



同济大学 1907-2017
Tongji University



同济博士论丛
TONGJI Dissertation Series

总主编 伍江 副总主编 雷星晖

翟双 周苏 孙澎涛 著

质子交换膜燃料电池仿真方法 及若干现象研究

Study of Numerical Methods and Several Typical
Phenomena of Proton Exchange Membrane Fuel Cell



同济大学出版社
TONGJI UNIVERSITY PRESS



同济博士论丛
TONGJI Dissertation Series

总主编 伍江 副总主编 雷星晖

翟双 周苏 孙澎涛 著

质子交换膜燃料电池仿真方法 及若干现象研究

Study of Numerical Methods and Several Typical
Phenomena of Proton Exchange Membrane Fuel Cell



同济大学出版社
TONGJI UNIVERSITY PRESS

内 容 提 要

质子交换膜燃料电池(PEMFC)是燃料电池的一种,具有高效率、零排放、低噪声和低操作温度等优点,适用于车辆、移动电源和应急电源等。本书主要做了三个方面的工作:在模型研究方面,有效解决了 PEMFC 气液两相模型扩散系数间断导致的迭代发散和振荡问题,并提出了基于组分与质量守恒的分布参数模型数值验证方法。在仿真方法方面,为发挥 PEMFC 分布参数模型和集总参数模型的优点并弥补各自缺陷,建立了协同仿真模型。基于该平台,对加载过程中出现的 undershoot 现象进行了全面合理的解释。在现象研究方面,基于建立的完整 PEMFC 电堆分布参数模型,仿真分析了堆内单池电压非一致分布的主要影响因素。通过考虑对流传质,将原仅能在低电流下仿真电磁阀开关对电堆性能影响的模型扩展到在中等电流下也能适用。

本书可作为燃料电池领域研究人员的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

质子交换膜燃料电池仿真方法及若干现象研究 / 翟双, 周苏, 孙澎涛著. —上海: 同济大学出版社, 2018. 9

(同济博士论丛 / 伍江总主编)

ISBN 978 - 7 - 5608 - 7028 - 1

I. ①质… II. ①翟… ②周… ③孙… III. ①质子交换膜燃料电池—仿真模型—研究 IV. ①TM911. 4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 093481 号

质子交换膜燃料电池仿真方法及若干现象研究

翟 双 周 苏 孙澎涛 著

出品人 华春荣 责任编辑 胡晗欣 助理编辑 翁 晗

责任校对 徐春莲 封面设计 陈益平

出版发行 同济大学出版社 www.tongjipress.com.cn

(地址:上海市四平路 1239 号 邮编:200092 电话:021-65985622)

经 销 全国各地新华书店

排版制作 南京展望文化发展有限公司

印 刷 浙江广育爱多印务有限公司

开 本 787 mm×1092 mm 1/16

印 张 11.75

字 数 235 000

版 次 2018 年 9 月第 1 版 2018 年 9 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978 - 7 - 5608 - 7028 - 1

定 价 60.00 元



本书若有印装质量问题,请向本社发行部调换 版权所有 侵权必究

“同济博士论丛”编写领导小组

组 长：杨贤金 钟志华

副 组 长：伍 江 江 波

成 员：方守恩 蔡达峰 马锦明 姜富明 吴志强
徐建平 吕培明 顾祥林 雷星晖

办公室成员：李 兰 华春荣 段存广 姚建中

“同济博士论丛”编辑委员会

总 主 编：伍 江

副 总 主 编：雷星晖

编委会委员：（按姓氏笔画顺序排列）

丁晓强	万 钢	马卫民	马在田	马秋武	马建新
王 磊	王占山	王华忠	王国建	王洪伟	王雪峰
尤建新	甘礼华	左曙光	石来德	卢永毅	田 阳
白云霞	冯 俊	吕西林	朱合华	朱经浩	任 杰
任 浩	刘 春	刘玉擎	刘滨谊	闫 冰	关侗红
江景波	孙立军	孙继涛	严国泰	严海东	苏 强
李 杰	李 斌	李风亭	李光耀	李宏强	李国正
李国强	李前裕	李振宇	李爱平	李理光	李新贵
李德华	杨 敏	杨东援	杨守业	杨晓光	肖汝诚
吴广明	吴长福	吴庆生	吴志强	吴承照	何晶晶
何敏娟	何清华	汪世龙	汪光焘	沈明荣	宋小冬
张 旭	张亚雷	张庆贺	陈 鸿	陈小鸿	陈义汉
陈飞翔	陈以一	陈世鸣	陈艾荣	陈伟忠	陈志华
邵嘉裕	苗夺谦	林建平	周 苏	周 琪	郑军华
郑时龄	赵 民	赵由才	荆志成	钟再敏	施 骞
施卫星	施建刚	施惠生	祝 建	姚 熹	姚连璧

