

基于正交实验和熵值法耦合人工神经网络的 PEMFC 多目标优化

王则善, 徐洪涛*, 李建军

上海理工大学能源与动力工程学院, 上海

收稿日期: 2025年4月18日; 录用日期: 2025年5月21日; 发布日期: 2025年5月29日

摘要

质子交换膜燃料电池(PEMFC)性能指标多样, 通过多目标优化可以提升PEMFC的综合性能。本文综合运用正交实验(OEM)、方差分析(ANOVA)以及熵值法(EWM)与人工神经网络(ANN), 提出了一种综合评价 PEMFC 性能的多目标优化方法。首先, 选择几个常用的 PEMFC 性能指标, 针对 PEMFC 的几何参数和操作参数初步选择对 PEMFC 性能有影响的参数设计正交实验, 随后使用 COMSOL 软件模拟计算获取对应工况下各个性能指标结果。通过方差分析筛选出对目标有显著影响的变量, 可以达到减小优化空间、提高优化效率的目的。其次, 根据显著变量再次进行正交实验, 获取优化空间中具有全局代表性的数据集, 随后提出了代表 PEMFC 综合性能(CP)的表达式, 通过熵值法分析了 CP 中多目标的权重, 进一步计算出 CP 的数学表达式并作为适应度函数。最后将 ANN 作为计算 CP 的代理模型, 对显著变量进行优化, 继而得到一种最优的参数组合使得对应的 CP 值达到最大, 从而最大限度地提升 PEMFC 的综合性能。利用该方法对梯形挡板流道模型进行了多目标优化分析, 在 0.4 V 电压下, 优化后流道模型相比较基础流道模型而言, 功率密度和净功率分别提升了 53.71% 和 53.70%, 然而阴极压降却仅仅只上升了 7.93 Pa, 氧气不均匀度降至 0.19。上述方法可有效降低优化计算时间, 对今后 PEMFC 的结构设计与操作运行具有一定的指导意义。

关键词

质子交换膜燃料电池, 梯形挡板流道, 正交实验, 熵值法, 方差分析, 多目标优化

Multi-Objective Optimization of PEMFC Based on Orthogonal Experiment, Entropy Method, and Artificial Neural Network

Zeshan Wang, Hongtao Xu*, Jianjun Li

School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

*通讯作者。

文章引用: 王则善, 徐洪涛, 李建军. 基于正交实验和熵值法耦合人工神经网络的 PEMFC 多目标优化[J]. 物理化学进展, 2025, 14(2): 370-386. DOI: 10.12677/japc.2025.142035

Abstract

Proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) has various performance indicators, and the comprehensive performance of PEMFC can be improved by multi-objective optimization. In this paper, a multi-objective optimization method for comprehensively evaluating the performance of PEMFC is proposed by comprehensively applying orthogonal experiment (OEM), analysis of variance (ANOVA), and entropy value method (EWM) with artificial neural network (ANN). Firstly, several commonly used PEMFC performance indexes are selected, and orthogonal experiments are designed for the parameters that have an impact on the PEMFC performance by initially selecting the geometrical and operational parameters of the PEMFC, and then simulations are performed using COMSOL software to obtain the results of the performance indexes under the corresponding working conditions. Through the analysis of variance to screen out the variables that have a significant impact on the target, it can achieve the purpose of reducing the optimization space and improving the optimization efficiency. Secondly, orthogonal experiments were conducted again according to the significant variables to obtain a globally representative data set in the optimization space. Subsequently, an expression representing the comprehensive performance (CP) of PEMFC was proposed, and the weights of multiple objectives in the CP were analyzed by entropy method, and the mathematical expression of the CP was further computed and used as the fitness function. Finally, the ANN is used as a proxy model for calculating the CP to optimize the significant variables, and then an optimal combination of parameters is obtained to maximize the corresponding CP value, thus maximizing the comprehensive performance of the PEMFC. A multi-objective optimization analysis of the trapezoidal baffle runner model is carried out using this method, and the power density and net power of the optimized runner model are increased by 53.71% and 53.70%, respectively, compared with the base runner model at 0.4 V, while the cathode pressure drop is increased by only 7.93 Pa, and the oxygen inhomogeneity is reduced to 0.19. The above method can effectively reduce the optimization computation time, which is very useful for the design of future PEMFC structures and the development of the PEMFC.

Keywords

PEMFC, Flow Channel with Trapezoidal Baffles, Orthogonal Experiment, Entropy Method, ANOVA, Multi-Objective Optimization

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

质子交换膜燃料电池(PEMFC)因其高效能和低排放特性而备受瞩目, 被视为未来能源转换的重要设备[1]-[3]。在汽车和电子领域, PEMFC 展现出广阔的应用前景, 为实现可持续发展提供了重要支持。然而, 同时也面临着催化剂成本昂贵、耐久性不足等挑战, 这些障碍限制了其在市场上的广泛应用[4]。因此, 迫切需要加强对质子交换膜燃料电池性能的研究与改进, 以推动其更广泛的应用和发展。

改善流道几何结构对提升 PEMFC 性能至关重要。例如在流道中添加挡板可以有效强化反应气体的传输效果, 提升 PEMFC 输出性能, 许多学者已在这一领域进行了大量研究。Yin 等[5]定量研究了梯形挡

板的前斜角和后斜角对 PEMFC 性能的影响。结果表明, 梯形挡板的前斜角和后斜角均为 45° 时, PEMFC 的性能最佳。Perng 等人[2]研究了不同几何参数(倾斜角和高度)的梯形挡板对 PEMFC 性能的影响。研究表明, 当高度为 1.125 mm、倾角为 60° 时, PEMFC 的净功率比不带挡板的 PEMFC 提高了约 90%。Wang 等人[6]研究了具有两种不同结构的 PEMFC, 发现交错梯形挡板(STBP)流道显著提高了 PEMFC 的最大净功率, 与传统的平行流道和平行梯形障板(PTBP)流道相比, 分别提高了 6.39%和 2.54%。

此外, 为了实现质子交换膜燃料电池商业化的目标, 还必须确保 PEMFC 在适当的操作条件下稳定运行。否则会降低燃料电池的输出性能, 加速燃料电池的退化, 从而大大缩短燃料电池的使用寿命[7]。针对这一挑战, 研究人员对这一领域进行了探索, 旨在提升质子交换膜燃料电池的性能表现。Yan [8]等实验研究了阴极入口气体流速、阴极入口加湿温度、电池温度等各种操作条件对采用传统流场和交错流场的 PEMFC 电流密度的影响。实验结果表明, 随着阴极入口气体流速、阴极加湿温度和电池温度的升高, 电池的性能会有所提高。Kim [9]等研究了相对湿度和反应物的化学计量比对 PEMFC 水饱和度的影响。结果表明, 较高的氢化学计量比降低了阴极处的水饱和度, 并增强了水从阴极到阳极的扩散, 从而提高了 PEMFC 的性能。然而, 上述研究都使用单一目标来优化 PEMFC 的性能, 这限制了其对不同场景的适应性。

