



# **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 CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, 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 CO<sub>2</sub>, 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 CO<sub>2</sub>, 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 ( $\Delta G$ ) 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  $2 \text{ A/cm}^2$ , постигат производителност на  $\text{H}_2$  от около  $8.4 \text{ Nm}^3 \text{ H}_2 / \text{m}^2$ , докато при AWE, работещи при  $0.45 \text{ A/cm}^2$ , 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**

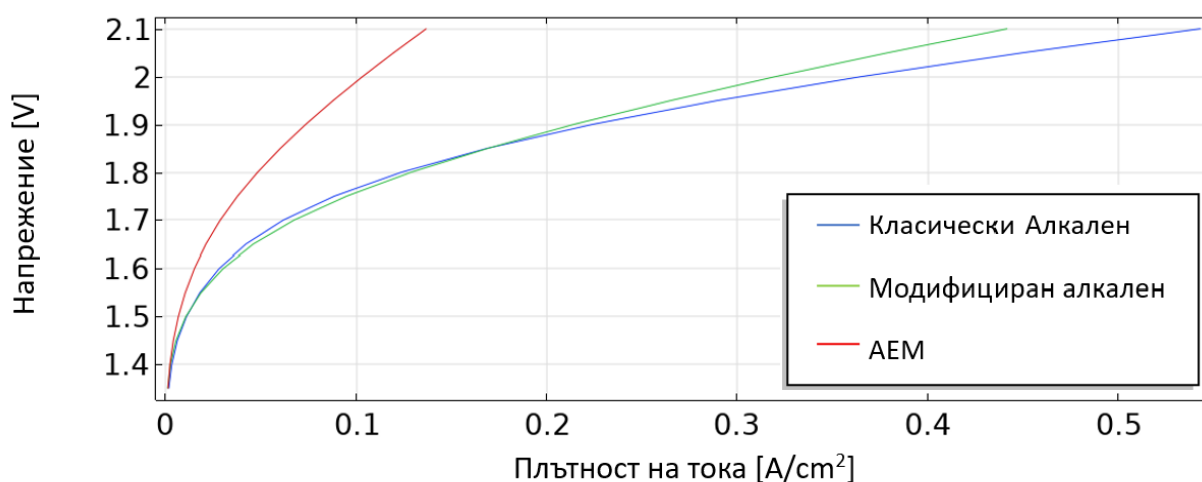
Моделът за двуфазно течение с мехурчета е опростен вариант на двуфлуидния подход Ойлер - Лагранж, при който се проследява разпределението на диспергирана газовата фаза в непрекъснатата течна среда. Движението на газовите мехурчета се определя от градиента на налягане и вискозното съпротивление, породено 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



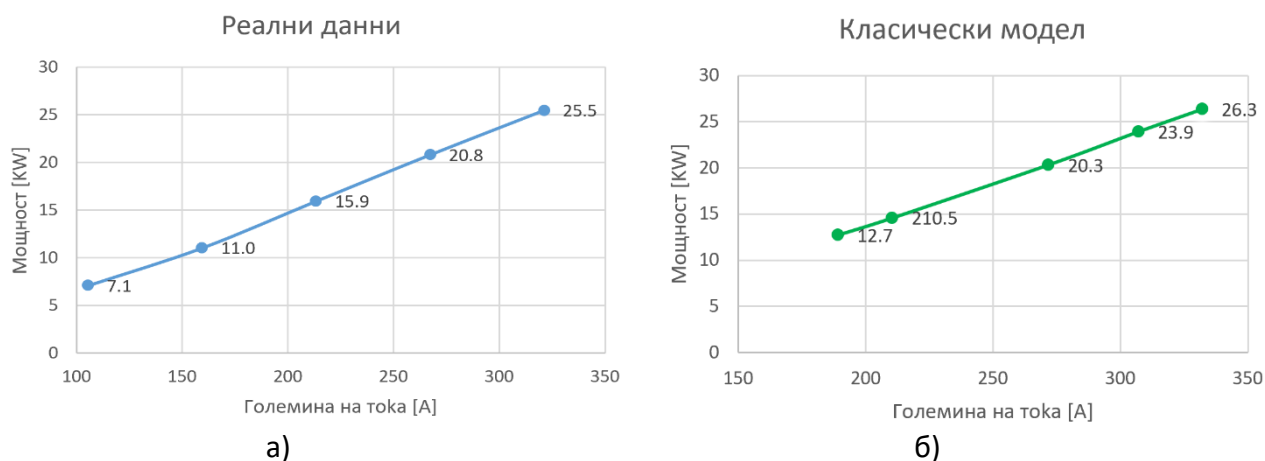
Фиг. IV.3. Поляризационни криви на трите изследвани модела на електролизни клетки електрохимичните реакции без повишаване на активационните или омичните загуби. Постига се същото производство на водород, както при класическия електролизатор, при над 50 % по-малък обем на клетката. По-голямата дебелина 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 електролизьор са използвани работни характеристики на реален алкален електролизьор с биполярна конфигурация. Електролизьорът 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

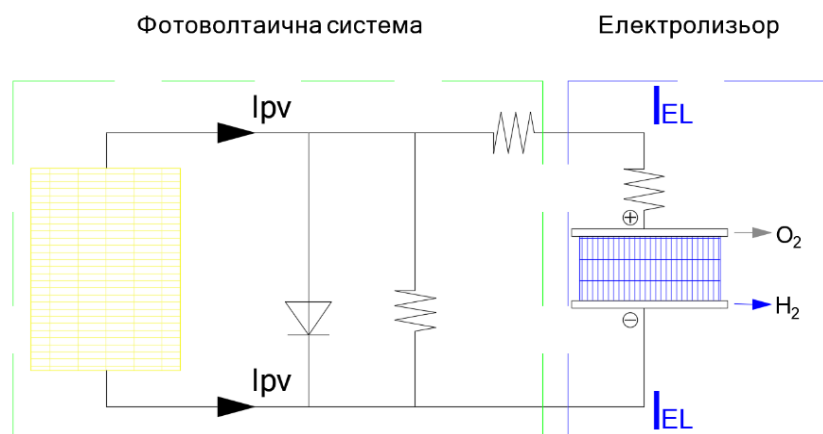
Експерименталната и симулационната волт-амперни характеристики са представени на Фиг. V.2. Най-високата измерена мощност за реалната система е 25.47 kW при ток от 321.2 A и напрежение 79.31 V, като при симулационния модел при 332.1 A и същото напрежение, се постига мощност от 26.34 kW, което представлява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



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

### V.2 Изследване на възможностите за съвместяване на електролизьор 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

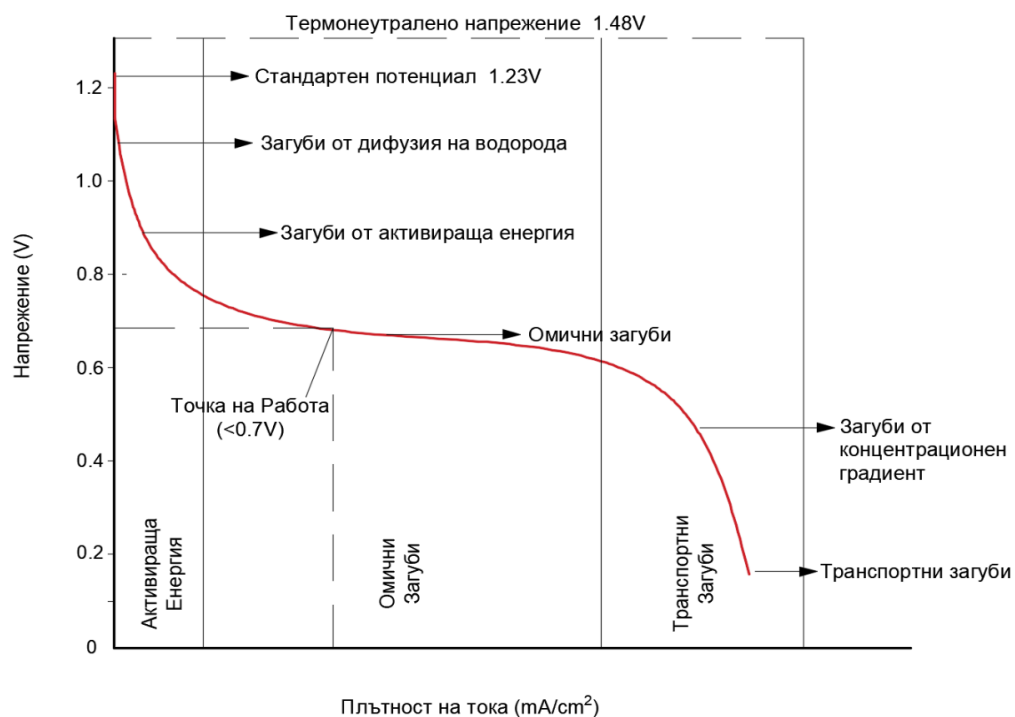
За разлика от електролизата, при която се влага електрическа енергия за предизвикване на електрохимичен процес, при горивните клетки се генерира електрическа енергия от химичните взаимодействия. Горивните клетки се класифицират според вида на използвания електролит и гориво, което определя електродните 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  $\Delta G$ , като теоретичната електродвижеща сила  $E^\circ$  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  $\Delta G$ ), отнесена към общото количество химична енергия, освободено при реакцията (енталпията  $\Delta H$ ), 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.



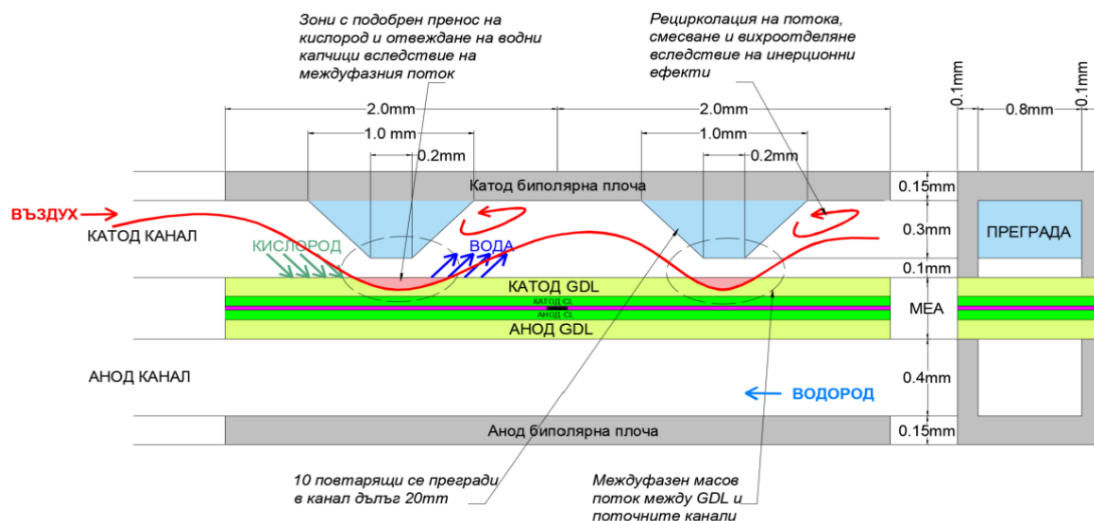
Фиг. VI.2. Поляризационна крива на PEMHFC, отразяваща зоните на загубите при електрохимичния процес

## **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  $45^\circ$  дава най добри показатели и увеличава с 18.8 % плътността на мощността, като при  $30^\circ$  и  $60^\circ$  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/cm<sup>2</sup>. 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,  $\alpha$  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:  $\eta_{dif}$  е дифузионния свръхпотенциал [V]; B е константата за дифузионно напрежение [V];  $i$  – плътност на тока [A/cm<sup>2</sup>];  $i_{lim}$  – плътност на ограничаващ ток [A/cm<sup>2</sup>]. 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:

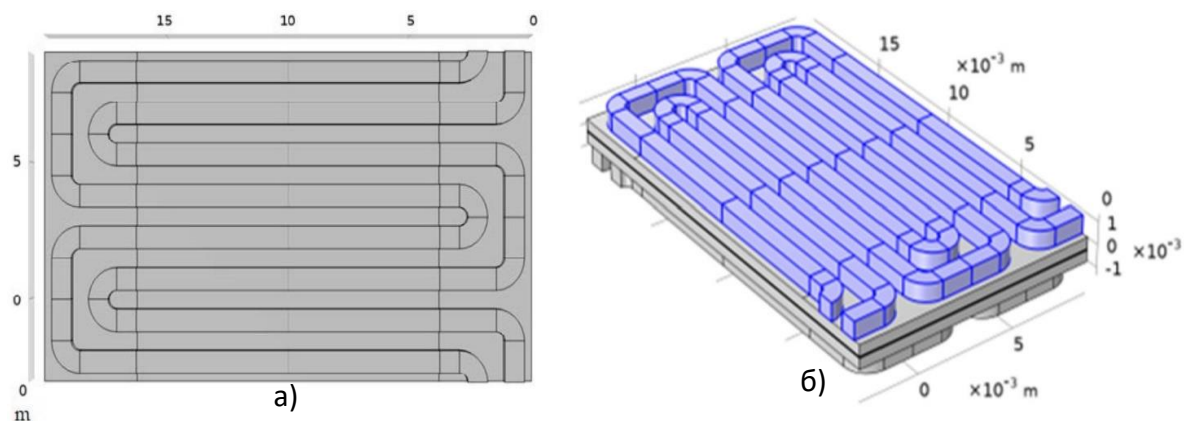
$$i_{lim} = \frac{2FDC_{H_2O}}{L} \quad (8.1.8)$$

Където (F) е константата на Фарадей, C/mol; D е коефициент на дифузия, m<sup>2</sup>/s; L е дебелината на газодифузияния слой (m);  $C_{H_2O}$  - обемна концентрацията на реагента [mol/m<sup>3</sup>] [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<sup>-3</sup> A/cm<sup>2</sup> за плътност на тока на анода и 10<sup>-6</sup> A/cm<sup>2</sup> на катода, базирани на литературни данни [186].

