

氢燃料电池密封胶线压缩仿真分析与研究

李 天¹, 樊中免^{1,2}, 李昊依², 刘长军^{1,2*}

(1. 沈阳工业大学化工装备学院, 辽宁 辽阳 111003; 2. 辽阳云梦增材科技有限公司, 辽宁 辽阳 111000)

摘要:为了探究质子交换膜(PEMFC)工作过程中密封件的压缩比对电池密封性能的影响,首先采用 Mooney-Rivlin 5 超弹性本构模型对 EPDM70 密封条材料进行曲线拟合,以提高分析和仿真精准性。然后对密封件的高度、形状进行设计计算,设计了用于压缩仿真的圆角为 0.2 mm 的矩形模型,并通过拓扑优化分析逐步设计为双峰结构。最后采用 ANSYS 非线性有限元方法对燃料电池密封胶线的压缩进行仿真分析。结果表明,圆角密封胶线的密封力更大,圆角平面密封胶线的密封力与双峰结构一致,并在密封要求下提出了密封件的初始高度。

关键词:氢燃料电池;压缩仿真;密封力;有限元

中图分类号:TM911.4

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2023)S2-0273-05

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2023.S2.054

Simulation analysis and study of hydrogen fuel cell sealant-thread compression

LI Tian¹, FAN Zhong-mian^{1,2}, LI Hao-yi², LIU Chang-jun^{1,2*}

(1.School of Chemical Equipment, Shenyang University of Technology, Liaoyang 111003, China;

2.Liaoyang Yunmeng Additive Technology Co., Ltd., Liaoyang 111000, China)

Abstract:In order to investigate the influence of the compression ratio of the sealing element on the sealing performance of the cell during the operation of the proton exchange membrane (PEMFC), the Mooney-Rivlin 5 hyperelastic intrinsic model is firstly used to curve fit the EPDM70 seal material to improve the accuracy of analysis and simulation. Then, the height and shape of the sealing element are designed and calculated, and a rectangular model with rounded corners of 0.2 mm is designed for compression simulation, and gradually designed as a bimodal structure by topology optimization analysis. Finally, ANSYS nonlinear finite element method is employed to simulate the compression of the fuel cell sealing strip. The results show that the rounded corner sealant-thread exhibits a higher sealing force that is consistent with the double-peaked structure. The initial height of the seal element is proposed under the sealing requirement.

Key words:hydrogen fuel cell; compression simulation; sealing force; finite element

制约氢燃料电池商业化发展的重要因素是质子交换膜燃料电池(PEMFC)的续航能力和寿命^[1]。密封材料作为燃料电池重要组成部分虽然不参与电化学反应,但性能优劣直接影响着蓄电池的发电效率和使用寿命^[2]。通过改变质子交换膜燃料电池密封层的厚度,比较 3 个单电池的极化曲线和内阻变化,得出一个符合条件的密封层厚度^[3]。对圆角矩形、圆角梯形、双峰梯形和双峰半圆形 4 种形状的密封结构进行仿真分析,结果表明,有圆角的矩形密封结构密封效果更好。在截面底边接触长度相同的情况下,随着截面顶部接触面积减小,密封结构对应的应力应变仿真结果也减小^[4]。

针对燃料电池最佳密封力作用下密封结构易失效的问题,提出了以最佳密封力为基础的密封结构设计方法,并运用有限元分析手段,基于燃料电池结构和工作原理进行验证。结果发现,在保证燃料电池工作性能不受影响的同时,基于这种方法设计的密封槽和密封圈也处于压缩的最佳状态,不仅密封圈的预压缩量比橡胶的永久变形量要小,而且产生的接触应力也符合介质密封的要求,因此,密封结构

大大提高了燃料电池工作的可靠性^[5]。

利用 Isight 内置的多岛遗传算法,结合 ABAQUS 和 MATLAB 泄漏率计算程序,基于 PEMFC 封口性能的分析结果,以最小泄漏率为优化目标,展开封口截面形状的优化设计,从而获得封口截面的最佳形状。并将这一、二维优化成果扩展到三维电池密封结构设计中,使优化后的密封结构泄漏率降低 26.7%,从而显著改善了电池的密封性能^[6]。

