**文章编号:**1000-8608(2020)03-0244-07

# 基于代理模型的直流道质子交换膜燃料电池优化设计

陈超<sup>1</sup>, 王硕<sup>1</sup>, 兰海兵<sup>1</sup>, 杨林林<sup>2</sup>, 吴 私<sup>2</sup>, 宋学官<sup>\*1</sup>

(1.大连理工大学 机械工程学院, 辽宁 大连 116024;

2. 中国科学院大连化学物理研究所 洁净能源国家实验室, 辽宁 大连 116023)

摘要:质子交换膜燃料电池是一种可以将储存在燃料中的化学能转化为电能的装置.应用 Kriging 代理模型结合遗传算法对流道宽、流道高和岸宽3个几何参数进行了优化设计,以质 子交换膜燃料电池的净功率作为优化的目标函数来评价质子交换膜燃料电池的性能.数值模 拟应用了商业软件 ANSYS FLUENT.优化后的质子交换膜燃料电池流道内具有更高的压力, 使更多的反应气体参加电化学反应,因此优化后的质子交换膜燃料电池的性能得到了提高.

## 0 引 言

质子交换膜燃料电池是一种可以直接将燃料 中储存的化学能转化为电能的装置.因为其具有 低排放、高能量密度等优点,一直被认为是一种理 想的可替代能源[1-2].质子交换膜燃料电池流道的 几何形状直接影响电池的性能[3]. 很多研究者对 质子交换膜燃料电池的流道高、流道宽和岸宽以 及流道的形状等做了大量的研究. Shimpalee 等[4]用三维数值模拟研究了蛇形流道长度对质子 交换膜燃料电池性能的影响,发现流道较短时蛇 形流道的质子交换膜燃料电池的电流密度分布更 加均匀. Santamaria 等<sup>[5]</sup>用数值模拟和实验验证 方法在考虑寄生功率的情况下研究了流道长度对 交指形流道的影响,证明了具有较短交指形流道 的质子交换膜燃料电池性能更好. Kumar 等<sup>[6]</sup>对 单条蛇形流道进行了三维数值模拟,找到了最优 的流道宽与岸宽,但是其研究过程中选取的流道 尺寸在数值上是离散的. Manso 等<sup>[7]</sup>用三维数值 模拟找到了最优的流道高宽比例,但其所用电池 性能评价标准中没有考虑到空气压缩机所带来的 寄生功率. Choi 等<sup>[8]</sup>用 Star-CD 对质子交换膜燃 料电池进行了三维数值模拟,研究了不同蛇形流 道高度和宽度对质子交换膜燃料电池性能的影

响.以上研究都是通过对实验数据的统计与分析 在其中找到燃料电池流道的最优几何尺寸或形 状.Zeng等<sup>[9]</sup>以质子交换膜燃料电池的净功率为 其性能的评价标准,用三维数值模拟和遗传算法 找到了梯形流道横截面的最优几何参数.Yang 等<sup>[10]</sup>用 COMSOL 对质子交换膜燃料电池进行了 二维数值模拟,通过遗传算法找到质子交换膜燃 料电池的最佳流道宽、流道高和岸宽.但是在上述 两者的工作中遗传算法使用的适应度函数值是通 过数值模拟直接得到的,计算时间成本太高.

本文应用一个三维两项的质子交换膜燃料电 池数学模型对单条直流道质子交换膜燃料电池进 行数值模拟,并将仿真结果与实验数据进行对比 验证.基于这个质子交换膜燃料电池的数学模型, 选取质子交换膜燃料电池净功率为优化的目标函 数,构建代理模型(一种可以根据少量数值模拟结 果得到设计变量与目标函数之间关系的模型),用 遗传算法找到全局最优的质子交换膜燃料电池几 何尺寸.

### 1 数值模型

质子交换膜燃料电池的模型是基于 CFD 技 术构建的,因此模型中的电化学反应方程可以通

**收稿日期**: 2019-08-13; 修回日期: 2020-03-26.

基金项目:国家自然科学基金辽宁联合基金资助项目(U1608256).

作者简介: 陈 超(1995-),男,硕士生,E-mail:1298463927@qq.com;宋学官\*(1982-),男,博士,教授,E-mail:sxg@dlut.edu.cn.

