

大型质子交换膜燃料电池优化建模

叶云涛¹, 江小辉¹, 杨 曜^{1,2}

¹上海理工大学机械工程学院, 上海

²上海捷氢科技股份有限公司, 上海

收稿日期: 2023年2月13日; 录用日期: 2023年3月8日; 发布日期: 2023年3月15日

摘要

本文研究质子交换膜燃料电池(Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)中的关键部件密封圈和气体扩散层(Gas Diffusion Layer, GDL)在制造时产生的尺寸公差对其受力影响。通过建立一种弹簧-阻尼模型用于仿真大型电堆的压紧过程。此模型相比于FEM (Finite Element Method)模型, 极大提高了计算效率。传统FEM模型计算单片单电池所需的时间通常会超过20分钟, 而当电堆层数增加时, 计算时间会呈非线性增加, 采用此模型计算100层电堆只需要8分钟。计算结果可以显示出每一层电池中的密封圈和GDL的受力大小, 根据这些结果, 可为电堆的夹紧力设计提供参考。结果表明, 随着压缩比增大, 密封圈和GDL的受力及力的标准差呈非线性增加, 含有公差的部件与标准部件受力的值相差达到28%。

关键词

质子交换膜燃料电池, 优化建模, 密封圈, 气体扩散层, 压力

Optimal Modeling of Large Proton Exchange Membrane Fuel Cells

Yuntao Ye¹, Xiaohui Jiang¹, Xi Yang^{1,2}

¹School of Mechanical Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

²Shanghai Hydrogen Propulsion Technology Company Limited, Shanghai

Received: Feb. 13th, 2023; accepted: Mar. 8th, 2023; published: Mar. 15th, 2023

Abstract

In this paper, we investigated the effect of dimensional tolerance on the force of key component seal ring and GDL (Gas Diffusion Layer) in PEMFC (proton exchange membrane fuel cell) when manufactured. A spring-damping model was developed to simulate the compression process of a large stack. Compared with FEM (Finite Element Method) model, this model greatly improved the

calculation efficiency. The traditional FEM model usually takes more than 20 minutes to compute a single cell, but the calculation time increases nonlinearly as the number of layers increases. It takes only 8 minutes to calculate 100 layers of stack using this model. The calculation results can show the force of the seal ring and GDL in each cell, according to these results, it can provide a reference for the design of the clamping force of the stack. The results showed that the force and standard deviation of force of seal ring and GDL increased nonlinearly with the increase of compression ratio. The difference of force between the tolerance component and the standard component is up to 28%.

Keywords

Proton Exchange Membrane Fuel Cell, Optimization Modeling, Seal Ring, Gas Diffusion Layer, Force

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

质子交换膜燃料电池(PEMFC)具有高能量转化效率，工作温度低，启动速度快，无污染等优点，可以广泛应用于汽车，航空航天，潜艇，发电站等众多领域。由于每片单电池的实际输出电流有限，很难满足人们的实际需求，因此在实际设计时，工程师会根据需要的功率，将若干片单电池串联叠合并用螺栓紧固成电池堆[1] [2] [3] [4] [5]。

过大的封装载荷会过度挤压双极板，MEA，密封垫圈等部件，使得这些重要部件产生过度变形甚至受损。过小的封装载荷会使密封垫圈与双极板接触不够紧密，从而产生气体泄漏现象。可靠的密封性能是电堆稳定运行的必要条件[6] [7] [8]。Khazaee [9]建立不同形状的单流道 PEMFC 模型，研究了不同夹紧力对 GDL 接触压力分布的影响。Movahedi [10]等人建立了 PEMFC 的三维模型，研究了不同参数的影响。结果表明，夹紧力存在一个最佳范围，其范围取决于 GDL 的厚度，最佳的夹紧力可以改善电池中的温度分布。Chen 等人[11]不同组装扭矩对气体泄漏率的影响，提出了考虑电化学性能和密封性能的最佳组装扭矩。Huang 等人[12]发现增加夹紧力可以提高电堆的输出功率和稳定性，但超过最佳夹紧力，电堆的输出功率就会下降。由此可见，电堆压缩与电堆的性能有着密不可分的关系。

