

华北电力大学

专业硕士学位论文

基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电
极性能评价模型研究

**Evaluation Model for Membrane Electrode
Assemblies in Proton Exchange Membrane Fuel Cells
Based on Flow Field Characteristics**

陈启勇

2025年6月

国内图书分类号：TK91

国际图书分类号：669

学校代码：10079

密级：公开

专业硕士学位论文

基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电极性能评价模型研究

硕士研究生：陈启勇

导师：刘彦丰教授

企业导师：段志洁

申请学位：工程硕士

专业领域：动力工程

学习方式：全日制

所在学院：能源动力与机械工程学院

答辩日期：2025年5月

授予学位单位：华北电力大学

Classified Index: X
U.D.C: 669

Professional Master's Thesis

Evaluation Model for Membrane Electrode Assemblies in Proton Exchange Membrane Fuel Cells Based on Flow Field Characteristics

Candidate:	Chen Qi yong
Supervisor:	Prof.Liu Yan feng
Enterprise mentor:	Duan Zhi Jie
Professional Degree Applied for:	Master of Engineering
Speciality:	Power Engineering
Cultivation ways:	Full-time
School:	School of Energy Power and Mechanical Engineering
Date of Defence:	May, 2025
Degree-Conferring-Institution:	North China Electric Power University

华北电力大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：此处所提交的学位论文《基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电极性能评价模型研究》，是本人在导师指导下，在华北电力大学攻读学位期间独立进行研究工作所取得的成果。论文中除已注明部分外不包含他人已发表或完成的研究成果。对本文的研究工作做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式注明。论文由本人撰写，未使用人工智能代写。本声明的法律结果将完全由本人承担。

作者签名：陈启勇

日期：2025年5月27日

华北电力大学学位论文使用授权书

学位论文系研究生在华北电力大学攻读学位期间在导师指导下完成的成果，知识产权归属华北电力大学所有，学位论文的研究内容不得以其它单位的名义发表。研究生完全了解华北电力大学关于保存、使用学位论文的规定，同意学校保留并向有关部门送交论文的复印件和电子版本，同意学校将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，允许论文被查阅和借阅，学校可以为存在馆际合作关系的兄弟高校用户提供文献传递服务和交换服务。本人授权华北电力大学，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存论文，可以公布论文的全部或部分内容。

保密论文在保密期内遵守有关保密规定，解密后适用于此使用权限规定。
本人知悉学位论文的使用权限，并将遵守有关规定。

本学位论文属于（请在相应方框内打“√”）

公开 内部 秘密 机密 绝密

作者签名：陈启勇

日期：2025年5月27日

导师签名：刘彦东

日期：2025年5月27日

摘要

质子交换膜燃料电池（PEMFC）因其高效、低噪及快速响应的特性，成为清洁能源领域的研究热点。膜电极（MEA）作为其核心组件，其性能评价方法的局限性严重制约了燃料电池的优化设计。现有实验方法高度依赖特定流场结构及实验参数（如温度、湿度），导致不同研究间的数据可比性不足；而数值模拟中流场特性与性能指标的强耦合性，又导致了跨流场结构性能评价的难度。为此，本文提出了一种多维度融合的 MEA 性能评价模型：建立流场均匀性指标同功率密度间的线性比例关系，以拟合直线斜率作为 MEA 性能评价指标。基于流场特性与电化学反应的关联机制，结合理论建模、多物理场仿真与机器学习技术，系统分析了流场结构对 MEA 内部反应物传输及电流密度分布的影响；进一步通过特征工程构建了跨流场结构的性能评价指标体系，利用数据驱动方法实现了多结构多工况下 MEA 性能的定量预测，为 MEA 性能标准化评估提供了理论工具。主要内容如下：

首先，以四种典型流道（蛇形流道、直平行流道、交指型流道、网格型流道）为研究对象，分别改变流道的结构尺寸（流道宽度、深度、肋宽等）、运行工况（温度、压力、气体流量、湿度等）和 MEA 材料特性（密度、导电率、气体扩散率、热导率、比热），通过计算流体力学（CFD）方法，分析了不同影响条件下膜电极内部的浓度分布、速度分布、温度分布、压力分布以及电流密度分布，并将研究结果与实验数据及文献结果对比。结果显示：模拟值与实验值的电压-电流密度曲线最大误差小于 5%，且氧浓度分布与激光诱导荧光（LIF）测量结果的空间吻合度达 90%以上，验证了传质模型的准确性。另外根据 Fluent 后处理的温度场与红外热像仪实测数据对比，最大温差不超过 3.5℃，验证了热耦合模型的可靠性。

其次，考虑到 MEA 内部物理场的分布特性直接决定了电化学反应效率，进而影响燃料电池的输出功率密度。通过数值模拟获取了不同流道结构、工况及材料下 MEA 各接触面的物理场（浓度、速度、压力、温度）分布数据，并将各物理场的“均匀度”作为其性能描述符，值越趋近于 1，表明分布均匀性越优，同时为后续模型推导提供了可靠的数据基础。为了建立输出功率密度与描述符的定量关系，选择反向传播神经网络作为建模工具。结果表明，燃料电池的输出功率密度与 MEA 性能描述符之间的线性关系，回归系数 R^2 分别为 0.9780、0.9745、0.9709、0.9848 和 0.9603，说明物理场均匀度对功率密度具有强解释性。进一步发现，对于同一 MEA 材料，不同流场结构及工况下的功率密度与均匀度间的斜

率 K 为定值，证明该描述符能够稳定表征 MEA 在不同流场特性下的性能，而对于不同 MEA 材料，在不同流场结构及工况下的功率密度与均匀度的比值（即 K 值）存在显著差异，说明斜率 K 可清晰区分不同 MEA 材料的性能特征。同时将 K 值的大小与 MEA 的材料属性进行了数值关联，发现二者呈现正相关性，验证了 MEA 性能评价描述符的合理性，即斜率 K 反映的就是 MEA 自身的材料特性。

最后，为了避免通过 CFD 模拟消耗的大量计算资源，从工程实际的角度出发。根据不同 PEMFC 流场的结构特点，提取了流场结构特征值和运行工况特征值，采用随机森林法分析了不同特征值对输出功率密度的影响，并以特征值为变量，MEA 性能描述符为目标函数，利用神经网络建立了特征值与 MEA 性能描述符之间的映射关系。五种材料下，回归系数 R^2 分别为 0.8257、0.8746、0.8868、0.8596 和 0.9067。结果表明，流场结构和运行工况特征值与 MEA 性能描述符之间的线性关系，通过分析结构和运行工况特征值，可对不同 MEA 材料、流场结构尺寸、运行工况下的 MEA 性能描述符进行预测，进而建立起了燃料电池的输出功率密度与流场结构和运行工况特征值之间的关系。

本文结合多物理场仿真与数据驱动算法，揭示了流场结构、运行工况与 MEA 材料特性对 MEA 性能的影响，构建起了多维度融合的 MEA 性能评价模型，为 MEA 性能预测提供了标准化评估和理论工具。

关键词：质子交换膜燃料电池；膜电极性能；流场特性；评价模型；神经网络

Abstract

Proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) have become a research hotspot in the field of clean energy due to their high efficiency, low noise, and rapid response characteristics. The membrane electrode assembly (MEA) serves as its core component, but the limitations in performance evaluation methods severely restrict the optimization and design of fuel cells. Existing experimental methods heavily rely on specific flow field structures and parameters such as temperature and humidity, leading to insufficient comparability between different studies. Moreover, the strong coupling between flow field characteristics and performance metrics in numerical simulations complicates the evaluation of performance across different flow field structures. To address these issues, this paper proposes a multidimensional integrated MEA performance evaluation model. It establishes a linear proportional relationship between flow field uniformity indices and power density, using the slope of the fitted line as the MEA performance evaluation metric. By leveraging the correlation mechanism between flow field characteristics and electrochemical response, and combining theoretical modeling, multiphysics simulations, and machine learning techniques, the study systematically analyzes the influence of flow field structures on reactant transport and current density distribution within the MEA. Furthermore, through feature engineering, it constructs a performance evaluation index system across different flow field structures, achieving quantitative prediction of MEA performance under multiple structures and operating conditions using data-driven methods. This provides a theoretical tool for standardized assessment of MEA performance. The main contents are as follows:

Firstly, four typical flow channel designs serpentine, straight-parallel, interdigitated, and meshtype were selected as research objects. The study systematically varied the structural dimensions of the flow channels (channel width, depth, and rib width), operating conditions (temperature, pressure, gas flow rate, and humidity), and MEA material properties (density, electrical conductivity, gas diffusivity, thermal conductivity, and specific heat). Using computational fluid dynamics (CFD) methods, the internal distributions of concentration, velocity, temperature, pressure, and current density within the membrane electrode were analyzed under different influencing factors. The simulation results were then compared with experimental data and literature findings. The results showed that the maximum deviation between the simulated and experimental polarization curves (voltage-current density) was less than 3%. Additionally, the spatial consistency between the oxygen concentration distribution from simulations and laser-induced fluorescence (LIF) measurements exceeded 90%, confirming the accuracy of the mass transfer model. Furthermore, a comparison between the Fluent post-processed temperature field and infrared thermography measurements showed a maximum

temperature difference of no more than 3.5°C, validating the reliability of the thermal coupling model.

Secondly, considering that the distribution characteristics of physical fields within the MEA directly determine the electrochemical reaction efficiency and subsequently affect the output power density of the fuel cell, numerical simulations were conducted to obtain the distribution data of physical fields (concentration, velocity, pressure, and temperature) on various contact surfaces of the MEA under different flow channel structures, operating conditions, and material properties. The "uniformity" of each physical field was used as a performance descriptor, where values approaching 1 indicate better distribution uniformity, providing a reliable data foundation for subsequent model derivation. To establish a quantitative relationship between output power density and the performance descriptor, a backpropagation neural network was chosen as the modeling tool. The results showed that the linear regression coefficients (R^2) between fuel cell output power density and the MEA performance descriptor were 0.9780, 0.9745, 0.9709, 0.9848, and 0.9603, demonstrating that the uniformity of physical fields strongly explains power density. Further analysis revealed that for the same MEA material, the slope K between power density and uniformity under different flow field structures and operating conditions remained constant, proving that this descriptor can reliably characterize MEA performance across various flow field characteristics. However, for different MEA materials, the ratio between power density and uniformity (K -value) varied significantly under different flow field structures and operating conditions, indicating that the slope K can clearly distinguish the performance characteristics of different MEA materials. Moreover, a numerical correlation analysis between the K -value and MEA material properties showed a positive correlation, further validating the rationality of the MEA performance evaluation descriptor—confirming that the slope K directly reflects the intrinsic material properties of the MEA.

Finally, to avoid the high computational cost associated with CFD simulations and to enhance practical engineering applicability, structural and operational characteristic values were extracted based on the unique features of different PEMFC flow fields. A random forest method was employed to analyze the influence of these characteristic values on output power density. Using the extracted characteristic values as input variables and the MEA performance descriptor as the target function, a neural network was utilized to establish a mapping relationship between the characteristic values and the MEA performance descriptor. For five different materials, the regression coefficients (R^2) were 0.8257, 0.8746, 0.8868, 0.8596, and 0.9067, respectively. The results demonstrated that a linear relationship exists between flow field structure, operating condition characteristics, and the MEA performance descriptor. By analyzing the structural and operational characteristic values, it became possible to predict the MEA

performance descriptor under various MEA materials, flow field structures, and operating conditions. Consequently, a relationship was established between the fuel cell' output power density and the flow field structure and operating condition characteristics.

This study integrates multiphysics simulations with data-driven algorithms to reveal the effects of flow field structure, operating conditions, and MEA material properties on MEA performance. A multidimensional integrated MEA performance evaluation model was established, providing a standardized assessment and theoretical tool for MEA performance prediction.

Keywords: Proton Exchange Membrane Fuel Cell, Membrane Electrode Assembly Performance, Flow Field Characteristics, Evaluation model, Neural Network

目录

摘要	I
Abstract	III
第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景与意义	1
1.2 质子交换膜燃料电池	2
1.2.1 质子交换膜燃料电池结构	2
1.2.2 质子交换膜燃料电池工作原理	3
1.2.3 质子交换膜燃料电池膜电极	4
1.3 基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电极性能评价国内外研究现状	5
1.3.1 典型流场研究现状	5
1.3.2 质子交换膜燃料电池膜电极性能研究现状	6
1.4 研究内容	10
第 2 章 质子交换膜燃料电池基础理论与控制方程	12
2.1 基本守恒方程	12
2.1.1 质量守恒方程	12
2.1.2 动量守恒方程	12
2.1.3 能量守恒方程	12
2.1.4 组分守恒方程	13
2.2 电化学反应	13
2.2.1 电荷守恒方程	13
2.2.2 Butler-Volmer 方程	14
2.2.3 气体组分在多孔介质中的扩散方程	14
2.2.4 液态水形成与输运方程	14
2.3 燃料电池内部流场均匀度及输出功率	14
2.3.1 流场均匀度	14
2.3.2 燃料电池输出功率	15
2.3.3 均方误差 MSE 和回归系数 R^2	15
2.3.4 MEA 均匀度	15
2.3.5 最小-最大归一化	16
2.3.6 MEA 雷达图面积	16
2.4 质子交换膜燃料电池物性参数模型	16
2.4.1 密度	16

2.4.2 粘度	17
2.4.3 比热	17
2.4.4 热导率	17
2.4.5 扩散系数	17
2.5 边界条件及模型假设	17
2.5.1 边界条件	18
2.5.2 模型假设	18
2.6 求解策略	18
2.7 本章小结	18
第 3 章 基于典型流场 MEA 性能的仿真建模与分析	20
3.1 模型建立	20
3.1.1 几何模型	20
3.1.2 边界条件及工作参数	22
3.1.3 膜电极材料特性	22
3.2 网格独立性检验及模型验证	23
3.3 流道结构尺寸对燃料电池输出性能的影响	25
3.3.1 流道深度对电池性能的影响	25
3.3.2 流道宽度对电池性能的影响	26
3.3.3 肋宽度对电池性能的影响	28
3.4 本章小结	29
第 4 章 基于流场特性的膜电极性能评价研究与分析	30
4.1 MEA 性能评价指标的选取	30
4.2 不同影响条件下 MEA 流场均匀度分析	30
4.2.1 流道结构尺寸对 MEA 流场均匀度的影响	30
4.2.2 运行条件对 MEA 流场均匀度的影响	33
4.2.3 MEA 材料特性对 MEA 流场均匀度的影响	38
4.3 基于 MEA 流场均匀度的神经网络预测模型构建	40
4.3.1 神经网络算法简介	40
4.3.2 神经网络预测模型验证	41
4.3.3 MEA 评价模型效果分析	42
4.4 本章小结	46
第 5 章 测试条件特征同 MEA 均匀性间的预测模型	48
5.1 特征值相关理论基础	48
5.2 特征值选取原则	48

5.3 流道几何结构尺寸特征值分析	48
5.3.1 流道深度	48
5.3.2 流道宽度	50
5.3.3 流道肋宽	51
5.4 运行工况特征值分析	52
5.4.1 反应区温度	52
5.4.2 气体压力	54
5.4.3 气体流量	55
5.5 基于特征值与 MEA 性能描述符的研究	56
5.5.1 神经网络选择	56
5.5.2 多变量神经网络预测模型构建	56
5.5.3 神经网络模型预测效果分析	57
5.6 MEA 性能评估网站的设计	59
5.6.1 网页界面展示	60
5.6.2 测试结果展示	60
5.7 本章小结	61
第 6 章 总结与展望	63
6.1 总结	63
6.2 展望	64
参考文献	66
攻读硕士学位期间发表的论文及其它成果	72
致谢	73
华北电力大学学位论文答辩委员会情况	74

第 1 章 绪 论

1.1 研究背景与意义

能源在二十一世纪人类社会发展进程中的重要性日益凸显，与国民经济发展密切相关。在经济持续增长态势下，我国能源需求呈现出不断攀升的趋势。根据 2023 年权威机构发布的研究数据^[1]，在全球能源消费格局中占据主导地位的仍是化石能源，其比例高达 81.5%。具有不可再生特性和高排放特征的化石能源，对生态环境保护和能源安全保障造成了巨大压力。为了应对这一挑战，近年来我国政府明显加快了能源体系转型的进程。2021 年正式提出的“双碳”战略目标，由此可见发展可再生能源技术已经成为了当前社会各界的普遍共识。

在现代能源体系构建中，尤为突出的是具有高热值特性、环境友好性表现、资源储量可观性以及来源多样化特征的氢能，当前学术界众多研究工作者所重点关注。根据碳达峰目标情景下的预测模型显示，至 2030 年时我国氢气年度需求总量预计将达到 3715 万吨级规模，这一数值相当于终端能源消费总量 5% 左右。此外氢气的年需求量会逐年上升，在 2060 年有望突破 1.3 亿万吨量级，届时其占终端能源消费比例将显著提升至 20%。氢能产业战略地位的逐步凸显由此可见一斑。特别需要指出的是，在 2022 年这个重要时间节点上召开的全国两会期间，被写入国民经济和社会发展第十四个五年规划纲要的氢能产业正式获得政策层面的确认。从全产业链视角分析，氢能开发利用过程主要涵盖制备环节、储运环节以及终端应用三大组成部分。就当前技术路线而言，氢能高效利用方式可划分为两大类：一是分布式发电系统的能量供给，二是交通运输领域（涵盖道路车辆与水上船舶）的动力系统，如图 1-1a)所示。而当前的燃料电池动力车型主要涵盖乘用车类、公交运输车型类以及商用运输工具类别（其中重型卡车与物流运输车占据主导地位），如图 1-1b)所示。

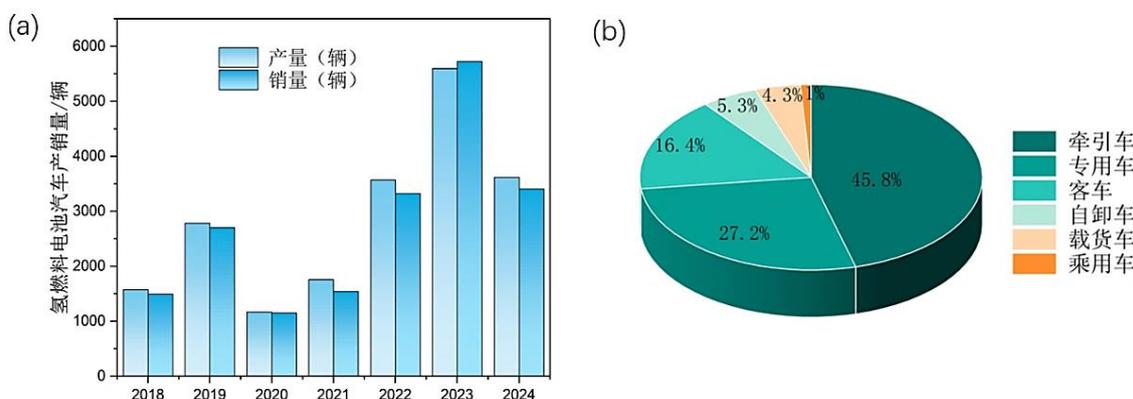


图 1-1 a)2018-2024 年中国氢燃料电池汽车产销量 b)2024 年氢燃料电池汽车车型结构分布

燃料电池技术在氢能领域中占据重要地位，是一种可以直接将氢气和空气中的化学能转化成电能的储能装置，突破了传统卡诺循环对效率的限制，能量转化率可达 60%-70%^[2]，且反应产物仅为水和少量的二氧化碳，当该技术被整合至分布式发电热电联产系统时，其发电效率可达 82%以上，因此发展燃料电池技术对于缓解能源短缺与环境污染问题具有双重积极效应。依据电解质材料性质的差异性可划分类别^[3]，包括采用碱性电解质的 AFC（Alkaline Fuel Cell）型、基于质子交换膜构造的 PEMFC（Proton Exchange Membrane Fuel Cell）型、以固态氧化物为特征的 SOFC（Solid Oxide Fuel Cell）型、使用磷酸溶液的 PAFC（Phosphoric Acid Fuel Cell）型、涉及熔融碳酸盐的 MCFC（Molten Carbonate Fuel Cell）型以及直接利用甲醇燃料的 DMFC（Direct Methanol Fuel Cell）型。因工作温度参数存在显著差异：处于相对低温工况的 AFC 类、PEMFC 类、PAFC 类及 DMFC 类被定为低温燃料电池范畴；而运行于高温环境下的 SOFC 与 MCFC 两类则被归属于高温燃料电池类别，每种电池特点如表 1-1 所示。

表 1-1 各类燃料电池特点与工作特征^[4]

电池种类	质子交换膜燃料电池	碱性燃料电池	固体氧化物燃料电池	磷酸燃料电池	熔融碳酸盐燃料电池	直接甲醇燃料电池
燃料	H ₂	H ₂	H ₂ 、CO、HC	天然气、甲醇	H ₂ 、CO、天然气	甲醇和水的混合物
氧化剂	O ₂	O ₂	O ₂	O ₂	O ₂	O ₂
电解质	Nafion	KOH	陶瓷材料	浓磷酸	熔融碳酸盐	质子交换膜
催化剂	Pt	Pt/Ni	Ni	Pt	Ni	Pt
工作温度 (K)	323-373	333-373	773-1273	423-493	873-973	323-393
燃料灵活性	低	低	高	中	高	低
启动速度	快速	快速	较慢	中等	较慢	快速
应用领域	车用、便携设备	航天、军用	分布式发电	商业供电	大规模发电	小型设备
主要挑战	CO 中毒	耐 CO ₂ 性能差	材料稳定性	成本、体积	电解质腐蚀	甲醇渗透损失

在上述各类燃料电池中，具备显著优势的是质子交换膜燃料电池，具有低温启动快、响应速度快、转换效率高等优点，在交通、分布式发电、移动电源等领域有较大的发展前景^[5]。

1.2 质子交换膜燃料电池

1.2.1 质子交换膜燃料电池结构

如图 1-2 所示为质子交换膜燃料电池（Proton exchange membrane fuel cell，简称 PEMFC）的主要结构。

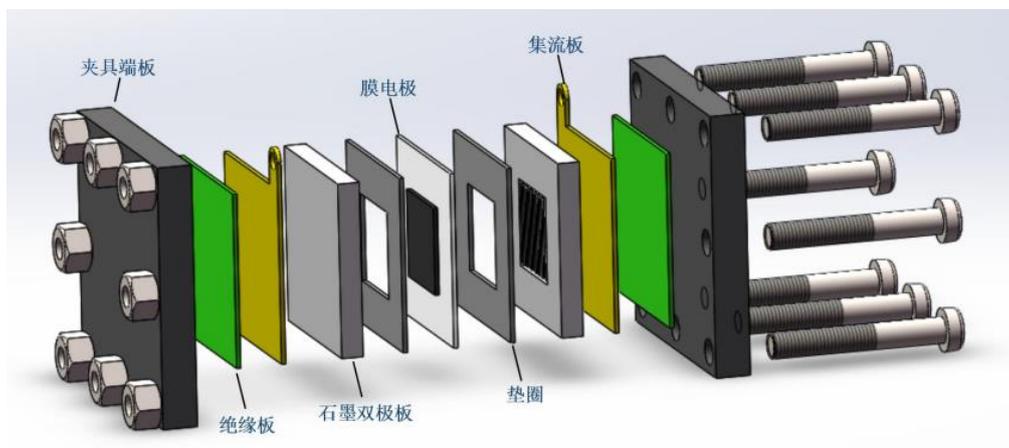


图 1-2 质子交换膜燃料电池单体结构图

构成一个 PEMFC 单体的部件由外到内依次为双极板、气体扩散层、催化层以及质子交换膜。质子交换膜是 PEMFC 的核心元件，一般为全氟磺酸（Nafion）隔膜^[6]，质子导电性能好，氧化稳定性高，水力渗透阻力基本为零。催化层（catalyst layer，简称 CL）是反应气体在其上的催化剂表面发生电化学反应，完成反应物中的化学能量转化为电能，是燃料电池中真正意义上的电极。气体扩散层（Gas Diffusion Layer，简称 GDL）除了最重要的是为气体反应物向催化层提供良好的输送作用和较低的电阻率外，同时还具有机械支撑、反应物输送、液态水清除等功能。双极板（Bipolar Plate，简称 BP），串联各单体电池，传递反应气体，将电池中多余的水排出，同时支撑电池组的整体结构，对电流进行收集和传导^[7]。流经双极板表面流道的反应气体，在抵达气体扩散层后继续向催化层移动，电化学反应现象最终发生于催化剂表面区域，热量与液态水在此过程中得以生成。

1.2.2 质子交换膜燃料电池工作原理

PEMFC 的工作原理如图 1-3 所示。氢气由阳极流道进入，经过扩散层到达催化层，在催化剂的作用下发生氧化反应：



分解出来的氢离子穿过质子交换膜到达阴极催化层，电子则通过外部电路到达阴极区域，在阴极侧，质子和电子与氧气分子结合生成水：



最后，未反应的气体和生成的液态水均由流道出口排出。总的反应式为：

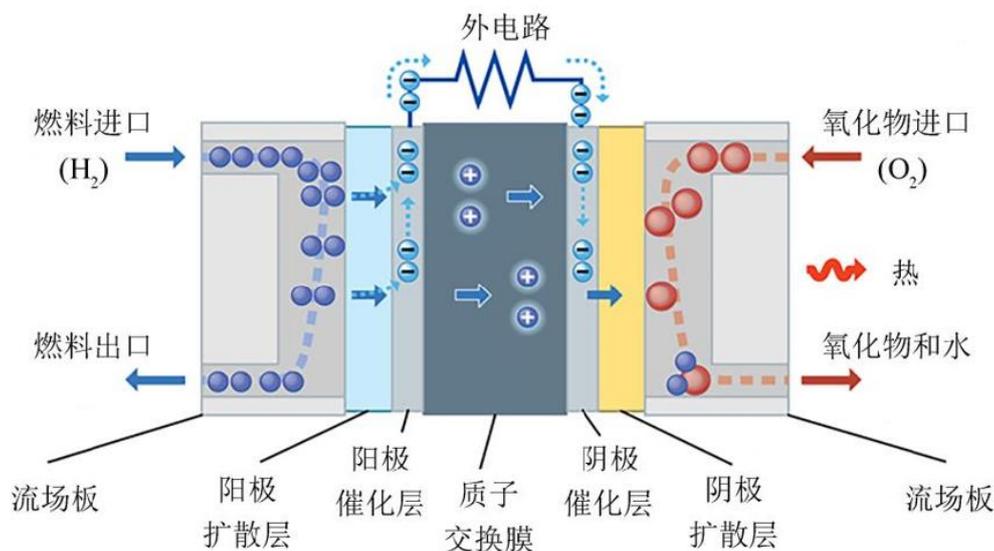


图 1-3 质子交换膜燃料电池工作原理图

在质子交换膜燃料电池（PEMFC）中，三相反应界面（Three-Phase Boundary, TPB）是电化学反应发生的关键区域。它是指：气体反应物（氢气/氧气）、电解质（质子导体）和催化剂（电子导体）三者接触并同时存在的位置区域，其组成与作用见表 1-2。

表 1-2 三相反应界面的组成与作用

组成成分	作用
气相（氢气或氧气）	提供反应物分子，参与氧化或还原反应
电解质相（如 Nafion 膜）	传导质子（H ⁺ ），使其从阳极流向阴极
电子导体相（通常是 Pt 等催化剂与碳载体）	传导电子至外电路或来自外电路
界面区域	反应物、电解质和电子同时接触的微区，是电化学反应唯一可发生的区域

1.2.3 质子交换膜燃料电池膜电极

由质子交换膜，催化剂层，气体扩散层共同组成了膜电极（MEA）。而这些零部件一般都是独立制备，然后在高温高压下进行压制处理。一个燃料电池正常运行所需的物质传输过程包含三种：

- (1) 质子从膜至催化剂；
- (2) 电子从电流收集器借助气体扩散层到达催化剂层；
- (3) 反应气体和产物在催化剂层和气体通道中进行传输。

1.3 基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电极性能评价国内外研究现状

集流板是 PEMFC 的重要组成部分，其质量约占燃料电池总重量的 60%，成本约占 30%^[8]。而影响着燃料电池整体性能的关键要素之一是刻在集流板上的流道，主要用于分配反应气体（ H_2 和 O_2 ）、排除生成的水，同时影响燃料电池的电化学性能、热管理和运行寿命。所以合理的流道设计可以提高燃料电池的整体效率，而不良的流道设计可能导致局部反应不均匀、水淹问题^[9,10]以及压力损失增大，从而降低燃料电池的性能和耐久性。

1.3.1 典型流场研究现状

在质子交换膜燃料电池性能的优化研究中，众多学者已展开对流场构型方面的探索性工作。不同流场之间性能存在着显著差异，如蛇形流场、直平行流场、交指型流场、网格型流场等。因其流场构型的简易制造特性而被广泛研究。流场结构如图 1-4 所示。

