燃料电池汽车动力系统过程模拟

陈黎明，林昭佳，马紫峰

上海交通大学化学工程系，电化学与能源技术研究所，上海200240

摘要：建立了包括燃料供应模块、燃料电池堆模块和水热平衡模块在内的质子交换膜燃料电池汽车动力系统数学模型。运用Matlab/Simulink软件进行模型构建和系统仿真，研究了主要操作条件对系统性能的影响。通过仿真结果与实验数据的对比，表明该模型能较为准确地反映动力系统的特性，为燃料电池汽车动力系统的研究和设计提供理论依据。

随着全世界汽车产量和保有量的日益增多，以石油产品为动力源的车辆所排放的废气已经成为影响地球气候和环境污染的主要来源，能源危机也日益加剧[1]。因此，人们迫切地需要开发低污染的替代能源汽车来改善能源短缺和环保问题，燃料电池汽车作为一种可行方案已成为世界各汽车厂商在技术领域进行竞争的焦点之一。与传统内燃机汽车相比，燃料电池汽车不通过热机过程，不受卡诺循环的限制，具有能量转化效率高、环境友好等内燃机汽车不可比拟的优点，同时仍然可以保持传统内燃机汽车高速度、长距离行驶和安全、舒适等性能，被认为是21世纪首选的洁净、高效运输工具。

动力系统是燃料电池汽车的核心部分，是决定整车性能的关键，也是其不同于传统内燃机汽车和其他类型电动汽车的标志，因此，对燃料电池汽车动力系统进行研究具有非常重要的意义。随着计算机技术的发展，建模仿真技术已经成为汽车动力系统研发过程中的一个重要手段。通过仿真分析可以灵活地调整设计方案，合理优化参数，预测不同操作条件下的系统性能，有助于样车的制造和试验。近年来，国内外学者对于燃料电池汽车动力系统中的电池堆模型研究得较多，可分为经验模型和机理模型，经验模型由于结构简单可以大大缩短建模时间，早在1995年，Kim等人[2]就建立了一个描述电压与电流密度之间关系的经验模型，最近，Alejandro等人[3]也开发了一个半经验模型，描述了气体流道和气体扩散层中各组分的流体动力学、热传导动力学和温度影响。机理模型则更有利于对电池堆内部结构和工作原理的研究，并已经从一维模型发展到了三维模型，然而对于系统层面上的仿真优化，一维模型更加合适[4]，本文的出发点是旨在建立燃料电池动力系统的完整模型。

燃料电池汽车动力系统中运用最为广泛的动力源是质子交换膜燃料电池(PEMFC)，本文以Matlab/Simulink软件为仿真平台建立了质子交换膜燃料电池汽车动力系统的完整模型。整套动力系统中燃料电池堆是核心部分，除了电池堆之外，还有燃料供应系统(氢气和空气供给)和水热管理系统等作为辅助系统。笔者分别建立了电池堆模块、燃料供应模块和水热平衡模块，齐集成为一套完整的车用燃料电池汽车动力系统模型。分析了氢气流量、空气流量、电堆温度、环境温度等不同操作条件对系统性能的影响。

1系统数学模型

在实际应用中，燃料电池汽车动力系统的工作压力和反应气类型的选择要考虑储存反应气的气瓶在车载时所受到的重量和尺寸限制、汽车续航里程的要求、燃料的经济性、系统工作的安全性和噪音等问题。本文的模拟对象采用高纯氢和空气作为反应气，其中氢气充装于高压储罐内，经减压阀再进入电池堆，空气供给采用无油型螺杆压缩机压缩至一定压力，经加湿后进入电池堆进行反应。

1.1燃料供应模块

(ⅰ)压缩机模型。压缩机主要用于为燃料电池提供高压空气，燃料电池专用的空气压缩机不仅需要满足无油润滑的结构设计，而且对它的重量、体积、变转速运行特性以及电堆参数变化的动态响应性能等都提出了严格的要求。本文中燃料电池汽车动力系统选用较为常用的螺杆压缩机作为模拟对象，并假设压缩机是在理想情况下工作，即无摩擦、无热交换、无泄漏、无吸排气压力损失的情况下进行吸气、压缩和排气。

已知被压缩的气体为理想气体时，螺杆压缩机的等熵绝热功率 P_{ad} 可按下式计算：

$$P_{ad}=\frac{\kappa}{\kappa-1}p_s q_v\left(\left(\frac{p_d}{p_s}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}-1\right), \quad (1)$$

