

燃料电池膜电极的催化剂载量面 分布非均匀设计

杨钦文¹, 王旭¹, 肖罡^{1,2}

(1. 湖南大学机械与运载工程学院, 长沙 410082; 2. 江西铜业技术研究院有限公司, 南昌 330096)

摘要:为提高燃料电池膜电极各处电流密度的大小及分布均匀性,采用多项式函数近似模拟催化剂载量的分布规律,并构建燃料电池平均电流密度和电流密度均匀性的加权目标函数。通过数值仿真求解多项式系数与加权目标函数的映射关系,进而优化分布函数。结果表明,与催化剂载量均匀分布的燃料电池相比,采用优化的非均匀催化剂载量分布的燃料电池虽然平均电流密度略有下降,但电流密度均匀性提升显著。综合考虑电流密度和均匀性,非均匀分布优于均匀分布,且一阶非均匀分布函数优势更加明显。

关键词:质子交换膜燃料电池;非均匀催化剂载量分布;电流密度均匀性;平均电流密度;多目标优化

中图分类号: TM911.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 1671-5497(2025)12-3814-08

DOI: 10.13229/j.cnki.jdxbgxb.20240478

Non-uniform design of catalyst distribution for fuel cell membrane electrode assembly

YANG Qin-wen¹, WANG Xu¹, XIAO Gang^{1,2}

(1. College of Mechanical and Vehicle Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China; 2. Jiangxi Copper Technology Research Institute Co., Ltd., Nanchang 330096, China)

Abstract: To improve the magnitude and distribution uniformity of current density at various locations of the fuel cell membrane electrode, a polynomial function is used to approximate the distribution law of catalyst loading, and a weighted objective function is constructed for the average current density and current density uniformity of the fuel cell. By using numerical simulation to solve the mapping relationship between polynomial coefficients and weighted objective function, the distribution function can be optimized. The results showed that compared with fuel cells with uniformly distributed catalyst loading, fuel cells with optimized non-uniform catalyst loading distribution showed a significant improvement in current density uniformity, although the average current density slightly decreased. Considering both the magnitude and

收稿日期: 2024-05-03.

基金项目:国家自然科学基金面上项目(52471055);江西省自然科学基金杰出青年基金项目(20224ACB218002);江西省高层次高技能领军人才培养工程项目;浙江大学流体动力基础件与机电系统全国重点实验室开放基金项目(GZKF-202422).

作者简介:杨钦文(1985-),女,副教授,博士.研究方向:机械设计及理论.E-mail: yangqw@hnu.edu.cn

通信作者:肖罡(1983-),男,副教授,博士.研究方向:复杂非线性系统建模与优化.E-mail: xg_1221@163.com

uniformity of fuel cell current density, non-uniform catalyst loading surface surpasses the uniform one. Furthermore, the first-order distribution function indicates greater advantages.

Key words: proton exchange membrane fuel cell; non-uniform distribution of catalysts; uniformity of current density; average current density; multi-objective optimization

0 引言

质子交换膜燃料电池(Proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)是一种将储存在反应物中的化学能转化为电能的装置。在阳极端,氢气在催化层失去电子成为质子,质子穿过质子交换膜进入阴极,随后与氧气、电子结合生成水^[1]。一个完整的PEMFC由双极板、多孔层、催化层和质子交换膜构成,具有环保、效率高的优点,是理想的能量来源。

催化层是燃料电池内部反应物消耗并产生电流的区域,直接影响反应物、电流密度及温度的均匀性。反应物在流经燃料电池流道时,受电化学反应消耗影响,入口和出口附近的浓度差异较大,这加剧了燃料电池整体电流密度的不均匀程度,而电流密度的均匀性与燃料电池的耐久性密切相关^[2]。国内外对催化层结构的改进可以分为优化催化剂的制备工艺^[3-5]和优化催化剂的整体分布形式^[6, 7]两类。但是这些研究大都局限于对燃料电池平均电流密度的优化。提高电流密度的均匀性可以减少催化剂的降解,延长PEMFC的使用寿命^[8, 9]。一些研究对催化层中离聚物^[10]、铂催化剂^[11, 12]、气体扩散层的孔隙分布^[12]进行优化设计,补偿膜电极中不均匀的物质运输和电化学反应速率,进而提高电流密度的均匀性。

针对燃料电池车辆对输出功率和使用寿命日益增长的需求,本文综合考虑PEMFC的平均电流密度和电流密度均匀性,构建两者的加权函数,通过数值仿真模拟,研究非均匀催化剂载量分布与加权目标函数的关系,并基于仿真结果对催化剂载量分布形式进行优化,以提高电流密度的大小和均匀性。

1 数学模型

1.1 守恒方程

守恒方程可以描述燃料电池内部的流体流动、组分运输、质量热量传递及电化学反应过程,本文对物理模型作出如下假设:

(1)燃料电池内部流体的流动为不可压缩层流;