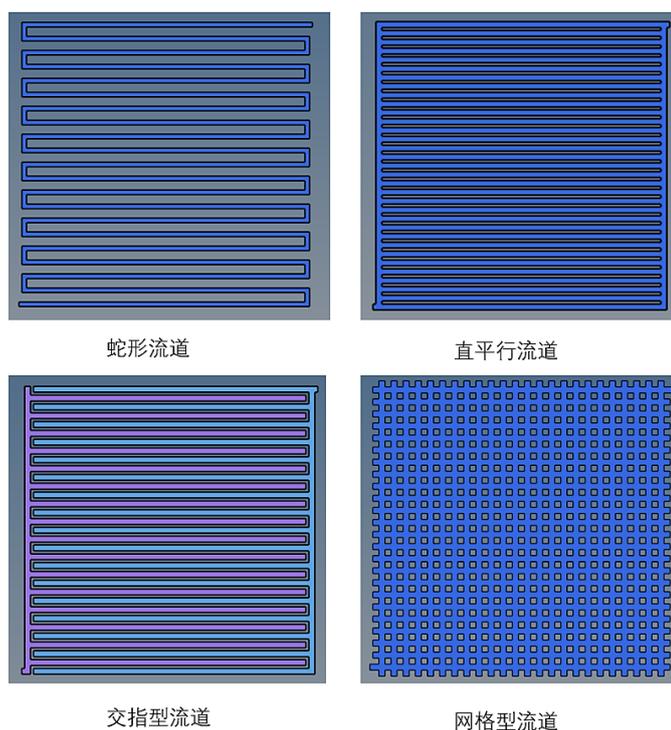


图 1-4 四种典型流场结构示意图

蛇形流场构型属于被广泛采用的类型之一。因流道弯曲且较长的流动路径，易形成扰流效应，可有效控制反应气体的输运、提高水管理能力，增强传质能力，降低局部热点，同时确保电池性能的稳定性。但是，对于大尺寸的电池板，由于气体流动路径长，且存在多个拐角，易导致较高的压力损失，另外蛇形流道是单

一路径，如果流道某一段出现气阻或局部水积聚，可能导致后续流道供气不足，导致产生的热量分布不均^[11,12,13]，降低该区域的反应效率。

直平行流场由多条平行排列的直流道组成，气体从入口进入后，在多个平行通道内流动，由于流速较低，可降低单一路径的压力损失，使得寄生功率较低^[14]。然而由于气体流速较低，水容易在流道内积聚，尤其是在出口处可能形成气阻，影响气体输运。同时由于各条流道的流动阻力可能不均衡，部分流道可能存在供气不足的情况，容易出现“死区”，导致电池局部性能下降。因此，Seydali^[15]的研究指出直平行流道只适用于反应物流量较大且压降要求较小的情况下。

交指型流道是一种非连续性构型，其进气流道与出气流道呈现交错排列特征，直接连通性在流道间并不存在，强制对流现象在气体进入扩散层过程中产生，反应速率由此获得提升，而水淹问题通过有效移除反应水得以缓解，浓差极化程度同时降低，整体性能表现提升明显^[16]。然而，扩散层阻力需要被气体克服在交指型流道中，较大压力损失往往随之产生，尤其在极端工况条件下更甚，反应气体与产物可能发生阻塞情况^[17]。

网格型流道是一种呈现出多通道交叉分布特征的构型，在流场设计中具有显著优势性。多个方向上交错排列着进气与出气路径，气体分布均匀性由此获得提升。生成水得以通过多方向流动并排出，水淹现象被有效防止。多个流动路径的存在使得单个通道的流动阻力减小，压力损失得以降低^[18]。然而，由于气体可沿多路径流动的特性，部分区域流速可能呈现较低状态，氧气扩散速率可能因此下降，燃料电池局部区域反应速率受影响的情况时有发生。

1.3.2 质子交换膜燃料电池膜电极性能研究现状

膜电极是电化学反应的重要场所，其制备工艺和材料会对电池性能产生重要影响^[19]，从制备工艺和结构设计优化的角度，MEA 可以分为三种类型，分别是 GDE 型、CCM 型和有序化型^[20,21,22]，如图 1-5 所示。在文献^[23,24]中被详细记载的，由气体扩散层（GDL）、催化剂层（CL）及质子交换膜（PEM）共同构成了第一代 MEA。其核心采用 Nafion[®]膜，但厚度较大（50-175 μm ），导致质子传导效率较低。催化剂层通常使用高铂载量 Pt/C 催化剂（4-10 $\text{mg Pt}/\text{cm}^2$ ），但利用率低，成本高昂。早期 MEA 的水管理能力较差，容易因水淹或脱水影响性能^[25]，耐久性有限，难以长期稳定运行。此外，第一代 MEA 的工作温度受限（60-80 $^{\circ}\text{C}$ ），影响整体效率。尽管存在催化剂成本高、水管理能力弱等问题，但它奠定了燃料电池技术的基础^[26]。第二代 MEA 在第一代基础上进行了优化，降低了铂载量（通常 $\leq 0.5 \text{ mg Pt}/\text{cm}^2$ ），提高催化剂利用率，减少燃料电池成本。质子交换膜更薄（ $\leq 50 \mu\text{m}$ ），降低内阻，提升质子传导性能。改进了水管理策略，引入微孔层

(MPL), 增强扩散层疏水性, 减少水淹问题。此外, 催化剂层采用合金催化剂或纳米结构, 提高耐久性和电化学反应活性, 工作温度扩展至 80-100℃, 整体性能更优^[27]。相对于 GDE 型 MEA 技术而言, CCM 型 MEA 的 CL 设计精度较高, 具有较低的界面电子电阻和质子电阻, 同时暴露出更多的催化活性位点, 提高了电极性能输出的可靠性和单位质量 Pt 的催化活性^[28]。第三代 MEA 进一步优化催化剂结构, 采用低铂或无铂催化剂 (如 Pt 合金、Pt 壳层结构、非贵金属催化剂), 大幅降低了成本。超薄质子交换膜 ($\leq 20 \mu\text{m}$) 减少内阻, 提高了质子传导效率^[29,30]。Zhang^[31]等人采用氢处理的二氧化钛纳米管 (H-TNT) 阵列作为高度有序的纳米电极支撑材料, 显著增强了电子传输能力。Tian^[32]通过一种实验方法, 以垂直排列形态存在的碳纳米管材料 (VACNTs) 作为载体, 制备获得了铂载量达到超水平的 MEA 组件。

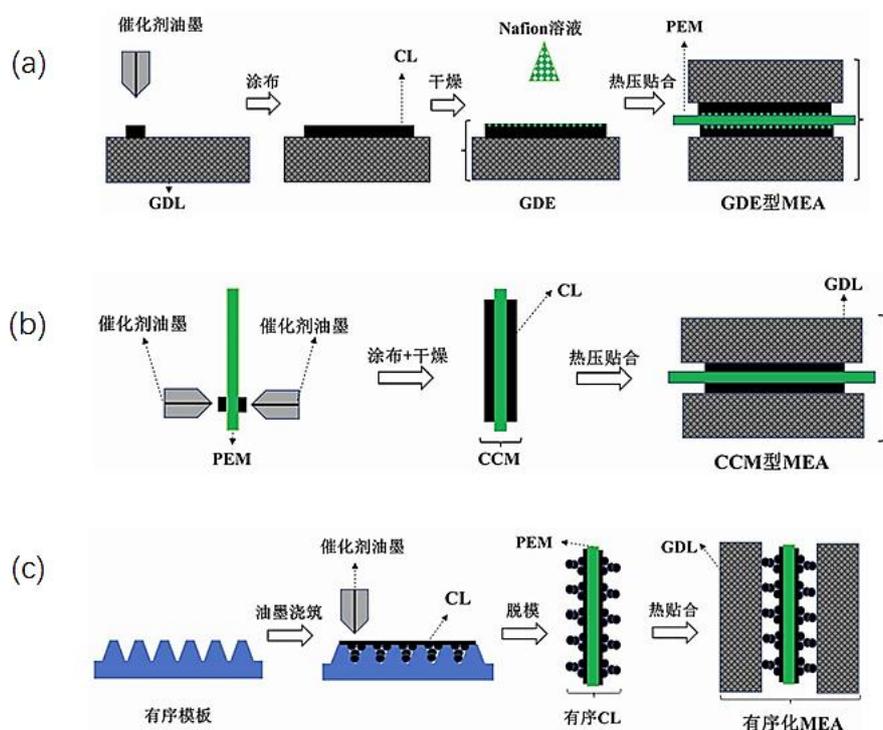


图 1-5 MEA 的三种设计 a)GDE 型 b)CCM 型 c)有序化型

膜电极 (MEA) 作为电化学反应发生的关键区域, 其性能表现对于整体燃料电池系统具有决定性影响作用。研究人员提出一种改进策略性方案, 即在碳纸与催化剂层之间引入水管理层结构, 以优化水分调控能力, 该层主要由碳以及疏水的聚四氟乙烯 (PTFE) 构成, 然后利用传感器监测电池运行过程中温度与湿度的变化, 对膜电极 (MEA) 性能的影响分析表明, 在碳纸与催化剂层之间引入水管理层能够显著提升 MEA 的整体性能^[33,34,35,36,37]。Zhigang^[35]研究发现, 在水管理层被引进到 MEA 结构中后, 可有效消除由于碳纸种类所造成的性能差异^[38]。Mirzazadeh^[34]通过极化曲线实验分析发现, 水管理层能够有效提升 MEA 在高电流

密度区域的性能。Liu^[36]等重点研究了水管理层的的水分调控作用，结果表明，水管理层能够有效改善电极内部的水分分布，减少水淹，同时还能有效防止质子交换膜的缺水现象以及阴极的水淹问题，从而改善 MEA 的整体性能。

膜电极 (MEA) 的性能主要受氢电极、质子交换膜及其制备方法的影响。在制备工艺固定的情况下，质子交换膜的选择至关重要。目前，NafionTM 系列质子交换膜依旧是主流隔膜材料^[39]。研究人员以 Nafion117 膜为研究对象，首先进行表面粗糙化预处理，然后将其浸泡在水与有机溶剂的混合溶液中，为降低膜电极组件制备环节中收缩现象的影响，开展循环伏安测试法 (cyclic voltammetry, CV) 与交流阻抗谱技术 (electrochemical impedance spectroscopy, EIS) 等系列实验。发现在高电流密度区域经过粗糙化处理的膜电极性能得到了显著提升。Hsu^[40]等人基于质子交换膜在溶剂中先膨胀并在干燥后恢复原始尺寸的特性，提出了“预溶胀”策略，该方法能够增强催化层与质子交换膜的结合强度和有效接触面积，扩大电化学反应的活性区域，并降低界面接触阻抗，从而进一步提高膜电极的整体性能。

Silva^[41]等人采用电流控制法^[42]和电位控制法^[43]对 MEA 进行活化，以实现其稳定的高性能。经活化处理后的材料，采用极化曲线测定法、线性扫描伏安技术 (LSV) 以及交流阻抗谱测试 (EIS) 等多种表征手段进行性能评估。活性面积和催化剂的活性显著增大，同时也改善了质子交换膜的性能。Yang^[44]和 Hu^[45]等人提出了一种三步活化方法，该方法基于阶梯式电流分布与恒定气体利用率，与传统活化方法的 I-V 曲线对比分析后发现，该方法显著提升了燃料电池的整体性能。三步法通过空隙挖掘效应和空隙溶胀效应来提升 MEA 的活化效率，这种机制有助于增加三相反应界面，从而在保持高催化活性的同时大幅降低 Pt 用量。

Qing^[46]等人对质子交换膜厚度影响 MEA 性能进行了研究，发现膜厚度对 MEA 性能影响显著，根据功率密度测试结果。在制备条件等同且铂载量相同的情形下，Nafion112 膜其厚度为 50 μm 时，最大功率密度达 1100 mW/cm^2 ，该数值约为采用 180 μm 厚度 Nafion117 薄膜的 2 倍。由于膜电极中的质子传递阻力随着膜厚度的减少而减小，所以薄膜能明显改善电池性能。Ohenoja^[47]等人对微孔层厚度和 PTFE 含量影响 MEA 性能进行了研究。实验实施于 60 $^{\circ}\text{C}$ 恒温条件下，采用 TGP-H-120 型碳纸材料作为基底载体，阳极催化剂负载量控制在 0.45 mg/cm^2 。研究表明，加入微孔层能有效缓解水浸现象，使蓄电池的电流密度达到最高值；当微孔层厚度由 38 μm 提升至 136 μm 时，电池性能表现先升后降，以 84 μm 的厚度表现最佳。在微孔层内部 PTFE 含量为 0 下，达到 570 mA/cm^2 电流密度时，电池性能呈现传质控制特征，而只有在 1500 mA/cm^2 的电流密度下，PTFE 含量为 20 wt% 时才会降至 0.5 V。

Bao^[48]等人借助于扫描电镜 SEM 和透射电镜 TEM 发现, 优化电极结构对提升 MEA 的性能是非常关键的。其中, GDL 承担着水传输的亲水通道和气体传输的疏水通道, 在 PEMFC 高功率运行时^[49]显得尤为重要。CL 是较为致密的堆积层, 其内部的传输阻力主要来源于纳米孔隙结构及催化活性位点处离聚物附着薄膜的渗透阻力^[50]。理想的 MEA 结构不仅具有合理的孔隙结构以保证水和气传输的高效进行, 还具有良好的反应界面结构以保证质子和电子的快速传导。其中, 离聚物高分子链以高透性的纳米纤维丝在催化剂 Pt 表面网络缠绕, 形成丰富的气体通道和质子通道。均匀的离聚物网络状分布既保证了高的质子传导性能, 也不影响催化活性位点的局部气体传输^[51]。因此, 在电极结构中构建更加高效的质子、电子和气体传输通道是实现高性能 MEA 开发的重要方向之一。

Alink^[52]等人利用 X 射线衍射 XRD, 分析了阴极 CL 中的各种组分(如离聚物含量、催化剂负载和催化剂类型)对 O₂ 和 MEA 的影响, 表明 CL 中最佳的离聚物含量取决于 MEA 的运行条件以及催化剂载体的特性。Braaten^[53]等人也通过在 CL 中引入高透氧性离聚物来强化电极内部的局部氧传输和催化反应活性, 表明 CL 在低电流密度下比典型离聚物的性能提高了 67%。Shahgaldi^[54]等人设计了具有离聚物分布梯度的阴极 C 来提高传质性能, 表明靠近 PEM 侧的梯度含量离聚物双层设计产生了更多的孔结构和降低了质子电阻。Dong^[55]等人设计了分层皱纹结构 CL/PEM 界面来研究其对电池性能的影响, 与典型界面相比, 该分层褶皱界面结构有利于提高电极的电化学活性面积。Choi^[56]等人通过电喷雾沉积将多功能树枝 Nafion 结构引入到 PEM 和 CL 之间来扩大二者的界面接触面积, 在 C 与 GDL 之间形成了微尺度的空隙, 增强了电极界面中水和气的传输能力。Feng^[57]等人通过模板法工艺设计了具有规则排列的亲、疏水性通道结构的 MPL 提高 MEA 的水和气管管理能力, 相比无规则结果的 MPL, 有序结构的 MPL 有利于水通过亲水通道传输和气体通过疏水通道传输两者互不干扰且有序进行, 其电池峰值功率密度提高了 30%。Liang^[58]等人使用碳基凝胶在 MPL 表面设计出微米级的有序压痕结构以促进 MEA 中的传质, 当有序压痕的方向垂直于气体通道的方向时, MPL 有序压痕结构可以有效缩短水转移路径。Huang^[59]等人通过蒙特卡洛模拟计算来研究 MP 和 C 之间界面的粗糙程度对电极中热量和物质传输的影响, 表明电极中热阻和扩散系数均随 MPL/CI 界面粗糙度的增加而减小。Shang^[60]等人在 MPL 结构中引入的裂缝并研究裂缝程度对水和气体传输管理的影响, 表明随着 MPL 交叉裂纹面积比率的增加, MEA 中氧传输阻力随之降低, 电池输出性能也随之得到提升。

以上研究进展表明, 通过在膜电极结构中添加水管理层、选择合适的质子交换膜及其厚度, 对 MEA 进行活化, 以及对电极内部结构包括界面形态、疏水特性、孔隙结构进行优化, 进而利用 I-V 曲线、极化曲线、电化学阻抗谱、循环伏

安法、水管理分析来对 MEA 的性能进行评估，然而这些测试方法大都是在标准实验室环境下进行的，未能完全反映实际使用条件下的复杂性，也无法全面评估膜电极的整体性能。因此，本研究旨在研究多种因素（流场类型结构尺寸、运行工况参数与 MEA 材料特性参数）耦合下对 MEA 性能的影响，以找到合适的模型来对 MEA 性能进行整体评估。

1.4 研究内容

根据上述对国内外研究现状的总结和分析，传统的 MEA 性能检测方法虽然能够在一定程度上反映 MEA 的性能，但仍存在一些不足之处：

(1) 传统的检测方法大都侧重于单一因素对 MEA 性能的影响，而实际的 PEMFC 运行过程是一个多因素相互作用的复杂系统，流场结构、运行工况以及膜电极材料等因素之间存在着强烈的耦合关系，对这些多因素耦合作用的深入研究还相对较少。

(2) 传统模型受限于假设简化与孤立变量分析，难以全面量化 MEA 综合性能，且跨流场结构的普适性不足。

针对上述研究缺口，本文提出了一种多维度耦合分析框架。通过整合流场结构参数、运行工况与 MEA 材料特性的协同作用，突破传统单一因素研究的局限，并构建基于多物理场仿真的数据驱动模型，实现跨流场、多工况下 MEA 性能的标准化评价。本文整体研究思路如图 1-6 所示：

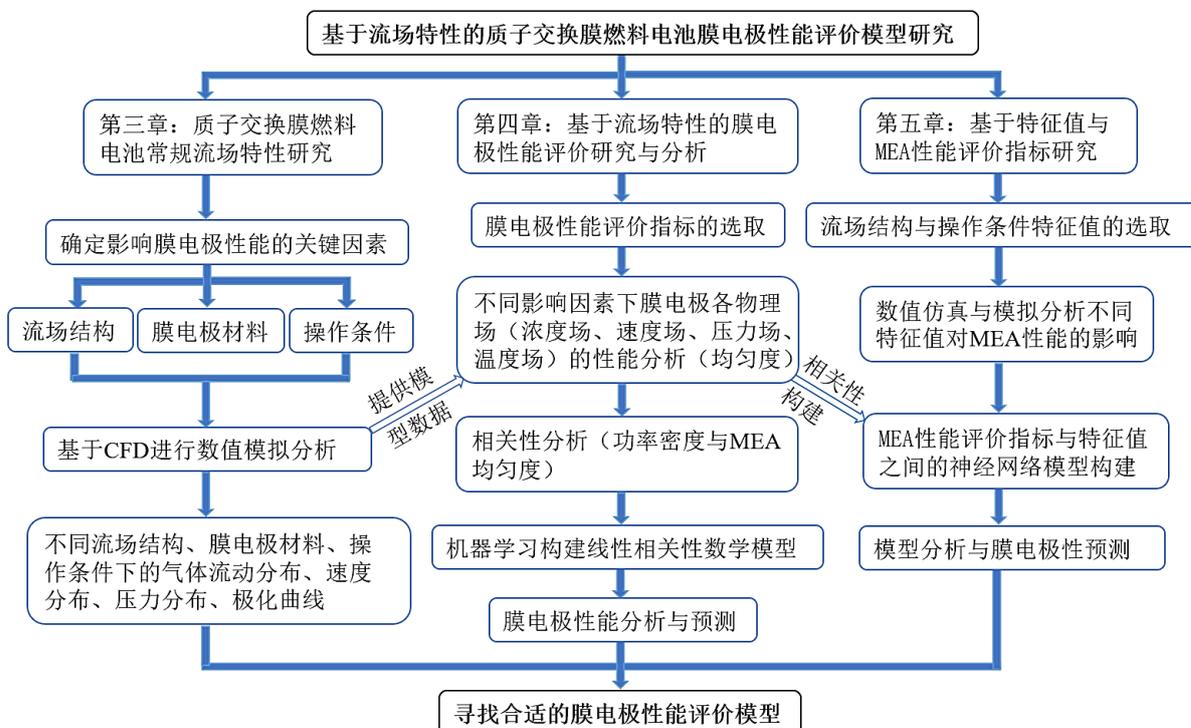


图 1-6 本文研究思路图

具体内容如下：

(1) 建立了包括基本守恒方程、电化学反应方程以及液态水的形成与输运方程在内的质子交换膜燃料电池数学模型。首先运用 SolidWorks 软件对典型流道（蛇形流道、直平行流道、交指型流道、网格型流道）质子交换膜燃料电池进行 3D 建模，并进行网格划分。接着运用 CFD 软件 Fluent 在合适的边界条件和流体物性参数来进行模拟，并与实验结果对比，验证模型的有效性。最后通过改变流道的结构尺寸（流道宽度、深度、肋宽等），运行工况（温度、压力、气体流量、湿度等）和 MEA 材料特性进行数值模拟，分析了不同影响条件下膜电极内部的浓度分布、速度分布、温度分布、压力分布以及电流密度分布。发现在一定范围内减小流道深度，适当减小流道宽度和肋宽，同时适当提高反应区温度、进气压力和气体流量，控制合适的湿度均可有助于提升 MEA 性能。

(2) 为了寻找表征 MEA 性能的描述符，研究了 MEA 内部物理场（浓度场、速度场、压力场、温度场）的分布特性，并将流场均匀度作为评价 MEA 性能的指标，分别计算了不同流场结构、不同膜电极材料、不同运行工况下 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度和输出功率密度。以不同影响因素下 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度为输入值，输出功率密度为目标函数，利用机器学习建立起了 MEA 均匀度与目标函数之间的线性关系，即在 MEA 材料固定下，改变流道的结构尺寸和模拟工况，其对应的输出电流密度与得到的 MEA 的均匀度的比值是一个定值。同时将 K 值的大小与 MEA 的材料属性进行了数值关联，验证了 MEA 性能评价描述符的合理性，即斜率 K 反映的就是 MEA 自身的材料特性。

(3) 为了更加高效的评价 MEA 的性能，从特征值的角度出发，根据不同流场结构和运行工况的特点，提取了流场结构和运行工况特征值，采用随机森林法分析了不同特征值对输出功率密度的影响，并以流场结构和运行工况特征值为变量，MEA 均匀度为目标函数，利用神经网络建立流场结构和运行工况特征值与 MEA 均匀度之间的映射关系，通过分析不同结构和运行工况特征值，可对不同膜电极材料下的 MEA 性能进行评估和预测，以此来寻找性能比较好的膜电极材料，进而提高燃料电池的输出性能。

第 2 章 质子交换膜燃料电池基础理论与控制方程

质子交换膜燃料电池的运行机理涉及多物理场耦合作用，包括气体扩散传质、焦耳热传导、离子电荷迁移及水相态转变等复杂过程。为精确描述燃料电池在动态工况下的传输特性与电化学反应特征，本文构建了基于多相流理论的三维稳态数值模型，该仿真体系整合了质量/动量/能量守恒方程、电极反应动力学方程以及液态水相变迁移过程控制方程^[61]。

2.1 基本守恒方程

2.1.1 质量守恒方程

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u}) = S_m \quad (2-1)$$

式中， ε 为多孔介质的孔隙率； ρ 为流体密度； \mathbf{u} 为流体矢量； S_m 为质量源项； t 为时间。

2.1.2 动量守恒方程

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\varepsilon\nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon\mu\nabla\mathbf{u}) + S_u \quad (2-2)$$

式中， p 为压力； μ 为动力粘度； S_u 为动力源项。右侧前两项分别表示由压力引起的动量传递和由粘度引起的动量传递。对于阴极和阳极流道，动力源项为 0；而对于多孔介质扩散层和催化层，动力源项可以表示为：

$$S_u = \frac{\varepsilon^2\mu}{K_p}\mathbf{u} \quad (2-3)$$

式中， K_p 为多孔介质的渗透率。

2.1.3 能量守恒方程

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon\rho c_p \mathbf{u} T) = \nabla \cdot (k^{eff}\nabla T) + S_Q \quad (2-4)$$

式中， c_p 表示定压比热容； k^{eff} 表示有效热导率； T 表示温度； S_Q 表示能量源项。能量源项包括电化学反应产生的热量（ S_{reaction} ）、相变潜热（ S_l ）、欧姆热（ S_g ）和过电位热（ S_η ）。其表达式可表示为：

$$S_Q = S_{\text{reaction}} + S_g + S_l + S_\eta = \beta S_{H_2O} h_{\text{reaction}} + i^2 R_{\text{ohm}} + r_w h_{1g} + S_{a,c} \eta \quad (2-5)$$

式中， β 为化学能转换为热能的效率； S_{H_2O} 为气态水生成速率； h_{reaction} 为反应焓； i 为面积电流密度； R_{ohm} 为欧姆电阻率； r_w 为水发生相变时的速率； h_{1g} 为水相变时的焓值； $S_{a,c}$ 为阴阳极交换电流密度； η 为过电势。

2.1.4 组分守恒方程

$$\frac{\partial(\varepsilon c_k)}{\partial t} + \nabla(\varepsilon \mathbf{u} c_k) = \nabla \cdot (D_k^{\text{eff}} \nabla c_k) + S_k \quad (2-6)$$

式中， c_k 为组分浓度； D_k^{eff} 为组分有效扩散系数； S_k 为组分源项。由于电化学反应是在催化层中发生，因此，对于流道和扩散层， $S_k=0$ 。在催化层中， S_k 可表示为：

$$S_{H_2} = \frac{-M_{H_2}}{2F} R_a \quad (2-7)$$

$$S_{O_2} = \frac{-M_{O_2}}{4F} R_c \quad (2-8)$$

$$S_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}}{2F} R_c \quad (2-9)$$

式中， R_a 为阳极电流密度， R_c 为阴极电流密度， F 为法拉第常数 (96487C/mol)。

2.2 电化学反应

2.2.1 电荷守恒方程

$$\nabla \cdot (\sigma_e \nabla \phi_e) + S_e = 0 \quad (2-10)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_m \nabla \phi_m) + S_m = 0 \quad (2-11)$$

式中， σ_e 为固相电导率； σ_m 为膜相电导率； ϕ_e 为固相电势； ϕ_m 为膜相电势； S_e 为电子电流源项； S_m 为质子电流源项。根据电荷守恒原理， $S_e + S_m = 0$ ，对于阳极催化层，有 $S_e = -S_m < 0$ ；对于阴极催化层，有 $S_e = -S_m > 0$ ；其余区域， $S_e = S_m = 0$ 。

2.2.2 Butler-Volmer 方程

$$R_a = j_{a,ref} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2}^{ref}} \right)^{\lambda_a} \left[e^{\frac{\alpha_a F \eta_a}{RT}} - e^{-\frac{\alpha_c F \eta_c}{RT}} \right] \quad (2-12)$$

$$R_c = j_{c,ref} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ref}} \right)^{\lambda_c} \left[e^{\frac{\alpha_c F \eta_c}{RT}} - e^{-\frac{\alpha_a F \eta_a}{RT}} \right] \quad (2-13)$$

式中， R_a 为阳极电化学源项； R_c 为阴极电化学源项； $j_{a,ref}$ 、 $j_{c,ref}$ 分别为阳极和阴极的参考电流密度； λ_a 、 λ_c 分别为阳极和阴极的反应物浓度系数； C_{H_2} 、 C_{O_2} 、 $C_{H_2}^{ref}$ 、 $C_{O_2}^{ref}$ 分别为阳极和阴极的反应物浓度与反应物参考浓度； α_a 、 α_c 分别为阳极和阴极的转移系数； η_a 、 η_c 分别为阳极和阴极的活化过电势。

2.2.3 气体组分在多孔介质中的扩散方程

$$D_i = \varepsilon^{1.5} (1-s)^{r_s} D_i^0 \left(\frac{p_0}{p} \right)^{\gamma_p} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{r_t} \quad (2-14)$$

式中， ε 为孔隙率， s 为液态水的饱和度， D_i^0 为组分 i 在参考温度 T_0 及压力 p_0 时的扩散系数， r_s 为饱和系数， γ_p 为压力因子， r_t 为温度指数。

2.2.4 液态水形成与输运方程

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_l s)}{\partial t} + \nabla(\rho_l \vec{u}_l s) = r_w \quad (2-15)$$

$$r_w = c_r \max \left[(1-s) \frac{p_w - p_{sat}}{RT} M_{H_2O} - s \rho_l \right] \quad (2-16)$$

式中， r_w 为水凝结率； c_r 为凝结速率常数； s 为液态水体积分数； p_w 为水蒸气压力； p_{sat} 为水的饱和蒸气压； ρ_l 为水的密度。

2.3 燃料电池内部流场均匀度及输出功率

2.3.1 流场均匀度

在评价质子交换膜燃料电池内部物理场的分布特性时，需要对物理场的均匀性进行计算，以温度场为例，其计算公式为：

$$c_v = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - x)^2}{(n-1)}}}{x} \quad (2-17)$$

式中， x 为温度在该表面上的平均值，表达式为：

$$x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (2-18)$$

式中， c_v 为温度均匀度， x_i 为该表面上的变量分布， i 表示有 n 个网格面， n 表示网格数。

2.3.2 燃料电池输出功率

输出功率指燃料电池系统所能提供的电功率。计算公式如下：

$$P_{out} = VI \quad (2-19)$$

式中， V 为开路电压， I 为在开路电压下的燃料电池系统的电流密度。

2.3.3 均方误差 MSE 和回归系数 R^2

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\bar{y}_i - y_i)^2 \quad (2-20)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - f_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (2-21)$$

其中 \bar{y}_i 为实际输出的平均值，计算结果 MSE 数值越低或者 R^2 越接近于 1 代表该模型的预测性能越好。

2.3.4 MEA 均匀度

$$y = k_1 \prod_{i=1}^6 a_i \cdot k_2 \prod_{i=1}^6 b_i \cdot k_3 \prod_{i=1}^6 c_i \cdot k_4 \prod_{i=1}^6 d_i \quad (2-22)$$