与单目标优化相比, PEMFC 的多目标优化具有更强的实用性。由于在 PEMFC 中, 不同的性能指标经常相互冲突, 因此, 进行多目标优化是一项有意义且具有挑战性的工作。Liu 等人[10]以能效和输出功率为目标, 通过多目标遗传算法对 PEMFC 的运行条件和流道结构进行了优化。Kwan 等人[11]进行了一项基于 NSGA-II 的优化, 以优化 PEMFC 系统热电发电机设计的系统输出功率和效率。然而, 采用多目标优化算法需要不断地去计算和评估适应度函数的值, 往往比较耗时。因此, 本文提出一种综合评估 PEMFC 性能的多目标优化方法, 可快速、系统地实现电流密度、净功率、压降和氧气不均匀度等多指标的综合优化。基于该方法, 本文以具有梯形挡板的 PEMFC 流道模型为例进行实施, 在 0.4 V 电压下, 优化后流道模型相比较基础流道模型而言, 功率密度和净功率分别提升了 53.71%和 53.70%, 然而阴极压降却仅仅只上升了 7.93 Pa, 氧气不均匀度降至 0.19。上述方法可有效降低优化计算时间, 对今后 PEMFC 的结构设计与操作运行具有一定的指导意义。

2. 数值模拟

2.1. 多目标优化方法

多目标优化流程如图 1 所示。首先进行多目标选择, 选择几个常用的 PEMFC 性能指标。针对 PEMFC 的几何参数和操作参数初步选择对目标有影响的参数设计正交实验, 随后通过 COMSOL 模拟计算来获取对应工况下各个性能指标结果。通过对每个性能指标进行方差分析, 筛选出对各个性能指标有显著影响的变量, 可以达到减小优化空间、提高优化效率的目的。针对显著变量再次设计正交实验以获取优化空间中具有全局代表性的数据集, 并通过 COMSOL 模拟计算每组工况不同运行电压如(0.4~0.95 V, 间隔 0.05 取值)下的四个性能指标值。随后提出了代表 PEMFC 综合性能的表达式 CP, 根据所获得的数据集通过熵值法分析了 CP 中多目标的权重, 进一步计算出 CP 的数学表达式作为之后多目标优化的适应度函数并计算出每一组工况模拟对应的 CP 值以供后续 ANN 模型训练/测试使用, 其中每组工况参数及其对应的 CP 值构成一组数据集。紧接着, 在建立 ANN 模型之后, 按照一定比例将获得的所有数据集随机分为训练集和测试集, 采用训练集进行训练, 通过测试集评估预测性能。最后在确定 ANN 模型预测的准确性以后重新定义显著变量取值范围, 将 ANN 模型作为计算 CP 的代理模型获取预测取值范围内所有 CP 值, 继而从中筛选出得到一种最优的参数组合使得对应的 CP 值达到最大, 最大限度的提升了考虑多目标的

PEMFC 综合性能。

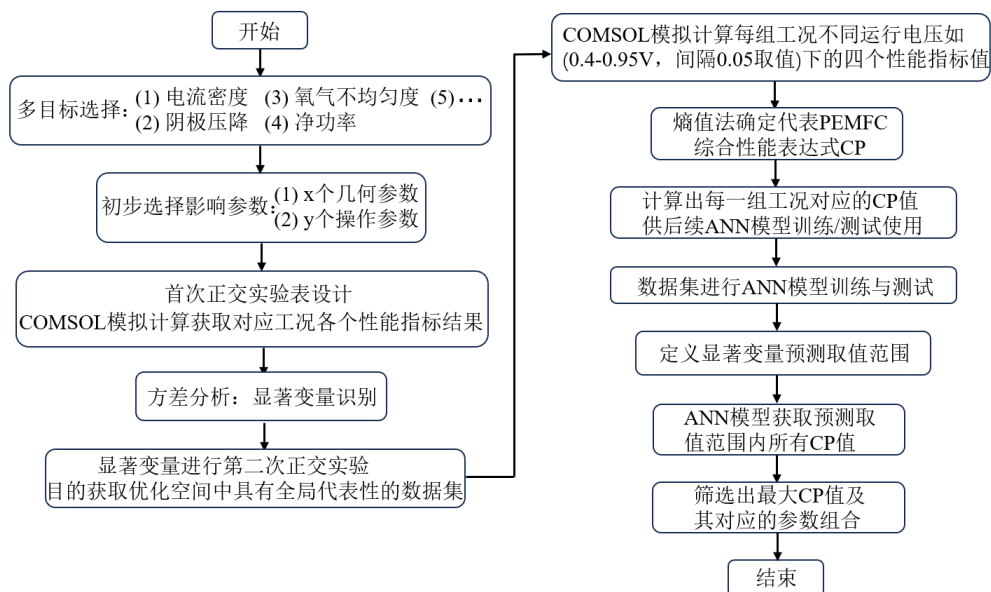


Figure 1. Multi-objective optimization flowchart
图 1. 多目标优化流程图

2.2. 几何模型

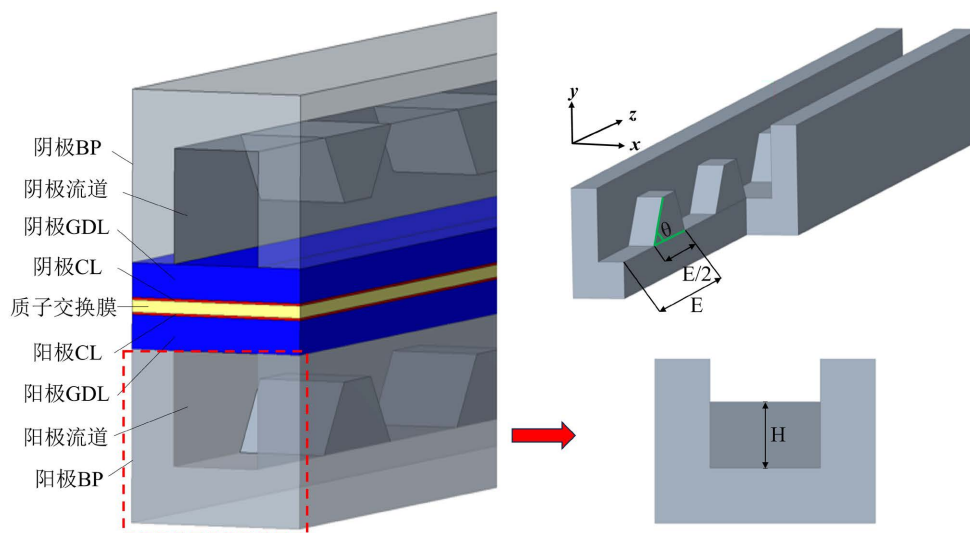


Figure 2. Schematic of PEMFC runner geometry with trapezoidal baffle structure
图 2. 带梯形挡板结构的 PEMFC 流道几何示意图

采用上述多目标优化方法，本文针对带梯形挡板的 PEMFC 流道进行多目标优化分析，其模型示意图见图 2，具体模型的几何和物理参数见表 1。该模型包括双极板(BP)、气体扩散层(GDL)、催化剂层(CL)和质子交换膜(PEM)。一个循环长度(E)包括一条与梯形挡板相连的线性路径。梯形挡板底边的长度等于一个循环长度(E/2)的一半。梯形挡板的两个侧壁角度相等。直线路径和梯形挡板构成一个完整的循环，延伸至整个流道。流道中梯形障板的高度(H)、侧壁角度(θ)和循环次数(N)被定义为可变几何参数。

