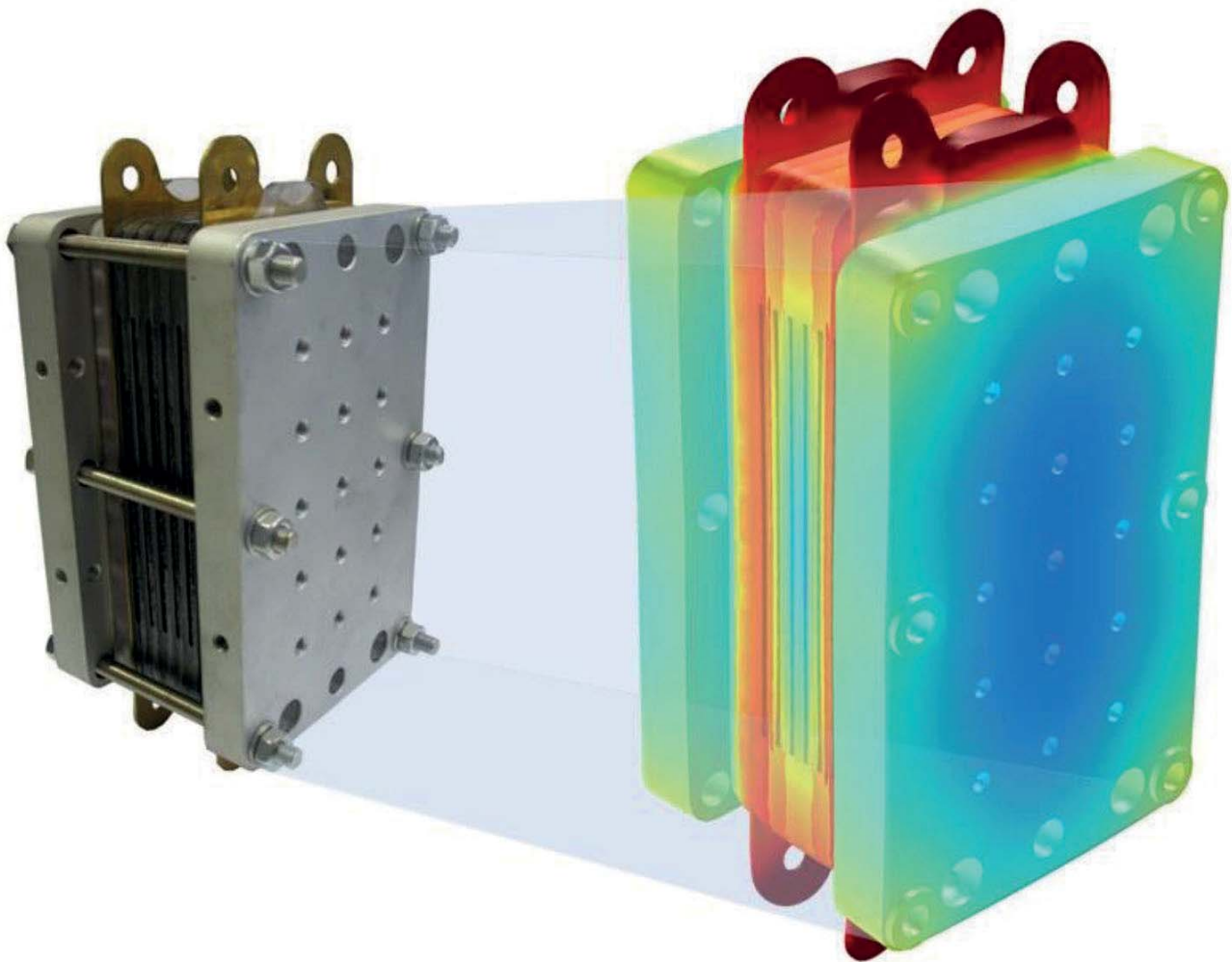


Ahmet Evren Fırat

Mechanical Analysis of PEM Fuel Cell Stack Design



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag



Mechanical Analysis of PEM Fuel Cell Stack Design





Mechanical Analysis of PEM Fuel Cell Stack Design

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Abteilung Maschinenbau der
Universität Duisburg-Essen
zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR-INGENIEUR

genehmigte Dissertation

von

Ahmet Evren Fırat

aus

Tunceli, Türkei

Referent: Prof. Dr. rer. nat Angelika Heinzl
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Wojciech Kowalczyk

Tag der mündlichen Prüfung: 29.04.2016



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2016

Zugl.: Duisburg-Essen, Univ., Diss., 2016

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2016

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2016

Gedruckt auf umweltfreundlichem, säurefreiem Papier aus nachhaltiger Forstwirtschaft.

