文章编号: 1671-6612 (2025) 03-318-10

基于机器学习多模型预测的 PEMEC 工作参数综合评价与对比分析

王玉坤 朱相源 张 谦 刘 洋 刘吉营

(山东建筑大学热能工程学院 济南 250101)

【摘 要】 提出了一种基于模拟的质子交换膜电解槽(PEMEC)制氢装置,并采用机器学习对装置进行预测 对比分析。研究旨在寻找预测 PEMEC 性能的最优模型。建立了一个三维电解槽模型,改变电解 槽的主要工作参数得到对其电流密度、氢气摩尔分数和温度的影响。以工作参数为自变量,三种 评价指标为因变量输出数据集,对 PEMEC 性能进行相关性分析。采用六种不同预测模型来对 PEMEC 三种性能评价指标进行预测以比较得到精度最高模型。结果表明,电压是影响三个指标最 重要性能因素,其相关系数分别为 0.7456、0.6919 和 0.7664,其次是入口水温度和膜厚度。入口 水流速对氢气摩尔分数也有一定影响。随机森林算法和经过遗传算法优化的反向传播神经网络是 预测最优模型,其三个指标的决定系数分别为 0.995、0.992、0.992 和 0.996、0.997、0.993。该研 究提出了一种将智能算法与数值模拟相结合的方法,为在工程应用中优化 PEMEC 工作参数和选 择最优模型提供了有价值的见解。

【关键词】 质子交换膜电解槽;数值模拟;工作参数;性能评估;机器学习

中图分类号 TQ151.1+5 文献标志码 A

Comprehensive Evaluation and Comparative Analysis of PEMEC Working Parameters Based on Machine Learning Multi-model Prediction

Wang Yukun Zhu Xiangyuan Zhang Qian Liu Yang Liu Jiying

(School of Thermal Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan, 250101)

(Abstract **)** A hydrogen production device based on simulation for proton exchange membrane electrolyzer (PEMEC) was proposed, and machine learning was used to predict and compare the device. The aim of this study is to find the optimal model for predicting PEMEC performance. A 3D cell model was established to analyze the effect of varying the main operating parameters on the current density, hydrogen mole fraction and temperature of the cell. The correlation analysis of PEMEC performance was carried out by taking the working parameters as the independent variables and the three evaluation indexes as the dependent variables to output the data set. Six different prediction models were used to predict three performance evaluation indexes of PEMEC to get the highest accuracy model. The results show that voltage is the most important factor affecting the performance of the three indexes, and the correlation coefficients are 0.7456, 0.6919 and 0.7664, respectively. Followed by inlet water temperature and membrane thickness. The inlet water flow rate also has a certain influence on the mole fraction of hydrogen. Random forest algorithm and back-propagation neural network optimized by genetic algorithm are the optimal prediction models, and the determination coefficients of the three indexes are 0.995, 0.992, 0.992 and 0.996, 0.997, 0.993, respectively. This study proposes a

作者简介: 王玉坤(2000.05-), 男, 硕士研究生, E-mail: w19861801635@163.com

通讯作者: 刘吉营(1983.08-), 男, 博士, 教授, E-mail: JXL83@sdjzu.edu.cn

method that combines intelligent algorithms with numerical simulation, providing valuable insights for optimizing PEMEC operating parameters and selecting optimal models in engineering applications.

(Keywords) Proton exchange membrane electrolytic cell; Numerical simulation; Working parameters; Performance evaluation; Machine learning

0 引言

氢能因其无污染、高能量密度的优点被誉为 21世纪发展前景最广阔的可再生能源之一^[1,2]。质 子交换膜电解槽(PEMEC)是一种将剩余可再生 电能转化为氢能的新型制氢装置,与传统的制氢方 式相比(化工原料制氢,煤、石油、天然气重整制 氢),PEMEC 更加环保和高效^[3]。但是,由于较 高的成本、较低的耐久性以及技术领域难以突破等 问题,PEMEC 目前仍未进行大规模开发与利用。 近几年,一些新兴的优化方法被提出以用来提高 PEMEC 的电解效率,降低成本和提高安全性。目 前主流的一种方法是通过改变电解槽的双极板流 道结构,特别是对阳极流场中的水和产物气体进行

均匀去除,以实现高性能和增加寿命^[4,5]。流场几 何形状不仅影响局部流体流动分布,而且还关联到 整个 PEMEC 的压力损失。另一种常见的方法则是 通过开发更好的膜电极组件,包括催化剂层、扩散 层、膜以及双极板材料,来减少贵金属的使用以降 低成本^[6,7]。

