国际电气工程先进技术译丛

WILEY

固体氧化物燃料电池的动态建模与预测控制

Dynamic Modelling and Predictive Control in Solid Oxide Fuel Cells: First Principle and Data-based Approaches

[加拿大] Biao Huang
Yutong Qi
AKM Monjur Murshed
著

孙玉绣 汪浩 等译



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

关于本书

在目前的能源市场中，高温固体氧化物燃料电池(SOFC)被认为是主要的燃料电池技术的竞争者之一。然而,为了操作作为一个高效的发电系统,SOFC需要一个适当的控制系统，还需要一个详细的过程动态模型。为了能够论述最先进的动态建模、估计和SOFC系统的控制，本书介绍了原始建模方法以及由作者研究的全新的成果。本书通过采用基于动态建模和基于数据的方法,并考虑控制的各个方面,包括建模、系统辨识、状态估计、传统和先进的控制，全面覆盖和SOFC技术的许多方面。



国际电气工程先进技术译丛

固体氧化物燃料电池的动态建模与预测控制

Biao Huang
〔加拿大〕 Yutong Qi 著
AKM Monjur Murshed
孙玉绣 汪 浩 等译

机 械 工 业 出 版 社

在目前的能源市场中，高温固体氧化物燃料电池（SOFC）被认为是主要的燃料电池技术的竞争者之一。然而，为了操控一个高效的发电系统，SOFC 需要一个适当的控制系统，还需要一个详细的建模过程动态。为了能够论述最先进的动态建模、估计和 SOFC 系统的控制，本书介绍了原始建模方法以及由作者开发的全新的成果。本书通过采用基于动态建模和基于数据的方法，并考虑控制的各个方面，包括建模、系统辨识、状态估计、传统和先进的控制，全面覆盖和 SOFC 技术的许多方面。

本书介绍的方法适合学习化学工程的基本原理、系统辨识、状态估计和过程控制，因此，它适用于化工、机械、电力、电气工程，特别是在过程控制、过程系统工程、控制系统、燃料电池方面的研究生与教师以及研究和工程技术人员参阅。本书还能帮助研究人员了解相关的基础知识以及当前在 SOFC 动态建模和控制技术方面的概述。

译 者 序

为了缓解当今日益加重的能源危机与环境压力，开发和利用新能源和可再生能源是当今国际一大研究热点。燃料电池作为一种清洁能源受到了人们的极大关注。燃料电池是一种直接将化学能转化为电能的电化学装置。在各种燃料电池中，低温质子交换膜燃料电池（PEMFC）和高温固体氧化物燃料电池（SOFC）已被确认为有前途的燃料电池技术，并将在未来市场中占有很大份额。为了达到操作和控制SOFC系统的目的，对SOFC动态特性的建模和仿真研究是十分必要的。

建模和控制器设计是两个必要的先进过程控制策略的组成部分，两者错综复杂、相互依存。从过程控制的角度来看，模型应该可以用来设计控制器，但也要足够详细地提供系统动态真实模型解释。

动态模型可以用来研究在不同操作条件下燃料电池的响应，以便说明与设计和材料选择有关的缺陷。通过最优化控制，可以引导操作条件朝向有利于提高燃料电池耐用性和效率的方向进行。因此，动态建模和控制在燃料电池的发展中是十分必要的。随着廉价计算机的出现，工业上也采用复杂控制器，如非线性模型预测控制器。

在本书中，诸位作者参考了大量的期刊论文、会议论文集资料以及作者研发的全新科研成果，概述了最先进的动态建模、估计和SOFC系统的控制的最新发展。

我国是一个能源消费大国，能源紧张问题尤为突出，更迫切需要开发高效利用燃料的相关技术和方法。尽管我国在SOFC方面已经取得了一些成绩，但是与发达国家相比，该领域相关研究起步晚、资金投入不够、技术积累不多，所以在此领域技术明显落后。在此背景下，翻译本书的目的是向国内读者系统介绍基于动态建模和基于数据的方法，考虑控制的各个方面，包括建模、系统辨识、状态估计、传统和先进的控制，以及当前在SOFC动态建模和控制技术方面的概述，为研究人员在过程系统工程与控制系统工程方面探索新的控制理论和算法提供良好的参考。

