

文章编号: 1671-6612 (2024) 02-168-09

质子交换膜电解池 进水温度与流速参数分析及系统能效预测

程维嵩 祝 乔 杨子龙

(西南交通大学机械工程学院 成都 610031)

【摘要】 操作参数的变化对质子交换膜 (PEM) 电解池的系统能效和耐用性产生重大影响。基于多物理场电热耦合模型, 对进水温度和进水流速进行了参数分析, 研究了它们对电解池性能的影响。研究表明, 提高进水温度能够显著改善电解池的电流密度, 进而提高电解制氢效率。然而, 这也使得电解池内部的温度可能升至超过膜的热降解临界温度 (80°C)。另一方面, 提高进水流速加强了电解池内部的热交换, 使温度分布更加均匀, 避免了电解池尾部局部热点的形成。但提升温度和流速也增加了电解系统中泵和散热器的功耗, 对系统能效产生了不利影响。采用机器学习的方法, 将多物理场仿真与人工神经网络 (ANN) 相结合, 利用仿真模型的电热特性数据并加入系统能效计算, 建立代理模型对其质子膜上最高温度与电解系统能效进行快速预测, 以便电解池系统实际运行中可以及时调整进口参数。其中, 模型预测的均方根误差仅有 0.106%, 确保了预测精度, 并大大提高了仿真效率。因此, 对不同进口参数下电解池的系统能效预测提供了重要的参考依据。

【关键词】 质子交换膜电解池; 进水温度和流速分析; 电解系统能效; 性能预测; 评价指标
中图分类号 TK91 **文献标志码** A

PEM Electrolyzer Inlet Water Temperature and Flow Velocity Parameter Analysis and System Energy Efficiency Prediction

Cheng Weisong Zhu Qiao Yang Zilong

(School of Mechanical Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu, 610031)

【Abstract】 This study investigates the impact of varying operating parameters on the energy efficiency and durability of a proton exchange membrane (PEM) electrolyzer. Using a multi-physics electro-thermal model, we analyze the parametric effects of inlet water temperature and flow velocity on electrolysis performance. Results reveal that increasing inlet water temperature enhances electrolyzer current density, improving efficiency but risking membrane thermal degradation above 80°C. Conversely, higher inlet water flow velocity promotes uniform temperature distribution, yet increases pump and radiator power consumption, reducing system energy efficiency. We employ a machine learning approach combining multiphysics simulations with artificial neural networks (ANN) to predict system energy efficiency and maximum membrane temperature. The model achieves a root-mean-square error of only 0.106%, ensuring accurate predictions and enhancing simulation efficiency. This work serves as a valuable reference for predicting electrolytic cell system energy efficiency under varying inlet parameters.

【Keywords】 PEM electrolyzer; Inlet water temperature and flow velocity analysis; System energy efficiency; Performance prediction; Evaluation indicators

作者简介: 程维嵩 (1999-), 男, 在读硕士研究生, E-mail: weisongcc@my.swjtu.edu.cn

通讯作者: 祝 乔 (1982-), 男, 博士, 教授, E-mail: zhuqiao@home.swjtu.edu.cn

收稿日期: 2024-01-15

0 引言

考虑到长期发展需求、碳排放最小化和可再生能源的充分利用,水电解制氢无疑是最有前途的途径之一^[1-3]。在不同的水制氢技术中,质子交换膜(PEM)电解槽因其高电流密度运行、高纯度制氢和高负荷灵活性而越来越受到人们的关注^[4]。

若要提高电解池电解性能,改善电解制氢效率,需要改善内部的电流密度进而提升电解电流、保证生成物气体的顺利排出,并保证反应物与电极的充分接触等^[5]。首先,电解池的性能与效率会随着温度的提高而得到改善^[6],如温度升高后质子膜的电导率增加^[7],可逆电动势降低^[8]。从机理上分析,这是由于电催化剂的活性增强,反应速率得到提升,反应过电势降低。然而,电解池温度过高(长时间超过 80℃)质子膜中的交换树脂会发生化学降解从而影响膜的耐久性^[9-11],另一方面也会增加氢渗透的风险^[12]。因此,分析 PEM 电解池进水温度与流速对电解池内部特性影响,并合理调控温度以进一步提升性能和避免膜失效,是我们有待深入研究的。此外,我们还关注到电解池的进水温度和流速与电解系统中的整体能效也密切相关,若能在给定进口参数的情况下对电解池整体能效进行预测,则对实际应用有重大意义。

参数分析通常需要借助适当的手段,利用 COMSOL 建立的三维多物理场仿真(MPS)模型不仅可以对电解池内部的电热耦合现象做出较为全面且准确的分析^[14],还可以为降低实验成本。我们采用多物理场仿真模型模拟电解池的性能参数,并通过实验数据验证其模型可靠性^[13]。然而,MPS 模型的高复杂度而带来的大计算量与计算时间,限制了其在性能预测方面的应用。与 MPS 相比,通过数据训练得到的代理模型能够在给定输入情况下准确预测系统输出^[15],且计算成本较低,可用于电解池性能的预测^[16]。