虽然以上方法能够在各个方面有效提高电解 能力,但是这些研究普遍固定了电解槽自身的结构 参数和运行参数(以下简称工作参数),对于工作 过程中电解槽参数改变产生的影响却少有研究。此 外,PEMEC的膜电极组件主要是由质子交换膜、 催化剂层和气体扩散层组成的。许多复杂的物理化 学过程发生在这之上,直接影响电解效率,包括电 化学反应,电子和质子转移,以及气液传输。因此, 调节膜电极组件的结构以优化这些过程对于提高 其性能至关重要^[8]。

近年来,随着机器学习算法的兴起,越来越多的研究人员开始将各种智能算法运用到PEMEC中进行参数分析与预测^[9,10]。Zhuang^[11]等人分析了 PEMEC 通道高度和宽度的影响,并采用遗传算法 对模型的通道高度和宽度进行优化,成功降低了模型的压降,提高了质子交换膜上的电化学反应速 率。Chen^[12]等人对电解槽的多个工作参数(初始 工作温度、通道宽度和深度、扩散层厚度等)进行

敏感性分析和人工神经网络模型预测,优化了电流 密度和氧质量分数。Yang^[13]等人采用 k-最近邻和 决策树回归方法对 PEMEC 的最佳制氢系统设计进 行机器学习模型预测。分析了氢气产生速率、电极 面积、阳极流动面积等 17 个参数并成功预测了 PEMEC 最优设计条件下的氢气生产率。但是,上 述研究多为一种预测优化方法的模拟研究。当研究 人员进行 PEMEC 参数分析后做算法预测时,该方 法是否为精度最高且时间成本最低的优化算法却 不得而知。此外,大多数的研究只对电解槽的电流 密度或电压进行预测,而其他性能方面的研究(温 度、产气量等)却相对较少。因此,该研究致力于 探讨 PEMEC 多工作参数的多预测模型性能评价。 通过 COMSOL 软件建立了一个全面的三维两相非 等温传热传质电解槽模型,模拟研究了 PEMEC 工 作参数与评价指标之间的关系并输出了数据集。

更重要的是,将此数据集导入到 MATLAB 软件,利用相关性分析得到了影响各评价指标的重要性能因素。采用了六种不同的预测算法,包括组合算法,来综合对比各算法对于预测不同 PEMEC 性能的优劣,得到了预测电解槽各性能的最优算法模型。该研究得出的最优模型为未来优化 PEMEC 参数选择合适的预测模型提供理论见解。

1 理论模型与方法

1.1 物理模型

图 1 为文章研究的 PEMEC 几何模型。由于 多个单通道的相互对称性,为了节省计算时间, 模型采用单通道进行计算。每个单通道模型包括 两侧的阴极板(C-BP)和阳极板(A-BP),阴极 流道(C-CH)和阳极流道(A-CH),阴极扩散 层(C-CL)和阳极扩散层(A-CD),阴极催 化剂层(C-CL)和阳极催化剂层(A-CL),以及 中间的一层质子交换膜(MEM)。由于液态水可 以加强阴极氢气的排出和阻止质子膜脱水,该模 型在阴极同样引入液态水。单通道 PEMEC 的尺 寸参数如表 1 所示。

	分型	,	1-
Table 1	Geometric dimensions of the mo		model
	表1	模型的几何尺寸	

	值
电池长度 L/(mm)	50
电池宽度 W/(mm)	1
阴/阳极板高度 H _{C-BP} /H _{A-BP} /(mm)	1.5
阴/阳极流道高度 H _{C-CH} /H _{A-CH} /(mm)	1
阴/阳极流道宽度 W _{CH} /(mm)	0.5
阴/阳极扩散层高度 H _{C-GDL} /H _{A-GDL} /(mm)	0.3
阴/阳极催化剂层高度 H _{C-CL} /H _{A-CL} /(mm)	0.02
膜厚度 H _{MEM} /(mm)	0.178





Fig.1 3D model and single-channel cross section of PEMEC

1.2 数值模型

在对模型进行数值计算之前,提出了以下假 设^[14]: (1)参与反应的液态水为层流,且水与气 体均为理想不可压缩流体; (2)不考虑重力、接 触热阻和接触电阻的影响; (3)扩散层和催化剂 层为各向同性介质; (4)忽略液态水的相变,氢 气和氧气在膜中不发生交叉扩散; (5)未考虑水 分子在电拽力作用通过质子交换膜的影响。因此, 基于 COMSOL 建立了一个同时耦合电化学、多相 流和多孔介质流动、固体和流体的传热和传质的多 物理场三维两相非等温 PEMEC 模型。