Table 1. PEMFC model geometry and physical parameters
表 1. PEMFC 模型几何及物理参数

参数	数值
流道长度/mm	20
流道高度/mm	1
流道宽度/mm	1
肋板宽度/mm	1
扩散层厚度/mm	0.3
多孔电极厚度/mm	1.29×10^{-2}
质子交换膜厚度/mm	0.108
膜的电导率/(S·m ⁻¹)	9.825
多孔电极渗透率/m ²	2.36×10^{-12}
阴极参考交换电流密度/(A·m ⁻²)	0.001
阳极交换电流密度/(A·m ⁻²)	100
扩散层渗透率/m ²	1.18×10^{-11}
扩散层电导率/(S·m ⁻¹)	222

2.3. 数学模型

本研究开发的模型为三维、稳态、单相、非等温的 PEMFC 模型。为简化数值计算，采用如下假设 [12]:

- 1) 气体流动为层流且是不可压缩的理想气体。
- 2) 多孔介质均各向同性。
- 3) 反应气体不能穿透 PEM。
- 4) 忽略重力作用。

基于以上假设，控制方程可以表述如下 [13]:

质量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = S_m \quad (1)$$

式中: ρ 为流体密度, kg/m³; $\mathbf{u}$ 为速度矢量, m/s; S_m 为质量源项。

动量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\varepsilon \nabla P + \nabla \cdot (\varepsilon \mu_{eff} \nabla \mathbf{u}) + S_u \quad (2)$$

式中: ε 为孔隙率; P 为流体压力, Pa; μ_{eff} 为有效动力粘度, Pa·s; S_u 为动量源项。

能量守恒方程:

$$\rho C_p \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_e \quad (3)$$

式中: C_p 为气体定压比热容, J/kg·K; T 为温度, K; k_{eff} 为有效导热系数, W/m·K; S_e 为能量源项。

组分守恒方程:

$$\rho \mathbf{u} \cdot \nabla \omega_k = \nabla \cdot (\rho D_k^{eff} \nabla \omega_k) + S_k \quad (5)$$

式中: ω_k 为不同组分的质量分数; D_k^{eff} 为不同组分有效扩散系数; S_k 为组分源项。

电荷守恒方程:

$$\nabla \cdot (-\sigma_s \nabla \phi_s) = S_{sol} \quad (6)$$

$$\nabla \cdot (-\sigma_m \nabla \phi_m) = S_{mem} \quad (7)$$

式中: σ_s 、 σ_m 为分别为固相和膜的电导率, S/m; ϕ_s 、 ϕ_m 为固相和膜相电势, V; S_{sol} 、 S_{mem} 为电子和质子电流源项;

Butler-Volmer 方程:

$$i = i_0 \left(\frac{C_k}{C_{k,ref}} \right)^{\gamma_i} \left[\exp \left(\frac{\alpha_R F}{RT} \eta \right) - \exp \left(\frac{-\alpha_0 F}{RT} \eta \right) \right] \quad (8)$$

式中: i 为电流密度, A/m²; i_0 为交换电流密度, A/m²; α_R 、 α_0 为传递系数; γ 为浓度修正系数; C_k 、 $C_{k,ref}$ 为反应物浓度和参考反应物浓度; T 为工作温度, K; η 为活化过电势, V; F 为法拉第常数, 96,485 C/mol。

2.4. 边界条件

除阳极和阴极的入口和出口外, 所有边界均采用零流量边界条件。入口处的温度、压力和相对湿度可用于计算各组分的质量分数。阳极和阴极的入口速度由以下公式提供:

$$u_{in,a} = \xi_a \frac{i_0}{2F} A_m \frac{1}{\omega_{H_2}^{in}} \frac{RT_a^{in}}{p_a^{in}} \frac{1}{A_{ch}} \quad (9)$$

$$u_{in,c} = \xi_c \frac{i_0}{4F} A_m \frac{1}{\omega_{O_2}^{in}} \frac{RT_c^{in}}{p_c^{in}} \frac{1}{A_{ch}} \quad (10)$$

式中: ξ_a 、 ξ_c 分别为阳极和阴极的化学计量比; i_0 为参考工作电流密度, A/m²; A_m 、 A_{ch} 分别为活化区域面积和流道入口截面积, m²; ω 为不同组分气体的质量分数。

在阳极和阴极的出口边界, 边界条件设置为压力出口, 出口压力为 PEMFC 的工作压力。

2.5. 网格无关性验证与模型验证

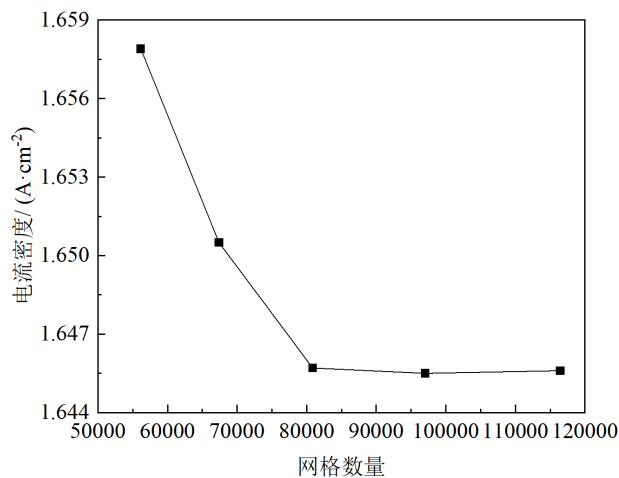


Figure 3. Grid-independent verification
图 3. 网格无关性验证

本文选择了 56,160、67,392、80,870、97,044 和 116,453 五种不同的网格数来对 PEMFC 模型进行网格独立性验证。如图 3 所示, 在 0.4 V 电压下, 网格数为 80,870 和 97,044 的模型之间的电流密度相对误差在 0.5% 以内。因此, 可以认为 80,870 的网格数模型具有足够的计算精度, 并在后续模拟计算中使用该网格数。

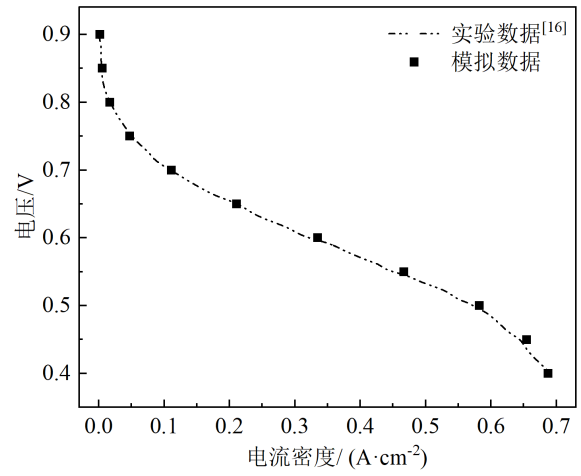


Figure 4. Comparison of simulation results with experimental data
图 4. 模拟结果与实验数据对比

极化曲线是评估 PEMFC 运行期间综合性能的关键标准。为了验证本文数值模型的准确性, 根据 Sezgin 等[14]模型的几何条件和工作条件, 对文献中的直流道进行对比验证, 结果如图 4 所示。从图中可以看出, 模拟数据与实验数据非常吻合, 从而证实了上述数学模型的可靠性。

3. 结果与讨论

3.1. 多目标的选择和首次正交实验设计

Table 2. Selected 10 variables and their respective level values
表 2. 所选 10 个变量及各自水平值

