

基于粒子群算法的燃料电池仿真模型建模与分析

王家恒 蔡文杰 杨磊 姚帅杰

安徽江淮汽车集团股份有限公司

摘要: 利用 MATLAB/Simulink 软件平台, 对燃料电池的开路电压和极化作用引起的过电压分析计算, 重点通过粒子群优化算法对公式中经验参数进行迭代寻优确认, 形成一种实用且准确的燃料电池计算模型, 经计算单体电压计算误差小于 $\pm 3\%$ 。

关键词: 质子交换膜燃料电池; 极化曲线; 活化极化; 粒子群算法; Simulink 模型

0 前言

在能源紧张、环境恶化的背景下, 全球范围内主要国家和地区均把氢能源作为重点支持发展的清洁能源, 积极开展燃料电池汽车领域开发。近年来, 我国也在积极布局燃料电池产业, 国家、地方以及行业层面密集颁布了一系列产业政策, 在发展规划、技术研发和财政补贴等方面给予扶持。

与传统汽车及纯电动汽车相比, 燃料电池汽车具有零排放、长续航里程及使用方便性等优势。其中, 质子交换膜燃料电池因其工作温度低、响应速度快和体积小等特点完全适用于电动汽车的动力源, 被认为是未来新能源汽车最重要的发展方向之一。

本文介绍了一种质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 的建模方法, 重点在于利用粒子群算法优化和确认公式中电堆经验参数, 并通过系统的台架试验验证了模型的有效性, 在此基础上也讨论了 PEMFC 外特性影响因素和模型的动态响应能力。

1 PEMFC 数学模型

PEMFC 数学模型总体可分为 3 类: 集总参数、分布参数和混合参数模型。集总参数模型与空间无关, 是关于时间的函数, 但对于研究燃料电池内部结构设计和优化有局限。分布参数模型与时间、空间都有关系, 可分别描述电池内部组分、速度、压力和液态水等分布, 此类推导过程复杂, 模型参数较多且涉及化学参量不

易获得, 较适用于理论研究。混合参数模型包含集总参数模型和分布参数模型, 可同时描述燃料电池内部变量和辅助单元的边界输入条件, 模型复杂程度不亚于分布参数模型。本文采用集总参数模型, 即经验模型, 简单易用。

1.1 PEMFC 电压损失

氢氧燃料电池的理论标准电势 (E_0) 为 1.229 V, 当电池回路有电流通过时, 在电池内部会发生相应的物理和化学反应, 造成电压下降, 小于理论电压, 这一过程又叫作极化现象。极化主要分为四种, 分别是活化极化、欧姆极化、浓度极化和内部电流 / 渗透损耗。燃料电池的电压损失值是关于电化学反应速率 (电流密度) 的函数, 燃料电池性能典型特征正是它的极化曲线, 如图 1 所示。

根据上面的电化学反应机理, 质子交换膜单电池的输出电压可表示为:

$$V_{\text{CELL}} = E_{\text{Nemst}} - \eta_{\text{act}} - \eta_{\text{ohmic}} - \eta_{\text{con}} - E_{\text{loss}}$$

式中, E_{Nemst} 为热力学电动势; E_{loss} 为内部电流 / 渗透损耗引起的电压降; ($E_{\text{Nemst}} - E_{\text{loss}}$) 为开路电压; η_{act} 为活化过电压; η_{ohmic} 为欧姆过电压; η_{con} 为浓度过电压。

1.1.1 开路电压

根据氢氧燃料电池的能斯特方程, 其热力学电动势方程为:

$$E_{\text{Nemst}} = 1.229 - (8.5 \times 10^{-4}) (T_{\text{fc}} - 298.15) + (4.308 \times 10^{-5}) T (\ln P_{\text{H}_2} + \frac{1}{2} \ln P_{\text{O}_2})$$