ISBN 978-3-7369-9257-3

eISBN 978-3-7369-8257-4



Acknowledgements

Foremost, I would like to express my sincere gratitude to my advisor Prof. Dr. rer. nat. Angelika Heinzel for her continuous support of my research and Ph.D study.

Beside my advisor, I would like to thank my second reviewer Prof. Dr.-Ing. Wojciech Kowalczyk and the rest of my thesis committee:

Prof. Dr.-Ing. Alfons Fischer

Prof. Dr. Andreas Kempf

Prof. Dr.-Ing. Stefan Panglisch

My deepest thanks also go to Dr. Peter Beckhaus for offering and leading me working on diverse exciting projects and supporting my research efforts.

I thank Michael Schoemaker for his contribution to this thesis. I am also grateful to all of my friends and colleagues at ZBT GmbH in Duisburg and University of Duisburg-Essen.

These acknowledgements wouldn't be complete without thanking my parents for their constant encouragement and support.



Table of Contents

Nomenclature

Abstract

1	<i>Motivation</i>	1
2	<i>Introduction</i>	3
2.1	Fuel Cell Applications	3
2.1.1	Stationary Applications	3
2.1.2	Portable and Transportation Applications	4
2.2	Theoretical Background	5
2.2.1	Type of Fuel Cells	5
2.2.2	Thermodynamics of PEM Fuel Cells	5
2.2.3	Operating Principles of PEM Fuel Cells	6
2.2.4	Electrochemistry of Fuel Cells	8
2.2.5	Operating Conditions of PEM Fuel Cells	10
2.3	Fuel Cell Stack	11
2.3.1	ZBT Fuel Cell Stack Design	12
2.3.2	PEM Fuel Cell Stack Components	13
3	<i>Cell and Stack Tests</i>	19
3.1	Measuring the Thermal Expansion of the Fuel Cell Stack	19
3.1.1	Operating Conditions and Measurements	22
3.2	Pressure Films	31
3.3	Cell Performance	33
4	<i>Fuel Cell Modeling</i>	35
4.1	Introduction to Finite Element Method	37
4.2	Fuel Cell Stack Simulations (Stack-Size)	43
4.2.1	Literature Model Overview	43
4.2.2	Model Development	44
4.2.3	Results and Evaluation	54
4.3	Fuel Cell Simulations (Cross-Section Model)	69
4.3.1	Literature Model Overview	69
4.3.2	Model Development	70
4.3.3	Results and Evaluation	87
5	<i>Conclusions and Outlook</i>	99
6	<i>References</i>	103
7	<i>List of Figures</i>	113
8	<i>List of Tables</i>	115



Nomenclature

ZBT	The Fuel Cell Research Center	D	Diameter
GDL	Gas diffusion layer	T	Temperature
ΔH_H^0	Higher heating value	T_{Ref}	Reference ambient temperature
ΔG_H^0	Higher Gibbs free energy	ϕ	Potential
CHP	Combined heat power	ω	Mass fraction
mb/d	Millions of barrels per a day	R_s	Thermal contact resistance
MW	Megawatt	P_r	Prandtl's number
PEM	Polymer electrolyte membrane	T_u	Upside contact temperature
ppm	Parts per million	T_d	Downside contact temperature
N_A	Avogadro's number	ε	Elastic strain
R_g	Gas constant	M	Molar mass
F	Faraday constant	J	Current density
E	Electrical potential	λ	Stoichiometry
R	Resistance	L_{act}	Active layer's thickness
MEA	Membrane electrode assembly	R_{agg}	Agglomerate radius
PTFE	Polytetrafluoroethylene	D_{agg}	Gas diffusivity
POM	Polyoxymethylene	K	Henry's constant
FEM	Finite element method	Na	Avogadro's number
CFD	Computational fluid dynamics	i_0	Exchange current density
CAD	Computer aided design	S	Specific surface area
USB	Universal serial bus	ε_{Mac}	Macroscopic porosity
x_i	Mole fraction	$n_{a,c}$	Charge Transfer number
k	Thermal conductivity	λ_{H_2O}	Waters drang coefficient
L	Characteristic length	c_{ref}	Reference concentration
Re	Reynold's number	γ	Permeability
μ	Dynamic viscosity	φ	Electrical conductivity
Ra	Rayleigh number	θ	Compressibility factor
C_p	Heat capacity	ρ_s	Contact resistance
ρ	Fluid density	κ	Ion conductivity
p	Pressure	ϕ_{RH}	Relative humidity
BPP	Bipolar plate	T_{inf}	Ambiente temperature
I	Current	α	Thermal expansion coefficient
u	Velocity	V	Voltage