我们期望本书的出版对国内相关领域的发展有所帮助。如果能做到这一点，我们将非常欣慰和鼓舞。

本书的翻译人员有：孙玉绣（第1～6章）、汪浩（第7～12章）。田晓萌、张欣、赵博文、沈强、付丛丛、邓思旭、吴春卉、王先明、曹以靓、靳晴、郭超、郭振玺、王鲁、刘炳毅、古悦、邵可然、邬浩等人参与了本书部分翻译工作，全书由孙玉绣统稿。机械工业出版社顾谦老师为本书的翻译、编辑、加工、出版付出了辛勤的劳动，在此深表谢意。由于时间仓促以及我们的知识面有限，译文中肯定有疏漏或欠妥之处，诚冀读者批评指正。

译 者

原 书 前 言

为了缓解当今日益加重的能源危机与环境压力，开发和利用新能源和可再生能源是当今国际一大研究热点。严禁排放温室气体、含硫氧化物和含氮氧化物气体相关环境法规的颁布，很大程度上缩短了寻找一种清洁能源的进程。燃料电池作为一种清洁能源可替换来源受到了人们的极大关注。燃料电池是一种直接将化学能转化为电能的电化学装置。由于其不涉及任何的转动或热组件，燃料电池没有任何摩擦和燃烧损失。此外，电池中未使用的燃料可以用来产生更多的能量，使其达到高的总效率。

在各种燃料电池中，低温质子交换膜燃料电池（PEMFC）和高温固体氧化物燃料电池（SOFC）已被确认为有前途的燃料电池技术，并将在未来市场中占有很大份额。

为了达到操作和控制 SOFC 系统的目的，对 SOFC 动态特性的建模和仿真研究是十分必要的。建模和控制器设计是两个必要的先进过程控制策略的组成部分，两者错综复杂、相互依存。从过程控制的角度来看，模型应该可以用来设计控制器，但也要足够详细地提供系统动态真实模型解释。

本书着重介绍两种模型用于 SOFC 研究，分别为第一性原理和数据基模型。第一性原理模型考虑电化学、化学和热力学方面，并提供一组非线性常微分方程(ODE)。用于燃料电池系统组件（如换热器、重整装置和燃烧器）的零维热模型也提供了燃料电池系统的仿真和控制。同时，数据基模型是通过系统辨识方法研发的。

动态模型用来研究在不同操作条件下燃料电池的响应，以便说明与设计和材料选择有关的缺陷。通过最优化控制，可以引导操作条件朝向对有利于提高燃料电池耐用性和效率的方向进行。因此，动态建模和控制在燃料电池的发展中是十分必要的。

随着廉价计算机的出现，工业上也采用复杂控制器如非线性模型预测控制器。在本书中，常规控制器和先进的模型预测控制器均应用在燃料电池系统中。

本书试图将作者在过去八年里发展或出版的成果完整地整合在一本书中，就这一点来说，本书将适合作为研究生及科研人员的教科书或专题著作，为寻找与动态模型和控制及应用相关的基础知识以及先进的技术提供帮助。本书介绍了几个独立的燃料电池模型，并附有详细的参数和解释，为研究人员在过程系统工程与控制系统工程方面寻找具有挑战性的问题来测试新的控制理论和算法提供良好的参考。本书适合从事化学工程、机械工程、电气工程等相关的过程控制、燃料电池、过程系统工程或控制系统等专业的研究生和科研人员阅读，还可以用作教材或者作为参考，有助于学习化学工程的基本原理、系统辨识、状态估计和过程控制。另外，本书附有燃料电池应用实例的生动图示。