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

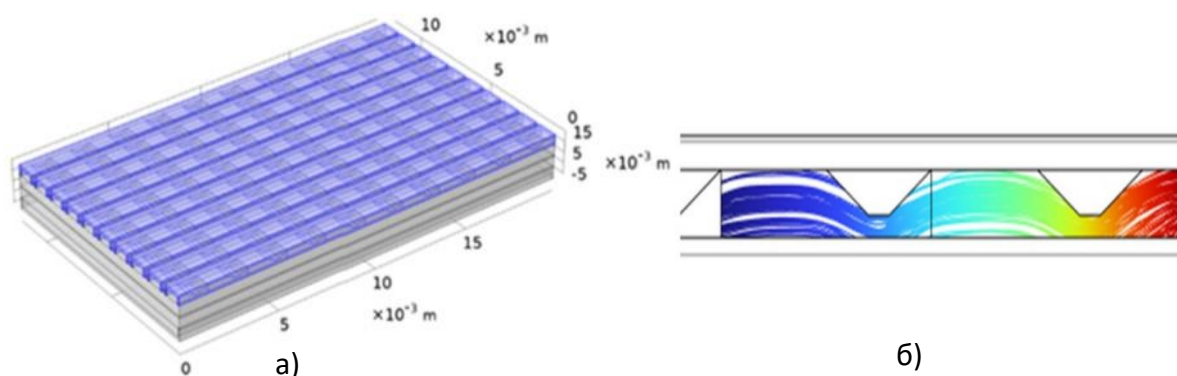
В обхвата на настоящия дисертационен труд са разгледани четири различни конфигурации на поточни канали в PEMFC. При всички варианти изследванията са проведени върху мембранно-електродни пакети (MEA) с идентични размери и материали. Размерите на клетката са ширина 12 mm и дължина 20 mm, като мембраната е протоннообменна с висока йонна проводимост Nafion, подходяща за работа при температури под 100 °C. Газоразпределителният слой е с порьозност 80 % и дебелина 500  $\mu\text{m}$ , а катализаторният слой съдържа платинени микрочастици с диаметър 1  $\mu\text{m}$ . 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.



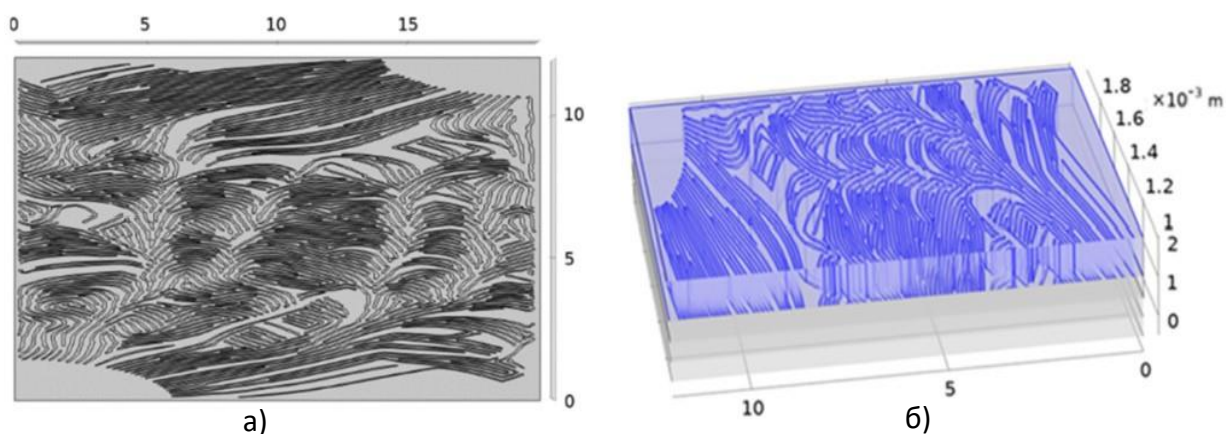
Фиг. IX.1 Паралелно-серпентинен дизайн на поточни канали: а) изглед отгоре; б) триизмерен дизайн

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

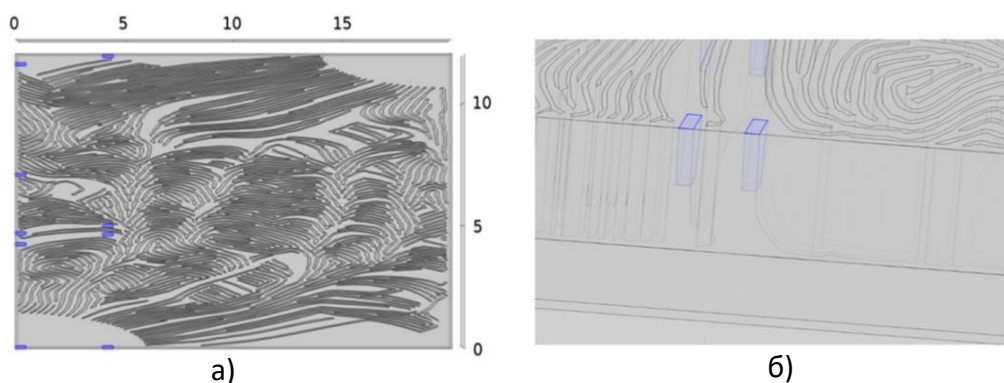
Третият изследван модел представлява нетрадиционна конфигурация на флуидните канали, базирана на Тюринг дизайн, вдъхновен от биологични структури. При този дизайн се създават сложни, но структурирани канали, наподобяващи разпределението на естествени канали, като тези в листа или на кръвоносна система. 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.

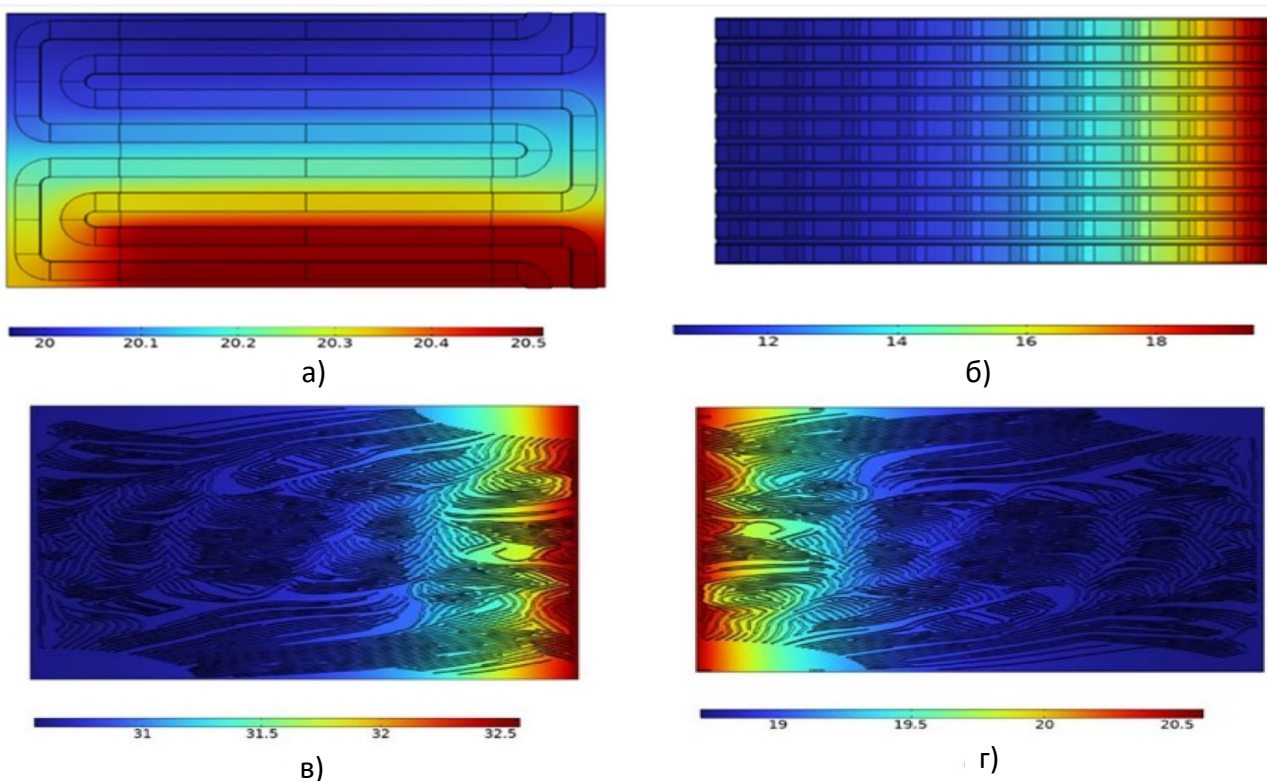
Въпреки че Тюринг дизайнът предлага предимства по отношение на равномерното разпределение на течението и повишената ефективност, той все още среща предизвикателства, свързани с управлението на водата. За да се преодолеят тези ограничения, е разработен иновативен подход представен на Фиг. IX.4., който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

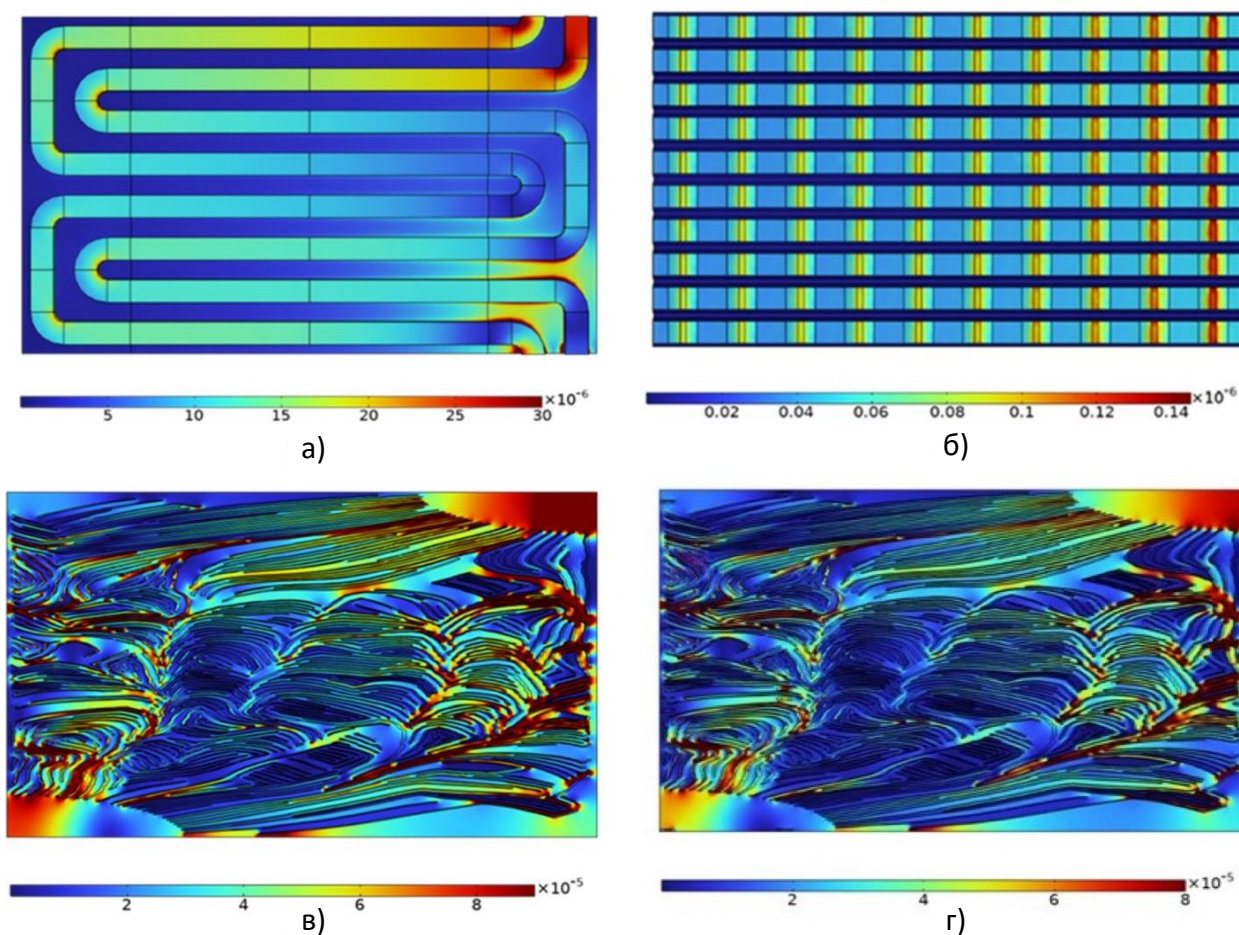
Изследвано е разпределението на молната концентрация на кислорода при четирите различни конфигурации на флуидните канали на PEMHFC – серпентинен, с прегради, Тюринг и хибриден – Фиг.IX.5