粗糙度接触压力与气膜平均压力之和等于密封面上的密封压力,当膜厚比较小时密封压力主要由粗糙度接触压力决定,粗糙度接触压力影响较小,气膜压力影响较大,反之气膜压力影响较小^[7]。结合燃料电池技术详细介绍了氢能燃料电池汽车工作原理与动力系统,重点分析了燃料电池发动机技术以及配套核心材料、关键零部件应用现状与研制成本^[8]。

1 Mooney-Rivlin 超弹本构模型选择

Mooney-Rivlin 2 超弹本构模型,弹性应变能函数为:

收稿日期:2023-04-26;修回日期:2023-07-16

作者简介:李天(1995-),男,硕士生;刘长军(1971-),男,博士,教授,研究方向为表面工程与增材制造,通讯联系人,18941998881@126.com。

$$W = C_{10}(I_1 - 3) + C_{01}(I_2 - 3) + (1/D_1)(J - 1)^2 \quad (1)$$

Mooney-Rivlin 3 弹性本构模型, Mooney-Rivlin 3 参数的弹性应变能函数为:

$$W = C_{10}(I_1 - 3) + C_{01}(I_2 - 3) + C_{11}(I_1 - 3)(I_2 - 3) + (1/D_1)(J - 1)^2 \quad (2)$$

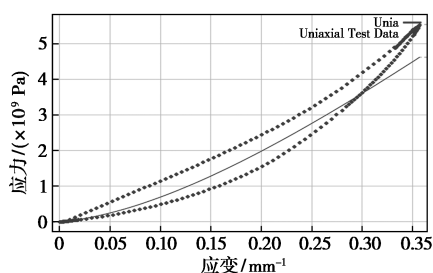
Mooney-Rivlin 5 超弹本构模型, Mooney-Rivlin 5 参数的弹性应变能函数为:

$$W = C_{10}(I_1 - 3) + C_{01}(I_2 - 3) + C_{20}(I_1 - 3)^2 + C_{11}(I_1 - 3)(I_2 - 3) + C_{02}(I_2 - 3)^2 - (1/D_1)(J - 1)^2 \quad (3)$$

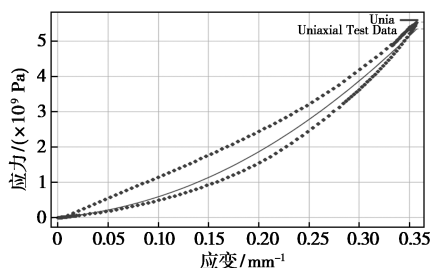
函数中的 C_{10} 、 C_{01} 、 C_{20} 、 C_{11} 、 C_{02} 是材料常数; D_1 是不可压缩量; I_1 、 I_2 是变形张量。如表 1 所示, Mooney-Rivlin 3 比 Mooney-Rivlin 2 多了 1 个常数 C_{20} , Mooney-Rivlin 5 多了 3 个常数 (C_{20} 、 C_{11} 和 C_{02}), 计算会更加复杂, 难度更大。使用 Uniaxial Test data 进行模拟验证, 可以模拟 2、3 和 5 参数, 不能模拟 9 参数; 因为模型 9 的参数更加复杂, 不能验证 9 参数。模型 9 具有更复杂的参数, 需要更多的计算并可能导致收敛困难。模型 2 参数只能模拟变量小于 30%。本实验采用 EPDM70 材料进行曲线拟合。输入表 1 中函数参数, 得到的拟合曲线见图 1。