1.2.1 电化学模型

PEMEC 的电解电压 E 主要由开路电压 E_{eq} 、活

化过电势 η_{act} 、欧姆过电势 η_{ohm} 和扩散过电势 η_{diff} 组成^[15]:

$$E = E_{eq} + \eta_{act} + \eta_{ohm} + \eta_{diff}$$
(1)

开路电压在不同的温度和压力下有所差别,可 以通过能斯特方程计算^[16]:

$$E_{eq} = 1.229 - 9.0 \times 10^{-4} \left(T - 298.15 \right) + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{pH_2 P_{O_2}^{\frac{1}{2}}}{pH_2 O} \right)$$
(2)

式中: *R* 为通用气体常数, J/(mol·K); *F* 为法 拉第常数, C/mol; *T* 为电解槽工作时的温度, K; *p*_(*i*)为 O₂、H₂、H₂O 的平衡压力, Pa。

活化过电势包括阴阳两极的过电势($\eta_{act,a}$, $\eta_{act,c}$),通过 Butler-Volmer 方程进行计算^[17]:

$$i_{a} = \alpha_{v} i_{ref,a} \left[\exp\left(\frac{\alpha_{a} F \eta_{act,a}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{\left(1 - \alpha_{a}\right) F \eta_{act,a}}{RT}\right) \right]$$
(3)

$$i_{c} = \alpha_{v} i_{ref,c} \left[\exp\left(\frac{\alpha_{c} F \eta_{act,c}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{(1 - \alpha_{c}) F \eta_{act,c}}{RT}\right) \right]$$
(4)

式中: *a*_v为活性比表面积, 1/m; *a*_a、*a*_c分别为阳极和阴极的电荷传输系数; *i*_{ref,a}、*i*_{ref,c}分别为阳极和阴极的参考交换电流密度, A/m²。

电子在电解槽内部转移时,会有欧姆损失,主 要由质子交换膜、阴阳极催化剂层、阴阳极气体扩 散层、阴阳极流场板的电阻产生。将这几部分组件 假设成各向同性材料,且只考虑电解槽运行温度对 质子交换膜电阻的影响。质子交换膜电导率σ_m的公 式为^[5]:

$$\sigma_m = 10 \exp\left[1268\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T}\right)\right] \tag{5}$$

则总欧姆过电势的计算公式为[5]:

$$\eta_{ohm} = I\left(\frac{\varphi_m}{\sigma_m} + \frac{\varphi_s}{\sigma_s}\right) \tag{6}$$

式中: σ_m 、 σ_s 分别为电解质电导率和电子电导率, S/m; *I*为电流, A; φ_m 为电解质电势, V; φ_s 为电子电势, V。

因为扩散过电势不足电解槽总电势的千分之

一,因此忽略扩散过电势的影响。

1.2.2 流体流动模型

通过质量守恒和动量守恒对电解槽内部的两 相流动进行建立,通过麦克斯韦-斯特凡方程对电 解槽内部的对流和扩散进行描述^[16]。

1.2.3 热量传递模型

PEMEC 的热量来源主要有水流带来的热量和 电流做功产生的热量, 热量散失途径主要为对流散 热、辐射散热及电解产生的气体和未反应的水流出 电解池带走的热量。热量分布主要通过能量守恒方 程描述^[18]。

1.3 边界条件

对于电场, 阴极一侧为电接地条件, 阳极一侧 存在初始电势条件。对于流动条件, 流体以恒定的 速度和温度从一侧流入, 从另一侧以恒定压力流 出。此外, 模型两侧壁面设为对称壁面, 其余壁面 设为电绝缘和热绝缘边界条件。模型参数见表 2。

表 2	模型的物理参数

Table 2Physical parameters of the model

参数	值
阳极电荷传输系数α。	0.5
阴极电荷传输系数ac	0.5
电子电导率 $\sigma_s/(S/m)$	1000
扩散层孔隙率&0	0.5
膜导热系数 k _{s,MEM} /(W/(m·K))	0.21
氧气导热系数 <i>k_{s,o2} /(W/(m·K))</i>	0.204
氢气导热系数 ^k s.H ₂ /(W/(m·K))	0.0296
扩散层导热系数 k _{s,GDL} /(W/(m·K))	15.2

