

基于MATLAB/Simulink的船用燃料电池电堆极化性能仿真研究

文/张望¹ 聂巍¹ 许强²

1. 武汉船用电力推进装置研究所; 2. 武汉氢能与燃料电池产业技术研究院有限公司

摘要: 基于半机理半经验的方法搭建船用燃料电池发电系统电堆仿真模型, 以研究电堆极化输出电压为核心, 从研究电堆活化过电压、浓差过电压和欧姆过电压的仿真曲线入手, 完成电堆电压模型的优化设计。最终结合电堆台架测试边界条件和数据, 验证船用燃料电池发电系统电堆模型满足船用燃料电池发电系统性能仿真、控制策略研究、寿命预测及状态评估研究等应用要求。

关键词: 船用燃料电池电堆; 极化电压; MATLAB/Simulink

船用燃料电池极化特性 ($U-I$) 曲线是燃料电池模块的核心性能曲线, 用于评价燃料电池的健康状态及寿命指标等工作性能。

建立船用燃料电池电堆电压数学模型, 定性分析目标参数对电堆活化过电压、浓差过电压和欧姆过电压的影响趋势。

基于MATLAB/Simulink平台搭建船用燃料电池发电系统电堆仿真模型, 主要由电堆阴极流道模型、电堆阳极流道模型、水传输模型和电压模型构成。本文以电堆极化电压的研究为核心, 从研究电堆活化过电压、浓差过电压和欧姆过电压的仿真曲线入手, 以MK350电堆台架测试边界条件和极化电压为数据库, 计算船用燃料电池发电系统电堆模型仿真精度, 满足船用燃料电池发电系统性能仿真、控制策略验证、寿命预测及状态评估研究等应用需求。

船用燃料电池电堆电压数学模型

电堆电压由开路电压、欧姆损失电压、活化损失电压及浓度损失电压计算得出, 表达式为

$$V_{st} = E - V_{act} - V_{ohm} - V_{con} \quad (1)$$

式中, V_{st} 为电堆输出电压 (V); E 为电堆开路电压 (V); V_{act} 为电堆活化过电压 (V); V_{ohm} 为电堆欧姆过电压 (V); V_{con} 为电堆浓差过电压 (V)。

1. 开路电压

开路电压可用一个关于燃料电池温度、电堆阴极氧气分压和阳极气体压力的函数 (能斯特方程) 表示, 即

$$E = 1.229 - 8.5 \times 10^{-4} (T_{st} - 298.15) + 4.308 \times 10^{-5} T_{st} \left[\ln \left(\frac{P_{H_2}}{101.325} \right) + 0.5 \ln \left(\frac{P_{O_2}}{101.325} \right) \right] \quad (2)$$

式中, T_{st} 为电堆温度, 取333.15K; P_{H_2} 为阴极流道内氢气分压 (kPa); P_{O_2} 为阴极流道内氧气分压 (kPa)。

2. 活化过电压

活化过电压表征的是从阳极到阴极移动电子的过程中消耗的能量, 根据经验公式可得

$$V_{act} = V_0 + V_1 e^{c_1 I_{st}} \quad (3)$$

式中, V_0 、 V_1 根据饱和蒸汽压力、电堆阴极气体压

基金项目: 科技部2022“船舶绿色动力系统构型与谱系化技术”(2022YFB4300700)

力和电堆氧气分压计算得出，为经验常量； i_{st} 为电堆电流密度（A/cm²）。

3. 欧姆过电压

欧姆过电压指电荷由阳极到阴极运动过程中的损失，根据经验公式可得

$$V_{ohm} = \frac{i_{st} t_m}{(0.005139\lambda - 0.00326)e^{\left(1.155 - \frac{350}{T_{st}}\right)}} \quad (4)$$