(2)反应气体遵从理想气体定律;

(3)多孔介质的组分传输特性及导电性为各向同性;

(4)燃料电池处于绝热条件且保持稳态;

(5)忽略阴阳极气体互窜及泄漏电流。

电子在固体导电材料中的传输模型为^[13]:

$$\nabla \cdot (\sigma_{\text{sol}} \nabla \phi_{\text{sol}}) + R_{\text{sol}} = 0 \quad (1)$$

式中: R_{sol} 为催化层的交换电流密度; ϕ_{sol} 为电势; σ_{sol} 为电导率。

R_{sol} 与催化剂的活性面积 ζ_{sol} 有关,其表达式为^[13]:

$$R_{\text{sol}} = (\zeta_{\text{sol}} f(\bar{x}) j_{\text{sol}}(T)) \times \left(\frac{[A]}{[A]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{sol}}} \times \left(e^{\frac{\alpha_{\text{an}}^{\text{sol}} F \eta_{\text{an}}}{RT}} - e^{-\frac{\alpha_{\text{cat}}^{\text{sol}} F \eta_{\text{cat}}}{RT}} \right) \quad (2)$$

式中: $j_{\text{sol}}(T)$ 为参考交换电流密度; T 为温度; $[A]$ 为气体的摩尔浓度; $[A]_{\text{ref}}$ 为气体摩尔浓度的参考值; F 为法拉第常数; R 为阿伏伽德罗常数; γ_{sol} 、 $\alpha_{\text{an}}^{\text{sol}}$ 、 $\eta_{\text{an}}^{\text{sol}}$ 、 $\alpha_{\text{cat}}^{\text{sol}}$ 和 $\eta_{\text{cat}}^{\text{sol}}$ 为待拟合的模型参数。为了模拟催化剂载量的非均匀分布,本文引入 $\bar{x}$ 处催化剂载量与均匀分布的催化剂载量的比值 $f(\bar{x})$ 。当催化层各处催化剂载量一致时, $f(\bar{x})=1$;当各处催化剂载量不一致时, $f(\bar{x})$ 为关于空间坐标 $\bar{x}$ 的函数。

水在质子交换膜中的传输模型为^[13]:

$$\nabla \cdot \left(i_{\text{m}} \frac{n_{\text{d}}}{F} M_{\text{w}} \right) = \nabla \cdot (M_{\text{w}} D_{\text{w}}^i \nabla \lambda) + S_{\lambda} + S_{\text{gd}} + S_{\text{ld}} \quad (3)$$

式中: S_{gd} 、 S_{ld} 、 S_{λ} 为水在不同相之间的转化源项; λ 为水含量; D_{w}^i 为扩散系数; M_{w} 为水的摩尔质量; F 为法拉第常数; n_{d} 为电渗拖拽系数; i_{m} 为电流。

多孔介质中液态水的饱和度计算模型为^[13]:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\rho_{\text{l}} K K_{\text{r}}}{\mu_{\text{l}}} \nabla (p_{\text{c}} + p) \right) = S_{\text{gl}} - S_{\text{ld}} \quad (4)$$

式中: p_{c} 为毛细压力; p 为气体压力; K 为绝对渗透

率; K_r 为相对渗透率; ρ_l 为水的密度; μ_l 为水的黏度; S_{gl} 、 S_{ld} 为相变源项。

气体组分的传输模型为^[13]:

$$\nabla \cdot (\rho_g U_g y_i) = \nabla \cdot (\rho_g D_g^{\text{eff}} \nabla y_i)$$

(5)

式中: ρ_g 为气体密度; U_g 为气体流速; y_i 为气体的质量分数; D_g^{eff} 为气体的有效扩散系数。

能量守恒方程为^[13]:

$$\nabla \cdot (\rho c_p U T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S^{\text{react}} + S^{\text{phase}}$$

(6)

式中: ρ 为气体密度; c_p 为比热容; U 为气体流速; T 为温度; S^{react} 、 S^{phase} 分别为反应热和相变热。

1.2 边界条件

上述守恒方程的流量边界条件为:

$$\dot{m} = \varepsilon \frac{I}{nF} A_{\text{MEA}} \frac{1}{x} \frac{RT}{P} \rho$$

(7)

式中: ε 为化学计量比; I 为参考电流密度; n 为反应物的电子数; x 为反应物的摩尔分数; P 为入口压力; ρ 为反应物的密度; A_{MEA} 为活性面积; R 为气体常数; T 为气体温度。

本文采用恒定电压法对上述模型进行求解,以双极板端面的阳极电势为参考,假设其电势为0,阴极电势与外电路电势相等。此外,阴阳极的入口设置为质量流量入口,出口设置为压力出口。