综上所述,针对质子交换膜电解池制氢过程中的水热分析及系统能耗问题,本研究以三维多物理场仿真模型为基础,选取电解池关键参数(进水温度及流速)进行分析,并结合辅助设备泵和散热器搭建 PEM 系统能效模型,建立代理模型预测电解系统的能效。

1 PEM 电热耦合模型及系统描述

PEM 电解槽系统如图所示。该装置由 PEM 电解槽、散热器和水泵组成。在运行过程中,泵将水送到 PEM 电解槽,通过电解反应水被分解成氢气和氧气。阴极和阳极的水夹带着生成物气体,分别进入氢气分离器和氧气分离器,分离后的纯氢和纯氧被分开储存。阴极和阳极的水被送到热交换器散热,然后由泵进行再循环利用。

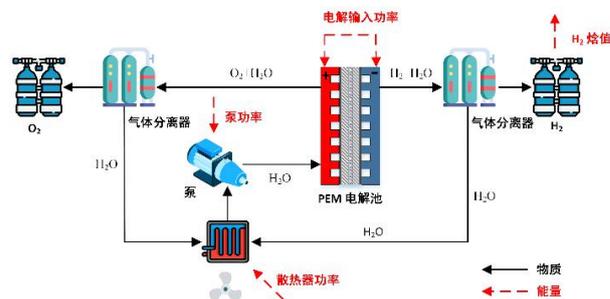


图 1 PEM 电解池的 PEM 电解槽制氢过程示意图

Fig.1 Schematic illustration of the PEM electrolyzer system's hydrogen generating process

图 2 为阳极、阴极两侧单通道的 PEM 电解池的三维多物理场仿真模型。该模块包括质子交换膜阳极和阴极的双极板、流道、气体扩散层、催化剂层。在电解池内部,水流经阳极流道,其中一部分水通过阳极扩散层扩散到阳极催化层。然后水被分解成质子、电子和氧气。产生的质子在电场力的作用下穿过质子交换膜到达阴极催化层,并与来自外部电路的电子发生反应。在阴极侧,我们通水的目的是,增强氢气的排出并防止膜干燥,特别是在高电流密度下。

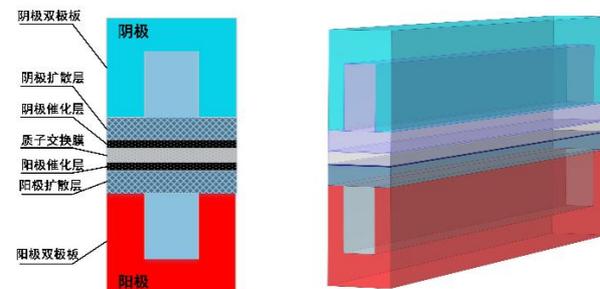


图 2 PEM 电解池的几何结构与多物理场仿真模型

Fig.2 Geometry and multiphysics field simulation modeling of PEM electrolytic cell

本研究使用的详细几何结构参数参照文献^[17],见表 1。

表 1 PEM 电解池几何结构参数
Table 1 PEM electrolytic cell geometry parameters

参数	值	单位
流道长	50	mm
流道宽	0.5	mm
流道高	1	mm
双极板高	1.5	mm
肋宽	0.5	mm
扩散层厚度	300	μm
催化层厚度	20	μm
质子交换膜厚度	178	μm

2 模型建立

2.1 PEM 电解池系统建模

2.1.1 电解池多物理场建模

(1) 电荷守恒方程

根据 Butler-Volmer 方程^[18], 阳极或阴极催化层的体积电流密度 i_v (A/m^3) 可表示为:

$$i_v = a_v i_{ref} \left(\exp\left(\frac{\alpha F \eta_{act}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha F \eta_{act}}{RT}\right) \right) \quad (1)$$

式中, T 为电解池催化层上各点的温度; a_v 、 i_{ref} 、 α 、 F 和 R 分别为活性比表面积, 参考交换电流密度, 电荷传递系数, 法拉第常数与气体常数。此外, η_{act} 为活化电动势可以采用式 (2) 计算:

$$\eta_{act} = \varphi_s - \varphi_m - V_{oc} \quad (2)$$

式中, $V_{oc} = 1.229 - 9.0 \times 10^{-4} (T - 298.15)$ 为电解池的开路电动势, V。基于欧姆定律, 电子电势 φ_s (V) 和电解质电势 φ_m (V) 可被表示为:

$$\nabla \cdot (-\sigma_s \nabla \varphi_s) = -i_v \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (-\sigma_m \nabla \varphi_m) = i_v \quad (4)$$

式中, $\sigma_s = 1000$ S/m 为电子电导率;

$$\sigma_m = (0.5139\lambda - 0.326) \exp\left(1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right)$$

(S/m); λ 为质子交换膜中的水含量, 本文假设质子膜内水含量饱和和取值 16。

(2) 质量守恒方程

阳极和阴极的流道、气体扩散层和催化层中液态水的质量守恒表示为:

$$\nabla \cdot (\rho_w u_{in}) = Q_{mass} \quad (5)$$

式中, ρ_w 为液态水的密度, kg/m^3 ; u_{in} 为水的速度向量; $Q_{mass} = -\frac{|i_{v,a}| M_{H_2O}}{2F}$ 催化层上参加化学反应水的源项, $kg/(m^3 \cdot s)$ 。

