

采用偏心端头多几何参数耦合的商用质子交换膜 燃料电池电堆阴极气体分配优化

尹仁杰^{1,2}, 白帆^{1,2}, 陶文铨^{1,2}

(1. 西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室, 710049, 西安;

2. 西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 针对质子交换膜燃料电池(PEMFC)电堆阴极侧反应气体分布不均匀的问题,提出了一种基于偏心端头多几何参数协同优化的气体分配均匀性提升方法以提高电堆性能。通过计算流体力学仿真构建有限数量样本集,结合本征正交分解(POD)降维技术将样本集重构为模态空间与对应坐标;采用多元多项式拟合法,精确表征模态坐标与工况参数之间的非线性映射关系,构建了基于模态空间重构的偏心端头对应阴极气体分配参数化预测模型。仿真及实验结果表明:所提预测模型精度较高(决定系数为 0.911),偏心端头多个几何参数对分配特性存的影响为非线性且参数间存在显著的交互作用;预测能筛选出最优参数组合;阴极气体分配不均匀度从初始模型的 7.69% 经过优化后降至 4.04%,降幅达 47.5%,实现了在不扩大歧管截面的前提下对阴极气体分配均匀性的大幅度提升,并有望使电堆的体积功率密度有所提升。所提出的 POD 降维与多项式拟合方法可高效解析电堆端头多几何参数协同作用机制,能改善阴极气体分布均匀性,为 PEMFC 电堆端头设计提供了可靠优化策略。

关键词: 质子交换膜燃料电池;偏心端头;本征正交分解;多项式拟合;计算流体力学

中图分类号: TK91 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202512001 **文章编号:** 0253-987X(2025)12-0001-10

Optimization of Cathode Gas Distribution for Commercial Proton Exchange Membrane Fuel Cell Stacks Based on Multiple Geometric Parameters of Eccentric Headers

YIN Renjie^{1,2}, BAI Fan^{1,2}, TAO Wenquan^{1,2}

(1. Key Laboratory of Thermo-Fluid Science and Engineering of Ministry of Education, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: To address the problem of uneven gas distribution at the cathode of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) stacks for better stack performance, a distribution uniformity enhancement method is proposed based on the co-optimization of multiple geometric parameters of eccentric headers. For the purpose of this study, a limited sample dataset is constructed through computational fluid dynamics simulations, and then reconstructed into modal space with corresponding coordinates by proper orthogonal decomposition (POD); polynomial curve fitting is employed to

收稿日期: 2025-03-24。 作者简介: 尹仁杰(1997—),男,博士生;陶文铨(通信作者),男,教授,博士生导师,中国科学院院士。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(523061123);能源陕西实验室能源基础研究中心资助项目(ESLB202408)。

网络出版时间: 2025-07-14

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.t.20250712.1159.002>

accurately characterize the nonlinear mapping relationship between the modal coordinates and parameters; based on the reconstructed modal space, a parameter-based prediction model is built for cathode gas distribution in an eccentric header. The results show that the prediction model is proved to be of high precision (coefficient of determination up to 0.911). The geometric parameters of the eccentric header have significant interaction, with a nonlinear effect on the cathode gas distribution. By using the predication model, the optimal parameter combination can be identified, as evidenced by the reduction of the gas distribution non-uniformity indicator at the cathode from 7.69% in the initial model to 4.04% after optimization, achieving a 47.5% improvement. This significant improvement in the uniformity of cathode gas distribution is realized without expanding the cross-section of the manifold, and may enhance the volumetric power density of the stack. Therefore, the proposed POD-based dimensionality reduction and polynomial fitting method can efficiently deciphers the mechanism of synergistic effects of multiple geometric parameters in stack headers and improve cathode gas distribution uniformity, providing a reliable optimization strategy for the design of PEMFC stack headers.

Keywords: proton exchange membrane fuel cell; eccentric header; proper orthogonal decomposition; polynomial curve fitting; computational fluid dynamics

绿色能源因其无污染的特点已成为实现碳中和目标的重要支柱^[1-3]。近年来,随着绿色能源的迅速发展,质子交换膜燃料电池(PEMFC)作为绿色能源的利用设备,因其高功率低污染的特点而被广泛采用。为满足工业用电需求,需将数百个 PEMFC 单电池组装成一个 PEMFC 电堆供服务对象使用。Park 和 Li^[4]指出,在实际运行中,PEMFC 电堆中的单电池性能各不相同,这是由于每个单电池从电堆入口分配得到的反应气体流量不同。缺少充足反应物(空气或氢气)的单电池将不能提供充足的电力,如果反应物短缺现象持续,不仅会降低总供电量,还可能导致单电池工作寿命缩短。为改善这一现象,需对电堆反应气体分配均匀性进行优化。

早期研究中,覃有等为^[5]率先发现阴极歧管布置形式对气体分配均匀性具有显著影响,并指出采用两头双口进气的设计可有效改善分配性能。这一发现为后续歧管优化研究奠定了基础。Hensel 等^[6]通过实验进一步验证了分配均匀性的重要性,他们在 4 节电池电堆中通过手动控制单电池流量,证明减少电池间分布不均匀性可显著提升电堆功率效率。随着数值模拟技术的发展,研究者开始通过仿真手段探究歧管几何参数的影响。Chen 等^[7]将电堆流动简化为沿歧管及电池流动方向的二维模型,通过计算流体力学(CFD)仿真首次得出歧管宽度增加可提升分配均匀性的结论。此后,Chen 等^[8]针对双电堆配置的仿真表明,双堆结构在加载过程中能促进入口流动均匀化。Lebæk 等^[9]通过 70 节

电池电堆的实测数据,揭示了阴极歧管中压力与流动分布的复杂关系。与此同时,解析模型逐渐兴起。Wang 等^[10]提出基于歧管几何参数的二维解析解模型,根据电堆歧管参数提出了多个无量纲参数为快速评估电堆分配均匀性提供了新工具。

后续电堆分配均匀性研究进一步细化。Qin 等^[11]采用流动网络模型(FNM),结合横向流动与局部损失效应,优化了 12 节电池堆的阴极歧管及冷却水通道设计以获得更加均匀的分配特性。Amirfazli 等^[12]通过 FNM 对比了 65 节电池 U 型与 Z 型歧管在固定和渐变截面积下的表现,发现渐变截面积歧管在特定工况下既能保持与最大固定截面积歧管类似的分配特性,又可增加有效反应面积。Lim 等^[13]通过三维模型研究了电池数量对短电堆性能的影响,而 Li 等^[14]聚焦 5 节电堆阴极,首次指出 U 型与 Z 型歧管中出口端流动的不稳定性问题。