过数值计算的方法求解.因为本文主要目的不是 对质子交换膜燃料电池数学模型的改进,而是优 化质子交换膜燃料电池流道尺寸,所以本文中使 用的模型是基于商业软件 ANSYS FLUENT 燃 料电池模块手册<sup>[11]</sup>,且在表 1 中列出了材料的属 性和数值模拟的边界条件.

表1 材料属性和操作条件

Tab. 1 Material	l properties	and	operating	conditions
-----------------	--------------	-----	-----------	------------

模型参数	数值	参考文献
阳极扩散层黏性阻力/m <sup>-2</sup>	$1 \times 10^{12}$	[12]
阴极扩散层黏性阻力/m <sup>-2</sup>	3.86×10 <sup>12</sup>	[12]
阳极浓度系数	0.5	[12]
阴极浓度系数	1.0	[12]
阳极转移系数	1.0	[12]
阴极转移系数	1.0	[12]
阳极操作压力/Pa	$1.01 \times 10^{5}$	[13]
阴极操作压力/Pa	$1.01 \times 10^{5}$	[13]
操作温度/℃	70	[13]
阴极和阳极的入口温度/℃	70	[13]
反应气体的相对湿度/%	100	[13]
阳极化学计量比	3.0	[13]
阴极化学计量比	3.0	[13]
扩散层孔隙率	0.4	[14]
氧气的参考浓度/(mol • m <sup>-3</sup> )	3.39	[15]
氢气的参考浓度/(mol • m <sup>-3</sup> )	56.4	[15]
扩散层接触角/(°)	120	[15]
催化层接触角/(°)	95	[15]
阳极参考体交换电流密度/(A・m <sup>-3</sup> )	5.4×10 <sup>10</sup>	假设
阴极参考体交换电流密度/(A・m <sup>-3</sup> )	$1.9 \times 10^{5}$	假设

#### 1.1 控制方程

包括质量守恒、动量守恒和能量守恒的三维 流体流动和热传输物理现象以 Navier-Stokes 方 程的形式呈现和计算求解<sup>[12]</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho \phi \, \mathrm{d}V + \oint \rho \phi \, V \mathrm{d}A = \oint \Gamma_{\phi} \, \nabla \phi \, \mathrm{d}A + \int S_{\phi} \, \mathrm{d}V$$
(1)

方程(1)左边是瞬态项与对流传输项的和,右 边是扩散项与源项的和.其中 φ 是运输量(能量、 动量),t 是时间,A 是表面积,V 是体积,Γ 是扩散 系数,S 是源项.

计算求解式(2)和(3)两个电势方程,一个用 于固体内电子的转移,另一个则是用于质子交换 膜内质子的转移:

$$\nabla \cdot (\sigma_{\rm sol} \nabla \phi_{\rm sol}) + R_{\rm sol} = 0 \tag{2}$$

 $\nabla \cdot (\sigma_{\text{mem}} \nabla \phi_{\text{mem}}) + R_{\text{mem}} = 0 \qquad (3)$ 

式中:σ是电导率,φ是电势,R是体转移电流.

催化层内的体转移电流是通过 Butler-Volmer 方程计算求解的:

$$R_{\rm an} = \zeta_{\rm an} j_{\rm an}^{\rm ref} \left( \frac{c_{\rm H_2}}{c_{\rm H_2}^{\rm ref}} \right)^{\gamma_{\rm an}} \left[ \exp\left(\frac{\alpha_{\rm an}F}{RT} \eta_{\rm an}\right) - \exp\left(-\frac{\alpha_{\rm cat}F}{RT} \eta_{\rm an}\right) \right]$$

$$(4)$$

$$R_{\text{cat}} = \zeta_{\text{cat}} j_{\text{cat}}^{\text{ref}} \left( \frac{c_{\text{O}_2}}{c_{\text{O}_2}^{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{cat}}} \left[ -\exp\left(\frac{\alpha_{\text{an}}F}{RT}\eta_{\text{cat}}\right) + \exp\left(-\frac{\alpha_{\text{cat}}F}{RT}\eta_{\text{cat}}\right) \right]$$
(5)