式中， $k_1=1.05$ ， $k_2=0.9$ ， $k_3=1.1$ ， $k_4=0.925$ ； a 代表浓度场均匀度， b 代表速度场均匀度， c 代表压力场均匀度， d 代表温度场均匀度；数字 1-6 分别表示 channel-a 与 gdl-a，channel-c 与 gdl-c，gdl-a 与 cl-a，gdl-c 与 cl-c，cl-a 与 mem，cl-c 与 mem 的接触面。

2.3.5 最小-最大归一化

$$X' = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (2-23)$$

式中， X 是原始数据， X' 是归一化后的数据。

2.3.6 MEA 雷达图面积

$$S = \sum_{i=1}^n s_i \quad (2-24)$$

其中 i 为 MEA 组件， s_i 为 MEA 组件各项属性归一化处理后求得的雷达图面积。

2.4 质子交换膜燃料电池物性参数模型

燃料电池内部工作过程具有多物理场强耦合特性，其数值模型中关键物性参数（如催化层电荷转移系数等）缺乏标准化数据库支撑。在仿真建模过程中，需通过多维度参数辨识方法精确获取质子膜电极组件（包含质子交换膜、催化剂层、气体扩散层）与双极板等核心部件的本构参数，下文将对此展开系统论述。

质子交换膜燃料电池中，作为阳极反应物的是氢气组分，阴极侧则通常采用空气或纯氧作为反应介质。在阳极多孔传输层至催化层的物质输运过程中，氢气分子遵循多孔介质扩散传输机制，最终在催化剂三相界面活性位点发生电化学反应解离反应，解离产物为活化质子及自由电子，水分子（气态或液态形态）随之生成并伴随热量释放。由此可见，质子交换膜燃料电池运行过程涉及反应气体流动特性、传热机制与传质行为等多物理场耦合作用。密度、粘度、比热容、热导率及扩散系数等构成上述物质的物性参数体系。

处于不同压力条件、温度环境、相对湿度水平及组分浓度边界下的氢气、氧气（空气）与水蒸气等反应介质，其物性参数表现出显著的状态依赖性特征。

2.4.1 密度

对于压力变化很小，可以忽略的情况，采用如下公式：

$$\rho = p_{\text{op}} / \frac{R}{M} T \quad (2-25)$$

对于可压缩理想气体，采用如下公式：

$$\rho = (p_{\text{op}} + p) / \frac{R}{M} T \quad (2-26)$$

式中， p_{op} 为当前操作压力 (Pa)； R 为气体常数 (J/(kg·K))； M 为组分的分子量 (kg)； T 为温度 (K)； p 为当地的相对压力 (Pa)。

2.4.2 粘度

如果温度变化比较大，粘度 μ 一般是温度的函数，以多项式表示为

$$\mu(T) = A_0 + A_1T + A_2T^2 + \dots \quad (2-27)$$

式中， A_0 ， A_1 ， A_2 为系数，如果温度变化较小，粘度可以是常数。

2.4.3 比热

如果温度变化比较大，比热 c_p 一般是温度的函数，以多项式表示为

$$c_p(T) = B_0 + B_1T + B_2T^2 + \dots \quad (2-28)$$

式中， B_0 ， B_1 ， B_2 为系数，如果温度变化较小，比热可以是常数。

2.4.4 热导率

如果温度变化比较大，热导率一般是温度的函数，以多项式表示为

$$k_g = C_0 + C_1T + C_2T^2 + \dots \quad (2-29)$$

式中， C_0 ， C_1 ， C_2 为系数，如果温度变化较小，热导率可以是常数。

2.4.5 扩散系数

单组份气体的自扩散系数

$$D_A = \frac{2}{3\pi^{2/3}d^2p} \left(\frac{K_b^3 T^3}{M} \right)^{1/2} \quad (2-30)$$

双组份系统的互扩散系数

$$D_{AB} = 1.86 \times 10^{-3} T^{3/2} \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2} \frac{1}{p\sigma_{AB}^2\Omega} \quad (2-31)$$

式中， d 为分子直径 (m)，即分子之间的有效作用距离； K_b 为玻尔兹曼常数 (J/K，约等于 1.38×10^{-23})； σ_{AB} 为碰撞直径 (m)； Ω 为碰撞积分； T 为气体的绝对温度 (单位：K)； p 为气体的压力 (Pa)； M 为气体分子的质量 (kg)。

2.5 边界条件及模型假设

2.5.1 边界条件

反应气体流速在阴阳极流道进口处呈现差异，与化学计比、参考电流密度、质子交换膜几何面积参数、流道横截面积相关。具体可通过以下公式计算：

$$u_{in,a} = \zeta_a \frac{i_{max}}{2F} A_m \frac{1}{\omega_{H_2,in}} \frac{RT_{in}}{p_{in,a}} \frac{1}{A_{ch}} \quad (2-32)$$

$$u_{in,c} = \zeta_c \frac{i_{max}}{4F} A_m \frac{1}{\omega_{O_2,in}} \frac{RT_{in}}{p_{in,c}} \frac{1}{A_{ch}} \quad (2-33)$$

式中， i_{max} 为最大平均电流密度， ζ 为化学计量数， A_m 为电池活性面积， A_{ch} 为流道进口截面积， p 为气体的压力 (Pa)， T 为气体的绝对温度 (单位：K)， R 为气体常数 (J/(kg·K))。

2.5.2 模型假设

为了简化数值模拟过程，对 PEMFC 的计算模型做出以下假设：

- (1) PEMFC 在稳态下工作；
- (2) PEMFC 内的气体混合物为理想气体；
- (3) 流道内气体的流动均为层流和不可压缩流动；
- (4) 所有多孔介质视为均匀且各向同性；
- (5) 忽略重力效应；

2.6 求解策略

在本研究的后续计算过程中，数值模拟的实现主要依赖于 Ansys 这一商业流体计算软件包。针对单体燃料电池的全流场计算问题，Fluent 软件内置的 PEMFC 模块被用于方程的求解工作。采用有限体积法为基础的双精度求解技术，上述控制方程组的数值解得以获取。对于速度场与压力场的耦合现象，Simple 算法被选择作为主要的处理手段。二阶迎风型插值函数在离散化过程中得到应用。为提升收敛特性方面的表现，所有控制方程均配置了 F-cycle 型多重网格技术，同时引入双共轭速度梯度稳定法以增强数值稳定性。压力-速度耦合关系的处理采用 PISO 格式实现，微分方程的离散则运用二阶迎风格式完成。

2.7 本章小结

这一章主要构建了一个三维、稳态、多相流的质子交换膜燃料电池数学模型。同时加入了描述电化学反应的动力学方程以及水分子生成与传输的相关方程。为

为了更好地求解这些耦合方程，详细设定了模型的边界条件，并对一些复杂过程做了必要的简化假设，为接下来进行质子交换膜燃料电池的数值模拟研究打下了重要的理论基础。

第 3 章 基于典型流场 MEA 性能的仿真建模与分析

本章从典型流道质子交换膜燃料电池的流道出发，系统开展了蛇形流道、直平行流道、交指型流道及网格型流道的三维仿真建模研究。通过对比分析了流道截面尺寸、肋宽比、流道间距等关键结构参数对膜电极组件（MEA）内反应气体传输特性及电化学性能的影响机制，探究了流道几何特征对 MEA 性能的影响。本研究通过多工况数值模拟获取的流场动态数据，为后续开展 MEA 性能评价模型的探索提供了基础数据库支撑。

3.1 模型建立

3.1.1 几何模型

构成质子交换膜燃料电池计算域共计九部分。主要涉及集流板阳极侧与阴极侧、多孔扩散层结构、催化反应层区域以及作为核心部件的质子交换膜。以蛇形流道为例，完整的单电池几何模型 2 维图如图 3-1（a），图 3-1（b）为计算域。流道的几何结构由上底宽度 a 、下底宽度 b 、肋宽度 c 和流道高度 h ，如图 3-2 所示。模型的几何参数见表 3-1。

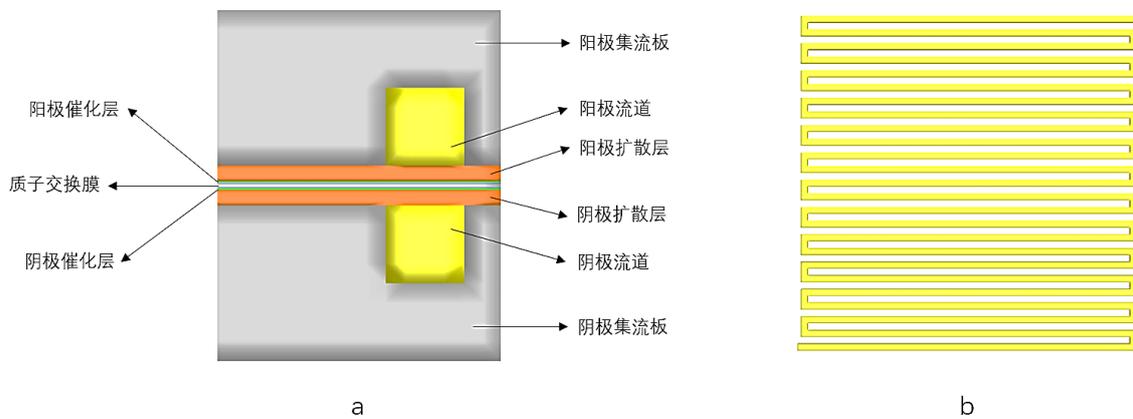


图 3-1 a)几何模型 2D 图 b)计算域

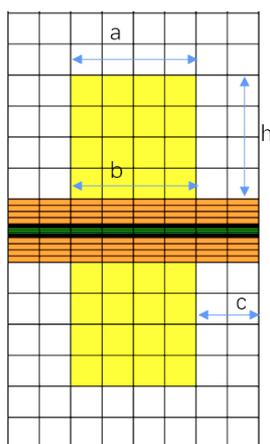


图 3-2 蛇形流道 PEMFC 截面结构

表 3-1 几何模型参数

参数	数值
极板尺寸(mm)	50×50
集流板高度(mm)	2
阳极扩散层高度(mm)	0.2
阴极扩散层高度(mm)	0.2
阳极催化层高度(mm)	0.01
阴极催化层高度(mm)	0.01
质子交换膜厚度(mm)	0.05

为了增加流道的结构多样性，主要通过改变流道宽度与肋宽的比值，同时改变流道的深度，共有以下四种形式：

(1) 流道宽度：肋宽度=1：1（肋宽度为 0.5 mm），改变流道的深度，分别为 1.2 mm，1 mm，0.8 mm，0.6 mm，0.5 mm，0.4 mm，0.3 mm 其余几何模型参数与表 3-1 保持一致。

(2) 流道宽度：肋宽度=2：1（肋宽度为 0.5 mm），改变流道的深度，分别为 1.2 mm，1 mm，0.8 mm，0.6 mm，0.5 mm，0.4 mm，0.3 mm 其余几何模型参数与表 3-1 保持一致。

(3) 流道宽度：肋宽度=3：1（肋宽度为 0.5 mm），改变流道的深度，分别为 1.2 mm，1 mm，0.8 mm，0.6 mm，0.5 mm，0.4 mm，0.3 mm 其余几何模型参数与表 3-1 保持一致。

(4) 流道宽度：肋宽度=1：2（肋宽度为 0.5 mm），改变流道的深度，分别为 1.2 mm，1 mm，0.8 mm，0.6 mm，0.5 mm，0.4 mm，0.3 mm 其余几何模型参数与表 3-1 保持一致。

(5) 流道宽度：肋宽度=1：3（肋宽度为 0.5 mm），改变流道的深度，分别为 1.2 mm，1 mm，0.8 mm，0.6 mm，0.5 mm，0.4 mm，0.3 mm 其余几何模型参数与表 3-1 保持一致。

直平行流道、交指型流道、网格型流道的几何模型参数与蛇形流道结构保持一致，改变尺寸方式同为上述四种形式。

3.1.2 边界条件及工作参数

在仿真计算中，边界条件的设置与计算是否收敛密切相关，直接影响计算结果的准确性。以蛇形流道为例，表 3-2 为单体蛇形流道燃料电池的运行参数及操作条件，阳极端面流场板电势设置零，阴极流场板电势设置从低到高 0.2 V-0.9 V，不同电压设置相同的收敛次数。本文中全部流场均设置为相同运行参数以及操作条件，由此得到不同流场的极化曲线。阴阳极入口处，采用流量进口条件的为模型。压力边界条件则被应用于出口处。

表 3-2 运行参数及操作条件

参数	数值	参数	数值
运行温度(K)	343	水扩散系数(m ² /s)	7.35×10 ⁻⁵
运行压力(Pa)	101325	扩散层孔隙率	0.4
出口背压(Pa)	0	催化层孔隙率	0.3
开路电压(V)	0.7	阴/阳极反应气体相对湿度(%)	100
阴/阳极入口温度(K)	343	阳极参考交换电流密度(A/m ²)	10
氢气过量系数	1.5	阴极参考交换电流密度(A/m ²)	7500
氧气过量系数	2	阳极浓度系数	0.5
阳极进气温度(K)	343	阴极浓度系数	1.0
阴极进气温度(K)	343	阳极电荷转移系数	1.0
氢气扩散系数(m ² /s)	1.1×10 ⁻⁴	阴极电荷转移系数	1.0
氧气扩散系数(m ² /s)	3.2×10 ⁻⁵	膜质子传导系数	1
阴/阳极扩散层接触角	120	阴/阳极催化层接触角	100
氢气参考浓度(kmol/m ³)	1	氧气参考浓度(kmol/m ³)	1

质子交换膜燃料电池（PEMFC）的膜电极性能受多种运行参数的影响，为了探究不同的运行参数对质子交换膜燃料电池膜电极性能的影响，现通过改变运行的边界条件，以此来增加运行工况的多样性，部分参数与表 3-2 相同，其余主要操作参数根据 Fluent 内置 PEMFC 模型板块计算出来的，具体数值见表 3-3。

表 3-3 运行工况主要操作参数

运行温度(K)	气体压力(atm)	阳极水的质量分数	阳极氢的质量分数	阴极水的质量分数	阴极氧的质量分数	阳极质量流量(kg/s)	阴极质量流量(kg/s)	电势(V)
303	1	0.1039	0.8960	0.0160	0.2293	1.78e-06	5.88e-05	0.2
313	1.5	0.1332	0.8668	0.0212	0.2281	2.02e-06	5.91e-05	0.3
323	2	0.1679	0.8320	0.0278	0.2265	2.12e-06	5.95e-05	0.4
333	2.5	0.2084	0.7915	0.0363	0.2246	2.25e-06	5.99e-05	0.5
343	3	0.2544	0.7455	0.0469	0.2221	2.42e-06	6.07e-05	0.6
353	3.5	0.3053	0.6946	0.0602	0.2189	2.63e-06	6.15e-05	0.7
363	4	0.3603	0.6396	0.0769	0.2151	2.89e-06	6.26e-05	0.8
373	4.5	0.4181	0.5818	0.0977	0.2102	3.63e-06	6.41e-05	0.9

3.1.3 膜电极材料特性

膜电极材料属性对 PEMFC 的整体性能有着重要影响。优化质子交换膜、催化剂层、气体扩散层和电子导电层的材料特性，不仅可以提高 PEMFC 的功率输出，还能提高其稳定性、耐久性和效率。为此本次模拟通过改变膜电极的材料特性，探究五种膜电极材料特性对于燃料电池最终输出性能的影响。其特性参数见表 3-4。

表 3-4 MEA 特性参数

MEA 种类	部件名称	密度 [kg/m ³]	C _p 比热 [J/(kg·k)]	热导率 [w/(m·k)]	气体扩散率[m ² /s]	导电率 [S/m]
MEA1	GDL(difflayer-default)	2719	871	5	1.00e-09	5000
	Catalyst(catalyst-default)	2719	871	80	1.00e-11	5000
	MEM(electrolyte-default)	2719	871	0.2	1.00e-10	1.00e-15
MEA2	GDL(碳纳米管)	1300	1000	2000	1.00e-10	1.00e+5
	Catalyst(铂镍合金)	14000	130	50	1.00e-10	2.00e+6
	MEM(聚醚醚酮)	1350	1600	0.3	1.00e-12	1.00e-12
MEA3	GDL(铝泡沫)	800	1500	10	1.00e-08	10000
	Catalyst(碳纳米管)	1300	1000	2000	1.00e-10	1.00e+5
	MEM(聚醚砜)	1100	1300	0.2	1.00e-10	1.00e-14
MEA4	GDL(镍泡沫)	400	800	60	1.00e-08	1.00e+6
	Catalyst(石墨烯)	1500	730	3000	1.00e-12	10000
	MEM(聚苯乙烯磺酸)	1240	1200	0.15	1.00e-11	1.00e-12
MEA5	GDL(碳纸)	1500	700	3	1.00e-09	1000
	Catalyst(Pt)	21450	133	41	1.00e-12	9.6e+5
	MEM((C ₂ F ₄) _n)	2000	800	0.25	1.00e-11	1.00e-15

3.2 网格独立性检验及模型验证

网格划分作为数值模拟中重要的组成部分之一，对仿真算例的准确性以及收敛程度具有重要影响。在计算流体力学离散化方法中，网格拓扑结构可分为拓扑结构化离散单元与拓扑非结构化离散单元两大体系。前者以六面体单元为典型代表，后者则以四面体单元为主要实现形式。数值分析研究表明，六面体单元相较于四面体单元在高阶插值精度方面具有显著优势，这源于其规则的拓扑排列特性可有效抑制各向异性误差累积，相较于四面体单元能够提供更优的数值收敛性特征。

对单一蛇形流场板的单体电池模型进行网格划分，采用 Hypermesh 对模型进行网格划分，共计生成七种网格数量。图 3-3 为蛇形流场中的一种，其中流道宽 0.5 mm，流道深度 0.4 mm，肋宽 0.5 mm，生成的网格数量分别为 62 万、96 万、124 万、156 万、185 万、226 万、253 万，在 0.65V 电压下得出阴极极板端面平均电流密度。由图 3-5 可知，当网格数量由 185 万增多到 253 万时，电流密度的变化仅为 0.25%。考虑到计算效率性，本章采用 185 万网格进行仿真模拟。

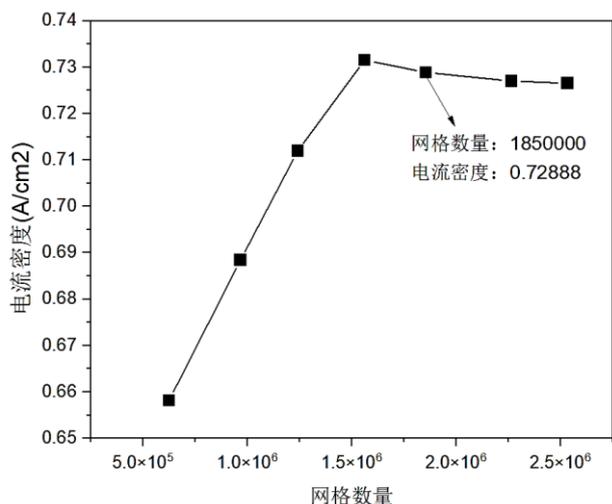


图 3-3 网格独立性验证

在模型验证研究中，采用多物理场耦合数值模型输出的极化特性曲线与 He^[62] 等人的实验结果进行了交叉验证，结果如图 3-4 所示。分析表明：在电流密度小于 0.7 A/cm²，数值预测结果与实验测量值基本呈现一致性；但当电流密度大于 0.7 A/cm²，模拟值较实验值偏低。这是由于在高电流密度区，可能会导致膜的水分不足或积水，进而影响了质子导电性，氢气供应也可能变得不足，特别是在反应气体流速和扩散受限的情况下，导致模拟结果偏低。

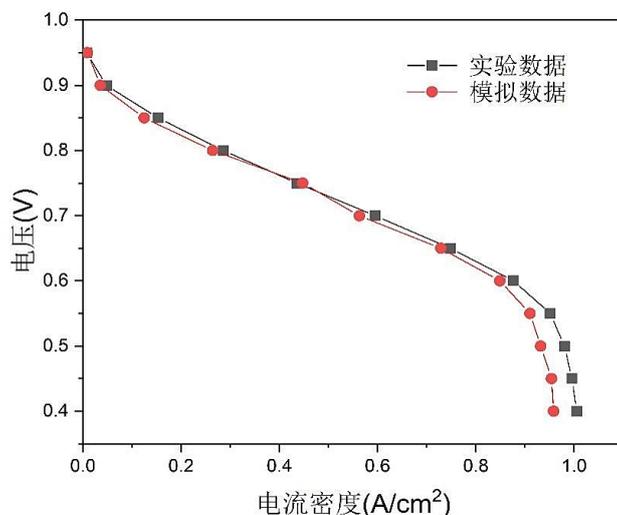


图 3-4 数值模拟与实验的极化曲线对比

3.3 流道结构尺寸对燃料电池输出性能的影响

3.3.1 流道深度对电池性能的影响

以蛇形流道为例，探究流道深度对燃料电池性能的影响，保持流道宽度与肋宽的比值为 1: 1，依次改变流道的深度为 0.4 mm，0.5 mm，0.6 mm，0.8 mm，1.0 mm，1.2 mm，同时采用第一种膜电极材料见表 3-4，运行参数及边界条件见表 3-2。根据 Fluent 后处理得出的结果，如图 3-5 所示。

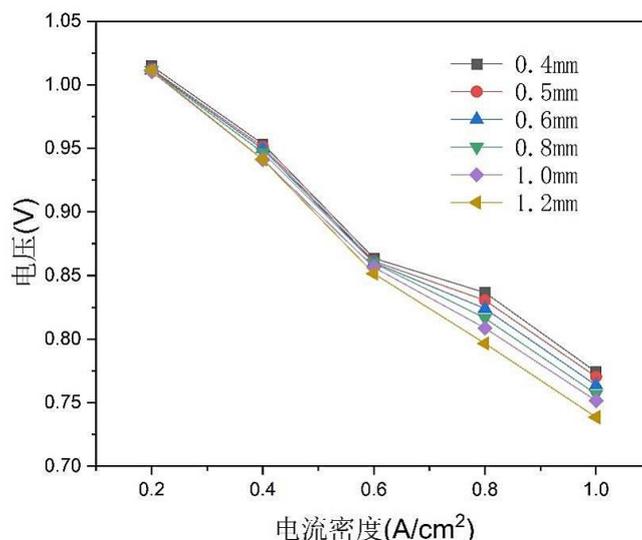


图 3-5 电池性能曲线

从图 3-5 可以看出，随着流道深度逐渐减小，在同一电流密度下的电压逐渐上升，说明电池的输出性能在逐步提高。这是因为在进气流量保持恒定条件下，流道截面积受到深度的影响，气体流速因此得以提升。随着流道深度减小，催化层和扩散层交界处的气体反应速度明显加快，单位时间内参与反应的气体量显著增多，反应物浓度也随之上升。这种情况下，燃料电池的整体性能呈现逐步提升的趋势。从图 3-6 可以看出，当流道深度过小时，导致气体流通截面积减小，气体流速变快，摩擦阻力上升，不利于气体向扩散层和催化层扩散，特别是靠近出口区域，主要是气体在流道内的压力损失增大，同时气体在流场中的分布也会变得不均，容易在某些区域形成浓差极化，进而导致电池局部区域气体供应不足，降低输出功率。另外，生成的水很难从浅流道中有效排出，尤其是在下低负载状态，会造成水泛滥，阻碍气体到达催化层活性位点，严重影响反应进行，而流道浅也意味着液冷或气冷流体的通道也更薄，导致传热面积变小，散热不充分，从而影响质子交换膜的稳定性和寿命。

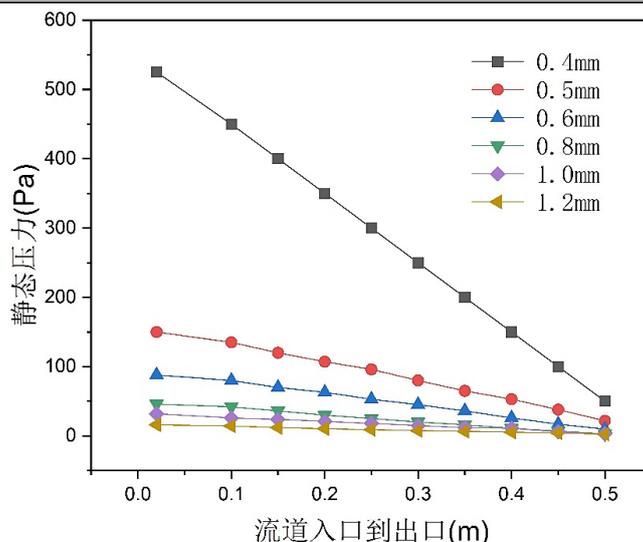


图 3-6 阴极气体从入口到出口压降

图 3-7 显示了阴极流道中心下方的气体浓度分布情况。可以看出，在阴极侧气体扩散层-催化层界面区域，氧气的摩尔浓度场呈现出沿程梯度耗散的特征；而阳极流道中心下方的氢气摩尔浓度分布也表现出相似的特征。可以看出，当流道深度变小时，气体在催化层与扩散层交界处的摩尔浓度都会逐渐上升。说明较浅的流道深度有利于提高反应气体的输送效率，而随着流道深度的减小，气体更容易从流道传递到扩散层和催化层中。

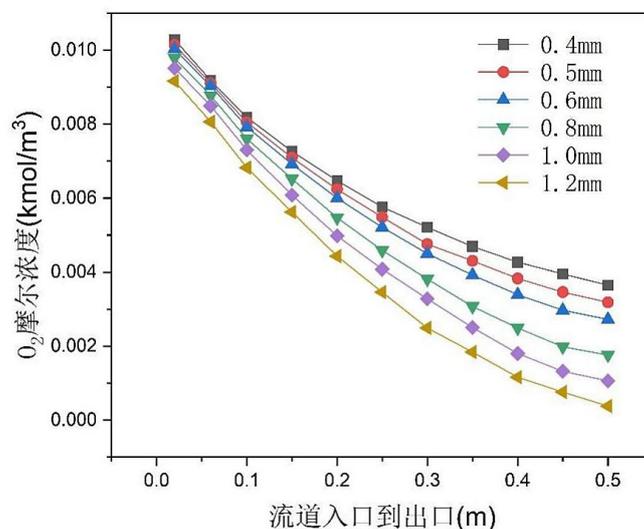


图 3-7 阴极流道下气体从入口到出口的浓度分布

3.3.2 流道宽度对电池性能的影响

以蛇形流道为例，在保证流道深度为相对最优值不变的基础上，使肋宽和流道深度相等，即肋宽为 0.5 mm，通过改变流道的宽度和肋宽的比来探究其对燃料电池性能的影响。图 3-8 为改变流道宽度与肋宽度的比值对电池性能的影响曲线。

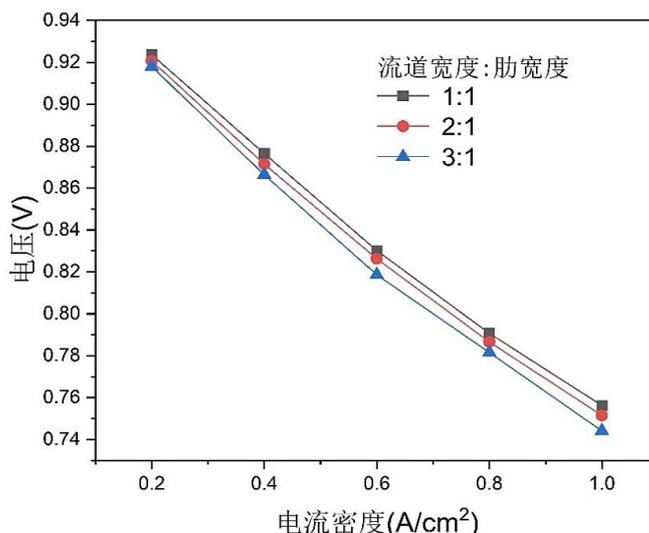


图 3-8 电池性能曲线

从图 3-8 可以看出，在保证肋的宽度不大于流道宽度的前提下，通过改变流道的宽度，电池的性能略微有些变化，但变化不大。这是因为流道宽度的改变使得气体的进口截面积发生了改变，二者的进口截面积之比为 1:2:3，在保证进气流量不变的情况下，二者的进口速度之比为 3:2:1，也就是说，电池的进口速度是随着流道宽度的增加而下降的，这会导致电池的性能略微有所下降，但对流道宽度进行改变时，电池性能所受影响并不显著。