(3) 动量守恒方程

$$\frac{\rho_w}{\varepsilon_{eff}} \left(u_{in} \cdot \nabla \right) \frac{u_{in}}{\varepsilon_{eff}} = - \left(\frac{\mu_w}{k_{eff}} + \frac{S_m}{(\varepsilon_{eff})^2} \right) u_{in} + \quad (6)$$

$$\nabla \cdot \left\{ -p_w I + \frac{\mu_w}{\varepsilon_{eff}} \left(\nabla u_{in} + (\nabla u_{in})^T - \frac{2}{3} \frac{\mu_w}{\varepsilon_{eff}} (\nabla u_{in}) \right) \right\} I$$

式中, ε_{eff} 为被液态水所占据的有效孔隙率; p_1 为液态水的压力, Pa; μ_w 代表液态水的动力粘度, Pa·s; I 为数学中的换位符号; k_{eff} 为水的有效渗透率, m^2 。

(4) 能量守恒方程

PEM 电解槽内的温度分布可由下式计算:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho_{eff} C_{p,eff} u_{in} T) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_H \quad (7)$$

式中: ε , ρ_{eff} , $C_{p,eff}$ 和 k_{eff} 分别代表材料孔隙率, 材料有效密度, 常压下的材料热容和材料的有效热导率。此外, S_H 为电解池内部不同位置的热源项^[20], W/m^3 。

基于上述方程, 本文发现电解池的体电流密度 i_v 本质上为温度场 T 的函数, 操作参数进水流速 u_{in} 和进水温度 T_{in} 通过影响温度场进而改变电解池的电解性能。此外, 合理的调控进水温度与流速可以避免电解池内部温度超过 $80^\circ C$, 即质子膜产生局部热点的临界阈值。其次, 还可以在保证膜安全运行的前提下通过提高进口水流量和温度提高电解性能。

2.1.2 系统能效计算

本文将 PEM 电解槽系统的功率分为两部分, 即辅助设备包括泵和散热器的功率消耗, 另一部分是电解水所需的电解功率。

在本文中, 水泵供水所需的功率 (W), 它可以用式 (8) 来计算:

$$P_{pump} = \frac{\rho_w A_{ch} g u_{in} H_{pump}}{\eta_{pump}} \quad (8)$$

式中, A_{ch} 为阳极和阴极流道的截面积, m^2 ; g 为重力加速度, m/s^2 ; H_{pump} 是水泵的扬程; η_{pump} 为水泵的效率。此外, 我们取流道出口处温度为水的出口温度 T_{out} 。通过散热器我们将出口水的温度

重新降低为进水温度 T_{in} , 所以散热器的功率我们可以表示为:

$$P_{rad} = \frac{C_{p,w} \rho_w A_{ch} u_{in} (T_{out} - T_{in})}{COP} \quad (9)$$

式中, $C_{p,w}$ 为水的比热容, $J/kg \cdot K$; COP 为散热器的性能系数, 取值为 4。

电解池单位时间内产生氢气的焓值 E_{H_2} (W) 可被表达为:

$$E_{H_2} = \frac{I_{cell}}{2F} H_{H_2} \quad (10)$$

式中, $I_{cell} = \int_{\tau \in ACL} i_{v,d} d\tau$ 为电解池的电流;

ACL 为电解池的阳极催化层; F 为法拉第常数, $96485C/mol$; H_{H_2} 为氢气的低热值, $2.86 \times 10^5 J/mol$ 。

当输入电压 V_{cell} 恒定时, 输入电解功率可由式 (11) 给出:

$$P_{in} = V_{cell} I \quad (11)$$

通过整合电解池所有能量的输入与产出项, PEM 电解池系统能效 (制氢能效) η_{sys} 可被表示为:

$$\eta_{sys} = \frac{E_{H_2}}{P_{in} + P_{pump} + P_{rad}} \quad (12)$$

基于上述方程, 可以发现电解池的进水温度 T_{in} 与流速 u_{in} 一方面会影响电解池外部辅助设备水泵与散热器的能耗, 另一方面也会通过影响电解池的电流进而改变电解池单位时间的产氢量。

因此, 如果能提前预测不同的进水温度与流速下, 电解池膜上的最高温度与电解系统的制氢效率, 这对提高电解池的高效长久运行很有帮助。

2.2 基于 ANN 的 PEM 电解系统能效预测模型

2.2.1 能效预测模型搭建流程

MPS 模型精通 PEM 电解槽的传热、传质和电化学反应分析研究, 但由于模型耗时长, MPS 在预测分析中无法快速响应, 仍有不足。为了解决这一问题, 本研究采用机器学习算法, 人工神经网络 (ANN) 建立代理模型。ANN 代理模型需要学习和训练的数据量少, 可以实现对 PEM 电解槽性能的准确预测, 符合本研究数据量小的特点。图 3 展示了本文所提出预测方法的工作流程。

