

备注：不含图的文字页要求每页行数不小于 30 行，如果有软件截图，软件截图中出现的标题要与登记表、说明书和源码中一致。

- 5 文档 :指用自然语言或者形式化语言所编写文字资料和图表，用来描述程序的内容、组成、设计、功能规格、开发情况、测试结果及使用方法，如程序设计说明书、流程图、用户手册等。

可逆运行的固体氧化物燃料电池有限元

多物理场仿真系统

使 用 说 明

15

20

西安交通大学
二零二零年六月

1. 系统概述

可逆运行的固体氧化物燃料电池有限元多物理场仿真系统采用有限元分析的方法，基于开源 Python 软件包 Sfepy 进行仿真计算。SfePy 是一款用有限元方法求解耦合偏微分方程（PDE）系统的构建自定义应用程序的 Python 包，可以快速地对复杂的 FEM 问题进行编码。该系统适用于气体流量控制和负载控制下的可逆固体氧化物燃料电池的多物理场耦合的电化学仿真，主要用来实现对电堆气体流速，以及电堆中电流、电压和温度的仿真和处理分析，将电堆的性能反应出来。使用 Flask 和 Bootstrap4 进行用户交互界面的实现，使其可以部署在服务器上运行，为用户提供一个可变参数的入口气体和负载可控的燃料电池电堆电化
学仿真与设计平台。

软件的主要模块有：参数输入模块、气体和负载控制模块、有限元计算模块和计算结果文件输出模块、计算结果后处理模块、界面设计和使用帮助等。各模块之间的数据传递通过数据流和子程序的结合完成。

运行在 Windows 7/SERVER 简体中文版及以上、Linux 或 macOS 10.12+ 的 PC 或服务器上，服务器硬件要求内存 1G、硬盘 20G 以上。运行环境为 C 编译器, Python3.6+, NumPy, Sfepy, vtk, Mayavi, Flask 和 Bootstrap4。

2. 功能介绍

有限元法简介

有限元法 (FEM) 是解决工程问题的最常用的方法的数学方法。典型问题领域包括结构分析 , 传热 , 流体流动 , 传质和电磁势等传统领域。有限元法是一种特殊的数值方法 , 用于求解两个或三个空间变量 (即某些边值问题) 中的偏微分方程。为了解决问题 , FEM 将大型系统细分为更小 , 更简单的部分 , 称为有限元。这是通过在空间维度上进行特定的空间离散化来实现的 , 该离散化是通过构造对象的网格实现的 : 解决方案的数值域具有有限数量的点。边值问题的有限元方法公式化最终形成了一个代数方程组。该方法在域上近似 函数。然后 , 将对这些有限元建模的简单方程式组合成一个对整个问题进行建模的较大方程式系 10 统。然后 , FEM 通过最小化关联的误差函数 , 使用来自变分形式的变分方法来近似求解。

可逆固体氧化物燃料电池电堆单元多物理场模型

对于固体氧化物燃料电池 (SOFC) 模式 , 氧气流入氧气通道并扩散到多孔 15 氧电极中 , 其中氧分子与来自外部电路的电子结合 , 并形成氧离子。氧离子通过致密电解质迁移到氢电极。在氢气侧 , 蒸汽和氢气流入氢气通道。然后氢扩散到多孔氢电极中 , 其中氢分子与来自氧电极的氧离子结合 , 并形成蒸汽并释放电子。然后电子通过外部电路从氢电极传输到氧电极 , 产生电力。当大于 SOFC 的开路 20 电位的外部电压施加到电池时 , 电池的 SOFC 模式切换到固体氧化物燃料 (SOEC) 模式。在这种情况下 , 内部运输和电化学反应将逆转。具体地 , 多孔氢电极处的蒸汽通过来自外部电路的电子供应分成氢分子和氧离子。然后氧离子通过致密电解质迁移到氧电极 , 然后氧离子形成氧分子并释放电子。然后电子通过外部电路从氧电极传输到氢电极。在此过程中 , 产生氢气和氧气并消耗电力。