Abstract

The aim of this work is to analyze the PEM fuel cell stack design from a mechanical point of view with the help of computational methods and to develop a design procedure for fuel cell stacks. This systematic approach results in potential optimization for fuel cell stacks.

Mechanical compression of a fuel cell is required to prevent leakage and to ensure a proper electrical component contact, both of which play an important role in fuel cell performance. Fuel cells have to be held mechanically together in order to get them serially connected. Combining of fuel cells in series yields higher voltage values to deliver the desired amount of energy. The size and the number of combined single fuel cells are related to the application and requirements. The assembly of a number of single fuel cells, which is called a fuel cell stack, has to assure the identical properties for each included cell.

Compressing of fuel cells with the help of endplates and clamping them with tie rods is a conventional method used for fuel cell stack design. This method is commonly used due to the low cost and ease of fuel cell stack assembly.

Within this work a fuel cell stack of the fuel cell research center ZBT is analyzed, which is compressed with the help of endplates and tie rods. This exemplary stack has an active area of 50 cm² and 5 cells. The standard fuel cell stack of ZBT is focused on in this work due to the experience and wide range of examination.

Fuel cells convert chemical energy to electrical and thermal energy. The exerted thermal energy results in a temperature profile in the fuel cell stack, which affects the fuel cell mechanics via thermal expansion. The accumulating thermal expansion of the stack components results in a change in the displacement profile of the fuel cell stack. This is analyzed for ZBT fuel cell stack with the help of an appropriately prepared experimental set-up. The effect of the cell operating conditions on the mechanical properties of the fuel cell stack is also investigated with the help of measured data.

The analysis of fuel cells with the help of simulation techniques opens a gateway to product design before prototyping. It is possible to virtually investigate the behavior and properties of fuel cell systems with the help of simulations. Computational methods also enable to reach immeasurable data, which does not only facilitate the analysis, but also extends the range of design parameters.

The 3D models representing the exemplary fuel cell stack of ZBT is precisely established in accordance with the design properties. The analysis of the fuel cell stack design is carried out with the help of two computational models supplementary to the experiments. The thermomechanical characteristics of the fuel cell stack design is investigated in stack size. The



effect of the compression pressure on the cell performance is examined on a cross-section model by implementation of the electrochemistry and fluid dynamics.

The thermomechanical model of the stack on a large scale contributes to the understanding of the fuel cell stack design from a mechanical point of view and leads to the dimensioning of stack components properly. Thermal expansion is to be implemented into the structural mechanics for a proper mechanical analysis as realized by the performed measurements. The computation of thermal expansion for each component is taken into account by integrating cell operating temperature profiles into the structural analysis.

The cross-section model is derived precisely from the fuel cell supplemental to the stack model. The effect of the compression pressure on the fuel cell dynamics is analyzed with the help of this cross-section model including electrochemistry. The polarization curve as a result is examined in detail. The sensitivity analyses are performed to understand the effect of selected parameters on the fuel cell performance and the dynamics of simulations.

As a result the mechanical pressure distribution profile and its effect on the fuel cell performance are analyzed. Performed measurements are utilized for the verification of the computational models. The value of compression pressure in the fuel cell must be small enough to assist the gas diffusion in the GDL. Beside this, it must also be large enough to fulfill the requirements for a proper contact resistance and tightness.