首先, 建立 MPS 模型, 并根据实验结果进行验证。通过 MPS 模型分析进水流速和进水温度对电解池电热特性的影响, 确定电解池内质子膜的

高温和电解电流。随后, 利用 PEM 系统能效模型计算不同进水参数和电解电压下系统的制氢能效, 并构建神经网络输入输出数据库。通过训练 ANN 预测模型, 映射输入条件和输出参数的关系。使用人工神经网络代理模型生成新的输出, 与 MPS 模型结果比较验证准确性。最终, 通过 ANN 预测模型可预测不同进水参数和电压下系统的能效和最高温度。

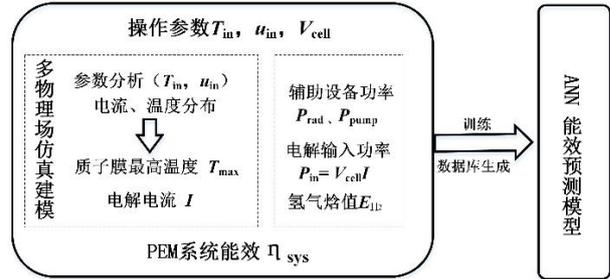


图 3 能效预测模型搭建流程

Fig.3 Performance prediction model building process

2.2.2 ANN 预测模型建立

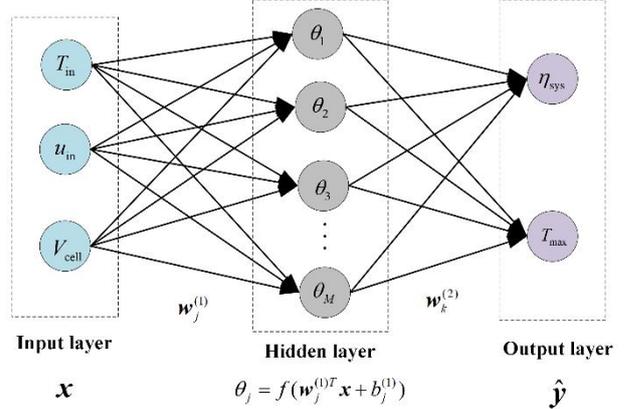


图 4 人工神经网络结构

Fig.4 Structure of an artificial neural network

在本文中, 使用具有一个隐藏层的前馈网络来模拟 PEM 电解池, 如图 4 所示。事实证明, 只要有足够的隐藏节点可用, 这种网络实际上可以以任意精度逼近任何感兴趣的函数^[21]。具有单个隐藏层和单个输出的前馈神经网络可以由输入变量 (x)、权重 (w) 和偏差 (b) 的函数表示:

$$\hat{y} = g \left(\sum_{i=1}^h w_i^{(2)} f \left(\sum_{j=1}^v w_{ij}^{(1)} x_j + b_i^{(1)} \right) + b^{(2)} \right) \quad (13)$$

式中, \hat{y} 代表预测的输出变量, v 代表输入变量的数量, h 代表隐藏层中隐藏节点的数量, 传递函数 $f(z)$ 和 $g(z)$ 分别是隐藏层和输出层的传递函数则被分别用于隐藏层和输出层的节点, $w_{ij}^{(1)}$ 和 $b_i^{(1)}$

分别为隐藏层的权重与偏置， $w_i^{(2)}$ 和 $b_i^{(2)}$ 则为输出层的权重与偏置。在训练过程中，使用优化算法最小化网络对训练集的拟合误差，训练过程执行 N 个周期（一个周期是指网络中的权重被优化算法更新一次）。

在训练过程中，我们使用均方差（MSE）误差作为损失函数，其公式如下：

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (14)$$

其中， n 为批量大小， y_i 为多物理场模型的仿真数据值， \hat{y}_i 为 ANN 模型在每一个周期中训练时做前向运算的预测值。

根据前文 2.1 节的分析，本文选用了电解池的进水温度 T_{in} 、进水流速 u_{in} 与电解电压 V_{cell} 作为 ANN 预测模型的输入，将系统能耗 η_{sys} 与质子膜上最高温度 T_{max} 作为网络的预测输出。

3 PEM 多物理场模型验证与分析

3.1 仿真模型验证

为了验证模型的可靠性，采用与文献[19]中电解池相同的运行参数与结构参数。选取进水流速为 0.5m/s，电解池的进口温度分别为 25℃、45℃ 与 80℃ 的运行条件下，电解池仿真模型的 $I-V$ 特性曲线与文献中实验的结果相对比，如图 3 所示。对于三种不同的进口温度，研究发现电解池内部电流密度从 0—3.5A/m² 的范围内，仿真与实验结果都比较吻合，因此本文的仿真模型可以较好的展现电解池内部电化学反应特性。