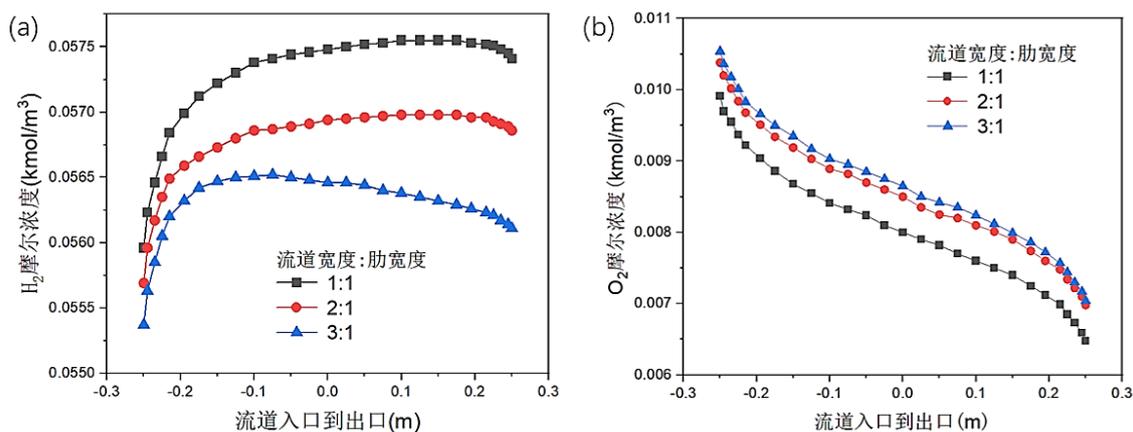


图 3-9 流道下的气体摩尔浓度分布 a)H₂ b)O₂

从图 3-9 (a) 可以看出，伴随着流道宽度的增大，呈现下降趋势的是阳极扩散层与催化层界面处的氢气摩尔浓度值。这是因为流道宽度的增加导致了气体流速的减小与压力损失的增加。反应过程推进的同时，在流道末端区域可观察到水的聚集现象逐步显现。同时氢气的摩尔浓度逐渐降低。从图 3-9 (b) 可以看出，阴极的情况与阳极相反，随着流道宽度增加，氧气摩尔浓度在扩散层与催化层界面处显现上升态势，然而变化幅度较为有限。阴极侧采用空气作为反应介质时，流道宽度变化对气流速率的扰动性较弱，特别是氧气分压参数所受影响较小。因

此，对于燃料电池来说，阴极氧气浓度具有决定性影响，特别是在氧气浓度较高状态下，电池输出特性更优，这也与孟庆然^[63]等的试验结果是一致的。

3.3.3 肋宽度对电池性能的影响

在流道宽度等于流道深度等于 0.5 mm 的情况下，通过改变流道宽度与肋宽的比，即改变肋的宽度，得到的电池性能曲线如图 3-10。可以看出，流道宽度较肋宽度显著减小时，性能表现呈现明显的下降趋势，尤其是在高电流密度工况下。这是因为在保证流道宽度不变的情况下，随着肋宽度的增加，肋下的气体扩散不易进行，使得到达催化层的气体浓度特别低，这与 Wang^[64]的实验结果是基本吻合的，因此，随着肋宽的加大，电池性能就会下降。

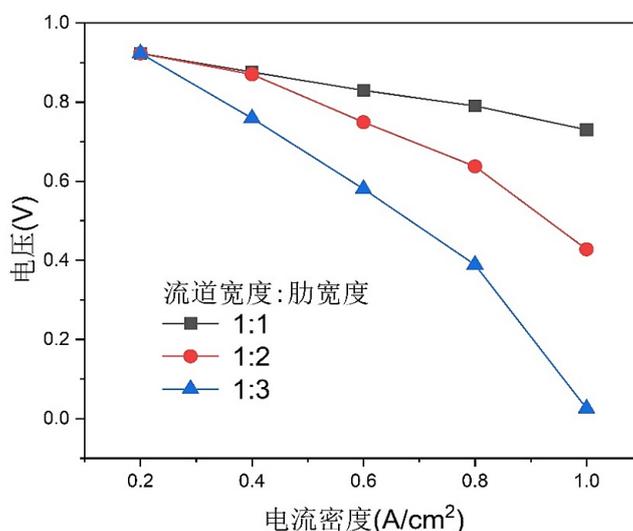


图 3-10 电池性能曲线

图 3-11 显示了沿流动方向在阴极流道中心正下方催化层与扩散层交界面出氧气的摩尔浓度分布。可以看出，当流道宽度较肋宽度更小时，随着肋宽度的增大，催化层和扩散层交界面的氧气浓度呈现显著降低的态势，尤其是在流道宽度与肋宽度比为 1:3 时，肋下的氧气摩尔浓度在出口处几乎为零。由于阴极进入的是空气，使得气体流速受流道宽度的影响较为有限，特别是对氧气分压的影响较小，因此加剧了扩散层和催化层交界面处的氧气摩尔浓度差异。综上所述，阴极氧气摩尔浓度对电池性能至关重要，氧气摩尔浓度越高，电池性能越好，这一结果也与陈磊^[65]等人的试验结果是一致的。

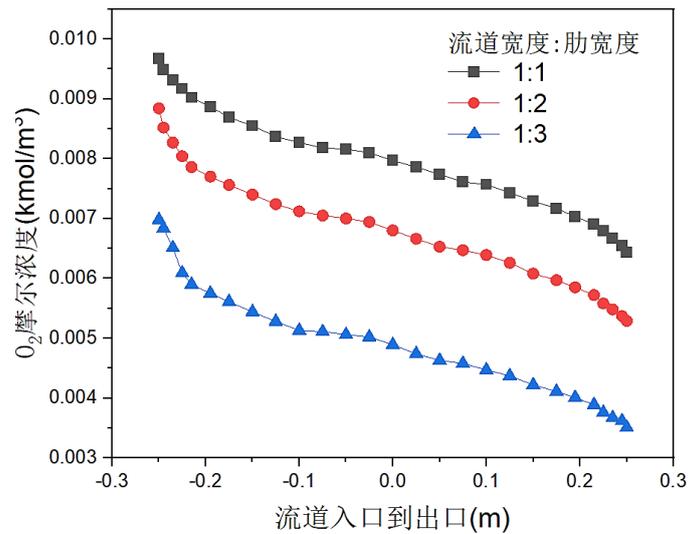


图 3-11 阴极流道下气体从入口到出口的浓度分布

3.4 本章小结

通过对蛇形流道 PEMFC 流场结构尺寸进行了数值模拟，得出了以下结论：

(1) 当蛇形流道质子交换膜燃料电池的流道深度约为 0.5 mm 时，电池性能最佳。

(2) 燃料电池肋的宽度应小于流道的宽度。

(3) 当流道深度和肋宽度保持不变且肋宽度不超过流道宽度时，随着流道宽度从 0.5 mm 增加到 1.2 mm，电池性能变化不明显。

(4) 当流道深度和流道宽度保持不变，且流道宽度不超过肋宽度时，随着肋宽度从 0.5 mm 增大到 1.2 mm，电池性能发生显著变化。

(5) 电池性能的关键在于阴极催化层与扩散层交界面的氧气浓度，交界面上氧气浓度较高时，电池性能将更好。

因此，在设计流场尺寸时，应综合考虑流场压降、电池性能等因素，确定流道深度、流道宽度与肋宽度的合理比例。

第 4 章 基于流场特性的膜电极性能评价研究与分析

基于上一章对典型流道质子交换膜燃料电池流场结构的系统性研究，通过数值模拟构建了涵盖四种典型流道（蛇形、直平行、交指型、网格型）的流场特性数据库，并验证了模拟数据的可靠性。研究进一步明确了流道截面宽度、深度及肋宽比对膜电机组件（MEA）性能的影响规律。然而，上述工作尚未深入解析流道内多物理场（浓度场、速度场、压力场、温度场）的均匀分布特性与 MEA 内部电化学性能的关联机制。

针对上述问题，本章提出一种基于机器学习的多物理场耦合分析方法，通过深度挖掘流场构型、运行工况及 MEA 材料下的动态数据集，创新性的构建了以均匀度为核心的 MEA 性能评价模型。该模型通过定义接触界面多物理场均匀度系数（区间[0,1]），首次建立了燃料电池功率密度与 MEA 均匀度的线性映射关系，并将 K 值的大小与 MEA 自身材料建立了联系，发现二者呈现正相关性，即模型的斜率 K 在客观上反映的就是 MEA 自身的材料特性。

4.1 MEA 性能评价指标的选取

在质子交换膜燃料电池（PEMFC）中，流场均匀度是评价膜电极性能的一个重要指标。流场的均匀度将直接影响到电池的效率、性能和寿命，而为了更全面的反映出膜电极的性能，综合考虑了气体浓度场均匀度、速度场均匀度、温度场均匀度以及压力场均匀度四个主要方面。

气体浓度均匀度反映了反应气体（氢气和空气）在膜电极内部的分布均匀程度，速度场均匀度则反映了气体反应物在电池内部流道、气体扩散层以及催化剂层附近等各关键部位的流动速度均匀状况，温度场均匀度是指在质子交换膜燃料电池内部，不同区域温度分布的一致性程度，而压力场均匀度则源于气体的流动与分配。

4.2 不同影响条件下 MEA 流场均匀度分析

4.2.1 流道结构尺寸对 MEA 流场均匀度的影响

MEA 由阳极扩散层（gdl-a）、阴极扩散层（gdl-c）、阳极催化层（cl-a）、阴极扩散层（cl-c）和质子交换膜（mem）五部分构成，利用公式 2-17 分别计算 MEA 各层接触面的四种流场（浓度场、速度场、压力场、温度场）的均匀度。以蛇形流道为例，分析流道的结构尺寸对 MEA 流场均匀度的影响。图 4-1 为流道宽度与肋宽度之比为 1: 1（肋宽度为 0.5mm），采用第一种膜电极材料见表 3-4，运行参数及操作条件，见表 3-2，通过改变流道的深度，探究流道的深度对 MEA 流

场均匀度的影响。

从图 4-1(a)可以看出, MEA 各层接触面的浓度场的均匀度随着流道深度的改变呈现波动变化, 但存在一个适中的流道深度为 0.5 mm, 这是因为流道深度适度增加, 使得气体在流道中的流速相对较低, 气体的停留时间较长, 允许气体有更多时间在流道内扩散, 从而在扩散层和催化层之间提供更加均匀的气体分布, 减少了浓度梯度, 扩散层内的气体供应也会更为均匀, 催化层的反应会更加稳定, 而较浅的流道, 气体流速相对较快, 气体的停留时间也会变短, 可能导致气体在流道中分布不均匀, 尤其是在流道入口或流道末端, 可能出现局部浓度过高或过低的现象, 进而会导致扩散层与催化层接触面的浓度场出现较大的波动和梯度, 从而影响电池性能。

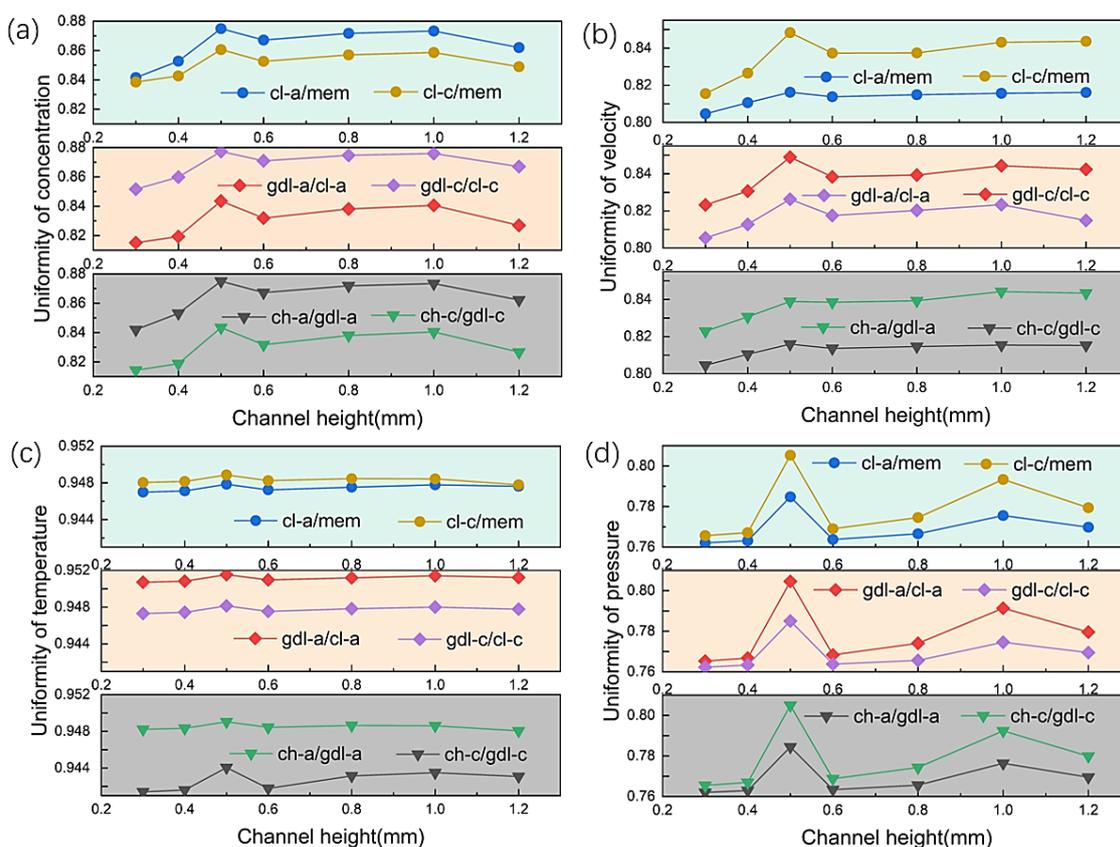


图 4-1 蛇形流道燃料电池 MEA 各层接触面物理场均匀度随流道高度变化 a)浓度场 b)速度场 c)压力场 d)温度场

图 4-1b)、图 4-1c)、图 4-1d)分别为 MEA 各层接触面的速度场均匀度、压力场均匀度、温度场均匀度随着流道深度的改变, 这与浓度场的均匀度随着流道深度的改变呈现相同的变化趋势。这与 Rostami^[66]等人的研究结果一致, 表明在较深的流道中, 气体停留时间较长, 气流流速较低且稳定, 压力梯度和温度梯度较小, 分布也更加均匀, 可以使气体与电池壁面充分进行热交换, 从而提高膜电极的反应效率。

在确定了比较适中的流道深度后，为了探究流道宽度与肋宽之比对 MEA 流场均匀性的影响。分别模拟了四种流道燃料电池在不同流道宽与肋宽比例下的 MEA 性能分布，采用相同的运行参数及操作条件，见表 3-2，开路电压为 0.5V。图 4-2 为不同流道燃料电池在不同流道宽与肋宽之比下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场均匀度。图 4-3 为蛇形流道燃料电池在流道宽与肋宽之比为 2:1 下的阳极扩散层与催化层交界面上的物理场分布。从图 4-3 可以看出蛇形流道在该比例下 O₂ 的摩尔浓度在扩散层与催化层交界面的分布较为均匀，而在流道宽与肋宽之比为 1:3 时，O₂ 的摩尔浓度分布均匀性较差。这是因为当流道宽度适当增大时，气流的横向扩展面得以增大，速度通常呈现降低趋势，而这种变化促使了气体分布更趋均匀，区域性的气流集中现象得以减弱^[67]。更多的流动空间存在于较宽的流道中，使得气体与扩散层及催化层表面的接触更为充分，浓度场的均匀性由此获得提升。流动阻力随着肋宽度的增加而增大，流道中心区域的气流速度相对降低，肋间区域的气流集中现象可能产生。气体的均匀分布受到较宽肋的阻碍，整个扩散层的浓度场均匀度因此受到影响。

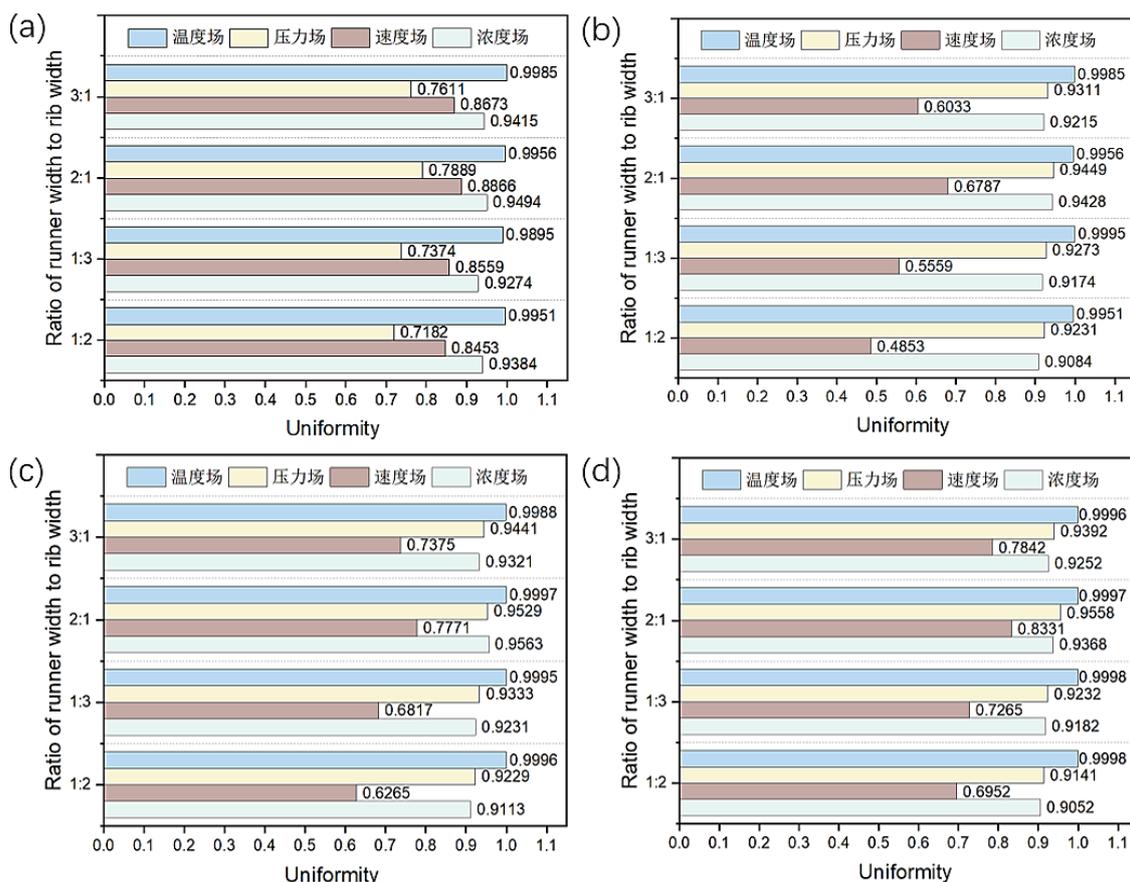


图 4-2 不同流道燃料电池在不同流道宽与肋宽之比下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场均匀度 a)蛇形流道 b)直平行流道 c)交指型流道 d)网格型流道

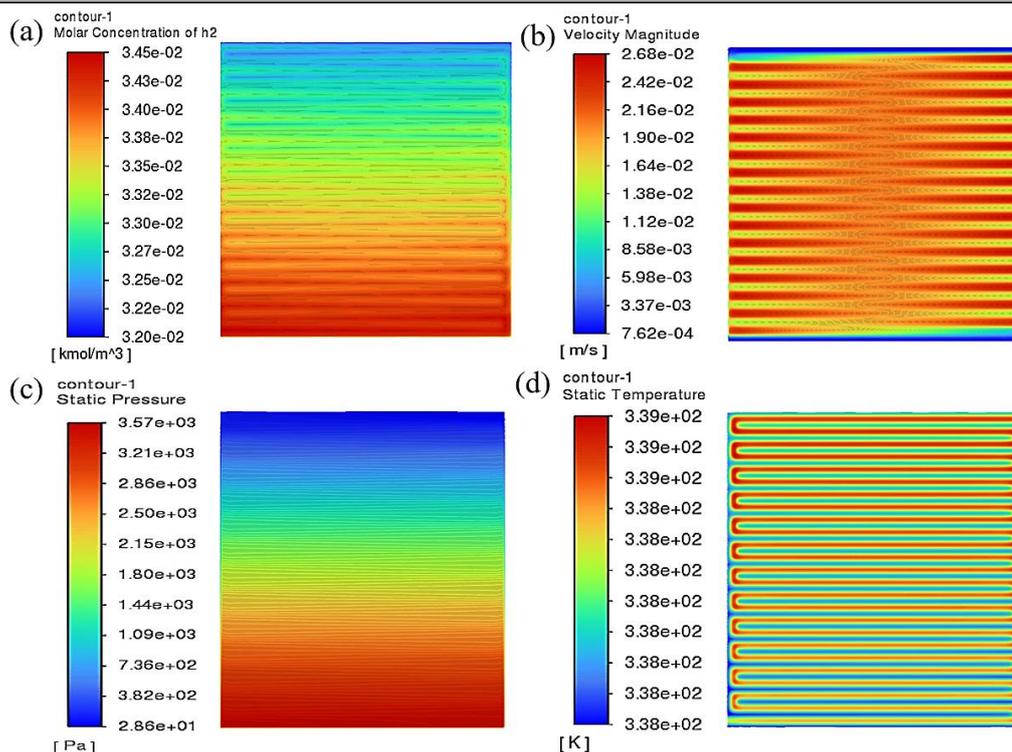


图 4-3 蛇形流道燃料电池在流道宽与肋宽之比为 2:1 下的阴极扩散层与催化层交界面上的流场分布 a)浓度场 b)速度场 c)压力场 d)温度场

4.2.2 运行条件对 MEA 流场均匀度的影响

为了探究运行条件对 MEA 各层接触面的流场均匀性的影响，分别改变气体的流量、操作温度来进行探究，同样以蛇形流道燃料电池为例，流道宽度：肋宽度=1：1（肋宽度为 0.5 mm），采用第一种膜电极材料。

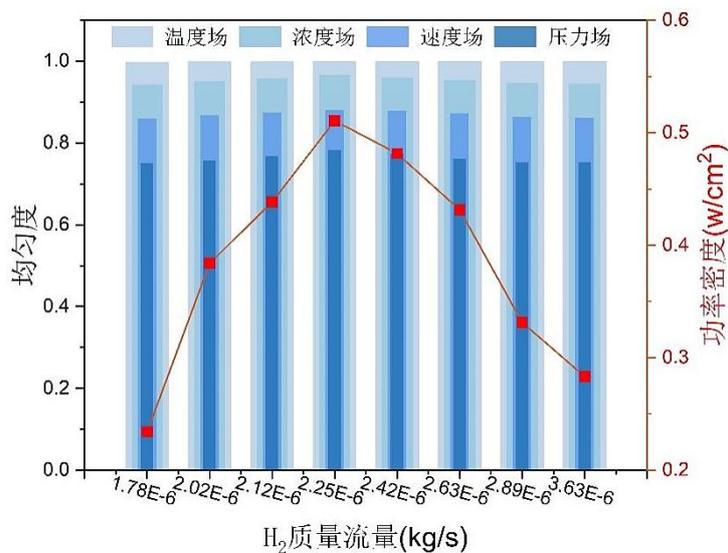


图 4-4 蛇形流道燃料电池在不同 H₂ 质量流量下的阳极扩散层与催化层交界面上的物理场均匀度及功率密度

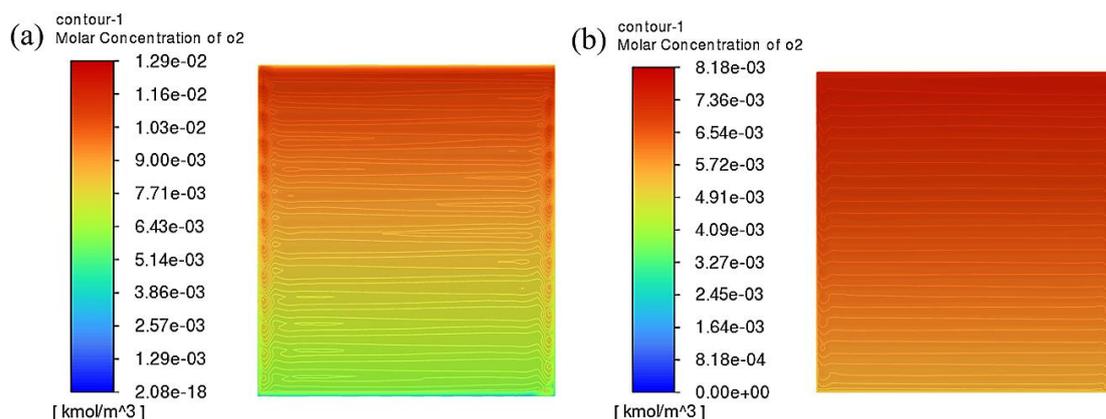


图 4-5 两种质量流量下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布 a) H_2 质量流量为 $3.63 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ b) H_2 质量流量为 $2.42 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$

图 4-4 为蛇形流道燃料电池在不同 H_2 质量流量下的阳极扩散层与催化层交界面上的物理场均匀度及功率密度。图 4-5 为图 4-4 中浓度场均匀度最高和最低所对应的 H_2 的质量流量下，在阴极扩散层与催化层接触面上的 O_2 的摩尔浓度分布。从图 4-4 可以看出， H_2 的质量流量过高或过低都不利于气体在 MEA 内部的物理场均匀分布，这是因为气体流量过高时会导致气体在流道内停留时间缩短，部分区域可能出现氢气供应过剩，而其他区域可能相对不足，造成浓度梯度不均，当质量流量过低时，氢气供应不足，电化学反应受限，导致催化层局部氢气浓度降低，加剧浓差极化，使电池性能下降^[68]。其次，氢气流量过高会加速气体在流道内的流动，导致某些区域气体流速过快，而其他区域流速较慢，形成流速梯度，影响反应均匀性，而流量过低时，气体流动缓慢，可能导致局部滞留区的形成，使得燃料运输效率降低，影响 MEA 的整体反应均匀性。再次，高流量的氢气可能在流道入口处造成局部压力升高，而出口压力相对较低，形成较大的压力梯度，影响气体均匀分布，而流量过低时，氢气的驱动力不足，容易造成局部区域供气不足，降低燃料电池的整体功率输出，同时影响稳定性。最后，高流量的氢气会带走更多的热量，导致流道内温度降低，使 MEA 局部区域冷却过度，影响电化学反应速率，而流量过低时，局部区域的燃料消耗速度较快，可能导致热点 (hot spot) 形成^[69]，使 MEA 局部过热，加速膜老化并影响水管理。

除了气体流量会对 MEA 流场均匀性产生影响，气体在反应区温度同样会影响到 MEA 各层接触面的流场均匀性。因为温度变化不仅会影响到反应速率和气体扩散性，还会影响膜的导电性和水管理等因素，从而间接影响 MEA 的流场均匀性。为了探究反应区温度对 MEA 流场均匀性的影响，同样以蛇形流道质子交换膜燃料电池为例，流道宽度：肋宽度=2：1（肋宽度为 0.5 mm），采用第一种膜电极材料，改变反应区温度，分别为 30°C ， 40°C ， 50°C ， 60°C ， 70°C ， 80°C ， 90°C ， 100°C 。

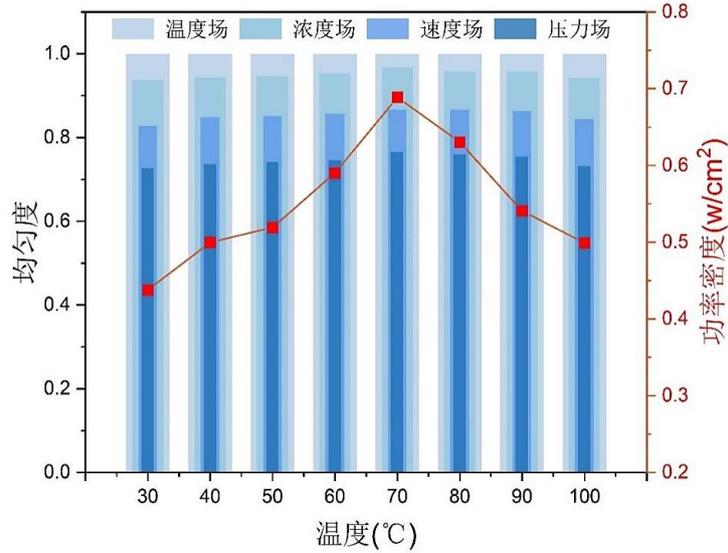


图 4-6 蛇形通道燃料电池在不同反应区温度下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场的均匀度及功率密度

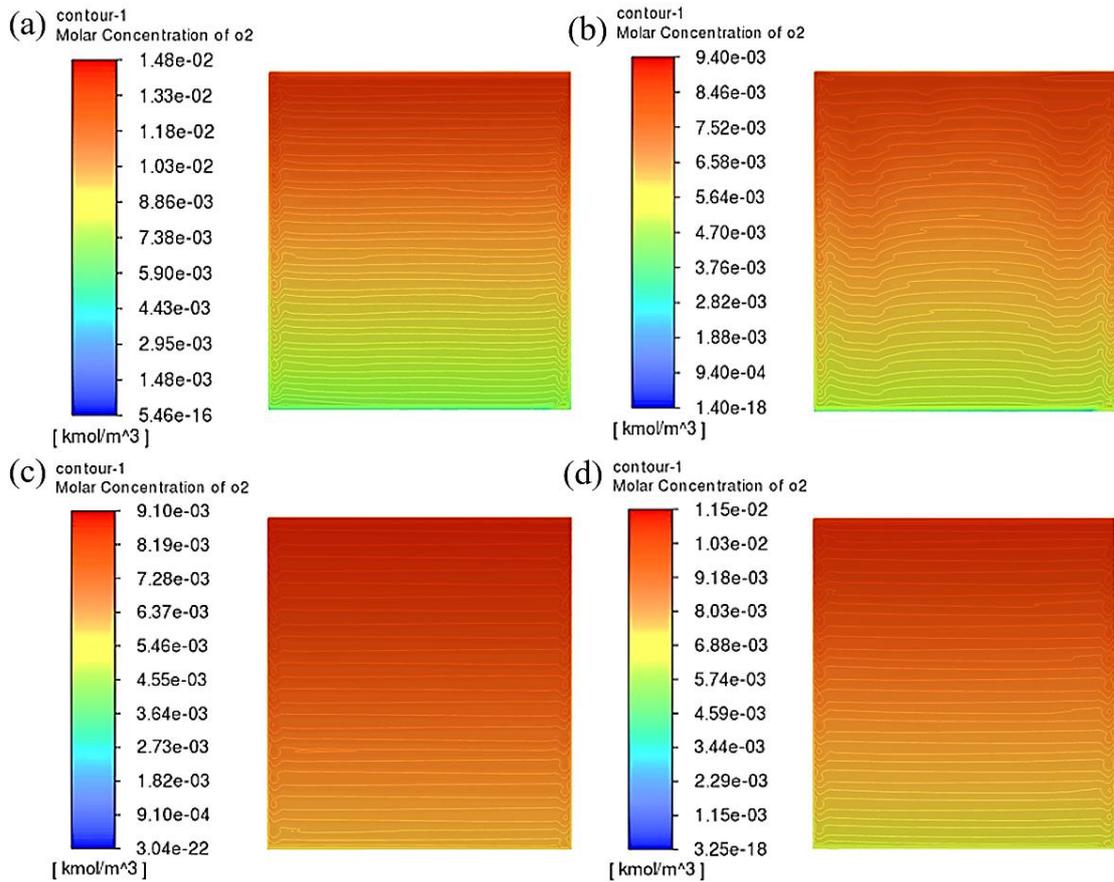


图 4-7 四种反应区温度下的蛇形通道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布 a) $T=30^\circ C$ b) $T=50^\circ C$ c) $T=70^\circ C$ d) $T=90^\circ C$