式中， t_m 为质子交换膜厚度（cm）； λ 为质子交换膜水含量，取值14（0~14对应相对湿度为0%~100%）。

4. 浓差过电压

浓差过电压是反应物在电化学反应时浓度下降产生的损失电动势。根据经验公式可得

$$V_{con} = i_{st} \left(c_2 \frac{i_{st}}{i_{max}} \right)^{c_1} \quad (5)$$

式中， c_2 依赖氧气分压和饱和蒸汽压力计算得出， c_2 取值1.15； i_{max} 为经验常量。

船用燃料电池电堆MATLAB/Simulink模型

MATLAB/Simulink 是进行各种系统建模、仿真和分析的软件平台，根据理想气体状态方程和质量守恒方程等搭建电堆阴/阳极流道及水传输模型。

1. 模型架构

电堆建模的方法为半机理半经验法，其中阴极流道、阳极流道使用质量守恒方程和理想气体状态方程计算。模型架构如图1所示，各子模型的输入输出参数见表1。

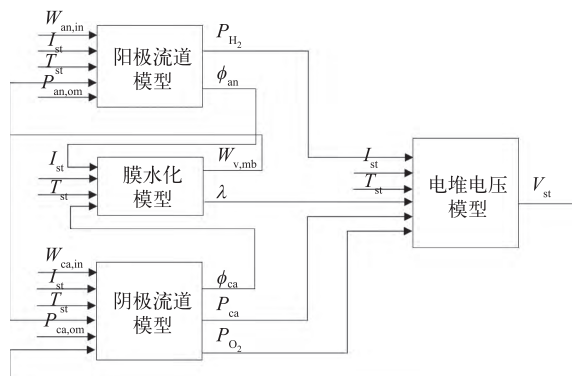


图1 电堆模型架构图

表1 电堆模型输入输出参数

	电堆电压模型	阴极流道模型	阳极流道模型	膜水化模型
输入参数	电堆电流 I_{st}	阴极入口流量 $W_{ca,in}$	阳极入口流量 $W_{aa,in}$	电堆电流 I_{st}
	电堆温度 T_{st}	电堆电流 I_{st}	电堆电流 I_{st}	电堆温度 T_{st}
	阴极气体压力 P_{ca}	电堆电压 V_{st}	电堆温度 T_{st}	阴极气体相对湿度 ϕ_{ca}
	氧气分压 P_{O_2}	电堆温度 T_{st}	膜水化流量 $W_{v,mb}$	阳极气体相对湿度 ϕ_{an}
	氢气分压 P_{H_2}	阴极出口管道压力 $P_{ca,om}$	阳极出口管道压力 $P_{an,om}$	
	膜平均含水量	膜水化流量 $W_{v,mb}$		
输出参数	电堆电压 V_{st}	氧气分压 P_{O_2}	氢气分压 P_{H_2}	膜水化流量 $W_{v,mb}$
		阴极气体相对湿度 ϕ_{ca}	阳极气体相对湿度 ϕ_{an}	膜的平均含水量