多片大尺度电堆与端头几何的研究成为近年重点。Huang 等^[15]对 200 节电池堆的仿真显示,Z 型分配均匀性劣于 U 型,且高电流密度由于反应气体流量增大会加剧分配不均匀性。Huang 等^[16]进一步对比 CFD 与 FNM 模型,发现两者在预测 200 节无端头电堆阴极流动趋势时具有一致性,并且发现该电堆阴极分配不均匀性极大。解析电堆歧管与端头几何的协同优化近来也成为了对电堆分配均匀性的研究新方向。Su 等^[17]首次关注电堆端头产生的涡流的负面影响,指出合理设计涡旋位置可改善分配。Chen 等^[18]通过 Taguchi 法、神经网络和多重

自适应回归样条法,量化分析了连接管与端头区域长度之比与端头区域宽度及连接管直径等参数对 30 节电堆阴极分配的影响强度。赵岩等^[19]通过压力速度耦合算法评估了 U 型与 Z 型歧管截面面积与电池节数的关系。Pan 等^[20]基于二维解析模型提出层流电堆的快速均匀性判据。Huang 等^[21]针对 160 节 U 型电堆,系统分析了端头是否有渐变段、渐变段高度、进口与歧管水利直径比(RITMHD)等参数的影响,结果表明分配均匀性受端头几何构型影响极大。装有渐变段端头的电堆相较无渐变段靠近进出口的单电池的质量流量升高。分配极差随着 RITMHD 的增加而显著降低,然后又升高。Bai 等^[22]通过本征正交分解(POD)降阶模型研究了 140 节电堆冷却水腔的偏心端头效应,发现随着偏心矢量增大分配极差逐渐减小,偏心辐角相较于偏心矢量影响较小。该研究通过 POD 降维及预测,成功地获得了分别在不同偏心矢量或偏心辐角的冷却水腔分配极差曲线预测拟合式。Yin 等^[23]针对一款 140 节电堆阳极氢气腔开展研究,结果发现对称端头优于非对称设计得到的分配均匀性,与 Bai 结论相悖,暗示端头其他几何参数可能干扰其带来的偏心效应。Huang 等^[24]提出歧管形状与入口涡流的协同作用,发现特定长度比可实现最优均匀性。

从以上研究可以发现,当前电堆分配优化主要集中于电堆歧管及端头几何设计。若受制于体积要求无法扩大歧管截面,则可通过端头几何形状的优化设计进一步改善。现有方法中二维解析模型无法处理湍流问题,而流动网络模型无法解析端头中复杂流场的影响。因此,上述两种方法均难以对端头内产生的漩涡及其对歧管内湍流流动的影响进行精确求解。相比之下,三维 CFD 仿真能够完整表征入口效应显著的电堆内部流场特性,但其计算需要消耗大量资源。目前,针对质子交换膜燃料电池堆端头的研究多局限于单一参数的独立分析,缺乏对端头多个几何参数协同作用的综合考量。同时,大部分研究也仍然依赖 CFD 仿真逐个分析。

针对端头优化研究中存在的上述问题,本文应用 CFD 仿真获取了一系列在给定条件下的空气腔分配曲线(ADC)样本。采用 POD 降维及数据拟合,建立了一种基于少量样本的快速预测模型,可在极短时间内根据偏心端头的多个几何参数预测对应空气腔分配曲线及其极差。据此,分析了各偏心端头几何参数对 ADC 的影响及其相互影响,从而为电堆端头结构设计及电堆分配不均匀性优化提供了

可靠的理论依据及研究模型。

1 数值模型及实验设置

1.1 研究对象

研究对象为一款装有对称端头的 140 节 U 型商用堆的阴极空气腔流场,如图 1 所示。目前,商用堆更多采用 U 型结构,这是因为 U 型电堆的空气腔分配特性在相同工况下优于 Z 型电堆,且 U 型电堆进出口同向更方便系统装配。电堆中每节单电池的活化反应面积都为 320 cm^2 。

CFD 仿真计算域包括进出口端头、歧管及简化为多孔介质的流道区域(简化原因在 1.2 节中具体阐述)。在本研究中,各个案例的分配歧管与简化为多孔介质的流场部分保持不变,只有电堆端头形状变化。由于电堆三腔间彼此独立不联通,所以该模型不包括氢气腔与冷却液腔。电堆具体尺寸参数出于商业机密的原因省略,但不影响本文的研究与分析。

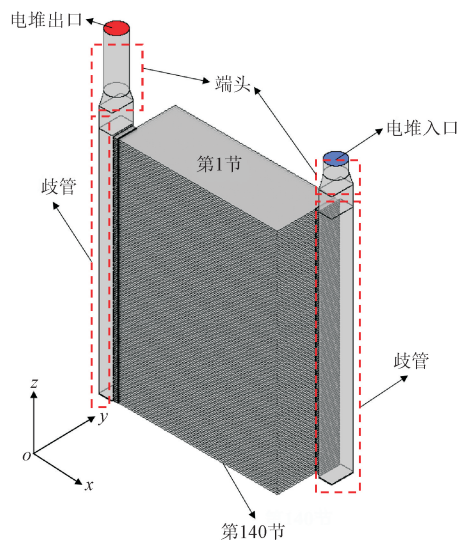


图 1 140 节商用堆阴极空气腔流场物理模型

Fig. 1 140-cell commercial PEMFC stack cathode

针对不对称偏心端头,选择图 2 中的 3 个几何参数作为不对称渐变端头设计的可变研究对象,具体如下。

(1) 横向偏心度 E_c 。电堆端头偏心通常有两个方向,即图 2 中所示的相对于歧管中轴线的横向 e_c 与纵向 e_t (e_c 和 e_t 分别代表单电池中主流方向的平行方向和垂直方向)。纵向 e_t 方向尺寸有限,其变动容易影响氢气腔和冷却水腔的端头尺寸,并且 Bai 等^[22]的研究中发现偏心辐角对分配趋势的影响较小。因此,本文仅选取横向偏心矢量 r_c 与偏心端头

下表面横向几何尺寸的一半(即图2中的 A)之比的范数称为横向偏心度 E_c 。作为研究对象。

(2) 偏心端头截面积比 R_s 。Huang等^[21]发现,偏心端头进口水力直径与歧管水力直径比值(RITMHD)对分配特性影响显著,本文受此启发,将进口截面积 S_{in} 与歧管截面积 S_{mani} 之比定义为偏心端头截面积比 R_s 。

(3) 偏心端头高度比 R_H 。Huang等^[21]发现,对于对称渐变端头,渐变段高度对分配特性影响较小。目前,偏心端头渐变段高度比对空气分配特性影响的强度及其他参数对其的影响均尚无定论。本文将渐变段高度 h_{inter} 与端头整体高度 h_{total} 之比定义为偏心端头高度比 R_H 。