图 4-6 为蛇形通道燃料电池在不同反应区温度下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场的均匀度及功率密度。图 4-7 为四种反应区温度下的蛇形通道

燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布。可以看出，在催化层与扩散层的交界面处气体各物理场的均匀度及输出功率密度随着反应区温度的增大先上升后下降，存在一个适中的反应区温度 $70^\circ C$ ，在此温度下扩散层与催化层交界面上的气体的各物理场分布相比于其他反应区温度更为均匀。

主要原因在于反应区温度升高会增加气体分子的平均运动能量，从而提高气体在扩散层和催化层之间的扩散系数。气体扩散速率的提高有助于减小气体在催化层表面的浓度梯度，促使气体更均匀地分布在催化层表面，改善浓度场的均匀性。同时较高的温度可以使催化层上的反应速率增加，从而提供更多的反应产物，降低催化层局部气体浓度的差异。另外高温会加快气体的扩散，使某些区域流速增大，而湿度较低的区域流速可能降低，形成速度梯度；低温情况下，水的冷凝可能堵塞流道，造成局部流速下降或停滞，影响燃料输运的均匀性；再次，高温会导致气体膨胀效应增强^[70]，使局部区域压力升高，导致流道内部的压力梯度增大，影响电池稳定性；最后，高温易形成局部热点，加剧 MEA 材料的老化，同时影响催化层的电化学反应速率；低温会降低催化层活性，使电池整体性能下降，同时增加水管理的挑战，导致局部区域过湿或过干。

气体压力的改变同样会影响到 MEA 各层接触面的流场均匀性。为了探究气体压力对 MEA 流场均匀性的影响，以蛇形流道质子交换膜燃料电池为例，流道宽度：肋宽度=2：1（肋宽度为 0.5 mm），采用第一种膜电极材料，改变气体压力，分别为 1 atm，1.5 atm，2 atm，2.5 atm，3 atm，3.5 atm，4 atm，4.5 atm，5 atm。图 4-8 为蛇形流道燃料电池在不同气体压力下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场的均匀度及功率密度。图 4-9 为四种气体压力下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布。

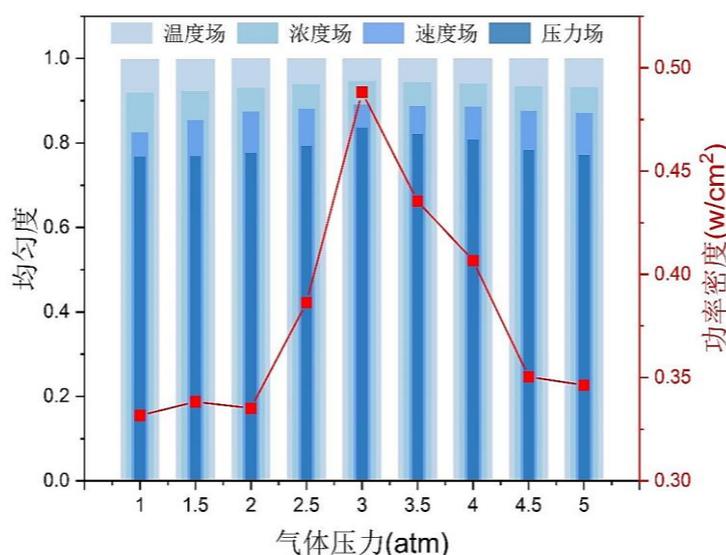


图 4-8 蛇形流道燃料电池在不同气体压力下的阳极扩散层与催化层交界面上的四种物理场的均匀度及功率密度

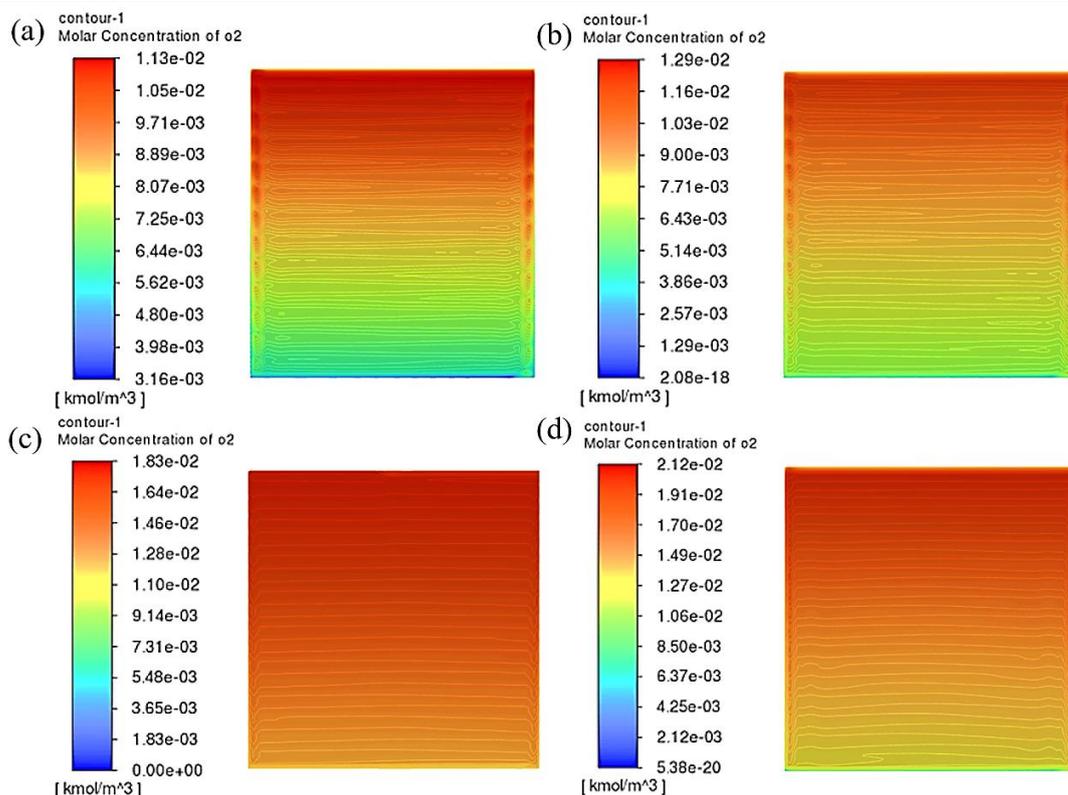


图 4-9 四种气体压力下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布 a) $P=1$ atm b) $P=2$ atm c) $P=3$ atm d) $P=4$ atm

从图 4-8 可以看出，在催化层与扩散层界面处气体的物理场均匀度及对应的输出功率密度随着气体压力的增大先上升后下降，存在一个适中的气体压力为 3 atm，在此气体压力下扩散层与催化层交界面上的气体浓度分布相比于其他气体压力更为均匀，这是因为气体压力改变了气体的流动特性，扩散速率及反应速率，从而影响了气体在电池内的分布均匀性。然而过高或者过低的气体压力都会影响 MEA（膜电极组件）内部浓度场、速度场、压力场和温度场的均匀分布，进而影响燃料电池的性能和稳定性。

首先，气体压力过高时，氢气和氧气的密度增加，可能导致扩散过快，使局部浓度分布不均，影响催化层反应的稳定性，而压力过低时，气体扩散驱动力减弱，燃料供应不足，导致电池局部区域氢气或氧气浓度下降，形成贫燃区，使催化层反应受限。其次，压力过高时，气体流速增加，可能导致流场内局部流速过快，而其他区域流速较慢，形成速度梯度，影响 MEA 内的均匀运输^[71]，而压力过低时，气体流动缓慢，可能形成滞留区，使燃料输送不均匀，降低燃料利用率和电池效率。再者，高压力下，气体密度增加，可能增强对流换热，使局部冷却过度，影响反应速率，而压力过低时，气体流量减少，热量不易被带走，可能导致局部热点（hot spot）形成，加速 MEA 材料老化，同时影响水管理，使局部过湿或过干，影响燃料电池寿命。

4.2.3 MEA 材料特性对 MEA 流场均匀度的影响

除了流道结构尺寸和运行条件会对 MEA 流场均匀度产生影响，MEA 自身的材料特性同样会对 MEA 流场均匀度产生影响，因为材料特性的改变将直接影响电池的功率输出、效率、稳定性和使用寿命。对于质子交换膜来说，质子导电性是其最关键的特性，膜的导电性越高，质子可以更有效地从阳极通过膜层到达阴极，从而增强燃料电池的性能。对于催化层来说，催化剂的催化活性是决定燃料电池性能的关键因素之一，其直接影响了电化学反应速率，常用的催化剂是铂基催化剂 (Pt)，由于其高活性，可以有效催化氢气在阳极的电化学反应以及氧气在阴极的还原反应。高活性的催化剂可以提高催化反应速率，减少浓度梯度，提高反应物的消耗均匀性，从而提高电池性能。

为了探究 MEA 自身的材料特性对 MEA 流场均匀度的影响，以蛇形流道为研究对象，流道宽度：肋宽度=2：1（肋宽度为 0.5 mm），运行参数及操作条件见表 3-2，分别改变 MEA 的材料特性，见表 3-4，共 5 种膜电极材料。图 4-10 为蛇形流道质子交换膜燃料电池五种 MEA 材料下流场性能曲线。图 4-11 为四种 MEA 材料下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布。图 4-12 为五种 MEA 材料下的蛇形流道燃料电池在扩散层与催化层交界面上的浓度均匀度。

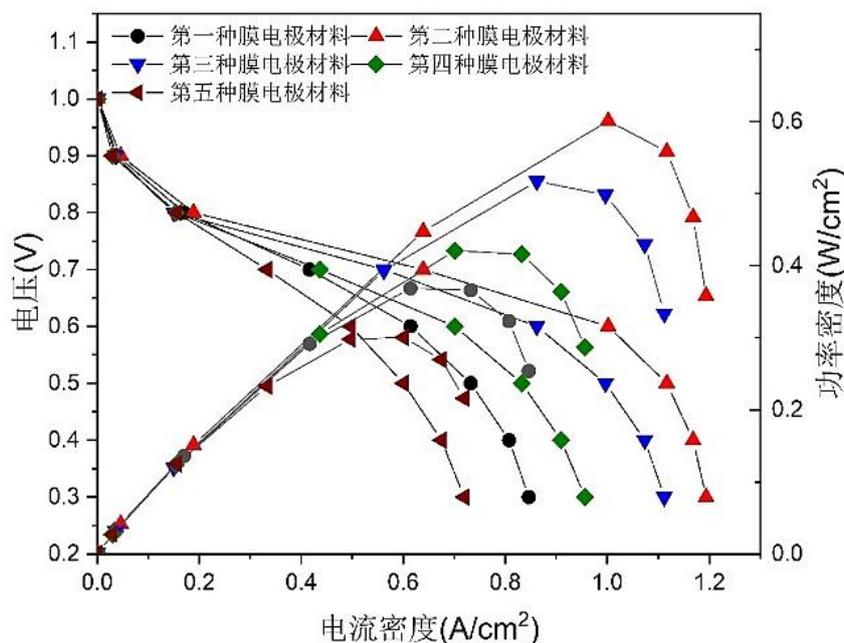


图 4-10 蛇形流道质子交换膜燃料电池五种 MEA 材料下流场性能曲线

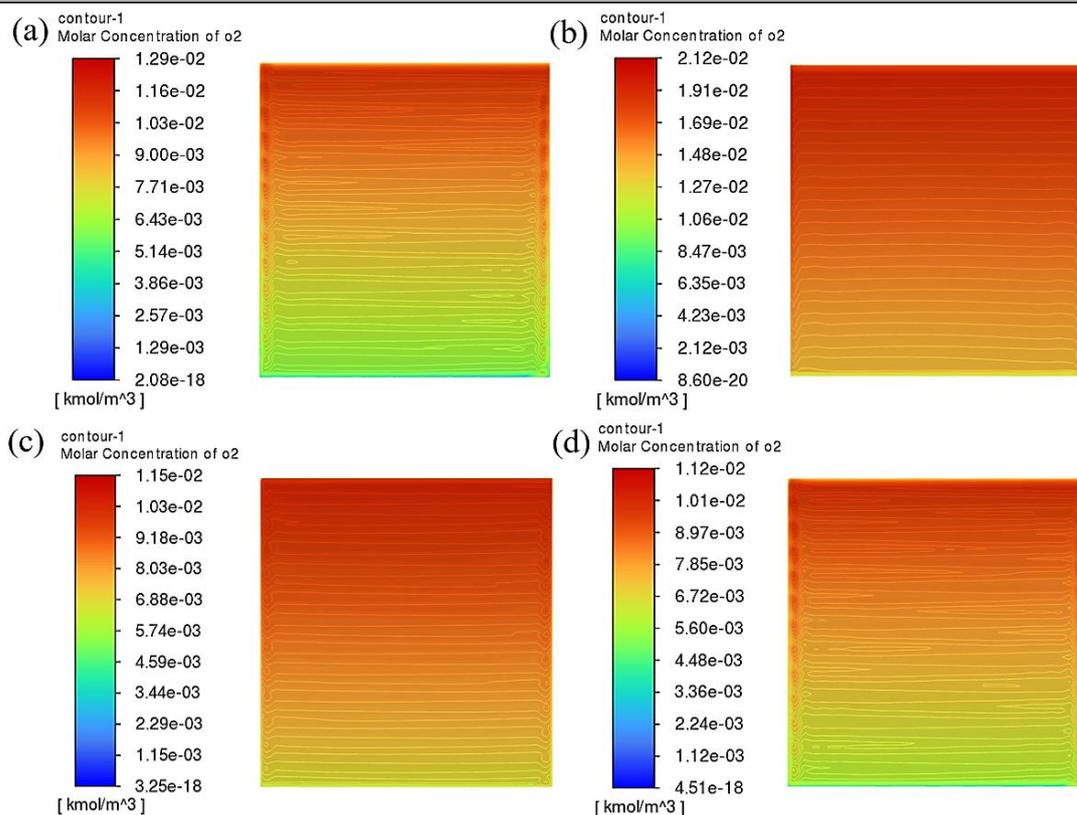


图 4-11 四种 MEA 材料下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布 a)第一种 MEA 材料 b)第二种 MEA 材料 c)第三种 MEA 材料 d)第四种 MEA 材料

从图 4-10 可以看出，不同 MEA 材料特性下，燃料电池的输出性能有很大差异，对比 5 种 MEA 材料，发现采用第二种 MEA 材料，在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布更为均匀，其均匀度也更大，电池的输出性能也更好。对比 3-4 中 5 种 MEA 的材料特性，可以看出第二种 MEA 材料，其中扩散层 (gdl) 采用的是碳纳米管，催化层 (cl) 采用的是铂镍合金，质子交换膜采用的是聚醚砜，其热导率、气体扩散率、导电率都具有较高的数值。热导率决定热量传导效率，较低时易引发局部过热，导致催化剂稳定性下降和膜电极退化，较高则利于温度均匀分布，保障稳定运行^[72]。气体扩散率决定气体传输效率，过高导致催化层反应不充分，过低则造成气体积聚和死区，需优化平衡以提升输出功率^[73]。导电率影响电子传输，高导电率减少内阻和能量损失，低导电率则增加内阻，限制输出功率和效率，尤其在高压条件下^[74]，从而导致电池性能降低，尤其是在高负载条件下，进而影响 PEMFC 的输出功率和效率。图 4-10 也直观的反映了四种 MEA 材料下的蛇形流道燃料电池在阴极扩散层与催化层交界面上的 O_2 摩尔浓度分布及浓度均匀度，采用第二种 MEA 材料， O_2 的摩尔浓度及均匀度在阴极扩散层与催化层分布的最为均匀，其次是第三种 MEA 材料，第四种 MEA 材料，第一种 MEA 材料。

4.3 基于 MEA 流场均匀度的神经网络预测模型构建

为了更准确的评价 MEA 整体的性能，从流场均匀度出发，我们需要构建输出功率密度与 MEA 整体均匀度的一种更直观的评价模型，基于计算流体力学（CFD）方法建立了稳态数值解析模型，分别模拟计算出了 4 种流道形状，36 种结构尺寸，48 种工况，5 种膜电极材料共计 1200 种质子交换膜燃料的膜电极各层接触面的 4 种流场均匀度和输出功率密度，该工作耗费了大量时间和计算资源，导致相应研究通常局限于 MEA 各层接触面的流场均匀度，为了评价 MEA 整体的性能。本节引入以神经网络为代表的人工智能手段，通过由仿真数据训练的预测模型可靠实现针对多变量复杂工况的性能预测。

4.3.1 神经网络算法简介

神经网络是一种数据处理工具，它受到了生物神经元和大脑处理信息方式的启发，因能够识别和学习输入数据与相应输出数据之间的关系而被广泛应用于工程类研究中。如图 4-所示，本节使用前馈型神经网络。神经网络为多层单向结构，每一层包含若干个神经元，每一层的神经元可以接收前一层神经元的信号，并产生信号输出到下一层。在该神经网络中，第 0 层为输入层，最后一层为输出层，其它中间层为隐藏层，相邻两层的神经元之间为全连接关系。在隐藏层中，神经元对输入数据进行加权求和，并加上偏置项，最后通过激活函数变换产生输出，由于隐含层的神经元常使用 sigmoid 激活函数，其输出多为非线性曲线。相比之下，输出层内的神经元则会将由隐含层输入的非线性数据转化为线性数据，并传递至输出节点输出。

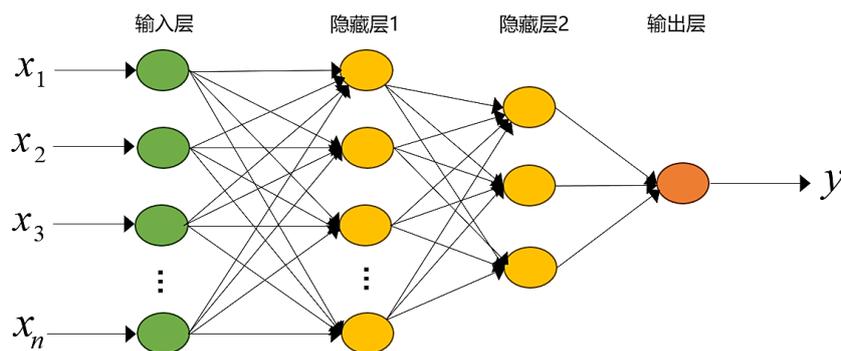


图 4-12 前馈型神经网络

在前馈型神经网络中，使用 Levenberg-Marquardt 反向传播算法(trainlm)最小化训练集的期望输出和实际结果之间的误差。预测模型的精度与效果则由均方误差 MSE 和回归系数 R^2 来衡量，其计算公式分别为式 (2-20) 和式 (2-21)。

4.3.2 神经网络预测模型验证

基于流场均匀度，本节引入四种典型流道质子交换膜燃料电池，通过改变流道的结构尺寸、模拟的边界条件、MEA 的材料特性，通过 *fluent* 模拟计算出了 MEA 各层接触面的四种流场（浓度场、速度场、压力场、温度场）均匀度，构建多变量输入与输出功率密度的神经网络预测模型。训练参数如表 4-1 所示。

表 4-2 为 MEA 均匀度的输出值与预测值在训练集、测试集和验证集上的回归系数。

表 4-1 神经网络训练参数

参数	设置
网络类型	多层感知器
数据分割	随机
训练集(%)	70
测试集(%)	15
验证集(%)	15
输入层神经元数	24
隐藏层神经元数	12
输出层神经元数	1
训练函数	Levenberg-Marquardt(trainLM)
激活传递函数	Sigmoid
最大迭代数	1000

表 4-2 MEA 均匀度拟合相关性系数

参数	R^2	RMSE	MAE
训练集	0.9968	0.0048	0.0036
测试集	0.9965	0.0046	0.0033
验证集	0.9962	0.0042	0.0029

MEA 均匀度的计算公式为式 (2-22)。从表 4-2 可以看出，MEA 均匀度的输出值与预测值无论在训练集、测试集还是验证集上都有非常好的拟合度，回归系数 R^2 分别为 0.9968、0.9965 和 0.9962。而 RMSE 和 MAE 也相差不大，表明模型的预测值与实际值较为接近，其中 RMSE 略高于 MAE，说明存在少量较大的预测误差。

4.3.3 MEA 评价模型效果分析

图 4-15 分别显示了四种流道质子交换膜燃料电池采用不同 MEA 材料在不同结构尺寸不同运行工况下的输出功率密度与 MEA 均匀度的相关性。

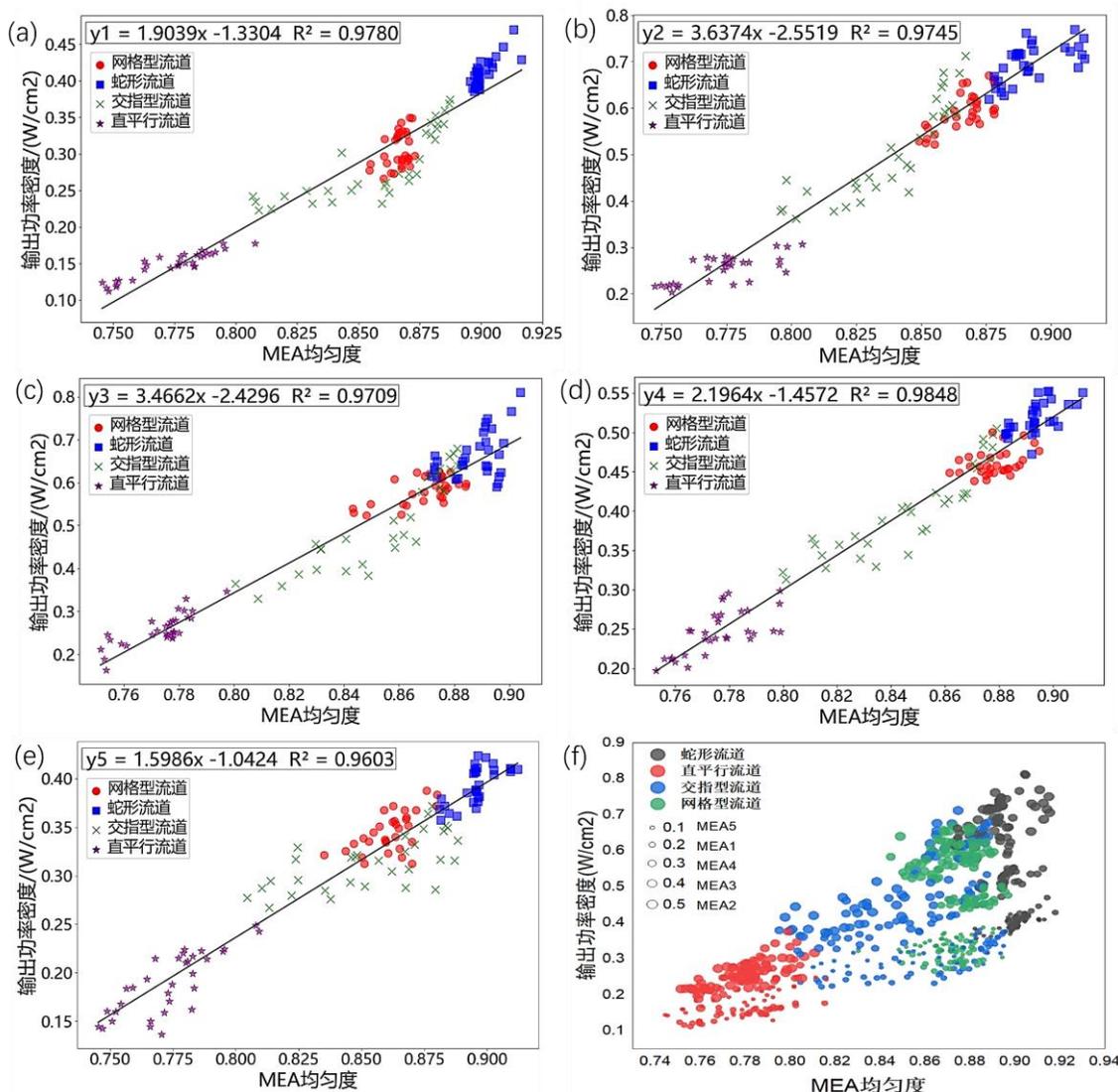


图 4-15 四种流道采用不同 MEA 材料在不同结构尺寸不同运行条件下的输出功率密度与 MEA 均匀度的关系 a)第一种 b)第二种 c)第三种 d)第四种 e)第五种 f)五种材料下 MEA 均匀度与输出功率气泡图

从图 4-15 可以看出，在相同的权重和偏度下，五种膜电极材料在不同流道结构、不同工况下其输出功率密度与膜电极的均匀度都具有很好的拟合度，回归系数 R^2 分别为 0.9780、0.9745、0.9709、0.9848 和 0.9603，得到的线性表达式分别为： $y_1=1.9039x-1.3304$ 、 $y_2=3.6374x-2.5519$ 、 $y_3=3.4662x-2.4296$ 、 $y_4=2.1964x-1.4572$ 、 $y_5=1.5986x-1.0424$ 。即在 MEA 材料固定下，通过改变流道的结构尺寸和运行工况，其对应的输出功率密度与得到的 MEA 的均匀度的比值是一个定值，

而 MEA 的性能主要受到流道结构尺寸、运行工况和自身材料特性的影响，那么表达式的斜率 K 在一定程度上反映的就是 MEA 的自身材料特性。另一方面，从图 4-15 a)–e)可以看出在每种 MEA 材料下，改变流道的结构尺寸和运行工况，蛇形流道主要集中在高均匀度区域，紧接着依次是网格型流道、交指型流道，最后是直平行流道，而这与典型流道所表现出的性能差异性是一致的，进一步说明了 MEA 均匀度可以用来表征 MEA 的性能，图 4-15 f)为五种材料下 MEA 均匀度与输出功率气泡图，也更加直观的反映了 MEA 均匀度与流道种类所导致的性能差异的合理性。图 4-16 为四种流道采用五种 MEA 材料在不同结构尺寸不同运行条件下的输出功率密度与 MEA 均匀度的关系。图中 a、b、c、d、e 分别为不同流道结构尺寸不同运行工况在 MEA 均匀度为 0.875 时所采用的 MEA 材料种类。

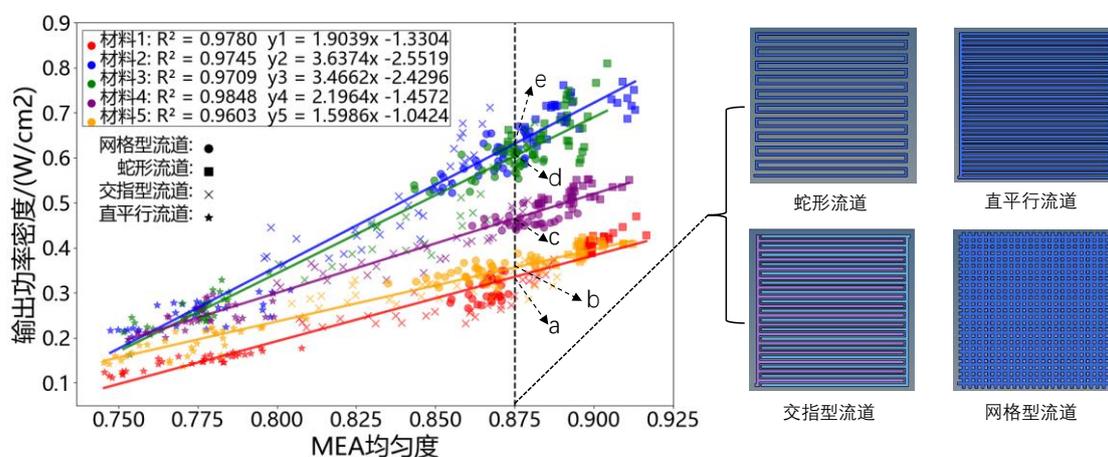


图 4-16 四种流道采用五种 MEA 材料在不同结构尺寸不同运行条件下的输出功率密度与 MEA 均匀度的关系

由图 4-16 可以看出， $k_2 > k_3 > k_4 > k_1 > k_5$ ，对比表 3-4 中第二种 MEA 材料的各项特性和其他四种材料的各项特性时，发现第二种 MEA 中的催化层（CL）的导电率极高，扩散层（GDL）的气体扩散率和热导率也非常高，考虑到高质子导电性可以提高质子在膜中的快速传递，高气体扩散率可以提高电池的反应，而高的热导率也有助于散热，提高 MEA 的性能，因而得到的斜率 K 较大。当 MEA 采用第五种材料时，得到的斜率 K 是最小的，表明该材料下 MEA 的性能是最差的，从表 3-4 可以看出，该材料下 GDL、CL 以及 MEM 的 C_p 比热、热导率和气体扩散率以及导电率相比于其他四种 MEA 材料特性都要偏低。而 C_p 比热主要影响催化层的温度调节能力和膜的热稳定性，较低的比热可能导致局部过热，加速催化层降解，同时会导致膜受热不均；热导率主要影响热量的分布，低热导率可能导致催化层热点，影响水合状态并降低质子传导率，如果温度梯度过大，还会导致膜干燥或水堵，引发膜降解；气体扩散率主要影响反应气体的传输速率和水管理，低扩散率可能导致氧贫化，导致功率输出降低。而为了更好的反映斜率 K 表征的