The explicit mechanical analysis of the standard fuel cell stack of ZBT with the help of experimental and computational methods leads to an optimization procedure. The design procedure developed in this study can be used for different sizes of fuel cell stack designs and similar applications like electrolysis or flow batteries.

Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit werden die mechanischen Analysen eines PEM-Brennstoffzellenstacks sowie die Entwicklung einer Methodik für die Auslegung eines Brennstoffzellenstacks mit Hilfe von den rechnergestützten Simulationen durchgeführt. Diese systematische Methodik ermöglicht die Optimierung des Brennstoffzellenstackdesigns.

Die mechanische Verpressung der Einzelzellen ist erforderlich für die Gasdichtigkeit und die elektrische Kontaktierung der Komponenten. Dies spielt eine wesentliche Rolle für die Leistung der Brennstoffzellen. Brennstoffzellen müssen mechanisch verspannt werden, um deren serielle Schaltung zu erstellen, die zu den höheren Spannungswerten und dementsprechend zur benötigten Energiemenge führt. Die Größe und Anzahl der gestapelten Brennstoffzellen richten sich dabei nach der Zielanwendung und den Systemanforderungen. Ein Brennstoffzellenstack muss diese Anforderungen für jede einzelne Zelle sicherstellen.

Die Verspannung der Brennstoffzellen unter Verwendung von Endplatten und Zugstangen ist ein konventioneller Aufbau für die Brennstoffzellenstacks. Dieser Aufbau wird auf Grund seiner leichten und kostengünstigen Ausführung häufig in Brennstoffzellenstacks angewendet.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein aus 5 einzelnen Zellen mit einer Fläche von jeweils 50cm² bestehender ZBT-Brennstoffzellenstack, welcher mittels Endplatten und Zugstangen verspannt wurde, im Detail untersucht. Der Standard-Brennstoffzellenstacks des ZBT wurde ausgewählt, weil zu diesem Stack bereits umfangreiche Untersuchungen am ZBT durchgeführt wurden.

In Brennstoffzellen wird chemische Energie in elektrische und thermische Energie umgewandelt. Die entstandene Wärme führt zu einer Temperaturverteilung innerhalb des Brennstoffzellenstacks. Diese beeinflusst die mechanischen Eigenschaften des Brennstoffzellenstacks durch die thermische Ausdehnung. Die gesamte thermische Ausdehnung aller Komponenten innerhalb des Brennstoffzellenstacks ändert die Auslenkung des Brennstoffzellenstacks im Betrieb. Dies wurde innerhalb dieser Arbeit für einen Standard-Brennstoffzellenstack des ZBT mit der Hilfe eines entsprechend eingerichteten Versuchsaufbaues untersucht. Der Einfluss von Betriebsparametern auf die mechanischen Eigenschaften des Brennstoffzellenstacks wurde mit der Hilfe der aufgenommenen Messdaten analysiert.

Die Analyse der Brennstoffzellen mit Hilfe der Berechnungsmethoden ermöglicht Zeit- und Kostenreduktionen in der Entwicklungsphase. Durch Simulationen können Brennstoffzelleneigenschaften virtuell untersucht und optimiert werden. Berechnungsmethoden erlauben die Evaluierung der am Prüfstand messtechnisch nicht erfassbaren Parameter. Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei 3-dimensionale Modelle des



exemplarisch verwendeten ZBT-Brennstoffzellenstacks entsprechend der Designeigenschaften entwickelt. Die Analyse des Brennstoffzellenstacks wurde mit der Hilfe von zwei Berechnungsmodellen ergänzend zu den Messdaten durchgeführt. Die thermomechanischen Eigenschaften eines aus 5 einzelnen Zellen bestehenden Brennstoffzellenstacks wurden mit dem ersten Modell charakterisiert. Der Einfluss der Anpresskraft auf die Leistung der Brennstoffzelle wurde mit Hilfe eines zweiten Schnitt-Modells unter Berücksichtigung der Elektrochemie und Strömungsmechanik untersucht.