1.4 数据采集

考虑了 PEMEC 的七个工作参数:电压(V)、 入口水流率(uin)、入口水温(Tin)、MEM 厚度 (HMEM)、A-GDL 有效孔隙率(pA-GDL)、厚度 (HA-GDL)和 A-CL 电导率(ECA-CL)。对于评价指 标,A-CL 电流密度反映了电解槽电化学反应速率 的快慢。A-CL 平均温度与入口水温度的差值反映 了电解槽温度安全性的高低。阴极平均氢气摩尔分 数则直接反应电解槽产出氢气的多少。因此,用上 述三个因变量来评价电解槽电化学反应、温度安全 性和效率的影响,并用模拟得到了 2061 组数据。 各研究变量详细的研究范围如表 3 所示。

表 3 研究参数的变化范围

研究参数	研究范围	
电压 <i>V/</i> V	1.8-2.5	
入口水流率 uin/(kg/s)	0.00025 - 0.0007	
入口水温 T _{in} /(K)	293.15-353.15	
MEM 厚度 H _{MEM} /(µm)	99-336	
A-GDL 孔隙率 p_{A-GDL}	0.2-0.8	
A-GDL 厚度 H _{A-GDL} /(mm)	0.1-0.9	
A-CL 有效电导率 Ec _{A-CL} /(S/m)	0.1, 10, 1000	





Fig.2 Grid independence test

为了消除网格配置引起的计算误差,进行了网格独立性分析。如图2所示,对于研究的八种不同 网格数,在达到88488之后,增加网格数量对电流 密度的影响可以忽略不计,且增大网格也会导致计 算时间的增加。因此,采用88488的网格数量来保 证网格的无关性和更短的计算时间。





计算结果与 Majasan^[19]等人实验测得的结果进行对 照,如图 3 所示。从图中可以看出,25℃和 80℃ 模型的模拟结果与实验结果显示的最大误差值分 别为 2.5%和 3.9%,表明本模型具有足够的准确性 和可操作性,模型建立基本正确。因此,在后文的 描述中将模拟得到的结果以实际值替代,来比较实 际值与预测值的差别。

1.6 预测模型方法

1.6.1 相关性分析

相关性分析是指对一个输入和一个输出进行 相关程度的分析。在这项研究中,采用皮尔逊相关 系数(r)探讨各输入对各输出之间的相关程度。 皮尔逊相关系数越大,表明该输入对该输出的影响 越大。相反,皮尔逊相关系数越小,表明该输入对 该输出的无关项越大。r的计算公式如式(7)所示:

$$r = \frac{\operatorname{cov}(X,Y)}{\sigma_{X}\sigma_{Y}} = \frac{E\left[\left(X - \mu_{X}\right)\left(Y - \mu_{Y}\right)\right]}{\sigma_{X}\sigma_{Y}} = \frac{E\left[XY\right) - E\left(X\right)E\left(Y\right)}{\sqrt{E\left(X^{2}\right) - E^{2}\left(X\right)}\sqrt{E\left(Y^{2}\right) - E^{2}\left(Y\right)}}$$
(7)

式中: cov(*X*,*Y*)为*X*和*Y*的协方差; *σ*_{*X*}和*σ*_{*Y*}分别为*X*和*Y*的方差; *E*(*X*)和*E*(*Y*)分别为*X*和*Y*的数学期望。

1.6.2 Elman 神经网络(ENN)

ENN 是一种由输入层、隐藏层、上下文层和 输出层组成的局部回归反馈神经网络^[20]。与标准人 工神经网络相比, ENN 主要增加了上下文层,其 具有与隐层相同数量的神经元,并存储隐藏层单元 前一时刻的输出值,然后将其反馈到网络的输入。 上下文层使得 ENN 具有很强的全局稳定性、强大 的计算能力以及动态信息处理能力。

1.6.3 反向传播神经网络(BPNN)

BPNN 是一个多层前馈网络模型。其输入层神经元数量由输入数据的特征维度决定,隐藏层的层数对于预测结果的精度有着不同程度的影响,输出层代表预期的取值^[21]。三层 BPNN 结构为输入层-隐藏层-输出层。BPNN 具有处理复杂模式分类的能力和优良的多维函数映射能力,在机器学习和模式识别领域得到了广泛的应用。

1.6.4 随机森林 (RF)

RF 算法是一种集成学习方法, 它采用 bagging 算法和决策树(DT)为学习者^[22]。作为当前先进

的监督机器学习算法之一,它在各种回归和分类问题上都有很好的表现。DT 作为 RF 的基本学习器,可以被认为是二叉树模型,包括顶部的根节点、没有后代的许多叶节点和中间非终端节点^[23]。 Bagging 算法作为组织 DT 的主要方法,以创建 RF 集成学习模型。

1.6.5 支持向量机 (SVM)