描述在 SOFC 模式和 SOEC 模式下操作的固体氧化物电池内的传输和电化学过程

的相应数学模型及各模块耦合关系 , 如图 1 所示

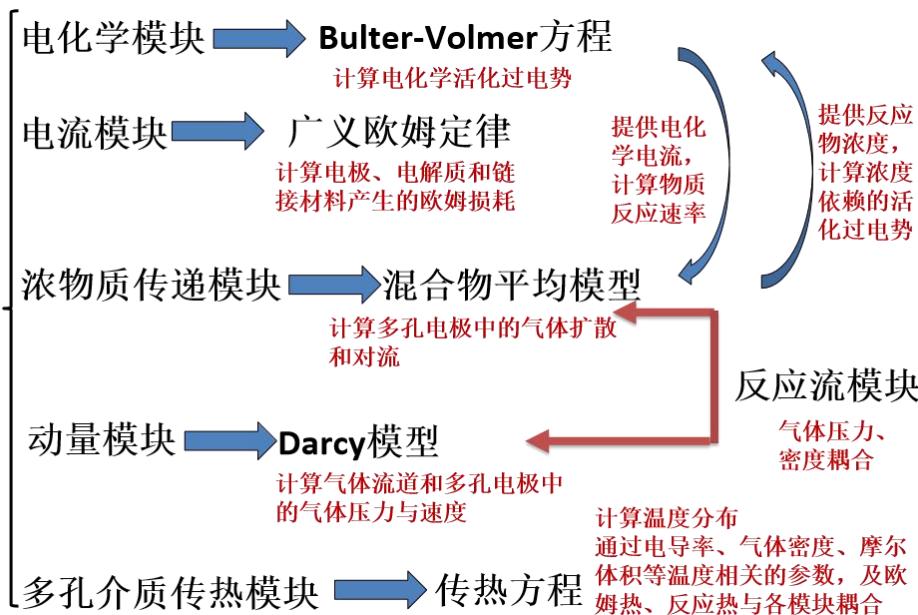


图 1 多物理场模型各模块耦合关系

5 软件总体功能结构

软件各标签页界面如图 2 到图 6 所示。在服务器上使用 Flask 运行后端 python 程序 , 前端使用 Bootstraps4 , 采用响应式界面设计 , 自动识别分辨率给出不同的界面 , 客户端可以使用电脑和移动设备进行数据输入并提交计算命令 , 最后下载数据 , 软件还给出了相关的软件介绍和作者信息。

“主页” 标签如图 2 所示 , 介绍了软件的概述 , 技术特点 , 以及致谢部分。顶端为导航栏 , 分别导航到 “主页” 、“有限元程序” 、“查看文档” 和 “联系我们” 四个标签 , 并通过按钮 “运行程序” 链接到软件的 “有限元程序” 标签 , “使用帮助” 链接到软件的 “查看文档” 标签 , “联系我们” 链接到软件的联系我们标签。当分辨率较小时 , 导航栏会折叠起来 , 通过右上角按钮展开。

The screenshot displays the RSOCFem software interface. On the left, a window titled 'System Overview' contains a brief description of the software's purpose and features, mentioning its use for simulation and analysis of SOFCs under reversible operating conditions. It includes a 'Run Program' button at the bottom. On the right, another window titled 'Run Program' shows a menu with options like 'Home', 'Finite Element Analysis', 'View Document', 'Contact Us', and a prominent blue 'Run Program' button.

The screenshot shows the RSOCFem homepage. At the top, there's a navigation bar with 'RSOFCFem' and links to '主页' (Home), '有限元程序' (Finite Element Program), '查看文档' (View Document), and '联系我们' (Contact Us). A blue button labeled '运行程序' (Run Program) is prominent. The main content area has a title '可逆运行的固体氧化物燃料电池有限元多物理场仿真系统' (Reversible Operation of Solid Oxide Fuel Cell Finite Element Multi-Physics Field Simulation System). Below it is a detailed description of the system's features and its application in research and development. There are also sections for '技术特点' (Technical Features), '致谢' (Acknowledgments), and '联系我们' (Contact Us). A '使用帮助' (Help) link is at the bottom.