表 1 Mooney-Rivlin 超弹本构模型材料参数

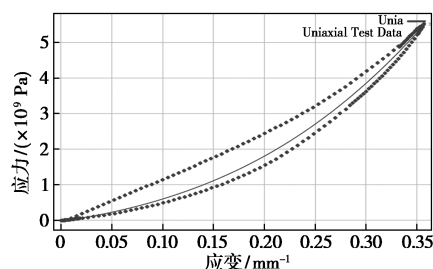
材料参数	Mooney-Rivlin 2	Mooney-Rivlin 3	Mooney-Rivlin 5
C_{10}	9.5201 GPa	7.5102 GPa	7.5102 GPa
C_{01}	-9.0694 GPa	-4.8036 GPa	-7.0128 GPa
C_{20}		3.3176 GPa	-10.548 GPa
C_{11}			41.071 GPa
C_{02}			-32.786 GPa
D_1	0 Pa ⁻¹	0.001 Pa ⁻¹	0.12 GPa ⁻¹



(a) Mooney-Rivlin 2 模型



(b) Mooney-Rivlin 3 模型



(c) Mooney-Rivlin 5 模型

图 1 Mooney-Rivlin 超弹本构模型拟合曲线

通过 Mooney-Rivlin 2、3、5 模型参数拟合曲线比较, Mooney-Rivlin 5 参数模型拟合效果最吻合。虽然模型 5 的计算难度相对较大, 但是计算结果更加精确, 可选择 Mooney-Rivlin 5 模型参数来计算。

2 密封垫设计与计算

EPDM70 的形状来源于新一代金属板设计, 目的就是为计算达到密封条件下最小密封垫的高度, 对各部分的受力进行分析。采用厚度为 0.169 mm 的碳纸进行计算, 密封线被压缩 25% 后的密封线的高为 0.33 mm。参考目前标准中密封胶线的设计原则, 密封线的宽度取值 2.5 mm, 计算密封的厚度, 使密封达到 230 kPa 的压力标准。密封材料的物性见表 2。

表 2 EPDM70 材料物性

密度/(g·cm ⁻³)	弹性模量/MPa	泊松比	应力松弛/%
1.174	13	0.495	2~5

密封线初始计算的模型选用日本三井 EPDM70 样品, 取宽度 2.5 mm、长度 10 mm, 高度的初始值分别设置为 0.35、0.38、0.40、0.42 mm, 分别建模, 计算不同高度的密封力, 压缩到 0.13 mm, 仿真简化模型如图 2 所示。

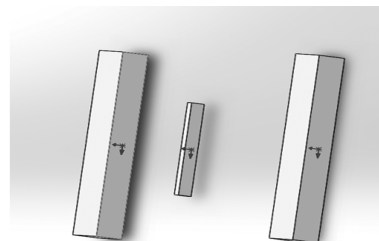
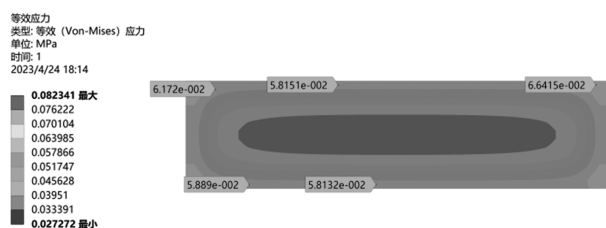