Фиг.IX.5. Разпределение на молната фракция на кислород (mol.% O<sub>2</sub>) 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 поляризацияните криви на четирите конфигурации –

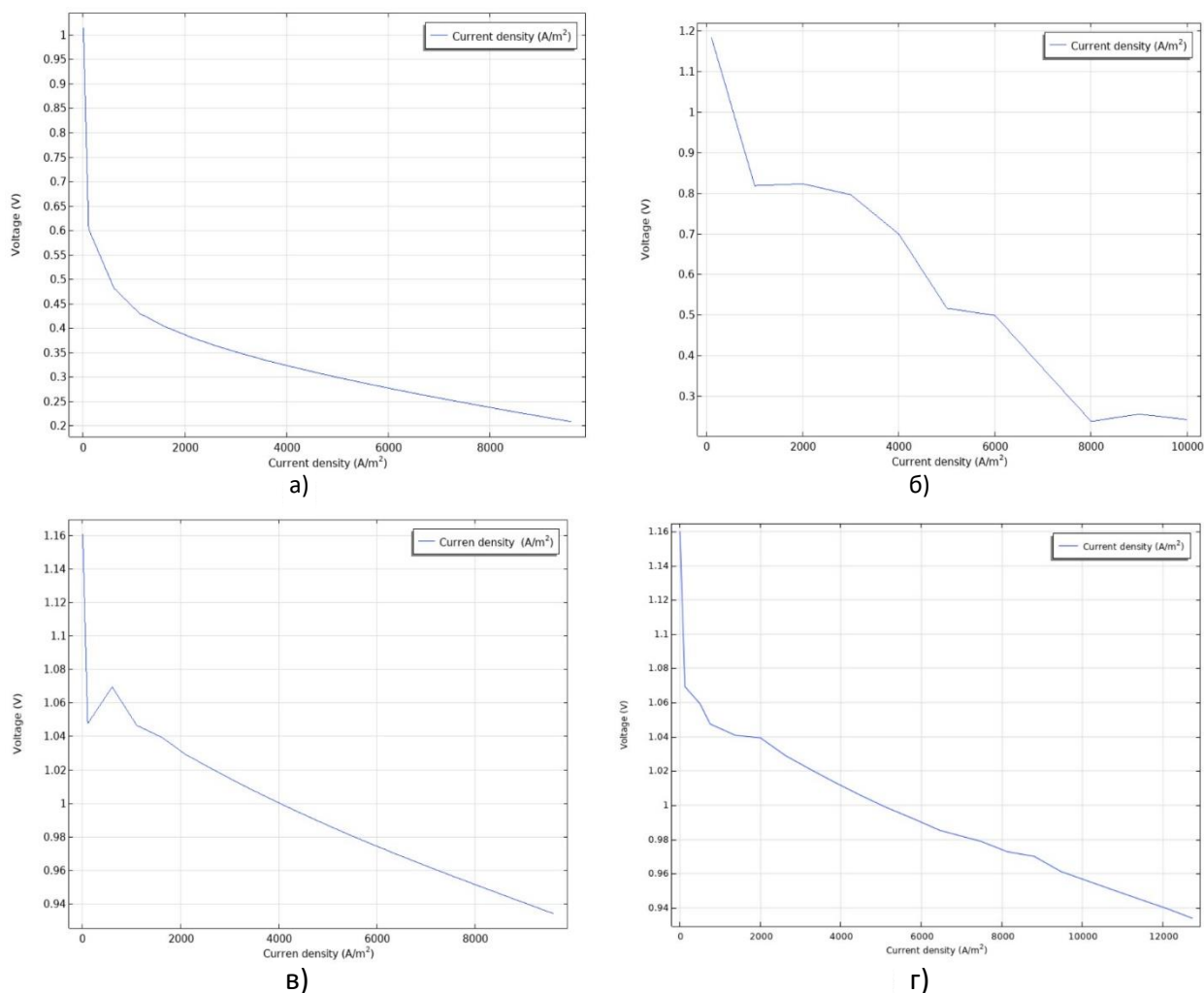


Фиг. IX.6 Разпределение на масовия дебит на кислорода по площ в каналите (kg/s) за следните конструкции: а) паралелно-серпентинен дизайн (вход отгоре надолу); б) дизайн с прегради (вход отдясно наляво); в) Тюринг дизайн (вход отдясно наляво); г) Хибриден модел (вход отдясно наляво)

паралелно-серпентинна, преградна, Тюринг и Хибридна при еднакъв масов дебит на течението на вход от  $2.53 \times 10^{-7}$  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/cm<sup>2</sup> при напрежение от 0.9 V, с изходящ масов дебит въздух от  $1.26 \times 10^{-7}$  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/m<sup>2</sup>) за: а) паралелно-серпентинен ; б) с прегради; в) Тюринг ; д) хибриден дизайн.

конфигурацията показва плътност на тока от 1.0 A/cm<sup>2</sup>, масов дебит от  $1.23 \times 10^{-8}$  kg/s и

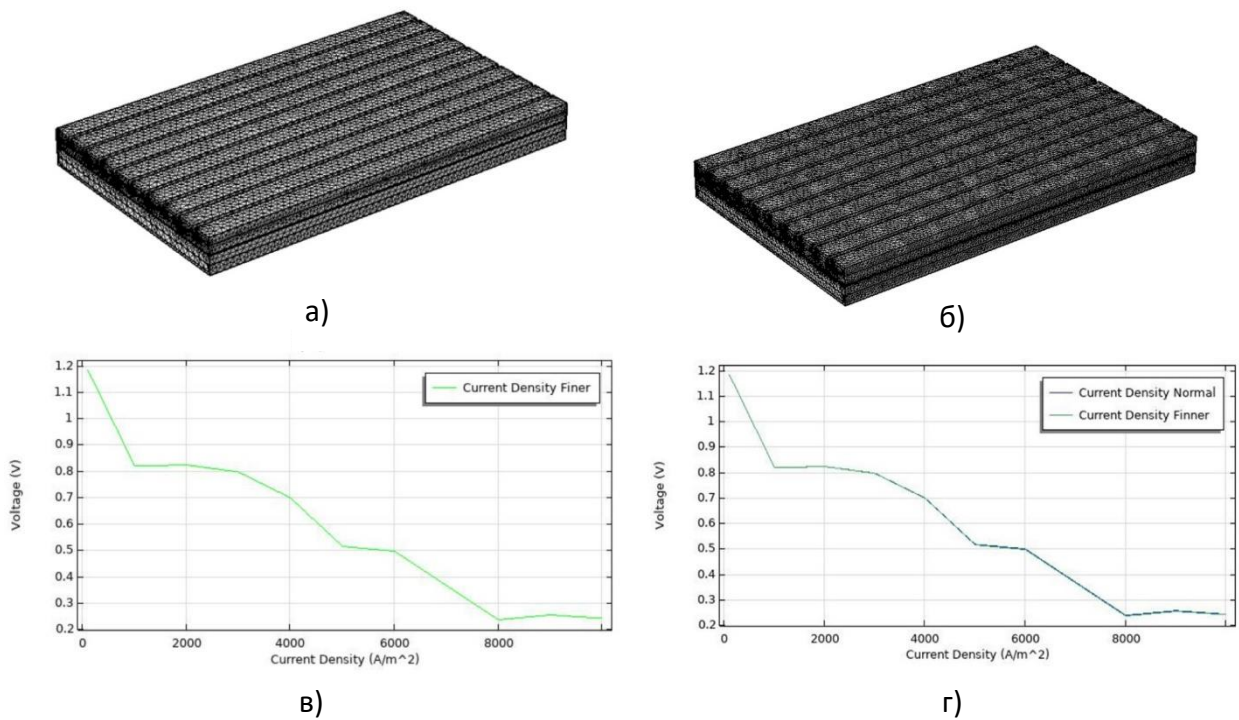
висока степен на оползотворяване на кислорода – 95.14%, което означава ефективно използване на реагентите, въпреки по-ниския ток. Дизайнът с прегради показва по-ниска плътност на тока от  $0.4 \text{ A/cm}^2$  и масов дебит от  $2.26 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$ , като също достига ефективност на използване 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  $0.6 \text{ V}$ , което индикира значителни активационни загуби. При нея се достигат едва  $0.5 \text{ A/cm}^2$  при напрежение от  $0.35 \text{ V}$  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 cm<sup>3</sup>, перфорираният модел е със същата активна повърхност на електродите (365 cm<sup>2</sup>), но с почти двойно по-малък обем (52.5 cm<sup>3</sup>) 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  $1.2 \text{ A/cm}^2$  и 50.2 % ефективност на използване на кислород, в съпоставка с класическият дизайн с плътност на тока при същите параметри от  $0.3 \text{ A/cm}^2$ .

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.



# **TECHNICAL UNIVERSITY - SOFIA**

**Faculty: Faculty of Power Engineering and Power Machines**

**Department: Thermal and Nuclear Power Engineering**

**MSc. Eng. Dilyan Yordanov Gavrailov**

## **EXPLORING OPPORTUNITIES TO IMPROVE THE EFFICIENCY OF ELECTROLYSIS AND FUEL CELLS IN HYDROGEN ENERGY SYSTEMS**

### **SYNOPSIS**

of a PhD thesis for the acquisition of an educational and scientific degree

**"DOCTOR"**

Field: 5. Technical Sciences

Professional field: 5.4 Energy

Research specialty: Thermal and nuclear power plants

**Supervisor: Prof. Dr. Eng. Silvia Vasileva Boycheva**

The PhD thesis was discussed and directed for defense by the Extended Departmental Council of the Department of Thermal and Nuclear Power Engineering at the Faculty of Power Engineering and Power machines of the Technical University of Sofia, at a meeting held on 13.02.2026.

The public defense of the PhD thesis will take place on 04.06.2026 at 13:00 in the conference hall of the BIC of the Technical University - Sofia at an open meeting of the jury, determined by Order OZH-5.4-08 of 05.03.2026 of the Rector of the Technical University - Sofia, consisting of:

- 1. Assoc. Prof. PhD Eng. Tsvetelina Petrova – Chairperson**
- 2. Assoc. Prof. PhD Eng. Detelin Markov - Scientific Secretary**
- 3. Prof. PhD Eng. Nina Penkova**
- 4. Prof. DS Eng. Martin Bozhinov**
- 5. Prof. PhD Eng. Tamara Petkova**

**Reviewers:**

- 1. Prof. DS Eng. Martin Bozhinov**
- 2. Assoc. Prof. PhD Eng. Detelin Markov**

The materials on the defense are available to those interested in the office of the Faculty of Power Engineering and Power Machines of the Technical University of Sofia, Block No 2, room No 2344.

The PhD thesis is written by a full-time PhD student at the Department of Thermal and Nuclear Power Engineering of the Faculty of Power Engineering and Power Machines. The research on the PhD thesis was done by the author, and some of it was supported by a research project.

Author: Dilyan Yordanov Gavrailov

Title: "Exploring Opportunities to Improve the Efficiency of Electrolysis and Fuel Cells in Hydrogen Energy Systems"

Circulation: 30 copies

Printed in the IPC of the Technical University of Sofia

## I. GENERAL CHARACTERISTICS OF THE PHD THESIS

### **Actuality of the problem**

In the context of the energy transition and decarbonization, hydrogen is seen as a key energy carrier with the potential to integrate its production through electrolysis of water with renewable energy sources. A major problem in the production and use of green hydrogen remains low efficiency and high energy losses in electrolysis and fuel cells. This requires the development of optimized designs of the main components of these devices to improve their performance.

### **Purpose of the PhD thesis, main tasks and research methods**

The aim of the PhD thesis is to create opportunities to increase the efficiency of hydrogen production by improving the electrode structure of electrolysis cells and increasing the efficiency of using hydrogen in fuel cells by improving their channel configuration, as well as reducing energy losses in the integration of photovoltaic and electrolysis systems for the production of "green" hydrogen. The objectives defined in the PhD thesis are focused on the following areas:

Task 1: Development and validation of mathematical models of alkaline electrolyzers in different configurations (existing system, classical configuration, common cathode configuration, common anode and perforated electrode configuration) to evaluate the performance, efficiency and feasibility of individual design options.