式中: $j^{ref}$ 是单位活化面积上的参考交换电流密度 (A•m<sup>-2</sup>), $\zeta$ 是比活化面积(m<sup>-1</sup>),c, $c^{ref}$ 是局部 物质的量浓度和浓度参考值(kmol•m<sup>-3</sup>), $\gamma$ 是 浓度系数, $\alpha$ 是转移系数,F是法拉第常数 (9.65×10<sup>7</sup>C•kmol<sup>-1</sup>). $\eta$ 是阴极或阳极的活化 损失,可由式(6)和(7)计算:

$$\eta_{\rm an} = \phi_{\rm sol} - \phi_{\rm mem} \tag{6}$$

$$\eta_{\rm cat} = \phi_{\rm sol} - \phi_{\rm mem} - V_{\rm oc} \tag{7}$$

其中V<sub>oc</sub>是阴极侧的开路电压.

质量守恒方程中,氢气、氧气和水3种化学物 质的源项:

$$S_{H_2} = -\frac{M_{H_2}}{2F}R_{an} < 0$$
 (8)

$$S_{\rm O_2} = -\frac{M_{\rm O_2}}{4F} R_{\rm cat} < 0 \tag{9}$$

$$S_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{2F} R_{cat} > 0$$
 (10)

式中:S是各物质的源项(kg•m<sup>-3</sup>•s<sup>-1</sup>),M是 各物质的分子质量(kg•kmol<sup>-1</sup>).

阴极和阳极催化层中产生的电流是相同的, 都可由下面的电流守恒方程表示:

$$\int_{an} R_{an} dV = \int_{cat} R_{cat} dV \qquad (11)$$

不可逆过程中不是所有的化学能都可以转化 为电能,总热能的源项:

 $S_h = h_{\text{react}} - R_{\text{an,cat}} \eta_{\text{an,cat}} + I^2 R_{\text{ohm}} + h_1$  (12) 式中: $h_{\text{react}}$ 是由于电化学反应导致的净焓变 (J·s<sup>-1</sup>), $R_{\text{an,cat}} \eta_{\text{an,cat}}$ 是阳极或阴极催化层中体转 移电流与过电势的乘积,I是电流, $R_{\text{ohm}}$ 是导体的 欧姆电阻, $h_1$ 是水的相变导致的焓变.

质子交换膜燃料电池内部液态水的形成和运输由基于液态水的体积分数(s)或水的饱和度的 守恒方程控制.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho_{\rm l} s) + \nabla \cdot (\rho_{\rm l} v_{\rm l} s) = r_{\rm w}$$
(13)

式中: $\epsilon$  是孔隙率, $\rho_1$  是液体密度, $v_1$  是液体速度,  $r_w$  是凝结速率.

$$r_{\rm w} = C_r \max\left(\left[(1-s)\frac{p_{\rm wv}-p_{\rm sat}}{RT}M_{\rm H_2O}\right], \left[-s\rho_{\rm l}\right]\right)$$
(14)

式中:*C*, 是凝结速率常数, *p*<sub>wv</sub>是水蒸气的压力, *p*<sub>sat</sub>是水的饱和蒸气压. 在多孔介质中,毛细管扩 散项用来替代方程(13)中的对流项:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon \rho_{\rm l} s) + \nabla \cdot \left(\rho_{\rm l} \frac{K s^3}{\mu_{\rm l}} \frac{\mathrm{d} p_{\rm c}}{\mathrm{d} s} \nabla s\right) = r_{\rm w} \quad (15)$$

式中:K 是绝对渗透率(m<sup>-2</sup>), $\mu_l$  是液态水的动力 黏度(Pa•s), $p_c$  是毛细压力(Pa),由 Leverett 方 程计算:

$$p_{c} = \begin{cases} \frac{\sigma_{c} \cos \theta_{c}}{(K/\epsilon)^{0.5}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^{2} + 1.263(1-s)^{3}); & \theta_{c} < 90^{\circ} \\ \frac{\sigma_{c} \cos \theta_{c}}{(K/\epsilon)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^{2} + 2.12s^{2} + 2.12s^{3}); & \theta_{c} > 90^{\circ} \end{cases}$$
(16)

式中: $\sigma_t$ 是表面张力(N·m<sup>-1</sup>), $\theta_c$ 是接触角度.