序号	参数	缩写	水平 1	水平 2	水平 3
1	挡板高度/mm	H	0.2	0.4	0.6
2	挡板角度/°	θ	30	45	60
3	挡板周期	N	2	4	6
4	扩散层孔隙率	ε	0.4	0.5	0.6
5	操作压力/atm	P	1	2	3
6	操作温度/K	T	333	343	353
7	阳极化学计量比	ζ_a	1.5	3.5	5.5
8	阴极化学计量比	ζ_c	2	4	6
9	阳极相对湿度/%	RH_a	80	90	100
10	阴极相对湿度/%	RH_c	80	90	100

选择四个常用的性能指标: 1. 电流密度 I ; 2. 阴极流道入口与出口之间的压降 ΔP ; 3. GDL/CL 界面

处氧气不均匀度 N ；净功率 J 。在传统的优化研究中，显著变量的选择往往基于经验，具有一定的主观性。为了在最少的显著变量下获得较好的优化结果，采用方差分析方法在优化前进行显著变量识别。选择对目标有显著影响的变量，达到减小优化空间、提高优化效率的目的。针对梯形挡板流道模型选择 10 个常用的 PEMFC 参数进行分析，所选 10 个变量及各自水平值见表 2。几何参数和操作参数都被考虑在内。几何参数为挡板高度、挡板侧壁角度、挡板周期数、扩散层孔隙率；操作参数为压力、温度、阴/阳极化学计量比、阴/阳极相对湿度。

为了进行方差分析，首先进行正交实验设计[15]。每个参数都有三个不同的水平数，如表 2 所示。需要强调的是，这 10 个参数的三个水平值的选择是基于 PEMFC 参数的一般范围和一些经验[16] [17]。因此，根据正交实验法，一个 $L_{27}(3^{10})$ 正交阵列被选择，方案见表 3。对于每行的工况组合，由于 PEMFC 通常在 0.4 V 电位左右达到最大功率密度，所以通过 COMSOL 模拟计算出 0.4 V 电位下对应的四个性能指标的值。因此一共需要进行 27 组模拟仿真，得出不同工况组合下对应的各个性能指标。计算结果如表 3 所示。

Table 3. Arrangement design of orthogonal table $L_{27}(3^{10})$ and its simulation results

表 3. 正交表 $L_{27}(3^{10})$ 的安排设计及其模拟结果

序号	H	θ	N	ε	P	T	ζ_a	ζ_c	RH_a	RH_c	电流密度 $I/(\text{W}\cdot\text{cm}^{-2})$	降压 P/Pa	氧气不均 匀度 N	净功率 J/W
1	0.2	30°	2	0.4	1	333	1.5	2	80	80	1.0727	2.2670	0.66	0.171631
2	0.2	30°	2	0.4	2	343	2.5	4	90	90	1.1449	5.0318	0.33	0.183181
3	0.2	30°	2	0.4	3	353	3.5	6	100	100	1.1596	8.0176	0.26	0.185529
4	0.2	45°	4	0.5	1	333	1.5	4	90	90	1.1466	4.9899	0.25	0.183453
5	0.2	45°	4	0.5	2	343	2.5	6	100	100	1.1636	7.9809	0.19	0.186169
6	0.2	45°	4	0.5	3	353	3.5	2	80	80	1.1056	2.4889	0.51	0.176895
7	0.2	60°	6	0.6	1	333	1.5	6	100	100	1.1603	7.9856	0.15	0.185641
8	0.2	60°	6	0.6	2	343	2.5	2	80	80	1.1078	2.4826	0.46	0.177247
9	0.2	60°	6	0.6	3	353	3.5	4	90	90	1.1570	5.4890	0.20	0.185117
10	0.4	30°	4	0.6	1	343	3.5	2	90	100	1.1105	3.5188	0.46	0.177679
11	0.4	30°	4	0.6	2	353	1.5	4	100	80	1.1552	7.8436	0.19	0.184827
12	0.4	30°	4	0.6	3	333	2.5	6	80	90	1.1713	11.6720	0.15	0.187398
13	0.4	45°	6	0.4	1	343	3.5	4	100	80	1.1328	8.5660	0.30	0.181243
14	0.4	45°	6	0.4	2	353	1.5	6	80	90	1.1458	14.3200	0.24	0.183315
15	0.4	45°	6	0.4	3	333	2.5	2	90	100	1.0627	3.7275	0.62	0.170031
16	0.4	60°	2	0.5	1	343	3.5	6	80	90	1.1784	14.9900	0.18	0.188531
17	0.4	60°	2	0.5	2	353	1.5	2	90	100	1.1114	4.5586	0.50	0.177823
18	0.4	60°	2	0.5	3	333	2.5	4	100	80	1.1617	9.2141	0.24	0.185867
19	0.6	30°	6	0.5	1	353	2.5	2	100	90	1.1303	6.1930	0.55	0.180846
20	0.6	30°	6	0.5	2	333	3.5	4	80	100	1.1883	14.1060	0.27	0.190120
21	0.6	30°	6	0.5	3	343	1.5	6	90	80	1.2027	25.5730	0.19	0.192410
22	0.6	45°	2	0.6	1	353	2.5	4	80	100	1.1719	23.7330	0.19	0.187490

续表

23	0.6	45°	2	0.6	2	333	3.5	6	90	80	1.1867	35.1280	0.15	0.189843
24	0.6	45°	2	0.6	3	343	1.5	2	100	90	1.1157	10.5000	0.45	0.178509
25	0.6	60°	4	0.4	1	353	2.5	6	90	80	1.1752	39.3790	0.24	0.187997
26	0.6	60°	4	0.4	2	333	3.5	2	100	90	1.0781	9.6117	0.64	0.172493
27	0.6	60°	4	0.4	3	343	1.5	4	80	100	1.1508	22.9710	0.31	0.184115

3.2. 显著变量识别

采用方差分析方法判断各变量对结果的显著性[18]。方差分析是一种统计方法,可用于检验变量对实验结果的显著性。在这项工作中,方差分析的计算过程是通过 MINITAB 软件实现的。根据表 3 的模拟结果,分别对 4 个性能指标进行方差分析,统计结果见表 4。

Table 4. ANOVA results for the four performance indicators
表 4. 四个性能指标的方差分析结果

		变量	离差平方和	自由度	均方	F 值	P 值	贡献率	排名
电流密度		挡板高度	0.002296	2	0.001148	23.38	0.001	6.65%	3
		挡板侧壁角度	0.000603	2	0.000301	6.14	0.035	1.75%	4
		挡板周期数	0.000123	2	0.000061	1.25	0.352	0.36%	
		扩散层孔隙率	0.004414	2	0.002207	44.96	0	12.78%	2
		操作压力	0.000004	2	0.000002	0.04	0.96	0.01%	
		操作温度	0.00049	2	0.000245	4.99	0.053	1.42%	
		阳极化学计量比	0.000079	2	0.00004	0.81	0.49	0.23%	
		阴极化学计量比	0.02606	2	0.01303	265.42	0	75.47%	1
		阳极相对湿度	0.000108	2	0.000054	1.1	0.393	0.31%	
		阴极相对湿度	0.00006	2	0.00003	0.61	0.574	0.17%	
		误差	0.000295	6	0.000049	/	/	0.85%	
		总和	0.03453	26	/	/	/	100.00%	
		变量	离差平方和	自由度	均方	F 值	P 值	贡献率	排名
压降		挡板高度	1206.18	2	603.09	515.17	0	48.66%	1
		挡板侧壁角度	149.1	2	74.552	63.68	0	6.01%	4
		挡板周期数	41.42	2	20.71	17.69	0.003	1.67%	
		扩散层孔隙率	34.46	2	17.229	14.72	0.005	1.39%	
		操作压力	9.51	2	4.755	4.06	0.077	0.38%	
		操作温度	10.9	2	5.449	4.65	0.06	0.44%	
		阳极化学计量比	4.73	2	2.365	2.02	0.213	0.19%	
		阴极化学计量比	796.76	2	398.381	340.31	0	32.14%	2
		阳极相对湿度	151.28	2	75.641	64.61	0	6.10%	3
		阴极相对湿度	67.47	2	33.733	28.82	0.001	2.72%	
		误差	7.02	6	1.171	/	/	0.28%	
		总和	2478.83	26	/	/	/	100.00%	