2. 电堆电压模型

根据第1部分介绍的数学模型搭建电堆电压Simulink模型，如图2所示，建模理论依据见表2。

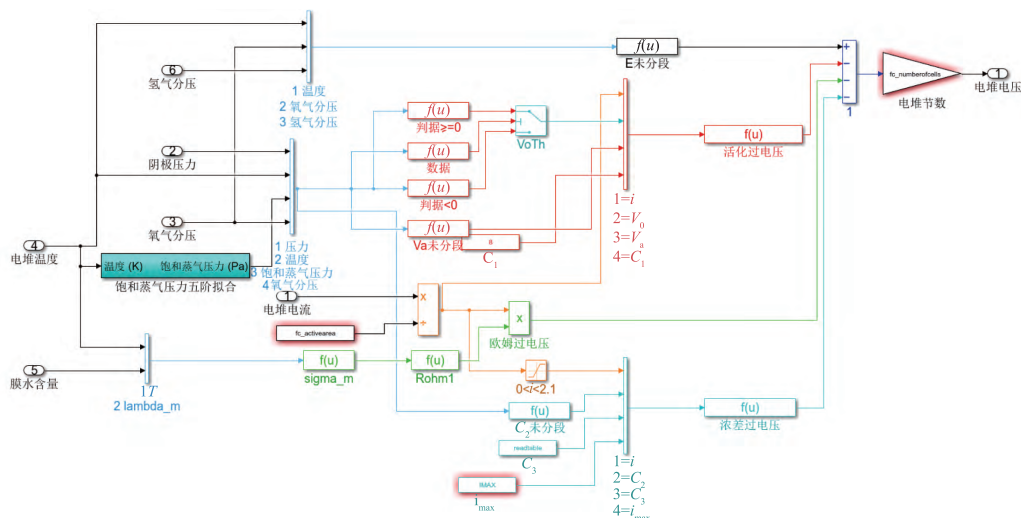


图2 电堆电压模型

表2 电堆电压模型设计原理

序号	子模型名称	子模型建模原理
1	开路电压	根据能斯特方程计算
2	活化损失电压	阳极和阴极中电子移动、化学键断裂和形成所需电压由经验公式计算
3	欧姆损失电压	质子交换膜对质子转移的电阻引起, 由膜的厚度、膜的电导率等计算
4	浓度损失电压	反应物在反应中消耗时浓度下降造成, 高电流密度下变大, 由经验公式计算

阴极流道模型

阴极流道模型用于仿真阴极流道内 N_2 、 O_2 和水蒸气的热力学状态,通过 N_2/O_2 /水蒸气质量守恒方程计算出流道出口的流量、氧气分压等,模型架构如图3所示,建模理论依据见表3。

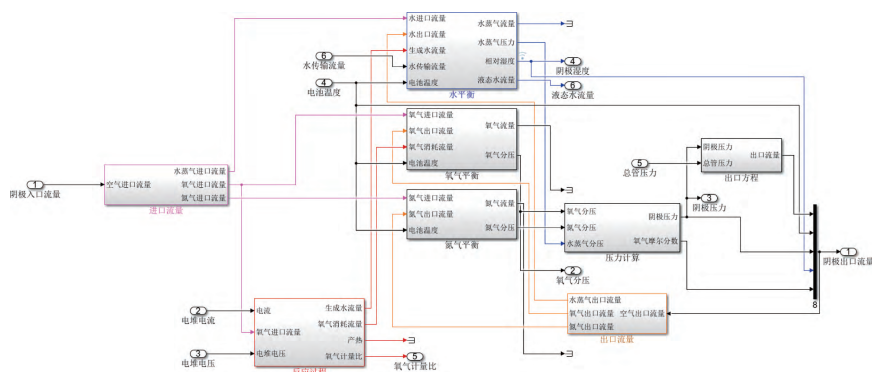


图3 电堆阴极流道模型

表3 电堆阴极流道模型设计原理

序号	子模型名称	子模型建模原理
1	入口气体流量特性	1. 通过饱和水蒸气压力计算湿度比, 计算流道入口干空气流量和流道入口水蒸气流量 2. 通过流道入口干空气流量、氧气气摩尔分数计算流道入口的氮气流量和氧气流量
2	氧气平衡	根据氧气质量守恒方程计算氧气分压
3	氮气平衡	根据氮气质量守恒方程计算氮气分压
4	水蒸气平衡	根据水蒸气质量守恒方程计算水蒸气分压和相对湿度
5	电化学反应	根据电化学反应公式计算消耗氧气流量、生成水流量和过氧比
6	压力计算	计算总压及氧气摩尔分数
7	出口气体流量特性	1. 通过饱和水蒸气压力计算湿度比, 计算流道出口干空气流量和流道出口水蒸气流量 2. 通过流道出口干空气流量、氧气摩尔分数计算流道出口的氮气流量和氧气流量