Task 2: Investigate the possibility of directly connecting an electrolyser to a photovoltaic system (PV-ELY) by comparing the output and input electrical characteristics and calculating the power match factor ( $CF_{direct\_coupled}$ ).

Task 3: Assessment of the influence of geometric parameters (thickness and perforation of electrodes) on the compactness, pressure and electrochemical performance of the electrolysis system.

Task 4: Model investigation and comparative analysis of volt-ampere characteristics of all studied electrolyser configurations in order to determine the optimal engineering solution according to efficiency criteria and convergence to data from real measurements (validation of a numerical model with a deviation of less than 20%).

Task 5: CFD modeling of PEM fuel cells (PEMFC) with different configurations of channel structures: coils, with baffles in channels, Turing design and combined channel structure in order to obtain data on current density, humidity control and mass transfer efficiency in channels.

Task 6: Study of interconnections and derivation of mathematical relationships between the electrochemical and the thermodynamic parameters describing the processes in both electrolyzers and fuel cells.

Task 7: Formulation of scientific and applied conclusions for the development and optimal design of integrated systems photovoltaic module - electrolyser - fuel cell based on the results of simulation studies.

### **Scientific novelty**

A new electrode configuration with a perforated structure for alkaline electrolyzers has been proposed, and a new hybrid channel design has been developed for PEM fuel cells, which improve performance and reduce energy loss of the devices studied.

### **Practical applicability**

The practical applicability of the PhD thesis is expressed in the development of engineering solutions to increase the efficiency of real systems for the production and utilization of hydrogen. The results obtained can be directly used in the design and optimization of alkaline electrolyzers by implementing perforated electrode structures with an increased active area. The proposed configuration allows for a reduction in the volume of electrolysis systems while maintaining or increasing productivity. Research on the direct connection of photovoltaic systems with electrolyzers can be applied in the construction of autonomous systems for the production of "green" hydrogen. This creates prerequisites for reducing investment costs by eliminating additional electronic converters. The proposed hybrid design of channel structures in PEM fuel cells can be used to increase the efficiency and reliability of fuel cell energy systems. The results of CFD modeling support the optimization of mass transfer and water balance management in real devices. In summary, the developments have the potential to be implemented in integrated energy systems, including renewable energy sources, electrolyzers and fuel cells.

### **Approbation**

The results were tested by numerical simulations and compared with experimental data from a real electrolyser. Some of the research has been presented at international scientific conferences. Publications in refereed journals confirm the scientific validity of the development.

### **Publications**

The main achievements and results of the PhD thesis have been published in 5 scientific articles, of which 2 in journals with impact factor and impact rank (Q1) and 3 in refereed editions of conferences with impact rank.

### **Structure and volume of the PhD thesis**

The PhD thesis is **167** pages long, including an introduction, **11** chapters on solving the main problems, a list of main contributions, a list of publications on the PhD thesis and references. A total of **210** literary sources are cited, **205 of which** are in Latin and **5** in Cyrillic. The work includes a total of **42** figures and **11** tables. The numbers of the figures and tables in the abstract correspond to those in the PhD thesis.

## **II. CONTENT OF THE PHD THESIS**

### **CHAPTER I. Hydrogen as an Energy Carrier**

In the context of the global energy transition and the growing need for decarbonization, hydrogen is establishing itself as an energy carrier, fuel and energy storage facility, with the potential to integrate different sectors of the energy system, such as RES and combustion plants[12],[13],[14]. Hydrogen has the highest gravimetric energy density among known fuels, which allows the storage of significant amounts of energy in a relatively low weight [15]. It is the most abundant element in the bound state and can be obtained from a variety of sources, including water and biomass, ensuring long-term resource availability. When used as an energy carrier in electrochemical systems, the product of its oxidation is water, which represents a

significant advantage over the fossil fuels, which combustion generates CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, dust, persistent organic pollutants and heavy metals. It should be noted that the overall environmental effect of the use of hydrogen depends on how it is produced [16]. Hydrogen is an environmentally friendly energy carrier that is constantly developing technologically and reducing the cost of obtaining it, has the potential to play an increasingly important role in the global energy mix, contributing to the achievement of climate goals and energy security. Although steam reforming of natural gas is the main method of hydrogen production, due to its lower costs and established infrastructure, water electrolysis has significant environmental advantages. It allows integration with RES and eliminates CO<sub>2</sub> emissions, making it a key tool in the transition to low-carbon energy.

## **I.2 Classification of hydrogen according to the carbon footprint**

The classification of hydrogen according to the source of production is based on the raw materials and energy resources used in its production, and each method is characterised by a different impact on the environment. This classification is essential to assess the contribution of different types of hydrogen to climate goals, the decarbonization of the economy and the achievement of sustainable development. The systematization of hydrogen production technologies by environmental indicators allows for an appropriate choice of strategies in the energy transition and in industry [22].

## **I.4 Hydrogen production technologies**

The dissociation of the water molecule into hydrogen and oxygen is a reaction that takes place through charge carriers [38]. Hydrogen production technologies are divided into:

Thermochemical (thermolysis) – use thermal energy, and direct thermolysis of water molecules is not applicable for practical purposes, as it is realized at temperatures above 2000 °C.

Electrochemical (electrolysis) – use electrical energy to decompose water molecules (the process is the subject of research in this PhD thesis).

Photochemical (photolysis) – decomposition of the water molecule under the action of light and in the presence of semiconductor photocatalysts.

Photoelectrochemical – the dissociation of water molecules occurs through an electrochemical process.

### **I.5 Conclusion**

Hydrogen is an environmentally friendly energy carrier that, with continued technological development and reducing the cost of obtaining it, has the potential to play an increasingly important role in the global energy mix, contributing to the achievement of climate goals and energy security. Although steam reforming of natural gas is the main method of hydrogen production, due to its lower costs and established infrastructure, water electrolysis has significant environmental advantages. It allows integration with RES and eliminates CO<sub>2</sub> emissions, making it a key tool in the transition to low-carbon energy. Due to the prospects for the development of water electrolysis as a leading technology for sustainable hydrogen production, increasing the efficiency of electrolysis systems is the subject of research in this PhD thesis.

## **Chapter II. Hydrogen Production by Water Electrolysis**

The degradation of the water molecule is a thermodynamically non-spontaneous endothermic process that occurs with energy absorption and positive enthalpy . Chemical transformation involves both reduction and oxidation, both of which are interrelated. The type of charge carriers involved in the electrochemical reaction depends on the pH of the medium. In acidic conditions, these are hydrogen cationes ( $H^+$ ), in alkaline environments – hydroxide anions ( $OH^-$ ), while in solid oxide electrolysis, a solid electrolyte conducting oxygen anions ( $O^{2-}$ ) is used.[52][53]

### **II.1 Alkaline electrolysis (AWE)**

Alkaline electrolysis is the most established technology for the production of green hydrogen by electrolysis of water. It uses a highly alkaline electrolyte, usually potassium (KOH) or sodium (NaOH) hydroxide with a concentration of about 30% and pH=13-14, which provides a high concentration of hydroxide ions – the main charge carriers. In the system, porous diaphragms or anion-exchange membranes (AEM) are used as separators, and in the classical design there is a distance between the electrodes (finite gap), and in improved designs - the electrodes are tightly adhered to the membrane, the so-called "infinity small distance" or Zero-gap [54], [55].

### **II.2 Proton Exchange Membrane (PEM) electrolyzers**

PEM uses a proton exchange polymer membrane based on acid-dominated (most often with  $H_3PO_4$ ) polybenzimidazole (PBI) as an electrolyte. The cells are compact (5-7 mm). On the anode side, water dissociates from the applied voltage, which generates oxygen gas, hydrogen ions and electrons. [64] [65][39]

### **II.3 Solid oxide cell electrolyzers (SOEC)**

AWE and PEM operate at relatively low temperatures (<180 °C), resulting in process inefficiencies, taking into account the thermodynamics of electrolysis. According to thermodynamic principles, at higher temperatures, some of the energy needed to decompose

water molecules can be supplied as heat, which reduces the overall electrical consumption of the system. Thermodynamic analyses of the dissociation of the water molecule show that the Gibbs free energy ( $\Delta G$ ) of the reaction decreases with an increase in the temperature of the electrolysis cell. [10][39]

#### **II.4 Main configurations of electrolyzers**

There are three main configurations in electrolyzers: monopolar, bipolar and bipolar with a central electrode. In the monopolar configuration, each electrode plate is connected directly to the power supply and the same reaction takes place on both sides – either the evolution of hydrogen or oxygen. This requires parallel cell connection, resulting in high total current, significant ohmic losses and the need for massive live busbars – mainly suitable for smaller systems. [68] [69]

#### **II.5 Comparative study of hydrogen production by different electrolysis systems**

AWE, PEM and SOEC are established technologies for the production of hydrogen by decomposition of water. AWE and PEM electrolyzers operate at relatively low temperatures, which affects the energy required for the water decomposition process and the overall efficiency. A key factor in efficiency is the relationship between the voltage in the cell and the current density. PEM cells operating at a current density of  $2 \text{ A/cm}^2$  achieve a performance of  $\text{H}_2$  [71] of about  $8.4 \text{ Nm}^3 \text{ H}_2/\text{m}^2$ , while in AWE operating at  $0.45 \text{ A/cm}^2$ , it is about  $1.9 \text{ Nm}^3 \text{ H}_2/\text{m}^2$ . This shows the significant difference in the capacity of the two technologies. Although PEM offers higher performance, AWE technology is more established and has been applied on a larger scale – up to 6 MW, while PEM is still limited to smaller capacities [72].

## Chapter III. Mathematical Models of Processes in Electrolysis Cells

### III.1 Electrochemical models of electrolysis cells

The electrochemical reaction taking place in electrolysis cells is influenced by several key parameters: cell voltage ( $V_{cell}$ ), equilibrium potential ( $V_{eq}$ ), activation surges ( $V_{activation}$ ) and voltage drop from ohmic losses ( $V_{ohmic}$ ). The total voltage of the cell is expressed as the sum of the equilibrium potential and the voltage drop from the various losses, as shown in equation (3.1.1.):

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

The lower the surges, the closer the actual cell voltage ( $V_{cell}$ ) is to the thermodynamic minimum ( $V_{eq}$ ) required to start the reaction. The relationship between the voltage and the magnitude of the current flowing in the electrochemical cell is the polarization curve that characterizes the efficiency of the electrolyzer. The rate of production of hydrogen (mol/s) is determined by Faraday's law and the Faraday constant (F):

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

Where:  $I$  is the magnitude of the current through the cell (A), which, in turn, is defined by:

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

Where:  $j$  is the current density ( $A/m^2$ ) and  $A_e$  is the active area of the electrode ( $m^2$ ). Equation (3.1.4.) shows that hydrogen production is directly dependent on the magnitude of the current in the system, which in turn depends on the effective area of the electrodes ( $A_e$ ).

## **III.2 Mass transfer in electrochemical cells**

In electrolysis, gas bubbles (hydrogen and oxygen) are formed, which significantly affect the mass transfer and the efficiency of the electrodes. To describe mass transfer in electrochemical cells, a two-phase flow model known as the Bubbly Flow model is applied, which describes the behavior of the gas phase in a liquid medium. [97]

### **III.2.1 Mathematical model of two-phase flow in electrolysis cells**

The two-phase bubble flow model is a simplified version of the two-fluid Euler-Lagrange approach, which tracks the distribution of the dispersed gas phase in a continuous liquid medium. The movement of gas bubbles is determined by the pressure gradient and the viscous resistance generated by the friction forces between the bubble and the liquid. The equilibrium between these forces determines the speed and direction of movement of the gas bubbles. For each of the phases, a separate velocity field is defined, and their dynamics are described by the equations for conservation of mass and momentum. [98]

## **III.3 Conclusion**

The mathematical description of electrochemical processes shows that the active surface of the electrodes is a determining factor in reducing activation losses and increasing the current density and hydrogen yield, therefore increasing the efficiency of electrolysis cells requires targeted development of electrode materials and optimization of electrode design. In the present work, alkaline electrolysis is selected as the focus due to its status as the most mature and widely implemented technology to date. Accordingly, this PhD thesis concentrates on optimizing the electrode design of an alkaline electrolyzer.