原书致谢

我们要特别感谢我们的同行和合作者，Kumar Nandakumar 教授、Karl Chuang 以及 Jingli Luo，他们与我们进行了很多次讨论，让我们了解到在过去的几年里燃料电池的主要研究成果，同时，我们也感谢加拿大阿尔伯塔大学计算机程序控制团队，他们为过程控制研究提供了模拟环境。阿尔伯塔大学包括化学和材料工程专业的广泛智囊团为本书的出版提供了不同思想的交融和发展。我们非常感激我们的工业合作者，他们为我们提供了过程控制研究的相关实践的数据。我们也感谢我们的计算支撑团队以及阿尔伯塔化学和材料功能专业的其他帮助者。感谢加拿大自然科学与工程研究委员会（NSERC）和西加拿大燃料电池创制权（Western Canada Fuel Cell Initiative，WCFCI）对相关研究工作的支持。最后同样重要的是，我们要感谢 Shima Khatibisepehr 和 Seraphina Kwak 对本书的详细评阅和对很多章节的建议。

目　　录

译者序
原书前言
原书致谢

第 1 章　绪论 …… 1

1.1　燃料电池技术概述 …… 1
1.1.1　燃料电池种类 …… 1
1.1.2　板式和管式设计 …… 2
1.1.3　燃料电池体系 …… 3
1.1.4　燃料电池的优、缺点 …… 4
1.2　建模、状态估计和控制 …… 4
1.3　本书覆盖范围 …… 5
1.4　本书大纲 …… 5

第 1 部分　基 本 原 理

第 2 章　化学反应的第一性原理建模 …… 7

2.1　热力学 …… 7
2.1.1　能量的形态 …… 7
2.1.2　第一定律 …… 7
2.1.3　第二定律 …… 8
2.2　热传递 …… 9
2.2.1　传导 …… 9
2.2.2　对流 …… 10
2.2.3　辐射 …… 11
2.3　质量传递 …… 13
2.4　流体力学 …… 15
2.4.1　黏性流 …… 15
2.4.2　速度分布 …… 16
2.4.3　伯努利方程 …… 16

2.5　变化方程式 …… 16
2.5.1　连续性方程 …… 17
2.5.2　运动方程 …… 17
2.5.3　能量平衡方程 …… 18
2.5.4　连续性方程的种类 …… 19
2.6　化学反应 …… 20
2.6.1　反应速率 …… 20
2.6.2　可逆反应 …… 21
2.6.3　反应热 …… 21
2.7　注解和参考文献 …… 22

第3章　系统辨识Ⅰ …… 23

3.1　离散时间系统 …… 23
3.2　信号 …… 28
3.2.1　输入信号 …… 28
3.2.2　信号的光谱特性 …… 32
3.2.3　输入信号的持续激励 …… 35
3.2.4　输入设计 …… 39
3.3　模型 …… 39
3.3.1　线性模型 …… 39
3.3.2　非线性模型 …… 43
3.4　注解和参考文献 …… 45

第4章　系统辨识Ⅱ …… 46

4.1　回归分析 …… 46
4.1.1　利用外生输入模型的移动平均自动回归 …… 46
4.1.2　线性回归 …… 47
4.1.3　线性回归分析 …… 48
4.1.4　加权最小二乘法 …… 49
4.2　预测误差方法 …… 52
4.2.1　最优预测 …… 53
4.2.2　预测误差方法 …… 57
4.2.3　独立参数预测误差法 …… 60
4.2.4　PEM 渐近方差属性 …… 61
4.2.5　非线性辨识 …… 62
4.3　模型验证 …… 64