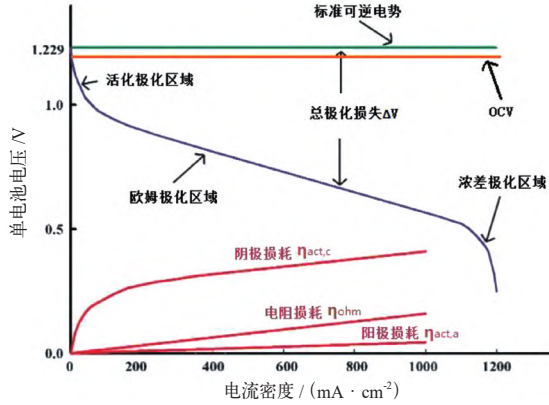


图1 PEMFC典型极化曲线

式中： P_{O_2} 为氧气在阴极界面的分压 (atm)； P_{H_2} 为氢气在阳极界面的分压； T_{fc} 表示电池温度 (K)。

PEMFC 在运行时增湿水的饱和蒸气压与电池温度 T_{fc} 的关系如下：

$$\log_{10}(P_{H_2O}^{sat}) = 2.95 \times 10^{-2} \times (T_{fc} - 273.15) - 2.18 -$$

$$9.18 \times 10^{-5} \times (T_{fc} - 273.15)^2 + 1.44 \times 10^{-7} \times (T_{fc} - 273.15)^3$$

$$P_{N_2}^{channel} = \frac{0.79}{0.21} P_{O_2}, \quad P_{O_2} = P_C - P_{N_2}^{channel} \times \exp\left(\frac{0.291 \times J}{T^{0.832}}\right)$$

式中， P_a 和 P_c 为电池阳极和阴极的压力； $P_{N_2}^{channel}$ 为氮气在阴极的分压 (atm)； J 为电池的电流密度 (A/cm^2)； $P_{H_2O}^{sat}$ 为水的饱和蒸气压。

参考燃料电池系统台架数据，电池温度 28℃，阳极、阴极压力分别为 1.15 bar 和 1.07 bar (1 bar=0.1 MPa) 时，根据以上公式算得理论单电池电压为 1.218 V，对应开路电压 226 V 左右，根据电池的可逆电压推算 E_{loss} 约为 0.191 V。

1.1.2 活化极化过电压

当电极表面电化学反应速率较快，而电极过程动力学速度较慢时，导致电极表面积累带某种电荷粒子，从而引起电极电位损失，被称为“活化极化过电压”。Mann 和 Amphlett 等利用巴特勒-福尔默 (Butler-Volmer) 方程推导的过电位与电流密度之间的关系，得出以下经验方程：

$$\eta_{act} = \xi_1 + \xi_2 T_{fc} + \xi_3 T_{fc} \ln(C_{O_2}) + \xi_4 T_{fc} \ln i$$

式中： ξ_1 、 ξ_2 、 ξ_3 、 ξ_4 是电池模型参数的相关系数，通过实验数据优化得到； C_{O_2} 为阴极与质子膜界面的氧气浓度 (mol/cm^3)，根据 Henry 定律表示为：

$$C_{O_2} = P_{O_2} \times 1.97 \times 10^{-7} \exp(498/T_{fc})$$

1.1.3 欧姆极化过电压

燃料电池内阻 R_{Ohm} 主要是来自电解质对离子的流动阻力。造成的欧姆损失可表示为：

$$\eta_{ohm} = IR_{Ohm} = I(R_M + R_C)$$

式中， R_M 为质子交换膜等效电阻， R_C 为质子交换膜接触电阻，通常为常数。质子交换膜的等效电阻可由膜的电阻率 r_M 表示为：

$$R_M = \frac{r_M \times L}{A}$$

式中， A 为膜电极的有效面积； L 为质子交换膜的厚度； r_M 是 Nafion 质子膜的特性参数，同样可由经验公式来表示：

$$r_M = \frac{181.6[1 + 0.03J + 0.062(\frac{T_{fc}}{303})J^{2.5}]}{[\lambda - 0.634 - 3J]\exp[4.18(\frac{T_{fc} - 303}{T})]}$$