式中，p_s 为压缩机的吸气压力(Pa)，p_d 为排气压力(Pa)，κ 是被压缩气体的等熵指数，q_v 为压缩机的实际容积流量(m^3/s)．由于等熵绝热功率是理想状态下的压缩机功率，它与实际功率 P_{comp} 的比值称为绝热效率，用 η_{ad} 表示．因此，压缩机的实际消耗功率为

$$P_{comp}=p_{ad}/\eta_{ad}. \quad (2)$$

一般在低压力、大中容积流量时，η_{ad} 取 0.75~0.85；高压力、小容积流量时，η_{ad} 取 0.65~0.75．

（ii） 气体分压模型． 该模型主要是求得氢气、氧气和水蒸气在两极中的分压．实际过程中，往往使氢气过量让氧气尽可能多的参与反应，因此，可以通过氢气流量来计算电池堆电流为

$$I=2uFq_{H_2}^{in}/N, \quad (3)$$

其中 u 为燃料利用率．电池中水蒸气的含量对 PEMFC 的性能影响很大，需要加湿来保证质子交换膜的离子传导性，一般均采用饱和增湿，即两极中水蒸气的分压等于其在该温度下的饱和蒸气压 p_{H_2O} (1 标准大气压)，求解公式如下[5]：

$$\begin{aligned}\log(p_{H_2O})&=2.95\times10^{-2}\cdot(T-273.15)\\&-9.18\times10^{-5}\cdot(T-273.15)^2\\&+1.44\times10^{-7}\cdot(T-273.15)^3-2.18. \quad (4)\end{aligned}$$

氢气分压为

$$p_{H_2}=0.5\cdot p_{H_2O}\cdot\left[\frac{1}{\exp\left(\frac{1.635\cdot(I/A)}{T^{1.334}}\right)\cdot\frac{p_{H_2O}}{p_a}}-1\right], \quad (5)$$

氧气分压有两种情况，当反应气为氧气时：

$$p_{O_2}=p_{H_2O}\cdot\left[\frac{1}{\exp\left(\frac{4.192\cdot(I/A)}{T^{1.334}}\right)\cdot\frac{p_{H_2O}}{p_c}}-1\right]. \quad (6)$$

当反应气为空气时：

$$p_{O_2}=p_c-p_{H_2O}-p_{N_2}\cdot\exp\left(\frac{0.291\cdot(I/A)}{T^{0.832}}\right). \quad (7)$$

其中 p_a 和 p_c 分别为阳极、阴极入口压力(1 标准大气压)，p_{N_2} 为空气中氮气在流道内的分压(1 标准大气压)，T 为电池温度(K)，A 为电极有效面积(cm^2)，I 是电池电流(A)．

1.2 电池堆模块

发生在质子交换膜燃料电池电极上的氧化还原反应可以表示为

阳极氧化反应：$2H_2\rightarrow4H^++4e^-$，

阴极还原反应：$O_2+4H^++4e^-\rightarrow2H_2O$，

电池总反应：$2H_2+O_2\rightarrow2H_2O$．

PEMFC 工作过程中由于活化极化、欧姆极化和浓差极化引起的不可逆电压损失的存在，实际燃料电池的电压会小于理想可逆电势．电池开路无负载时的热力学平衡可逆电势可由 Nernst 方程得到：

$$E_{Nernst}=\frac{\Delta G}{2F}+\frac{\Delta S}{2F}(T-T_0)+\frac{RT}{2F}\left[\ln(p_{H_2}\cdot p_{O_2}^{0.5})\right], \quad (8)$$

其中 T_0 是环境温度．在标准状态下，反应生成液态水，单电池的理想标准可逆电势为 1.229V．将标准状态下的各个参数值代入(8)式，可以得到 Nernst 方程的展开式如下：

$$\begin{aligned}E_{Nernst}&=1.229-0.85\times10^{-3}(T-298.15)+4.3085\\&\times10^{-5}T[\ln(p_{H_2}\cdot p_{O_2}^{0.5})], \quad (9)\end{aligned}$$

在阳极和阴极产生的活化极化过电压可由经验方程得到[6]：

$$\begin{aligned}U_{act}&=-[\xi_1+\xi_2\cdot T+\xi_3\cdot T\cdot\ln(C_{O_2})+\xi_4\cdot T\cdot\ln(I)]\\&=-[-0.9+0.0024\cdot T+7.3\times10^{-5}\cdot T\cdot\ln(C_{O_2})\\&-0.00023\cdot T\cdot\ln(I)], \quad (10)\end{aligned}$$