电堆性能不只表现在功率输出，还关乎于电堆的密封性能。密封性能不足会导致气体和水发生泄漏，使电堆性能下降或故障[13] [14]。更严重的情况甚至会让氢气泄漏产生爆炸[15]。Huang 等人[16]提出一种泄漏机制模型用于评估密封件的长期泄漏率。Zhang 等人[17]研究了 PEMFC 在不同的工作温度下的密封性能，发现温度对密封结构的 von-Mises 应力有很大的影响，不容忽视。Diankai 等人[18]研究了不同密封材料的力学特性，结果表明，压缩率对密封结构的接触应力有很大的影响，并且 SR 相比于 EPDM，NBR 和 FR 有更好的密封性能。

上述结论均由 10 层以内的电堆研究得出，属于小型电堆范围。通常一片单电池的输出电压在 0.7 V 左右，若组成大型电堆需要堆叠上百层单电池。其中双极板具有复杂的特征，这使得仿真大型电堆变得非常困难，并且会消耗大量的资源和时间。Lin 等人[19] [20]提出一种大型 PEMFC 电堆的高效组装技术，此技术在保证计算精度的同时极大地减少了计算时间。通过此技术研究了电堆的刚度变化，结果表明，当电堆中电池的数量增加时，等效刚度以非线性方式降低，并给出了 PEMFC 的最佳夹紧力。

众多学者通过研究标准尺寸的密封圈和 GDL，从而给出理想接触应力。但未考虑到尺寸公差对部件

受力的具体影响。除此之外，当许多具有尺寸公差的部件被装配到电堆中时，其受力也会出现变化。同时，电堆组装完毕后能否保持在理想接触应力范围内仍有待研究。基于以上两个问题，本文将详细地展开研究。研究结果能够为后续地电堆组装提供有价值地参考。

2. 电堆优化模型

纸型

图 1 为电堆内部结构的三维模型。密封圈，MEA 和双极板组成一片单电池。根据实际输出需求堆叠足够的单电池后，依次在两侧覆盖上集流板和绝缘板，最后利用端板和螺栓封装成多级电堆。每片双极板都有极其复杂的结构，这导致 FEM 模型难以模拟多级电堆。因此，简化双极板流场的结构成了模拟多级电堆的关键。得益于电堆压装的过程不参与流体计算，本文建立了一种弹簧 - 阻尼模型。图 2 左边部分表示多级电堆的结构示意图，右边部分表示单片燃料电池的模型结构。电堆中的每个部件都被表示成一种弹簧。已知弹簧的压缩量，可得到相应的受力。此模型的原理就是把关键部件的力 - 位移曲线通过实验或者仿真等方法提取出来，赋予到这些相应的弹簧上，以此来实现电堆的压缩过程。仿真基于 Abaqus 并使用 Python 对其进行二次开发，使用代码自动完成一系列前处理，例如建模、装配和提交作业等。