燃料电池车辆在工作过程中,为回收制动能量以提高系统的能量利用效率及响应速度,通常会并联动力电池等其他电源。参考车辆的CLTC行驶工况及多能源系统能量管理策略^[14]可知,燃料电池处于中等输出功率的概率更高。此外,为避免铂基催化剂在高电位环境下溶解,燃料电池的工作电压通常限制在0.85 V以下^[15]。因此,本文着重优化燃料电池中等输出功率下的平均电流密度和电流密度均匀性,并设置阴极的电势边界条件为0.7 V。

1.3 模型验证

为拟合上述模型参数,首先使用 GREEN-LIGHT 公司生产的 G60 测试台架对单电池的极化性能进行测试,采集各传感器数据,实验测试工况如表 1 所示,单电池测试夹具的加热片温度保持在 80 ℃。该测试台架由供气系统、温控系统、数据采集系统及负载 4 部分组成,如图 1 所示。其次,本文对实验所用的蛇形流场燃料电池进行三维建模,其结构参数及网格模型分别如表 2 和图 2 所示。在网格划分的过程中,气体扩散层、催化层和质子交换膜沿厚度方向分为 4 层^[16]。对比不同网格数量(0.22×10^6 、 1.44×10^6 、 2.24×10^6)模型的仿真结果可知,当网格数目 $>1.44 \times 10^6$ 时,仿真结果基本保持不变。因此,综合考虑计算资源消耗与模型精度,本文选取网格总数为 1.44×10^6 的模型进行后续仿真,并采用 Fluent 数值仿真软件求解。

表 1 极化曲线测试工况

Table 1 Polarization curve test conditions					
电流/ A	阳极计 量比	阴极计 量比	气体出口 压力/kPa	气体露点 温度/℃	气体入口 温度/℃
0	14.34	12.03	60	68	80
5	43.02	36.11	60	68	80
10	21.51	18.05	60	68	80
15	14.34	12.03	60	68	80
20	10.75	9.03	60	68	80
22.5	9.56	8.02	60	68	80
25	8.6	7.22	60	68	80
27.5	7.82	6.56	60	68	80
30	7.17	6.02	60	68	80
35	6.15	5.16	60	68	80
40	5.38	4.51	60	68	80
45	4.78	4.01	60	68	80
50	4.3	3.61	60	68	80

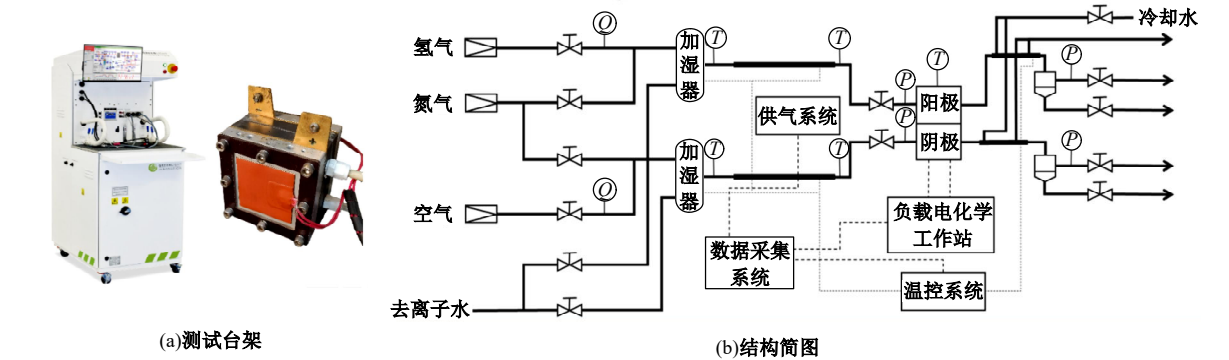


图 1 G60 燃料电池测试台架实物图及结构示意图

Fig. 1 G60 fuel cell test bench physical diagram and structural diagram

表 2 蛇形流场 PEMFC 结构参数

Table 2 Structural parameters of PEMFC with serpentine flow field

参数名称	单位	阳极侧值	阴极侧值
流道高度	mm	1	1
流道宽度	mm	1	1
气体扩散层厚度	mm	0.2	0.2
催化层厚度	mm	0.01	0.01
质子交换膜厚度	mm	0.05	0.05
气体扩散层孔隙率	—	0.6	0.6
催化层孔隙率	—	0.2	0.2
有效面积	cm ²	25	25
操作压力	Pa	101 325	101 325