© 西安交通大学 2020

© 西安交通大学 2020

图 2 主页标签预览图

“有限元程序” 标签如图 3 所示，主要实现模型参数输入、计算设置

和计算命令提交。给出了模型的网格设置预览图，通过滑块实现对模型参数的调节，并实时显示参数当前的设定值。分别可以通过滑块对电池的参数和运行条件包括电池电压、温度、连接体热导率、电极热导率、电解质热导率、氢气摩尔分数、燃料气入口压力、氧气摩尔分数、空气入口压力、连接体电导率、电子电导率和离子电导率的值进行设置。还可以调整结算结果输出的格式，用单项选择框进行选择，有“vtk”和“h5”两种格式。

最后点击“进行计算”提交运行命令，通过 post 将数据提交给“计算结果”标签进行处理。

The screenshot shows the 'Finite Element Program' tab. It includes a section for '三维模型参数' (3D Model Parameters) with sliders for '电池电压' (Battery Voltage) set to 1.1V, '温度' (Temperature) set to 800°C, and '连接体热导率' (Interconnect Thermal Conductivity) set to 60°C/m. To the right, there's a '计算结果格式' (Calculation Result Format) section with radio buttons for 'vtk' (selected) and 'h5'. A large blue button labeled '进行计算' (Perform Calculation) is at the bottom right.