阳极流道模型

阳极流道模型用于仿真阳极流道内 H_2 、水蒸气的热力学状态,通过氢气/水蒸气质量守恒方程计算

出流道出口的流量、氢气分压等，模型架构如图4所示，建模理论依据见表4。

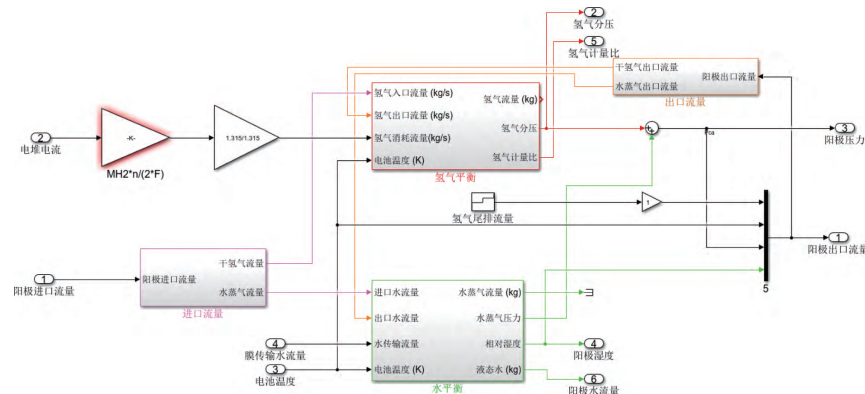


图4 电堆阳极流道模型

表4 电堆阳极流道模型设计原理

序号	子模型名称	子模型建模原理
1	入口气体流量特性	1. 根据温度计算饱和水蒸气压力 2. 计算相对湿度、水蒸气分压，再计算湿度比 3. 通过流道入口总流量，计算流道入口干氢气流量和流道入口水蒸气流量
2	氢气平衡	根据氢气质量守恒方程计算氢气分压和过氧比
3	水蒸气平衡	根据水蒸气质量守恒方程计算水蒸气分压和相对湿度
4	电化学反应	根据电化学反应公式计算消耗氢气流量
5	出口气体流量特性	1. 根据温度计算饱和水蒸气压力 2. 计算相对湿度、水蒸气分压，再计算湿度比 3. 通过流道出口总流量，计算流道出口干氢气流量和水蒸气流量

膜水化模型

膜水化模型通过质子携带水分子数量方程、水的反向扩散方程计算阳极通过膜传输至阴极的水流量，模型如图5所示，建模理论依据见表5。

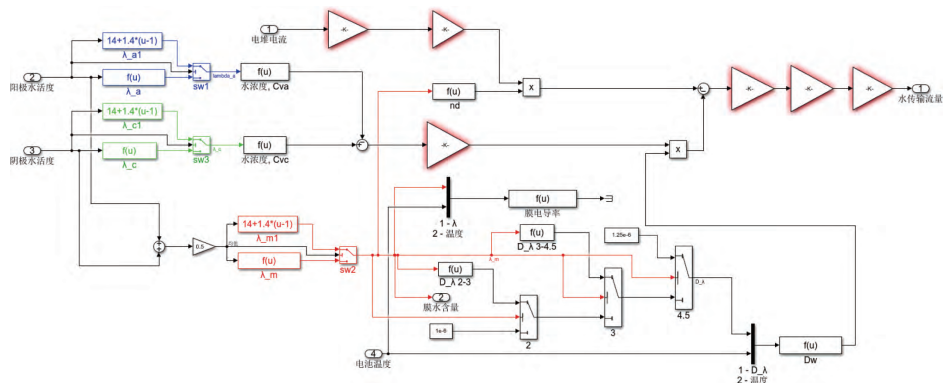


图5 电堆膜水化模型

表5 电堆膜水化模型设计原理

序号	子模型名称	子模型建模原理
1	质子传输的水流量	根据电渗透阻力系数、电堆电流密度及电渗阻力引起的阳极至阴极净水流量计算质子传输的水量
2	反向扩散的水流量	根据水在膜中的扩散系数、阴/阳极流中水浓度、膜的厚度计算反向扩散的水流量
3	膜的平均含水量	根据水活度的经验公式计算膜平均含水量