4.3.1 模型结构选择 …… 64
4.3.2 简约原则 …… 65
4.3.3 模型结构比较 …… 66
4.4 经验法 …… 67
4.4.1 非零处理 …… 67
4.4.2 漂移干扰处理 …… 68
4.4.3 鲁棒性 …… 68
4.4.4 额外的模型验证 …… 68
4.5 闭环辨识 …… 69
4.5.1 直接闭环辨识 …… 70
4.5.2 间接闭环辨识 …… 71
4.6 子空间辨识 …… 75
4.6.1 符号 …… 76
4.6.2 回归分析法子空间辨识 …… 80
4.6.3 范例 …… 82
4.7 注解和参考文献 …… 85

第 5 章 状态估计 …… 86

5.1 随机动态系统过滤技术进展 …… 86
5.2 问题界定 …… 88
5.3 状态估计的序贯贝叶斯推理 …… 89
5.3.1 KF 和 EKF …… 92
5.3.2 UKF …… 94
5.4 范例 …… 97
5.5 注解和参考文献 …… 100

第 6 章 模型预测控制 …… 102

6.1 最先进的模型预测控制 …… 102
6.2 基本原理 …… 103
6.2.1 MPC 模型 …… 104
6.2.2 自由和强迫响应 …… 105
6.2.3 目标函数 …… 105
6.2.4 限制条件 …… 106
6.2.5 MPC 规则 …… 106
6.3 DMC …… 107
6.3.1 预测 …… 107

6.3.2 无变形控制移动的 DMC …… 109
6.3.3 变形控制移动的 DMC …… 109
6.3.4 DMC 算法反馈 …… 110
6.4 NMPC …… 113
6.5 NMPC 通用优化准则 …… 115
6.6 离散模型：正交配置法 …… 115
6.6.1 预测时域 1 的正交配置方法 …… 116
6.6.2 预测时域 N 的正交配置方法 …… 118
6.7 MPC 的优、缺点 …… 120
6.8 最优化 …… 121
6.9 范例：混沌系统 …… 122
6.10 注解和参考文献 …… 123

第 2 部分　管式 SOFC

第 7 章　管式 SOFC 动态模型：第一性原理方法 …… 124

7.1 SOFC 堆栈的设计 …… 124
7.2 转换过程 …… 125
7.2.1 电化学反应 …… 125
7.2.2 电流动态 …… 128
7.3 扩散动态 …… 129
7.3.1 扩散传递函数 …… 130
7.3.2 简化的扩散传递函数 …… 131
7.3.3 扩散动态模型 …… 132
7.3.4 扩散系数 …… 133
7.4 燃料输送过程 …… 134
7.4.1 重整/转移反应 …… 134
7.4.2 传质过程 …… 135
7.4.3 动量传递 …… 137
7.4.4 能量转移和热交换 …… 138
7.5 空气输送过程 …… 139
7.5.1 阴极通道传质 …… 139
7.5.2 阴极通道动量传递 …… 140
7.5.3 阴极通道能量传递 …… 140
7.5.4 注入通道空气 …… 140

7.6 SOFC 温度 …… 141
7.6.1 动态能量交换过程 …… 141
7.6.2 热传导 …… 142
7.6.3 对流 …… 143
7.6.4 辐射 …… 144
7.6.5 电池温度模型 …… 145
7.6.6 注入管温度模型 …… 145
7.7 最终动态模型 …… 146
7.7.1 I/O 变量 …… 146
7.7.2 状态空间模型 …… 147
7.7.3 模型验证 …… 150
7.8 模拟动态属性研究 …… 152
7.8.1 扩散动态 …… 152
7.8.2 燃料输送过程动态 …… 154
7.8.3 空气输送过程动态 …… 156
7.8.4 外部负载动态 …… 157
7.9 注解和参考文献 …… 160