式中 ξ_1，ξ_2，ξ_3，ξ_4 是通过实验数据拟合得到的，其值具有基于动力学、热力学和电化学的物理意义，可参见文献[5]．C_{O_2} 为汽液界面的溶解氧浓度，可由 Henry 定律得到[6,7]：

$$C_{O_2}=p_{O_2}/((5.08\times10^6)\exp(-498/T)). \quad (11)$$

欧姆过电压由两部分阻抗引起：电极中电子的传输阻抗和质子交换膜中质子的传输阻抗．总的内阻引起的欧姆过电压可表示为[6]

$$U_{ohmic}=(0.01605-3.5\times10^{-5}\cdot T+8\times10^{-5}I)\cdot I. \quad (12)$$

浓差极化过电压是由于反应物和产物在电池电极中的传递速度有限而引起的，在高电流密度时，浓差极化的作用明显增强．由浓差极化产生的电压损失可表示为[8]

$$U_{con}=-B\ln\left[1-\frac{J}{J_{max}}\right], \quad (13)$$

其中 B 是取决于电池和其工作状态的常数．J 是电池实际电流密度(A/cm^2)，J_{max} 是最大电流密度(A/cm^2)．

综上所述，燃料电池工作的实际电压为

$$U=E_{Nernst}-U_{act}-U_{ohmic}-U_{con}. \quad (14)$$

设电池堆中的单电池个数为 N，则电池堆电压和功率可表示为

$$U_{stack}=N\cdot U, \quad (15)$$

$$P_{stack}=U_{stack}\cdot I. \quad (16)$$

1.3 水热平衡模块

水热平衡对 PEMFC 的工作性能有很大的影响，其热量来源主要有化学反应热、焦耳热(内阻产生)和反应气带入的热量．电堆的反应热和焦耳热可以用下式表示[9,10]：

$$\Delta Q_{stack}=N\cdot I\cdot(1.481-U), \quad (17)$$

反应气带入的热量 Q_{gas_in} 和带出的热量 Q_{gas_out} 可以根据进出口温度及流量由热量公式求得．除了反应气本身带走的热量，电池堆还依靠辐射和冷却水带走大部分热量，辐射热计算公式为

$$\Delta Q_{rad}=\delta\cdot\sigma_b\cdot a\cdot(T^4-T_0^4), \quad (18)$$

其中 δ 为电堆黑度，σ_b 是波尔兹曼常数．a 是换热面积(m^2)．循环冷却水带走的热量为

$$\Delta Q_{fr}=q_{fr}C_{p,w}(T-T_0), \quad (19)$$

其中，$C_{p,w}$ 是水的摩尔定压热容[J/(mol·K)]，可由热容公式求得．燃料电池堆稳定工作时，必须保证电堆的热平衡使电堆工作温度稳定，即

$$\Delta Q_{stack}+Q_{gas_in}=\Delta Q_{rad}+\Delta Q_w+Q_{gas_out}. \quad (20)$$

根据式(20)便可以求得在不同操作条件下循环冷却水的需求量 q_w，对冷却水系统的设计很有帮助．

2仿真结果验证与分析

根据以上模型，本文利用Matlab/Simulink软件对质子交换膜燃料电池汽车动力系统的不同工况进行了仿真，Simulink仿真模块框图如图1。模型参数取值如表1所示[11]。

表 1　燃料电池车动力系统模型参数

模型参数	值
单电池个数(N)	332
电池堆长×宽×高/ m×m×m	0.8×0.15×0.2
电池堆温度 T/K	353.15
燃料利用率(u)	0.7
法拉第常数 F/ C·(kmol)$^{-1}$	96484600
理想气体常数 R/J·(kmol·K)$^{-1}$	8314.47
压缩机吸气压力 p_s/ Pa	1.013×10^5
空气等熵指数(κ)	1.4
压缩机绝热效率(η_{ad})	0.75
电堆黑度(δ)	0.8
波尔兹曼常数σ_b/W·(m^2·K^4)$^{-1}$	5.67×10^{-8}
环境温度 T_0/K	298.15
常数 B/V	0.05