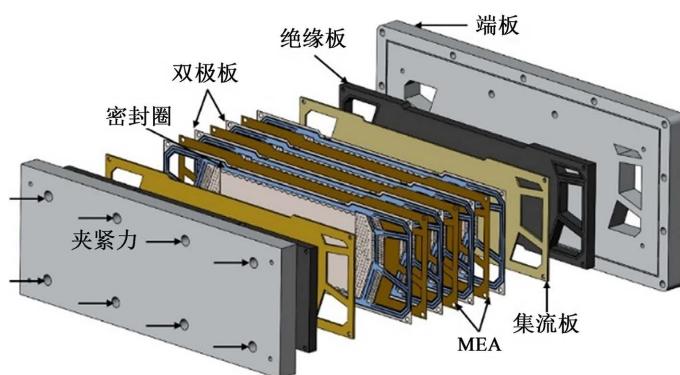


Figure 1. Schematic diagram of the 3D structure of the stack

图 1. 电堆三维结构示意图

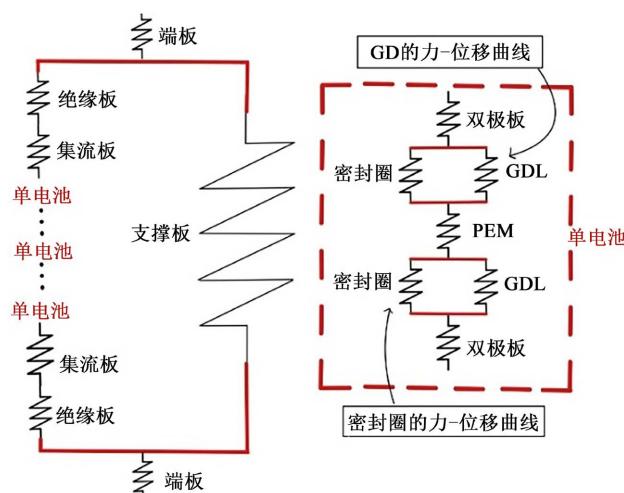


Figure 2. Spring-damping model of PEMFC

图 2. PEMFC 弹簧 - 阻尼模型

图 3 表示了密封圈和 GDL 的 FEM 模型。这两个模型被用来提取力 - 位移曲线。密封圈的形状为矩形，其厚度为 0.4 mm，宽度为 3 mm。GDL 的长和宽分别是 250 mm 和 110 mm，厚度为 0.3 mm。白色线条为双极板的流道和脊。脊的宽为 1 mm，圆角为 0.25 mm。密封圈为橡胶材料，其应力应变采用 Ogden 本构模型。Ogden 模型的应变能势函数基于左手柯西格林应变张量的主伸长率，有如下形式：

$$W = \sum_{i=1}^N \frac{u_i}{\alpha_i} (\lambda_1^{-\alpha_i} + \lambda_2^{-\alpha_i} + \lambda_3^{-\alpha_i} - 3) + \sum_{k=1}^N \frac{1}{D_k} (J-1)^{2k} \quad (1)$$

(1)式中，N 通常取 1~3 之间的数，表示模型的阶数。 u_i 的单位是压力和 α_i 是无量纲，它们都是材料常数。 D_i 为不可压缩参数用于表示体积变化。缩减主伸长率具有如下关系：

$$\overline{\lambda}_p = \lambda^{-\frac{1}{3}} \lambda_p \quad (2)$$

$$J = (\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3)^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

λ_1 、 λ_2 和 λ_3 是应变张量的三个方向上的主伸长率。Ogden 模型的优点在于可以广泛应用于各类型的超弹本构关系。在橡胶的整个应变范围内部具有较好的模拟能力。当 N = 3 或更高时，可达到所需要的精度要求。且在某些特定条件下转化为 neo-Hookean 模型和 Mooney-Rivlin 模型。

图 4 表示被提取出来的力 - 位移曲线。每条曲线表示一种尺寸的密封圈或 GDL。图中存在 18 条曲线。密封圈和 GDL 各有 9 条曲线。这些曲线将被赋予到代表相应部件的弹簧模型中，表示每片燃料电池中不同尺寸的密封圈和 GDL，用于模拟尺寸公差对部件受力的影响。由曲线可以看出，被压缩相同位移的情况下，由于压缩比增大，厚度越薄的部件受力越大。