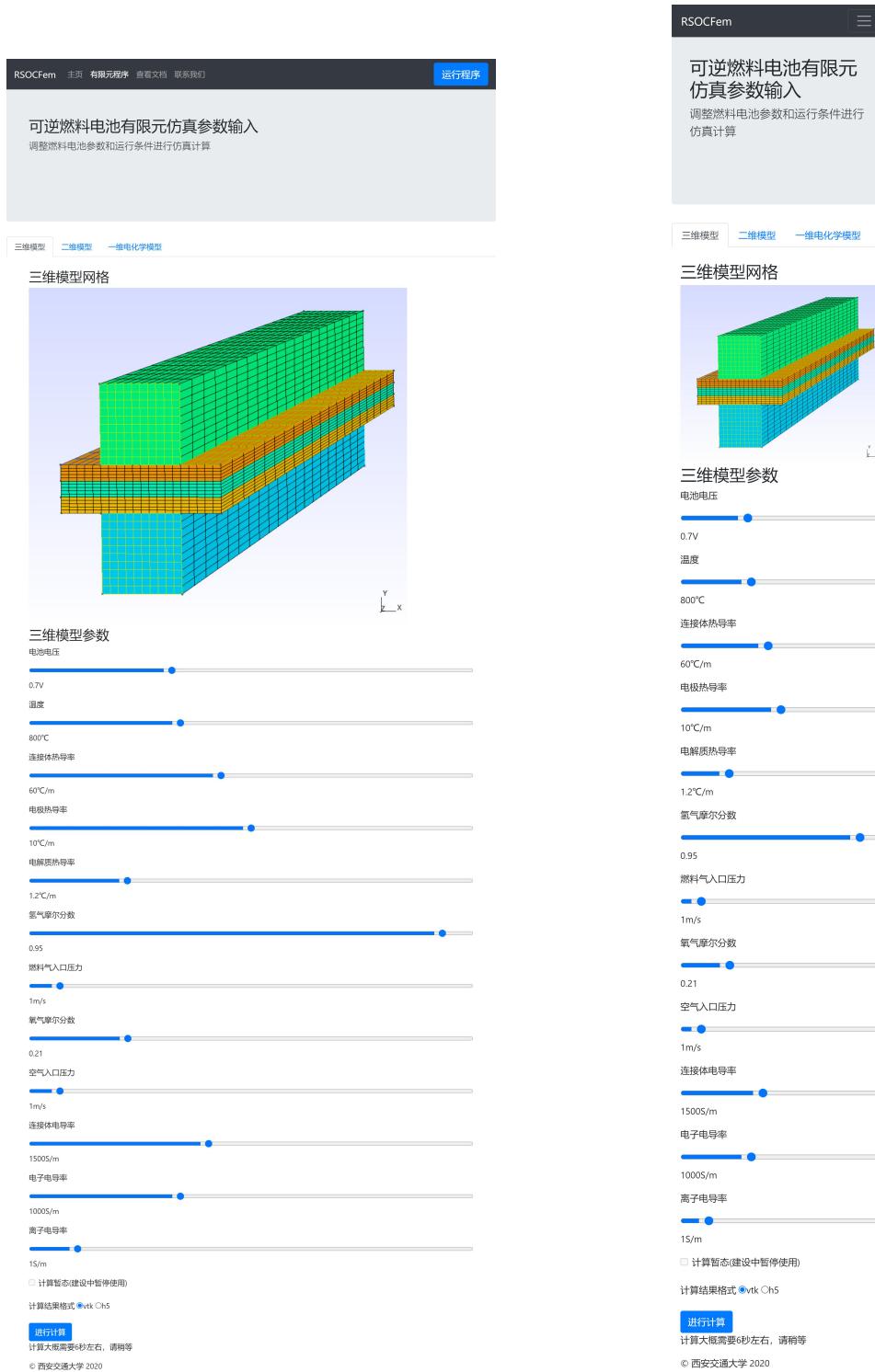


图 3 有限元程序标签预览图

“计算结果”标签如图 4 所示，接收“有限元程序”标签中点击进行计算后的 post 数据，通过后台调用 python 编写的有限元计算程序，并将 request 作为参数传入有限元计算程序进行稳态计算，等待后台有限元计算程序运行完毕之后，调用数据处理程序，最后将处理完成的结果预览图和数据结果文件作为参数传入“计算结果”标签页。从“有限元程序”标签中读取的输入参数展示在“计算结

果”标签中供检查和参考用，结果预览图分别给出了电池温度、燃料电极氢气浓度分布、燃料电极水蒸气浓度分布、空气电极氮气浓度分布、空气电极氧气浓度分布、燃料气道压力分布、空气气道压力分布、电解质离子电势分布、燃料极电子电势分布和空气极电子电势分布。数据结果可以在客户端上下载，分为.vtk 和.h5 两种格式，分别可以通过开源软件 ParaView 和免费软件 HDFView 进行结果的后处理。后处理方法在后面进行介绍。