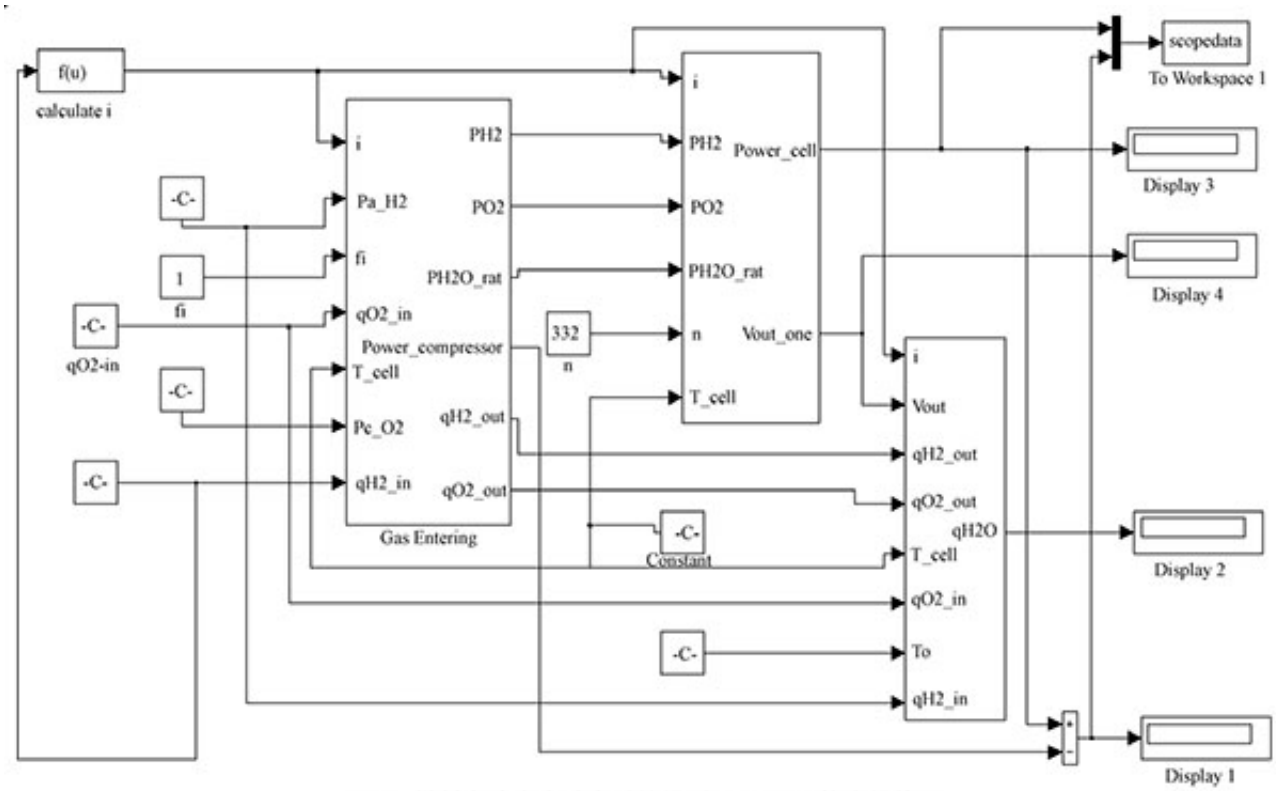

图 1　燃料电池汽车动力系统模型 Simulink 仿真模块图

为了验证本文所建立的模型是否正确，是否能作为燃料电池汽车动力系统稳态分析的工具，本文对电池堆模块进行了实验验证，实验过程中采用自主搭建的单电池测试装置为实验对象。用Matlab工具箱中的Fminsearch函数对稳态模型进行参数寻优和仿真，图2为PEMFC优化模型的性能曲线与实验数据的比较图，从仿真结果可以看出该模型可以较为准确地反映PEMFC稳态特性。