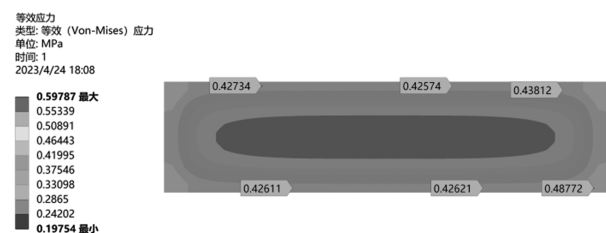
图 2 仿真简化模型

刚性压板与 EPDM 胶线, 一边设置为绑定约束, 一边设置为摩擦接触, 摩擦系数为 0.8, 采用广义拉格朗日法计算, 渗透容差值 0.1 mm, 法向刚度

因素为 10^{-4} , 稳定阻尼系数 0.2, 搜索区域半径 1.5 mm, 在另一面压缩 20%。计算结果如图 3 所示。



(a) 厚度 0.35 mm 模型仿真结果



(b) 厚度 0.38 mm 模型仿真结果

图 3 矩形压缩仿真应力分布

图 3 中显示的结果表明,图 3(a)中的密封力达不到所需的 230 kPa,测量值仅为 60 kPa。图 3(b)显示了 430 kPa 的应力分布,满足密封要求。虽然压缩比为 27.5%,但密封力主要来自平板密封的边缘,中间部分达不到要求。针对这一问题,在边缘处增加 0.2 mm 的圆角,以拉长密封线,消除应力集中对边缘和尖角的影响。用于仿真的计算模型宽度为 2.5 mm,长度为 10 mm,高度为 0.38 mm,圆角为 0.2 mm,如图 4 所示。计算结果如图 5 所示。

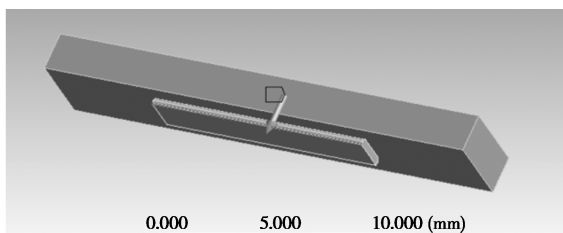


图 4 厚度 0.38 mm、圆角 0.2 mm 仿真模型

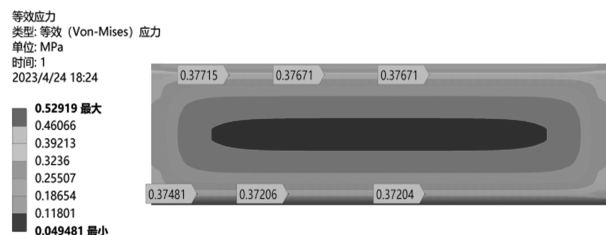
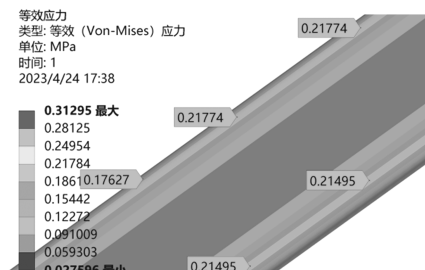


图 5 圆角 0.2 mm 的应力分布

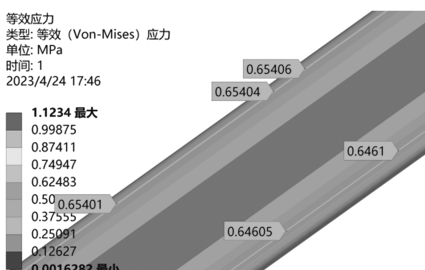
研究发现,密封压力集中在材料的圆角边缘,约为 370 kPa。要求工作气体压力为 230 kPa(表压),满足此要求。研究还表明,有圆角的密封力比没有

圆角的密封力大。对密封线模型进行了扩展,采用 0.25 mm 的宽度,100 mm 的长度,0.38 mm 的高度和 0.2 mm 的圆角来计算压力块,同时设置为刚体和柔性体。根据柔性体的计算数据进行拓扑优化,设定条件为保留 60%的材料。

图 6 表明了压块的设置对计算结果影响较大,需要进行实验验证。在三元乙丙密封胶线的 2 种设置下,圆角和上边缘附近的应力分布保持一致。压块被设置为柔性的拓扑优化,设置目标减少 40%的材料,计算结果见图 7。



(a) 刚性压块



(b) 柔性压块

图 6 长度扩大后应力分布

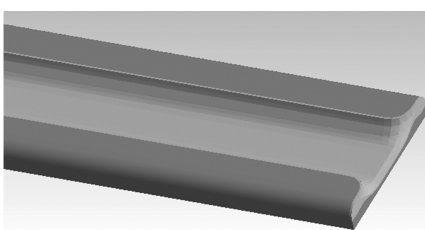


图 7 拓扑优化后的模型

从图 7 可以看出,拓扑优化后发现材料去除大部分是胶线中间应力小的区域,演变成双峰的密封效果。突出的单峰在实际装配中被压缩的方向难于控制而易发生变形,从而导致密封失效。假设压缩变形的方向可控,类似丰田的设计,双峰结构效果应该更好。材料去除集中在中部区域,单峰宽度大约在 0.6 mm。采用模型宽 2.5 mm、长 100 mm、高 0.38 mm、圆角 0.2 mm 的双峰胶线进行仿真验证。