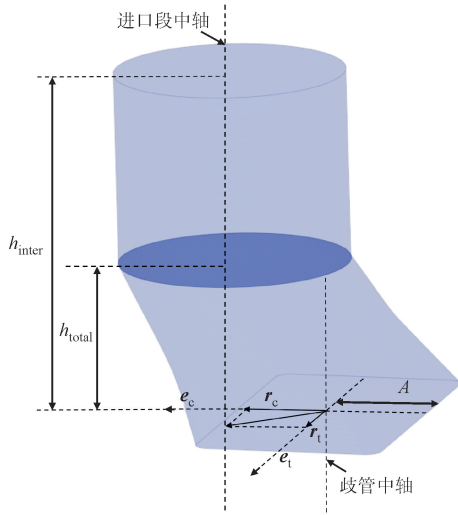


图2 偏心端头几何参数

Fig. 2 Eccentric header geometric parameter

1.2 CFD 仿真基本假设、守恒方程及网格生成

CFD 仿真模型中包含以下假设。

(1) 忽略液态水的影响。实验仅在部分工况下发现阴极出口有不连续的水珠,说明空气腔中的液态水含量较低,因此其对电堆压降影响很小,可以被忽略。

(2) 将整个计算域内的温度视为常数,混合气体的热物性也因此不变。参照此前相关研究^[15-24],不额外考虑单电池内部的热传导、膜水化及与其他腔体间热耦合与机械应力等过分细致的影响因素。

(3) 将混合气体视作可压缩理想气体处理。空气仅由氧气和氮气组成。

(4) 假设在简化多孔介质中,氧气和蒸汽沿通道方向均匀消耗和产生。

(5) 假设过程处于稳态。

控制方程包括质量守恒方程、动量守恒方程和

组分守恒方程,各方程表示如下

$$\nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_g) = S_m \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g}{\epsilon} \right) = -\nabla p_g + \mu_g \nabla \cdot \left(\nabla \left(\frac{\mathbf{u}_g}{\epsilon} \right) + \left(\frac{\mathbf{u}_g}{\epsilon} \right)^T \right) - \frac{2}{3} \mu_g \nabla \left(\nabla \cdot \left(\frac{\mathbf{u}_g}{\epsilon} \right) \right) + S_u \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\rho_g \mathbf{u}_g w_i) = \nabla \cdot (\rho_g D_i^{\text{eff}} \nabla Y_i) + S_i \quad (3)$$

式中: ρ_g 及 $\mathbf{u}_g$ 为混合气体密度及速度矢量; S_m 、 S_u 及 S_i 分别为质量源项、动量源项及各组分源项; ϵ 为孔隙率; μ_g 为混合气体动力黏度; w_i 为各组分质量分数; D_i^{eff} 为各组分有效扩散系数。对于140节电堆阴极,湍流模型采用标准 $k-\epsilon$ 方程,使用于除简化多孔介质流道区以外的其他计算域。

质量源项计算式为

$$S_m = S_{O_2} + S_{\text{vap}} \quad (4)$$

式中: S_{O_2} 、 S_{vap} 为氧气源项和水蒸气源项,在各自的组分守恒方程中又都是各自的组分源项。根据经典 PEMFC 性能仿真模型,氧气源项可表示为

$$S_{O_2} = -\frac{j_c}{4F} M_{O_2} \frac{A_{ra}}{V_c} \quad (5)$$

式中: j_c 为电流密度; F 为法拉第常数; M_{O_2} 为氧气摩尔质量; A_{ra} 为流道有效反应面积; V_c 为简化后的多孔流道体积。电堆入口处的氧气质量流量为

$$q_{m,O_2,in} = 10^3 N \frac{j_c A_{ra} \lambda_c}{4F} M_{O_2} \quad (6)$$

式中: N 为电堆节数; λ_c 为阴极计量比。根据空气中氧气的体积分数 y_{O_2} 和空气的摩尔质量 M_{air} ,得到入口处空气的质量流量为

$$q_{m,\text{air},in} = \frac{q_{m,O_2,in}}{M_{O_2}} y_{O_2} M_{\text{air}} \quad (7)$$

入口水蒸气分压由入口温度 T_{in} 下对应的饱和压力 $P_{\text{sat}}(T_{in})$ 和入口相对湿度 φ_{in} 导出。进口水蒸气质量流量为

$$q_{m,\text{vap},in} = \frac{n_{\text{air},in} \varphi_{in} P_{\text{sat}}(T_{in})}{P_{in} - \varphi_{in} P_{\text{sat}}(T_{in})} M_{H_2O} \quad (8)$$

式中: P_{in} 为电堆入口压力; n 为物质的量。据此,进口总质量流量为

$$q_{m,in} = q_{m,\text{air},in} + q_{m,\text{vap},in} \quad (9)$$

整堆中消耗的氧气质量为

$$q_{m,O_2,consumed} = 10^6 N S_{O_2} V_c \quad (10)$$

从而得到出口的氧气质量流量为

$$q_{m,O_2,out} = q_{m,O_2,in} - q_{m,O_2,consumed} \quad (11)$$

由于空气中除氧气都不参与反应,可以推算出电堆出口空气质量流量推导如下

$$q_{m,\text{air},out} = q_{m,O_2,out} + q_{m,\text{air},in} - q_{m,O_2,in} \quad (12)$$

根据假设其余气体仅为氮气,则出口空气的物质的量可按式(13)进行计算

$$n_{\text{air},\text{out}} = \frac{q_{\text{m},\text{O}_2,\text{out}}}{M_{\text{O}_2}} + \frac{q_{\text{m},\text{air},\text{in}} - q_{\text{m},\text{O}_2,\text{in}}}{M_{\text{N}_2}} \quad (13)$$

出口蒸汽质量流量的推导方法与进口蒸汽质量流量相同,如下所示

$$q_{\text{m},\text{vap},\text{out}} = \frac{n_{\text{air},\text{out}} \varphi_{\text{out}} P_{\text{sat}}(T_{\text{out}})}{P_{\text{out}} - \varphi_{\text{out}} P_{\text{sat}}(T_{\text{out}})} M_{\text{vap}} \quad (14)$$

式中: T_{out} 为电堆出口温度, $P_{\text{sat}}(T_{\text{out}})$ 为出口温度对应的饱和压力; φ_{out} 为出口相对湿度; P_{out} 为出口压力。出口处总质量流量和电化学反应产生的水蒸气质量流量按下面两式计算

$$q_{\text{m},\text{out}} = q_{\text{m},\text{air},\text{out}} + q_{\text{m},\text{vap},\text{out}} \quad (15)$$

$$q_{\text{m},\text{vap},\text{gen}} = q_{\text{m},\text{vap},\text{out}} - q_{\text{m},\text{vap},\text{in}} \quad (16)$$