续表

	变量	离差平方和	自由度	均方	F 值	P 值	贡献率	排名
氧气不均匀度	挡板高度	0.001089	2	0.000544	1.41	0.314	0.16%	
	挡板侧壁角度	0.001689	2	0.000844	2.19	0.193	0.24%	4
	挡板周期数	0.000089	2	0.000044	0.12	0.893	0.01%	
	扩散层孔隙率	0.081067	2	0.040533	105.23	0	11.54%	2
	操作压力	0.000156	2	0.000078	0.2	0.822	0.02%	
	操作温度	0.004822	2	0.002411	6.26	0.034	0.69%	3
	阳极化学计量比	0.000067	2	0.000033	0.09	0.918	0.01%	
	阴极化学计量比	0.610956	2	0.305478	793.07	0	86.97%	1
	阳极相对湿度	0.000067	2	0.000033	0.09	0.918	0.01%	
	阴极相对湿度	0.000156	2	0.000078	0.2	0.822	0.02%	
	误差	0.002311	6	0.000385	/	/	0.33%	
	总和	0.702467	26	/	/	/	100.00%	
	变量	离差平方和	自由度	均方	F 值	P 值	贡献率	排名
净功率	挡板高度	0.000058	2	0.000029	23.26	0.001	6.58%	3
	挡板侧壁角度	0.000015	2	0.000008	6.16	0.035	1.70%	4
	挡板周期数	0.000003	2	0.000002	1.25	0.352	0.34%	
	扩散层孔隙率	0.000113	2	0.000057	45.05	0	12.81%	2
	操作压力	0	2	0	0.04	0.959	0.00%	
	操作温度	0.000013	2	0.000006	4.99	0.053	1.47%	
	阳极化学计量比	0.000002	2	0.000001	0.8	0.49	0.23%	
	阴极化学计量比	0.000666	2	0.000333	265.16	0	75.51%	1
	阳极相对湿度	0.000003	2	0.000001	1.08	0.397	0.34%	
	阴极相对湿度	0.000002	2	0.000001	0.6	0.579	0.23%	
	误差	0.000008	6	0.000001	/	/	0.91%	
	总和	0.000882	26	/	/	/	100.00%	

在表 4 中，离差平方和是一组数据中每个数据点与该组数据的均值之差的平方的总和，均方是离差平方和除以自由度的结果，F 的高值和 P 的低值表示变量更显著。在电流密度方差分析中，按照各个参数对电流密度的贡献度进行排名，排名前四的分别是阴极化学计量比、扩散层孔隙率、挡板高度、挡板侧壁角度，四者对电流密度的总贡献率为 96.65%；同理，在压降方差分析中，排名前四的分别是挡板高度、阴极化学计量比、阳极相对湿度、挡板侧壁角度，四者对压降的总贡献率为 92.91%；在氧气不均匀度方差分析中，排名前四的分别是阴极化学计量比、扩散层孔隙率、操作温度、挡板侧壁角度，四者对氧气不均匀度的总贡献率为 99.44%；在净功率方差分析中，排名前四的分别是阴极化学计量比、扩散层孔隙率、挡板高度、挡板侧壁角度，四者对净功率的总贡献率为 96.60%；因此，选择阴极化学计量比、挡板高度、挡板侧壁角度、扩散层孔隙率、操作温度、阳极相对湿度作为后续工作的显著变量。这些变量的贡献如图 5 所示。对于其他对性能指标没有相对显著影响的变量，其值固定在一定的常数，以降低

后续优化模型的复杂度。即操作压力 2 atm，阳极化学计量比 3.5，挡板周期数 4，阴极相对湿度 100%。通过本小节，优化空间中的变量数量从 10 个减少到 6 个。

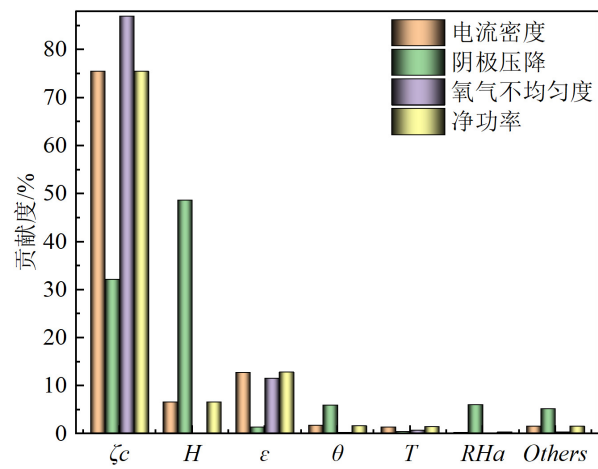


Figure 5. Contribution of decision variables to the four performance indicators

图 5. 决策变量对四个性能指标的贡献度

3.3. 二次正交实验设计和数据获取

第二次正交试验旨在获取优化空间中具有全局代表性的点，以供后续 ANN 模型的训练和测试。为了增加数据的多样性和代表性，对六个显著变量各自选取了 5 个水平值进行正交实验设计。具体的水平值和正交表见表 5 和表 6。每种工况组合下，本文计算了 12 个不同运行电压(0.4~0.95 V，间隔 0.05 取值)下的四个性能指标值，共得到 $25 \times 12 = 300$ 组数据。

Table 5. Six variables and their levels in the second orthogonal experiment

表 5. 第二次正交实验的六个变量及其水平

	变量	水平 1	水平 2	水平 3	水平 4	水平 5
1	ϵ	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
2	ζ_c	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5
3	θ	30°	45°	60°	75°	90°
4	H/mm	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
5	RH_a	80	85	90	95	100
6	T/K	333	338	343	348	353

Table 6. $L_{25}(5^6)$ orthogonal table with six variables and five levels

表 6. 具有六个变量及五个水平的 $L_{25}(5^6)$ 正交表

序号	ϵ	θ	ζ_c	H	RH_a	T
1	0.2	30°	1.5	0.2	80	333
2	0.2	45°	2.5	0.3	85	338
3	0.2	60°	3.5	0.4	90	343
4	0.2	75°	4.5	0.5	95	348