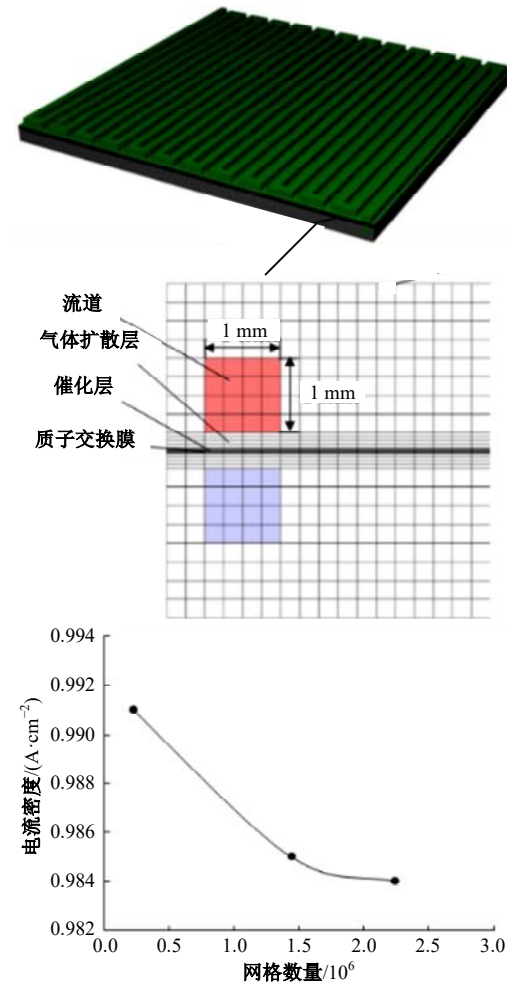


图 2 蛇形流场 PEMFC 网格模型

Fig. 2 Grid model of PEMFC with serpentine flow field

通过调整模型参数可以缩小仿真极化曲线与实验数据的误差。本文所用模型参数如表 3 所示,且仿真工况与实验工况保持一致。仿真与实验的极化曲线对比如图 3 所示,从图 3(b)中可以看出,在 0.793、0.692、0.592 V 附近两者的平均电流密度相对误差较大($<5\%$)。这是因为测

试过程中,测试台架的供气流量、温度、湿度等参数在部分工况点可能与设定目标存在偏差或延迟,导致测试数据不能形成光滑曲线。从整体来看,该模型的仿真结果在大部分电流密度点上与实验数据重合,因此可用于燃料电池性能的预测。

表 3 蛇形流场 PEMFC 模型参数

Table 3 Model parameters of PEMFC with serpentine flow field

参数名称	单位	阳极侧值	阴极侧值
参考交换电流密度	A/m ²	30 000	50
参考浓度	kmol/m ³	0.8	0.8
浓度指数	—	0.05	0.002
转移系数	—	1	1

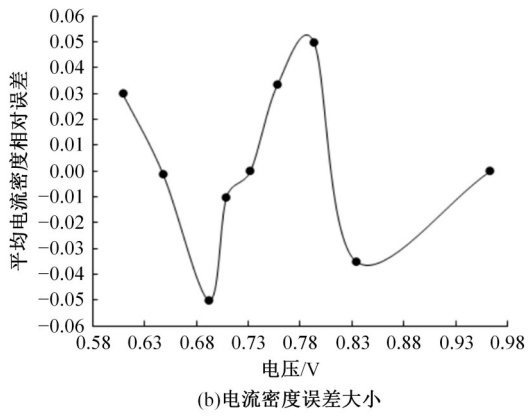
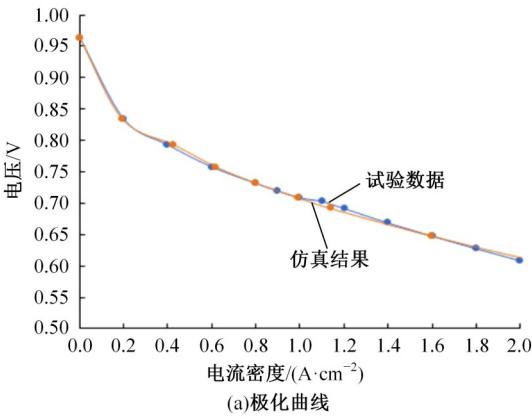


图 3 模型仿真结果与实验数据对比

Fig. 3 Comparison between model simulation results and experimental data

为了研究非均匀催化剂载量分布对燃料电池性能的影响,本节在式(2)中引入催化剂载量分布函数 $f(\bar{x})$ 。随后,基于实验数据及单电池零部件结构参数建立三维 CFD 仿真模型,并对其预测精度与准确性进行验证,为后续优化催化剂载量分布提供基础。

2 结果及讨论

由于浓度梯度的存在,反应物在流经燃料电池流道时不断向催化层扩散,在催化层表面发生化学反应并产生电流。这导致反应物浓度沿着流道从入口向出口逐渐降低,因此燃料电池流道后半段的电化学反应阻力较大,该处电流密度相较于入口处催化层也更低,这些因素加剧了燃料电池整体电流密度的不均匀性。电流密度与电化学反应速率相关,不均匀的化学反应速率会造成热量的不均匀分布,进而引发膜电极局部温度和应力的突变,影响其使用寿命^[17]。为衡量膜电极各处电流密度的不均匀程度,本文采用式(8)对其进行计算。

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^m (I_i - \bar{I})^2}{m}} \quad (8)$$