式中 λ 表示质子交换膜含水量，在不同的湿度状态下数值是变化的，在 100% 增湿条件下，其值为 14；水汽过饱和条件下为 23。

1.1.4 浓度极化过电压

质子交换膜燃料电池大电流工作状态下，阳极与阴极气体流量需求增加，但由于传质速度慢造成电极表面反应物浓度降低引起的电势降低。由质量传输造成的浓度过电压表示为：

$$\eta_{con} = B \ln\left(1 - \frac{J}{J_{MAX}}\right)$$

式中， B 与燃料电池的实际工作状态有关的常数； J_{MAX} 表示电池最大的电流密度。

1.2 MATLAB/Simulink 模型

Simulink 是 MATLAB 中的一种可视化仿真工具，利用此软件平台实现以上经验公式仿真计算，高效且便捷。燃料电池稳态仿真模型见图 2。

然而在燃料电池运行中，聚集在电极表面的电子和聚集在质子膜上的氢离子由于电荷的累积会有电压产生，会储存部分能量和电荷，相当于一个等效电容。当通过电极的电流发生变化时，由于以上双层电荷现象存在，导致活化过电压和浓度过电压有一个“缓冲”过程，而不像欧姆过电压下降急促。原理示意图见图 3。

由图 3 可知，燃料电池的电压动态变化取决于等效电容和并联的极化电阻值 R_a ($R_{act} + R_{con}$)，则 R_a 对应的电压 V_a 可用微分方程表述为：

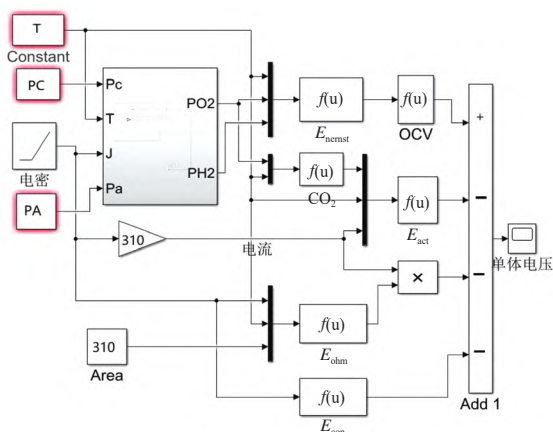


图2 燃料电池稳态仿真模型

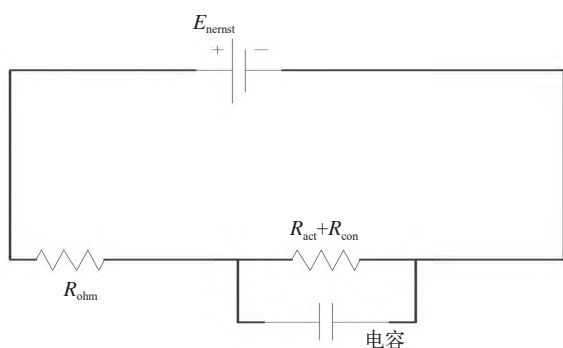


图3 PEMFC 等效电容示意

$$\frac{dV_a}{dt} = \frac{i}{C} - \frac{V_a}{R_a C}$$

根据燃料电池等效电容原理，建立燃料电池动态仿真模型，见图4。

1.3 燃料电池仿真模型系统参数辨识

粒子群优化算法（Particle Swarm Optimization, PSO）是一种进化计算技术（Evolutionary Computation）。PSO算法可以用于数据量大、复杂度高且目标函数复杂的系统中求解出最优参数。目前已被广泛应用于函数优化、神经网络训练、复杂系统控制以及其他遗传算法的应用领域。本文采用粒子群算法完成仿真模型系统参数辨识，算法具体流程如下：

首先，假设目标空间（Dim=8）随机产生了由 n 个粒子组成的一个种群，则该种群可以表示为一个 $n \times \text{Dim}$ 维的向量，第 i 个粒子表示为：

$$X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{i\text{Dim}}), i = 1, 2, \dots, n$$