SVM 是一种基于统计学习理论和结构风险最 小化原则的机器学习技术。它的主要目标是防止过 拟合,并确保模型可以准确地推广^[24]。SVM 对于 识别因变量和多个影响因素之间的非线性关系特 别有效,尤其是在样本量有限的情况下。其实质是 将训练样本投影到一个高维平面上,并确定一个合 适的超平面,可以有效地分离样本。

1.6.6 萤火虫算法-Elman 神经网络(FA-ENN)

FA 是一种生物启发优化算法。在特定范围内, 萤火虫会随机发光,其吸引力与发光强度成正比。 在移动和聚集的过程中,每只萤火虫的飞行位置都 会根据当前时区中最亮个体的光度而变化。最终, 所有的萤火虫都会聚集到最亮的个体^[25]。

在这项研究中,通过改变萤火虫的位置和亮度 来选择最佳萤火虫个体,然后对初始权重和偏差进 行最佳替换。利用 ENN 建立各输入与各输出之间 的非线性关系,从而实现准确的预测。

1.6.7 遗传算法-反向传播神经网络(GA-BP)

GA 模拟了达尔文生物进化论的自然选择和遗 传学机理的生物进化过程。GA 通过数学的方式, 利用计算机仿真运算,将问题的求解过程转换成类 似生物进化中的染色体基因的交叉、变异等过程。 在求解较为复杂的组合优化问题时,GA 通常能够 较快地获得较好的优化结果。

GA 作为一种模拟自然生物进化的方法,在解决复杂问题(包括非线性和全局优化)方面是极其有效的。在这项研究中,GA 被用来优化 BP 的权重和偏置。然后,利用优化后的权值和偏差对网络进行训练,得到最优解^[26]。

1.6.8 评价指标

用 5 种评价指标来评价上述各算法的精度,分别是均方误差(MSE)、平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)、平均绝对百分比误差(MAPE)和决定系数(R²)。分别由式(8)-(12)获得:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2$$
 (8)

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|$$
⁽⁹⁾

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - y_i)^2}$$
(10)

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{x_i - y_i}{y_i} \right| \tag{11}$$

$$R^{2} = 1 - \sum_{i=1}^{n} \frac{(x_{i} - y_{i})^{2}}{(x_{i} - \overline{y})^{2}}$$
(12)

式中: *n* 表示样本数; *x_i*表示第*i*个预测值; *y_i*表示第*i*个模拟值; *y*表示模拟值的平均值。

对于同一数据集, MSE、RMSE、MAE 和 MAPE 越小且 R²越大,表明预测值和实际值之间的差异 越小,模型的精度更高。

2 结果和讨论

首先采用 r 分析电流密度、氢气摩尔分数和温差的相关性。其次采用 ENN、BPNN、RF、SVM、FA-ENN和 GA-BP 六种算法分别对其三个指标进行精度对比分析,以找到各评价指标的预测最优模型。

2.1 相关性分析







图 4 显示了所有工作参数对电流密度的相关 性分析。从图中可以发现,电压的变化对电流密度 的影响最为显著,其相关系数达到了 0.7456,远远 超过其他工作参数。其次是 MEM 厚度和入口水温 度,其相关系数分别为-0.2955 和 0.3165。而另外 几种工作参数的相关性系数则非常小,相关性可以 忽略不计,其变化对电解槽电流密度以及电化学反应 的影响甚微。显而易见的是,根据欧姆定律,在电解 质和电极材料不变的情况下,电压将会直接影响电流 的大小,进而通过电流密度与电流的关系影响电流密 度的大小。电压升高,电流也将会显著升高。在质子 交换膜水电解过程中,这种影响尤为显著。





Fig.5 Correlation analysis of hydrogen mole fraction

氢气摩尔分数的相关性分析如图 5 所示。从图 中可以看出,电压的变化对氢气摩尔分数的影响依 旧是最高的,其相关系数达到了 0.6919。但是,与 电流密度的相关性分析不同,除了 MEM 厚度和入 口水温度同样对氢气摩尔分数的产出占仅次于电 压的影响之外,入口水流速的变化也对氢气摩尔分 数有着一定的影响,其相关性与 MEM 厚度和入口 水温度类似。这可能是因为入口水流速的变化影响 了产生的气体混入液态水中排出电解槽的速率,从 而影响电解槽内部的氢气摩尔分数。