## Chapter IV. Model studies of hydrogen electrolysis cells

For the implementation of the model simulations, the Fuel Cell & Electrolyzer module of COMSOL Multiphysics 6.2 was used, which allows an integrated approach to study electrochemical processes, heat transfer, fluid flow and structural parameters in a single environment. Configurations of electrochemical cells applied for water electrolysis, the classic alkaline electrolyzer, solid electrolyte and anion exchange membrane (AEM) electrolyzer, as well as a modified alkaline electrolyzer were studied. On Fig. IV.3 The polarization curves of the three studied electrolyzers are presented – classical alkaline, AEM and modified alkaline with perforated electrodes. The models are simulated under the same boundary conditions, as a result of which, the AEM electrolyzer exhibits the lowest performance and higher losses at low current densities, which is directly related to the absence of a catalyst. With the developed modified alkaline electrolyzer, the thickness of the electrodes is increased tenfold, which creates optimal conditions for electrochemical reactions without increasing the activation or ohmic losses. The same hydrogen production is achieved as with a classic electrolyser, with

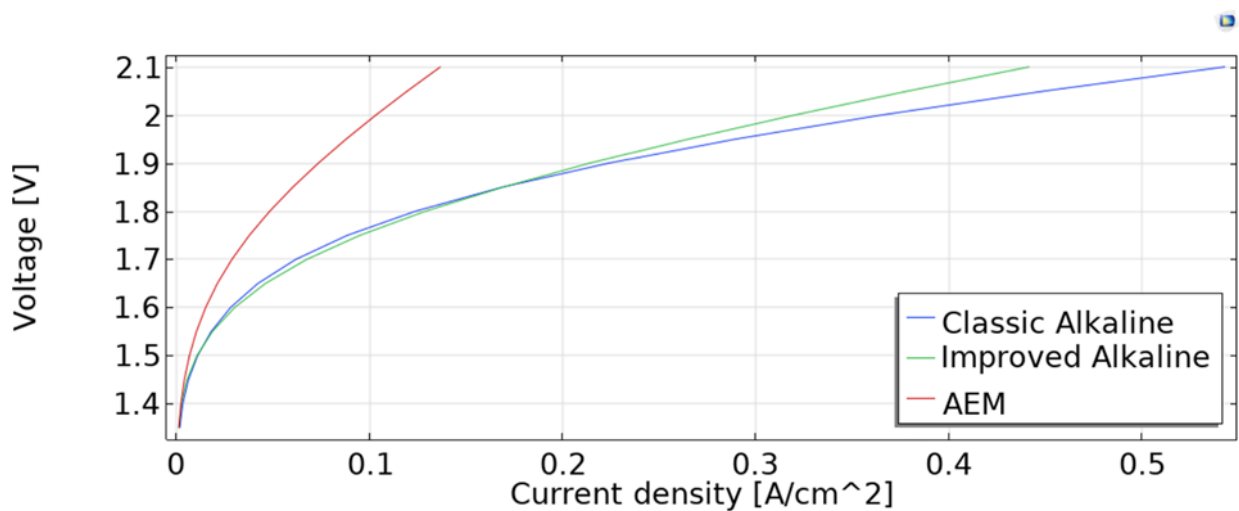


Fig. IV.3 Polarization curves of the three studied electrolysis cell models

more than 50% less cell volume. The greater thickness of the electrodes allows for more uniform distribution and dissipation of heat, maintaining a maximum operating temperature of 21.3 °C at a current density of 100 A/cm<sup>2</sup>.

## Chapter. V. Validation of the numerical model with experimental data and construction of models of electrolysis cell packets

To validate the numerical model used for modeling an alkaline electrolyzer, the performance characteristics of a real alkaline electrolyzer with a bipolar configuration were used. The electrolyzer contains a total of 40 electrodes, with only the final two being active and connected directly to an electrical supply, and the rest functioning in bipolar mode. The diameter of each electrode is 325 mm, with the passive electrodes being 1 mm thick and the active electrodes being 3 mm. The electrolyte is a potassium-based aqueous solution (30 mol % KOH) and the operating temperature is 80 °C.

### V.1 Validation of the constructed numerical model

The experimental and simulation volt-ampere characteristics are presented at the Fig. V.2 The highest measured power for the real system is 25.47 kW at a current of 321.2 A and a voltage of 79.31 V, while in the simulation model at 332.1 A and the same voltage, a power of 26.34 kW is achieved, which represents a deviation in the real and simulated data of about 0.87 kW or by 3.4 %.

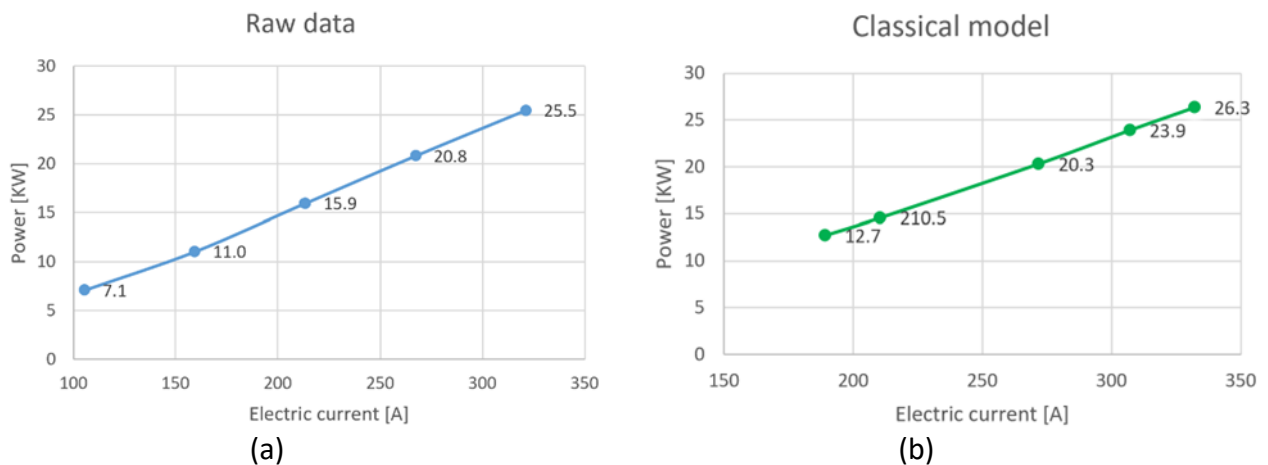


Fig. V.2 Performance characteristics of: (a) a real alkaline electrolyzer; (b) real-world configuration simulation model

## V.2 Exploring the possibilities of combining an electrolyser with a photovoltaic system

The polarization characteristics determine the efficiency of the electrolyser under different operating modes, which is a critical factor in assessing its compatibility with RES. The connection to solar photovoltaic (PV) systems has been investigated, as solar electricity is a clean, sustainable source for green hydrogen production. A challenge in the direct connection between photovoltaics and electrolysers lies in the inconsistency of energy production from PV installations. This leads to discrepancies between the instantaneous power of the electrolyser and the power produced by PV. To match the load between the two systems, it is necessary to know the polarization curve of the electrolyser, as it determines the optimal operating point of the device. Direct connection of a PV-electrolyser allows maximum hydrogen production, while ensuring stability in the operation of the electrolysis system and avoiding energy losses due to incorrect sizing or unstable power supply. Both the electrolyser and the photovoltaic (PV) modules operate in direct current (DC/DC) mode, which makes their direct connection more efficient and cost-effective, as there is no need to use inverters, transformers and rectifiers ([108] [109]Fig. V.11) . The maximum power that can be generated by the PV using a direct-coupled system is investigated, in which the operating point of the PV coincides with the (I–V) characteristic of the electrolyser. The output current and voltage of the PV system [110](Fig.V.11) ( $I_{PV}, V_{PV}$ ) are equal to the input current and voltage to the electrolyser ( $I_{EL}$ ,

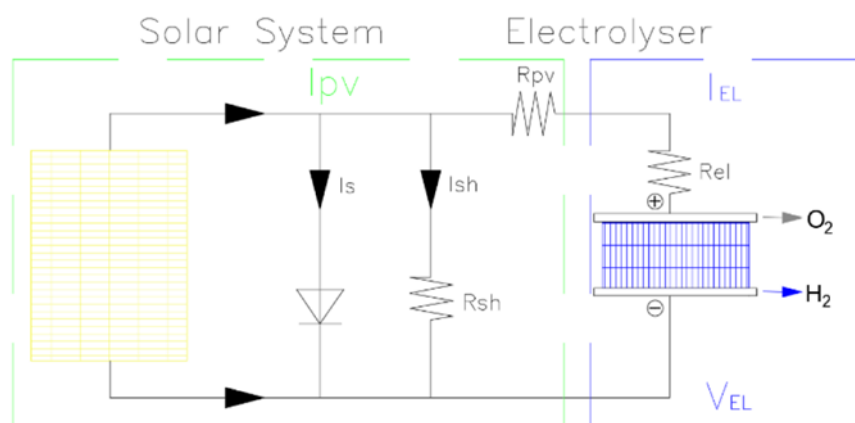


Fig. V.11 Diagram of a direct connection between an electrolyser and a solar system

$V_{EL}$ )[112].

## Chapter VI. Hydrogen fuel cells

Unlike electrolysis, in which electrical energy is used to induce an electrochemical process, fuel cells generate electrical energy from chemical interactions. Fuel cells are classified according to the type of electrolyte and fuel used, which determines the electrode reactions and the type of transport ions involved in the process. The electrochemical reaction takes place on the surface of the electrodes, generating a voltage that is transmitted to power an external electrical load. Unlike batteries, fuel cells operate in a continuous mass flow of reagents (reducer and oxidizer) that are fed to the electrodes, which allows continuous generation of electrochemical energy, while batteries store chemical energy in a closed system (charge-discharge cycle of operation). The energy balance of a fuel cell includes the following components: enthalpy of the reactants, heat produced by electrochemical processes, and heat losses from the cell to the environment. The maximum heat that can be released in the reaction is equal to the HHV of hydrogen, and the maximum work performed is determined by the value of the  $\Delta G$  [120][121], as the theoretical electromotive force  $E^\circ$  at a given temperature  $T$ , will be expressed as:

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

When determining the efficiency of fuel cells, the energy recovered in the form of work (Gibbs free energy  $\Delta G$ ) relative to the total amount of chemical energy released in the reaction (enthalpy  $\Delta H$ ) is taken into account, where the number of electrons carried in the electrochemical reaction is ( $z$ ) and  $F$  is the Faraday constant, which gives the ideal efficiency factor:

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

The real voltage of the fuel cell ( $V_{cell}$ ) is always a little bit lower of the thermoneutral voltage, due to various energy losses in the system. These losses form the so-called fuel cell polarization

curve that describes the relationship between operating voltage and current density [125]. Polarization losses result in a difference between the actual operating voltage and the ideal cell voltage, and it is always valid  $V_{cell} < V_{ideal}$ . In addition, not the entire amount of fuel, supplied to the anode of the fuel cell, is reduced to the cathode, therefore the operating voltage must be corrected with a fuel efficiency factor [126]. This coefficient is reflected in equation (6.1.9) for the net efficiency. The polarization losses reflected on the polarization curve are divided into three main zones, Shown on Fig. VI.2.

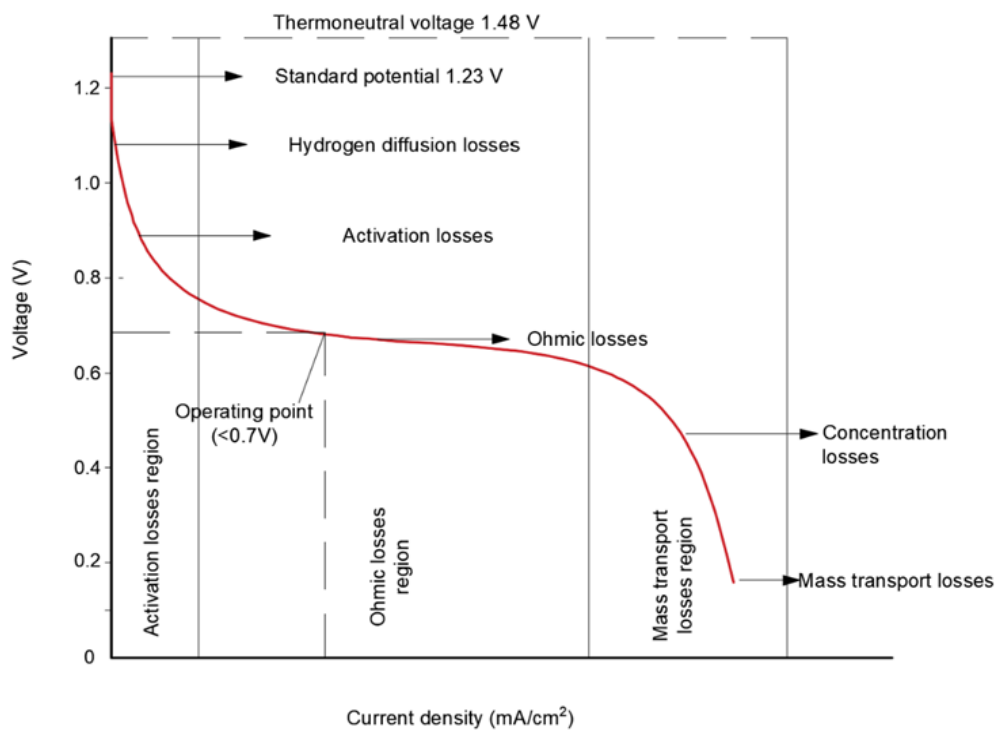


Fig. VI.2. PEMHFC polarization curve reflecting electrochemical process loss zones

## Chapter VII. Polymeric Proton-Conducting Membrane Fuel Cell (PEMFC)

PEMFCs have a lower operating temperature and fast start compared to other types of fuel cells, and a high power density in compact sizes, making them suitable for mobile and stationary applications,[101]. Their disadvantages are related to their efficiency at high current densities, the service life of the membrane, the use of precious metals in their construction and the management of the water balance. The mechanical stability of the fuel cell is ensured by bipolar plates, which also perform the function of collectors and carry out the electrical connection with the external circuit. Their channel-shaped surfaces serve to supply and remove hydrogen, oxygen and the formed water. The plates are made of graphite or polymer composites, and their fins are metallic [105, 142].