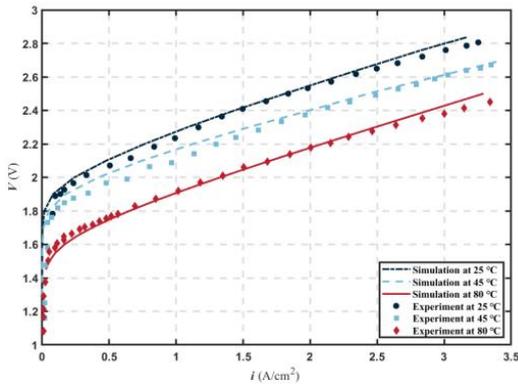


图 5 不同进水温度下仿真模型与实验数据的极化曲线比较

Fig.5 Comparison of the polarization curves from MPS model and experiments at different inlet water temperatures

3.2 参数影响分析

3.2.1 电解池平均电流密度及最高温度

由上述讨论可知，液态水在电化学反应中作为反应物，在散热过程中作为传热介质，并且还通过将生成的气体带离电解槽而影响质量输送。因此，本文利用多物理场仿真模型重点研究进水温度和流速对质子交换膜内最高温度 (T_{max})、阳极催化剂层内平均电流密度 (i_{mean}) 及其在 PEM 电解槽内分布的影响。

如图 6 所示，固定电解电压 $V_{cell}=2.3V$ ，当流速为 $u_{in}=0.1m/s$ 时，催化层中的平均电流密度和膜上最大的温度随进水流速增加均呈线性增长趋势。进水温度从 25℃ 上升到 75℃ 时，电流密度增加了 1.2255A/cm²，膜上最高温度超过了温度阈值 80℃ 达到 82.86℃。这主要归因于温度升高增强了电化学反应活性，并且在高温下 PEM 电解槽中产生了大量热量。因此，提高进水温度可以显著提高平均电流密度，这对提高单位时间产氢量非常有用，但也要同时考虑膜是否超过临界阈值而产生局部热点。

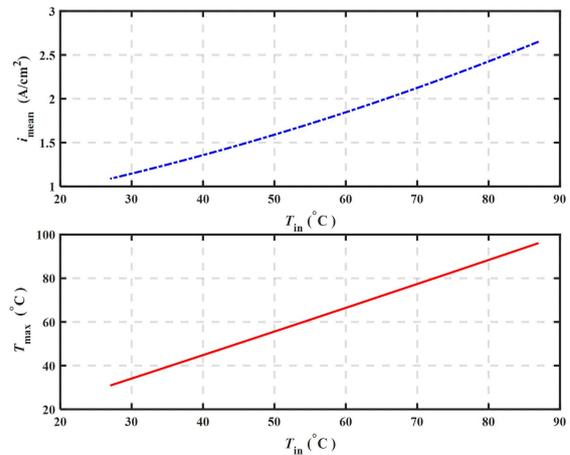


图 6 进水温度对阳极催化剂层内平均电流密度和质子交换膜内最大温度的影响

Fig.6 Effects of inlet water temperature on the mean current density within anode catalyst layer and the maximum temperature within proton exchange membrane

如图 7 所示，当电解电压 2.3V，进水温度固定在 75℃ 时，研究发现，增加进水流速对电流密度的影响与膜上最大温度相反。进水流速的增大略微提高了平均电流密度，但显著降低了膜上最高温度。当流速从 0.1m/s 增加到 1.0m/s 时，电流密度

增加了 $0.049\text{A}/\text{cm}^2$, 但膜上最高温度降低了 4.3°C 。平均电流密度略有提高是由于反应物浓度的提高和入口水流流速的提高引起的温度的降低共同作用的结果。增大流速可以加速 PEM 电解槽内气体的消除, 从而提高反应物的浓度, 但由于水与流道壁面之间的高传热系数, 也加强了散热。因此, 当前的电流密度变化趋势是反应物浓度增加和温度降低之间权衡的结果。

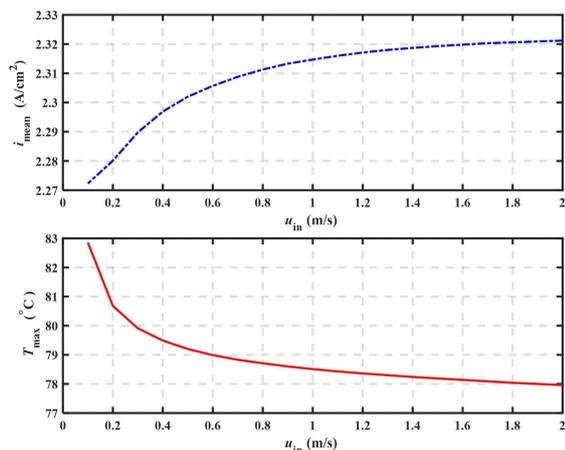


图 7 进水流速对阳极催化剂层内平均电流密度和质子交换膜内最大温度的影响

Fig.7 Effects of inlet water flow velocity on the mean current density within anode catalyst layer and the

maximum temperature within proton exchange membrane

3.2.2 电解池电流密度分布及温度分布

以上分析表明, 进水温度对催化层内电流密度和膜上最大温度都有较强的影响。相反, 进水流速主要影响膜上最高温度, 但对电流密度的影响相对不显著。为了进一步理解这些结果, 我们从 MPS 模型的角度分析了进水温度和流速对阳极催化层电流密度和膜上温度分布的影响。如图 8 (a) 和 (c) 所示, 热集中主要发生在 PEM 电解槽尾部。这是由于在 PEM 电解槽运行过程中产生的热量 (不可逆热源、熵热源和欧姆热源) 比电化学反应所需的热量高得多。因此, PEM 电解槽的温度整体升高, 随着水流带走的热量最终将聚集在 PEM 电解槽的末端。