燃料电池电堆过电压仿真研究

1. 活化过电压仿真试验

活化过电压的影响主要体现在低电流密度工况下。下面主要研究阴/阳极进气压力和经验常量对活化过电压的影响。仿真过程为：

1) 通过改变活化过电压模型的输入参数（阴极入口流量和阴极出口管道压力）进行仿真与分析，得到不同边界条件下的电堆活化过电压。

2) 通过改变活化过电压模型中经验常量的取值进行仿真与分析，得到不同取值下的电堆活化过

电压。

（1）阴/阳极进气压力影响研究

根据经验公式， V_0 和 V_1 均可根据阴极压力、电堆温度、饱和蒸汽压力和阴极氧气分压计算得出，图6为活化过电压和阴/阳极进气压力的仿真曲线。

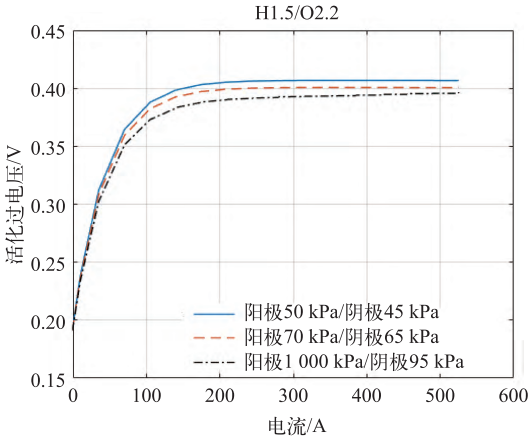


图6 活化过电压仿真曲线（阴/阳极进气压力）

由图6可知:随着进气压力的增大,低电流密度下,活化电压区别不大;中高电流密度下,活化电压稳定减小。这与电堆反应气体浓度和交换电流密度提高等整体反应条件改善有关。

(2) 经验常量影响研究

根据经验公式和Tafel公式的拟合关系,常量 c_1 用于近似表征活化过电压的指数常数, c_1 不同取值下的活化过电压性能仿真曲线如图7所示。

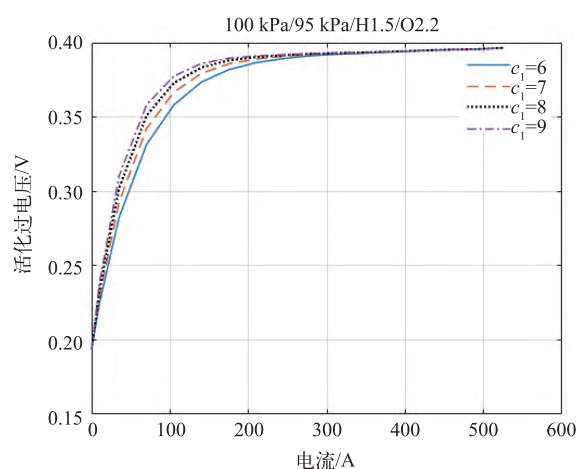


图7 活化过电压仿真曲线（经验常量 c_1 ）

由图7可得:随着 c_1 的增加,低电流密度下,电堆活化过电压增长更快;中高电流密度下,电堆活化过电压区别不大。故可用 c_1 来表征活化过电压的强度,仿真研究时可通过调节 c_1 来改变低电流密度下极化输出性能。

2. 浓差过电压仿真试验

浓差过电压的影响主要体现在高电流密度工况下。下面主要研究阴/阳极进气压力、常量 $i_{\max}$ 对浓差过电压的影响。仿真过程为:

1) 通过改变浓差过电压模型的输入参数(阴极入口流量和阴极出口管道压力)进行仿真与分析,得到不同边界条件下的电堆浓差过电压。

2) 通过改变浓差过电压模型中经验常量 $i_{\max}$ 的取值进行仿真与分析,得到不同参数下的电堆浓差过电压。

(1) 阴/阳极进气压力影响研究

根据经验公式, c_2 可根据饱和蒸汽压力、阴极 O_2 分压计算得出,浓差过电压和阴/阳极进气压力的仿真曲线如图8所示。

由图8可知:低电流密度下,不同进气压力浓差

过电压区别不大;中高电流密度下,随着进气压力的增大,浓差过电压降低,这是由于增大反应气体分压能提高气体通过电极层(GDL)向催化剂层的扩散速度,最终降低浓差过电压。

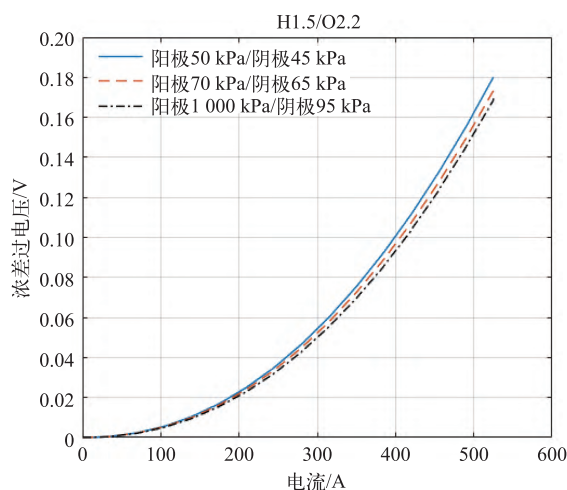


图8 浓差过电压仿真曲线（阴/阳极进气压力）

(2) 经验常量 $i_{\max}$ 影响研究

经验常量 $i_{\max}$ 和浓差过电压显著变化有明显关系, $i_{\max}$ 不同取值下电堆浓差过电压的仿真曲线如图9所示。

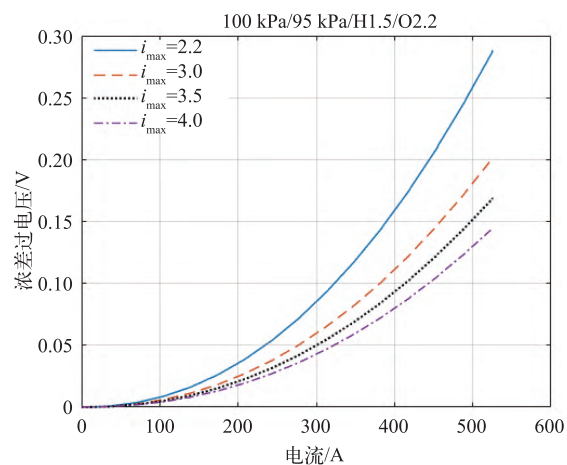


图9 浓差过电压仿真曲线（经验常量 $i_{\max}$ ）

由图9可知:低电流密度下,浓差过电压区别较小;中高电流密度下,随 $i_{\max}$ 增大,浓差过电压降低明显,在电堆极化性能仿真研究时,可通过调整 $i_{\max}$ 来改变高电流密度下的极化输出电压。