然后，计算每个粒子的适应度更新全局最优位置和局部最优位置。其中适应度函数 $f(x)$ 为：

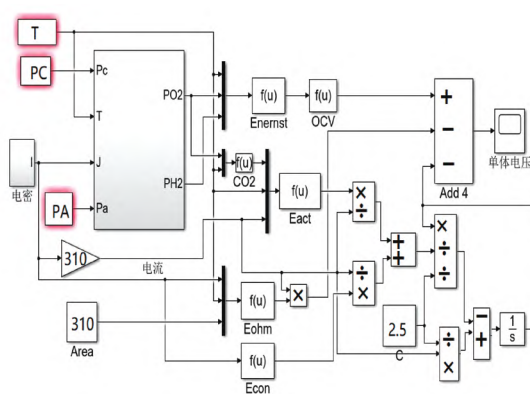


图4 PEMFC 动态仿真模型

$$\sum_{k=1}^n U_k - E_{Nernst} - \left(\zeta_1 + \zeta_2 T \ln(C_{O_2}) + \zeta_3 T \ln(I_k) \right) - I_k \left(\frac{181.6 \left[1 + 0.03J + 0.62 \left(\frac{T}{303} \right)^{2.5} \right] L}{\frac{[\lambda - 0.634 - 3J] e^{\frac{4.18(T-303)}{T}}}{A}} + R_c \right) - B \ln \left(1 - \frac{J}{J_{MAX}} \right) \right)^2$$

将第 i 个粒子当前的位置 X_i 代入即可得到该粒子当前的适应度 $f(X_i)$ 。更新第 i 个粒子的个体最佳适应度 $f_{pbest}(X_i)$ 和群体整体最佳适应度 f_{gbest} ，根据 $f_{pbest}(X_i)$ 更新粒子最佳位置 f_{pbesti} ，再从这些最佳位置 $gbest$ 中找到一个群体最佳位置作为本次迭代的全局最佳位置。

其次，更新粒子的速度与位置。粒子群通过初始化阶段产生随机解，然后通过迭代找到最优解。在每一次迭代中，粒子通过跟踪自身和群体来更新自己，具体算法如下：

$$v_i = w \times v_i + c_1 \times \text{rand}() \times (pbest_i - x_i) + c_2 \times \text{rand}() \times (gbest - x_i)$$

$$x_i = x_i + v_i$$

式中， v_i 是第 i 个粒子的移动速度； x_i 是第 i 个粒子当前的位置； c_1 、 c_2 为学习因子，通常设置为 2； $pbest_i$ 为第 i 个粒子的最优解； $gbest$ 是整个种群的最优解； w 为惯性权重，是一个非负数。