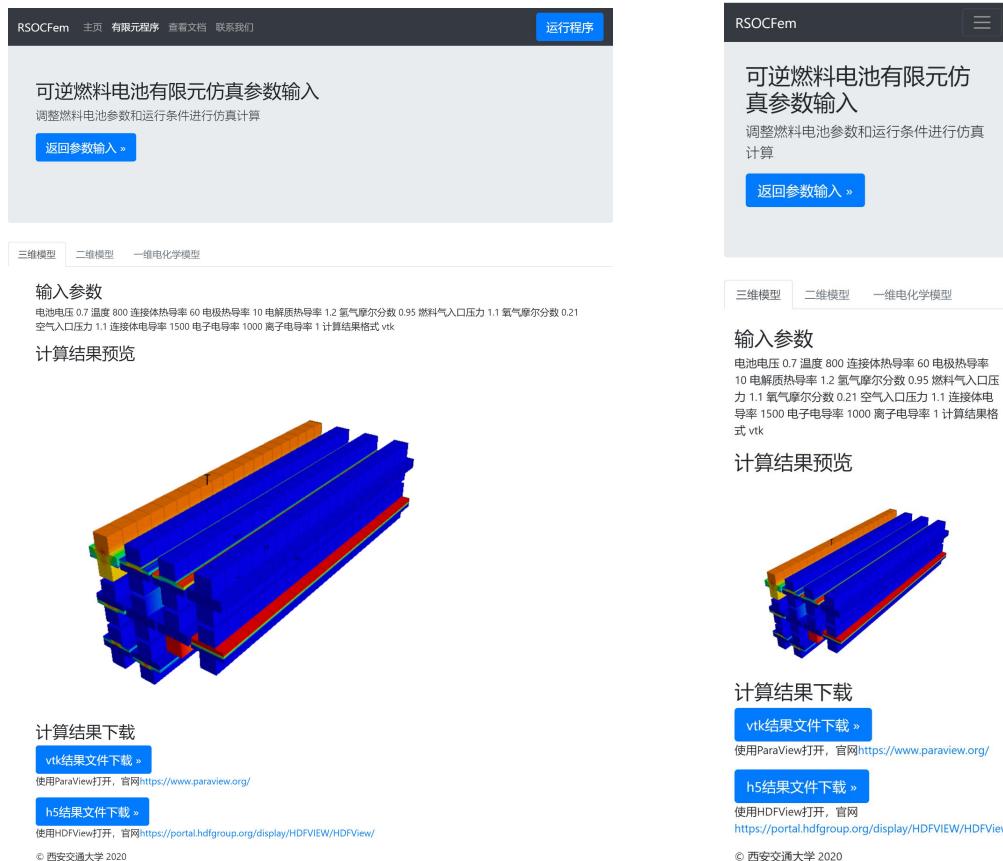


图 4 计算结果标签预览图

“查看文档”标签如图 5 所示，介绍了本软件使用的可逆固体氧化物燃料电池电堆单元多物理场模型的原理和结构，和其数学模型的各个模块，最后以框图的形式展示了各个物理场的数学模型之间存在的耦合关系。



5

图 5 查看文档标签预览图

“联系我们”标签如图 6 所示，给出了软件单位和作者的相关信息，方便解决用户在软件的使用中遇到的问题。



图 6 联系我们标签预览图

软件计算结果的后处理

软件计算结果可以保存为 vtk 和 h5 两种格式。

其中 vtk 文件可以用 ParaView 进行后处理 ,ParaView 是开源的多平台软件 ,
 5 支持 Windows、 MacOS 和 Linux 操作系统 , 这里使用 ParaView 5.8 Windows 版
 本进行演示。运行 ParaView 软件 , 在 Paraview 中打开我们在 “计算结果” 标签
 页下载的 3dcell.vtk 文件 , 点击文件名左边的小眼睛图标进行预览。在 Coloring
 菜单里可以选择要处理的变量 , 包括电池温度 T 、燃料电极氢气浓度分布 c_h2a 、
 燃料电极水蒸气浓度分布 c_h2oa 、空气电极氮气浓度分布 c_n2c 、空气电极氧气
 10 浓度分布 c_o2c 、燃料气道压力分布 p1 、空气气道压力分布 p2 、电解质离子电
 势分布 phil 、燃料极电子电势分布 phis1 和空气极电子电势分布 phis3 。