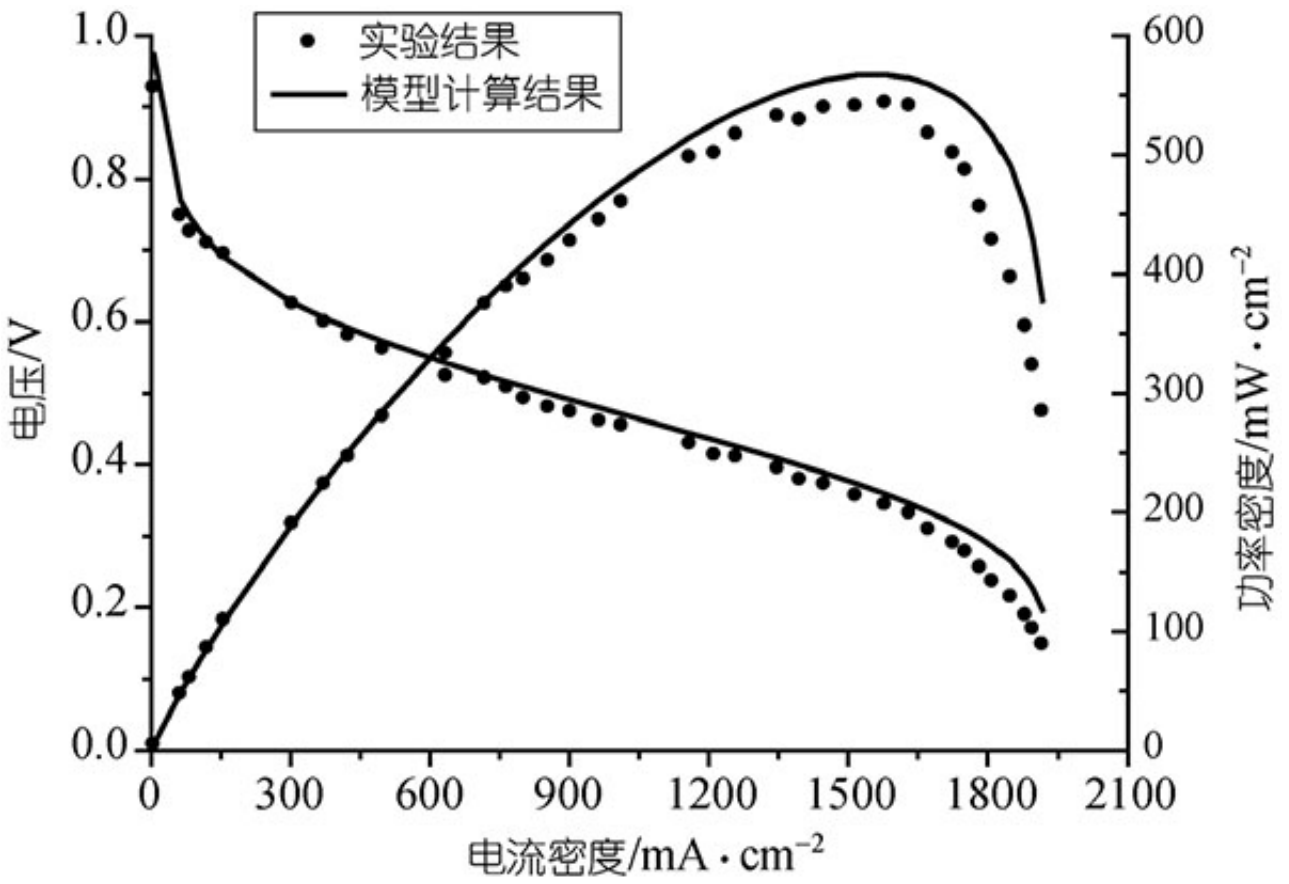

图 2　模型计算结果与实验数据的比较

另外，仿真结果表明，提高电堆温度可以提升电堆的功率，但由于质子交换膜作为一种有机膜，温度过高可能使膜脱水，导致离子电导率下降甚至使膜损坏，而且温度过高对车辆的安全性也不利，因此，选用80°C作为电堆的工作温度。下面再给出图3~5三个仿真结果。