第 8 章 管式 SOFC 动态模型：简化的第一性原理方法 …… 161

8.1 简介 …… 161
8.1.1 过程变量的关系 …… 161
8.1.2 功率输出限制 …… 162
8.2 SOFC 堆栈的低阶状态空间模型 …… 162
8.2.1 物理过程 …… 163
8.2.2 建模假设 …… 163
8.2.3 I/O 变量 …… 163
8.2.4 电压 …… 165
8.2.5 分压 …… 166
8.2.6 流速 …… 167
8.2.7 温度 …… 169
8.3 非线性状态空间模型 …… 170
8.4 仿真 …… 172
8.4.1 验证 …… 172
8.4.2 输入阶跃响应 …… 174
8.4.3 干扰阶跃响应 …… 174
8.5 注解和参考文献 …… 177

第 9 章　管式 SOFC 的动态建模与控制：系统辨识方法 …… 178

9.1　简介 …… 178
9.2　系统辨识 …… 178
9.2.1　变量选择 …… 178
9.2.2　阶跃响应测试 …… 179
9.2.3　非典型性阶跃响应 …… 181
9.2.4　输入设计 …… 183
9.2.5　线性系统辨识 …… 184
9.2.6　非线性系统辨识 …… 199
9.3　PID 控制 …… 203
9.3.1　设定点跟踪 …… 204
9.3.2　抗干扰 …… 204
9.3.3　离散时间过程 IMC …… 206
9.3.4　多环控制 SOFC 离散时间 IMC 应用 …… 214
9.4　闭环辨识 …… 218
9.5　注解和参考文献 …… 223

第 3 部分　板式 SOFC

第 10 章　板式 SOFC 动态建模：第一性原理方法 …… 224

10.1　简介 …… 224
10.2　几何学 …… 225
10.3　堆栈电压 …… 225
10.4　质量守恒 …… 227
10.5　能量守恒 …… 228
10.5.1　集中模型 …… 228
10.5.2　详细模型 …… 229
10.6　仿真 …… 232
10.6.1　稳态响应 …… 233
10.6.2　动态响应 …… 234
10.7　注解和参考文献 …… 236

第 11 章　板式 SOFC 系统动态建模 …… 237

11.1　简介 …… 237

11.2 燃料电池系统 …… 237
11.2.1 燃料和空气热交换 …… 238
11.2.2 重整装置 …… 239
11.2.3 燃烧器 …… 240
11.3 连同电容器的 SOFC …… 241
11.4 仿真结果 …… 242
11.4.1 燃料电池系统仿真 …… 242
11.4.2 超级电容器 SOFC 堆栈 …… 245
11.5 注解和参考文献 …… 245

第 12 章 板式 SOFC 系统的模型预测控制 …… 246

12.1 简介 …… 246
12.2 控制目标 …… 247
12.3 状态估计：UKF …… 248
12.4 稳态经济优化 …… 250
12.5 控制和仿真 …… 251
12.5.1 LMPC …… 252
12.5.2 NMPC …… 254
12.5.3 优化 …… 254
12.6 结果与讨论 …… 256
12.7 注解和参考文献 …… 257

附录 性质和参数 …… 258

A.1 参数 …… 258
A.2 气体性质 …… 259

参考文献 …… 263

第1章 绪 论

燃料电池是直接将化学能转化为电能的电化学装置。由于燃料电池中能量的产生不涉及任何移动部件及其不同于热引擎的工作原理，所以由这些燃料电池产生的能量既不产生任何机械摩擦损失也不受卡诺循环效率的限制。而且，电池中未反应的燃料可以用来产生更多的电力。增加电池的总效率还可以通过从废气中重新产生热量的方式实现。

解决当前能源危机的效率路径是寻找一个替代能源以便代替现有的不断消耗的常规能源。严格的环境法规已限制 SO_x 和 NO_x 等温室气体的排放，因此缩小了寻找清洁能源的范围。以上是燃料电池作为一种清洁能源的替代来源，其开发利用正日益受到人们关注的主要原因。