最后，迭代上述过程直到满足条件，得到最优位置以及最优适应度。PSO 算法具体流程如图 5 所示。

2 仿真与验证

2.1 台架测试与准备

涉及工具设备包括 CANoe、USBCAN2.0、笔记本电脑 2 台、示波器、电流钳和插线轮，如图 6 所示。

试验步骤分为：

- 1) 开启 CANoe 记录、上位机记录和电流钳示波器记录。
- 2) 通过上位机将控制模式改为 PC 自动模式。

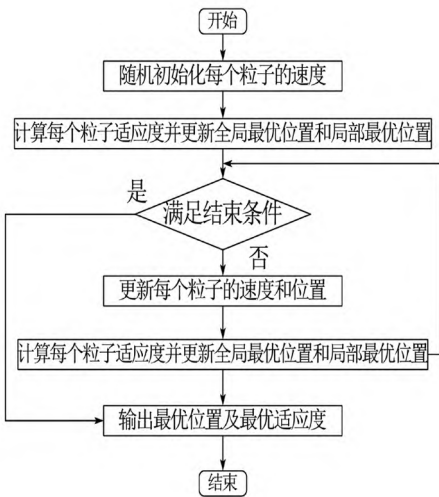


图5 算法流程原理

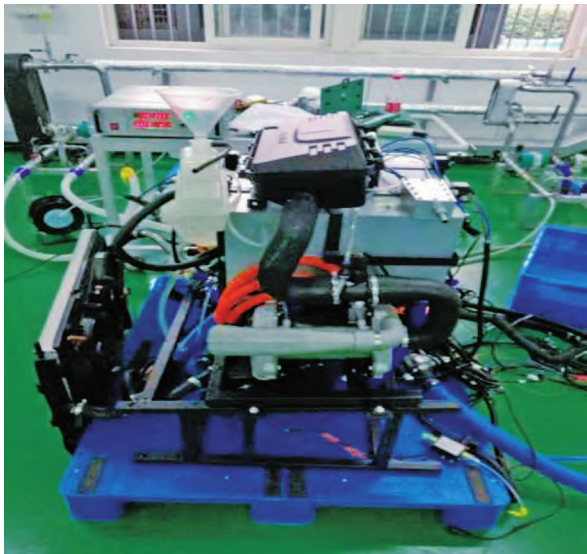


图6 燃料电池系统测试实物

3) 观察此功率下，示波器采集电流、上位机和CANoe 数据。

4) 需记录的数据及计算方法。

记录数据: DC-DC 输出电流、母线电压、电堆输出功率、电堆额定功率点起始时间、电堆额定功率点截止时间及示波器电流数据。

2.2 稳态模型验证

本文拟对 36 kW 级别燃料电池堆进行仿真验证，电堆来自大连某公司。

模型经验参数由电堆模块台架测试数据结合粒子群优化算法得到，详见表 1。

分别以下两种条件进行 PEMFC 稳态模型验证：

(1) 温度 70℃，阴极压力 1.6 bar，阳极压力 1.8 bar 的极化曲线仿真结果与实际工作极化曲线对照，见图 7。

表 1 燃料电池仿真模型参数

参数名称	单位	参数值
ζ_1	/	0.42
ζ_2	/	-0.00163
ζ_3	/	-3.82×10^{-5}
ζ_4	/	0.9×10^{-4}
λ	/	12.5
R_c	Ω	0.0002
L	μm	25
B	/	-0.016
J_{MAX}	A/cm^2	1.5
膜电极有效面积	cm^2	310
等效电容 C	F	2.5
单电池个数	/	220

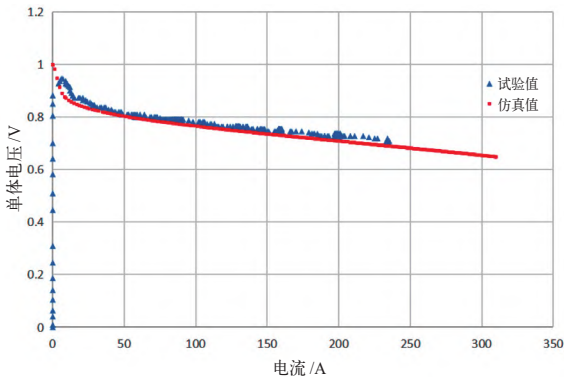


图 7 PEMFC 极化曲线稳态仿真结果与实验数据对比

(2) 不同输入参数条件下，燃料电池仿真模型与实验结果验证对比见表 2。

表 2 不同输入条件下模型仿真与实验数据对比

电池温度 /℃	阴极压力 /bar	阳极压力 /bar	电流 /A	仿真值 /V	实验值 /V
27.4	1.08	1.19	29.1	180.6	181
55.7	1.17	1.29	61.1	172.7	173
47.8	1.17	1.45	61.1	173.5	174
57.9	1.28	1.50	135.1	162.6	164
61.7	1.58	1.80	234.1	151.9	154

结果表明，PEMFC 稳态仿真模型在 $U-I$ 曲线和不同工况点的仿真数据与电堆实际数据高度一致，即使额定功率点 (35 kW) 模型的电压计算误差不超过 5 V，计算误差控制在 $\pm 3\%$ 以内，可有效描述燃料电池的输出性能。

2.3 动态模型验证

质子交换膜燃料电池动态仿真模型如图 8 所示，燃料电池输出电流在 0.1 s 和 0.3 s 时发生变化，分别为 160 A、170 A、180 A，两种模型对应输出的稳定

电压值相同，但由于“等效电容”存在，电流发生阶跃变化，动态模型电压和功率值均有明显的延缓过程，参考图 9 所示模型仿真过程表现与实际燃料电池性能基本一致。和稳态模型相比，更能准确地反映燃料电池内部电荷效应对电性能的影响。