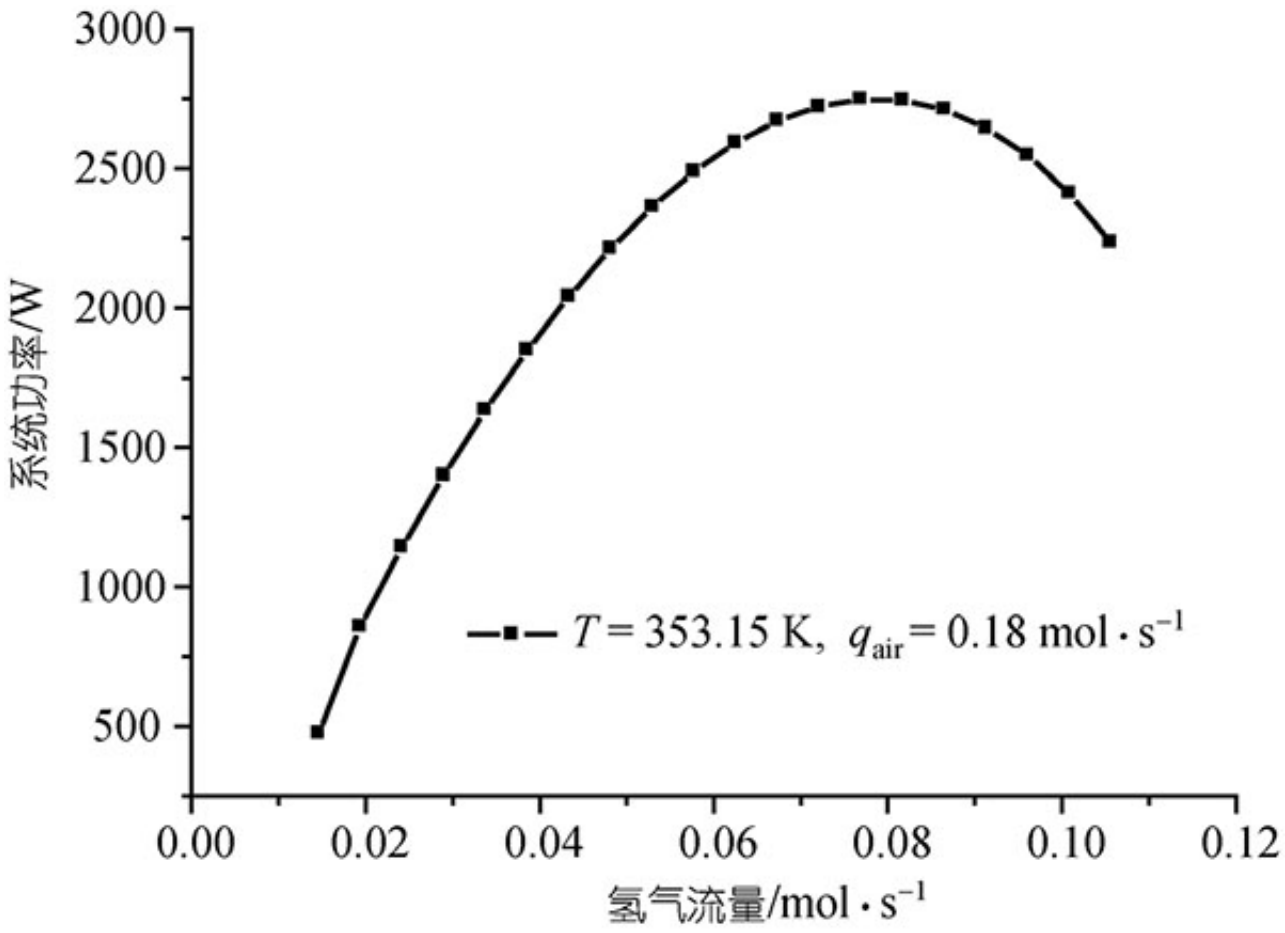

图 3　氢气流量对燃料电池汽车动力系统功率的影响

图3是在空气流量保持不变的情况下研究氢气流量对系统功率的影响，因为燃料电池汽车动力系统中压缩机的功率损耗是最大的，所以此处系统功率Psystem定义为电堆功率Pstack和压缩机消耗功率Pcomp之差。从图中不难看出，系统功率随着氢气进料流量的增加先增大后减小，一方面，这是由于在空气过量的情况下，氢气流量的增加在一定范围内会使电堆电流增大。另一方面，氢气流量的增加伴随着阳极内氢气分压的升高，从而使热力学可逆电压有所上升，但由于电流的增大，极化电压也随之增大，且比热力学可逆电压的上升幅度大得多，因此电池堆的输出电压有所下降。根据(16)式可知，系统功率存在最优值，并且在该工况下，当氢气流量为0.075mol/s时系统功率达到最优值。