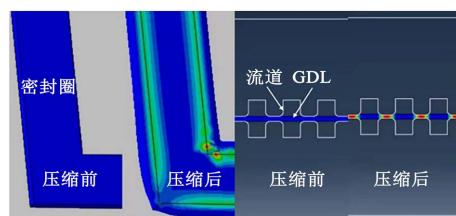


Figure 3. FEM model of sealing ring and GDL
图 3. 密封圈和 GDL 的 FEM 模型

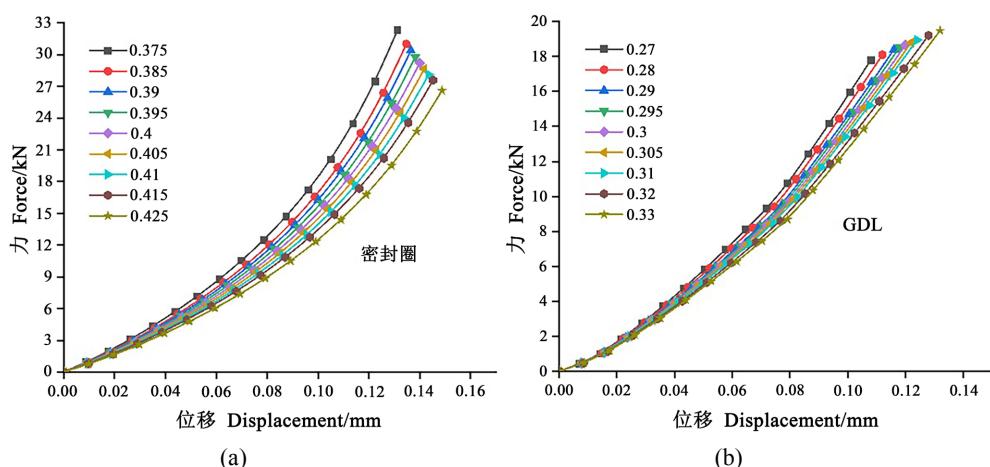


Figure 4. Force-displacement curves of components
图 4. 部件的力 - 位移曲线

通过计算得到部件所受力的大小可以推算出，电堆处于当前状态下是否符合运行标准。假设密封圈的受力为 F_1 ，可以根据公式(4)得出相应的压应力 σ ，其中 S_1 为密封圈和双极板的接触面积：

$$\sigma = \frac{F_1}{S_1} \quad (4)$$

图 5 为密封圈在气体压力下的示意图，根据不等式(5)即可以判断密封圈所受压力 F 是否可以达到密封标准， S_2 为内部气体与密封圈的接触面积， μ 为静摩擦系数：

$$\sigma \geq \frac{p \cdot S_2}{\mu \cdot S_1} \quad (5)$$

同样根据计算得出的 GDL 所受的压力 F_2 结合图 4 找到对应的压缩位移，通过公式(6)可以算出其受压后的孔隙率， ε_0 和 δ_0 分别为 GDL 的初始孔隙率和厚度， ε 和 δ 为变化后的孔隙率和厚度：

$$(\varepsilon - 1) \cdot \delta = (\varepsilon_0 - 1) \cdot \delta_0 \quad (6)$$

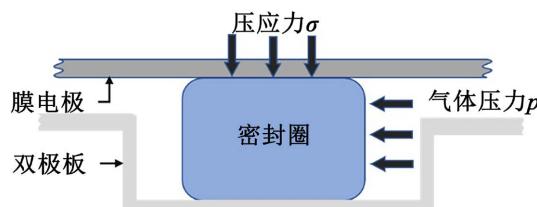


Figure 5. Diagram of sealing ring under gas pressure
图 5. 密封圈在气体压力下的示意图

此弹簧 - 阻尼模型可以反映多级电堆压装后的每片电池中密封圈和 GDL 的受力大小。基于以上分析，本研究对弹簧 - 阻尼模型提出了几点假设：

- 1) 电堆中的部件在夹紧力的作用下主要产生单向压缩位移，忽略其余两个方向的位移。
- 2) 电堆只会沿受压方向产生位移，而不会在其他方向上发生位移和旋转。
- 3) 所有材料均是弹性的，各向同性和均匀性的。
- 4) 该模型处于稳态状态。
- 5) 压缩过程在室温下进行。
- 6) 模型中的端板被视为刚体。

3. 压缩比对部件受力的影响

3.1. 压缩比对部件受力的平均值的影响

在本章的弹簧 - 阻尼模型中，电堆的层数为 100 层，密封圈和 GDL 都采用正态分布。装配间隙被设置为 0.05 mm。在电堆被压缩前，双极板先与密封圈接触，随着电堆被不断压缩，GDL 也会受到压缩。如图 6 所示，定义压缩比 ε 为电堆被压缩的高度 h_1 与电堆原高度 h_0 的比值。压缩比分为四种案例，分别是 25%、27.5%、30% 和 32.5%。图 7 表示了每组案例的密封圈和 GDL 的受力的平均值。由图所示，随着压缩比增加，部件的受力的平均值呈非线性增加。受力的平均值反映出部件受力的大致分布位置。

3.2. 压缩比对部件受力的标准差的影响

图 8 表示 100 层电堆中，不同压缩比对密封圈和 GDL 受力的标准差的影响。可以看出两条曲线重合度过高，其原因是处于同一单电池内的密封圈和 GDL 为并联放置。两者的受力不仅仅取决于自身的压缩比，同时需要保证两个部件受力之和与它们串联的部件的受力之和保持平衡，使得同一片单电池内的密

封圈和 GDL 的受力相互制约。结果表明, 压缩比越大, 部件受力的标准差越大, 且呈非线性增加。受力的标准差反映了部件受力的波动大小。标准差越小, 即这组数据越稳定。