模型参数的确定:①密封线压缩后的高度为 0.27 mm,密封线高度 0.38 mm,材料被压缩

0.11 mm;②密封线的平层高度为 0.25 mm,凸峰高度为 0.13 mm;③计算模型长度为 100 mm,截面如图 8 所示。

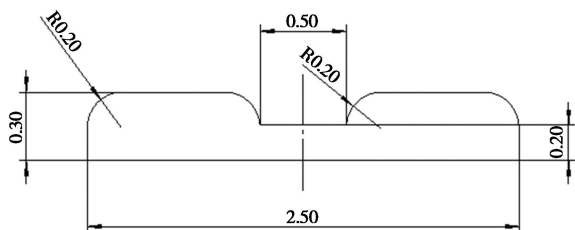
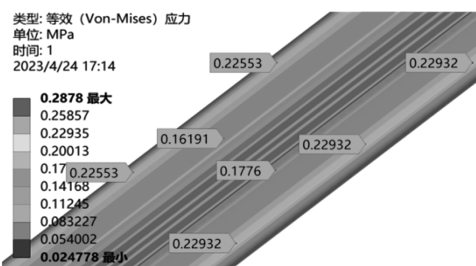
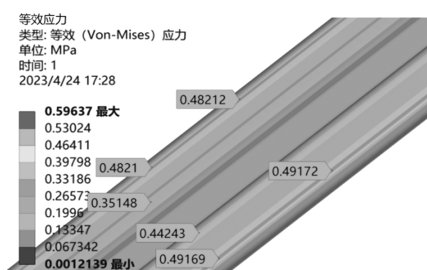


图 8 双峰结构设计截面

图 9 表明了单峰结构与双峰结构的单平面密封的结果基本上是一致的,由于网格和被压缩的方向不可控,双峰结构计算的结果和平面计算的结果存在误差。



(a) 刚性压块



(b) 柔性压块

图 9 双峰结构应力分布

3 冷却系统侧密封线设计受力分析

理论计算如图 10 所示,金属板胡槽深为 0.4 mm,冷却系统的 2 个单板用密封线连接,ARI

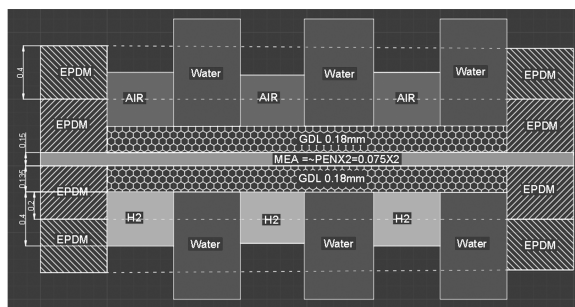
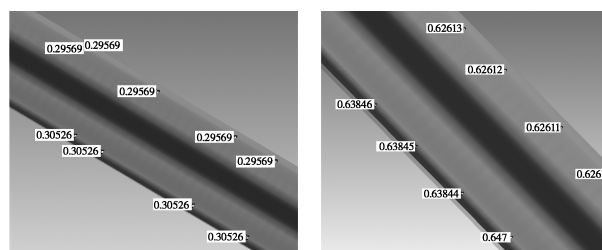


图 10 金属板设计截面

和 H₂ 部分,密封线被压缩后的高度为 0.4 mm。假设冷却系统的液体进入的水压为 300 kPa。借鉴到气体侧的计算,密封条会被压缩 25%~30%。所以,推断假设密封线的初始高度为 0.55 mm,压缩 0.5 mm,进行密封力的计算。