续表

5	0.2	90°	5.5	0.6	100	353
6	0.3	30°	2.5	0.4	95	353
7	0.3	45°	3.5	0.5	100	333
8	0.3	60°	4.5	0.6	80	338
9	0.3	75°	5.5	0.2	85	343
10	0.3	90°	1.5	0.3	90	348
11	0.4	30°	3.5	0.6	85	348
12	0.4	45°	4.5	0.2	90	353
13	0.4	60°	5.5	0.3	95	333
14	0.4	75°	1.5	0.4	100	338
15	0.4	90°	2.5	0.5	80	343
16	0.5	30°	4.5	0.3	100	343
17	0.5	45°	5.5	0.4	80	348
18	0.5	60°	1.5	0.5	85	353
19	0.5	75°	2.5	0.6	90	333
20	0.5	90°	3.5	0.2	95	338
21	0.6	30°	5.5	0.5	90	338
22	0.6	45°	1.5	0.6	95	343
23	0.6	60°	2.5	0.2	100	348
24	0.6	75°	3.5	0.3	80	353
25	0.6	90°	4.5	0.4	85	333

3.4. 熵值法获取 PEMFC 综合性能表达式 CP

熵值法是一种定量权重分配法，它根据各指标数值变化对整体的影响，计算指标的熵值，进而确定权重[19]。具体计算步骤如下：

步骤 1：使用最大(最小)归一化法对正交实验所得数据进行标准化处理。

$$x'_{ij} = \frac{x_{ij} - (x_{ij})_{\min}^j}{(x_{ij})_{\max}^j - (x_{ij})_{\min}^j} \quad (\text{正向目标}) \tag{11}$$

$$x'_{ij} = \frac{(x_{ij})_{\max}^j - x_{ij}}{(x_{ij})_{\max}^j - (x_{ij})_{\min}^j} \quad (\text{负向目标}) \tag{12}$$

步骤 2：确定每个指标的熵值 E_j 。

$$E_j = -K \cdot \sum_{i=1}^n p_{ij} \ln(p_{ij}) \tag{13}$$

$$p_{ij} = \frac{x'_{ij}}{\sum_{i=1}^n x'_{ij}} \tag{14}$$

$$K = \frac{1}{\ln(n)} \quad (15)$$

步骤 3: 计算每个指标的权重 W_j 。

$$W_j = \frac{1 - E_j}{\sum_{j=1}^m (1 - E_j)} \quad (16)$$

步骤 4: 计算每个样本的综合得分 Z_j

$$Z_i = \sum_{j=1}^m W_j x'_{ij} \quad (17)$$

式中: x_{ij} - 第 i 个样本的第 j 个指标值, $i=1,2,3,\dots,n$; $j=1,2,3,\dots,m$; E_j - 每个指标的熵值; W_j - 每个指标的权重; Z_j - 每个样本的综合得分; n - 样本数; 如果 $p_{ij}=0$, 则定义 $\lim_{p_{ij} \rightarrow 0} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n p_{ij} \ln(p_{ij}) = 0$ 。

根据 EWM 方法以及 COMSOL 模拟计算所获取到的 300 组模拟数据, 计算出了电流密度、压降、氧气不均匀度和净功率四个性能指标对应的权重, 如图 6 所示。因此, 综合性能表达式 CP 的数学表达式为 $CP = 0.5155I + 0.3655J + 0.0751P + 0.0439N$ 。

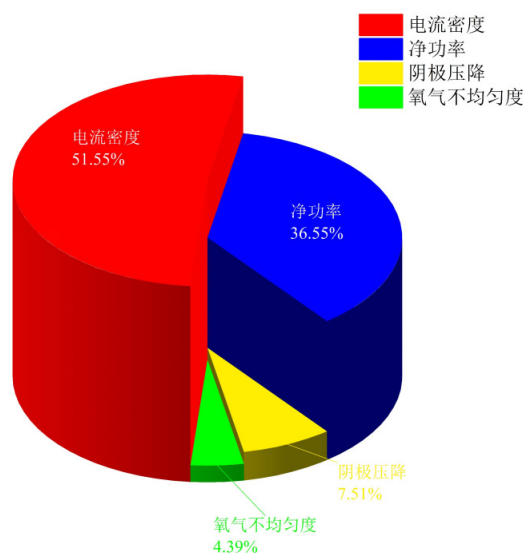


Figure 6. Contribution of significant variables to the four performance indicators

图 6. 显著变量对四个性能指标的贡献度

3.5. ANN 模型训练与测试

人工神经网络(ANN)模型可以根据得到的输入和输出信息对非线性函数进行处理, 并很好地映射输入数据和输出数据。ANN 的优点是利用经验数据具有良好的泛化能力, 计算速度非常快。因此, 本研究使用 ANN 来解决回归问题。ANN 包含三部分: 输入层、隐藏层和输出层。通过隐藏层神经元的多种组合, 得到从输入到输出的映射关系:

$$y_j = f_{\text{act}} \left(\sum_{i=1}^n x_i \omega_{ij} - \theta_j \right) \quad (18)$$

其中 x_i 表示输入变量; y_j 表示输出变量; ω_{ij} 为输入层与隐藏层间的连接权值; θ_j 表示阈值; f_{act} 表示非线

性函数的激活函数。图 7 显示了 ANN 的原理图。

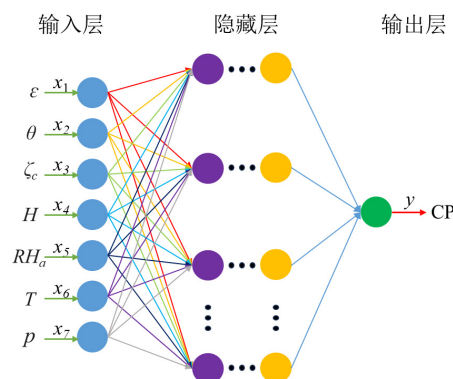


Figure 7. ANN model structure diagram
图 7. ANN 模型结构图

该模型的七个输入参数是 ε 、 θ 、 ζ_c 、 H 、 RH_α 、 T 和 p ，输出参数是综合性能指标 CP。采用试错法选择隐藏层数，模型中的隐藏层数为 2，每个隐藏层的节点数分别为 20 和 10。ANN 模型使用 ReLU 作为激活函数，ANN 模型由 Python 中的 scikit-learn 库实现。在建立 ANN 模型后，按照 5:1 的比例把 300 组数据随机分为训练集和测试集，其中训练集包含 250 组数据，测试集包含 50 组数据。采用训练集进行训练，通过测试集评估预测性能。

决定系数(R^2)用于测量 ANN 模型的预测精度，其表示为：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y - y_{\text{pre}})^2}{\sum_{i=1}^n (y - y_{\text{ave}})^2} \quad (19)$$

其中 n 表示样本数量， y ， y_{pre} 表示第 i 个样本的真实值和预测值， y_{ave} 表示所有样本真实值的平均值。 R^2 的值越接近 1 表示预测能力越准确。如图 8 所示，模型经过训练后，得到了很高的拟合度，在训练过程中， R^2 达到了 0.99833，在测试过程中， R^2 达到了 0.99741，由此表明 ANN 模型的拟合结果良好。