式中: $\bar{I}$ 为电流密度的平均值; m 为网格总数目; I_i 为网格*i*处的电流密度。

基于燃料电池平均电流密度和电流密度均匀性的多目标函数可以表示为:

$$J = w_\sigma \frac{\sigma_0 - \sigma}{\sigma_0} + w_{\bar{I}} \frac{\bar{I}_0 - \bar{I}}{\bar{I}_0} \quad (9)$$

式中: σ_0 、 $\bar{I}_0$ 分别为催化剂载量均匀分布时燃料电池的电流密度标准差和平均电流密度值; w_σ 、 $w_{\bar{I}}$ 分别为电流密度标准差和平均电流密度权重,二者之和为1。当催化剂载量均匀分布时,目标函数 $J=0$ 。为提高电流密度均匀性,本文设定 w_σ 的取值范围为 $[0.5, 1]$ 。

根据式(1)(2),本文假设在XZ平面内,催化层的催化剂载量分布服从函数 $f(\bar{x})$ 。随后,以入口为原点,沿入口到出口方向为正方向建立一维 x 坐标轴,如图4所示。

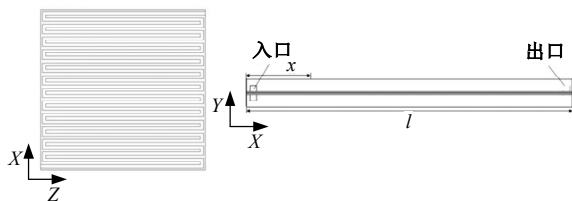


图4 催化剂载量分布示意图

Fig. 4 Schematic diagram of catalyst distribution

设某点距离入口的坐标为 x , l 为出口在 X 坐标轴上的位置。为便于计算,通过归一化方式将 x 转换为 $\bar{x}$,其中 $\bar{x} = x/l$ 。若非均匀催化剂载量分布不改变催化剂总量,则分布函数需满足如下约束条件:

$$\int_0^1 f(\bar{x}) d\bar{x} = 1 \quad (10)$$

对催化剂载量分布函数 $f(\bar{x})$ 进行泰勒展开,得到如下多项式函数:

$$f(\bar{x}) = f(\bar{x}_0) + f'(\bar{x}_0)(\bar{x} - \bar{x}_0) + \frac{f''(\bar{x}_0)(\bar{x} - \bar{x}_0)^2}{2!} + \dots + \frac{f^{(n)}(\bar{x}_0)(\bar{x} - \bar{x}_0)^n}{n!} + R_n \quad (11)$$

虽然增加泰勒展开项可以更精确地获得最优催化剂载量分布函数,但多项式系数的增多会显著增加系数优化的计算负担,同时对催化层的制备工艺提出更高要求。因此,为研究不同催化剂载量分布函数对燃料电池平均电流密度和电流密度均匀性的影响,本文仅使用 $f(\bar{x})$ 的一阶和二阶泰勒展开式,并对其系数进行优化。

2.1 联合运算模型构建

为了求解式(11)中的多项式系数优化问题,本文搭建了基于Matlab与Fluent的联合仿真平台,将Fluent作为目标函数的求解器,在Matlab中对多项式系数进行优化。具体的数据传输原理如图5所示。

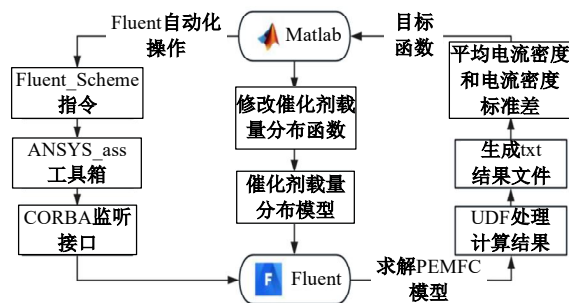


图5 联合仿真原理图

Fig. 5 Schematic diagram of the joint simulation

通过Matlab的ANSYS_aas工具箱访问Fluent提供的CORBA监听接口,读入aaS_FluentId.txt文件与Fluent建立连接,从而在Matlab中写入Scheme指令,实现对Fluent的自动化操作。借助提前在Fluent中编译的用户自定义函数(User-defined functions, UDF),可以将Matlab中优化后的催化剂载量分布模型注入计算。Fluent的计算结果在经过统计学分析后,会生成txt结果文件,并回传到Matlab中。

2.2 一阶分布函数系数对燃料电池性能的影响

催化剂载量一阶分布函数及其系数的约束条件分别为:

$$f(x) = ax + b \quad (12)$$

$$\begin{cases} \int_0^1 f(x) \mathrm{d} x = \int_0^1 (a x + b) \mathrm{d} x = \frac{a}{2} + b = 1 \\ f(x) > 0 (0 < x < 1) \end{cases} \quad (13)$$