3. 欧姆过电压仿真试验

根据经验公式可知,欧姆过电压由电堆组成部件的固有电阻组成,仅与质子交换膜含水量和电堆

温度有关。图10仿真了电堆温度60℃、 $\lambda=14$ （含水量为100%）状况下，修正系数 k 分别为0.8、1.0和1.2欧姆过电压的曲线。

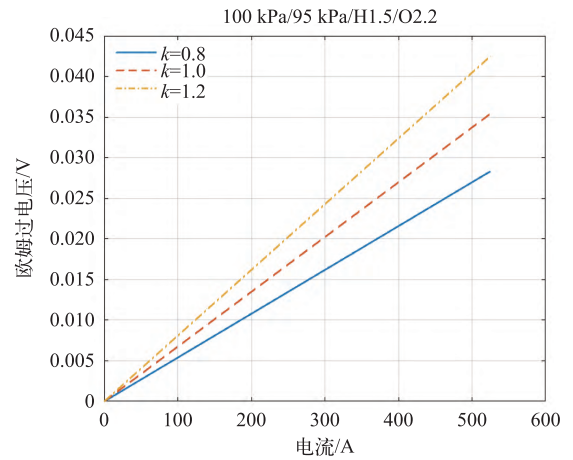


图10 欧姆过电压仿真曲线

燃料电池电堆极化性能仿真研究

- 试验工况

试验对象：MK350船用燃料电池电堆模型。

试验目的：在进气压力和过氧比（ ϕ_{air} ）改变情况下，验证电堆模型表征极化性能的准确度。

参考台架试验数据：GREENLIGHT 60 kW电堆测试台数据。

主要试验工况见表6。

表6 试验工况						
试验条件	试验序号	变过氧比试验工况			变进气压力试验工况	
阳极进气压力/kPa	100	100	100	100	70	50
阴极进气压力/kPa	95	95	95	95	65	45
过氢比	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
过氧比	2.0	2.2	2.5	2.2	2.2	2.2
阳极相对湿度 (%)	85	85	85	85	85	85
阴极相对湿度 (%)	80	80	80	80	80	80
电堆温度/℃	60	60	60	60	60	60
电堆电流/A	电堆逐步加载：70、105、140、175、210、245、280、315、350、385、420、455、490					

- 进气压力对电堆极化仿真性能的影响研究

按表7在Simulink模型中设置输入参数的数值，仿真不同阳极/阴极进气压力下电堆的平均单电压（即电堆输出电压/电堆节数），极化仿真数据和测试数据的误差分析见表8～表10。

表7 电堆模型输入参数取值

参数名称		参数取值
电堆电流/A		见表6
阳极入口流量	流量/ (kg/s)	$I_a 2.02 \times 0.001$ $170/2/96485 \times \phi_{\text{H}_2}$
	温度/K	323.15
	压力/kPa	见表6
	相对湿度 (%)	85
阴极入口流量	流量/ (kg/s)	$u 28.97 \times 0.001$ $170/4/96485/0.21 \times \phi_{\text{air}}$
	温度/K	323.15
	压力/kPa	见表6
	相对湿度 (%)	80
O ₂ 摩尔分数		0.21
电堆温度/K		333.15
阳极出口管道压力/kPa		参考电堆测试台架数据
阴极出口管道压力/kPa		参考电堆测试台架数据

注： ϕ_{H_2} 指过氢比。

表8 仿真试验数据（阳极100 kPa/阴极95 kPa）

电流/A	平均单电压 (测试数据) /V	平均单电压 (仿真数据) /V	误差 (%)
70	0.81	0.805	0.6
105	0.785	0.778	1.0
140	0.768	0.760	1.0
175	0.751	0.747	0.5
210	0.735	0.735	0.0
245	0.72	0.723	0.4
280	0.706	0.709	0.5
315	0.688	0.695	1.0
350	0.673	0.679	0.8
385	0.66	0.660	0.0
420	0.641	0.641	0.0
455	0.623	0.619	0.6
490	0.6	0.596	0.6

表9 仿真试验数据（阳极70 kPa/阴极65 kPa）

电流/A	平均单电压 (测试数据) /V	平均单电压 (仿真数据) /V	误差 (%)
70	0.796	0.797	0.0
105	0.773	0.768	0.6
140	0.753	0.750	0.4
175	0.739	0.737	0.3
210	0.723	0.725	0.2
245	0.707	0.712	0.7
280	0.691	0.698	1.1
315	0.677	0.684	1.0
350	0.659	0.667	1.2
385	0.642	0.649	1.1
420	0.621	0.629	1.3
455	0.601	0.607	1.0
490	0.58	0.584	0.6