最终得到水蒸气质量源项如下

$$S_{\text{vap}} = \frac{10^6 q_{\text{m},\text{vap},\text{gen}}}{NV_c} \quad (17)$$

多孔介质中的动量源项表示如下

$$S_u = -\frac{\mu_g}{k} u_g - c_2 \frac{1}{2} \rho_g |u_g| u_g \quad (18)$$

式中: $1/k$ 和 c_2 分别代表多孔介质的黏性阻力系数与惯性阻力系数,因为重力的影响很小所以可以在动量源项中忽略。

边界条件分别包括:电堆阴极入口处的质量流量;入口处和出口处的氧气和水蒸气的质量分数分别表示如下

$$\omega_{\text{O}_2,\text{in}} = \frac{q_{\text{m},\text{O}_2,\text{in}}}{q_{\text{m},\text{in}}} \quad (19)$$

$$\omega_{\text{vap},\text{in}} = \frac{q_{\text{m},\text{vap},\text{in}}}{q_{\text{m},\text{in}}} \quad (20)$$

$$\omega_{\text{O}_2,\text{out}} = \frac{q_{\text{m},\text{O}_2,\text{out}}}{q_{\text{m},\text{out}}} \quad (21)$$

$$\omega_{\text{vap},\text{out}} = \frac{q_{\text{m},\text{vap},\text{out}}}{q_{\text{m},\text{out}}} \quad (22)$$

仿真中将电堆出口表压(即相对环境大气压的压力值)设置为出口表压实验测得值。除电堆进出口外,电堆其余表面均作为壁面处理。

在 CFD 分析中,模型网格是重要组成部分之一。根据本课题组之前的研究,如果严格参照真实单电池流场构建网格,则 140 节电堆阴极的总网格量预估超过 50 亿。为减少网格总量,空气腔流场网格被分成两部分。第一部分包括进出端头、歧管、与单电池相连的过桥部分,下一部分是简化为多孔介质的阴极气通道流场,采用 Interface 法将两部分网格结合后分别对两部分网格的压降无关性试验进行了验证,在此

前的研究中^[22]已经详细介绍过了。为使简化为多孔介质的流道具有与真实流道相同的压降特性,采用一装载 15 节相同单电池的电堆实验数据进行多孔介质参数校核。对于 15 节电堆阴极,网格总数达到 1164 万。对于 140 节电堆阴极,总网格数为 9 614 万。网格整体使用 Altair Hypermesh 2019 生成。

上述控制方程在 ANSYS Fluent 17.2 中采用有限体积法(FVM)求解^[23]。压力-速度耦合采用半隐式压力耦合算法(SIMPLE)^[26]。算法在动量、 k - ϵ 控制方程中,对流项采用二阶迎风差分格式离散。用 Interface 连接的不同块网格之间在 FLUENT 求解器中实现数据交换。各片单电池进口过桥处的质量流量的相对偏差 $\bar{q}_i$ ($0 \leq i \leq N$), i 表示单电池阴极编号)定义如下

$$\bar{q}_i = \frac{q_i - q_{\text{ave}}}{q_{\text{ave}}} \quad (23)$$

式中: q_i 为各片阴极流道入口的质量流量; q_{ave} 则是电堆每节平均流量。空气腔不均匀性指标定义如下

$$R_{\bar{m}_i} = \frac{q_{i,\text{max}} - q_{i,\text{min}}}{q_{\text{ave}}} \quad (24)$$

式中: $q_{i,\text{max}}$ 、 $q_{i,\text{min}}$ 分别为单电池质量流量最大与最小值。显然,该值越小,气体流量分布的均匀性就越好。

用于计算单个算例 CFD 模型的耗时较长,在本研究中单个算例至少需要 36~48 h。在大量的设计工况下采用 CFD 逐个进行仿真获取分配曲线将过分消耗计算时间及资源。为使研究更具可行性及经济性,首先需要在合理数量内挑选具有一定代表性的工况进行 CFD 仿真获得 ADC 分配曲线,然后在研究参数范围内建立 ADC 与结构参数之间的相关性,最后基于上述相关性进一步优化空气腔气体分配均匀性。然而,由于因变量为 ADC 即 $\bar{q}_i$ 连线组成的一组矢量,若直接根据 ADC 预测会因样本数据量过大冗余导致机器学习效率降低或过拟合等诸多问题。因此,根据本课题组的相关研究,采用了一种基于 POD 降维的分析模型来建立分配曲线及端头几何参数间的相关性,其操作原理可参见文献^[27]。POD 降维可以将复杂的样本提取主要特征并降低维度,有助于样本数据的压缩、降噪及保持正交性,提高后续预测的准确性。POD 降维的核心是在低阶模态空间中类似于傅里叶级数中的频谱映射来分析分配曲线。

1.3 模态空间构造及建立 ADC 与设计参数的联系

根据 CFD 仿真得到的多组 ADC,将每组 ADC 视为一组向量 χ'_i 并将所有向量组合成快照矩阵 $\chi'_{i,m}$, 然后开始对其进行 POD 降维。首先将快照矩

阵 $\mathbf{x}'_{i,m}$ 的奇异值分解如下

$$\mathbf{x}' = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (25)$$

式中: $\mathbf{U}$ 和 $\mathbf{V}$ 是酉矩阵, 分别称为左奇异向量和右奇异向量; $\mathbf{\Sigma}$ 是存储每个奇异向量的奇异值 σ 的非平方对角矩阵, 表示对应的奇异向量捕获的信息量。将快照矩阵 $\mathbf{x}'$ 右乘 $\mathbf{V}$ 并归一化后, 可以构造模态空间 $\boldsymbol{\psi}_{i,j}$, 定义如下

$$\boldsymbol{\psi}_j = \frac{\sum_{m=1}^n \mathbf{x}'_m \mathbf{v}_{m,j}}{\left\| \sum_{m=1}^n \mathbf{x}'_m \mathbf{v}_{m,j} \right\|} \quad (26)$$

式中: $\|\cdot\|$ 代表 L2 范数。

经过上述步骤, ADC 可以转换成以坐标轴(模)为 $\boldsymbol{\psi}$, 坐标为 a_j 的 l 维模空间。当每个坐标 a_j 已知后, ADC 根据下式求得

$$\mathbf{x}_i = \sum_{j=0}^l a_j \boldsymbol{\psi}_{i,j} \quad (27)$$

每个坐标 a_j 是偏心端头多几何参数的函数 f_j 如下所示

$$a_j = f_j(E_c, R_s, R_H) \quad (28)$$

快照工况下的坐标可投影表示如下

$$a_{j,m} = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\psi}_{i,j} \mathbf{x}'_{i,m} \quad (29)$$