Im Hinblick auf die mechanischen Eigenschaften können die Designparameter eines Brennstoffzellenstacks mit Hilfe des Stackmodells im Detail analysiert werden. Dies führt zur Analyse der Dimensionierung von Stackkomponenten. Durch die Evaluierung der Messdaten soll die thermische Ausdehnung für eine explizite mechanische Analyse des Brennstoffzellenstacks bei der mathematischen Modellierung betrachtet werden. Die Berechnung der thermischen Ausdehnung wurde mit der Implementierung der simulierten Temperaturverteilung aller Komponenten in strukturmechanischen Modellierungsansatz durchgeführt.

Ergänzend zu dem Stack-Modell wurde das Schnitt-Modell mit Hilfe der Geometrie der Brennstoffzellenkomponenten abgeleitet. Der Einfluss der Anpresskraft auf die elektrochemischen Eigenschaften der Brennstoffzellen konnte mit Hilfe dieses Schnitt-Modells untersucht werden. Die von den Simulationen abgeleitete UI-Kennlinie wurde im Detail analysiert. Die Einflüsse der ausgewählten Betriebsparameter auf die Leistung der Brennstoffzellen konnten mit der Hilfe einer Sensitivitätsanalyse untersucht werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Kraftverteilung innerhalb des Brennstoffzellenstacks und deren Einfluss auf die Zelleistung im Detail untersucht. Die aufgenommenen Messdaten wurden für die Verifizierung der Berechnungsmethoden verwendet. Für die Anpresskraft existiert dabei ein Optimum: Für die elektrische Kontaktierung und Gasdichtigkeit ist einerseits eine maximale Anpresskraft erforderlich, andererseits wird die maximale Anpresskraft durch eine reduzierte Gasdiffusion innerhalb der Brennstoffzellenkomponenten limitiert.

Durch die Analyse eines ZBT-Brennstoffzellenstacks unter Verwendung von Simulationen und Experimenten an realen Stacks konnte eine Methodik für die optimale Auslegung eines Stacks erstellt werden. Diese Methodik kann sowohl für die Optimierung von Brennstoffzellenstacks unterschiedlicher Größen, als auch für die Auslegung von ähnlich aufgebauten Elektrolyseuren und Flow-Batterien verwendet werden.

1 Motivation

The use of fossil fuels to cover the energy demand in the future carries key problems to overcome. The environmental and economic concerns regarding the climate change and the decrease in the oil reserves lead the research and industry to the search for alternatives [1]. The increase in the energy demand due to the economic and demographic growth in the world enhances the necessity of these research efforts. The dependency of several developed countries on the fossil fuel economy and political instability for energy supply enforce the search for the alternatives additionally.

The global energy economy is not going to depend on only one single energy source in order to get a secure energy supply. The product range for the energy supply differs from nuclear power to geothermal energy. But renewable energy sources fulfill the requirements as a long term solution. They are getting incrementally more importance for the energy markets due to the depletion of fossil fuels and environmental concerns. The predicted growth in supply of renewable energy sources reaches an average value of 8.1% p.a. until 2035 [2].

The fluctuations in renewable energy production such as solar, wind and hydropower prevent sustainable energy sources to provide a stable solution to the energy problems [3-7]. Storing the energy produced by renewable sources is a key phenomenon in order to remove production instabilities and is focused by research and industry in last decade in order to achieve the global energy goals. The production and storage of renewable energy are significant issues in order to increase the use of renewable energy applications.

Production of hydrogen is considered as an alternative way for storing the electrical energy produced by renewable sources. Production of hydrogen with electrolysis and storing the produced hydrogen in special tanks or underground are actual research efforts and open the gateway to the hydrogen economy. The hydrogen economy is also feasible via producing the hydrogen from fossil fuels by reforming processes but this doesn't offer a long term solution.

Fuel cell systems represent a potentially viable option with high level of efficiency for re-electrification of hydrogen [8]. Using fuel cells to utilize hydrogen has high efficiency values depending on the type of the fuel cell [9]. The PEM type fuel cells promise several advantages for fuel cell applications due to the low temperature requirements. Hydrogen can also be converted to electrical energy by using a combustion process. However this reduces the overall efficiency [10].

Several PEM fuel cell systems have been demonstrated in the last decade. Besides the hydrogen supply and the costs for the fuel cell systems, the durability of fuel cells plays an important role for the commercial launch. The mechanical stability of fuel cells leads to a higher level of lifespan due to the durability of single fuel cell components like membrane and gas