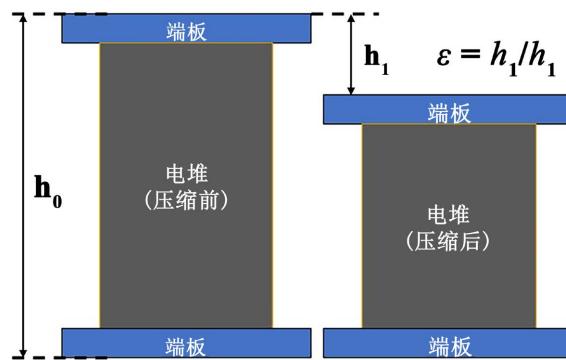


Figure 6. Definition of compression ratio
图 6. 压缩比的定义

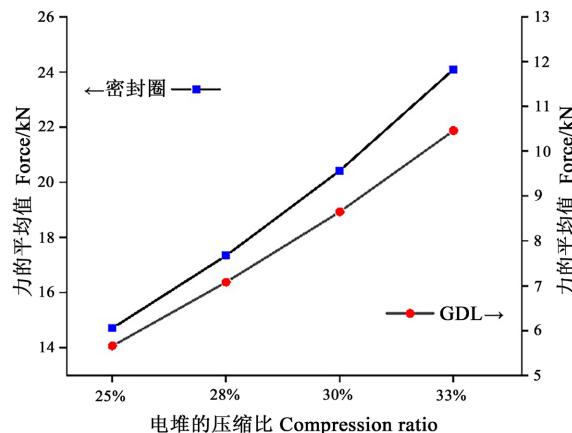


Figure 7. Average values of component forces in four cases
图 7. 四种案例下部件受力的平均值

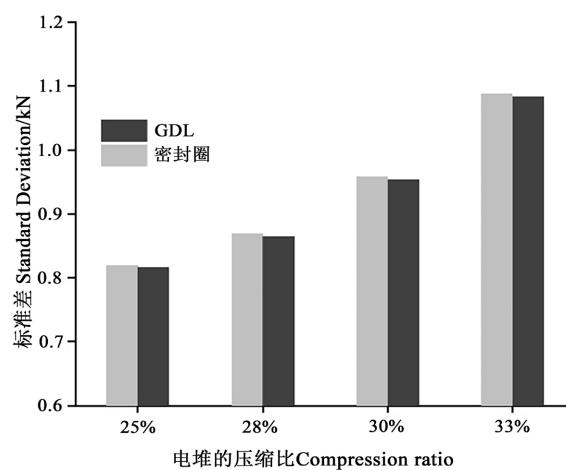


Figure 8. Standard deviation of component forces under different compression ratios
图 8. 不同压缩比下部件压力的标准差

4. 公差对部件受力的影响

实际工况下，单片电池受力约为 30 kN 左右。由结果可知，当电堆的压缩比为 30% 时，单片电池受力达到 29.06 kN 左右，最接近于 30 kN。在图 9 中，黑色实线表示标准值(以密封圈为例，当密封圈厚度为标准的 0.4 mm，压缩比为 30% 时受到的压力值)，红色虚线表示平均值。黑色的点代表每层中密封圈和 GDL。