式中: a 、 b 为待优化系数,由约束条件可知系数 a 的取值范围为 $(-2,2)$ 。

考虑数值模拟计算成本及加工精度,本文对定义域内的系数 a 和权重 w_s 按照 0.1 的步长取值,代入仿真模型后得到两者关于目标函数 J 的映射关系,如图 6 所示。其中,曲线上的标记点分别表示不同权重 w_s 下使目标函数 J 最大的系数 a 的取值。

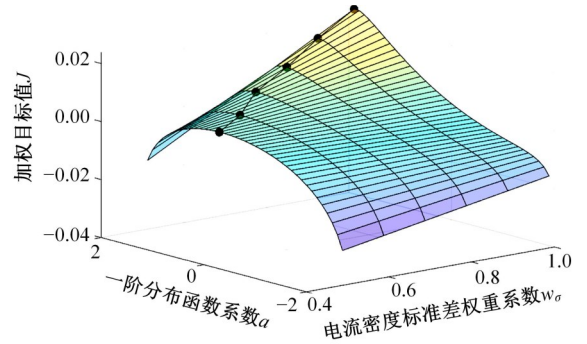


图 6 一阶分布函数系数对燃料电池性能的影响

Fig. 6 Effect of first-order distribution function coefficients on fuel cell performance

从图 6 中可以看出,当系数 $a < 0$ 时,目标函数 $J < 0$,即非均匀催化剂载量分布的效果比均匀分布的差。这是因为当系数 a 为负数时,催化剂载量沿着 x 坐标轴从入口到出口逐渐减小,使得流动后半段化学反应的活化能增大。此外,反应物浓度沿着流动从入口到出口同样不断降低,两者共同加剧了电流密度的不均匀程度。当系数 $a > 0$ 时,目标函数 $J > 0$,且随着权重 w_s 的增大而快速增大。这说明,当优化目标倾向于提高电流密度均匀性时,催化剂载量沿着 x 坐标轴从入口到出口逐渐增大的分布形式更具优势。

2.3 二阶分布函数系数对燃料电池性能的影响

根据 2.2 节的结论可知,催化剂载量的分布应保持从入口向出口增大的趋势,但该趋势并不一定是线性的。因此,为进一步研究最优催化剂载量分布,使用二阶多项式近似 $f(\bar{x})$ 并优化相关系数,其分布函数和约束条件分别为:

$$f(x) = ax^2 + bx + c \quad (14)$$
$$\begin{cases} \int_0^1 f(x) \mathrm{d} x = \int_0^1 (ax^2 + bx + c) \mathrm{d} x = \frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 1 \\ f(x) > 0 (0 < x < 1) \end{cases} \quad (15)$$

式中: a 、 b 、 c 均为待优化系数。

根据二阶多项式的判别式,可将式(15)的约束条件进一步划分为 4 种情况,如表 4 所示。随后在各情况的约束范围内随机取一组系数,绘制分布函数图像,如图 7 所示。

表 4 约束条件

Table 4 Constraint condition			
情况 1	情况 2	情况 3	情况 4
$\frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 1$	$\frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 1$	$\frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 1$	$\frac{a}{3} + \frac{b}{2} + c = 1$
$-\frac{b}{2a} < 0$	$0 < -\frac{b}{2a} < 1$	$0 < -\frac{b}{2a} < 1$	$-\frac{b}{2a} > 1$
$a > 0$	$a > 0$	$a < 0$	$a < 0$
$c > 0$	$c > 0$	$c > 0$	$c > 0$
	$a + b + c > 0$	$a + b + c > 0$	

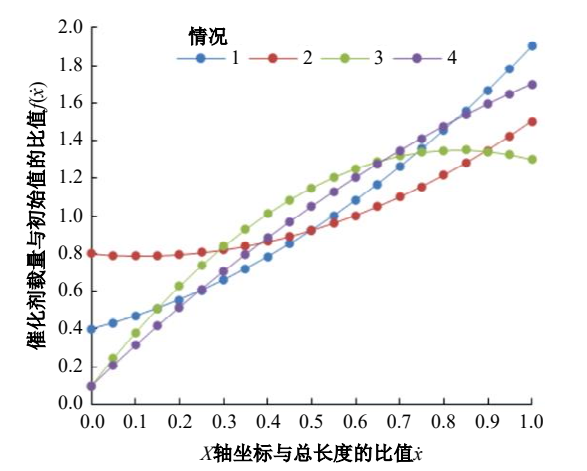


图 7 二阶分布函数示例

Fig. 7 Example of second-order distribution function

为缩小系数的取值范围,本文假设出口处催化剂载量始终大于入口处,并结合 2.2 节一阶分布函数特性,设定入口处分布函数 $f(0)$ 的取值范围为 $[0.1,1]$,出口处分布函数 $f(1)$ 的取值范围为 $[1.1,1.9]$ 。同样按照 0.1 的步长对两者取值,根据式(15)分别计算二阶分布函数系数 a 、 b 、 c ,再代入仿真模型,得到系数 a 、系数 c 、权重 w_s 及目标函数 J 的映射关系,如图 8 所示。