Larger cells have duct holes to supply coolant (most often water) to take away the heat generated during operation. It has been found that when PEMFC operates at high current densities, a reduced efficiency is found due to the accumulation of water generated as a result of the electrochemical process, which leads to flooding of the membrane and hinders the efficient transport of reagents. There is also a decrease in efficiency at low current densities and in case of drying and insufficient moisture of the membrane, which hinders ionic conductivity and disrupts the operation of the cell. Therefore, achieving maximum efficiency in fuel cell operation is directly related to the optimal management of the water balance, in order to prevent the occurrence of both flood and drainage zones, which significantly impair the electrochemical and transport efficiency of the system. Conventional channel structures in fuel cells ensure continuity of flow from inlet to outlet, with the flow of reactants running parallel to the surface of the electrode [138][139] [140] [141] [147] [148] [74] [149].

In contrast to the conventional linear channel structure, three-dimensional complex fields with repeating baffles, the so-called "partition" design, is an inverted trapezoidal partition in the channel structure, shown in blue on Fig. VII.3 They create a microscale flow between the gas diffusion layer and the channel fields, generating an intense oxygen flow that removes excess water from the gas diffusion layer and improves the efficiency of the fuel cell. The angles of the partitions (trapezoid) are essential by determining the angle at which air penetrates the gas diffusion layer. It was found that the angle of the legs with the base of 45° gives the best performance and increases the power density by 18.8%, with 30° and 60° also has improvements, but to a lesser extent. [161]

The reduction of hydraulic resistance supports the effective penetration of the reactants

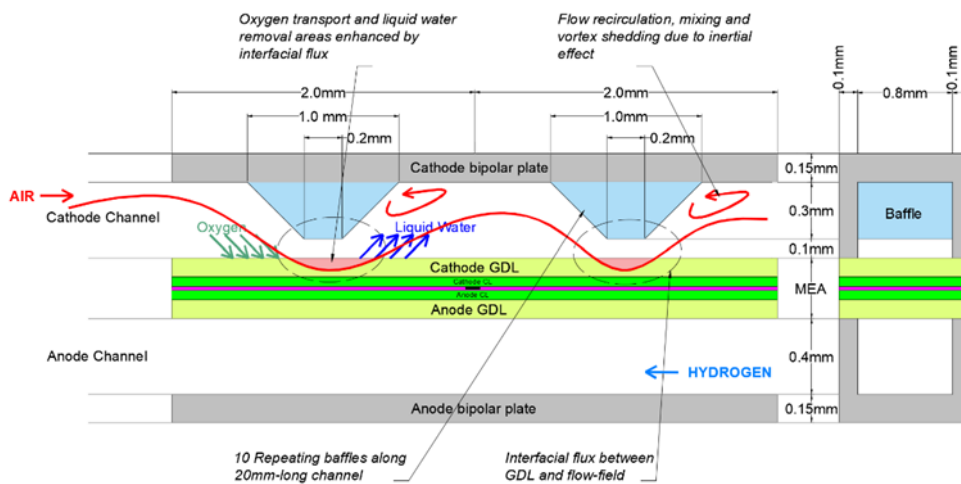


Fig. VII.3 Control of the water balance of the cathode side in a partition design

through the porous layer and the fuller use of the active surface of the electrodes. To improve the homogeneous course of the electrochemical reaction over the entire electrode surface, a structural optimization model inspired by biological systems and based on algorithms developed by Alan Turing is applied [165, 166].

## Chapter VIII. Fuel cell model descriptions

Model descriptions available in the scientific literature are usually limited to single-phase simulations or simplified two-phase approaches that do not adequately reflect the complexity of two-phase flows in the geometry of the channel structure. In this context, the integration of the two-phase Forheimer model is essential for realistically simulating the behavior of liquids in 3D flows. The installation of partitions in the channels of fuel cells with a proton exchange membrane is a technology for creating 3D microarrays that facilitate the recirculation of the flow, expansion, contraction and formation of vortices known as inertial effects (Forheimer effect), represented on the Fig. VII.3 [178]. The electrochemical potential of a fuel cell in equation (8.1.3) is a function of the current density ( $V_{cell} = f(i)$ ) and the already mentioned main types of losses that arise:[183]

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

Within this study, the current density is compared at a set voltage of 0.7 V for all models. Since the Nernst equation gives the equilibrium potential stress, which is the theoretical open-circuit stress, equation (8.1.3) can be expressed as follows: $V_{ocp}$

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

Where  $V_{Nernst}$  is the Nernst potential, and  $\eta_{ohm}(i)$ ,  $\eta_{act}(i)$ ,  $\eta_{dif}(i)$  represent ohmic, activation, and diffusion losses, respectively. Ohmic losses are described by the equation:

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

Ohmic losses are linear and are the sum of the resistances of the anode, cathode and electrolyte ( $R_{internal}$ ) multiplied by the current density  $i$ , A/cm<sup>2</sup>. Activation losses are expressed by equation (8.1.6):

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

Where: R is the universal gas constant (8.314 J/mol. K); T is the operating temperature,  $\alpha$  is the charge transfer coefficient; F is Faraday's constant (96,485 C/mol);  $i$  is the working density of the current;  $i_0$  is the exchange density of the current. Diffusion losses are defined by equation (8.1.7)

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

Where:  $\eta_{dif}$  is the diffusion superpotential [V]; B is the diffusion voltage constant [V];  $i$  – current density [A/cm<sup>2</sup>];  $i_{lim}$  – limiting current density [A/cm<sup>2</sup>]. These losses occur at high current densities, when mass transfer is limited and reactants near electrode are depleted, B is an empirical coefficient related to the properties of mass transfer, and  $i_{lim}$  is the limiting current density. The limiting current density is calculated by:

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

Where (F) is the Faraday constant, C/mol; D is the diffusion coefficient, m<sup>2</sup>/s; L is the thickness of the gaseous diffusion layer (m);  $C_{H_2O}$  - volumetric concentration of the reagent [mol/m<sup>3</sup>]. [185] The density of the exchange current ( $i_0$ ), mentioned in equation (8.1.4.), is a key parameter in fuel cell modelling. Within the framework of the present study, values of 10<sup>-3</sup> A/cm<sup>2</sup> for anode current density and 10<sup>-6</sup> A/cm<sup>2</sup> for cathode, based on literature data, were used.[186]

## Chapter IX. Model Studies of Channel Structure in PEM Fuel Cell

The scope of this PhD thesis examines four different configurations of streaming channels in PEMHFC. In all embodiments, the tests were carried out on membrane-electrode packages (MEA) of identical dimensions and materials. The dimensions of the cell are 12 mm wide and 20 mm long, and the membrane is proton-exchange with high ionic conductivity Nafion, suitable for operation at temperatures below 100 °C. The gas distribution layer has a porosity of 80% and a thickness of 500  $\mu\text{m}$ , and the catalyst layer contains platinum microparticles with a diameter of 1  $\mu\text{m}$ . This electrochemical process has slow kinetics and is speed-determining, which is why it is the subject of research to increase the efficiency and productivity of hydrogen fuel cells. [190]

For all the studied models, the same mass velocity of the inlet flow was given in order to compare the distribution of molar oxygen concentration in the cell core, humidity in the channels and membrane, pressure losses for each configuration and polarization curves. The parallel-serpentine design of the flow channels is a hybrid configuration that combines the advantages of the velocity field of the flow in parallel and serpentine designs. This design features multiple serpentine channels arranged in parallel, allowing for more even distribution of reagents and improved water management in the fuel cell. The parallel-serpentine design can improve the performance of PEMFC. This design has been found to provide better distribution of reagents and more efficient water removal compared to traditional configurations. Modifications to the parallel-serpentine design, such as the inclusion of baffles or changes to the geometry of the channels, can contribute to better water management and increased fuel cell efficiency. In this PhD thesis, a configuration of a current in a coil with two parallel channels is modeled, presented on the Fig. IX.1 [194][195] [196].

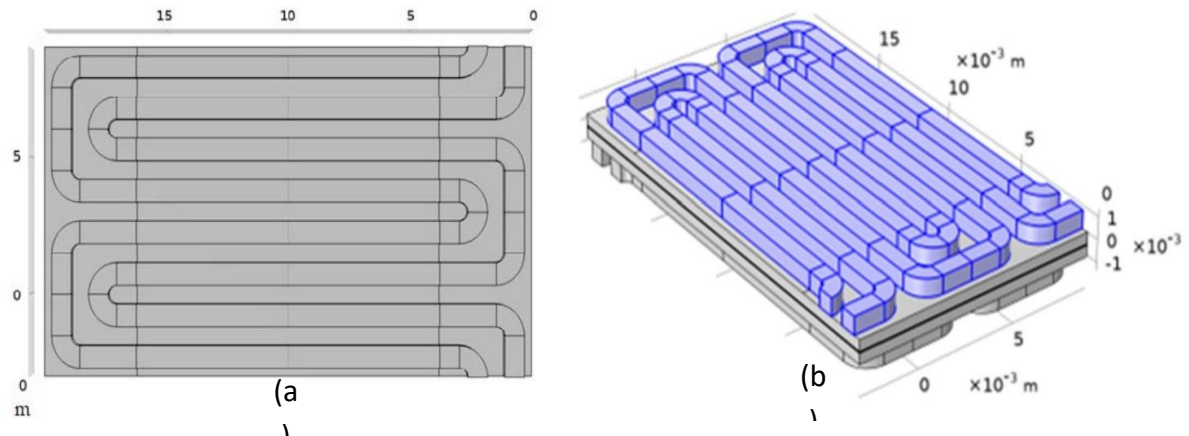


Fig. IX.1 Parallel-serpentine design of flow channels: a) top-view; b) three-dimensional design

On Fig. a classic parallel configuration is presented, in which the gas channels are oriented in a straight line and arranged parallel to each other. This type of geometry is characterized by low hydraulic resistance and minimal pressure losses, but it has significant drawbacks in terms of water management, especially at the end of the channel. In accordance with Bernoulli's equation, lowering the pressure towards the outlet leads to difficult water removal, which can cause local flooding and uneven operation of the cell. To overcome this problem, the modified configuration with built-in baffles located along the parallel channels is presented on the Fig. IX.2,b [199].

The third model studied is an unconventional fluid channel configuration based on a Turing

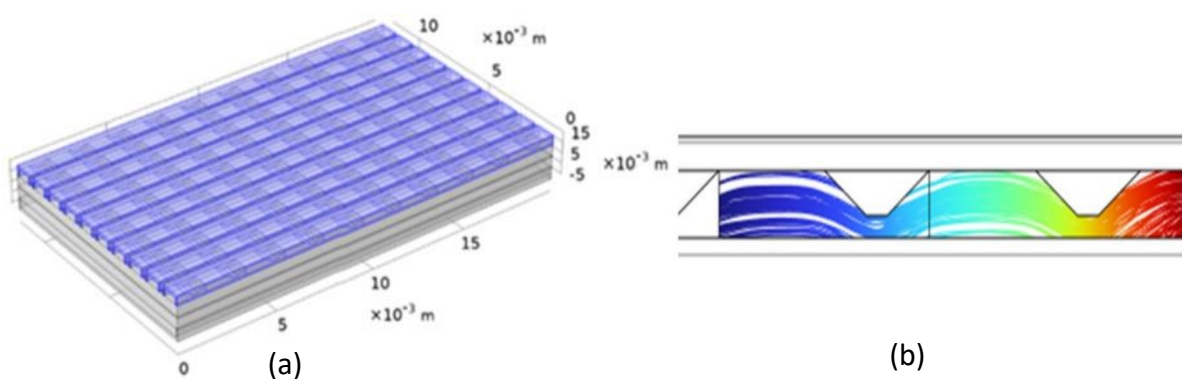


Fig.IX.2. Scheme of channel structure: (a) parallel-flow channel structure with 10 channels arranged in parallel, with built-in partitions; (b) visualization of the cross-sectional flow of the channel structure

design inspired by biological structures. In this design, complex but structured channels are

created, resembling the distribution of natural channels, such as those in the leaf or of the circulatory system. The goal of this approach is to achieve an even distribution of reactants and improve electrochemical activity in the fuel cell core. The Turing design balances the pressure from the inlet to the outlet of the channel, ensuring adequate flow speed while minimizing resistance in the channels. This balance is essential for effective water management and prevention of local flooding, which can impair fuel cell performance. The visualization of this model, presented at the Fig. IX.3 [202][203], includes both a top-down view and a three-dimensional perspective, allowing for a detailed overview of the channel configuration.