#### 1.2 网格无关性验证

根据燃料电池各个组成部分的作用,试用了 355 680、592 800 和 889 200 这 3 个依次增长的网 格数量对单直流道质子交换膜燃料电池几何模型 进行划分,通过三维数值模拟计算得到在 0.75 V 电压时不同网格数量下对应的质子交换膜燃料电 池的电流密度.由表 2 可知 355 680 和 889 200 网 格数量对应的电流密度的值相差小于 3 × 10<sup>-4</sup> A•cm<sup>-2</sup>.为了节省数值模拟的计算时间,选用 355 680 的网格数量划分几何模型.

表 2 网格数量与电流密度

Tab. 2 Grid numbers and current density

	•
网格数量	电流密度/(A・cm <sup>-2</sup> )
355 680	0.345 69
592 800	0.345 76
889 200	0.345 92

#### 1.3 模型验证

图 1 中对比了在 70 ℃操作条件下实验数据 和数值模拟的结果,实验数据源自文献[13],数值 模拟应用的几何参数(本文中应用的基本模型)如 表 3 所示.由图 1 可知实验数据与数值模拟结果 的匹配程度很高,证明该数值模拟结果准确可靠.



图1 数值模拟和实验的极化曲线对比

Fig. 1 Polarization curve comparison of numerical simulation and experiment

表	3	几何	参数
Tab. 3	Geo	metric	parameters

流道	流道	流道	岸宽/	膜厚	扩散层	催化层
长/m	高/m	宽/m	m	度/m	厚度/m	厚度/m
0.1	$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-3}$	$1 \times 10^{-4}$	$2 \times 10^{-4}$	$1 \times 10^{-5}$

## 2 流道优化

如图 2(a) 所示,质子交换膜燃料电池由双极 板、流道、扩散层(GDL)、催化层和质子交换膜组 成.为了优化质子交换膜燃料电池的流道几何尺 寸,选取了流道宽、流道高和岸宽作为优化的设计 变量,分别记为 A、B 和 C(如图 2(b)所示).



图 2 质子交换膜燃料电池结构和截面示意图

Fig. 2 The diagram of the proton exchange membrane fuel cell's structure and cross-sectional view

## 2.1 优化方法

一般在研究过程中人们选用质子交换膜燃料 电池的极化曲线来评价一个质子交换膜燃料电池 的性能.在优化质子交换膜燃料电池时,一般会选 择特定电压和操作条件下质子交换膜燃料电池的 电流密度作为优化问题的目标函数,当电流密度 达到最大值时,便认为其性能最佳.然而质子交换 膜燃料电池在工作中除了产生电能外,还会有一 部分能量由于空气压缩机的存在而被消耗.因此, 本文选用的目标函数为特定电压和操作条件下质 子交换膜燃料电池的净功率,即质子交换膜燃料 电池输出的功率减去空气压缩机的消耗功率,优 化问题如式(17)所示.

find 
$$\mathbf{x}(A \ B \ C)$$
  
max  $E_{net}(\text{at fixed } U, T)$   
s. t.  $0.5 \leq A \leq 1.5$   
 $0.5 \leq B \leq 1.5$   
 $A+C=2$  (17)

式中:x 是设计变量的向量表达形式,U、T 分别是 操作电压(根据文献[10]取为 0.5 V)和操作温 度,E<sub>net</sub>是质子交换膜燃料电池的净功率.

$$E_{\rm net} = E_{\rm output} - E_{\rm pump} \tag{18}$$

$$E_{\text{output}} = UI \tag{19}$$

$$E_{\text{pump}} = \frac{\dot{m}_{\text{air}} C_p T}{\eta_{\text{pump}}} \left( \left( \frac{p_{\text{in}}}{p_{\text{amb}}} \right)^{\frac{k-1}{k}} - 1 \right)$$
(20)

式中: $E_{output}$ 是输出功率, $E_{pump}$ 是质子交换膜燃料 电池所使用的空气压缩机的功率, $C_p$ 是空气的比 热容,T是空气的热力学温度, $\eta_{pump}$ 是空气压缩机 的效率, $p_{in}$ 是质子交换膜燃料电池阴极侧的进气 压力, $p_{amb}$ 是环境压力,k是值为 0.286 的常 数<sup>[16]</sup>.