由图 8 可知,表 4 中情况 1 对应的催化剂载量分布类型的加权目标值最大,其函数图像如图 7 中情况 1 所示。

2.4 最优分布函数系数求解

结合上述一阶、二阶分布函数与燃料电池性能的映射关系,本文分别记录了使目标函数 J 最大的分布函数系数,如图 9 所示。从图 9 中可以看出,不同 w_s 对应的最优分布函数存在较大差异,当 $w_s = 0.5$ 、 0.6 、 0.9 时,一阶分布的优化效果略

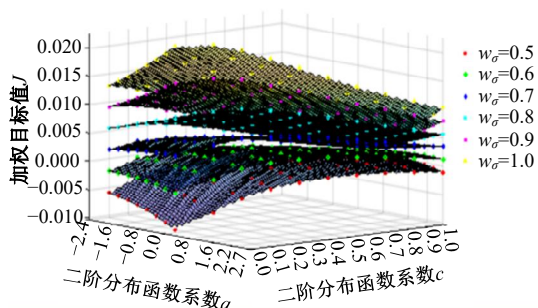


图 8 二阶分布函数系数对燃料电池性能的影响

Fig. 8 Effect of second-order distribution function coefficients on fuel cell performance

优于二阶分布,而当 $w_{\sigma}=0.7、0.8$ 时,二阶分布的优化效果明显优于一阶分布。随着 w_{σ} 的增大,即对电流密度均匀性的要求提高,两种非均匀的催化剂载量分布对目标函数 J 的提升效应更为显著。

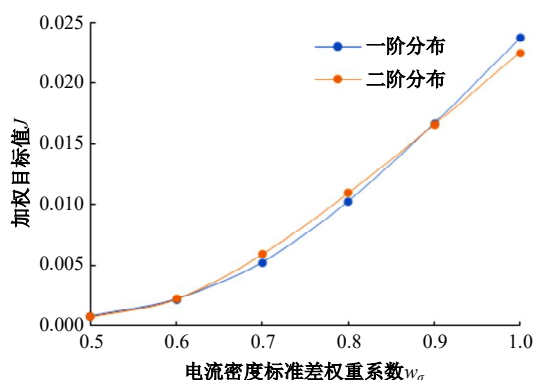


图 9 最优分布函数系数

Fig. 9 Optimal distribution function coefficients

上述最优分布函数对电流密度大小和均匀性的影响如表 5 所示,从表 5 中可以看出,当电流密度均匀性提升时,平均电流密度随之减小。由于燃料电池的极化性能和使用寿命均为其商业化运营的关键指标,因此在提高电流密度均匀性的同时,需避免平均电流密度过度下降。表 5 中,当催化剂载量分布函数为 $f(x)=0.5x+0.75$ 和 $f(x)=0.9x+0.55$ 时,电流密度均匀性分别提高 0.535% 和 1.063%,而平均电流密度的降低程度相比于电流密度均匀性提升稍小,分别为 -0.377% 和 -1.048%。因此,这两种非均匀催化剂载量分布相对于均匀分布,更能平衡电流密度均匀性与平均电流密度的关系,且在提高电流密度均匀性的同时,减少了平均电流密度的降低程度。

通过对催化剂载量分布函数 $f(\bar{x})$ 进行多项式展开,搭建基于 Matlab 和 Fluent 的联合仿真平

表 5 最优催化剂载量分布函数

Table 5 Optimal catalyst distribution function

最优分布函数	加权目标函数	电流密度均匀性提升/%	平均电流密度提升/%
$f(x)=0.5x+0.75$	0.000 79	0.535	-0.377
$f(x)=0.9x+0.55$	0.002 18	1.063	-1.048
$f(x)=0.9x^2+0.6x+0.4$	0.005 91	1.970	-2.627
$f(x)=0.6x^2+x+0.3$	0.010 94	2.147	-3.118
$f(x)=1.8x+0.1$	0.016 67	2.369	-4.643
$f(x)=1.9x+0.05$	0.023 71	2.371	-5.477

台优化多项式系数,本节获得了一阶和二阶催化剂载量分布函数的最优解,该结果有利于平衡燃料电池的电流密度大小和均匀性。

3 结束语

提出了一种可以平衡燃料电池电流密度大小和均匀性的催化剂分布形式。当催化层催化剂载量从入口向出口逐渐增加时,能够缓解因流场中反应物不断消耗引起的电流密度不均匀问题,有利于提高燃料电池的使用寿命。但是,这种催化剂分布形式会在一定程度上降低燃料电池的平均电流密度,使其最大输出功率下降。基于燃料电池平均电流密度和电流密度均匀性构建加权目标函数,用一阶、二阶泰勒展开式代替催化剂载量分布函数,并求解函数系数与加权目标值的映射关系。通过比较不同催化剂载量分布形式下目标函数的变化规律,完成对催化剂载量分布的优化。搭建了基于 Matlab 与 Fluent 的联合仿真平台,以 Fluent 作为求解器,对不同催化剂载量分布对应的燃料电池性能进行求解,将计算结果导入 Matlab 中处理,以优化催化剂载量分布函数系数。结果表明,所得最优催化剂载量分布函数 $f(x)=0.5x+0.75$ 和 $f(x)=0.9x+0.55$,有效提高了电流密度均匀性(分别为 0.535%、1.063%),同时避免了平均电流密度过度下降(分别为 -0.377%、-1.048%)。