就是 MEA 自身的材料特性，将表 3-4 中五种 MEA 的各项材料属性进行了线性最小-最大归一化处理，旨在将数据线性映射到区间[0,1]，见公式 (2-23)。表 4-3 为五种 MEA 材料扩散层各属性归一化后的值及面积。表 4-4 为五种 MEA 材料催化层各属性归一化后的值及面积。表 4-5 为五种 MEA 材料质子交换膜各属性归一化后的值及面积。图 4-17 为五种 MEA 材料属性归一化后各组件及整体部分属性分布。

表 4-3 五种 MEA 材料扩散层各属性归一化后的值及面积

MEA 扩散层属性	密度	Cp 比热	热导率	气体扩散率	导电率	S _{扩散层}
MEA 扩散层种类						
第一种	1	0.581	0.0025	0.1	0.005	0.2797
第二种	0.477	0.667	1	0.01	0.1	0.4964
第三种	0.294	1	0.005	1	0.01	0.2307
第四种	0.147	0.533	0.03	1	1	0.6045
第五种	0.552	0.467	0.0015	0.1	0.001	0.1233

表 4-4 五种 MEA 材料催化层各属性归一化后的值及面积

MEA 催化层属性	密度	Cp 比热	热导率	气体扩散率	导电率	S _{催化层}
MEA 催化层种类						
第一种	0.1267	0.871	0.0267	0.1	0.0005	0.0648
第二种	0.6513	0.13	0.0167	1	0.2083	0.2128
第三种	0.0605	1	0.6667	1	0.0104	0.6681
第四种	0.0699	0.73	1	0.01	0.001	0.3762
第五种	1	0.133	0.0137	0.01	1	0.5145

表 4-5 五种 MEA 材料质子交换膜各属性归一化后的值及面积

MEA 膜属性	密度	Cp 比热	热导率	气体扩散率	导电率	S _膜
MEA 膜种类						
第一种	1	0.5431	0.6667	1	0.000001	0.7475
第二种	0.4967	1	1	0.0001	1	0.9480
第三种	0.4057	0.8125	0.6667	1	0.0001	0.7314
第四种	0.4565	0.75	0.5	0.1	1	0.6295
第五种	0.7355	0.5	0.8333	0.1	0.000001	0.4126

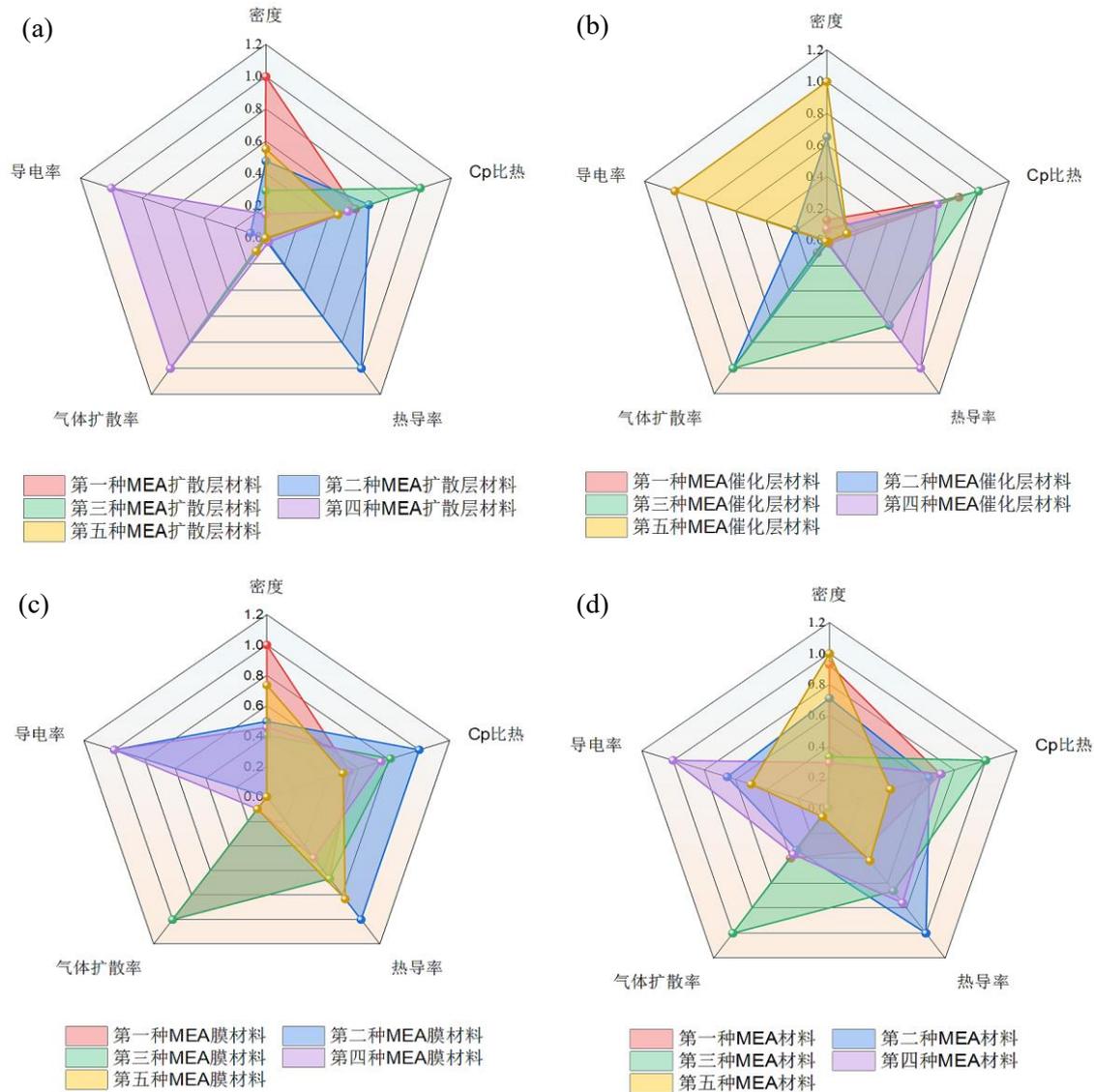


图 4-17 五种 MEA 材料下各组件及整体部分属性分布 a)扩散层 b)催化层 c)质子交换膜 d)MEA

根据 $L_v^{[76]}$ 使用雷达法求面积来对除臭剂改性橡胶沥青烟气抑制环境影响的评价模型，将其引入到对 MEA 的性能评价，对 MEA 组件各部分材料属性进行归一化处理并求雷达图的面积，使用面积求和法来表征 MEA 的综合性能，见公式 (2-24)。表 4-6 为利用该公式算出的五种 MEA 材料各组件部分雷达图面积及求和。

表 4-6 五种 MEA 材料各组件部分雷达图面积及求和

MEA 组件	扩散层	催化层	质子交换膜	S 求和
第一种 MEA	0.2797	0.0648	0.7475	1.092
第二种 MEA	0.4964	0.2128	0.9480	1.6572

表 4-6 (续表)

MEA 组件	扩散层	催化层	质子交换膜	S _{求和}
第三种 MEA	0.2307	0.6681	0.7314	1.6302
第四种 MEA	0.6045	0.3762	0.6295	1.6103
第五种 MEA	0.1233	0.5145	0.4126	1.0504

由图 4-17 和表 4-2 可以得出, 五种 MEA 材料下雷达图面积从高到低依次为 S₂、S₃、S₄、S₁、S₅, 这与通过 MEA 均匀度所拟合出来的线性表达式的斜率 K 的趋势一致, 说明均匀度可以用来反映 MEA 的整体性能, 那么斜率 K 反映的就是 MEA 自身的材料特性, 同时通过比较不同 MEA 材料下的斜率 K 便能直观的反映出 MEA 材料性能的好坏的一个程度。

4.4 本章小结

为了探究膜电极性能评价的数学模型, 从流场特性出发, 以典型流道(蛇形流道、直平行流道、交指型流道、网格型流道)为研究对象, 分别改变流道的结构尺寸(流道宽度、深度等)、运行条件(气体流量、气体压力、操作温度等)以及 MEA 的材料特性, 对质子交换膜燃料电池进行了仿真模拟, 同时将均匀度作为评价 MEA 性能好坏的指标, 综合考虑了四种物理场(浓度场、速度场、压力场、温度场), 分别计算了 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度, 建立起了燃料电池的输出功率密度与 MEA 均匀度的关系, 同时对比了不同条件下的极化曲线和功率密度曲线、阴极氧气摩尔浓度分布、电流密度分布, 四种流场均匀度分布, 得到了以下结论:

(1) MEA 各层接触面的浓度场均匀度、速度场均匀度、压力场均匀度、温度场均匀度随着流道深度的改变均呈现相同的变化趋势, 且在较深的流道中, 气体停留的时间较长, 气流流速较低且稳定, 压力梯度较小, 均匀度也更大, 另外在确定了比较适中的流道深度后, 分别模拟分析了四种不同流道宽与肋宽比例下的蛇形流道质子交换膜燃料电池, 发现在流道宽与肋宽之比为 2:1 时, O₂ 的摩尔浓度在扩散层与催化层交界面的分布更为均匀, 这是因为适当增大流道宽度时, 气流的横向扩展面增大, 气流的速度通常会减小。这种变化有利于气体在流道中的分布变得更均匀, 减少气流在某些区域的集中, 从而提升浓度场的均匀性。

(2) 气体流量的改变会影响 MEA 的流场均匀性, 增加气体流量或者减小气体流量都有可能导致气体在催化层表面的分布不均匀, 当 H₂ 流量为 2.42×10^{-6} kg/s 时, 阳极氢气摩尔浓度分布的更为均匀, 所以适中的气体流量有助于保持气体流

动的稳定，增强气体在扩散层和催化层表面之间的均匀分布，而反应区温度同样会影响到 MEA 各层接触面的流场均匀性，过高或过低的反应区温度都会对 MEA 的均匀性产生影响，本次所设置的温度区间，可以确定燃料电池最适中的温度为 70℃，另外，气体压力同样会显著影响到 MEA 各层接触面的流场均匀性，从压力区间可以看出，催化层与扩散层交界面处气体的浓度均匀度及对应的输出功率密度随着气体压力的增大先上升后下降，存在一个适中的气体压力 3 atm，在此气体压力下扩散层与催化层交界面上的气体浓度分布相比于其他气体压力更为均匀，这是因为气体压力改变了气体的流动特性，扩散速率及反应速率，从而影响了气体在电池内的分布均匀性。

(3) MEA 自身的材料特性也会对 MEA 流场均匀度产生影响，以蛇形流道为研究对象，分析了五种 MEA 材料下燃料电池的极化曲线和功率密度曲线，以及在阴极扩散层与催化层交界面上的电流密度分布，可以看出，采用第二种 MEA 材料，电池的输出性能较好，这是因为在第二种 MEA 材料中，扩散层采用的是碳纳米管，催化层采用的是铂镍合金，质子交换膜采用的是聚醚砜，而其热导率、气体扩散率、导电率都具有较高的数值，所以性能比较优越。

另外，为了建立起评价 MEA 性能的数学模型，将神经网络应用于 MEA 性能评价，基于前馈型神经网络，本节建立了起了燃料电池的输出功率密度与 MEA 均匀度的线性关系。

训练神经网络模型的数据集由数值解析模型计算获取，输入值分别为不同流道结构尺寸、不同运行条件、不同 MEA 材料特性下的 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度，每个案例下的输入值为 24 个，输出值为对应的功率密度，共计 900 组数据，训练结果表明在输出值与输入值之间存在较高的拟合度，即在 MEA 材料固定下，通过改变流道的结构尺寸和模拟工况，其对应的输出功率密度与得到的 MEA 的均匀度的比值是一个定值，并将五种 MEA 的各项材料属性进行了归一化处理，进行了面积计算求和，由高到低依次为 S_2 、 S_3 、 S_4 、 S_1 、 S_5 ，这与 K 的变化趋势一致，说明了斜率 K 反映的就是 MEA 自身的材料特性。根据得到的线性表达式，可以预测其他结构尺寸和工况下的输出功率密度，同时通过比较不同膜电极材料下的斜率 K 便能直观的反映出 MEA 材料性能的好坏的一个程度。

第 5 章 测试条件特征同 MEA 均匀性间的预测模型

基于第四章对质子交换膜燃料电池膜电极组件 (MEA) 性能评价模型的深入研究, 借助机器学习建立了燃料电池输出功率密度与 MEA 均匀度的线性映射关系 (斜率 K 值反映材料特性)。然而, 上述研究依赖于高精度数值模拟, 存在计算资源消耗大、周期长的局限性, 难以直接应用于实际生产中的快速性能检测与流场优化设计。此外, 现有模型虽揭示了 K 值与材料性能的正相关性, 但尚未解析测试条件 (流场结构尺寸、运行工况参数) 对 MEA 均匀度的动态影响规律, 制约了模型在工程实践中的普适性。

针对上述问题, 本章提出一种基于特征值分析的轻量化建模方法。通过提取流场构型和运行工况的关键特征参数, 构建了测试条件特征值与 MEA 均匀度的多变量关联数据集。利用机器学习算法, 首次建立了流场-工况特征值与 MEA 均匀度的定量预测模型, 实现了对不同结构尺寸及工况下 MEA 性能的快速评估。该模型可大幅降低传统模拟的算力需求, 为燃料电池流场设计优化与在线检测提供了低成本、高精度的工具支持。

5.1 特征值相关理论基础

在线性代数领域这一数学分支中, 理论价值显著的当属特征值概念。对于 n 阶方阵 A 而言, 特定数值存在时, 与之对应的非零向量 x 使得等式 $Ax=\lambda x$ 成立, 该数值即矩阵 A 的特征值被定义。在信号处理领域内, 特征提取与降噪处理可通过特征值分析实现, 信号质量及其可识别性由此获得提升。而在 MEA 性能评价体系中, 特征值同样具有重要的作用。MEA 相关数据经分析处理后, 性能特性与内在机制得以深入理解, 正是通过反映 MEA 性能的特征值提取而实现。

5.2 特征值选取原则

在 MEA 性能评估体系构建中, 特征值选取需遵循若干关键原则性要求。高度敏感性应被特征值所具备, 针对 MEA 性能的细微波动性变化能够实现敏锐捕捉。不同测试条件与环境下的测量结果需呈现良好的稳定性态, 重复性与可靠性指标应保持较高水平, 这是稳定性原则的核心体现。实际实验操作中可测量性原则亦不可忽视, 物理量或参数必须满足便捷且准确的测量要求性标准。

5.3 流道几何结构尺寸特征值分析

5.3.1 流道深度

流道深度是质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 流道结构中的一个关键尺寸特征,

对电池性能有多方面的影响。图 5-1 展示了四种流道内气体的平均流速随流道深度变化的趋势。可以观察到，在相同的气体流量下，流道深度从 1.2 mm 减小至 0.5 mm 时，气体在蛇形流道内的平均流速增加约 33%，在直平行流道内增加约 29%，在交指型流道内增加约 42%，在网格型流道内增加约 38%。这种变化使得反应气体能够与催化剂更充分接触，从而提高电池的电流密度和功率密度。

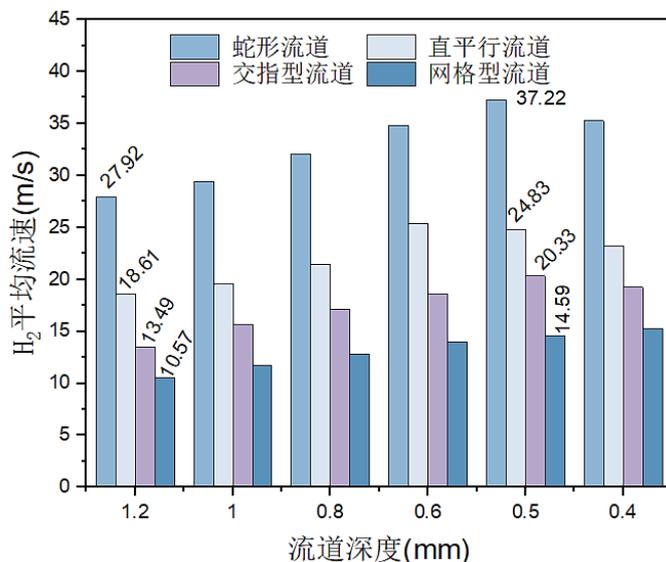


图 5-1 气体在四种流道内的平均流速随流道深度的变化

然而较小的流道深度会增加气体流动的阻力，导致压力损失增大。这是由于流道截面积变小，气体与流道壁面之间的摩擦作用加剧，致使气体在流动过程中需要克服更大的阻力。另一方面，过小的流道深度还可能导致水和热量排出不畅，从而引发水淹和过热等问题，严重影响电池的性能和使用寿命^[77]。

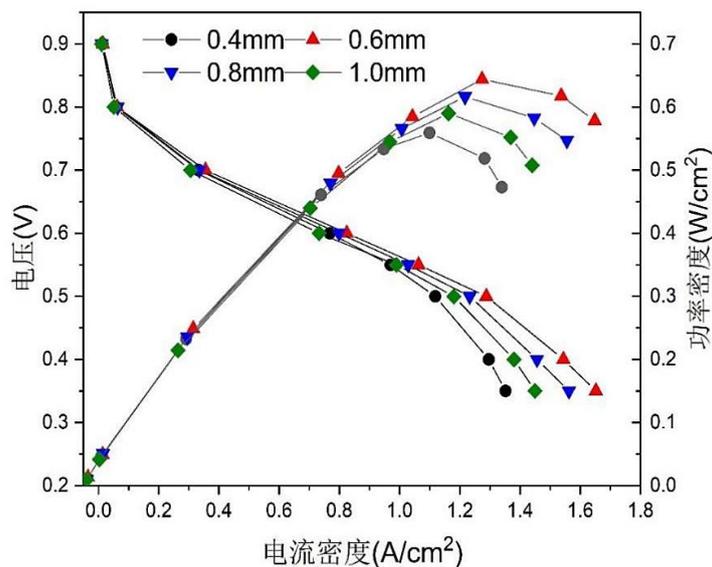


图 5-2 蛇形流道质子交换膜燃料电池在不同流道深度下的极化曲线

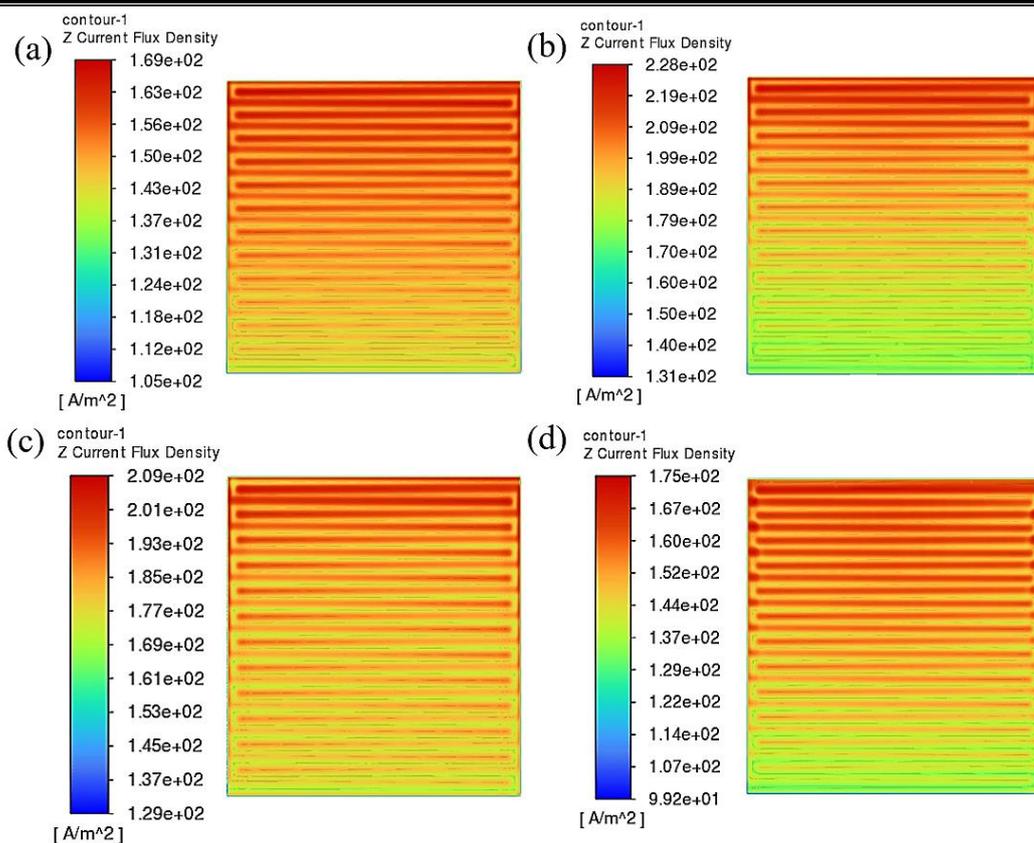


图 5-3 蛇形通道燃料电池在不同通道深度处的阳极扩散层与催化层接触面的电流密度分布 a) 通道深度 0.4 mm b)通道深度 0.6 mm c)通道深度 0.8 mm d)通道深度 1.0 mm

图 5-2 展示了蛇形通道质子交换膜燃料电池在不同通道深度下的极化曲线。图 5-3 则展示了不同通道深度下蛇形通道燃料电池阳极扩散层与催化层接触面的电流密度分布。从图 5-2 可以看出，随着通道深度的减小，电池的开路电压基本保持不变，但在高电流密度区域，电池的功率密度有着明显提高。当通道深度为 1.0 mm 时，电池在工作电压为 0.5 V 时的电流密度 1.18 A/cm^2 ，而功率密度却为 0.59 W/cm^2 ；而当通道深度减小到 0.6 mm 时，在相同工作电压下，电流密度提高到 1.287 A/cm^2 ，功率密度增加到 0.64 W/cm^2 ，从图 5-3 也可以看出在通道深度为 0.6 mm，产生的电流密度最大，这充分证明了适当减小通道深度可以有效提高电池在高电流密度下的性能。

5.3.2 通道宽度

通道宽度作为 PEMFC 通道结构的关键尺寸特征值之一，对电池的性能有着显著的影响，尤其是在气体分布和电流密度等方面。图 5-4 为蛇形通道质子交换膜燃料电池在不同通道宽度下的极化曲线。图 5-5 为蛇形通道燃料电池在两种通道宽度下的阳极扩散层与催化层接触面的电流密度分布，其中开路电压为 0.6 V。

从图 5-4 可以看出，在其他条件相同的情况下，将通道宽度从 1 mm 减小到

0.5 mm，电池的电流密度在相同工作电压下提高了约 25%。这是因为较窄的流道能够使气体更快速地扩散到电极表面，减少了浓差极化现象，提高了电化学反应的效率，从而提高电池的电流密度和功率密度，从图 5-5 也可以看出流道宽度为 0.5 mm 相比于 1 mm，在扩散层与催化层接触面的电流密度更大，分布也更加均匀，输出性能更好^[78]。

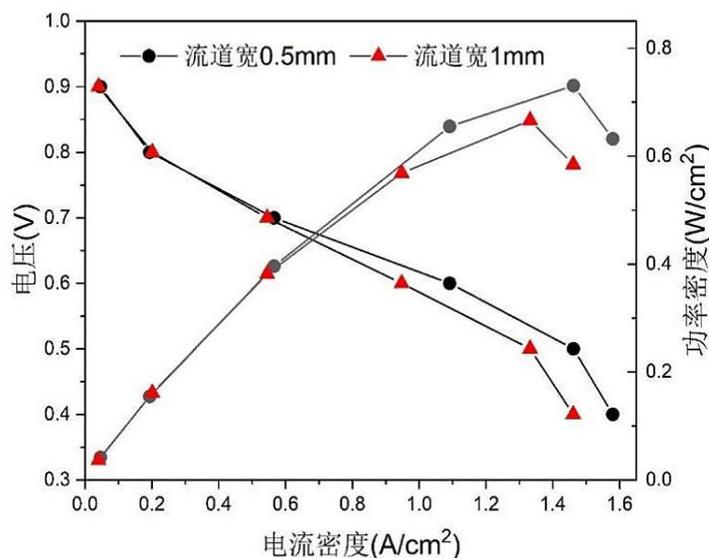


图 5-4 蛇形流道质子交换膜燃料电池在不同流道宽度下的极化曲线

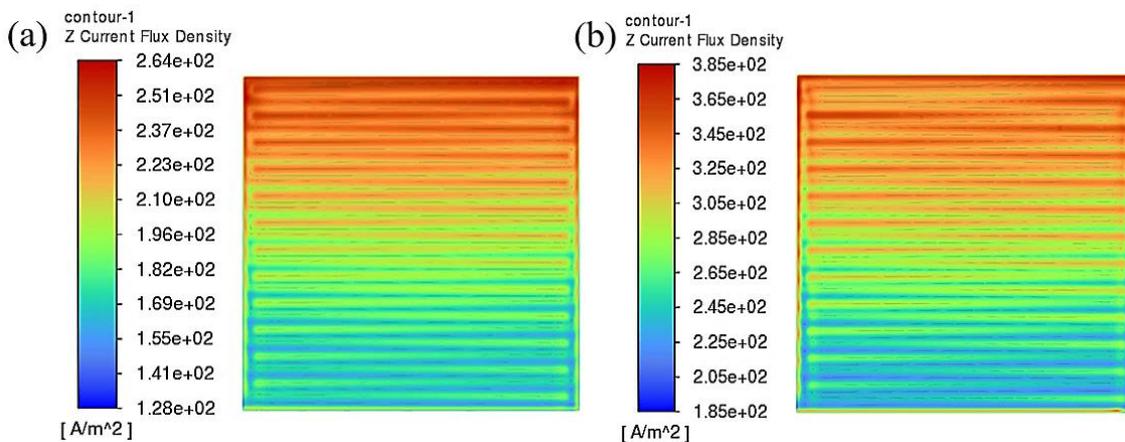


图 5-5 蛇形流道燃料电池在两种流道宽度下的阳极扩散层与催化层接触面的电流密度分布 (V=0.6V) a)流道宽 1 mm b)流道宽 0.5 mm

5.3.3 流道肋宽

流道肋宽是 PEMFC 流道结构中一个不可忽视的尺寸特征值，它对电池内部反应及输出性能有着独特的影响规律。流道肋宽主要影响着电池内部的电流传导和气体扩散过程。图 5-6 为蛇形流道质子交换膜燃料电池在不同流道肋度下的极化曲线。图 5-7 为蛇形流道燃料电池两种肋宽度下的阳极扩散层与催化层接触面