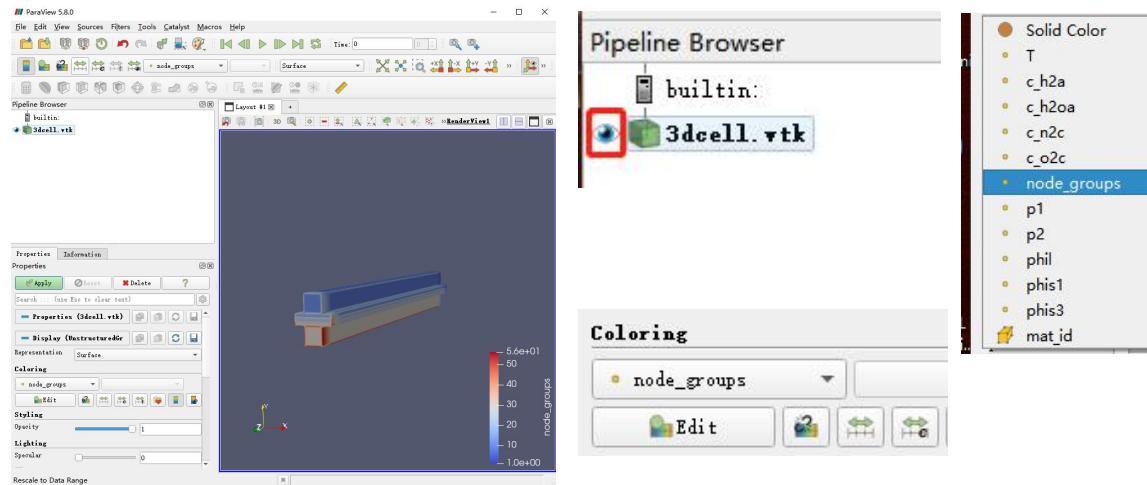
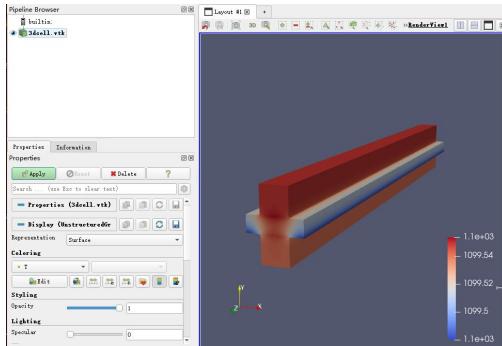


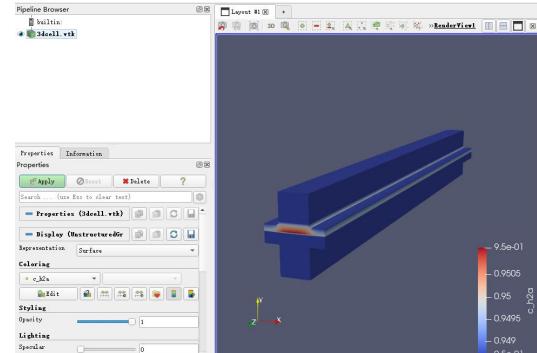
图 7 ParaView 软件打开 3dcell.vtk 数据文件

15 计算结果中各个物理量的值在电池几何中的分布三维交互式的展示在右侧
 绘图区域 , 如图 8 所示。可以通过 ParaView 软件实现旋转、放大和平移的操作 ,
 还可以展示和隐藏网格和坐标轴 , 以及改变色条的颜色和取值范围。从而直观的
 显示计算结果 , 便于观察和分析可逆固体氧化物燃料电池堆中的物理量的几何分
 布 , 从而加深对物理过程的理解 , 找出电池设计的薄弱点 , 为电池几何结构设计