参考文献:

- [1] 池训逞, 侯中军, 魏伟, 等. 基于模型的质子交换膜燃料电池系统阳极气体浓度估计技术综述[J]. 吉林大学学报:工学版, 2022, 52(9): 1957-1970.
- Chi Xun-cheng, Hou Zhong-jun, Wei wei, et al. A review of model-based anodic gas concentration estimation techniques for proton exchange membrane fuel

- cell systems[J]. Journal of Jilin University (Engineering and Technology Edition), 2022, 52(9): 1957-1970.
- [2] Zhang Y, Smirnova A, Verma A, et al. Design of a proton exchange membrane (PEM) fuel cell with variable catalyst loading[J]. Journal of Power Sources, 2015, 291: 46-57.
- [3] Yu H R, Roller M J, Mustain W E, et al. Influence of the ionomer/carbon ratio for low-Pt loading catalyst layer prepared by reactive spray deposition technology[J]. Journal of Power Sources, 2015, 283: 84-94.
- [4] Wang S Z, Li X H, Wan Z H, et al. Effect of hydrophobic additive on oxygen transport in catalyst layer of proton exchange membrane fuel cells[J]. Journal of Power Sources, 2018, 379: 338-343.
- [5] Wang H, Lin R, Cai X, et al. Transition metal dissolution control in Pt-alloy catalyst layers for low Pt-loaded PEMFCs for improving mass transfer[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 178: No. 121615.
- [6] Shahgaldi S, Ozden A, Li X G, 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.
- [7] Zheng Z F, Yang F, Lin C, et al. Design of gradient cathode catalyst layer (CCL) structure for mitigating Pt degradation in proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) using mathematical method[J]. Journal of Power Sources, 2020, 451: No. 227729.
- [8] Wang Y L, Xu H K, Wang X D, et al. Multi-sub-inlets at cathode flow-field plate for current density homogenization and enhancement of PEM fuel cells in low relative humidity[J]. Energy Conversion and Management, 2022, 252: No. 115069.
- [9] Babu V K, Geethu V, Varghese T J, et al. Optimization of graded catalyst layer to enhance uniformity of current density and performance of high temperature-polymer electrolyte membrane fuel cell[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(6): 4018-4032.
- [10] Fan R J, Chang G F, Xu Y M, et al. Multi-objective optimization of graded catalyst layer to improve performance and current density uniformity of a PEM-FC[J]. Energy, 2023, 262: No. 125580.
- [11] Ding R, Cheng Y L, Fan X C, et al. Many-objective optimization of graded cathode catalyst layer for PEMFC on performance, gas distribution quality, and cost via AI-based model[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2024, 58: 1514-1525.
- [12] Xing L, Wang Y, Prodip K D, et al. Homogenization of current density of PEM fuel cells by in-plane graded distributions of platinum loading and GDL porosity[J]. Chemical Engineering Science, 2018, 192: 699-713.
- [13] 柳奂宇. 质子交换膜燃料电池流场设计及水热管理[D]. 合肥: 合肥工业大学汽车与交通工程学院, 2021.
- Liu Huan-yu. Flow field design and hydrothermal management of proton exchange membrane fuel cells[D]. Hefei: College of Automotive and Transportation Engineering, Hefei University of Technology, 2021.
- [14] 黄立建. 面向全生命周期的燃料电池车能量动态管理策略研究[D]. 大连: 大连理工大学汽车工程学院, 2022.
- Huang Li-jian. Research on energy dynamic management strategies for fuel cell vehicles for the whole life cycle[D]. Dalian: College of Automotive Engineering, Dalian University of Technology, 2022.
- [15] Cherevko S, Keeley G P, Geiger S, et al. Dissolution of platinum in the operational range of fuel cells[J]. ChemElectroChem, 2015, 2(10): 1471-1478.
- [16] Yang Q W, Zhang N, Chen S J, et al. Non-uniform design of proton exchange membrane fuel cell and its matching with operations[J]. Journal of Cleaner Production, 2023, 428: No. 139382.
- [17] 王家军, 耿江涛, 邵志刚, 等. 氢燃料电池电堆寿命影响因素及机理分析[J]. 电源技术, 2023, 47(5): 551-557.
- Wang Jia-jun, Geng Jiang-tao, Shao Zhi-gang, et al. Influence factors and mechanisms of lifetime in hydrogen fuel cell stack[J]. Chinese Journal of Power Sources, 2023, 47(5): 551-557.