当流速为 $0.1\text{m}/\text{s}$ 时, 在 $T_{in}=25^\circ\text{C}$ 和 $T_{in}=75^\circ\text{C}$ 的情况下, 膜上最高温差分别为 2.3°C 和 4.6°C 。这是由于相对较低的流速导致了电解池内部散热不足。然而, 当进水流速增加到 $1.0\text{m}/\text{s}$ 时, 电解池内

部与水的换热增强, 膜上温差分别下降到 1°C 和 2.1°C 。温度分布明显更加均匀。因此, 在相同的进水温度下, 流速的增加可以显著降低最高温度和最大温差, 从而使 PEM 电解槽内温度分布均匀, 提高其耐久性。

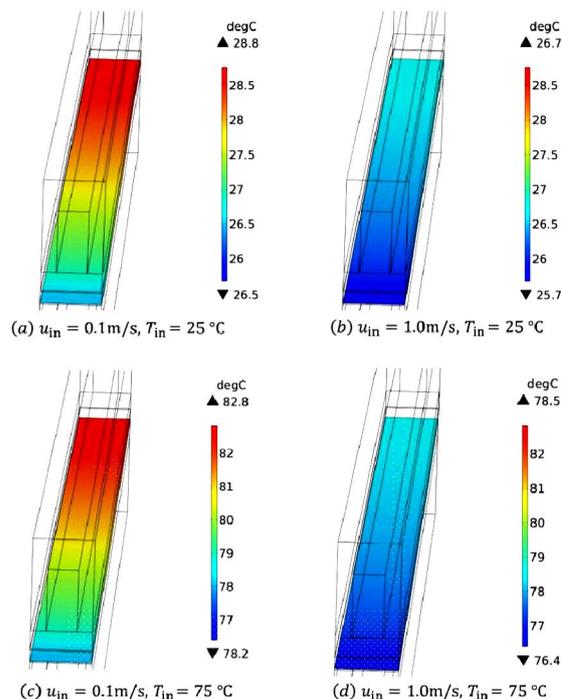


图 8 进水流速对质子交换膜内温度分布的影响

Fig.8 Effects of inlet water flow velocity and temperature on the temperature distribution within proton exchange membrane

PEM 电解槽的电流密度与制氢速率直接相关, 进而影响系统的整体能耗。从图 6 和图 7 中展示了平均电流密度的变化, 并不能直观反映催化层内部的电化学反应现象。在图 9 中, 展示了 u_{in} 和 T_{in} 对阳极催化层内电流密度分布的影响。当流速固定为 $0.1\text{m}/\text{s}$ 时, 随着进水温度从 25°C 升高到 75°C , 最大电流密度从 $1.03 \times 10^4 \text{A}/\text{m}^2$ 增加到 $2.23 \times 10^4 \text{A}/\text{m}^2$, 增加了 116%。这主要是由于高温促进了电化学反应, 降低了极化损耗, 提高了催化层的导电性。因此, 在相同的电解电压下, 电流密度增大。当流速为 $1.0\text{m}/\text{s}$ 时, 从图 9 (b) 和 (d) 中可以看出, 与 $0.1\text{m}/\text{s}$ 低流速下的结果相比, 阳极催化层中的电流密度分布明显更加均匀。重要的是, 虽然峰值电流密度在 75°C 时随着流速的增加略有下降, 但电流密度在表面的总体分布更加均匀, 这解释了平均电流密度曲线在高温和高流速下

有所改善。

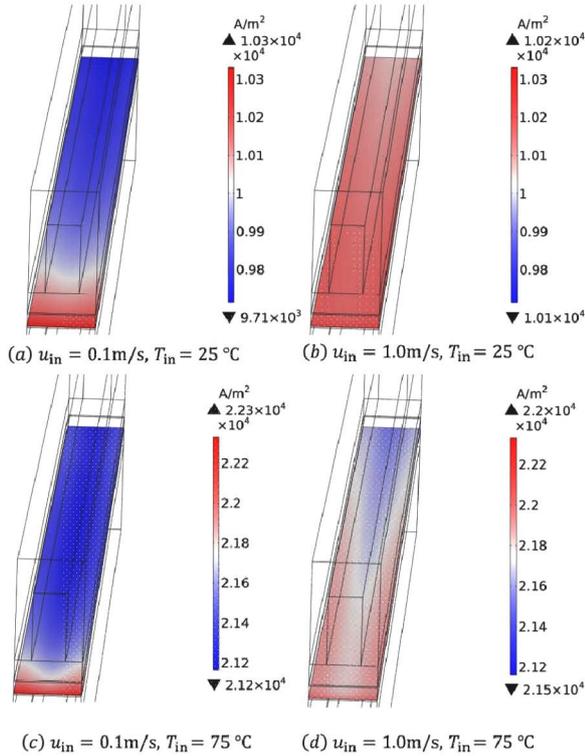


图9 进水流速和温度对阳极催化层内电流密度分布的影响

Fig.9 Effects of inlet water flow velocity and temperature on the current density distribution within anode catalyst layer