然后, 通过多元多项式二阶拟合 (polynomial curve fitting, PCF, 按照英文应为曲线拟合, 下文称 PCF 为二阶拟合) 得到式 (28) 中的函数 f_j 。拟合方法的选择原因将在 2.3.1 小节中阐述。本小节中的算法是通过 python 自编程实现的

1.4 实验测试装置

装有 15 节单电池的短堆实验在东方电气成都氢能技术有限公司自行搭建的测试台上完成。用于测试电堆各项参数的实验系统如图 3 所示。短堆测试台由电堆、压力及温度测试系统组成。在电堆的

阴极即空气腔进出口管道上安装了四通阀。温度传感器和压力传感器分别安装在四通阀的两侧并保持与地面平行。传感器距离 PEMFC 电堆进出口约 5~7 cm。压力传感器规格为 Dwyer-626-09-GRH-P1-E1-S1, 量程范围为 0~344.7 kPa, 精度为 $\pm 0.25\%$ (满量程)。装有相同单电池的 140 节电堆在东方电气成都氢能技术有限公司的系统测试台中进行了测试。

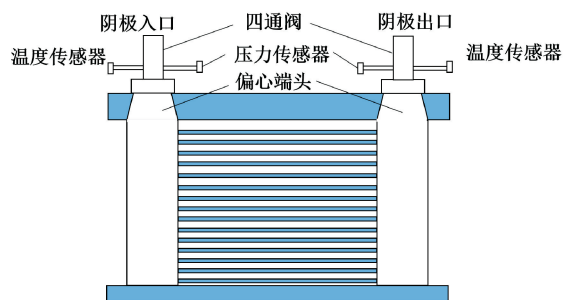


图3 15节PRMFC电堆实验装备图(垂直视角)

Fig. 3 Experiment equipment of the 15-cell PEMFC stack cathode (vertical view)

2 实验与仿真结果分析

2.1 多孔介质参数的测定

本节给出式 (18) 中两个多孔介质参数 $1/k$ 和 c_2 的校核过程。首先将简化多孔流道孔隙度设置为 $\epsilon = 0.6543$ 。 $1/k$ 和 c_2 (多孔介质的黏性阻力系数与惯性阻力系数) 这两个参数的初始值通过参考相关文献中的多孔介质参数数量级来设定。通过 CFD 仿真逐步迭代这两个参数值以减小仿真与实验压降之间的偏差直至最小。进而获得与实验压降最匹配的多孔介质参数。用于校核的实验数据及校核后的仿真结果如表 1 所示, 其中 ΔP_e 与 ΔP_s 分别代表实验与仿真压降。

表1 15节电堆阴极从 $0.3 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 至 $1.8 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的实验工况
Table 1 15-cell stack cathode experimental condition at $0.3 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ to $1.8 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$

$j_c / (\text{A} \cdot \text{cm}^{-2})$	$q_{m,in} / (\text{g} \cdot \text{s}^{-1})$	P_{in} / Pa	P_{out} / Pa	$T_{in} / ^\circ\text{C}$	$T_{out} / ^\circ\text{C}$	φ_{in}	φ_{out}	$\Delta P_e / \text{Pa}$	$\Delta P_s / \text{Pa}$
0.3	2.12	10 747	5 226	316.1	318.7	0.91	1.00	5 521	4 633
0.6	2.37	29 963	25 026	326.1	331.0	0.57	1.00	4 936	4 599
0.8	3.28	22 057	14 447	340.4	336.0	0.66	0.88	7 610	7 547
1.0	3.85	55 068	42 900	336.3	336.2	0.30	1.00	7 168	7 225
1.4	5.61	59 832	48 637	348.3	350.0	0.50	0.71	11 194	11 370
1.8	6.73	73 332	59 376	350.7	359.4	0.59	0.64	13 956	14 504

最后得到 $1/k=2.3 \times 10^8 \text{ m}^{-2}$, $c_2=250 \text{ m}^{-1}$, CFD 仿真压降与实验压降在所有工况下(除 $0.3 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 外)的相对误差均在 10% 以内,在 $0.3 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的误差可能是因为实验测量偶然误差导致的。此时可认为简化多孔介质流道与真实流道具有相同的压降特性。

2.2 快照设计及快照矩阵获取

因为 15 节与 140 节电堆实验均采用同款单电池,简化为多孔介质的流道拥有与真实单电池空气腔流道相同的流量压降特性,并且单电池的流量-压降特性取决于其本身流道结构,而不会因为电堆节数的变化而产生变化。因此将校核后的多孔介质流道放入 140 节电堆模型中展开仿真是可行的,该方法在文献[22]与[23]中得到应用。通过设计 1.1 节中 PEMFC 电堆端头不同的比例参数包括横向偏心度 E_c 、面积比 R_s 与高度比 R_H , 根据引言可知采用一定大小的横向偏心度、面积比与高度比可以提升气体分配均匀性。采用 1.2 节中介绍的 CFD 仿真模型获取不同端头对应的 ADC 快照矩阵。所有仿真工况均按照实验测定中电流密度为 $1.8 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的阴极工况。因为大型电堆一般在高负载情况下由于反应气体流量更大而分配均匀性更差,生产实际中侧重于对分配最差的工况展开分配优化。对于低中负载,其分配常优于高负载因此不需要考虑。 $1.8 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的阴极工况下 140 节整堆阴极进口质量流量为 $0.0631 \text{ kg} \cdot \text{s}^{-1}$,测得进、出口表压分别为 76 kPa 与 64 kPa,进出口温度分别为 339.15 K 与 346.15 K,进出口相对湿度为 0.43 与 0.80。

生成快照矩阵之前,需要设计每个快照矩阵工况。所需研究的变量称为因素,本文研究的因素即为 3 个端头几何参数。本研究中各因素变化都是基于歧管截面即渐变段头下底面不变的前提下,实验设计中,各因素数值变化次数称为水平数,3 个参数的水平级所对应取值如表 2 所示。各因素几何绝对值是实验中所采用的真实电堆端头尺寸。不同的水平即具体尺寸比例参考了此前研究中的范围值的同时,以不超出原电堆横纵极限尺寸为界限。多水平多因素快照矩阵配置设计方法采用了正交实验设计,正交实验设计能在有限的样本数量内保证样本的空间均匀性且能准确地分析各几何因素的交互作用。根据设计原则三因素五水平设计共 25 个工况。