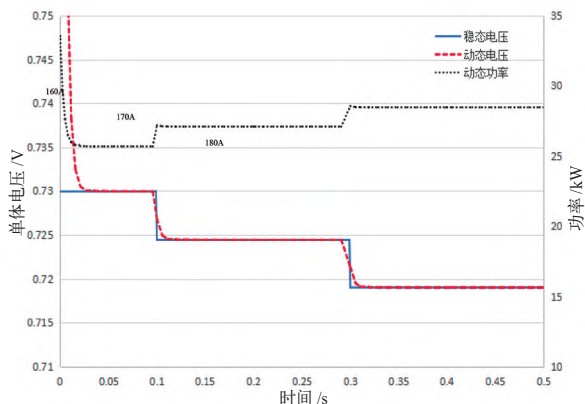


图 8 PEMFC 动态模型仿真结果

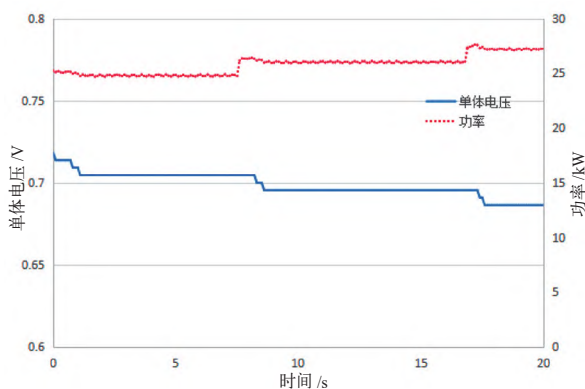


图 9 PEMFC 实际动态响应

2.4 仿真模型应用研究

基于燃料电池运行过程中受不同因素影响带来的性能变化，需要对燃料电池操作条件进行设计与控制，同时也要精确预测变化趋势。图 10、图 11 分别验证不同压力与温度对燃料电池性能影响，流道分压压力越大，此时反应压力及催化剂反应接触面积越大，电池性能越好；而电池温度影响并不是线性的，通常合适的温度有利于催化剂的活性，但低功率点较高的温度会降低膜的湿度，大功率点由于大量的产水量，则会避免这个问题。

3 结论

本文依据氢燃料电池电化学反应原理，利用经验公式详尽描述电池极化区域内电压和电流变化关系，

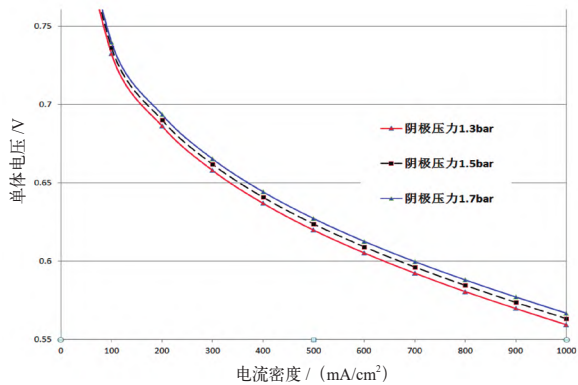


图 10 不同阴极压力对单体电压的影响

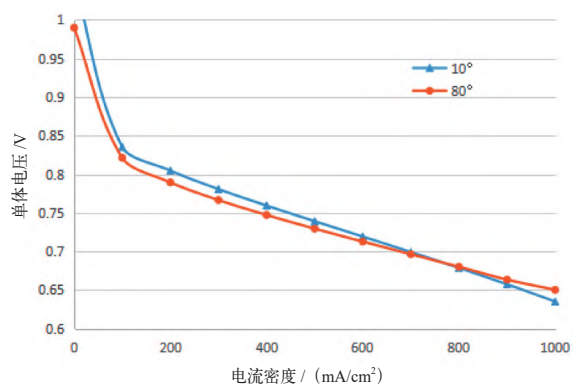


图 11 不同工作温度对单体电压的影响

搭建了质子交换膜燃料电池稳态及动态的经验仿真模型。模型以燃料电池进堆压力 P 、工作温度 T 和工作电流 I 作为输入参数，燃料电池单体电压、总电压和输出功率作为模型的输出。此模型在理论模型基础架构上，借助燃料电池台架实验数据尤其是粒子群优化算法的加入，准确地推出公式经验系数，计算结果与实验结果较吻合。