总之，在低流速下，电池的末端会过热，可能会产生局部热点，进而导致质子交换膜的降解。在高流速下，质子交换膜的温度分布和催化层的电流密度分布更为均匀。然而，高流速需要额外的泵功率消耗。因此，如果能快速预测不同进水温度与进水流速对应的系统整体效率和膜上最高温度，我们就可以合理的调控运行参数，以实现较高的系统能效，并确保质子膜处于一个的合理工作温度。

4 PEM 系统能效及最高温度预测

4.1 模型精度评价指标

基于 COMSOL 的 MPS 模型，能够分析电化学反应和温度场之间的强耦合，并获得了一个 5127×5 的数据库。基于之前的参数分析和数据库，我们构建了一个具有三个输入参数（电解电压，进水流速，进水温度）和两个输出参数（电解池系统能效，质子膜上最高温度）的人工神经网络数据驱动模型。

训练完成后，神经网络预测模型的预测效果的准确性可以通过均方根误差（RMSE）与决定系数（ R^2 ）这两个指标来评估。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (15)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (16)$$

式中， N 为总的的数据量， \bar{y}_i 是多物理场仿真模型的数据的平均值。RMES 越小与 R^2 越接近于 1，ANN 代理模型的预测效果也就越好。

4.2 ANN 预测模型精度验证

神经网络中的超参数如表 2 所示，隐藏层中的传递函数使用 Sigmoid 函数，即

$$f(z) = \frac{1}{(1 + \exp(-z))}$$

用线性传递函数 $g(z) = z$ 。

表 2 ANN 预测模型超参数设置

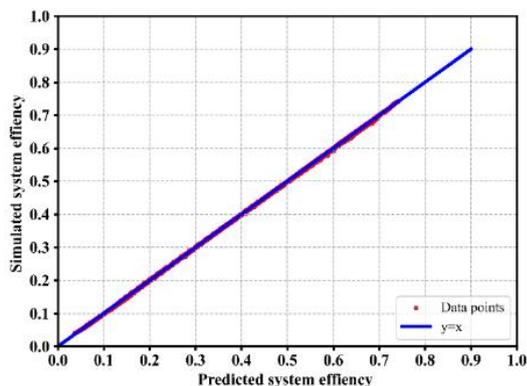
Table 2 Hyperparameter setting of the ANN

数据类型	超参数	值
网络结构	隐藏层层数	1
	隐藏层节点数	30
	隐藏层激活函数	Sigmoid
训练过程	优化器	Adam
	学习率	0.01
	批量大小	32
	训练周期	1200
	损失函数	MSE

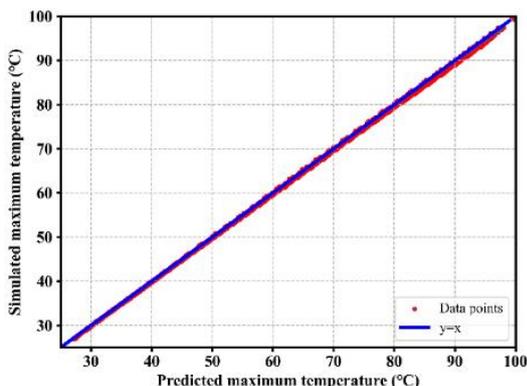
利用三维模型产生的仿真数据，训练神经网络代理模型来预测 PEM 系统效率和温度分布。

ANN 模型在整个数据集上的准确率如图 10 (a) 和

(b) 所示。横轴和纵轴分别表示神经网络模型的预测结果和三维模型的仿真结果。数据点越接近 $y = x$ 这条线，神经网络模型的预测就越准确。预测模型的系统整体效率和膜上最高温度的均方根误差分别为 0.001060 和 0.010688，而决定系数分别为 0.99995 和 0.99997。



(a) 系统效率



(b) 膜上最高温度

图 10 ANN 预测模型输出结果与三维仿真结果对比

Fig.10 Comparison of ANN prediction model output results with MPS simulation results

训练模型时的整体数据集按 0.8:0.2 划分成训练集与测试集, 整个数据集包含不用于训练的测试数据集。因此, 神经网络预测模型的鲁棒性得以验证。本文所建立的预测模型可以有效的预测不同工况下电解池系统效率和电解池内部的最高温度, 对往后合理调控电解池的进口参数和保证电解池高效长久运行提供了数据参考。

5 结论

本文建立 PEM 电解池的电热耦合模型与电解系统的能效模型, 分析了电解池进口参数对电解池整体和分布式电流密度与热的影响, 并利用神经网络搭建了一个预测模型, 该模型在保证计算精度的同时大大提高了计算速度, 实现电解池不同工况下的输出性能快速预测。本文的主要意义在于以下三个方面:

(1) 本文通过多物理场仿真建模对电解池的

进水温度与进水流速进行了参数分析。研究发现, 进水温度升高使阳极催化剂层内电流密度和膜内最高温度成比例增加, 而较高的进水流速使总电流密度略有增加, 但降低了膜内最大温差。此外, 在高进水温度低进水流速下, 质子交换膜上更容易出现尾端过热, 温度超过 80℃ 的现象, 这对电解池长久运行十分不利。

(2) 本文将电解池操作参数 (进水流速与进水温度) 与电解池系统的整体能耗结合起来。除了考虑电解输入功率还将辅助设备的散热器与泵的功耗融入系统总功耗中, 使系统能效的公式更加完善。此外, 本文的系统能效模型与参数研究分析为下一步研究奠定了基础, 即在不同电解工况下, 如何选取电解池的最优操作参数, 以减小辅助设备能耗并增加系统制氢量, 进而改善系统的整体能效。

(3) 本文采用机器学习的方法, 将多物理场仿真与 ANN 神经网络相结合, 利用多物理场仿真模型的电热特性数据并加入系统能效计算, 建立代理模型对其质子膜上最高温度和系统能效进行预测。其中对预测电解系统能效和膜上最高温度的均方根误差仅有 0.106%, 展现了高的预测精度。

参考文献:

- [1] Dincer I, Acar C. Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015,40(34): 11094-11111.
- [2] Wahid, Mazlan, Abdul, et al. Hydrogen production from renewable and sustainable energy resources: Promising green energy carrier for clean development[J]. Renewable & Sustainable Energy Reviews, 2016.
- [3] Baykara S Z. Hydrogen: A brief overview on its sources, production and environmental impact[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018,43(23).
- [4] Marshall A T, Sunde S, Tsympkin M, et al. Performance of a PEM water electrolysis cell using Ir x Ru y Ta z O₂ electrocatalysts for the oxygen evolution electrode[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2007,32(13): 2320-2324.
- [5] Olivier P, Bourasseau C, Bouamama P B. Low-temperature electrolysis system modelling: A review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews,

- 2017,78:280-300.
- [6] Yigit T, Selamet O F. Mathematical modeling and dynamic Simulink simulation of high-pressure PEM electrolyzer system[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016,41(32):13901-13914.
- [7] Lee B, Park K, Kim H M. Dynamic simulation of PEM water electrolysis and comparison with experiments[J]. *International journal of electrochemical science*, 2013,8(1):235-248.
- [8] Tugirumubano A, Kwac L K, Lee M S, et al. Analysis of the parametric effect on the performance of a polymer electrolyte membrane electrolyzer[J]. *International Journal of Mechanical Engineering and Robotics Research*, 2017,6(1):1-5
- [9] Ogumerem G S, Pistikopoulos E N. Parametric optimization and control for a smart Proton Exchange Membrane Water Electrolysis (PEMWE) system[J]. *Journal of Process Control*, 2020,91:37-49.
- [10] Chandesris M, Medeau V, Guillet N, et al. Membrane degradation in PEM water electrolyzer: Numerical modeling and experimental evidence of the influence of temperature and current density[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015,40(3):1353-1366.
- [11] Fouda-Onana F, Chandesris M, Medeau V, et al. Investigation on the degradation of MEAs for PEM water electrolyzers part I: Effects of testing conditions on MEA performances and membrane properties[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41(38):16627-16636.
- [12] Zhang K, Liang X, Wang L, et al. Status and perspectives of key materials for PEM electrolyzer[J]. *Nano Research Energy*, 2024-01-03.
- [13] Zhang Z, Xing X. Simulation and experiment of heat and mass transfer in a proton exchange membrane electrolysis cell[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020,45(39).
- [14] Upadhyay M, Lee S, Jung S, et al. Systematic assessment of the anode flow field hydrodynamics in a new circular PEM water electrolyser[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020.
- [15] Arriagada J, Olausson P, Selimovic A. Artificial neural network simulator for SOFC performance prediction[J]. *Journal of Power Sources*, 2002,112(1):54-60.
- [16] Wang B, Xie B, Xuan J, et al. AI-based optimization of PEM fuel cell catalyst layers for maximum power density via data-driven surrogate modeling[J]. *Energy conversion and management*, 2020,205:112460.
- [17] Wang Z M, Xu C, Wang X Y, et al. Numerical investigation of water and temperature distributions in a proton exchange membrane electrolysis cell[J]. *Science China Technological Sciences*, 2021,64(7):1555-1566.
- [18] Wang Y. Modeling of two-phase transport in the diffusion media of polymer electrolyte fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2008,185(1):261-271.
- [19] Majasan J O, Cho J I S, Dedigama I, et al. Two-phase flow behaviour and performance of polymer electrolyte membrane electrolyzers: Electrochemical and optical characterisation[J]. *international journal of hydrogen energy*, 2018,43(33):15659-15672.
- [20] Toghyani S, Afshari E, Baniasadi E, et al. Thermal and electrochemical performance assessment of a high temperature PEM electrolyzer[J]. *Energy*, 2018,152:237-246.
- [21] Hornik K. Approximation capabilities of multilayer feedforward networks[J]. *Neural networks*, 1991,4(2): 251-257.