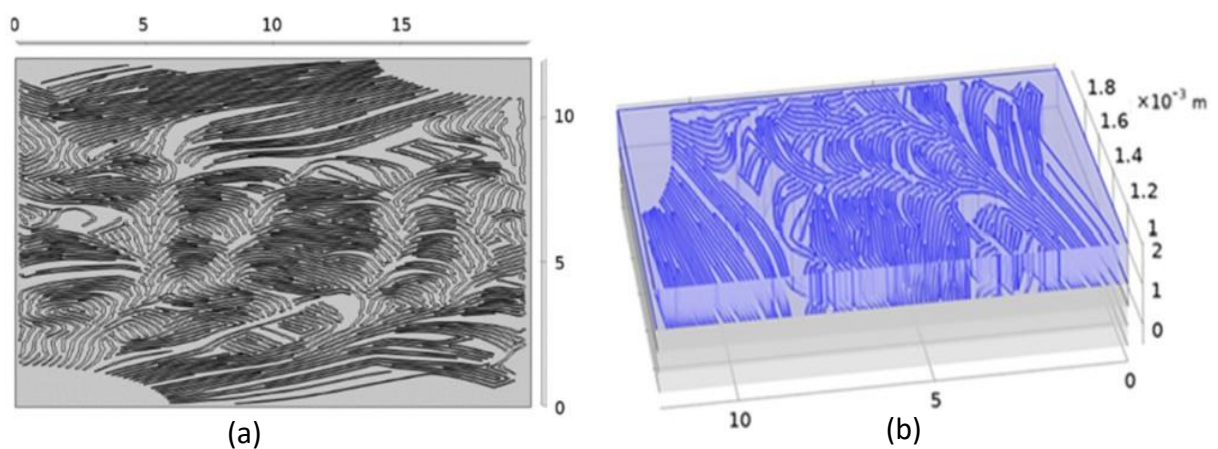


Fig. IX.3 Turing Current Field Design: Two-dimensional (a) and three-dimensional view (b) of the flow distribution in the channel section.

Although the Turing design offers advantages in terms of even flow distribution and increased efficiency, it still faces challenges related to water management. In order to overcome these limitations, an innovative approach has been developed presented at the Fig. IX.4., which integrates a partition configuration known for its efficiency in water management, with the advantages in flow distribution of the Turing design.

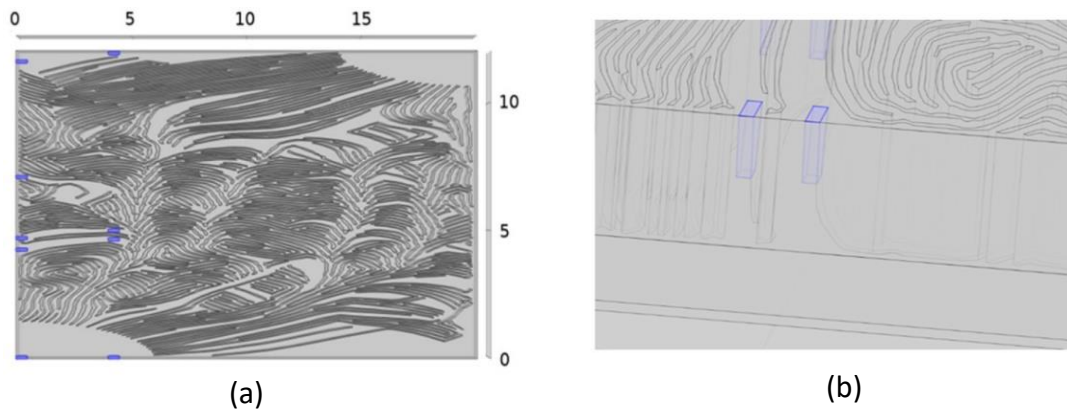


Fig. IX.4 Hybrid design with partitions: (a) two-dimensional representation of the current field; (b) Three-dimensional representation of the current field and channel bulkheads.

The distribution of the molar oxygen concentration in the four different configurations of the PEMHFC fluid channels – serpentine, baffled, Turing and hybrid – has been investigated. Fig. IX.5.

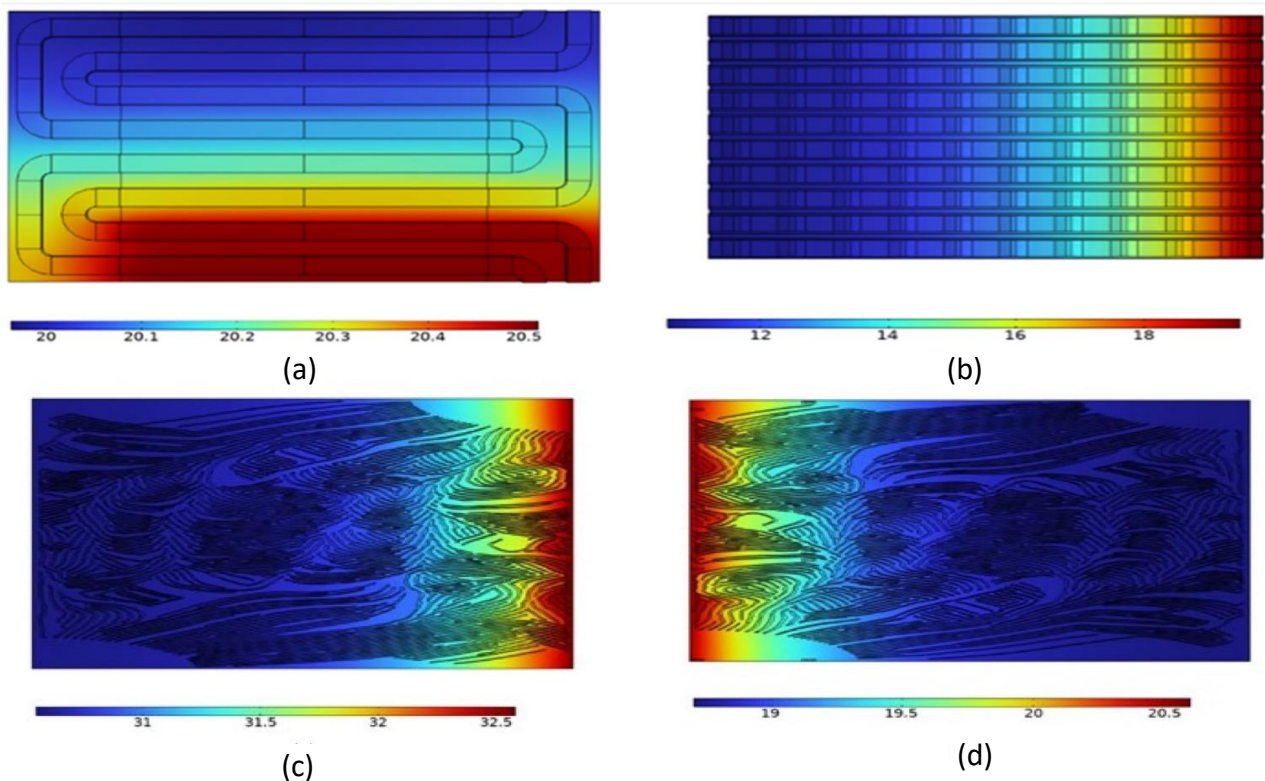


Fig. IX.5. Mole fraction distribution of oxygen (mol.% O<sub>2</sub>) in a) parallel-serpentine design (bottom-up inlet); b) partition design (entrance from right to left); c) Turing design (entrance from right to left); d) hybrid design (left-to-right entrance).

Although increasing the molar fraction of oxygen in the cathode channel is essential, it does not in itself constitute a reliable indicator of the optimal performance of the fuel cell. For a more precise assessment of the actual efficiency of mass transfer and reaction activity, it is necessary to consider not only the pattern of the concentration fields, but also the amount of oxygen that actually reaches a unit area of the core per unit of time. Oxygen mass flow normalized over the active area, which is a reliable indicator for assessing the reagent supply and current generation potential, is presented at the Fig.IX.6

On Fig IX.10 the polarization curves of the four configurations – parallel-serpentine, baffle, Turing and Hybrid with the same mass flow rate of the input flow of  $2.53 \times 10^{-7}$  kg/s are

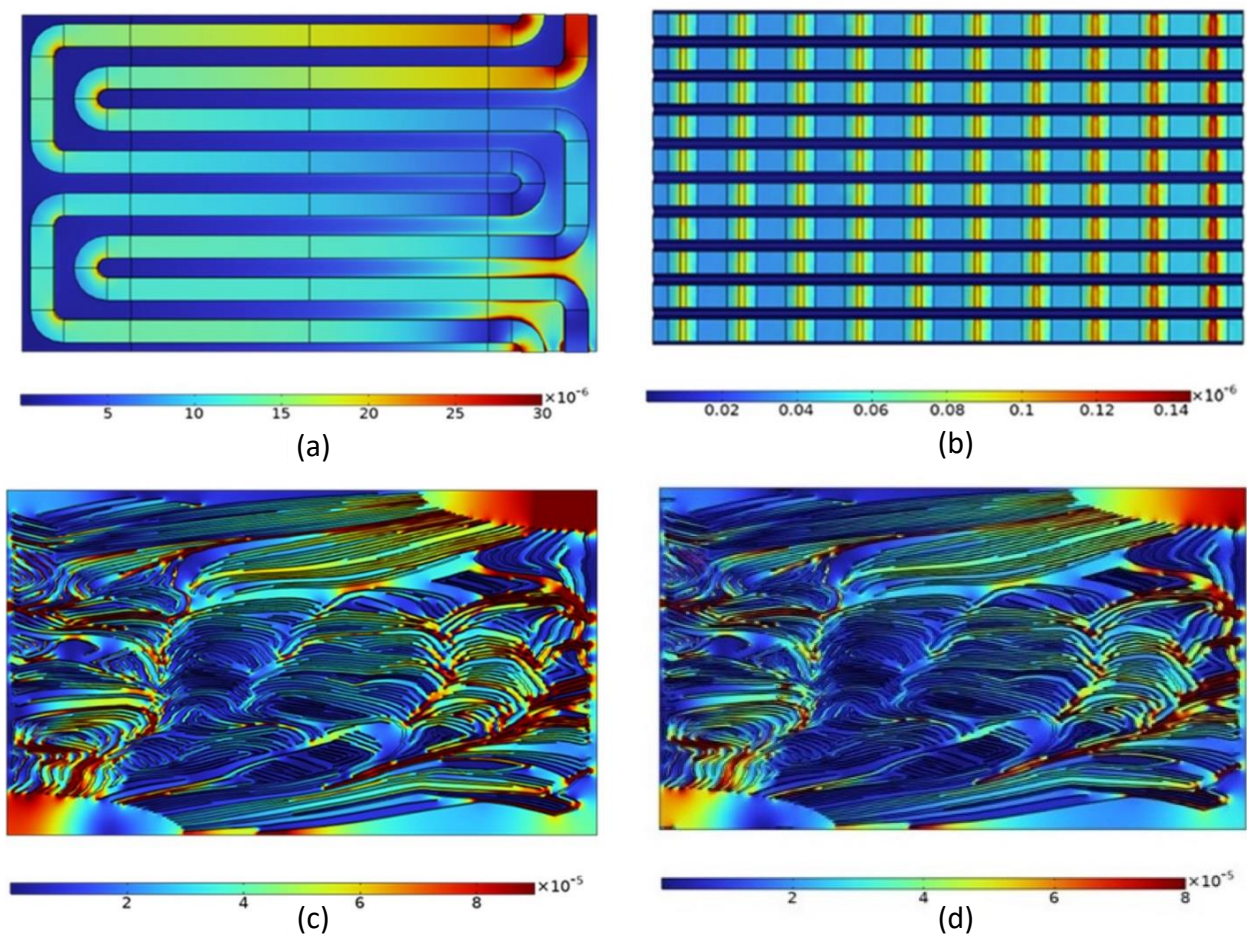


Fig. IX.6 Distribution of oxygen mass flow by channel area (kg/s) for the following designs: (a) parallel-coil design (top-down inlet); b) partition design (entrance from right to left); c) Turing design (entrance from right to left); d) Hybrid model (right-left entry)

presented. The benchmarking in terms of performance is done in the typical operating range for PEMHFC from 0.6 to 0.8 V, in which the highest efficiency is usually achieved. The results for

Turing and hybrid design show a minimum voltage of 0.9 V, indicating their ability to maintain high current density under increased load conditions.