图 11 表明了刚性比柔性的密封力要小,因为刚性面只与粗糙面高峰的地方接触,所以应力比较小。在实际应用中,压块更倾向于柔性体,密封力在 1 MPa 左右,虽然刚性 300 kPa 刚好满足要求,但仍能满足密封要求,因此冷却系统的密封胶线模型可以用厚度 0.55 mm、圆角 0.2 mm 的密封件进行冷却流道的密封。



(a) 刚性压块

(b) 柔性压块

图 11 厚度 0.55 mm 胶线应力分析

4 金属板气体侧密封计算

4.1 气体密封条件

根据金属板设计要求,空气的工况压力 250 kPa,氢气的工况压力 270 kPa。表压分别为 150、170 kPa。考虑到空压机气体的压力波动,取 1.5 倍的系数,则需要的密封力的最小值为 255 kPa。即对密封压力要求是不小于 255 kPa,气体工况指标如表 3、表 4。

表 3 氧气额定工况指标

设计参数	指标/数据	取值
工况压力	250 kPa	250 kPa
压力波动	2%	
最小密封力	1.2 安全系数	306 kPa

表 4 氢气额定工况指标

设计参数	指标/数据	取值
工况压力	250 kPa	250 kPa
最小密封力	1.2 安全系数	224 kPa(表压) 306 kPa(绝压)

4.2 气体侧密封高度计算

金属板设计见图 12,单板的流道深度为

0.4 mm,金属板的密封支撑边缘位于流道的中心面。

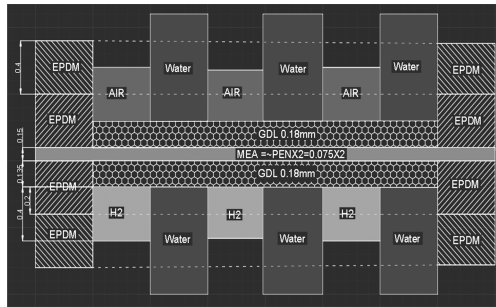


图 12 金属板设计截面图

忽略膜电极厚度 75 μm 的影响,MEA 的厚度为 0.15 mm。使用 GDL 最近工况压缩 20% ~ 25%, GDL 的厚度 0.169 mm。对压缩后的厚度进行计算,计算公式如下:

$$q = [(L - L_0)/L] \times 100\% \quad (4)$$

$$L = (L_0/q) \times 100\% \quad (5)$$

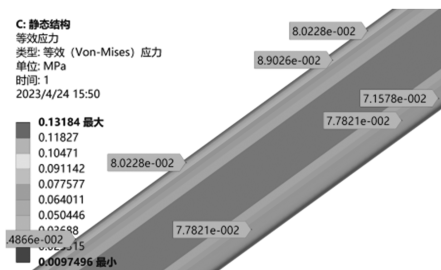
式中, q 为压缩比率; L 为初始高度; L_0 为压缩后的高度。代入式(4)可以计算出 GDL 压缩后的高度,气体密封被压缩后的高度流动深度的一半与 GDL 压缩后的厚度之和。将取 GDL 被压缩 25% 时的厚度及被压缩 20% 的厚度代入式(5)可以计算出压缩 20% 时 EPDM 的初始厚度为 0.42 mm,压缩 25% 时 EPDM 初始高度为 0.44 mm。计算结果如表 5 所示。

表 5 压缩前与压缩后 GDL 与 EPDM 的厚度

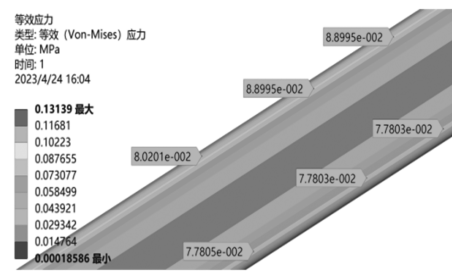
压缩率/%	GDL/mm	EPDM/mm	压缩位移/mm
0	0.169	0.42	0
0	0.169	0.44	0
20	0.135	0.33	0.09
25	0.127	0.33	0.11