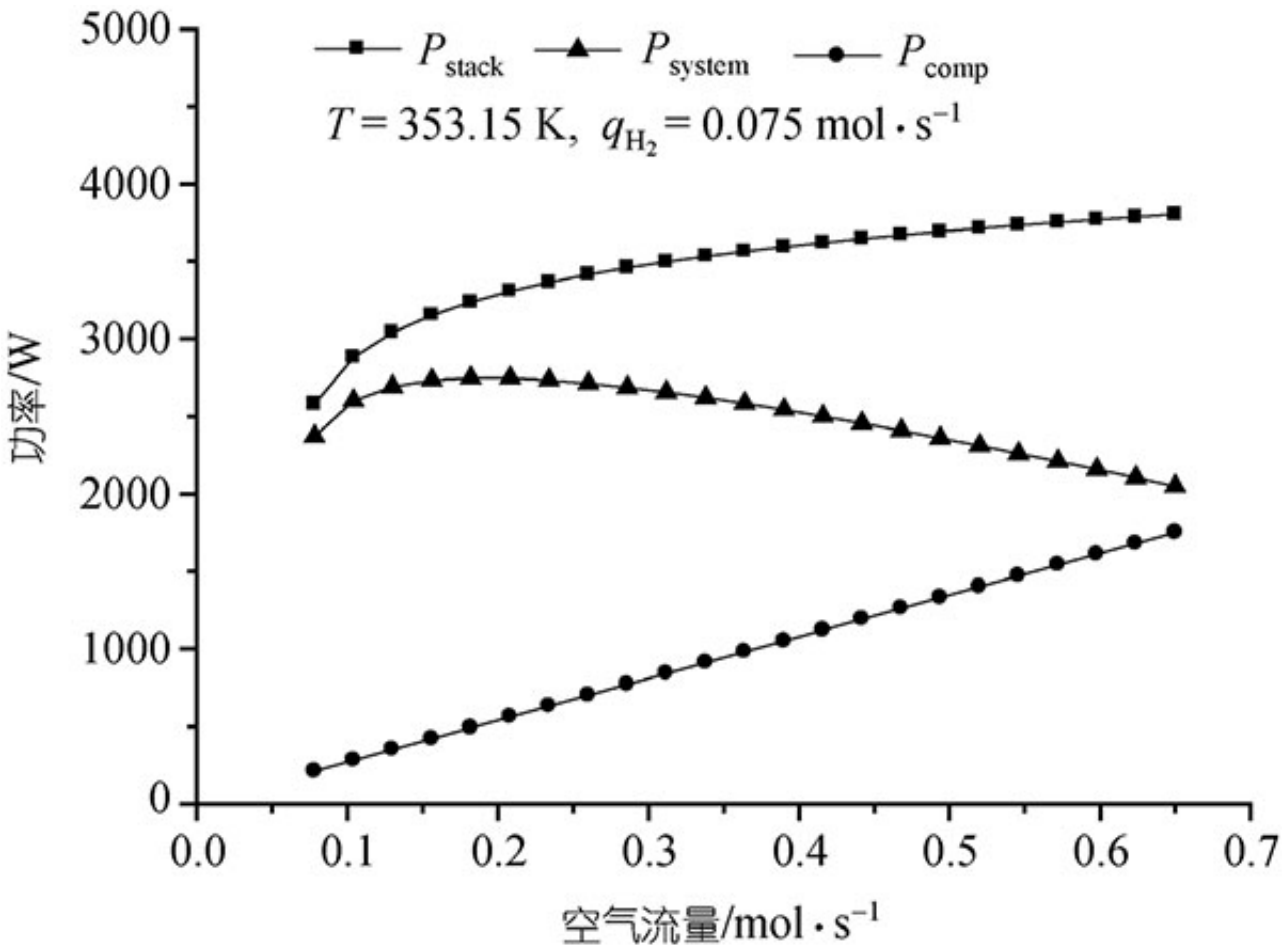

图 4　空气流量对燃料电池汽车动力系统功率的影响

图4是在氢气流量保持不变的情况下研究空气流量对系统功率的影响，并根据实际情况保证空气充足。由图可知，随着空气流量的逐渐增大，阴极内氧气分压增大从而提高了热力学可逆电压，因此电堆功率逐步增大。另外，由(1)式可知压缩机消耗功率必然随着空气流量的增大而增大，并且从图中可以看出其增大的幅度要比电堆功率大。因此，系统总功率随着空气流量的增大先增大后减小。不难看出，在该工况下，空气流量取0.18mol/s左右时系统功率达到最优值。