的电流密度分布。

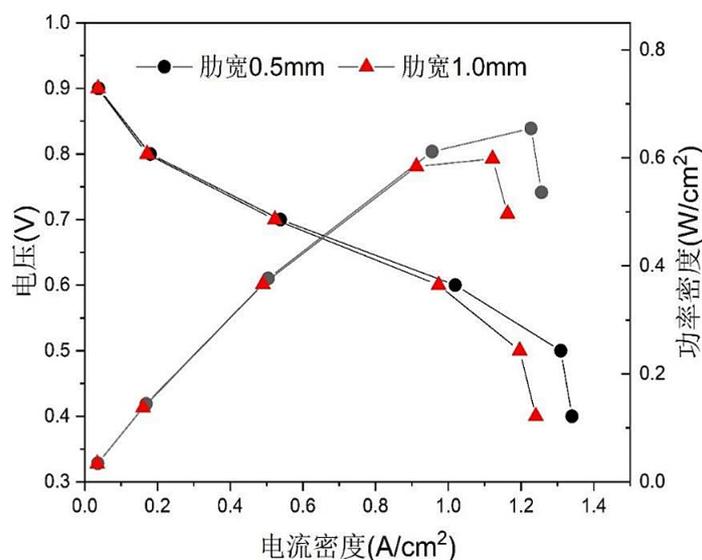


图 5-6 蛇形流道质子交换膜燃料电池在两种流道肋度下的极化曲线

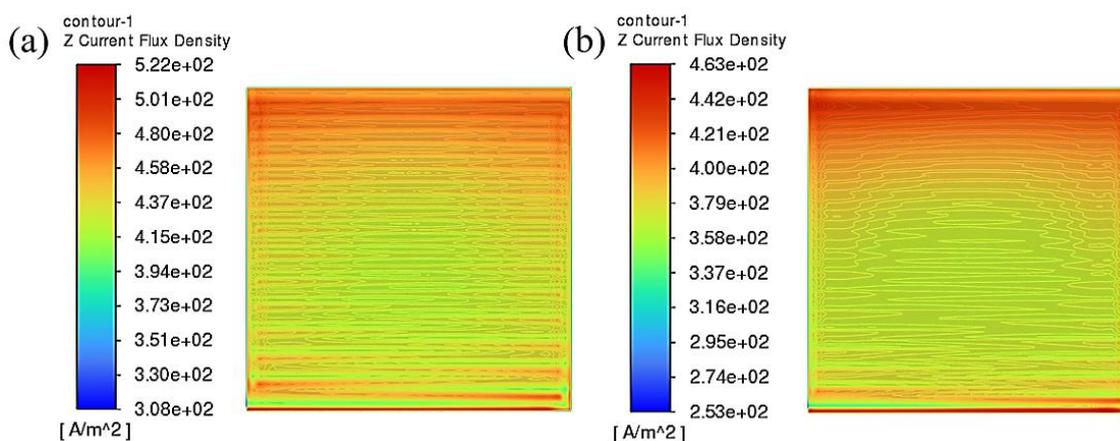


图 5-7 蛇形流道燃料电池两种肋宽度下的阳极扩散层与催化层接触面的电流密度分布 a)肋宽度为 0.5mm b)肋宽度为 1mm

从图 5-6 可以看出，在开路电压低于 0.6 V 时，随着肋宽从 1 mm 减小 0.5 mm，电池的电流密度在相同工作条件下提高了约 20%。这是因为较大的肋宽会减少气体扩散的有效面积，使得反应气体难以充分到达催化剂表面，从而影响电化学反应的进行，当流道肋宽适当减小时，气体扩散的有效面积增加，更多的反应气体能够接触到催化剂。从图 5-7 也可以看出肋宽度为 0.5 mm，在扩散层与催化层接触面的电流密度更大^[79]，分布也更均匀。

5.4 运行工况特征值分析

5.4.1 反应区温度

反应区温度对质子交换膜燃料电池的输出性能也有着重要影响。图 5-8 为两种湿度下的蛇形流道燃料电池在不同反应区温度下的质子传导率及功率密度变化。图 5-9 为 RH=60%的蛇形流道燃料电池在两种温度下的阳极扩散层与催化层交界面处的电流密度分布。

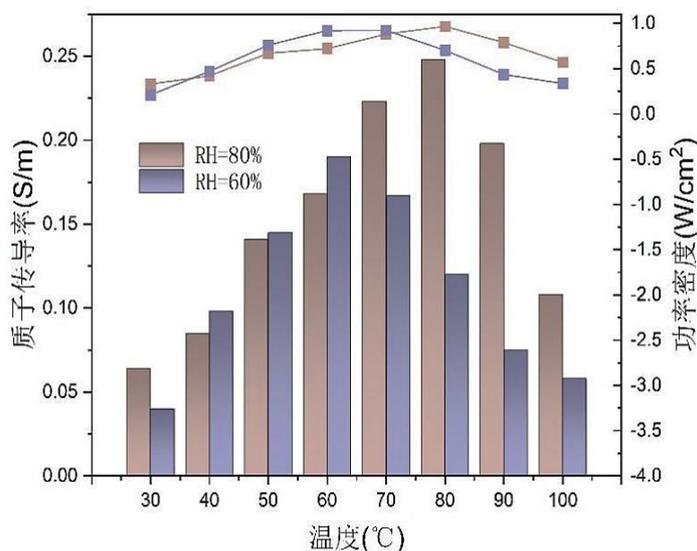


图 5-8 两种湿度下的蛇形流道燃料电池在不同反应区温度下的质子传导率及功率密度变化

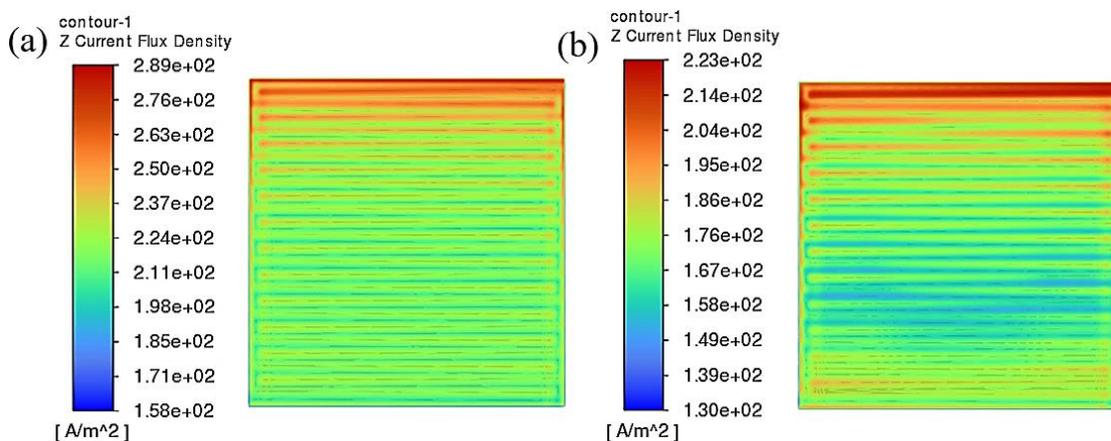


图 5-9 RH=60%的蛇形流道燃料电池在两种反应区温度下的阳极扩散层与催化层交界面处的电流密度分布 a)70°C b)90°C

从图 5-8 可以看出，在一定湿度条件下，反应区温度从 30°C 升高到 100°C，质子传导率会提高数倍，这是因为温度升高为反应分子提供了更多的能量，从而加快了氢气在阳极的氧化反应以及氧气在阴极的还原反应速度，使得输出电压损失减小。然而当温度超过 Nafion 膜的耐受温度时，导致质子传导率急剧下降，电池性能恶化。可以看出，在 RH=60%的情况下，反应区温度为 70°C 电池内部的质子传导率和输出功率密度最大；在 RH=80%的情况下，反应区温度为 80°C 电池内部的质子传导率和输出功率密度最大^[80]。从图 5-9 可以看出在 RH=60%的情况下，

反应区温度为 70℃ 相比于 90℃，在扩散层与催化层接触面的电流密度更大，分布也更加均匀。

5.4.2 气体压力

压力是影响质子交换膜燃料电池性能的另一个关键模拟工况特征值，主要包括氢气和氧气的进气压力。在保持操作温度为 70℃，RH=60%的情况下，通过改变气体压力来探究燃料电池输出性能的变化。

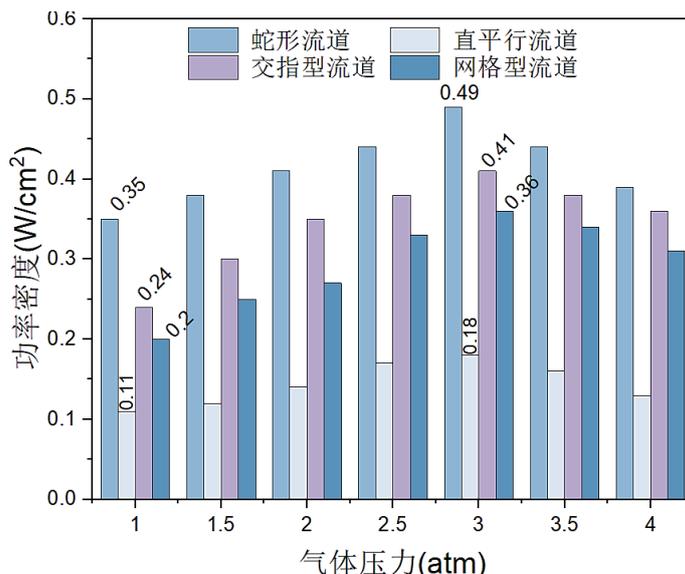


图 5-10 四种流道质子交换膜燃料电池的输出功率密度随气体压力的变化

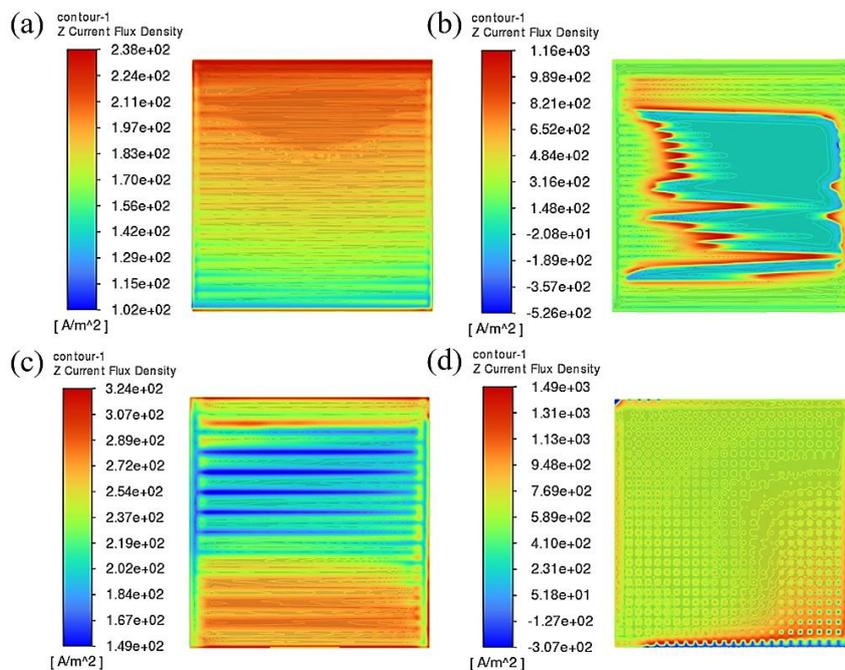


图 5-11 四种流道燃料电池在 P=2.5 atm 下的阳极扩散层与催化层交界面处的电流密度分布
图 5-10 为四种流道质子交换膜燃料电池的输出功率密度随气体压力的变化。

图 5-11 为四种流道燃料电池在 $P=2.5 \text{ atm}$ 下的阳极扩散层与催化层交界面处的电流密度分布。从图 5-10 可以看出，气体压力在 $1 \text{ atm}-3 \text{ atm}$ 范围内，随着氢气和氧气压力的升高，电池的电流密度和输出功率会相应增大。当氢气压力从 1 atm 提高到 3 atm ，同时氧气压力也相应增加时，四种燃料电池的输出功率密度均有所提高，其中蛇形流道的输出功率密度提高了约 40%左右，直平行流道和交指型流道提高了约 70%左右，网格型流道流道提高了约 80%左右，这表明增加压力能够有效提升电池的输出能力。然而当气体压力超过 3 atm 时，电池的输出功率密度有所下降，这是因为过高的压力影响了反应气体的扩散速率和传质过程，压力过高会时气体的黏度增加，导致扩散系数减小，这在一定程度上会抵消因压力升高带来的扩散通量增加的效果^[81]。同时过高的压力可能会使气体在流道和多孔介质中的流动阻力增大，影响气体的均匀分布，进而影响电池的输出性能。

5.4.3 气体流量

气体流量是影响质子交换膜燃料电池性能的重要因素之一，它主要影响气体的供应和排放速度以及与催化剂表面的接触程度。图 5-12 为在压力固定为 2 atm 的情况下，通过改变气体流量，蛇形流道质子交换膜燃料电池的输出性能随氢气流量的变化。

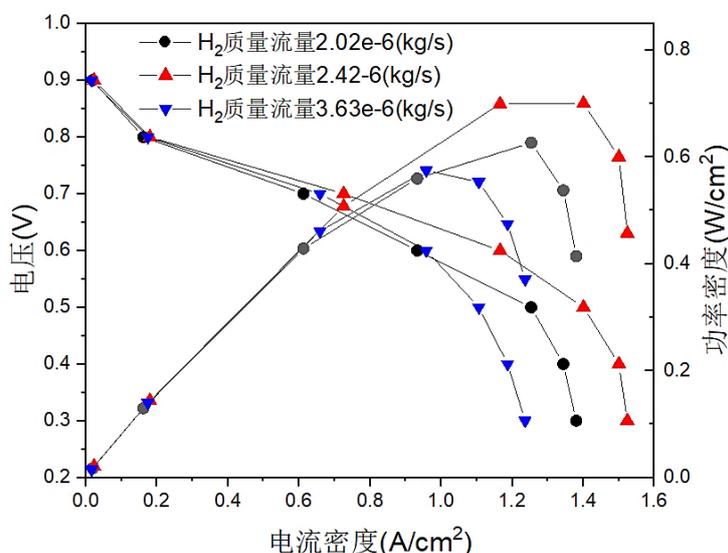


图 5-12 蛇形流道质子交换膜燃料电池的输出性能随氢气质量流量的变化

从图 5-12 可以看出，当氢气流量从 $2.02 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ 提高到 $2.42 \times 10^{-6} \text{ kg/s}$ ，电池性能有所提升。在电压为 0.5 V ，电流密度从 1.25 A/cm^2 增加到 1.40 A/cm^2 ，功率密度从 0.63 W/cm^2 提升到 0.70 W/cm^2 。这是因为适当增加气体流量，确保了反应物的充足供应，同时及时排出了反应产物，维持了良好的传质条件，有利于电化学反应的持续进行^[82]。然而，当气体流量继续增加时，电池性能反而有所降低。

当氢气流量增加到 3.63×10^{-6} kg/s, 电流密度降低到 1.11 W/cm²。这表明, 在一定压力下, 气体流量存在一个最佳范围, 超过这个范围后, 继续增加气体流量对电池性能反而有抑制作用。

5.5 基于特征值与 MEA 性能描述符的研究

为了更加高效的评价 MEA 整体的性能, 从特征值的角度出发, 分析了流场的结构参数和运行工况参数对 MEA 性能的影响。对于流道结构参数, 主要提取了流道宽度、深度、肋宽等几何参数作为特征值, 对于运行工况参数, 通过 CFD 软件, 主要提取气体流量、压力、操作温度等关键参数作为特征值。采用随机森林方法分析不同特征值对输出功率密度的影响, 将决策树的数量设置为 100, 树的最大深度设置为 10。图 5-13 为 17 个特征的重要性评估。借助于神经网络构建起 MEA 均匀度与不同流道结构尺寸不同运行工况特征值之间的数学模型, 进而通过预测模型对 MEA 均匀度进行预测。

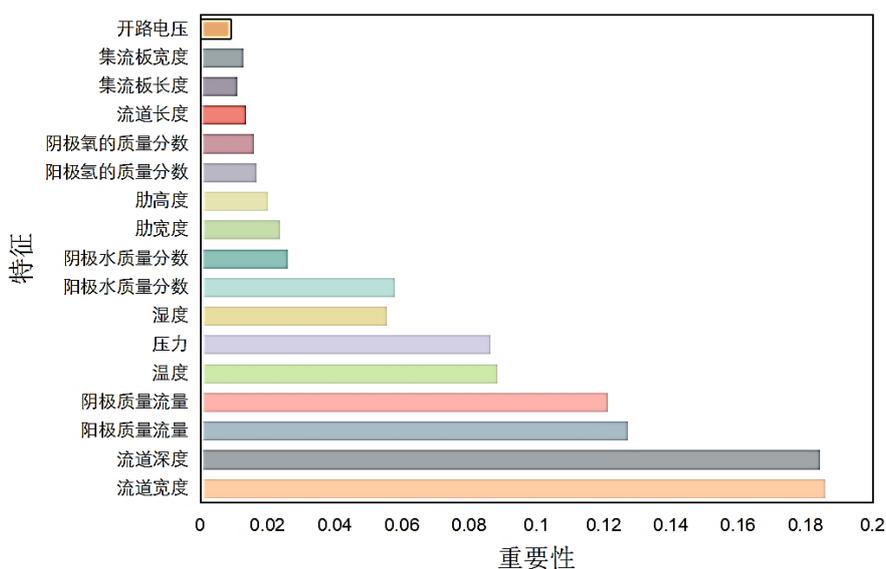


图 5-13 重要性分析

5.5.1 神经网络选择

BP 神经网络, 即反向传播神经网络, 其本质是采用误差逆向传播机制的多层级前馈式网络架构。常规情况下由数据输入的接口层、若干隐含层单元以及最终输出结果的处理层构成。在输入层的设计上, 将提取的流场结构特征值和运行工况特征值作为输入参数, 神经网络能够充分考虑流场结构和运行工况对 MEA 性能的综合影响。输出层则选择功率密度作为性能评价指标。

5.5.2 多变量神经网络预测模型构建

基于特征值，本节引入四种典型流道质子交换膜燃料电池的流场结构尺寸和运行工况特征值作为输入值，如表 5-1 所示。

表 5-1 输入指标及其参数范围

输入指标	参数值列表
流道宽度(mm)	0.5、1、1.5
流道深度(mm)	0.3、0.4、0.5、0.6、0.8、1.0、1.2
流道长度(mm)	47、47.5、48、49
肋宽度(mm)	0.5、1、1.5
肋高度(mm)	0.3、0.4、0.5、0.6、0.8、1.0、1.2
极板长度(mm)	50
极板宽度(mm)	50
阳极水的质量分数	0.1039、0.1339、0.1679、0.2084、0.2544、 0.3053、0.3603、0.4181
阳极氢的质量分数	0.896、0.8668、0.832、0.7915、0.7455、 0.6946、0.6396、0.5818
阴极水的质量分数	0.0160、0.0212、0.0278、0.0363、0.0469、 0.0602、0.0769、0.0977
阴极氧的质量分数	0.2293、0.2281、0.2265、0.2246、0.2221、 0.2189、0.2151、0.2102
阳极质量流量(kg/s)	1.78e-06、2.02e-06、2.12e-06、2.25e-06、 2.42e-06、2.63e-06、2.89e-06、3.63e-06
阴极质量流量(kg/s)	5.87e-05、5.90e-05、5.95e-05、6.00e-05、 6.07e-05、6.15e-05、6.26e-05、6.41e-05
温度(°C)	30、40、50、60、70、80、90、100
压力(atm)	1、1.5、2、2.5、3、3.5、4、4.5
湿度	0.6、0.8
开路电压	0.3、0.35、0.4、0.45、0.5、0.6、0.7、0.8、 0.9

5.5.3 神经网络模型预测效果分析

利用神经网络分别得到了四种典型流道采用五种 MEA 材料在不同结构和工

况下的特征值与相对应的 MEA 均匀度模拟值之间的关系，如图 5-14 所示。

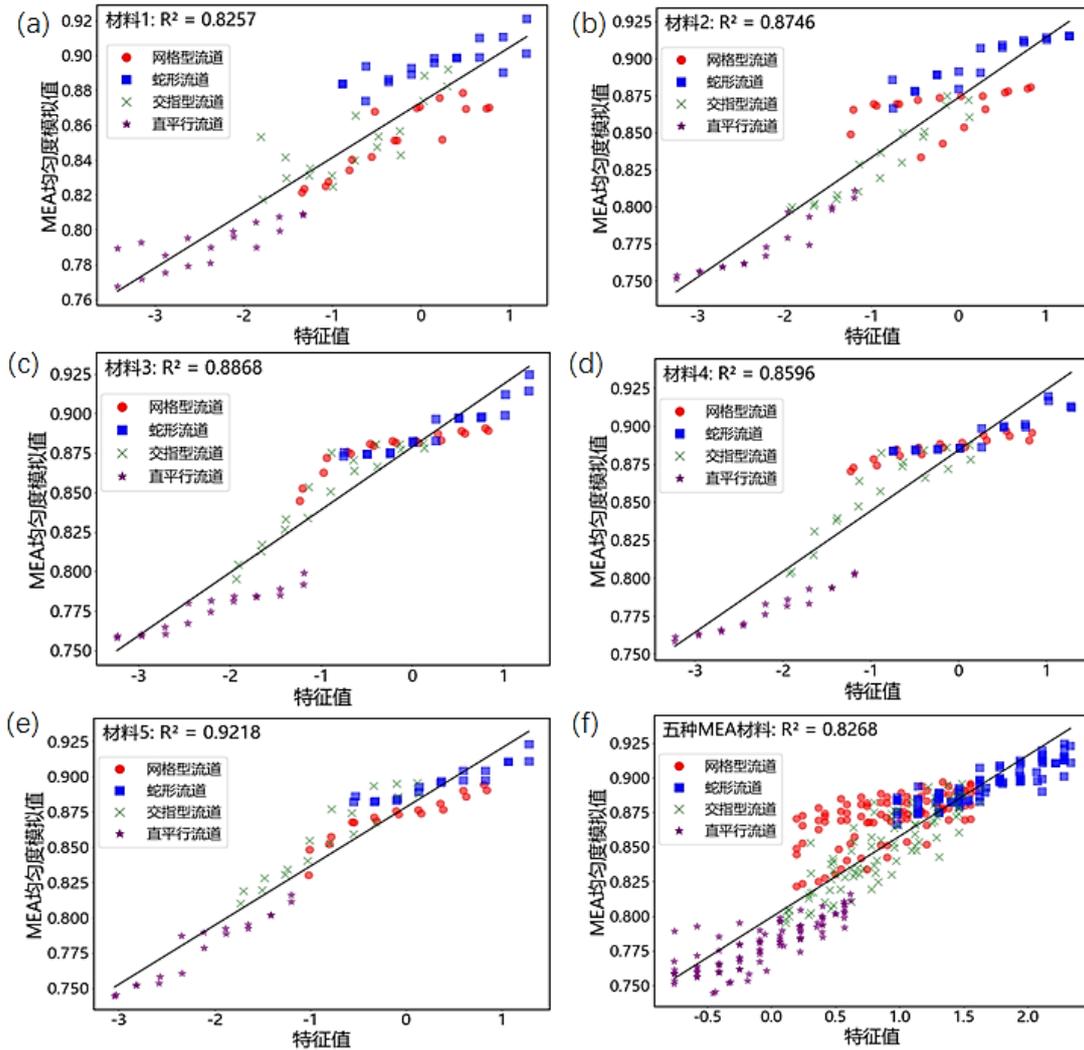


图 5-14 四种流道采用不同 MEA 材料下的 MEA 均匀度模拟值与不同流场结构与运行工况特征值的关系 a)第一种材料 b)第二种材料 c)第三种材料 d)第四种材料 e)第五种材料 f)五种材料下的 MEA 均匀度模拟值与不同流场结构与运行工况特征值的关系

从图 5-14 可以看出，五种 MEA 材料下的 MEA 均匀度模拟值与不同流道结构尺寸、不同运行工况的特征值都具有很好的拟合度，回归系数 R^2 分别为 0.8257、0.8746、0.8868、0.8596 和 0.9067。从图 5-15 可以看出 MEA 均匀度模拟值与预测值具有很高的拟合度，回归系数 R^2 为 0.9942，表明该神经网络模型训练成功并可以用于对 MEA 均匀度的预测。图 5-16 为 5 种 MEA 材料下功率密度与 MEA 均匀度的斜率 K 的模拟值与预测值。

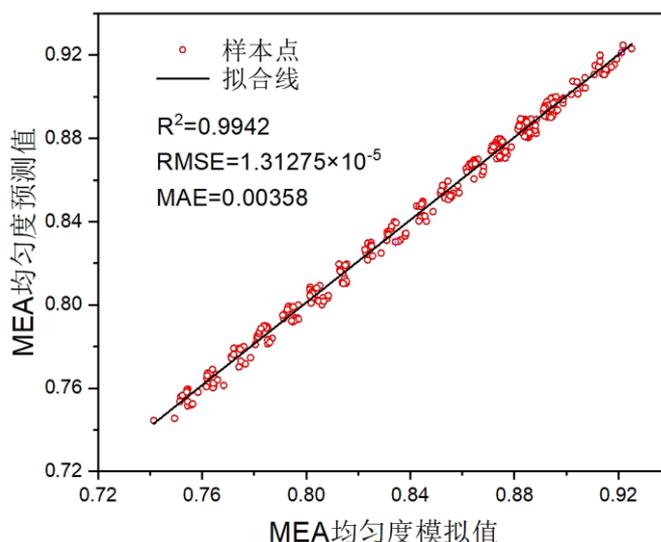


图 5-15 MEA 均匀度模拟值与预测值的相关性

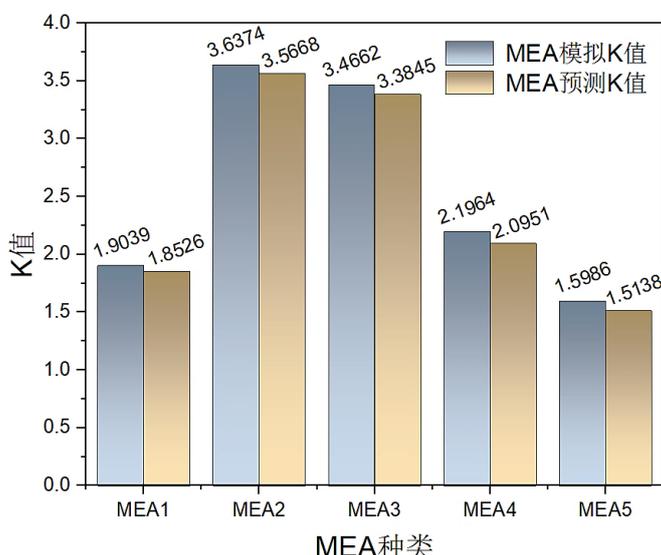


图 5-16 5 种 MEA 材料下功率密度与 MEA 均匀度的斜率 K 的模拟值与预测值

从图 5-16 可以看出，在每种 MEA 材料下，MEA 的模拟 K 值与预测 K 值的最大误差小于 5.6%，说明该模型可以用来对 MEA 的性能进行预测，进而与功率密度建立线性关系，利用斜率 K 值的大小来表征 MEA 的材料特性。进一步地，对于每种膜电极材料，在不同流道结构尺寸不同运行工况下的 MEA 均匀度与其流道结构尺寸和运行工况的特征值均呈现较高的拟合度，根据得到的数学模型，可以预测其他结构尺寸和工况下的 MEA 均匀度。

5.6 MEA 性能评估网站的设计

为了方便工程测试人员评估 MEA 的性能，联合第四章建立的 MEA 均匀度与输出功率密度间的模型和第五章获得的测试工况特征值与 MEA 均匀度间的模型，基于 Python 和 Streamlit 构建了交互式 Web 应用程序，用户可以方便地输入测试工况

的参数并查看MEA性能评估结果，极大的提升了用户对数据的分析效率，网址为 <https://energystorage-aivaqmrzxo5ydwqxnmpc.streamlit.app/>。

5.6.1 网页界面展示

如图 5-17 所示，用户进入到网页界面首先需要进行流道类型的选择，支持蛇形流道、直平行流道、交指型流道及网格型流道四类构型，每种类型预设至少 5 组测试样本，样本数据涵盖流道宽深比、肋宽比等结构特征值及流量、温度、湿度等运行工况特征值。设置好测试参数后便能可视化输出目标流场构型下膜电极组件（MEA）的均匀度预测值、功率密度分布曲线。



图 5-17 测试参数输入界面

5.6.2 测试结果展示

根据用户输入的参数，最终可对 MEA 性能进行评估，如图 5-18 所示。

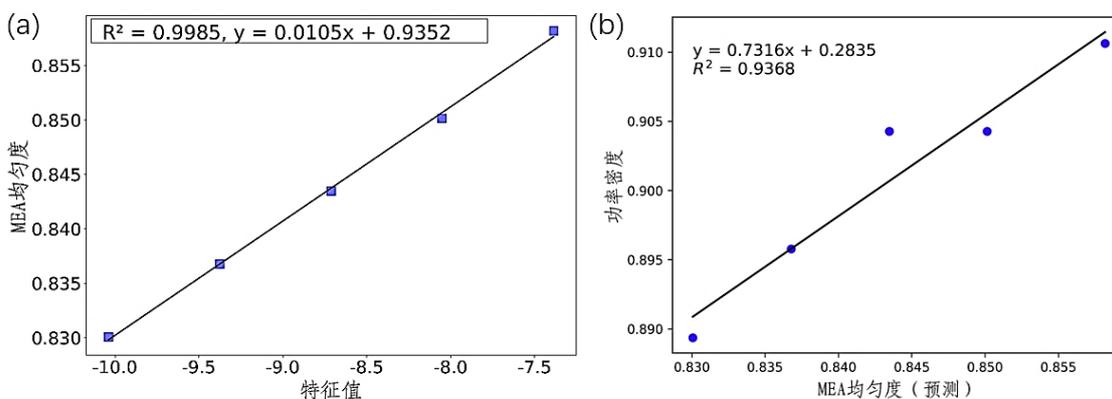


图 5-18 MEA 性能评估图 a)根据测试参数预测 MEA 均匀度 b)拟合 MEA 均匀度与功率密度 其中 5-18 a)为根据测试参数特征值预测出来的 MEA 均匀度，5-18 b)为预测

出来的 MEA 均匀度与功率密度之间的线性关系。通过改变输入参数，最终可以得到 MEA 均匀度与相对于的输出功率密度间的线性关系，斜率 K 即为表征 MEA 的性能，而通过比较 K 值的大小，便能反映出不同 MEA 材料之间的性能差异，以此可实现对 MEA 性能的快速检测。