表 2 偏心端头几何参数的水平级及对应取值

Table 2 Eccentric header adjustable geometric parameter and their level

参数	水平				
	1 级	2 级	3 级	4 级	5 级
E_c	0.00	0.35	0.70	0.85	1.00
R_s	0.62	0.69	0.75	0.81	0.887
R_H	0.40	0.44	0.49	0.53	0.58

之后对正交设计快照工况矩阵与仿真获得的 ADC 快照矩阵进行对拟合并预测,发现部分预测 ADC 出现了异于常规分配特性曲线的波动。为对预测 ADC 进行修正提高其拟合精度,加入如表 3 中的 6 个快照工况。因此快照矩阵共包含 31 个工况。

表 3 额外快照工况端头几何参数

Table 3 Additional snapshot condition geometric parameter

方案	E_c	R_s	R_H
1	0.00	0.887	0.58
2	1.00	0.62	0.41
3	1.00	0.62	0.43
4	1.00	0.69	0.44
5	1.00	0.69	0.47
6	1.00	0.69	0.49

2.3 端头参数与 ADC 拟合及其对分配极差的影响

2.3.1 ADC 预测拟合方法选定及拟合效果

由 ADC 快照矩阵 POD 降维后提取出的模态空间坐标需要与工况快照矩阵采用有效的方法进行拟合,在尝试过如神经网络、支持向量积,多输出回归及 MARS 等多种现有常规机器学习方法后,发现拟合结果对应的决定系数 R^2 均不大于 0.1,说明以上机器学习方法均不能进行有效拟合。这是因为作为拟合对象的样本矩阵是由每节电池流量计算得到的 ADC 列向量组成的,而不是电堆中的真实物理场,所以常用于预测物理场的例如 MARS 等方法并不适用。因此决定进一步采用多元多项式拟合(PCF)。实验发现,PCF 在拟合阶数取值分别为 1、3 时,决定系数均不满足拟合基本需求。在拟合阶数取值为 2 时,获得了最佳拟合效果,这是因为 ADC 近似于二次曲线,所以 PCF 二阶拟合比其他阶数更适合。拟合得到的均方误差为 6.56×10^{-6} ,决定系数 $R^2=0.911$ 。鉴于这是在根据偏心端头多参数耦合预测 ADC 的研究中首次被提出,并且是在比较多种拟合方法后能获取的最佳拟合效果,因此 PCF 被认为能对权函数矩阵做出准确的预测,进一步还原预测得到的 ADC 结果基本可以代表 CFD 仿真极差分配特性曲线。

2.3.2 参数 E_c 对分配的影响及 R_s 与 R_H 对其的影响

首先分析 3 个因素对极差 R_{q_i} 的主要影响,图 4 为固定 R_s ,其他两组参数在快照工况变化下得到的预测极差 R_{q_i} 柱状图。根据图 4 可知,大部分工况下, E_c 增大使分配极差 R_{q_i} 减小;根据固定 R_H 及 E_c 的预测结果发现,在大部分工况下分配极差 R_{q_i} 随 R_s 增大而增大;根据固定 R_s 及 E_c 的预测结果发现,在大部分工况下分配极差 R_{q_i} 随 R_H 增大先减小再增大,但在部分工况下出现了 R_{q_i} 随 R_H 增大而增大的情况。接下来讨论另两个因素对 E_c 的影响。 E_c 在特定工况下也呈现双向性,在 $R_s = 0.887$ 和 $R_H = 0.58$ 时,出现随 E_c 增大分配极差 R_{q_i} 出现先增大再减小的趋势。这是因为:当 R_s 较大且 E_c 较小时,受到 R_s 的影响,即让

R_{q_i} 增大占据主导地位,此时 R_{q_i} 呈增大趋势;而当 E_c 增大到特定值时, E_c 的作用超越 R_s 的影响,此时 R_{q_i} 会趋向减小。并且,当 R_H 取值较大时, R_s 与 R_H 共同作用使 R_{q_i} 呈增大趋势, E_c 带来的 R_{q_i} 减小作用被进一步覆盖,导致 E_c 增大使 R_{q_i} 转向再减小的转折点向后延迟。在 $R_s = 0.887$ 且 $R_H = 0.58$ 时, R_s 与 R_H 的极差增大作用完全覆盖了 E_c 的极差减小作用, E_c 带来的 R_{q_i} 减小的效应完全消失,呈现随 E_c 增大 R_{q_i} 增大的效果。因此,增大端头偏心程度虽然能显著改善分配,同时需要匹配 R_s 及 R_H 的取值范围。 R_H 与 R_s 增大都会同样缩减 E_c 增大所带来的极差波动范围。整体来说还是 R_s 导致 E_c 增大所带来的极差波动范围缩减得更窄,因此 R_s 对 E_c 的影响强度更大。