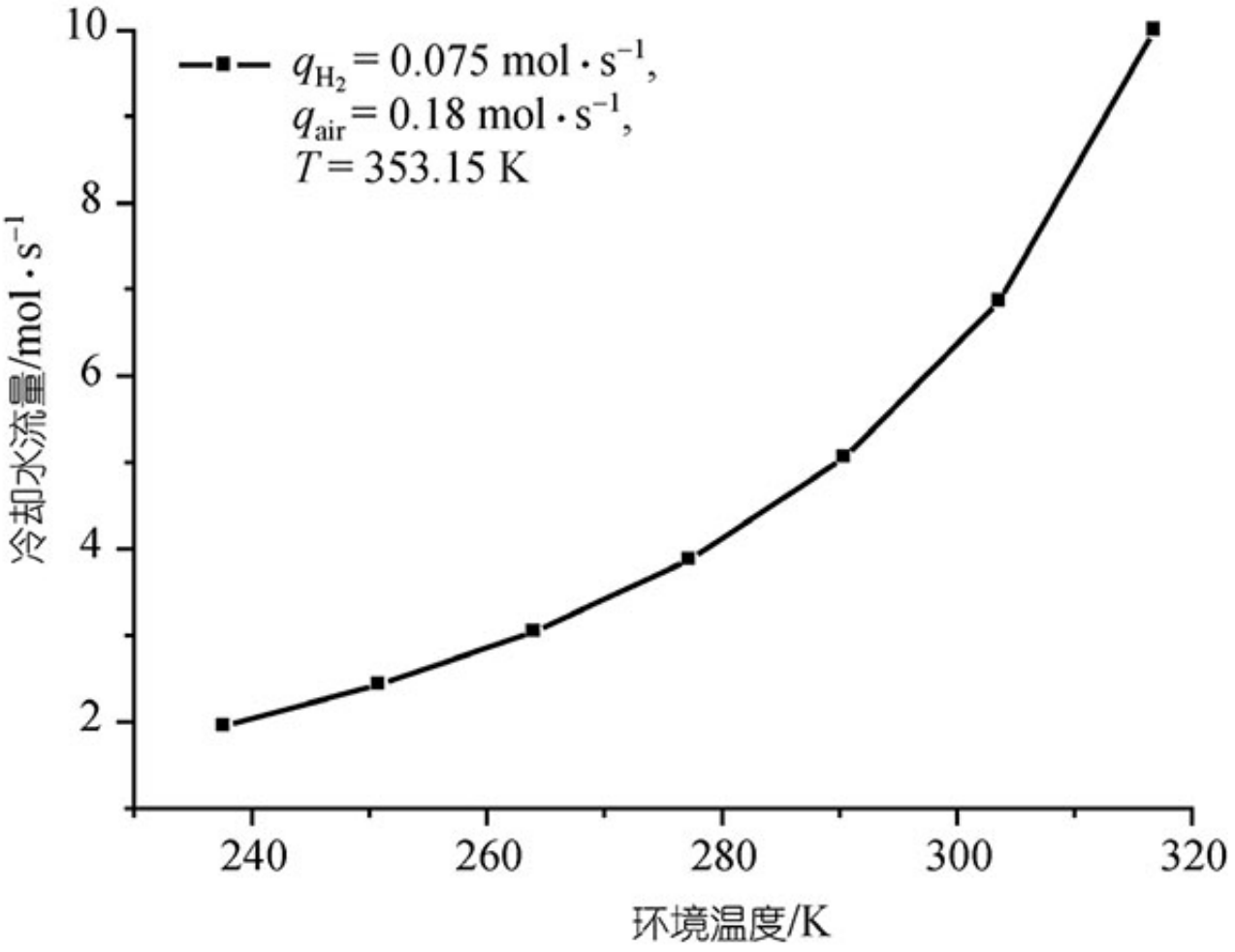

图 5　环境温度对冷却水流量的影响

图5是在其他条件都确定的情况下，研究环境温度的变化对冷却水流量的影响。从图中可以看出，冷却水需求量随着环境温度的升高而增大，并且在该工况下，当环境温度为298.15K时，冷却水用量为5.8mol/s，约0.38m3/h。

3结论

本文所建立的燃料电池汽车动力系统模型，综图合了机理模型和经验模型的优点，较为全面地描述了车载燃料电池动力系统，包括燃料供应系统、电池堆以及水热平衡系统。模型在满足基本精度的前提下忽略了一些次要因素，简化了建模过程，仿真结果表明，该模型可以描述系统参数、工作环境等因素的变化对燃料电池汽车动力系统性能的影响，为燃料电池汽车动力系统过程工艺的设计提供理论指导。

参考文献

1Z Weber A, Newman J. Modeling transport in polymer-lectrolyte fuel cells. Chem Rev, 2004, 104(10): 4679—4726

2Kim J, Lee S M, Srinivasan S. Modeling of proton exchange membrane fuel cell performance with an empirical equation. J Electrochem Soc, 1995, 142(8): 2670—2674

3J del Real A, Arce A, Bordons C. Development and experimental validation of a PEM fuel cell dynamic model. J Power Sources, 2007,173(1): 310—324

4Bao C, Ouyang M G, Yi B L. Modeling and optimization of the air system in polymer exchange membrane fuel cell systems. J Power Sources, 2006, 156(2): 232—243

5Nguyen T V, White R E. A water and heat management model for proton-exchange-membrane fuel cells. J Electrochem Soc, 1993,140(8): 2178—2186

6Amphlett J C, Baumert R M, Mann R F, et al. Performance modeling of the ballard mark IV solid polymer electrolyte fuel cell. J Elec-trochem Soc, 1995, 142(1): 9—15

7Mann R F, Amphlett J C, A I Hooper M, et al. Development and application of a generalised steady-state electrochemical model for a PEM fuel cell. J Power Sources, 2000, 86(1-2): 173—180

8Andujar J M, Segura F, Vasallo M J. A suitable model plant for control of the set fuel cell-DC/DC converter. Renew Energ, 2008,33(4): 813—826

9Lin B. Conceptual design and modeling of a fuel cell scooter for urban Asia. J Power Sources, 2000, 86(1-2): 202—213

10Hirchenhofer J H. Fuel Cell Handbook. 5th ed. West Virginia: National Energy Technology Laboratory Press, 2000

11Uzunoglu M, Alam M S. Dynamic modeling, design and simulation of a PEM fuel cell/ultra-capacitor hybrid system for vehicular ap-plications. Energ Convers Manage, 2007, 48(5): 1544—1553

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/96494.html