袁万城 莫天伟 夏四清 顾 明 顾祥林 钱梦騷
徐 政 徐 鉴 徐立鸿 徐亚伟 凌建明 高乃云
郭忠印 唐子来 闾耀保 黄一如 黄宏伟 黄茂松
戚正武 彭正龙 葛耀君 董德存 蒋昌俊 韩传峰
童小华 曾国荪 楼梦麟 路秉杰 蔡永洁 蔡克峰
薛 雷 霍佳震

秘书组成员：谢永生 赵泽毓 熊磊丽 胡晗欣 卢元姍 蒋卓文

总序

在同济大学 110 周年华诞之际，喜闻“同济博士论丛”将正式出版发行，倍感欣慰。记得在 100 周年校庆时，我曾以《百年同济，大学对社会的承诺》为题作了演讲，如今看到付梓的“同济博士论丛”，我想这就是大学对社会承诺的一种体现。这 110 部学术著作不仅包含了同济大学近 10 年 100 多位优秀博士研究生的学术科研成果，也展现了同济大学围绕国家战略开展学科建设、发展自我特色，向建设世界一流大学的目标迈出的坚实步伐。

坐落于东海之滨的同济大学，历经 110 年历史风云，承古续今、汇聚东西，秉持“与祖国同行、以科教济世”的理念，发扬自强不息、追求卓越的精神，在复兴中华的征程中同舟共济、砥砺前行，谱写了一幅幅辉煌壮美的篇章。创校至今，同济大学培养了数十万工作在祖国各条战线上的人才，包括人们常提到的贝时璋、李国豪、裘法祖、吴孟超等一批著名教授。正是这些专家学者培养了一代又一代的博士研究生，薪火相传，将同济大学的科学研究和学科建设一步步推向高峰。

大学有其社会责任，她的社会责任就是融入国家的创新体系之中，成为国家创新战略的实践者。党的十八大以来，以习近平同志为核心的党中央高度重视科技创新，对实施创新驱动发展战略作出一系列重大决策部署。党的十八届五中全会把创新发展作为五大发展理念之首，强调创新是引领发展的第一动力，要求充分发挥科技创新在全面创新中的引领作用。要把创新驱动发展作为国家的优先战略，以科技创新为核心带动全面创新，以体制机制改

革激发创新活力,以高效率的创新体系支撑高水平的创新型国家建设。作为人才培养和科技创新的重要平台,大学是国家创新体系的重要组成部分。同济大学理当围绕国家战略目标的实现,作出更大的贡献。

大学的根本任务是培养人才,同济大学走出了一条特色鲜明的道路。无论是本科教育、研究生教育,还是这些年摸索总结出的导师制、人才培养特区,“卓越人才培养”的做法取得了很好的成绩。聚焦创新驱动转型发展战略,同济大学推进科研管理体系改革和重大科研基地平台建设。以贯穿人才培养全过程的一流创新创业教育助力创新驱动发展战略,实现创新创业教育的全覆盖,培养具有一流创新力、组织力和行动力的卓越人才。“同济博士论丛”的出版不仅是对同济大学人才培养成果的集中展示,更将进一步推动同济大学围绕国家战略开展学科建设、发展自我特色、明确大学定位、培养创新人才。

面对新形势、新任务、新挑战,我们必须增强忧患意识,扎根中国大地,朝着建设世界一流大学的目标,深化改革,勠力前行!

万 钢

2017年5月

论丛前言

承古续今，汇聚东西，百年同济秉持“与祖国同行、以科教济世”的理念，注重人才培养、科学研究、社会服务、文化传承创新和国际合作交流，自强不息，追求卓越。特别是近20年来，同济大学坚持把论文写在祖国的大地上，各学科都培养了一大批博士优秀人才，发表了数以千计的学术研究论文。这些论文不但反映了同济大学培养人才能力和学术研究的水平，而且也促进了学科的发展和国家的建设。多年来，我一直希望能有机会将我们同济大学的优秀博士论文集中整理，分类出版，让更多的读者获得分享。值此同济大学110周年校庆之际，在学校的支持下，“同济博士论丛”得以顺利出版。

“同济博士论丛”的出版组织工作启动于2016年9月，计划在同济大学110周年校庆之际出版110部同济大学的优秀博士论文。我们在数千篇博士论文中，聚焦于2005—2016年十多年间的优秀博士学位论文430余篇，经各院系征询，导师和博士积极响应并同意，遴选出近170篇，涵盖了同济的大部分学科：土木工程、城乡规划学(含建筑、风景园林)、海洋科学、交通运输工程、车辆工程、环境科学与工程、数学、材料工程、测绘科学与工程、机械工程、计算机科学与技术、医学、工程管理、哲学等。作为“同济博士论丛”出版工程的开端，在校庆之际首批集中出版110余部，其余也将陆续出版。