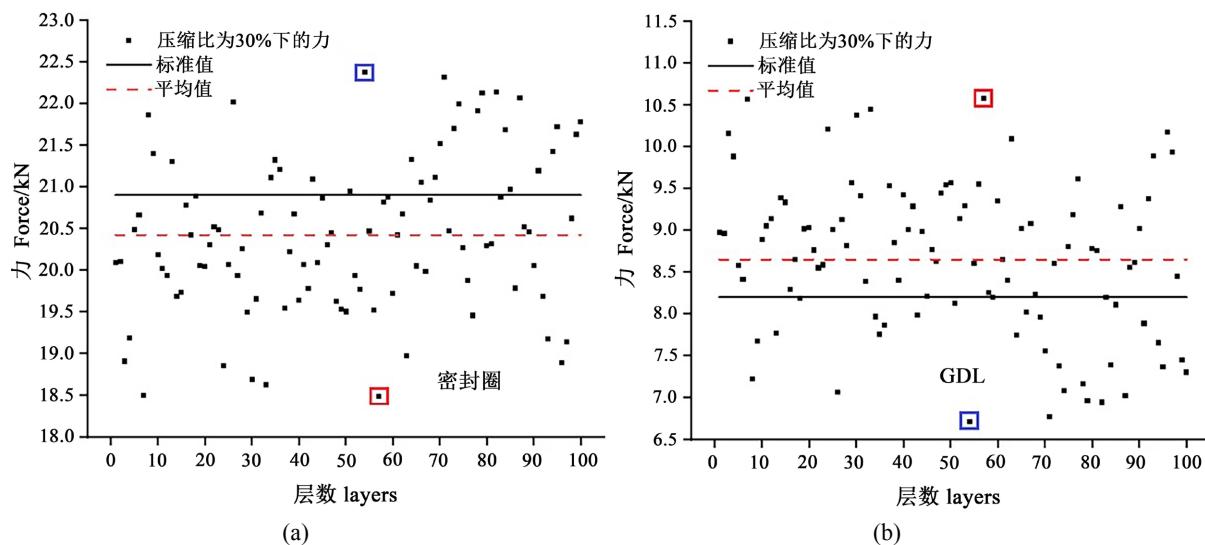


Figure 9. Force scatter diagram of sealing ring and GDL under different compression ratios
图 9. 不同压缩比下密封圈和 GDL 的受力散点图

当电堆的压缩比为 30% 时，密封圈的最大受力值为 22.37 kN，比标准值 20.84 kN 多了 7.4%，最小受力值为 18.49 kN，比标准值少了 12.7%。GDL 的最大受力为 10.57 kN，比标准值 8.26 kN 多了 28%，最小受力值为 6.71 kN，比标准值低了 23%。结果表明，含有公差的部件的受力与标准尺寸的部件受力(标准值)存在明显的差别。

图 9 中蓝色方框表示第 54 层电池。这层的部件的受力处于比较极端的情况，密封圈受力为整个电堆中的最大值，而 GDL 的受力为整个电堆中的最小值。导致这种情况发生的原因可以用图 10 解释。图 10 表示电堆的截面图，不同尺寸的部件均为随机搭配。当出现图 10 中第二层的情况就会产生蓝色方框的结果。因为在这一层中，密封圈和 GDL 的厚度相差过大，导致电堆被压紧后，密封圈会受到更多的压缩比。图 7 也说明压缩比越大，部件的受力越大。相反，如果出现第三层的情况，就会产生红色方框的结果。为了防止这种情况发生，可以避免使同一层中的密封圈和 GDL 的公差相差过大，例如 0.425 mm 的密封圈搭配 0.27 mm 的 GDL，或者 0.375 mm 的密封圈搭配 0.33 mm 的 GDL。

经过仿真计算出的结果，例如受力的平均值、标准差和受力范围并不是一个具体的值。在上一节中提到，每一层的部件均为随机搭配。那么如果重新装配一个电堆，无法保证新的电堆中的装配细节与上一个电堆完全一样。如图 11 所示，每一次组装新的电堆可能会是情况 a，也有可能会是情况 b。随着重建模型的次数增加，计算结果会逐渐形成一个范围区间。如果把重新建模看作为组装新的电堆，那么采用压缩比为 30% 的情况下重建模型 6 次可以看作是实际组装了 6 台电堆，这 6 组数据呈现在表 1 中。经过 6 次计算，Seal ring 的压力的平均值范围在 20.42 kN~20.98 kN；GDL 的压力的平均值范围在 8.32 kN~8.65 kN。两种部件的压力的标准差非常接近，维持在 0.1 kN 左右。极差表示部件受力的最大值与最小值的差。密