然而，燃料电池作为主要能源在商业化应用方面存在许多障碍，主要的障碍来自于高的生产成本。大量的研究集中在设计和操作燃料电池以便降低生产成本，将这些设备变成可行且有竞争力的能源上。电解质、催化剂以及电极材料的选择也会影响到燃料电池的成本。许多研究人员致力于研究这个领域。在不同操作条件下模拟燃料电池系统以便弥补与设计和材料选择相关的所有缺陷是十分有必要的。从不同的角度来看，模型和模拟范围可以达到从微观到系统的水平。本书着重从安全、高效运行的燃料电池系统的过程控制分析固体燃料电池作为一种动力来源，主要包括相关模型控制、状态评估和控制器设计。

1.1 燃料电池技术概述

一个燃料电池结构单元是由三部分组成的：电解液、阴极和阳极。燃料不断地被送入燃料电池的阳极，合适的氧化剂，通常是空气，被送入到阴极。电解液的主要作用是防止与阳极和阴极同时相连接的氧化剂与燃料直接接触。电解液也能够保证氧化剂或还原剂离子到达另一边参与电化学反应。

1.1.1 燃料电池种类

基于电解质和燃料的选择不同，将燃料电池进行分类如下：

- 固体氧化物燃料电池（SOFC）：SOFC 使用固体陶瓷型氧化物，因此这样命名。Y_2O_3 稳定型 ZrO_2（YSZ）是一种常见的使用在 SOFC 中的电解质，操作温度通常较高（600～1000℃）。由于电解质和电极都是固态的，所以 SOFC 的设计和制造采用最通用的方式，包括板式和管式设计。
- 熔融碳酸盐燃料电池（MCFC）：MCFC 采用不同种类碳酸盐相结合作为电

解质，这些碳酸盐通常是陶瓷基材料，其操作温度也比较高，通常在600～700℃。

● 质子交换膜燃料电池（PEMFC）：在此类电池中，高分子离子交换膜被用作电解质，操作温度通常较低，40～80℃。

● 磷酸燃料电池（PAFC）：在PAFC中的电解质为100%磷酸，其保存在碳化硅结构中。操作温度大约为150～220℃，该操作温度使这种燃料电池具有一定的优势，操作温度有利于灵活设计燃料电池和设备平衡（BOP）。

其他种类的燃料电池包括：碱性燃料电池（AFC）、直接甲醇燃料电池（DMFC）、再生燃料电池（RFC）、金属空气燃料电池（MAFC）。燃料（2004）为不同类型的燃料电池存在的主要差异进行了总结。操作温度低的PEMFC和温度高的SOFC被认定为有前景的燃料电池技术，它们将成为未来市场的重要角色。图1.1所示为典型的氢固体氧化物燃料电池的基本原理，电池内部进行的化学反应，直接参与电力的产生，如下所示：

$$\begin{aligned}&\text{在阳极三相界面（tpb）：}\ H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-\\&\text{在阴极三相界面（tpb）：}\ 1/2\ O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}\end{aligned} \tag{1.1}$$