博士学位论文是反映博士研究生培养质量的重要方面。同济大学一直将立德树人作为根本任务，把培养高素质人才摆在首位，认真探索全面提高博士研究生质量的有效途径和机制。因此，“同济博士论丛”的出版集中展示同济大

学博士研究生培养与科研成果,体现对同济大学学术文化的传承。

“同济博士论丛”作为重要的科研文献资源,系统、全面、具体地反映了同济大学各学科专业前沿领域的科研成果和发展状况。它的出版是扩大传播同济科研成果和学术影响力的重要途径。博士论文的研究对象中不少是“国家自然科学基金”等科研基金资助的项目,具有明确的创新性和学术性,具有极高的学术价值,对我国的经济、文化、社会发展具有一定的理论和实践指导意义。

“同济博士论丛”的出版,将会调动同济广大科研人员的积极性,促进多学科学术交流、加速人才的发掘和人才的成长,有助于提高同济在国内外的竞争力,为实现同济大学扎根中国大地,建设世界一流大学的目标愿景做好基础性工作。

虽然同济已经发展成为一所特色鲜明、具有国际影响力的综合性、研究型大学,但与世界一流大学之间仍然存在一定差距。“同济博士论丛”所反映的学术水平需要不断提高,同时在很短的时间内编辑出版 110 余部著作,必然存在一些不足之处,恳请广大学者,特别是有关专家提出批评,为提高同济人才培养质量和同济的学科建设提供宝贵意见。

最后感谢研究生院、出版社以及各院系的协作与支持。希望“同济博士论丛”能持续出版,并借助新媒体以电子书、知识库等多种方式呈现,以期成为展现同济学术成果、服务社会的一个可持续的出版品牌。为继续扎根中国大地,培育卓越英才,建设世界一流大学服务。

伍江

2017年5月

前 言

燃料电池是一种将化学能直接转化为电能的装置。质子交换膜燃料电池(PEMFC)是燃料电池的一种,具有高效率、零排放、低噪声和低操作温度等优点,因此,它适用于车辆、移动电源和应急电源等。

经过若干年的发展,PEMFC 的性能获得了很大的提高。但是,成本高和寿命短仍然是制约 PEMFC 商业化的两个主要因素。从机理上研究 PEMFC 的运行原理和存在的问题是降低成本和提高寿命的前提条件。为此,本书从以下三方面进行了考虑:① 数值仿真可以从电化学反应机理、优化控制和辅助试验等方面促进 PEMFC 发展;② 电堆内单池电压的非一致性是导致 PEMFC 性能下降和寿命缩短的主要影响因素之一,因而,借助于试验和仿真对这一现象从机理上进行研究是非常有理论和实际意义的;③ PEMFC 阳极末端一般采用电磁阀周期性开启与关闭(purge)的操作模式,如何有效地设计 purge 操作直接影响阳极端液态水和气体杂质(主要是从阴极渗透过来的氮气)排放,进而影响 PEMFC 的性能和氢气利用率。根据上述分析,本书内容分为以下六个部分。

第 1 章介绍了 PEMFC 的基本原理,以及在成本和寿命两方面的研

究进展;此外,比较了数值仿真研究 PEMFC 的三类主要数学模型:分布参数模型、集总参数模型及混合参数模型(协同仿真模型)。

第 2 章指出了 PEMFC 分布参数模型存在的问题,主要包括间断系数的处理和模型的正确性验证等。Wang C. Y. 等^[1]提出的多相流模型(M^2)将气态和液态水采用统一方程描述,极大地减少了计算量。但是,气液扩散系数的间断会导致计算过程不稳定或发散。本书采用商业软件 Fluent 及其用户自定义函数功能,和 Kirchhoff 变换^[2]成功地解决了 M^2 模型的间断系数问题。PEMFC 分布参数模型涉及的变量较多而且计算复杂,因此,对仿真结果的合理性和正确性进行数值验证尤为重要。本书提出了在工作电流区间段内基于组分质量守恒原理的数值判据因子方法,用于仿真结果的正确性验证。