封圈的极差为 3.88~5.59 kN, GDL 的极差为 3.86~5.56 kN。以上得到的数据为后续电堆的设计及安全系数提供有益的参考。

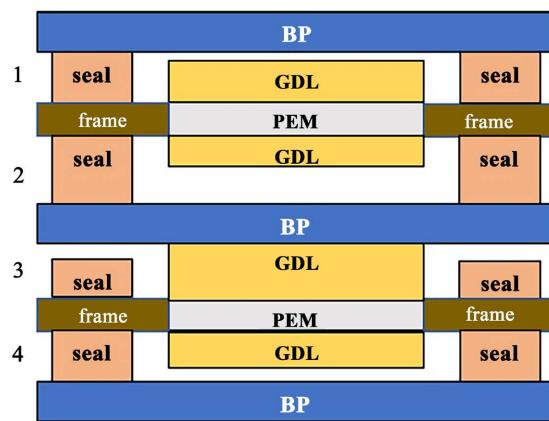


Figure 10. Schematic diagram of stack-1

图 10. 电堆示意图-1

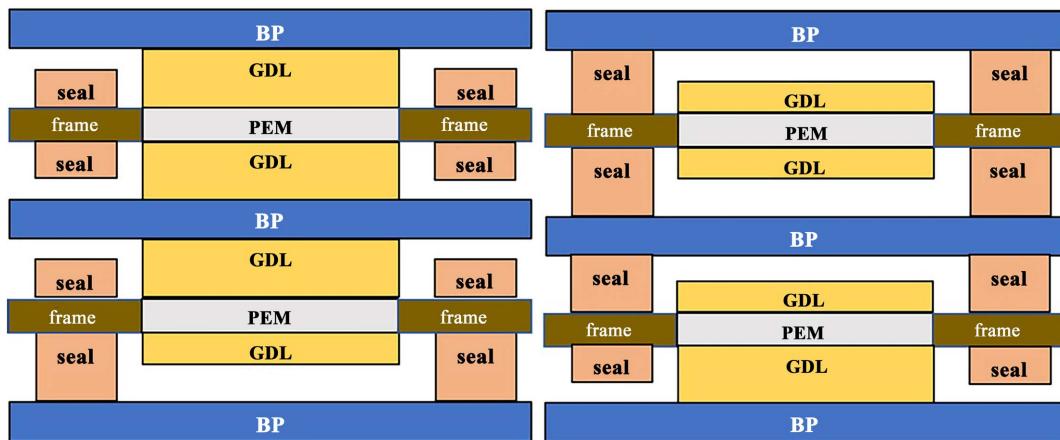


Figure 11. Schematic diagram of stack-2

图 11. 电堆示意图-2

Table 1. System resulting data of standard experiment

表 1. 标准试验系统结果数据

重建次数	密封圈			GDL		
	平均值/kN	标准差/kN	极差/kN	平均值/kN	标准差/kN	极差/kN
1	20.98	1.11	5.59	8.59	1.11	5.56
2	20.86	0.91	4.54	8.59	0.90	4.52
3	20.82	0.94	4.53	8.53	0.94	4.50
4	20.50	0.97	4.34	8.32	0.97	4.32
5	20.73	1.06	5.36	8.49	1.06	5.33
6	20.42	0.96	3.88	8.65	0.95	3.86

5. 结论

本文建立了一种弹簧 - 阻尼模型用于模拟电堆压装的过程，并考虑了尺寸公差对部件受力的影响。研究了电堆的压缩比对密封圈和 GDL 受力的影响。相比于 FEM 模型，此模型用于计算大型电堆压缩过程可以极大地提高计算效率。综合以上分析，得出如下的结论：

- 1) 仿真大型质子交换膜燃料电池电堆压缩过程时，此优化模型相比于 FEM 模型在计算效率和计算时间上有极大的优势。从提交任务到计算完成只需 8 分钟左右。
- 2) 压缩比越大时，密封圈和 GDL 的受力及其标准差越大，且呈非线性增加。
- 3) 公差会导致整个电堆中的个别部件会出现受力过大或者过小的情况。避免同一片单电池中的密封圈和 GDL 的厚度相差过大可有效防止这种情况发生。