密封计算分别以初始高度 0.42 mm 压缩 20% 和初始高度 0.44 mm 压缩 25% 来进行试算。

图 13 所示刚性和柔性的密封力均未达到密封要求,而图 14 虽然刚性设置刚刚满足要求,由于氢气的工况压力的最小密封力安全系数为 1.2 时取值

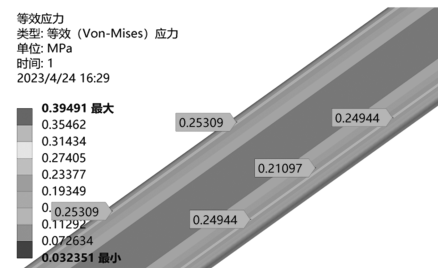


(a) 刚性压块

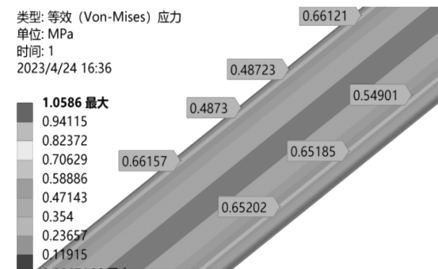


(b) 柔性压块

图 13 厚度 0.42 mm 胶线应力分布



(a) 刚性压块



(b) 柔性压块

图 14 厚度 0.44 mm 胶线应力分布

306 kPa,刚性压块密封力为 255 kPa,可靠性系数 0.83 没有达到安全系数,为了不过量设计,初始高度可采用 0.44 mm。

5 结论

使用有限元模拟计算压缩密封垫后的高度。初始高度设置为 0.35、0.38、0.40、0.42 mm 进行建模,并使用 ANSYS 软件模拟 25% 的压缩。结果表明,0.35 mm 厚度的密封力不足以完全密封,而 0.38 mm 厚度满足密封条件。因此,垫片的初始高度设置为 0.38 mm。密封线的形状设计采用矩形、圆角 0.2 mm、双峰结构进行仿真计算。在相同的高度和压缩量下,带圆角的模型密封力要大于不带圆角的模型。双峰结构的密封力与平面结构相似。如果可以控制装配误差和压缩方向,双峰结构将提供比单峰和矩形结构更好的密封效果。

(下转第 282 页)

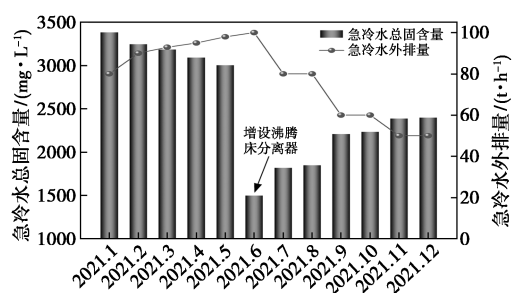


图 7 技改前后急冷水总固含量和外排量对比

4.3 水系统外排污水水质分析

MTO 净化水排放至污水处理单元的水量达到 150 t/h, 本次优化实施将外排净化水 COD 浓度降低 216 mg/L。水系统急冷水 COD 浓度为 2 000~4 000 mg/L, 较净化水 COD 值高, 侧重降低急冷水外排量并达到 50 t/h。以上 2 股水分别进行调控, 如图 8 所示, 最终使得水系统外排污水 COD 平均值从技改前的 1 586 mg/L 下降至 1 182 mg/L, 减量 404 mg/L, 成效十分显著, 完成了外排污水 COD 值小于 1 200 mg/L 的攻关目标。