在一般情况下,分布参数模型能够反映内部反应状态,但是不能有效地反映外部辅助系统(如负载、空气系统和增湿系统等)动态变化;而集总参数模型能够反映外部动态变化对电堆性能影响,但是不能反映电堆内空间状态变化。为了发挥这两类模型的优点并弥补各自的缺陷,本书第 3 章建立了协同仿真模型。书中提出的协同仿真方法,能够有效地呈现 PEMFC 内部变化同外部辅助系统之间的相互影响。另外,该方法也适用于 PEMFC 系统优化和故障诊断等。

第 4 章基于建立的三维、非等温 PEMFC 堆模型,研究了堆内电压非一致性的原因及主要的影响因素。研究表明:在恒电压模式下,燃料电池堆内的温度分布影响单池欧姆过电位和活化过电位的大小,并最终导致堆内单池电压的非一致分布。根据此结论,研究了不同热环境(包括绝热环境、恒温环境和热交换环境)对电堆性能的影响。此外,分析了不同材料的热交换系数对电堆性能的影响。在本章的最后,模拟了电堆内某两片单池接触电阻增大情况下,电堆内相关变量的变化情况。该尝

试为下一步基于模型对电堆内的故障类型诊断奠定了基础。

第5章首先基于试验台架研究了不同电流下,PEMFC阳极端采用purge操作对氢气利用效率和电堆性能的影响。然后,根据相关的试验数据和反应机理,建立了用于研究PEMFC阳极端purge操作的一维、两相模型。该模型能够在中等电流下,反映对流传质和扩散传质对电池性能的影响。基于该purge模型,还可以快速地分析不同操作参数对电堆性能的影响。

第6章对本书的工作进行了总结和展望。

目 录

总序

论丛前言

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 燃料电池技术概述	1
1.2 质子交换膜燃料电池结构和基本原理	2
1.2.1 质子交换膜燃料电池结构与基本反应	2
1.2.2 热力学基础与电池开路电压	3
1.2.3 电化学基础与电池反应速度	5
1.2.4 各种过电位及其影响因素	8
1.3 质子交换膜燃料电池研究现状	14
1.3.1 质子交换膜燃料电池的应用情况	14
1.3.2 质子交换膜燃料电池相关问题研究进展	16
1.4 质子交换膜燃料电池数值仿真研究现状	23
1.4.1 分布参数模型研究现状	24

1.4.2	集总参数模型研究现状	27
1.5	本书工作的意义和内容	27
第2章	质子交换膜燃料电池分布参数模型	29
2.1	分布参数数学模型	29
2.1.1	守恒方程	29
2.1.2	重要参数的数值特征	34
2.1.3	数值计算方法	36
2.2	间断系数处理	38
2.2.1	问题由来	38
2.2.2	Kirchhoff 变换	44
2.2.3	Fluent 及其 UDF	48
2.2.4	数值仿真分析	50
2.3	数值仿真验证与分析	54
2.3.1	数学模型介绍	54
2.3.2	仿真结果的数值误差估计判据	58
2.3.3	数值仿真验证	59
2.3.4	数值仿真分析	61
2.4	本章小结	64
第3章	质子交换膜燃料电池协同仿真与电压“undershoot”现象	
	研究	65
3.1	引言	65
3.2	协同仿真平台的建立	66
3.2.1	模型简化与假设	68

3.2.2	氢气供应系统模型	68
3.2.3	空压机模型	69
3.2.4	增湿器模型	69
3.2.5	质子交换膜燃料电池堆模型	70
3.3	电压“undershoot”现象试验研究	72
3.3.1	试验系统及装置	73
3.3.2	试验目的及步骤	74
3.4	数值仿真验证与分析	78
3.4.1	数值仿真验证	80
3.4.2	重要物理量动态特性分析	81
3.5	本章小结	86
第4章	质子交换膜燃料电池堆内电压非一致性研究	88
4.1	引言	88
4.2	数学模型	91
4.2.1	模型假设和仿真区域	91
4.2.2	守恒方程和边界条件	91
4.2.3	数值计算方法	94
4.3	数值结果分析	95
4.3.1	温度对堆内单池电压分布的影响	95
4.3.2	热操作环境对堆内单池电压分布的影响	104
4.3.3	不同导热材料对堆内单池电压分布的影响	108
4.3.4	接触电阻增大对堆内单池电压分布的影响	113
4.4	本章小结	113

第 5 章 质子交换膜燃料电池阳极“purge”现象研究	115
5.1 引言	115
5.2 质子交换膜燃料电池阳极 purge 的试验研究	117
5.3 质子交换膜燃料电池阳极 purge 的模型研究	123
5.3.1 数学模型	124
5.3.2 数值仿真与讨论	132
5.4 本章小结	142
第 6 章 结论与展望	143
6.1 结论	143
6.2 创新点	146
6.3 展望	146
附录 A	148
附录 B	150
参考文献	153
后记	167