目前主流的研究停留在小型电堆的模拟，但是建立大型的电堆模型分析其各种性能仍是未来的重要研究目标和方向。

基金项目

上海市自然科学基金项目(19060502300, 20ZR1438000)资助。

参考文献

- [1] Zhang, Y., He, S.R., Jiang, X.H., et al. (2022) 3D Multi-Phase Simulation of Metal Bipolar Plate Proton Exchange Membrane Fuel Cell Stack with Cooling Flow Field. *Energy Conversion and Management*, **273**, Article ID: 116419. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.116419>
- [2] Zhang, Y., He, S.R., Jiang, X.H., et al. (2022) Characteristics of Proton Exchange Membrane Fuel Cell Considering “Dot Matrix” Gas Distribution Zones and Waveform Staggered Flow Field with Cooling Channels. *Energy Conversion and Management*, **267**, Article ID: 115881. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2022.115881>
- [3] Zhang, Y., He, S.R., Jiang, X.H., et al. (2022) Performance Study on a Large-Scale Proton Exchange Membrane Fuel Cell with Cooling. *International Journal of Hydrogen Energy*, **47**, 10381-10394. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.01.122>
- [4] Lewandowska-Bernat, A. and Desideri, U. (2017) Opportunities of Power-to-Gas Technology. *Energy Procedia*, **105**, 4569-4574. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.982>
- [5] Ferrero, D., Gamba, M., Lanzini, A. and Santarelli, M. (2016) Power-to-Gas Hydrogen: Techno-Economic Assessment of Processes towards a Multi-Purpose Energy Carrier. *Energy Procedia*, **101**, 50-57. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2016.11.007>
- [6] Singdeo, D., Dey, T. and Ghosh, P.C. (2014) Contact Resistance between Bipolar Plate and Gas Diffusion Layer in High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, **39**, 987-995. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.10.147>
- [7] Wu, Z., Zhou, Y., Lin, G., et al. (2008) An Improved Model for Predicting Electrical Contact Resistance between Bipolar Plate and Gas Diffusion Layer in Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *Journal of Power Sources*, **182**, 265-269. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2008.03.044>
- [8] El Oualid, S., Lachat, R., Candusso, D. and Meyer, Y. (2017) Characterization Process to Measure the Electrical Contact Resistance of Gas Diffusion Layers under Mechanical Static Compressive Loads. *International Journal of Hydrogen Energy*, **42**, 23920-23931. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.130>
- [9] Khazaee, I. (2013) Experimental Investigation of Irreversibility of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Journal of Energy Resources Technology*, **134**, 24502-24505. <https://doi.org/10.1115/1.4006045>
- [10] Movahedi, M., Ramiar, A. and Ranjber, A.A. (2016) 3D Numerical Investigation of Clamping Pressure Effect on the Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cell with Interdigitated Flow Field. *Energy*, **142**, 617-632. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.10.020>
- [11] Chen, C.Y. and Su, S.C. (2018) Effects of Assembly Torque on a Proton Exchange Membrane Fuel Cell with Stamped Metallic Bipolar Plates. *Energy*, **159**, 440-447. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2018.06.168>
- [12] Huang, K.J., Chen, C.Y., Hwang, S.J. and Lai, W.H. (2012) Effects of Compression Distribution on PEMFC Stacks Using Reformatte as Fuel. *Energy Procedia*, **29**, 234-243. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.09.029>

-
- [13] Chung, T.T., Lin, C., Shiu, H.R., *et al.* (2010) Optimum Design of O-Ring Shapes for a PEM Fuel Cell Stack with Carbon Based Bipolar Plates. *ASME 2010 8th International Fuel Cell Science, Engineering and Technology Conference*, Volume 1, 573-579. <https://doi.org/10.1115/FuelCell2010-33166>
 - [14] Yang, D., Ma, J., Zhang, Q., *et al.* (2020) Accelerated Test of Silicone Rubbers Exposing to PEMFC Environment. *Progress in Natural Science: Materials International*, **30**, 882-889. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.10.008>
 - [15] Lee, D., Lim, J.W., Nam, S., *et al.* (2015) Gasket-Integrated Carbon/Silicone Elastomer Composite Bipolar Plate for High-Temperature PEMFC. *Composite Structures*, **128**, 284-290. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2015.03.063>
 - [16] Huang, X.M., Liu, S., Yu, X.L. and Zhang, Y.J. (2022) A Mechanism Leakage Model of Metal-Bipolar-Plate PEMFC Seal Structures with Stress Relaxation Effects. *International Journal of Hydrogen Energy*, **47**, 2594-2607. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.161>
 - [17] Zhang, J. and Hu, Y. (2020) Sealing Performance and Mechanical Behavior of PEMFCs Sealing System Based on Thermodynamic Coupling. *International Journal of Hydrogen Energy*, **45**, 23480-23489. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.06.167>
 - [18] Qiu, D.K., Liang, P., Peng, L.F., *et al.* (2020) Material Behavior of Rubber Sealing for Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, **45**, 5465-5673. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.07.232>
 - [19] Lin, P., Zhou, P. and Wu, C.W. (2009) A High Efficient Assembly Technique for Large PEMFC Stacks Part I. Theory. *Journal of Power Sources*, **194**, 381-390. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.04.068>
 - [20] Lin, P., Zhou, P. and Wu, C.W. (2010) A High Efficient Assembly Technique for Large Proton Exchange Membrane Fuel Cell Stacks: Part II. Applications. *Journal of Power Sources*, **195**, 1383-1392. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.09.038>