#### 2.2 优化设计过程

质子交换膜燃料电池流道几何尺寸的优化设 计过程如下:

(1)选取质子交换膜燃料电池流道优化的设 计变量,确定变量的取值范围和优化问题的目标 函数;

(2)用拉丁超立方实验设计(一种分层抽样方法,可以使样本点在空间的分布更加均匀)选取样本点,对不同流道尺寸的质子交换膜燃料电池进行数值模拟;

(3)用数值模拟的结果构建 Kriging 代理模型并确定其精度;

(4)用遗传算法找到质子交换膜燃料电池流 道几何尺寸的最优值;

(5)用优化得到的流道尺寸进行建模和数值 模拟,检验其性能是否得到提升.

#### 2.3 Kriging 代理模型

Kriging 代理模型是一种插值模型,可以通过 某一点周围其他点的信息线性组合对该点的响应 值进行预测.Kriging 代理模型由线性和随机两部 分组成<sup>[17]</sup>:

$$y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + z(\mathbf{x}) \tag{21}$$

式中:y(x)是待预测点的响应值,f(x)是多项式, z(x)是服从正态分布的误差,具有以下性质:

$$E[z(\mathbf{x})] = 0 \tag{22}$$

$$Var[z(\mathbf{x})] = \sigma^2 \tag{23}$$

$$Cov[z(\boldsymbol{x}_i), z(\boldsymbol{x}_j)] = \sigma^2 R(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \quad (24)$$

$$R(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \exp\left[-\sum_{l=1}^n \theta_l \left| x_i^l - x_j^l \right|^2\right] (25)$$

式中: $R(\theta, x_i, x_j)$ 为任意两个训练点的相关函数, 本文中高斯函数为训练点之间的相关函数. $\theta_i$ 为待估计的相关系数,表示变量之间的相关性.  $|x_i^i - x_j^i|$ 表示的是样本点 $x_i, x_j$ 中第l个分量之间的距离.相关函数选定之后可以求出待预测点  $x_{new}$ 处的函数响应值 $\hat{\chi}(x_{new})$ :

 $\hat{y}(\mathbf{x}_{new}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{new})^{T} \hat{\mathbf{\beta}} + \mathbf{r}^{T} \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F} \hat{\mathbf{\beta}}) (26)$ 式中: $\mathbf{r} = (\mathbf{R}(\mathbf{\theta}, \mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}_{1})) \mathbf{R}(\mathbf{\theta}, \mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}_{2}) \cdots$  $\mathbf{R}(\mathbf{\theta}, \mathbf{x}_{new}, \mathbf{x}_{n}))^{T},$ 表示一个预测点  $\mathbf{x}_{new} = n$ 个样本 点的空间相关性; $\mathbf{y}$ 是一组响应值; $\mathbf{F}$ 是一个包含 多项式的矩阵.

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{F})^{-1} \boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{R}^{-1} \boldsymbol{y}$$
(27)

通过求响应值的最大似然估计可以求得:

$$\widehat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{F} \widehat{\boldsymbol{\beta}})^{\mathrm{T}} \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{F} \widehat{\boldsymbol{\beta}}) \qquad (28)$$

 $\theta$  通过如下的优化问题可以求出:

$$\max -\frac{n}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2}\ln(|\mathbf{R}|)$$
(29)

s.t.  **heta > 0** 

本文中应用的 Kriging 代理模型是在商业软件 Matlab 中建立并运行的.

#### 2.4 Kriging 代理模型结果

通过拉丁超立方实验设计选取了 38 组训练 点和 10 组测试点,对实验设计得到不同流道尺寸 的质子交换膜燃料电池进行数值模拟,应用数值 模拟的结果以质子交换膜燃料电池的净功率为目 标函数建立 Kriging 代理模型.图 3 为 Kriging 代 理模型的质子交换膜燃料电池的净功率曲面图, 模型精度很高,决定系数 R<sup>2</sup> 为 0.988 9. 从图中 可以知道,关于流道宽和流道高的 Kriging 代理 模型曲面过渡平滑,随着流道宽度的增加电池净

第 60 卷

功率逐渐增大,而流道高对电池净功率的影响较小.