A-CL 平均温度与入口水温度差值的相关性分 析如图 6 所示。与电流密度的相关性类似,电压依 旧是影响温差最大的因素,其相关系数达到了 0.7664。其次是 MEM 厚度和入口水温度,其相关 系数分别为-0.24 和 0.2835。其余工作参数对电解 槽性能的影响甚微。纵观三个工作参数的流场分析 图,电压的改变无疑是对温差变化最大的影响因 素,显著影响电解槽的温度安全性。综上所述,在 对 PEMEC 的七个主要工作参数进行相关性分析 后,入口水温度、电压和 MEM 厚度是三个主要影 响电流密度、氢气摩尔分数和温差的因素。此外, 入口水流速对氢气摩尔分数也有一定的影响。而其 余工作参数对电解槽的影响甚微。在工程应用中可 根据本研究相关性分析得到的结论对电解槽进行 有目的的改进与优化,大大减少了不必要的实验和 分析,提高了效率。



图 6 温差的相关性分析

Fig.6 Correlation analysis of temperature difference 2.2 电流密度的预测对比

在相关性分析后进行预测模型对比分析。值得注 意的是,对于电流密度、氢气摩尔分数和温差,分别 各有三个或者四个影响因素占比较大,因此在节省时 间成本方面可以将剩余影响较小的因素舍去。但是, 由于减少影响因素将会导致数据量的缩减。因此在考 虑数据量的前提下,在保证数据准确性的同时依旧采 用总数据集(共2061组)进行预测,以获得相对准 确的结果。此外,在预测的过程中,所有方法都保证 总数据集的训练集和测试集的比例为 8:2。

任何机器学习算法的主要目标都是学习观察到 的训练数据的概念或函数,并且能够对新的独立数

据进行泛化,同时避免不足和过度拟合的缺陷。对 于总的 2061 组数据集,图 7(a)~(f)显示了全部 六种模型电流密度的预测结果。其中, x 轴代表预测 数值, v 轴代表模拟的实际数值。从图中可以发现, 对于单模型的预测, RF 表现出最高的精度, 其显示 出 0.011 的 MSE 值, 0.053 的 MAE 值, 0.105 的 RMSE 值和 0.995 的 R² 值。RF 作为一种集成学习思想的机 器学习算法,它擅长通过构建多棵决策树,并将这 些决策树的预测结果进行集成来产生最终的预测结 果[27]。与单一模型相比,其具有高准确性、高鲁棒 性、处理高维特征、并行化处理、特征重要性评估、 处理缺失值以及易于实现和调参等优势, 使得在此 电流密度的预测中脱颖而出。因此,对于单个模型, 推荐采用 RF 模型进行预测。在剩余单个模型对比 中, BPNN 的精度大于 ENN, SVM 精度低于上述两 者。与 RF 相比,这三个模型的预测值和实际值之间 存在显著偏差,不推荐用于预测电流密度。

从图 7 (a)、(b)、(e)、(f)的组合模 型对比中可以发现,经过 FA 优化的 ENN 模型与 ENN 模型相比精度提升甚微。而 GA-BP 模型却表 现出了显著的性能,其精度大幅度提高,R²达到了 0.996。可以表明,并不是所有优化后的组合模型 都能够显著提升预测性能,对于各单模型,经过优 化是否能够具有有效性还需分别考虑。综合所有精 度评价指标,对于电流密度的预测,GA-BP 和 RF 无疑是最优选择。



Fig.7 Comparative analysis of the accuracy of six algorithms for current density prediction

2.3 氢气摩尔分数的预测对比

各算法对氢气摩尔分数的预测如图 8 所示。从 图中可以发现,对于单预测模型,RF 算法的预测 精度最高,证明在氢气摩尔分数方面 RF 算法也是 相对最优的。但是,与预测电流密度不同的是,对 于其他单模型的预测呈现出了不同的规律,ENN 模型和 SVM 模型在所有评价指标表现出来的精度 类似,仅在 MAPE 和 MAE 方面有较大差别(偏差 约 8%)。其次是 BPNN,其 MSE、MAE、RMSE 和 MAPE 都略高。这可能是因为在处理较小值数 据时, BPNN 的稳定性和收敛性不如 ENN, 且处 理非线性问题的能力也不如 SVM, 从而表现出了 偏低的预测精度。

在组合模型中,GA-BP 模型表现出了最高的 预测精度,其MSE、MAE、RMSE、MAPE 和 R² 值分别为 0.00003、0.00137、0.00173、0.251%和 0.997。经过 GA 优化后的 BP 模型效果显著,而经 过 FA 优化后的 ENN 模型却作用甚微。因此与电 流密度预测类似,在氢气产气量方面同样优先选择 RF 和 GA-BP 模型。