5.7 本章小结

为了更加高效的评价膜电极的性能，从特征值的角度出发，同样以典型流道（蛇形流道、直平行流道、交指型流道、网格型流道）为研究对象，分别改变流道的结构尺寸（流道宽度、深度、肋宽度等）、运行工况（气体流量、气体压力、操作温度等）以及 MEA 的材料特性，对质子交换膜燃料电池进行了仿真模拟，分析了流场结构特征值和运行工况特征值对 MEA 的影响，利用随机森林评估了不同特征值对燃料电池输出功率密度的重要性，采用神经网络建立起了 MEA 均匀度与流场结构尺寸和运行工况特征值的关系，得到了以下结论：

（1）在流道结构特征方面，通过适当降低流道深度，有利于增加气体在流道内的平均流速增，提高电池在高电流密度区域的功率密度。在所设定的深度区间内，确立了流道深度为 0.6 mm 时电池的性能最好。另外将流道宽度从 1 mm 减小到 0.5 mm，电池的电流密度在相同工作电压下提高了约 25%，说明较窄的流道有利于提高了电池的输出性能。最后将肋宽度从 1 mm 减小到 0.5 mm，电池的电流密度在相同工作条件下提高了约 20%，说明适当减小流道肋宽也有助于提高电池的输出性能。

（2）在运行工况特征方面，适当提高反应区温度有助于提高电池性能。在 RH=60%的情况下，反应区温度为 70℃ 电池内部的质子传导率和输出功率密度最大；在 RH=80%的情况下，反应区温度为 80℃ 电池内部的质子传导率和输出功率密度最大。气体压力的改变会影响电池的性能，当氢气压力从 1 atm 提高到 3 atm，同时氧气压力也相应增加时，四种燃料电池的输出功率密度均有所提高，其中蛇形流道的输出功率密度提高了约 40%左右，直平行流道和交指型流道提高了约 70%左右，网格型流道流道提高了约 80%左右，这表明适当增加压力能够有效提升电池的输出能力。气体流量同样会显著影响到电池的输出性能，当氢气流量从 2.02×10^{-6} kg/s 提高到 2.42×10^{-6} kg/s，在电压为 0.5 V 时，电流密度从 1.25 A/cm² 增加到 1.40 A/cm²，而当氢气流量增加到 3.63×10^{-6} kg/s 时，电流密度却降低到 1.11 W/cm²，表明在一定压力下，气体流量存在一个最佳范围，超过这个范围后，继续增加气体流量对电池性能反而有抑制作用。

（3）五种 MEA 材料下，其对应的 MEA 均匀度与不同流道的结构尺寸和运行工况间的特征值都具有较高的拟合度，表明该神经网络模型训练成功并可以用

于对 MEA 均匀度的预测，根据得到的数学模型，基于 Python 和 Streamlit 构建了交互式 Web 应用程序，通过输入特征参数可以预测不同流道结构尺寸和运行工况下的 MEA 均匀度，进而建立起了 MEA 均匀度预测值与输出功率密度间的线性关系，通过比较 K 值的大小来定量评估 MEA 性能。

第 6 章 总结与展望

6.1 总结

本文主要围绕基于流场特性的质子交换膜燃料电池膜电极性能评价模型展开了研究，运用理论分析、数值模拟与机器学习相结合的方式寻找评价膜电极性能的模型。首先建立了质子交换膜燃料电池三维、多相、稳态计算流体力学模型，并根据前人的实验数据进行模型验证。首先，在流场特性对膜电极性能影响的研究中，详细分析了不同流场结构，包括蛇形流场、直平行流场、交指型流场和网格型流场对膜电极性能的影响机制。并且深入探讨了流场结构参数，如流道宽度、深度、肋宽等，运行工况参数，如温度、压力、气体流量和湿度等，对膜电极性能的影响规律。其次，根据流场的特点，将流场均匀度作为评价 MEA 性能的指标，综合考虑了浓度场、速度场、压力场和温度场，分别计算了不同流场结构、不同运行工况、不同 MEA 材料下，四种典型流道质子交换膜燃料电池 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度，并以 PEMFC 的输出功率密度为目标函数，利用神经网络建立起了 MEA 均匀度与目标函数之间的数学模型。最后，为了节省计算资源和贴近于工程实际，从特征值的角度出发，针对不同流场 PEMFC 的自身特点，提取了流场结构特征值和运行工况特征值，并以流场结构和运行工况特征值为变量，MEA 均匀度为目标函数，利用神经网络建立流场结构和运行工况特征值与目标函数之间的映射关系，依据得到的关系，分析结构和运行工况特征值，可对不同 MEA 材料下的 MEA 性能进行评估和预测。本文得到的主要结论如下：

(1) 在流场特性对膜电极性能影响的研究中，发现不同流场结构在极化曲线、功率密度、气体浓度分布、电流密度分布等方面表现出显著差异。平行流场结构简单，但气体分布不均匀，导致在高电流密度下电池性能下降明显；蛇形流场通过延长气体流动路径，提高了气体分布的均匀性，在一定程度上改善了电池性能；交指型流场利用强制对流的方式，实现了气体在膜电极表面的均匀分布，有效减少了浓差极化，在高电流密度下展现出优异的性能；网格型流场通过网格小孔有助于排水，避免膜电极的水积聚，改善了传质性能。

(2) 在流场结构参数和运行工况参数对膜电极性能影响的研究中，发现在一定范围内减小流道深度，可增加气体与催化剂层的接触面积，提高气体扩散效率，促进电化学反应，从而提升电流密度和功率密度，适当的减小流道宽度和肋宽有助于增加气体流速和气体扩散的有效面积，提高催化剂的利用率和传质效果，在本文的研究中，流道深度取 0.5 mm，流道宽度与肋宽的比为 1:1 时，电池性能最好。同时适当提高反应区温度和进气压力可以加快电化学反应速率，提高功率密度；增加气体流量可以改善气体浓度分布，提高电流密度；控制合适的湿度可

以保持质子交换膜的质子传导性能，提升电池性能。在本文的研究中，RH=60%，确定的最佳反应区温度为 70℃，最佳气体压力为 3 atm，最佳 H₂ 进气流量为 2.42×10^{-6} kg/s。

(3) 以流场均匀度作为评价 MEA 性能的指标，利用机器学习建立了起了燃料电池的输出功率密度与 MEA 均匀度的线性关系。其中输入值分别为不同流道结构尺寸、不同运行条件、不同 MEA 材料特性下的 MEA 各层接触面的四种物理场的均匀度，输出值为对应的功率密度，训练结果表明在输出值与输入值之间存在较高的拟合度，R² 分别为 0.9780、0.9745、0.9709、0.9848 和 0.9603，得到的线性表达式分别为： $y_1=1.9039x-1.3304$ 、 $y_2=3.6374x-2.5519$ 、 $y_3=3.4662x-2.4296$ 、 $y_4=2.1964x-1.4572$ 、 $y_5=1.5986x-1.0424$ 。即在 MEA 材料固定下，通过改变流道的结构尺寸和模拟工况，其对应的输出功率密度与得到的 MEA 的均匀度的比值是一个定值 K，并将 K 值的大小与 MEA 的材料属性进行了数值关联，分别将五种 MEA 材料属性值进行了归一化处理，绘制雷达图并求得面积，由高到低依次为 S₂、S₃、S₄、S₁、S₅，这与斜率 K 变化趋势一致，说明二者呈现正相关性，验证了 MEA 性能评价描述符的合理性，即斜率 K 反映的就是 MEA 自身的材料特性。同时通过比较不同 MEA 材料下的斜率 K 便能直观的反映出 MEA 材料性能的好坏的一个程度。

(4) 为了更加高效的评价膜电极的性能，从特征值的角度出发，根据不同流场 PEMFC 的自身特点，提取了流场结构特征值和运行工况特征值，并以流场结构和运行工况特征值为变量，MEA 均匀度为目标函数，利用神经网络建立起了不同流场结构和运行工况特征值与目标函数之间的映射关系，发现在每种 MEA 材料下，其对应的 MEA 均匀度与不同流道的结构尺寸和运行工况的特征值都具有较高的拟合度，表明该神经网络模型训练成功并可以用于对 MEA 均匀度的预测。而通过分析不同结构和运行工况特征值，便可对不同膜电极材料下的 MEA 均匀度进行评估和预测，进而提高燃料电池的输出性能。

6.2 展望

本文围绕流场特性，分析了不同流道结构尺寸、不同运行工况、不同膜电极材料对 MEA 性能的影响，建立起了评价 MEA 性能模型，但在研究过程中，仍有一些问题需要改进：

(1) 本文对流场的分析是基于数值模拟结果，虽然采用了较为先进的计算流体力学软件和多物理场耦合模型，但模型中仍然存在一些简化和假设。对一些复杂的物理过程，如电化学反应动力学、气体在多孔介质中的扩散等，可能无法完全准确地描述，这可能会导致模拟结果与实际情况存在一定的偏差。此外，模

拟过程中所使用的材料参数和边界条件等，大多是基于现有的文献资料和实验数据，实际应用中的材料性能和工况可能会有所不同，这也会影响模拟结果的准确性和可靠性。之后的工作应采取数值模拟计算与实验相结合的方式，利用实验数据不断优化和验证模拟模型，提高模型的准确性和可靠性本。

(2) 本文主要聚焦于稳态工况下的燃料电池膜电极性能分析，对于动态工况下，如燃料电池在启动、停止、负载突变等过程中，MEA 材料、流场结构和运行工况之间的相互作用及其对电池性能的影响研究较少。未来应加强对动态工况的研究，建立动态模型，深入探究动态过程中的性能变化规律，为燃料电池系统的动态优化和控制提供理论依据。

(3) 提高神经网络预测模型的效率和精度。基于数值解析模型，首先求解并比较影响燃料电池输出性能的关键输入因素。根据这些结果，调整和扩充训练数据集的组成元素和数量。同时，了解不同神经网络训练算法的基本原理及其应用领域，并通过协同优化隐藏层数量等因素，从而提高训练的效率和精度。

参考文献

- [1] 刘玲玲. 2023 年全球化石能源消费量占比微降至 81.5%[N]. 中国煤炭报, 2024-06-25(007).
- [2] 刘祥荣, 蒋宇, 张雪霞, 等. 质子交换膜燃料电池三维数值仿真研究综述[J]. 中国电机工程学报, 2021, 41(21): 7352-7370.
- [3] 赵强, 郭航, 叶芳, 等. 质子交换膜燃料电池流场板研究进展[J]. 化工学报, 2020, 71(05): 1943-1963.
- [4] Wang S, Jiang S P. Prospects of fuel cell technologies[J]. National Science Review, 2017, 4(2): 163-166.
- [5] 王洪建, 程健, 张瑞云, 等. 质子交换膜燃料电池应用现状及分析[J]. 热力发电, 2016, 45(03): 1-7+19.
- [6] 俞博文. 氢燃料电池质子交换膜研究现状及展望[J]. 塑料工业, 2021, 49(09): 6-10+90.
- [7] 赵邓玉, 邹文文, 赵康宁, 等. 氢能质子交换膜燃料电池核心技术和应用前景[J]. 自然杂志, 2020, 42(01): 44-50.
- [8] Yang C, Wan Z, Chen X, et al. Geometry optimization of a novel M-like flow field in a proton exchange membrane fuel cell[J]. Energy Conversion and Management, 2021, 228: 113651.
- [9] 童鑫, 熊哲, 高新宇, 等. 质子交换膜燃料电池研究现状及发展[J]. 硅酸盐通报, 2022, 41(09): 3243-3258.
- [10] Min T, Zhang R, Chen L, et al. Reactive Transport Processes in Proton Exchange Membrane Fuel Cells[J]. Encyclopedia, 2023, 3(2): 746-758.
- [11] 高莹. 质子交换膜燃料电池流道参数优化及性能分析[D]. 中国石油大学(北京), 2022.
- [12] Ijaodola O, Hassan E Z, Ogungbemi E, et al. Energy efficiency improvements by investigating the water flooding management on proton exchange membrane fuel cell (PEMFC)[J]. Energy, 2019, 179: 246-267.
- [13] Li W Z, Yang W W, Wang N, et al. Optimization of blocked channel design for a proton exchange membrane fuel cell by coupled genetic algorithm and three-dimensional CFD modeling[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(35): 17759-17770.
- [14] Quangang X, Tong Z, Zhifei S, et al. Design and optimization of thermal strategy to improve the thermal management of proton exchange membrane fuel cells[J]. Applied Thermal Engineering, 2023, 222.
- [15] Seydali F, Hegazy R, Ali D, et al. Optimal heuristic economic management strategy for microgrids based PEM fuel cells[J]. International Journal of Hydrogen Energy,

- 2024, 52(PC): 775-784.
- [16] 简弃非, 王丹, 魏蕤. 交指型流场结构的质子交换膜燃料电池温度分布特性模拟[J]. 兵工学报, 2009, 30(09): 1248-1252.
- [17] Manso A, Marzo F, Barranco J, et al. Influence of geometric parameters of the flow fields on the performance of a PEM fuel cell. A review[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012, 37(20): 15256-15287.
- [18] 甘忠禹, 陈涛, 张瑞轩, 等. 质子交换膜燃料电池叶脉型流场结构与优化[J]. 电源技术, 2024, 48(07): 1327-1333.
- [19] 李云飞, 王致鹏, 段磊, 等. 质子交换膜燃料电池有序化膜电极研究进展[J]. 化工进展, 2021, 40(S1): 101-110.
- [20] Bhosale A C, Ghosh P C, Assaud L. Preparation methods of membrane electrode assemblies for proton exchange membrane fuel cells and unitized regenerative fuel cells: A review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 133: 110286.
- [21] 邢以晶, 刘芳, 张雅琳, 等. 质子交换膜燃料电池膜电极制备方法的研究进展[J]. 化工进展, 2021, 40(S1): 281-290.
- [22] Tempelaere M, Zimmermann M, Chatenet M. 3D-structured electrocatalysts for improved mass-transfer in proton-exchange membrane fuel cell cathodes[J]. Current Opinion in Electrochemistry, 2023: 101353.
- [23] Reddy E H, Jayanti S, Monder D S. Thermal management of high temperature polymer electrolyte membrane fuel cell stacks in the power range of 1–10 kWe[J]. international journal of hydrogen energy, 2014, 39(35): 20127-20138.
- [24] Towne S, Viswanathan V, Holbery J, et al. Fabrication of polymer electrolyte membrane fuel cell MEAs utilizing inkjet print technology[J]. Journal of Power Sources, 2007, 171(2): 575-584.
- [25] Huang L, Qi R. A comprehensive review on assembly design strategies on proton exchange membrane applications[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(80): 33903-33918.
- [26] Gong X, Ruan M, Song P, et al. A cost-effective and highly efficient dissymmetric membrane electrode assembly designed for fuel cells[J]. Journal of Power Sources, 2021, 489: 229485.
- [27] Shahgaldi S, Alaefour I, Li X. Impact of manufacturing processes on proton exchange membrane fuel cell performance[J]. Applied Energy, 2018, 225: 1022-1032.
- [28] Liu R, Zhou W, Ling W, et al. Performance optimization of ultra-low platinum loading membrane electrode assembly prepared by electrostatic spraying[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(17): 10457-10467.
- [29] Zeng Y, Shao Z, Zhang H, et al. Nanostructured ultrathin catalyst layer based on open-walled PtCo bimetallic nanotube arrays for proton exchange membrane fuel

- cells[J]. *Nano Energy*, 2017, 34: 344-355.
- [30] Fidiani E, AlKahfi A Z, Absor M A U, et al. Au-doped PtAg nanorod array electrodes for proton-exchange membrane fuel cells[J]. *ACS Applied Energy Materials*, 2022, 5(12): 14979-14989.
- [31] Zhang C, Yu H, Li Y, et al. Supported Noble Metals on Hydrogen - Treated TiO₂ Nanotube Arrays as Highly Ordered Electrodes for Fuel Cells[J]. *ChemSusChem*, 2013, 6(4): 659-666.
- [32] Tian Z Q, Lim S H, Poh C K, et al. A highly order - structured membrane electrode assembly with vertically aligned carbon nanotubes for ultra - low Pt loading PEM fuel cells[J]. *Advanced energy materials*, 2011, 1(6): 1205-1214.
- [33] Chen J, Matsuura T, Hori M. Novel gas diffusion layer with water management function for PEMFC[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 131(1): 155-161.
- [34] Mirzazadeh J, Saievar-Iranizad E, Nahavandi L. An analytical approach on effect of diffusion layer on ORR for PEMFCs[J]. *Journal of power sources*, 2004, 131(1-2): 194-199.
- [35] Qi Z, Kaufman A. Improvement of water management by a microporous sublayer for PEM fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2002, 109(1): 38-46.
- [36] Liu C Y, Sung C C. A review of the performance and analysis of proton exchange membrane fuel cell membrane electrode assemblies[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, 220: 348-353.
- [37] Lee M, Uchida M, Yano H, et al. New evaluation method for the effectiveness of platinum/carbon electrocatalysts under operating conditions[J]. *Electrochimica Acta*, 2010, 55(28): 8504-8512.
- [38] Van Nguyen T, Lin G. Effect of Morphological and Wetting Properties of the Gas Diffusion Layers on the Performance of a PEM Fuel Cell[C]//ECS Meeting Abstracts. IOP Publishing, 2006 (18): 759.
- [39] Kim H, Subramanian P N, Popov N B. Preparation of PEM fuel cell electrodes using pulse electrodeposition[J]. *Journal of Power Sources*, 2004, 138(1-2): 14-24.
- [40] C.H Hsu, C.C Wan, An innovative process for PEMFC electrodes using the expansion of Nafion film, *Journal of Power Sources*, 2003, 115(2): 268-273.
- [41] Silva B V, Rouboa A. Hydrogen-fed PEMFC: Overvoltage analysis during an activation procedure[J]. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2012, 67158-66.
- [42] Bi W, Gray E G, Fuller F T. PEM Fuel Cell Pt/C Dissolution and Deposition in Nafion Electrolyte[J]. *Electrochemical and solid-state letters*, 2007, 10(5): B101-B104.
- [43] Weng F, Jou B, Su A, et al. Design, fabrication and performance analysis of a 200 W PEM fuel cell short stack[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 171(1): 179-185.
- [44] Yang C, Hu M, Wang C, et al. A three-step activation method for proton exchange

- membrane fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2012, 197180-185.
- [45] Hu M, Zhao R, Pan R, et al. Disclosure of the internal mechanism during activating a proton exchange membrane fuel cell based on the three-step activation method[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 46(3): 3008-3021.
- [46] Zuo Q, Li Q, Chen W, et al. Optimization of blocked flow field performance of proton exchange membrane fuel cell with auxiliary channels[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(94): 39943-39960.
- [47] Ohenoja, M.; Leiviskä, K. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, 35(22), 12618-12625.
- [48] Bao Z, Xie B, Li W, Zhong S, Fan L, Tongsh C, Gao F, Du Q, Benbouzid M, Jiao K. High-consistency proton exchange membrane fuel cells enabled by oxygen-electron mixed-pathway electrodes via digitalization design. *Sci Bull (Beijing)*. 2023 Feb 15; 68(3): 266-275.
- [49] Chen L, Zhang R, He P, et al. Nanoscale simulation of local gas transport in catalyst layers of proton exchange membrane fuel cells[J]. *Journal of Power Sources*, 2018, 400: 114-125.
- [50] Xiong Dan, Wei li, Fandi Ning, Qinglin Wen, Lei He, Yali Li, Can He, Xiaochun Zhou. In Situ Flame-Synthesized Carbon Nanotubes on Carbon Paper as a Microporous Layer for Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *ACS Applied Energy Materials* 2023, 6 (11), 6019-6028.
- [51] He Y, Liu S, Priest C, et al. Atomically dispersed metal–nitrogen–carbon catalysts for fuel cells: advances in catalyst design, electrode performance, and durability improvement[J]. *Chemical Society Reviews*, 2020, 49(11): 3484-3524.
- [52] ALINK R, SINGH R, SCHNEIER P, et al. Full parametric study of the influence of ionomer content, catalyst loading and catalyst type on oxygen and ion transport in PEM fuel cell catalyst layers [J]. *Molecules*, 2020, 25(7): 1523.
- [53] BRAATEN J P, KARIUKI N N, MYERS D J, et al. Integration of a high oxygen permeability ionomer into polymer electrolyte membrane fuel cell cathodes for high efficiency and power density[J]. *J. Power Sources*, 2022, 522: 230821.
- [54] Shahgaldi S, Ozden A, Li X, et al. Cathode catalyst layer design with gradients of ionomer distribution for proton exchange membrane fuel cells[J]. *Energy Conversion and Management*, 2018, 171: 1476-1486.
- [55] DongHyun L, GeunTae Y, Gisu D, et al. Hierarchical Wrinkle-Structured Catalyst Layer/Membrane Interface for Ultralow Pt-Loading Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells (PEMFCs). [J]. *Nano letters*, 2022, 22(3): 1174-1182.
- [56] CHOI J, YEON JH, YOON S H, et al. Multifunctional Nafion/CeO₂ dendritic structures for enhanced durability and performance of polymer electrolyte membrane fuel cells[J]. *ACS Appl Mater Inter*, 2021, 13(1): 806-815.
- [57] Zhang W, Guo F, Zhou Y, et al. Gas diffusion layer with a regular hydrophilic

- structure boosts the power density of proton exchange membrane fuel cells via the construction of water highways[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, 14(15): 17578-17584.
- [58] Liang C, Rui L, Mengcheng D, et al. Optimizing the Mass-Transfer Efficiency of a Microporous Layer for High-Performance Proton Exchange Membrane Fuel Cells[J]. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 2021, 125(25): 14122-14133.
- [59] Huang Y, Zhang S, Zhang M, et al. Fractal analysis of polymer electrolyte fuel cell performance influenced by rough contact between microporous layer and catalyst layer[J]. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2018, 40(23): 2792-2798.
- [60] Wang S, Guan S, Zhang L, et al. Enhancing the properties of water and gas management for proton exchange membrane fuel cells via tailored intersected cracks in a microporous layer[J]. *Journal of Power Sources*, 2022, 533: 231402.
- [61] 蔡超. 质子交换膜燃料电池耐久性及其反极研究[D]. 武汉理工大学, 2018.
- [62] He L, Hou M, Gao Y, et al. Experimental study of the S-shaped flow fields in proton exchange membrane fuel cells[J]. *Energy Conversion and Management*, 2020, 223: 113292.
- [63] 孟庆然, 陈海伦, 田爱华, 等. 流场沟槽对质子交换膜燃料电池性能的影响[J]. *电源技术*, 2021, 45(01): 22-26.
- [64] Wang Y, Yue L, Wang S. New design of a cathode flow-field with a sub-channel to improve the polymer electrolyte membrane fuel cell performance[J]. *Journal of Power Sources*, 2017, 344: 32-38.
- [65] 陈磊, 郭朋彦, 张瑞珠, 等. 质子交换膜燃料电池流道尺寸对电池性能的影响[J]. *河南科技*, 2018, (01): 141-142.
- [66] Rostami L, Haghshenasfard M, Sadeghi M, et al. A 3D CFD model of novel flow channel designs based on the serpentine and the parallel design for performance enhancement of PEMFC[J]. *Energy*, 2022, 258: 124726.
- [67] Deng S, Hao M, Wang R, et al. Improving water retention and mass transport for low-humidity proton exchange membrane fuel cells via a porous-channel interdigitated flow field[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, 95: 874-887.
- [68] Han B, Mo J, Kang Z, et al. Effects of membrane electrode assembly properties on two-phase transport and performance in proton exchange membrane electrolyzer cells[J]. *Electrochimica Acta*, 2016, 188: 317-326.
- [69] Wan Z, Pan D, Zhu X, et al. Numerical study on the performance of a novel three-dimensional stepped wavy flow field in PEMFC[J]. *Energy Conversion and Management: X*, 2023, 20: 100469.
- [70] Wang J, Zhu Y, Wang S, et al. Numerical investigation of high-temperature PEMFC

- thermal management using pyrolytic graphite[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024, 224: 125322.
- [71] Yang L, Sun Z Y, Zhang G M, et al. Unmasking the reactants inhomogeneity in gas diffusion layer and the performances of PEMFC induced by assembly pressure[J]. *Heliyon*, 2024, 10(12).
- [72] Zhang Z, Wang C, Chen C, et al. Optimal design of locally improved structure for enhancing mass transfer in PEMFC cathode flow field[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, 57: 798-811.
- [73] Branco C M, El-Kharouf A, Du S. Materials for polymer electrolyte membrane fuel cells (PEMFCs): Electrolyte membrane, gas diffusion layers, and bipolar plates[M]//Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. Elsevier, 2017: 1-11.
- [74] Salari S, Stumper J, Bahrami M. Direct measurement and modeling relative gas diffusivity of PEMFC catalyst layers: the effect of ionomer to carbon ratio, operating temperature, porosity, and pore size distribution[J]. *international journal of hydrogen energy*, 2018, 43(34): 16704-16718.
- [75] Zhang X, Ma X, Qin Y, et al. Modeling research of the impact of liquid water in channel on gas and water transport in proton exchange membrane fuel cell[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2024, 235:126127.
- [76] Lv Y, Wu S, Li N, et al. Flue gas suppression and environmental evaluation of deodorizer-modified rubber asphalt based on radar method[J]. *Construction and Building Materials*, 2024, 411: 134526.
- [77] Wang X R, Ma Y, Gao J, et al. Review on water management methods for proton exchange membrane fuel cells[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2021, 46(22): 12206-12229.
- [78] Li F, Cai S, Tu Z. Flow channel geometry optimization and novel criterion for improved water and thermal management in anion-exchange membrane fuel cell[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024, 87: 199-213.
- [79] Zhou Z, Qiu D, Peng L, et al. Channel/rib patterns optimization of a proton exchange membrane fuel cell by combining down-the-channel performance model and genetic algorithm[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2022, 183: 122235.
- [80] Ozen D N, Timurkutluk B, Altinisik K. Effects of operation temperature and reactant gas humidity levels on performance of PEM fuel cells[J]. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2016, 59: 1298-1306.
- [81] Zhang Z, Tao W Q. Effect of assembly pressure on the performance of proton exchange membrane fuel cell[J]. *Energy Storage and Saving*, 2023, 2(1): 359-369.
- [82] Duque L, Molinero A, Oller J C, et al. Study of Mass Transport in the Anode of a Proton Exchange Membrane Fuel Cell with a New Hydrogen Flow Rate Modulation Technique[J]. *ChemElectroChem*, 2024, 11(14): e202400100.

攻读硕士学位期间发表的论文及其它成果

- [1] Yang Weijie, Ge Han, Yao Tongao, Chen Qiyong, et al. Promotion mechanisms of LiBH₄ dehydrogenation dominated by charge redistribution [J]. Journal of Materials Chemistry A, 2025, 13(2): 1014-22. SCI 收录号: 001368295800001, IF:10.7, 除导师外第三作者
- [2] 杨维结, 陈启勇, 等. 一种与夹具流道无关的燃料电池膜电极性能评价方法: 中国, 202411100476.2[P].2024-12-06.

致 谢

路漫漫其修远兮，吾将上下而求索。落笔至此，思绪万千。二十载求学路，终于告一段落。一路走来，也终于弄明白了自己想要的到底是什么。每个阶段我都有不同的体会和收获，无论是喜悦还是酸楚，所有经历，于我都是幸运，所有相遇，于我都是宝藏。学业压力时常让我处于自我怀疑与自我否定的泥泽中，而在这期间总有朋友、家人、老师的陪伴和支持，让我收获了满满的善意和温暖。

桃李不言，下自成蹊。首先要郑重地感谢我的导师刘彦丰教授和毕业论文指导老师杨维结副教授，无论从选题，到开题，再到论文撰写，每一步都离不开老师们的悉心点拨和指导。正是因为你们对待科研求实的态度和对高标准的要求才让我走到今天，也让我在研究生三年中收获了人生中较为重要的解决问题的能力。在此衷心祝愿各位恩师桃李芬芳，教泽绵长！

漫漫求学路，悠悠父母心。攀着父母的肩膀，握着姐姐的手掌，我一路走到现在。他们一直以来坚定的支持和无私的付出，使我有机会推开一扇又一扇通往新世界的大门。愿今后的日子，时光能够慢一点，让我长大的快一些尽全力成为你们的骄傲，让你们幸福平安、健康快乐！

平生感知己，方寸岂悠悠。感谢 310 实验室的同门和师弟师妹们，同窗三载，朝夕相处，一起努力搞科研的日子弥足珍贵，必将终身难忘。山水一程，三生有幸，祝我们保持热爱，一起奔赴星辰大海。此去前程似锦，再相逢依然如故！

感谢一路平凡而又不断前行的自己，从未驻足。这些年自己吃过了很多苦头和教训，也重塑了我那颗易碎的玻璃心。希望以后自己能够从容豁达些，自信勇敢一点，永远保持着对生活的一份热忱，温暖自己也能够温暖身边人。我也知道接下来还有很多大山等着我去跨越，但是无论未来经历怎样的艰难坎坷，都希望自己能够坚持下去，并告诉自己，有付出的日子终会有收获的季节。

想说的话还有很多，想感谢的人也说不完，希望在我生命里的每一个人事业顺利、家庭美满！惟愿往后的日子里，我们都能光芒万丈，熠熠生辉，咱们江湖再见！

华北电力大学学位论文答辩委员会情况

	姓名	职称	工作单位	学科专长
答辩主席	李杰	教授级高 工	河北电力勘探设计 院	氢能系统
答辩委员 1	吴兵	高级工程 师	上海鲲华新能源科 技有限公司	氢能系统
答辩委员 2	叶陈良	副教授	华北电力大学	氢能系统
答辩委员 3	张炳东	副教授	华北电力大学	氢能系统
答辩委员 4	董帅	副教授	华北电力大学	氢能系统