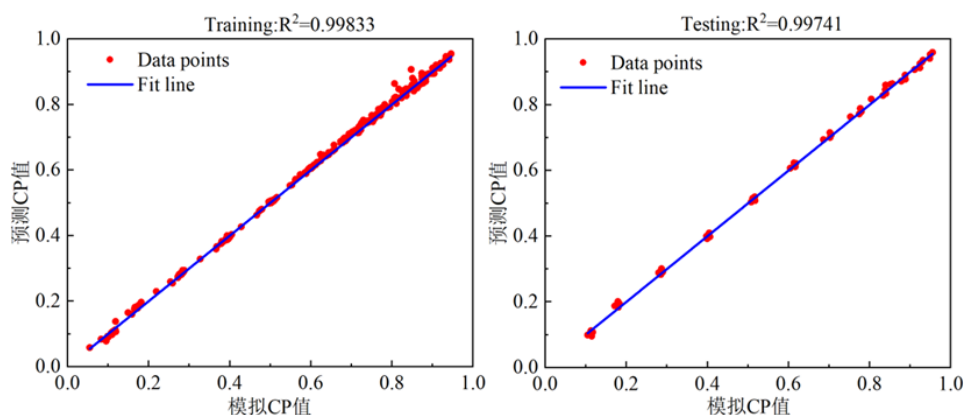


Figure 8. Correlation between ANN model predictions and actual values
图 8. ANN 模型预测值与实际值之间的相关性

3.6. 多目标优化结果

根据训练好的 ANN 模型，对扩散层孔隙率(0.2, 0.25, ..., 0.55, 0.6)，挡板侧壁角度

($30^\circ, 31^\circ, \dots, 89^\circ, 90^\circ$), 阴极化学计量比(1.5, 2.0, $\dots$, 5.0, 5.5), 挡板高度(0.2 mm, 0.25 mm, $\dots$, 0.55 mm, 0.6 mm), 阳极相对湿度(80%, 81%, $\dots$, 99%, 100%), 操作温度(333 K, 332 K, $\dots$, 352 K, 353 K)共 $9 \times 61 \times 9 \times 9 \times 21 \times 21 = 19,610,829$ 组数据进行预测, 为了能获得最优的 PEMFC 性能, 本文对预测 CP 值进行最优选择。最终, 当扩散层孔隙率、挡板侧壁角度、阴极化学计量比、挡板高度、阳极相对湿度、操作温度、运行电压分别为 0.57、 51° 、5.0、0.39 mm、99%、333 K、0.4 V 时, CP 达到最大值 0.9622, PEMFC 达到最优性能。图 8 显示了优化流道模型与基础流道模型(0.2、 30° 、1.5、0.2 mm、80%、333 K)的性能比较。如图 9(a)和图 9(b)所示, 在 0.4 V 电压下, 优化后流道模型相比较基础流道而言, 功率密度和净功率分别提升了 53.71%和 53.70%, 然而阴极压降却仅仅只上升了 7.93 Pa。并且从图 9(c)中可看出, 优化后流道模型在阴极 GDL/CL 界面处的氧气不均匀度明显小于基础流道模型, 经计算, 基础流道模型的氧气不均匀度 1.59, 优化后流道模型的氧气不均匀度降至 0.19, 氧气分布的更加均匀, 使得氧气更容易扩散至催化层表面参与反应, 进而提升了 PEMFC 性能。

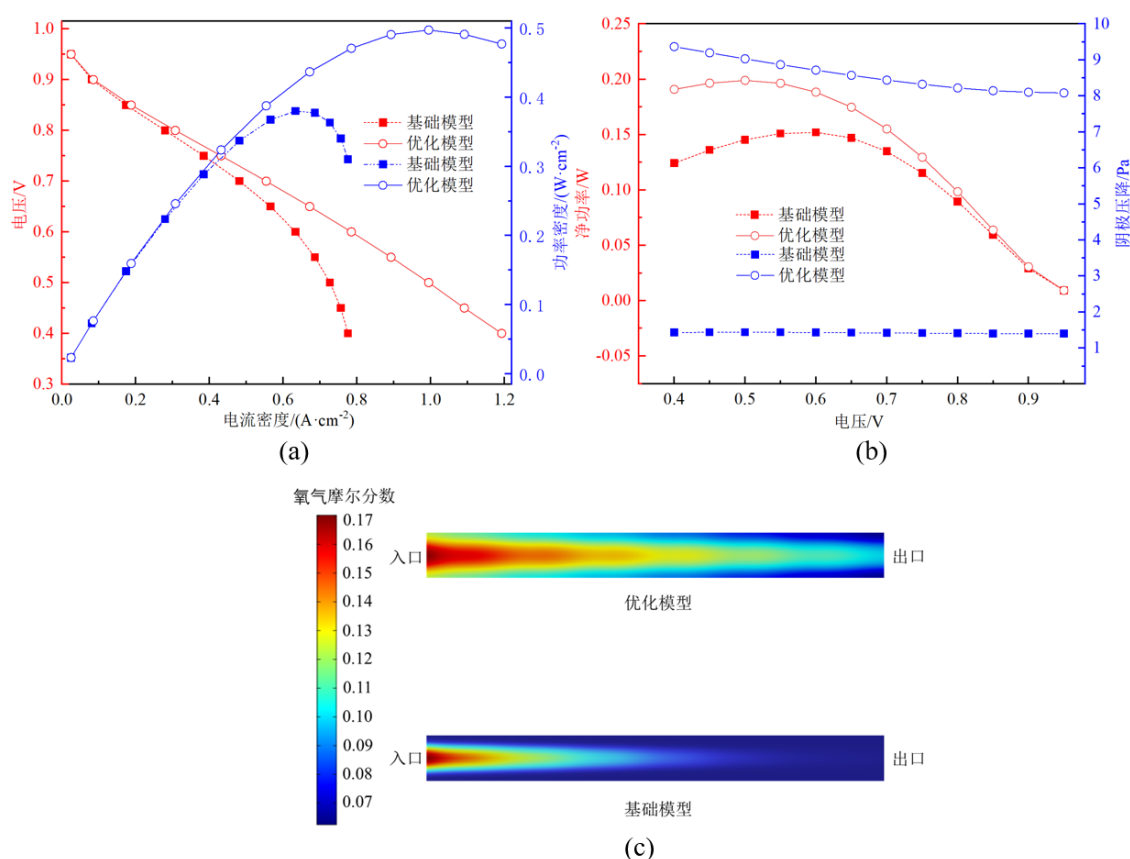


Figure 9. Comparison of the performance of the optimized model with the base model: (a) Polarization curves; (b) Net power and cathode pressure drop; (c) Oxygen mole fraction

图 9. 优化模型与基础模型的性能比较: (a) 极化曲线; (b) 净功率和阴极压降; (c) 氧气摩尔分数

此外, 在 Intel(R) Xeon(R) Gold 6240 CPU @ 2.60GHz 计算机上通过 Python 运行此 ANN 模型的总时间为 15 分钟 46 秒。相比之下, 通过 CFD 仿真获得一组结果大约需要 25 分钟。如果像以前的文献一样优化算法计算目标函数, 而不是使用代理模型, 则该算法可能需要近 14 天的时间才能迭代 800 代。因此, 所提出的综合性能表达式 CP 与训练好的 ANN 模型相结合, 可以显著减少优化时间, 同时确保不影响优化的准确性。

4. 结论

本文提出一种快速、系统的多目标优化方法,利用该方法对具有梯形挡板的 PEMFC 流道模型进行了多目标优化分析,全面考虑了其几何参数和操作参数,同时优化 4 个 PEMFC 性能指标电流密度、净功率、压降和氧气不均匀度,最大限度地提升了考虑多目标的 PEMFC 的综合性能。得出以下结论:

1) 通过将 ANN 模型与正交实验、方差分析法和熵值法结合的多目标优化方法仅用 15 分钟 46 秒便得出了优化结果,与传统的优化算法相比,可以显著缩短优化时间。

2) 针对 PEMFC 的几何参数和操作参数通过正交实验和方差分析,确定扩散层孔隙率、阴极化学计量比、挡板侧壁角度、挡板高度、阳极相对湿度和操作温度这 6 个参数对 PEMFC 性能的影响显著。因此将它们作为后续优化的决策变量,将优化空间的维度从 10 降至 6。

3) 由熵值法确定 PEMFC 综合性能表达式 $CP = 0.5155I + 0.3655J + 0.0751P + 0.0439N$, 根据所获得的数据训练并验证 ANN 模型,训练和验证的 R^2 分别高达 0.99833 和 0.99741,由此看出 ANN 模型体现了较好的预测精度。

4) 用验证过的 ANN 模型在给定输入参数范围条件下对综合性能表达式 CP 进行预测,并对预测 CP 值进行最优选择,当扩散层孔隙率、挡板侧壁角度、阴极化学计量比、挡板高度、阳极相对湿度、操作温度、运行电压分别为 0.57、51°、5.0、0.39 mm、99%、333 K、0.4 V 时,CP 值达到最大值 0.9622, PEMFC 达到最佳性能。

5) 通过将优化后流道模型与基础模型的性能对比可以得出:在 0.4 V 电压下,优化后流道模型的功率密度相比较基础流道而言,功率密度和净功率分别提升了 53.71%和 53.70%,然而阴极压降却仅仅只上升了 7.93 Pa,氧气不均匀度降至 0.19。

参考文献

- [1] Perng, S. and Wu, H. (2011) Non-Isothermal Transport Phenomenon and Cell Performance of a Cathodic PEM Fuel Cell with a Baffle Plate in a Tapered Channel. *Applied Energy*, **88**, 52-67. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2010.07.006>
- [2] Perng, S. and Wu, H. (2015) A Three-Dimensional Numerical Investigation of Trapezoid Baffles Effect on Non-Isothermal Reactant Transport and Cell Net Power in a PEMFC. *Applied Energy*, **143**, 81-95. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2014.12.059>
- [3] 孙峰, 苏丹丹, 殷宇捷, 等. PEMFC 翅脉流道传质及输出性能分析[J]. 太阳能学报, 2022, 43(6): 414-419.
- [4] Cai, G., Liang, Y., Liu, Z. and Liu, W. (2020) Design and Optimization of Bio-Inspired Wave-Like Channel for a PEM Fuel Cell Applying Genetic Algorithm. *Energy*, **192**, Article 116670. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116670>
- [5] Yin, Y., Wu, S., Qin, Y., Otoo, O.N. and Zhang, J. (2020) Quantitative Analysis of Trapezoid Baffle Block Sloping Angles on Oxygen Transport and Performance of Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Applied Energy*, **271**, Article 115257. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2020.115257>
- [6] Wang, X., Qin, Y., Wu, S., Shangguan, X., Zhang, J. and Yin, Y. (2020) Numerical and Experimental Investigation of Baffle Plate Arrangement on Proton Exchange Membrane Fuel Cell Performance. *Journal of Power Sources*, **457**, Article 228034. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2020.228034>
- [7] Zhang, S., Mao, Y., Liu, F., Xu, H., Qu, Z. and Liao, X. (2023) Multi-Objective Optimization and Evaluation of PEMFC Performance Based on Orthogonal Experiment and Entropy Weight Method. *Energy Conversion and Management*, **291**, Article 117310. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2023.117310>
- [8] Yan, W., Chen, C., Mei, S., Soong, C. and Chen, F. (2006) Effects of Operating Conditions on Cell Performance of PEM Fuel Cells with Conventional or Interdigitated Flow Field. *Journal of Power Sources*, **162**, 1157-1164. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.07.044>
- [9] Kim, Y.B. (2011) Study on the Effect of Humidity and Stoichiometry on the Water Saturation of PEM Fuel Cells. *International Journal of Energy Research*, **36**, 509-522. <https://doi.org/10.1002/er.1845>
- [10] Liu, Z., Zeng, X., Ge, Y., Shen, J. and Liu, W. (2017) Multi-Objective Optimization of Operating Conditions and Channel Structure for a Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **111**, 289-298. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.03.120>

-
- [11] Kwan, T.H., Wu, X. and Yao, Q. (2018) Multi-Objective Genetic Optimization of the Thermoelectric System for Thermal Management of Proton Exchange Membrane Fuel Cells. *Applied Energy*, **217**, 314-327. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2018.02.097>
- [12] Zhang, G., Fan, L., Sun, J. and Jiao, K. (2017) A 3D Model of PEMFC Considering Detailed Multiphase Flow and Anisotropic Transport Properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **115**, 714-724. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.102>
- [13] Zhou, Y., Chen, B., Chen, W., Deng, Q., Shen, J. and Tu, Z. (2022) A Novel Opposite Sinusoidal Wave Flow Channel for Performance Enhancement of Proton Exchange Membrane Fuel Cell. *Energy*, **261**, Article 125383. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.125383>
- [14] Sezgin, B., Caglayan, D.G., Devrim, Y., Steenberg, T. and Eroglu, I. (2016) Modeling and Sensitivity Analysis of High Temperature PEM Fuel Cells by Using Comsol Multiphysics. *International Journal of Hydrogen Energy*, **41**, 10001-10009. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.03.142>
- [15] Lin, R., Diao, X., Ma, T., Tang, S., Chen, L. and Liu, D. (2019) Optimized Microporous Layer for Improving Polymer Exchange Membrane Fuel Cell Performance Using Orthogonal Test Design. *Applied Energy*, **254**, Article 113714. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.113714>
- [16] Öztürk, A., Fıçıcılar, B., Eroğlu, İ. and Bayrakçeken Yurtcan, A. (2017) Facilitation of Water Management in Low Pt Loaded PEM Fuel Cell by Creating Hydrophobic Microporous Layer with PTFE, FEP and PDMS Polymers: Effect of Polymer and Carbon Amounts. *International Journal of Hydrogen Energy*, **42**, 21226-21249. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.06.202>
- [17] Antonacci, P., Chevalier, S., Lee, J., Ge, N., Hinebaugh, J., Yip, R., *et al.* (2016) Balancing Mass Transport Resistance and Membrane Resistance When Tailoring Microporous Layer Thickness for Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells Operating at High Current Densities. *Electrochimica Acta*, **188**, 888-897. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2015.11.115>
- [18] Zhou, M., Wei, P. and Deng, L. (2022) Research on the Factorial Effect of Science and Technology Innovation (STI) Policy Mix Using Multifactor Analysis of Variance (ANOVA). *Journal of Innovation & Knowledge*, **7**, Article 100249. <https://doi.org/10.1016/j.jik.2022.100249>
- [19] Li, Q., Hu, H., Ma, L., Wang, Z., Arıcı, M., Li, D., *et al.* (2022) Evaluation of Energy-Saving Retrofits for Sunspace of Rural Residential Buildings Based on Orthogonal Experiment and Entropy Weight Method. *Energy for Sustainable Development*, **70**, 569-580. <https://doi.org/10.1016/j.esd.2022.09.007>