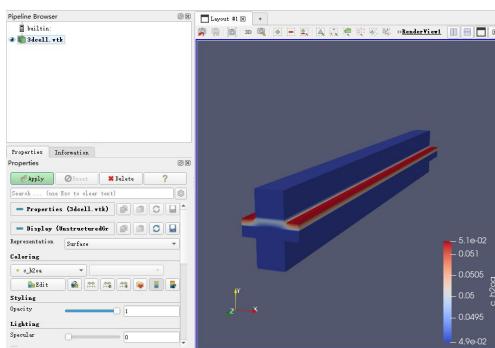
和参数优化提供参考。



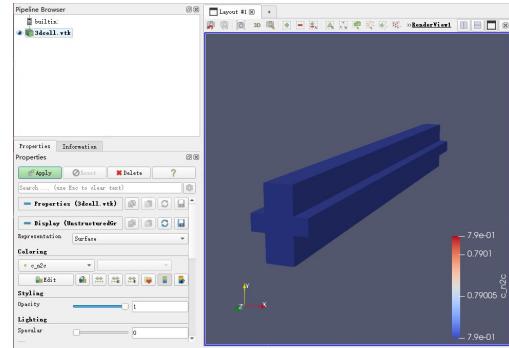
温度分布



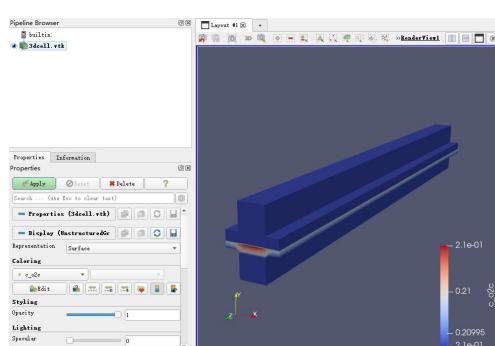
燃料电极氢气浓度分布



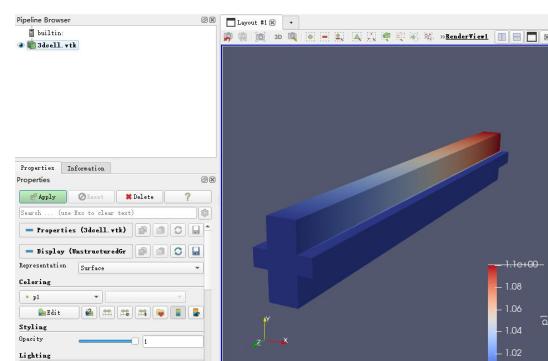
燃料电极水蒸气浓度分布



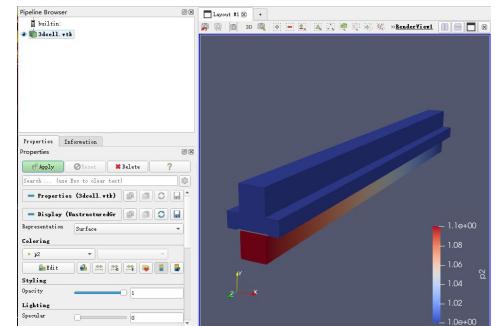
空气电极氮气浓度分布



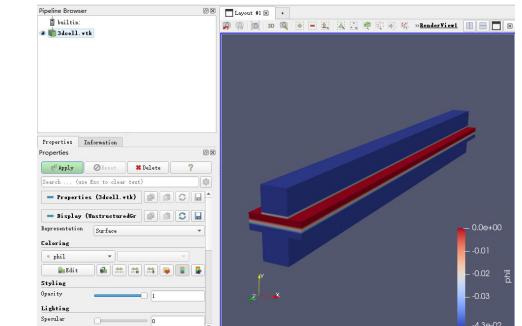
空气电极氧气浓度分布



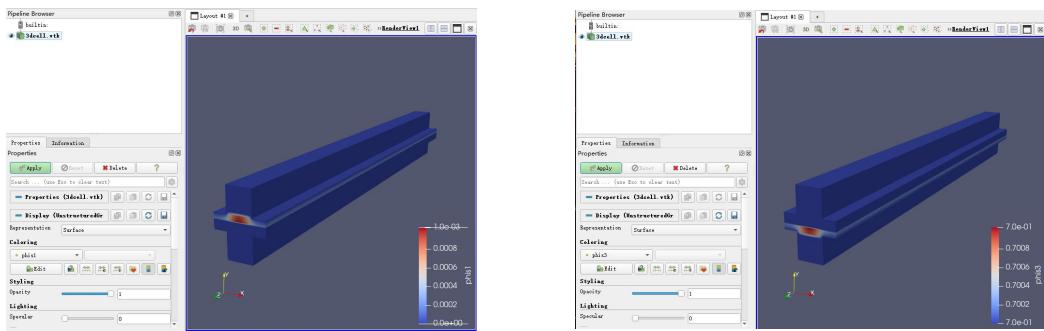
燃料气道压力分布 p1



空气气道压力分布 p2



电解质离子电势分布



燃料极电子电势分布

空气极电子电势分布

图 8 ParaView 实现 vtk 格式计算结果各物理量的后处理

h5 文件可以使用 HDFView 进行后处理，这里使用 HDFView-3.1.1 版本进行演示。运行 HDFView 软件，打开 3dcell.h5 文件，如图 9 所示。可以通过该软件读取计算结果，可以得到网格各个坐标点的坐标数据、各物理量(电池温度 T、
5 燃料电极氢气浓度分布 c_h2a、燃料电极水蒸气浓度分布 c_h2oa、空气电极氮气
浓度分布 c_n2c、空气电极氧气浓度分布 c_o2c、燃料气道压力分布 p1、空气气
道压力分布 p2、电解质离子电势分布 phil、燃料极电子电势分布 phis1 和空气极