图 3 Kriging 代理模型结果 Fig. 3 The result of the Kriging surrogate model

## 3 流道优化结果和讨论

#### 3.1 优化结果

优化后流道的几何模型如图 4 所示,流道的 宽和高分别为 1.5 和 0.69 mm,岸宽为 0.5 mm. 优化后质子交换膜燃料电池的输出功率和空气压 缩机的消耗功率分别为 1.174 和 0.003 84 W,而 原质子交换膜燃料电池的输出功率和空气压缩机 的消耗功率分别为 0.956 和 0.003 26 W.优化后 质子交换膜燃料电池的空气压缩机消耗功率增长 了 17.791%,而输出功率则增长了 22.803%,因 此可以知道优化后的质子交换膜燃料电池的净功 率得到了提高.



图 4 最优的流道几何模型

Fig. 4 The geometry model of the optimal flow channel

#### 3.2 讨论

图 5 显示了优化前后质子交换膜燃料电池阴 极流道内 X-Z 平面上的压力分布(几何模型在 Y 方向与 X 方向上的长度比是 0.4),由图可知优化 后质子交换膜燃料电池进出口之间的压降有明显 提升,从而造成了更多的能量损耗.

质子交换膜燃料电池的性能受阴极侧扩散层 中氧气浓度的影响,图 6显示了优化前后质子交 换膜燃料电池阴极扩散层内 X-Y 平面上氧气浓 度分布情况(几何模型在Y方向与X 方向上的长 度比是 0.4),由图可知优化后质子交换膜燃料电



- 图 5 基本模型和最优模型在阴极流道内 X-Z平面上的压力分布
- Fig. 5 Pressure distributions on the X-Z plane in cathode channel for basic model and optimal model



- 图 6 基本模型和最优模型在阴极侧 GDL 内 X-Y 平面上的氧气浓度分布
- Fig. 6 Oxygen concentration distributions on the X-Y plane in cathode GDL for basic model and optimal model

池阴极侧扩散层的氧气浓度更高,这可能是因为 优化后的质子交换膜燃料电池的阴极流道内的压 降更大,从而使阴极流道内的氧气更充分地向扩 散层扩散.优化前后的质子交换膜燃料电池阴极 侧扩散层中氧气浓度的平均值分别为 1.174 和 2.281 mol/m<sup>3</sup>,这说明优化后的质子交换膜燃料 电池中有更多的氧气参加反应,质子交换膜燃料 电池内部的反应更加充分,因此电池输出功率得 到提高.

图 7 显示优化前后的质子交换膜燃料电池质 子交换膜内 X-Y 平面上交换电流密度分布(几何 模型在 Y 方向与 X 方向上的长度比是 0.4),由 图可知优化后的质子交换膜燃料电池的平均电流 密度高于原质子交换膜燃料电池的平均电流密 度.



- 图 7 基本模型和最优模型在阴极流道内 X-Y 平面上的电流密度分布
- Fig. 7 Current density distributions on the X-Y plane in cathode channel for basic model and optimal model

图 8 是优化前后质子交换膜燃料电池的极化 曲线对比图. 从图中可看到两条极化曲线在电压 0.7 V 以前基本重合,而随着电压的不断降低,优 化后质子交换膜燃料电池的极化曲线则一直在原 质子交换膜燃料电池极化曲线的上方,即在较低 的操作电压时,优化后的质子交换膜燃料电池具 有更好的性能.



图 8 基本模型和最优模型的极化曲线对比 Fig. 8 Polarization curve comparison of basic model and optimal model

## 4 结 论

(1)通过选择合适的质子交换膜燃料电池的 模型参数,使质子交换膜燃料电池模型数值模拟 结果与实验数据匹配. (2)根据流道宽、流道高和岸宽 3 个设计变量 建立质子交换膜燃料电池净功率的 Kriging 代理 模型对未知几何尺寸的质子交换膜燃料电池净功 率做出预测,本文中应用的模型精度很高, R<sup>2</sup> 为 0.988 9.

(3) 通过优化算法以质子交换膜燃料电池的 净功率为目标函数找到最优的流道宽、流道高和 岸宽,分别为 1.5、0.69 和 0.5 mm.最优的流道 为向催化层扩散的反应气体提供了更高的压力, 最优的质子交换膜燃料电池与原质子交换膜燃料 电池相比空气压缩机的消耗功率增长了 17.791%,输出功率增长了 22.803%.