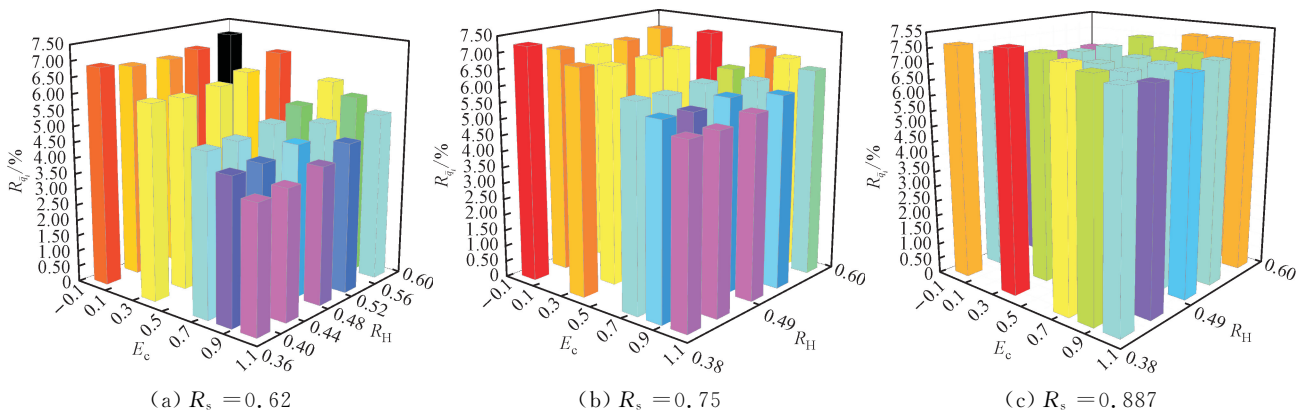


图 4 R_s 不变时 R_H 与 E_c 对 R_{q_i} 的影响

Fig. 4 R_H and E_c influence to R_{q_i} while R_s remains

2.3.3 参数 R_s 对分配的影响及 E_c 与 R_H 对其影响

当 $E_c = 0$ 即对称端头工况下,且 R_H 较小时,分配极差随 R_s 增大而增大;但当 R_H 增大到 0.58 时出现随 R_s 增大 R_{q_i} 小幅度减小的情况。同时, $E_c = 0$ 工况下, R_s 与 R_H 变化导致极差偏差都小于 1%,即对于对称端头来说 R_s 及 R_H 对优化分配不均匀性效果极小,所以优化分配不均匀性应首先配置偏心端头。当 $E_c > 0$ 时,可发现随 R_s 增大 R_{q_i} 增大,因此对于偏心端头都需要减小 R_s 比值来优化分配。接下来讨论 R_H 及 E_c 对 R_s 的影响。根据固定 R_H 及 E_c 的预测结果发现:在不同 E_c 工况下,随着 R_H 增大, R_s 增大带来的 R_{q_i} 上下波动范围都会缩小,即 R_H 增大将减弱 R_s 对分配均匀性的影响;而相反的是 E_c 对 R_s 的影响,在不同 R_H 工况下,随着 E_c 增大, R_s 增大带来的 R_{q_i} 上下波动范围都在增大,即 E_c 增大会使得 R_s 对分配均匀性的影响更加显著。因此将空气腔端头优化为偏心端头后,推荐尽可能缩小 R_s 以降低极差

R_{q_i} 而提升分配均匀性。

2.3.4 参数 R_H 对分配的影响及 E_c 与 R_s 对其的影响

R_H 对空气腔分配不均匀性的影响根据 E_c 与 R_s 值的不同呈现不同的趋向性。当 $R_s = 0.62$ 时,大部分工况下 R_H 增大使极差增大。仅在 $E_c = 0$ 时,随 R_H 增大 R_{q_i} 出现先减小再增大的趋势。由图 4 可以发现 R_s 增大后,大部分工况下 R_{q_i} 出现先减小再增大,并且 R_{q_i} 减小趋势的区间随 E_c 的增大而扩大。同时可发现随着 E_c 的增大, R_H 所导致的极差波动范围在逐渐扩大,所以可认为 E_c 的增大将加强 R_H 的影响。根据固定 R_H 及 E_c 的预测结果发现, $E_c = 0, 0.7, 1.0$ 时在不同 R_s 及 R_H 时 R_{q_i} 的变化发现,对于对称端头 R_{q_i} 都随 R_H 先减小再增大,对于非对称端头仅在 $R_s = 0.62$ 时有 R_{q_i} 随 R_H 增大而增大的情况,其他工况下都随 R_H 增大 R_{q_i} 先减小后增大。并且 R_{q_i} 减小趋势的区间随着 R_s 增大而缩短。同时可发现随着 R_s 的增大, R_H 所导致的极差波动范围在逐渐缩小,所以可认为 R_s 的增大将削弱 R_H 的影响。

2.4 端头几何参数设计及最优区间

以上结果表明,3 个端头几何参数变化对 $R_{\bar{q}_i}$ 的影响趋势都不是单调递增或递减,而是同时取决于其他 2 个参数的取值。即 3 个参数对分配特性的影响为非线性的。综合预测结果,当 E_c 参数趋近最大值 1.0,同时 R_s 和 R_H 参数分别趋近最小值 0.62 和 0.4 时,预测极差值 $R_{\bar{q}_i}$ 达到最优解集合,此时获得的最小预测极差值为 $R_{\bar{q}_i} = 3.94\%$,与对应该几何参数偏心端头电堆空气腔 CFD 仿真结果 $R_{\bar{q}_i} = 4.04\%$ 的相对偏差仅为 2.47%,验证了预测模型的可靠性。相较于原对称端头电堆即 2.3 节中的实验模型($E_c = 0, R_s = 0.887, R_H = 0.49$) $R_{\bar{q}_i} = 7.35\%$ 的 CFD 仿真极差,优化后使极差降低至 $R_{\bar{q}_i} = 4.04\%$,提升约 45%。极差以 5% 和 10% 作为分界标准,5% 以下属于较优水平。由于空气腔气体流量大导致分配均匀性差,本文方案将理论极差优化至 4.04%,具有显著意义;该优化仅通过端板结构改进,重新开模生产端板即可提升空气腔分配性能,无需改变歧管截面尺寸或单电池流道构型,具有一定的工程应用价值。

需要特别说明的是,以上结论中的定量结论只适用于该电堆,但其定性结论与文献[19]及[20]中的结论具有一致性,说明其定性结果对 U 型电堆的端头设计有确实的指导意义。偏心端头主要依靠影响分配歧管靠前部分的流动来改善分配,面对更高节数的电堆由于电堆歧管中的流动距离更长而可能会导致端头影响减弱,但这并不会使定性结论改变。

3 结 论

本文基于实验数据对 140 节 U 型 PEMFC 电堆的阴极进行了数值模拟研究。依据正交实验设计,设计了多组快照工况,并采用 CFD 仿真构建了相应的 ADC 快照矩阵。通过多元二阶式拟合(PCF),建立了 ADC 与偏心端头几何参数之间的定量预测的模型,实现了对装有不同几何参数下偏心端板的 ADC 及分配极差的快速准确预测。仿真结果表明,优化后的偏心端板可显著改善电堆阴极气体分配均匀性,根据结果可以得到以下结论。

(1)增大端头 E_c ,大部分情况下都将优化分配,减小空气腔分配极差。增大 R_s 与 R_H 都将减弱 E_c 增大带来的分配优化效果,其中 R_s 对 E_c 影响更显著。

(2)偏心端头只有降低 R_s 值才能显著体现偏心带来的分配优化效果,增大 E_c 与 R_H 都将加强 R_s 对分配特性的影响,而 E_c 对 R_s 影响更显著。

(3) R_H 是相对影响较小的,将 R_H 降低到合适

范围内将进一步优化分配,增大 E_c 或减小 R_s 都将加强 R_H 对分配特性的影响。

(4)根据在研究范围内得到的最佳解所对应的端头参数进行 CFD 仿真得到 $R_{\bar{q}_i} = 4.04\%$,相较原始空气腔提升了约 45%,在没有扩大歧管的前提下,仅对端头进行几何优化实现了较大分配均匀性提升。

致谢:

特别致谢东方电气(成都)氢能科技有限公司提供实验系统说明及相关实验数据。

参考文献:

- [1] 廖冠臣,李艳艳,孙志豪,等. 质子交换膜燃料电池堆多因素影响运行特性试验研究 [J]. 能源化工, 2024, 45(6): 17-24.
LIAO Guanchen, LI Yanyan, SUN Zhihao, et al. Experimental study on the operating characteristics of proton exchange membrane fuel cell stacks under the influence of multiple factors [J]. Energy Chemical Industry, 2024, 45(6): 17-24.
- [2] 刘欢,胡敏,邢彦锋,等. 燃料电池密封结构粗糙表面模型应力分布研究 [J]. 电源技术, 2024, 48(11): 2289-2294.
LIU Huan, HU Min, XING Yanfeng, et al. Research on the stress distribution of the rough surface model of fuel cell sealing structures [J]. Chinese Journal of Power Sources, 2024, 48(11): 2289-2294.
- [3] 刘绍俊,田思思,刘郭存,等. PEMFC 电堆快速成型建模和优化 [J]. 工程热物理学报, 2024, 45(2): 368-377.
LIU Shaojun, TIAN Sisi, LIU Guocun, et al. Rapid prototyping modeling and optimization of PEMFC stacks [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2024, 45(2): 368-377.
- [4] PARK J, LI Xianguo. Effect of flow and temperature distribution on the performance of a PEM fuel cell stack [J]. Journal of Power Sources, 2006, 162(1): 444-459.
- [5] 覃有为,刘坤,肖金生. 车用质子交换膜燃料电池堆阴极进气系统模拟及优化 [J]. 北京汽车, 2007(3): 1-3.
QIN Youwei, LIU Kun, XIAO Jinsheng. Simulation and optimization of the cathode intake system of vehicle proton exchange membrane fuel cell stacks [J]. Beijing Automotive Engineering, 2007(3): 1-3.
- [6] HENSEL J P, GEMMEN R S, THORNTON J D, et al. Effects of cell-to-cell fuel mal-distribution on fuel cell performance and a means to reduce mal-distribution using MEMS micro-valves [J]. Journal of Power

- Sources, 2007, 164(1): 115-125.
- [7] CHEN C H, JUNG S P, YEN S C. Flow distribution in the manifold of PEM fuel cell stack [J]. Journal of Power Sources, 2007, 173(1): 249-263.
- [8] CHEN Huicui, HE Yuxiang, ZHANG Xinfeng, et al. A method to study the intake consistency of the dual-stack polymer electrolyte membrane fuel cell system under dynamic operating conditions [J]. Applied Energy, 2018, 231: 1050-1058.
- [9] LEBÆK J, BANG M, KÆR S K. Flow and Pressure distribution in fuel cell manifolds [J]. Journal of Fuel Cell Science and Technology, 2010, 7(6): 061001.
- [10] WANG Junye, WANG Hualin. Discrete method for design of flow distribution in manifolds [J]. Applied Thermal Engineering, 2015, 89: 927-945.
- [11] QIN Yanzhou, LIU Guokun, CHANG Yafei, et al. Modeling and design of PEM fuel cell stack based on a flow network method [J]. Applied Thermal Engineering, 2018, 144: 411-423.
- [12] AMIRFAZLI A, ASGHARI S, SARRAF M. An investigation into the effect of manifold geometry on uniformity of temperature distribution in a PEMFC stack [J]. Energy, 2018, 145: 141-151.
- [13] LIM B H, MAJLAN E H, DAUD W R W, et al. Three-dimensional study of stack on the performance of the proton exchange membrane fuel cell [J]. Energy, 2019, 169: 338-343.
- [14] LI Min, DUAN Kangjun, DJILALI N, et al. Flow sharing and turbulence phenomena in proton exchange membrane fuel cell stack headers [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(57): 30306-30318.
- [15] HUANG Fuxiang, QIU Diankai, LAN Shuhuai, et al. Performance evaluation of commercial-size proton exchange membrane fuel cell stacks considering air flow distribution in the manifold [J]. Energy Conversion and Management, 2020, 203: 112256.
- [16] HUANG Fuxiang, QIU Diankai, XU Zhutian, et al. Analysis and improvement of flow distribution in manifold for proton exchange membrane fuel cell stacks [J]. Energy, 2021, 226: 120427.
- [17] SU Guoqing, YANG Daijun, XIAO Qiangfeng, et al. Effects of vortexes in feed header on air flow distribution of PEMFC stack: CFD simulation and optimization for better uniformity [J]. Renewable Energy, 2021, 173: 498-506.
- [18] CHEN W H, TSAI Z L, CHANG M H, et al. Geometry optimization and pressure analysis of a proton exchange membrane fuel cell stack [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(31): 16717-16733.
- [19] 赵岩, 罗马吉, 陈奔. 基于压力速度耦合算法的 PEMFC 电堆空气分布 [J]. 江苏大学学报(自然科学版), 2021, 42(1): 28-32.
- ZHAO Yan, LUO Maji, CHEN Ben. Air distribution in PEMFC stacks based on the pressure-velocity coupling algorithm [J]. Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition), 2021, 42(1): 28-32.
- [20] PAN Weitong, CHEN Zhekun, CHEN Xueli, et al. Analytical and numerical investigation of flow distribution in PEMFC stacks [J]. Chemical Engineering Journal, 2022, 450(Part 1): 137598.
- [21] HUANG Fuxiang, QIU Diankai, PENG Linfa, et al. Optimization of entrance geometry and analysis of fluid distribution in manifold for high-power proton exchange membrane fuel cell stacks [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(52): 22180-22191.
- [22] BAI Fan, YIN Renjie, LIAO Jinyang, et al. Eccentricity design for the coolant distribution optimization of a practical commercial-size proton exchange membrane fuel cell stack using a novel proper orthogonal decomposition based analysis model [J]. Applied Energy, 2023, 347: 121389.
- [23] YIN Renjie, ZENG Wenchao, BAI Fan, et al. Study on the effects of manifold structure on the gas flow distribution uniformity of anode of PEMFC stack with 140-cell [J]. Renewable Energy, 2024, 221: 119693.
- [24] HUANG Taiming, DING Wu, XIAO Yufan, et al. Manifold geometry optimization and flow distribution analysis in commercial-scale proton exchange membrane fuel cell stacks [J]. Renewable Energy, 2024, 237(Part B): 121736.
- [25] PATANKAR S V. Numerical heat transfer and fluid flow [M]. Boca Raton: ImprintCRC Press, 1980.
- [26] 陶文铨. 数值传热学 [M]. 西安交通大学出版社, 2001.
- [27] COLIN CAMERON A, WINDMEIJER F A G. An R-squared measure of goodness of fit for some common nonlinear regression models [J]. Journal of Econometrics, 1997, 77(2): 329-342.

(编辑 刘杨 陶晴)