表10 仿真试验数据（阳极50 kPa/阴极45 kPa）

电流/A	平均单电压 (测试数据) /V	平均单电压 (仿真数据) /V	误差 (%)
70	0.79	0.784	0.8
105	0.765	0.757	1.0
140	0.746	0.741	0.7
175	0.73	0.729	0.2
210	0.712	0.717	0.7
245	0.697	0.705	1.1
280	0.68	0.691	1.5
315	0.663	0.675	1.9
350	0.647	0.658	1.7
385	0.628	0.640	1.8
420	0.608	0.619	1.8
455	0.591	0.596	0.9
490	0.574	0.572	0.4

3. 过氧比对电堆极化仿真性能的影响研究

按表7在Simulink模型中设置输入参数的数值，仿真不同过氧比下电堆的平均单电压（其中过氧比2.0下的数据可参考表8），极化仿真数据和测试数据的误差分析见表11和表12。

表11 仿真试验数据（过氧比2.2）

电流/A	平均单电压 (测试数据) /V	平均单电压 (仿真数据) /V	误差 (%)
70	0.809	0.802	0.9
105	0.783	0.774	1.2
140	0.766	0.756	1.3
175	0.749	0.743	0.8
210	0.733	0.731	0.3
245	0.717	0.718	0.2
280	0.702	0.704	0.3
315	0.686	0.690	0.5
350	0.67	0.673	0.4
385	0.65	0.655	0.7
420	0.635	0.635	0.0
455	0.613	0.613	0.0
490	0.593	0.590	0.6

表12 仿真试验数据（过氧比2.5）

电流/A	平均单电压 (测试数据) /V	平均单电压 (仿真数据) /V	误差 (%)
70	0.808	0.809	0.1
105	0.784	0.783	0.2
140	0.767	0.766	0.1
175	0.752	0.754	0.2
210	0.738	0.742	0.6
245	0.723	0.731	1.1
280	0.709	0.718	1.3
315	0.696	0.705	1.3
350	0.682	0.690	1.2
385	0.667	0.674	1.0
420	0.65	0.655	0.8
455	0.633	0.636	0.4
490	0.62	0.615	0.8

结束语

本文基于MATLAB/Simulink平台，采用半机理半经验方法搭建了船用燃料电池发电系统电堆模型，针对电堆模型的极化电压曲线进行了重点研究，分析了活化过电压、浓差过电压及欧姆过电压的影响因素，并仿真了过电压曲线。最终将电堆极化仿真数据和电堆台架测试数据进行对比，船用燃料电池电堆模型在典型工况下仿真误差小于2%，满足船用燃料电池发电系统性能仿真、控制策略研究、寿命预测及状态评估研究等应用要求。

参考文献

[1] 刘秋秀．燃料电池空气供给系统的调控策略研究[D]．成都：电子科技大学，2020．

[2] 刘树良．质子交换膜燃料电池建模仿真与特性研究[D]．武汉：武汉理工大学，2013．

[3] 葛善海，衣宝廉，张华民．质子交换膜燃料电池模型研究进展[J]．电化学，2002，8(4)：363-375．

[4] JIA J, LI Q, WANG Y, et al. Modeling and dynamic characteristic simulation of a proton exchange membrane fuel cell[J]．IEEE Transactions on Energy Conversion, 2009, 24(1): 283-291．

[5] 徐艳辉，陈长聘，周琴．燃料电池的氢气供应[J]．船电技术，2000(2)：37-38，44．

[6] 周苏，纪光霁，刘冀晨，等．基于电流调节的燃料电池发动机过氧比波动研究[J]．上海交通大学学报，2012，46(11)：1712-1717，1728．