2.4 温差的预测对比

在考虑电解槽效率的同时,不可忽略的也要考 虑电解槽运行过程中带来的温度升高而影响电解 槽材质的问题。因此,研究其温差的变化,对其温 差的数值进行预测也十分重要。图9示出了六种不 同模型对电解槽温差的预测精度对比分析。首先同 样比较单模型可以发现,RF模型依旧具有最高精 度。因此可以得出结论,在研究的预测评价指标(电 流密度、氢气摩尔分数和温差)下,RF模型在所 有单模型中预测精度最高,可以被看作是PEMEC 性能预测算法的第一选择。对于其剩余单模型, ENN 的精度略高于 BPNN。结合电流密度和氢气 摩尔分数 ENN 和 BPNN 的对比可以总结如下: ENN 和 BPNN 都作为神经网络的一种,除去各自 表现出来的细微具体差别以外,其预测 PEMEC 性 能方面显示出来的精度基本类似,可以归纳为同一 梯度,即神经网络梯度,其精度仅次于 RF。而第 三梯度则是 SVM,除了对氢气摩尔分数的预测 SVM 表现出稍好的趋势(其精度趋近于第二梯度) 以外,SVM 对预测 PEMEC 性能都没有优势,预 测精度最低。

对于温差预测的不同组合模型和原模型的对 比分析可以从图 9(a)、(b)、(e)和(f)中 发现,其规律与电流密度和氢气摩尔分数的预测类 似。FA-ENN的精度与 ENN 类似, GA-BP 则显著 高于 BPNN。此外, GA-BP 的各精度评价指标与 RF 差别甚微。因此结合单模型之后对全部六种算 法进行 PEMEC 综合性能指标总结,精度最高的第 一梯队即为 RF 和 GA-BP,其次第二梯队为 BPNN、 ENN 和 FA-ENN,精度最差的第三梯队为 SVM。 可以表明,在该文章机器学习研究中,RF和GA-BP 是最好的预测模型。这一结论在大型工业或生产厂 家中节省了时间和精力。有助于研究人员和生产厂 商快速选择合适的预测算法进行有效的电解槽性 能预测。



Fig.9 Comparative analysis of the accuracy of temperature difference prediction by six algorithms

3 结论

研究建立了一个全面的三维稳态传热传质电 解槽模型,通过模拟的方式得到了电解槽七种不同 工作参数的变化对温度、电流密度和氢气摩尔分数 的影响并导出数据集。采用相关性分析得到三种评 价指标的分别重要性能因素。还实施了六种机器学 习方法来评估系统在不同评价指标下的预测性能。 基于这些研究,得到的可靠结论是:

(1)入口水温度、电压和 MEM 厚度是三个 主要影响电流密度、氢气摩尔分数和温差的因素。 其中,电压的相关性最高,其相关系数分别达到了 0.7456,0.6919,0.7664。

(2)入口水流速对氢气摩尔分数也有一定的 影响。其相关性达到了与入口水温度和 MEM 厚度 类似的等级。其余工作参数对电解槽的影响甚微。

(3) 对比单模型预测, RF 是预测三个评价指标精度最高的模型,其电流密度、氢气摩尔分数和温差的 R²分别为 0.995, 0.992, 0.992。其次是 ENN和 BPNN。而 SVM 预测精度相对最差。但是,预测氢气摩尔分数的模型中,SVM 的精度达到了第二梯队的标准。在预测氢气摩尔分数的过程中

SVM 选择与 ENN 和 BPNN 同样重要。

(4) GA-BP 显著提高三个指标的模型预测精度,其 R²分别为 0.996, 0.997, 0.993。FA-ENN 模型没有显著提高预测精度。

这项研究可为在工程应用中对电解槽进行有 目的的改进与优化提高参考,大大减少了不必要的 实验和分析,提高了效率。但是,本研究只考虑了 电解槽的温度安全性、极化曲线和产氢量的问题, 对于电解槽更多其他的问题(例如防止降解)没有 涉及。此外,研究并未涉及全部算法,在众多智能 算法当中只选取了大众的算法以及对比了两种经 过优化的预测算法。后续的研究可以考虑更多的电 解槽性能评价指标,更为广泛的运用优化算法,以 分别对比更多的因变量从而寻求规律和建议。

参考文献:

- [1] 张晓林,王润晴,陈兵.自然通风下的高压氢气泄露扩散特性[J].制冷与空调,2023,37(5):664-674.
- [2] 楚笑天,谢永亮.运行参数对高温燃料电池物质分布与 启动时间的影响研究[J].制冷与空调,2024,38(3):330-336.