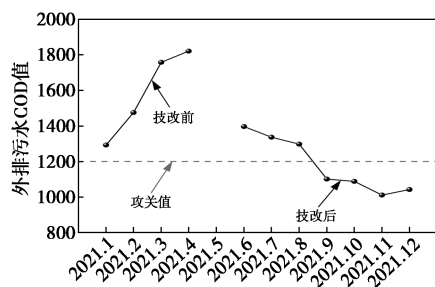


图 8 技改前后水系统外排污水 COD 值对比

5 结论

针对 MTO 装置水系统在实际运行过程中出现的净化水 COD 值长期偏高、急冷水外排量长期偏高的问题进行了分析, 并提出几种有效、可行的解决方案。

(1) MTO 水系统外排 COD 超标的原因是汽提系统操作条件设置不合理、与系统已有设备不匹配。通过对污水汽提塔塔底再沸器和塔顶回流罐运行工况的合理调控, 以及更换不符合现场生产条件的设备, 实现对净化水 COD 值和急冷水外排量的减量控制, 从而降低混合外排污水 COD 值。

(2) 调控塔底再沸器蒸汽流量、定期主动清洗再沸器、提高不凝气回炼量、降低塔顶回流量, 有利于汽提过程的正常运行, 减少污水中氧化物在塔盘上的富集程度, 确保污水汽提塔净化水 COD 值达标。

(3) 通过升级系统设备, 大幅降低污水汽提塔进料中污染物含量, 增强塔盘抗堵能力, 延缓塔盘堵塞。新增急冷水高效除固设备, 有效降低水系统固含量, 减少急冷水外排量。

(4) 本次优化实施后, 外排净化水 COD 浓度降低 216 mg/L, 急冷水外排量 50 t/h, 水系统外排污水 COD 平均值减量 404 mg/L, 完成了外排污水 COD 值小于 1 200 mg/L 的攻关目标。

参考文献

- [1] 薛晓彬, 齐欢, 陈建琦, 等. 甲醇制烯烃装置水系统运行问题及解决方案[J]. 工业水处理, 2020, 40(7): 120-124.
- [2] 林华东, 王泽予. 甲醇制低碳烯烃工业装置水系统问题及流程优化[J]. 山东化工, 2020, 49(24): 134-135, 138.
- [3] 姜海军. MTO 不停车检修污水汽提塔降低净化水 COD 措施[J]. 广州化工, 2018, 46(2): 118-119.
- [4] 许锐, 顾澜芳. 甲醇制烯烃装置污水汽提系统堵塞问题的研究[J]. 现代化工, 2018, 38(11): 192-195.
- [5] 王艳琪. 典型甲醇制烯烃装置环保措施有效性分析及补偿性建议[D]. 青岛: 中国石油大学(华东), 2017.
- [6] 王天翔, 陈建琦, 马世浩, 等. 旋流分离技术在甲醇制烯烃工艺废水处理中的应用[J]. 化工进展, 2019, 38(11): 5165-5172.
- [7] 黄起中, 刘冰, 马红鹏, 等. 基于新型微通道分离技术的甲醇制烯烃废水处理[J]. 化工进展, 2023, 42(2): 669-676. ■
- [4] 张强. 氢燃料电池密封复合材料超弹性本构关系研究及密封结构优化[D]. 北京: 北京化工大学, 2022.
- [5] 张圣卓, 于亮. 质子交换膜燃料电池密封结构设计方法研究[J]. 佳木斯大学学报: 自然科学版, 2018, 36(3): 475-478.
- [6] 肖文灵. 燃料电池密封结构优化设计与性能分析[D]. 大连: 大连理工大学, 2020.
- [7] 任晓, 吴承伟, 周平. 粗糙表面的气体密封性能研究[J]. 机械工程学报, 2010, 46(16): 176-181.
- [8] 殷卓成, 王贺, 段文益, 等. 氢燃料电池汽车关键技术研究现状与前景分析[J]. 现代化工, 2022, 42(10): 18-23. ■

(上接第 277 页)

参考文献

- [1] 余意, 王谌, 詹志刚, 等. 质子交换膜燃料电池启停衰减的研究进展[J]. 电池工业, 2010, 15(2): 120-123.
- [2] 李新, 王一丁, 詹明. 质子交换膜燃料电池密封材料研究概述[J]. 船电技术, 2020, 40(6): 19-23.
- [3] 杨全勇, 余意, 詹志刚. 密封层厚度对国产材料燃料电池性能影响[J]. 电池工业, 2011, 16(3): 172-175.