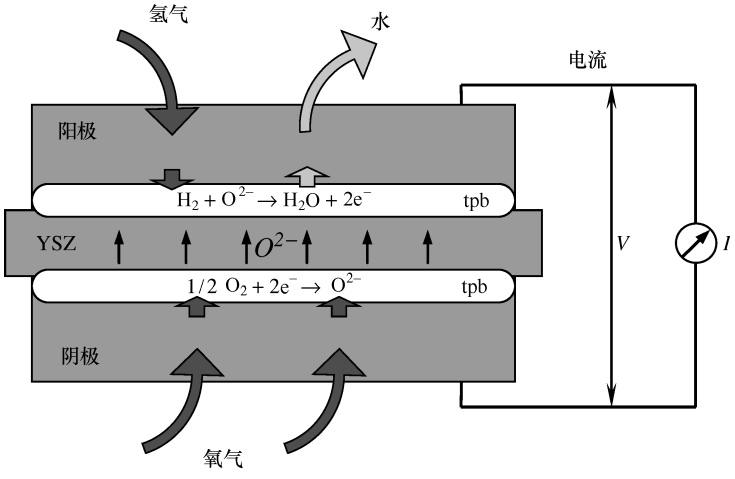


图1.1　固体燃料电池原理

在SOFC的阳极，氢气与通过电解质迁移的氧离子反应，生成水并释放电子。在阴极，氧气和电子反应生成氧离子，O^{2-}通过电解质运送到阳极。电子在阳极产生，流经外部电路，然后到达阴极。因此，这些反应持续进行流经外部电路，供应电力。通常燃料电池工作温度较高，在600～1000℃，以满足电解质离子电导率的要求。

氢被用作燃料电池的燃料，通常由天然气的蒸气重整产生。对于操作温度较高的燃料电池，在电池阳极内的重整反应可以在内部进行。

1.1.2　板式和管式设计

为了满足大部分应用程序的电压需求，燃料电池必须由成堆的单个电池连接。

一个 SOFC 堆栈由许多 SOFC 电池组成，以产生高的电压输出。在设计 SOFC 堆栈和电池的时候，一些因素必须考虑：如气体输送、热应力、机械力、固有电和离子阻力以及密封材料的选择。燃料电池可被制成各种几何形状，最常见的有板式和管式两种设计，如图 1.2 和图 1.3 所示。

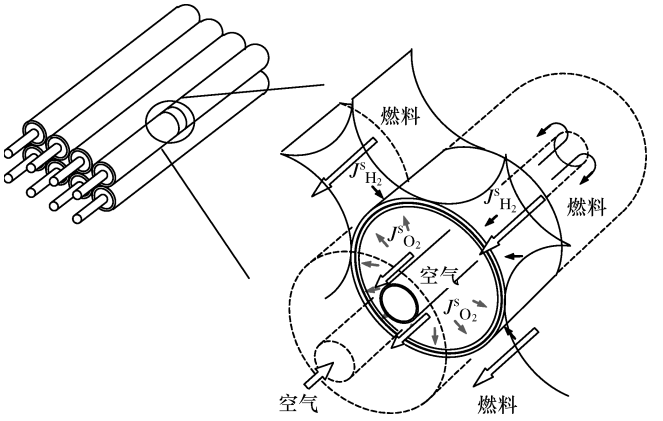


图 1.2　SOFC 堆的板式设计和电池

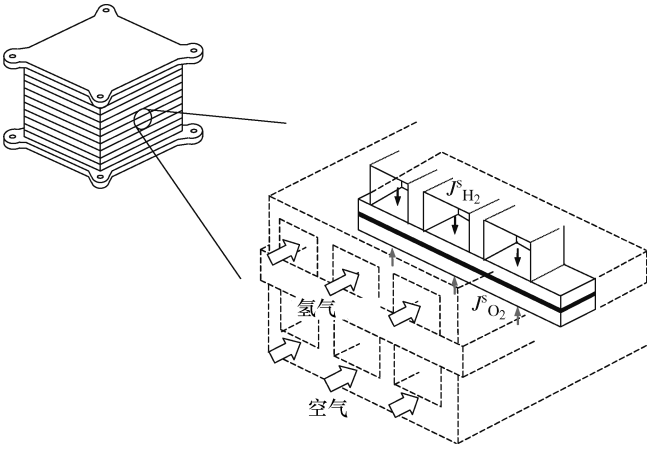


图 1.3　SOFC 堆的管式设计和电池

管式设计的主要优点在于其不需要密封来分离燃料和空气流。另一个优点在于管式的形状能够提高电池的强度。管式的形状还能提高气体输送性能。这种管式设计适合于固定的大规模发电应用领域。

另一方面，板式 SOFC 设计的主要优点在于它的电阻率低，板式 SOFC 更加适用于移动和低功耗应用领域。

1.1.3　燃料电池体系

在理想的燃料电池中，氢气被用作燃料，空气被用作氧化剂。这样工作的燃料