUMMARY

This doctoral thesis develops and validates advanced mathematical and CFD models to optimize electrode structures in electrolyzers and flow field designs in PEM fuel cells, targeting reduced losses and enhanced electrochemical performance. The results demonstrate that optimized geometries significantly improve efficiency, compactness, and reactant utilization. Furthermore, the study confirms the technical feasibility and energy benefits of directly coupling photovoltaic systems with electrolyzers for efficient and sustainable green hydrogen production. The proposed designs show strong potential for practical implementation in modern hydrogen energy systems. In addition, the validated modeling approach provides a reliable framework for future design, scaling, and optimization of integrated hydrogen technologies. The findings contribute to the development of cost-effective and energy-efficient solutions aligned with the goals of decarbonization and renewable energy integration. Moreover, the research supports the advancement of hydrogen as a key energy carrier in next-generation sustainable energy systems.