电子电势分布 phis3)在网格各个坐标点对应的值、物理量的形状、名称和自由度
等信息，并且可以绘制二维的预览图和进行数据导入导出操作。同时 h5 格式也
10 可以通过 h5py 包与 python 程序的变量互通，转换为 python 变量进行进一步分析
和后处理。

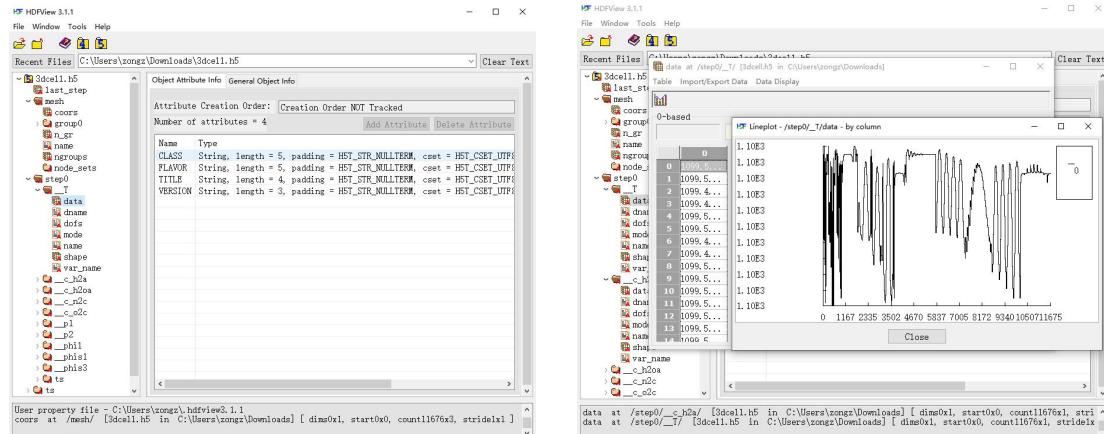


图 9 HDFView 实现 h5 格式计算结果各物理量的后处理

3. 安装与维护

本软件由一个工作项目空间包括 Flask 搭建的后端服务器、Python 编写的有限元计算程序和 Bootstraps 搭建的前端用户接口，共包含 11 个 Python 程序文件
5 和 5 个 html 文件。

本软件采用 python 程序设计编制，用户使用时，需要在服务器或者本地安装，Linux、MacOS 和 Windows 系统均可安装，首先需要安装 Vtk 在 vtk 官网
<https://vtk.org/> 上下载相应的安装包。然后需要配置 Python 运行环境，推荐
使用 Anaconda 或者 Minicoda 进行环境配置，需要依次安装 Sfepy ,Vtk ,Mayavi ,
10 Imageio 和 Flask 包。最后在服务器上后台运行 Python 主程序 main.py 启动服务
器。客户端可以使用带有浏览器功能的 PC 和智能手机

如果要对源程序作修改或者功能扩充，则需要在前端的 html 文件中构建对
相应的用户界面，并修改后端 Flask 路由程序和有限元相关功能实现 python 程序。

软件的后处理工作可以通过 Paraview 将仿真结果的 vtk 数据进行三维显示，
15 或者使用 HDFView 提取数据进一步后处理。