燃料电池性能与其温度和压力密切相关，较高的工作压力有利于电堆性能，而在低功率点时合适的电池温度更有利于电堆的电性能。

以上有效的计算模型，可准确对燃料电池各工况点的性能进行仿真和预估，尤其是作为仿真工具，在性能计算和续驶仿真相比 Cruise 或 AMESim 的计算速度方面有很大优势；同时在电控功能验证方面包括 MiL 和 HiL 测试中起到关键作用。在产品的设计过程中对燃料电池系统匹配和控制功能设计来说不可或缺。

参考文献

- [1] WANG G J, YU Y, LIU H, et al. Progress on design and development of polymer electrolyte membrane

- fuel cell systems for vehicle application: A review [J]. Fuel Processing Technology, 2018, 179: 203-228.
- [2] 吴占宽. 质子交换膜燃料电池水热管理与冷启动研究 [D]. 浙大: 浙江大学, 2024. DOI:10.27461/d.cnki.gzjdx.2024.000028.
- [3] 王吉华, 居钰生, 易正根, 等. 燃料电池技术发展及应用现状综述 (上) [J]. 现代车用动力, 2018(02): 7-12+39.
- [4] 王杰, 方存光. 基于热管理的氢燃料电池控制器研究 [J]. 内燃机与配件, 2023, (14): 27-29. DOI:10.19475/j.cnki.issn1674-957x.2023.14.013.
- [5] AIDIN TEIMOURI, ZAYER KABEH KAVEH, CHANGIZIAN SINA, et al. Comparative lifecycle assessment of hydrogen fuel cell, electric, CNG, and gasoline-powered vehicles under real driving conditions[J]. International journal of hydrogen energy, 2022, 47(89): 37990-38002.
- [6] 陈家城, 周苏. 大功率质子交换膜燃料电池建模及仿真 [J]. 太阳能学报, 2024, 45 (03): 290-297. DOI:10.19912/j.0254-0096.tynxb.2022-1982.
- [7] YANG Y, ZHU W C, LI Y, et al. Modeling of PEMFC and analysis of multiple influencing factors on output characteristics [J] . Journal of the Electrochemical society, 2022, 169 (3) : 034507.
- [8] 顾洮, 袁野. 质子交换膜燃料电池仿真建模与分析 [J] . 电源技术, 2021, 45 (4) : 459-462.
- [9] 李龙, 梁前超, 赵建锋, 等. 空冷型 PEMFC 的动态建模仿真及验证 [J]. 电源技术, 2020, 44 (2) : 200-203, 259.
- [10] LI D X, MA Z S, SHAO W, et al. Finite time thermodynamic modeling and performance analysis of high temperature proton exchange membrane fuel cells [J] . International journal of molecular sciences, 2022, 23 (16) : 9157.
- [11] 周嫣. 质子交换膜燃料电池建模与动态响应仿真分析 [J] . 电子技术与软件工程, 2022 (14) : 113-117.
- [12] JABBARY A, ROSTAMI ARNESA S, SAMANIPOUR H, et al. Numerical investigation of 3D rhombus designed PEMFC on the cell performance [J] . International journal of green energy, 2021, 18 (5) : 425-442.
- [13] DONG Z Z, LIU Y W, QIN Y Z. Coupled FEM and CFD modeling of structure deformation and performance of PEMFC considering the effects of membrane water content [J] . Energies, 2022, 15 (15) : 5319.
- [14] 邹巍涛, 李建威, 闫崇浩, 等. Real-time State Estimation of Fuel Cell Membrane Humidity Based on Extended Kalman Filter[C]// 中国汽车工程学会 (China Society of Automotive Engineers) .2023 中国汽车工程学会年会论文集 (2) .北京理工大学机械与车辆学院 ;,2023:5.DOI:10.26914/c.cnkihy.2023.068534.
- [15] 谢宏远, 刘逸, 候权, 等. 基于粒子滤波和遗传算法的氢燃料电池剩余使用寿命预测 [J]. 东北电力大学学报, 2021, 41 (01): 56-64. DOI:10.19718/j.isn.1005-2992.2021-01-0056-09.