- [3] 武晓彤,谭磊,郑越源,等.氢经济展望与电解水制氢技 术经济性分析[J].化学工业与工程,2024,41(2):131-140.
- [4] 邢晓慧.质子交换膜电解池传热传质及流场结构研究 [D].北京:北京交通大学,2020.
- [5] 王华,马晓锋,何勇,等.流场结构对 PEM 电解槽性能影 响模拟[J].洁净煤技术,2023,29(3):78-84.
- [6] 曹雪洁,杨磊,徐光宇,等.质子交换膜电解水制氢阳极 析氧反应催化剂的研究进展[J].硅酸盐学报,2024, 52(6):1861-1872.
- [7] 张舒涵.质子交换膜电解水制氢中阴阳极催化剂及膜 电极的制备研究[D].杭州:浙江大学,2023.
- [8] García-Salaberri PA. 1D two-phase, non-isothermal modeling of a proton exchange membrane water electrolyzer: An optimization perspective[J]. Journal of Power Sources, 2022,521:230915.
- [9] Duan X, Xiang X, Chen J, et al. Numerical simulation and multi-objective optimization on flow performance of novel alkaline water electrolyzer[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2024,55:1505-1513.
- [10] 程维嵩,祝乔,杨子龙.质子交换膜电解池进水温度与流 速参数分析及系统能效预测[J].制冷与空调,2024, 38(2):168-176.
- [11] Zhuang Y, Cui P, Long R, et al. Multi-objective optimization of channel structure for a proton exchange membrane water electrolysis cell[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2024,49:337-352.
- [12] Chen J, Lv H, Shen X, et al. Multi-objective optimization design and sensitivity analysis of proton exchange membrane electrolytic cell[J]. Journal of Cleaner Production, 2024,434:140045.
- [13] Yang R, Mohamed A, Kim K. Optimal design and flow-field pattern selection of proton exchange membrane electrolyzers using artificial intelligence[J]. Energy, 2023,264:126135.
- [14] Wang Y, Mao Y, Yang K, et al. Enhancing PEMEC Efficiency: A synergistic approach using CFD analysis and Machine learning for performance optimization[J]. Applied Thermal Engineering, 2024,255:124018.
- [15] 郑金松,莫景科.PEM 水电解池反应特性参数的三维模型数值模拟[J].电源技术,2021,45(11):1401-1404,1504.
- [16] 穆瑞,马晓锋,翁武斌,等.螺旋流场设计对 PEM 电解槽

性能影响的模拟研究[J].新能源进展,2023,11(4):295-302.

- [17] Wang Y. Modeling of two-phase transport in the diffusion media of polymer electrolyte fuel cells[J]. Journal of Power Sources, 2008,185(1):261-271.
- [18] Chen YN, Mojica F, Li GF, et al. Experimental study and analytical modeling of an alkaline water electrolysis cell[J]. International Journal of Energy Research, 2017,41(14):2365-2373.
- [19] Majasan JO, Cho JIS, Dedigama I, et al. Two-phase flow behaviour and performance of polymer electrolyte membrane electrolysers: Electrochemical and optical characterisation[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018,43(33):15659-15672.
- [20] 陈俊波,赵黎,刘海涛,等.基于 Elman 神经网络的室内定 位算法[J].光通信技术,2023,47(1):58-62.
- [21] An WH, Zhu XY, Yang KM, et al. Hourly Heat Load Prediction for Residential Buildings Based on Multiple Combination Models: A Comparative Study[J]. Buildings, 2023,13(9):2340.
- [22] 褚江东,粟晓玲,张特,等.基于随机森林模型的 GRACE 数据3种空间降尺度对比[J].湖泊科学,2024,36(3):951-962.
- [23] An J, Nie G, Hu B. Area-Wide estimation of seismic building structural types in rural areas by using decision tree and local knowledge in combination[J]. International Journal of Disaster Risk Reduction, 2021,60:102320.
- [24] 尹佳宇.几类快速支持向量机模型及算法研究[D].呼和 浩特:内蒙古大学,2023.
- [25] Anshory I, Jamaaluddin J, Wisaksono A, et al. Optimization DC-DC boost converter of BLDC motor drive by solar panel using PID and firefly algorithm[J]. Results in Engineering, 2024,21:101727.
- [26] 刘嘉兴,吕大立,吕可维,等.基于 BP 神经网络的转向架 斜楔参数优化[J].铁道学报,2023,45(10):52-59.
- [27] Xie J, Tang X, Zheng F, et al. Improvement of the ozone forecast over Beijing through combining the chemical transport model with multiple machine learning methods[J]. Atmospheric Pollution Research, 2024, 15(8):102184.