## 参考文献:

- JIAO Kui, LI Xianguo. Water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2011, 37(3): 221-291.
- [2] ZHANG Guobin, FAN Linhao, SUN Jing, et al. A 3D model of PEMFC considering detailed multiphase flow and anisotropic transport properties [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 115: 714-724.
- [3] WANG Yun, CHEN K S, MISHLER J, et al. A review of polymer electrolyte membrane fuel cells: Technology, applications, and needs on fundamental research [J]. Applied Energy, 2011, 88(4): 981-1007.
- [4] SHIMPALEE S, GREENWAY S, ZEE J V. The impact of channel path length on PEMFC flow-field design [J]. Journal of Power Sources, 2006, 160(1): 398-406.
- [5] SANTAMARIA A D, COOPER N J, BECTON M K, et al. Effect of channel length on interdigitated flow-field PEMFC performance: A computational and experimental study [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, 38(36): 16253-16263.
- [6] KUMAR A, REDDY R G. Effect of channel dimensions and shape in the flow-field distributor on the performance of polymer electrolyte membrane fuel cells [J]. Journal of Power Sources, 2003, 113(1): 11-18.
- [7] MANSO A P, MARZO F F, MUJIKA M G, et al. Numerical analysis of the influence of the channel cross-section aspect ratio on the performance of a PEM fuel cell with serpentine flow field design [J].
   International Journal of Hydrogen Energy, 2011,

**36**(11): 6795-6808.

- [8] CHOI Kapseung, KIM Hyungman, MOON Sungmo. Numerical studies on the geometrical characterization of serpentine flow-field for efficient PEMFC [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2011, 36(2): 1613-1627.
- [9] ZENG Xiangbing, GE Ya, SHEN Jun, et al. The optimization of channels for a proton exchange membrane fuel cell applying genetic algorithm [J].
   International Journal of Heat and Mass Transfer, 2017, 105: 81-89.
- [10] YANG W J, WANG H Y, KIM Y B. Channel geometry optimization using a 2D fuel cell model and its verification for a polymer electrolyte membrane fuel cell [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2014, 39(17): 9430-9439.
- [11] ANSYS Inc. ANSYS Fluent Fuel Cell Modules Manual [R]. Canonsburg: ANSYS, 2013.
- [12] IRANZO A, MUÑOZ M, ROSA F, et al. Numerical model for the performance prediction of a PEM fuel cell. Model results and experimental validation [J]. International Journal of Hydrogen

Energy, 2010, 35(20): 11533-11550.

- [13] WANG Lin. A parametric study of PEM fuel cell performances [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2003, 28(11): 1263-1272.
- [14] SU A, FERNG Y M, SHIH J C. CFD investigating the effects of different operating conditions on the performance and the characteristics of a high-temperature PEMFC [J]. Energy, 2010, 35(1): 16-27.
- [15] FAN Linhao, ZHANG Guobin, JIAO Kui. Characteristics of PEMFC operating at high current density with low external humidification [J].
   Energy Conversion and Management, 2017, 150: 763-774.
- [16] LARMINIE J, DICKS A. Fuel Cell Systems Explained [M]. 2nd ed. Hoboken: John Wiley & Sons, Inc., 2003.
- [17] LEI Xing, SONG Xueguan, SCOTT K, et al. Multi-variable optimisation of PEMFC cathodes based on surrogate modelling [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, 38(33): 14295-14313.

## Optimization of straight flow channel for proton exchange membrane fuel cell based on surrogate model

CHEN Chao<sup>1</sup>, WANG Shuo<sup>1</sup>, LAN Haibing<sup>1</sup>, YANG Linlin<sup>2</sup>, WU Si<sup>2</sup>, SONG Xueguan<sup>\*1</sup>

- (1. School of Mechanical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China;
  - 2. National Laboratory for Clean Energy, Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Science, Dalian 116023, China )

**Abstract:** A proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) is a device that can convert chemical energy stored in fuels into electricity. Three geometry parameters which are channel width, channel height and rib width are optimized applying Kriging surrogate model and genetic algorithm. The net power of the PEMFC is selected as the objective function to evaluate the fuel cell's performance. The simulation is implemented using the commercial software ANSYS FLUENT. The pressure in the flow channel of the optimized PEMFC is higher, enabling more reactant to participate in the electrochemical reaction, so the performance of the optimized PEMFC is improved.

Key words: proton exchange membrane fuel cell (PEMFC); numerical simulation; Kriging surrogate model; genetic algorithm