Among the configurations examined, the hybrid design showed the highest overall performance, reaching a current density of 1.2 A/cm<sup>2</sup> at a voltage of 0.9 V, with an output mass air flow rate of  $1.26 \times 10^{-7}$  kg/s and an oxygen recovery rate of 50.20 %. These values show an effective balance between the kinetics of electrochemical reactions and the uniform distribution of reactants. The Turing configuration shows a current density of 1.0 A/cm<sup>2</sup>, a mass

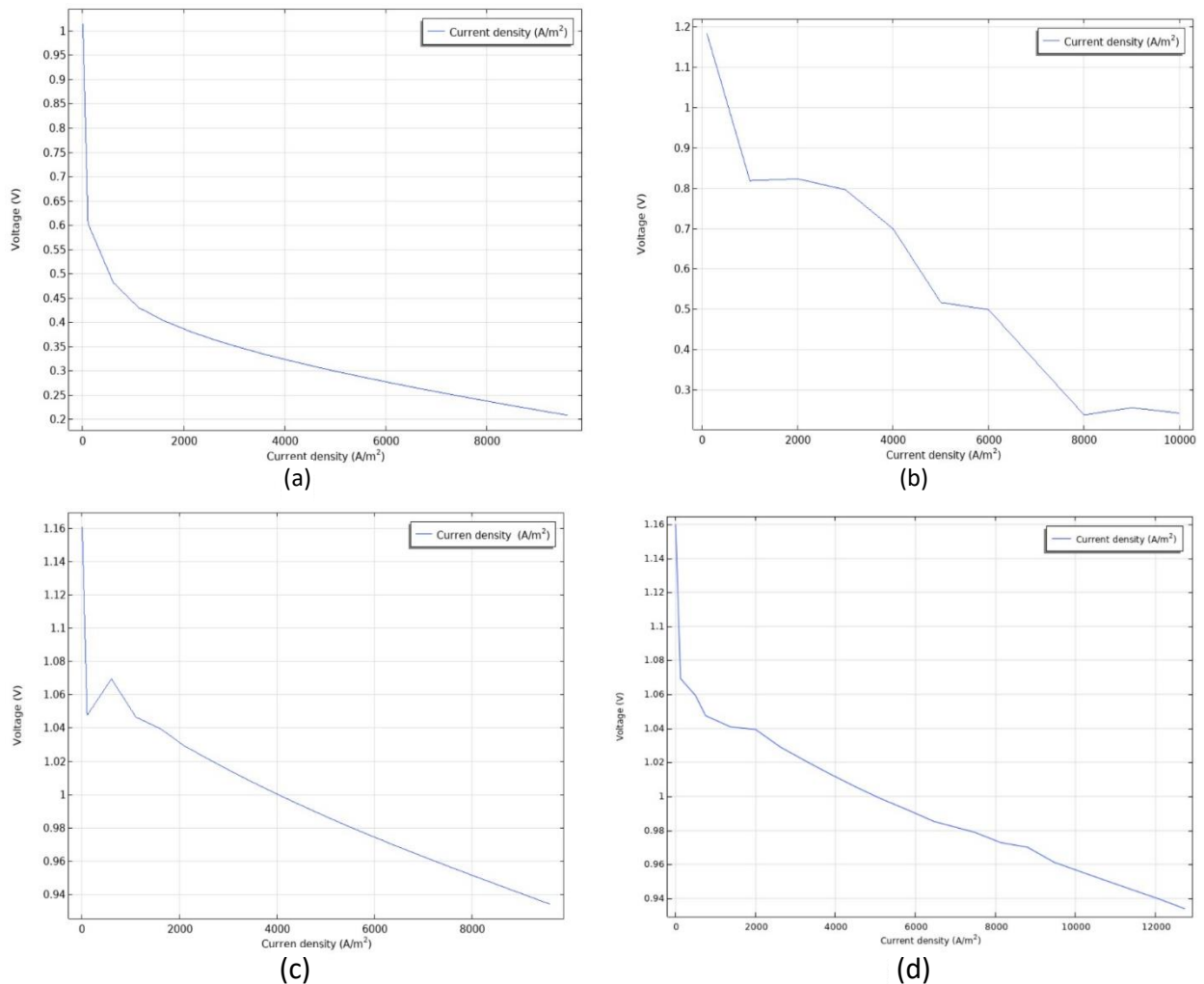


Fig. IX.10 Polarization voltage (V)-current density curves (A/m<sup>2</sup>) for: a) parallel-coil; b) with partitions; c) Turing ; e) hybrid design.

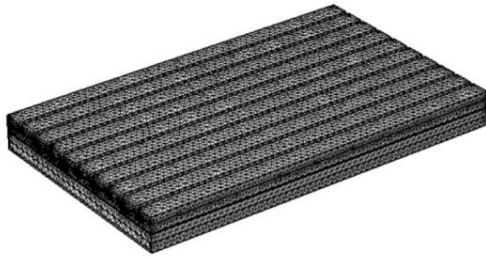
flow rate of  $1.23 \times 10^{-8}$  kg/s, and a high rate of oxygen utilization of 95.14%, which means efficient use of the reactants, despite the lower current. The baffle design shows a lower current density of 0.4 A/cm<sup>2</sup> and a mass flow rate of  $2.26 \times 10^{-8}$  kg/s, also achieving an oxygen utilization efficiency of 91.05 %. This implies good moisture control, but limited electrochemical activity. In contrast, the coil configuration begins to generate current at a lower voltage of about 0.6 V,

which indicates significant activation losses. It achieves only  $0.5 \text{ A/cm}^2$  at a voltage of  $0.35 \text{ V}$  and an output flow rate of  $3.64 \times 10^{-8} \text{ kg/s}$ , as well as oxygen recovery –  $85.61\%$ . Although the Turing configuration shows the highest degree of oxygen recovery, this does not automatically lead to better electrochemical efficiency at high powers. In the case of the hybrid design, approximately  $50\%$  of the oxygen is used efficiently, resulting in the highest current density at the same active area. This shows the importance of effectively managing both kinetic processes and the distribution of reactants. The hybrid design is distinguished by better performance in terms of electrochemical efficiency and reagent management, showing the best performance of the studied variants. Current field configurations with biologically inspired geometries ensure an even distribution of gas flows, thereby reducing pressure drop, but remaining the risk of drying out or flooding the membrane.

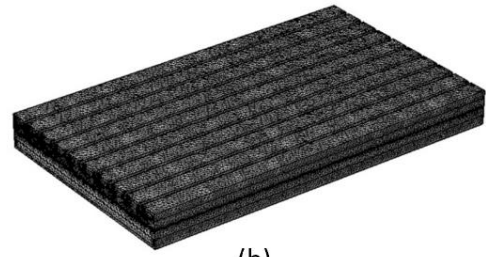
The inclusion of a partition structure in this design contributes significantly to improving moisture management and increasing overall efficiency. Turing and baffle configurations offer stable but not maximum performance, while the parallel-coil design lags far behind, demonstrating the importance of the current field in fuel cell optimization.

### **IX.1. Computing domain and verification of numerical models**

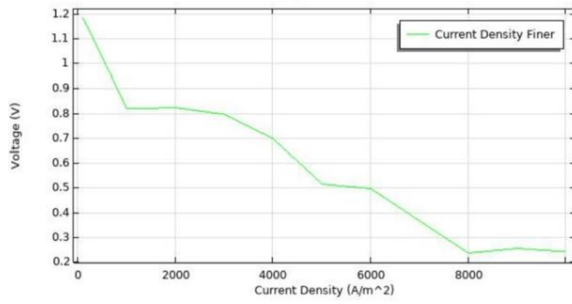
The sampling process involves a sequence of operations that determine the dimensions, distribution, and degree of detail of the elements on a comprehensive and local scale. While general model settings affect the entire computational area, local ones allow for more precise control in certain areas. Predefined mesh dimensions range from "normal" to "extremely fine", and the choice between them is tailored to the geometric and physical complexity of the particular configuration. Within the framework of the present study, a normal discretization grid was used for the partition models and for parallel-serpentine geometry, as it provides a good balance between computational load and accuracy of the results. On Fig IX.11 The computational grid structure for the partitioned model is presented, and the normal (Fig. IX.11a) and fine (Fig. IX.11b) a computing grid to assess the impact of grid density.



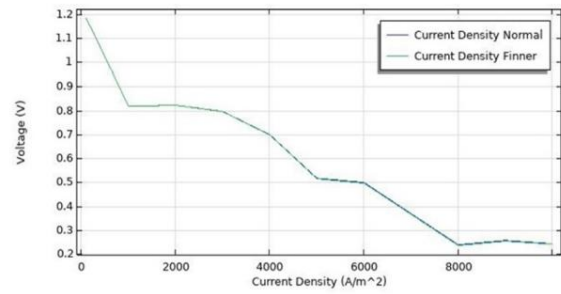
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig. IX.11 Partition design computing domain: (a) normal; (b) fine; (c) a polarisation curve for a fine mesh; (d) comparison of polarization curves for normal and fine mesh.

## CHAPTER X. Conclusions

Based on the results of the research carried out in the PhD thesis, the following conclusions can be drawn:

Through mathematical modeling, an electrode configuration of an alkaline electrolyzer with a perforated structure and increased thickness was studied, through which a more than 50% reduction in the volume of the electrolyzer was achieved while maintaining hydrogen performance. Compared to the classic 110 cm<sup>3</sup> electrolyzer, the perforated model has the same active electrode surface (365 cm<sup>2</sup>), but with almost half the volume (52.5 cm<sup>3</sup>) with a commensurate hydrogen production of 1.32 l/min at 2.1 V. Results show over 52 % increase in productivity per unit volume;

A computational grid of specialized software has been validated, through which the influence of the electrode geometry of alkaline electrolyzers on the rate of formation of gas bubbles has been investigated in order to reduce the ohmic losses of the electrolysis cell. The software-calculated maximum power of an alkaline electrolyzer with a perforated electrode is 102 kW at 1298 A, which corresponds to technologically realistic values, such as a significant increase in current density and efficiency at the same active area.

The possibility of direct connection of the electrolyzer to a PV source system with variable power has been investigated, and the simulation study confirms the possibility of synchronizing the operating characteristics of the systems to ensure the stability of the performance of the electrolyzer under dynamics in the power of the photovoltaic system. This proves the possibility of efficient hydrogen production by electrolysis of water when powered by renewable energy sources.

Simulation studies of various configurations of channel structures in proton exchange membranes in fuel cells have been carried out: classic serpentine, bioinspired Turing design, the baffle configuration, and a new hybrid design has been proposed, combining the advantages of Turing and the baffle design. The comparative studies carried out show that the proposed hybrid design shows the best efficiency, with a current density of 1.2 A/cm<sup>2</sup> and 50.2 %

efficiency of oxygen use, compared to the classic design with a current density of the same parameters of 0.3 A/cm<sup>2</sup>.

Computational models have been created and validated to describe the electrode configurations of alkaline electrolyzers and fuel cell channel structures, and the research conducted shows that numerical modeling in a COMSOL environment provides a reliable tool for software-based design and optimization of electrolysis and fuel cells.

Comparison with real data and validation of the results show that software-designed configurations of an alkaline electrolyzer with perforated electrodes and a proton exchange fuel cell with a hybrid draft field design have real application potential.

The analysis shows the need for technological compromises in alternative configurations, such as a common anode and a common cathode, which provide better cooling, lower electrical losses and organized gas separation, but give significant deviations in real power from the design power.

## **SCIENTIFIC, SCIENTIFIC-APPLIED AND APPLIED CONTRIBUTIONS**

### **Scientific and scientific-applied contributions**

A new electrode configuration with perforated holes has been proposed and investigated and the potential for miniaturization of alkaline electrolysis systems has been proven, achieving a greater effective active surface area and a higher rate of electrochemical reaction.

A computational procedure of electrode surfaces and reaction zones of alkaline electrolyzers has been built and validated as a basis for simulation-based design and scaling of electrolysis systems.

A new hybrid geometry of the Turing design type with partitions to increase the energy efficiency of fuel cells with proton exchange membranes has been proposed and researched. Through model studies, the importance of the hybrid configuration in minimizing ohmic losses through the distribution of reagent flows and the efficient removal of water as a reaction product for the sustainable functioning of the fuel cell has been proven.

A computational procedure for proton-membrane fuel cells has been developed and validated, which allows simulation-based design of various configurations and optimization of mode parameters.

### **Applied contributions**

An approach is proposed for the direct integration of an alkaline electrolyser with a photovoltaic system in synchronization of their performance characteristics and by configuring the number of parallel and series connected cells to achieve the most efficient production of green hydrogen.

## **LIST OF PUBLICATIONS ON THE PHD THESIS**

Publications in refereed journals with impact factor and impact rank

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

Caizhi Zhang, Xu Cao, Shutong Deng, Xin Gao, Dilyan Gavrilov, 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, quartile: Q1

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

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

Publications in refereed publications with impact rank

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

D Y Gavrilov 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.