

基于动态神经网络的质子交换膜燃料电池建模方法

曹政才^{1,2}, 李 博³, 刘 民⁴, 张 杰¹

(1.北京化工大学信息科学与技术学院,北京 100029;2.东南大学复杂工程系统测量与控制教育部重点实验室,江苏南京 210096;
3.中国科学院理化技术研究所,北京 100190;4.清华大学自动化系,北京 100084)

摘 要: 针对现有质子交换膜燃料电池(Proton Exchange Membrane Fuel Cell, PEMFC)模型逼近能力不足、自适应性差的问题,提出一种基于动态神经网络的 PEMFC 建模方法.该方法引入神经网络输出敏感度作为隐含层结构合理性判别依据,根据敏感度分析结果选择采用相应的神经元修改算法调整隐含层结构,使隐含层神经元数目根据燃料电池数据处理需求动态变化,实现模型结构与参数的双重优化.以某型双系统燃料电池测试平台实际运行数据为例进行验证,结果表明构建的 PEMFC 动态神经网络模型比传统模型的网络规模小、拟合精度高、收敛速度快,适用于工程化仿真应用.

关键词: 质子交换膜燃料电池;建模;动态神经网络;敏感度分析

中图分类号: TP183 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2014)01-0102-05

电子学报 URL: <http://www.ejournal.org.cn> **DOI:** 10.3969/j.issn.0372-2112.2014.01.016

Approach to Proton Exchange Membrane Fuel Cell Modeling Based on Dynamic Neural Networks

CAO Zheng-cai^{1,2}, LI Bo³, LIU Min⁴, ZHANG Jie¹

(1. College of Information Science and Technology, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China; 2. Key Laboratory of Measurement and Control of Complex Systems of Engineering, Ministry of Education, Southeast University, Nanjing, Jiangsu 210096, China; 3. Technical Institute of Physics and Chemistry of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; 4. Department of Automation, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: An innovative approach of proton exchange membrane fuel cell (PEMFC) modeling based on dynamic neural networks is proposed to improve approximating and self-adaptive ability of the existing PEMFC models. To evaluate the rationality of networks structure, sensitivity analysis (SA) of the model output was introduced. The hidden nodes were pruned or inserted according to the result of SA to optimize the networks structure and parameters, so that the networks could adapt the PEMFC data processing automatically. The approach was validated using operation data from a commercial dual-system fuel cell test platform. The result shows the proposed PEMFC model with more compact structure, higher accuracy and faster convergence rate compared with the common models, have the capability to be applied to engineering simulation applications.

Key words: proton exchange membrane fuel cell (PEMFC); modeling; dynamic neural network; sensitivity analysis

1 引言

PEMFC 具有能量密度高、结构简单安全、启动速度快、工作温度低等优势,很适于作为便携式电子产品及家用设备的能源^[1],是新能源领域的研究热点之一.为实现 PEMFC 控制与优化,国内外学者对其模型进行广泛研究,目前按建模方法大致分为三类:①利用经验公式构建的经验模型^[2-4],此类模型不考虑电池内部结构

参数,只根据伏安特性曲线拟合得到相应方程来为电池系统的模拟和优化提供依据,不足之处在于参数值仅针对电池某一特定工作范围,模型自适应性差;②以三大守恒定律(质量守恒、动量守恒、能量守恒)及四大维相方程(Stefan-Maxwell 方程、Butler-Volmer 方程、Nernst-Planck 方程、Schlögl 方程)为主构建的机理模型^[5-8],其特点是能够较全面地刻画电池流道、电极、膜层的复杂反应现象,但模型中含有多变量偏微分方程组及难以测

收稿日期:2012-05-14;修回日期:2012-12-26;责任编辑:郭游

基金项目:国际科技合作与交流专项(No. 2011DFG13000);国家 973 重点基础研究发展计划(No. 2009CB320602);国家自然科学基金(No. 61025018);系统控制与信息处理教育部重点实验室开放基金(No. SCIP2011005)和复杂系统管理与控制国家重点实验室要开放课题(No. 20120104)

量的参数,不利于实际工程应用与后期电池控制方法研究;③利用神经网络建模技术构建的神经网络模型^[9-11]能够精确描述燃料电池各变量间的复杂关系,同时易于实施控制算法,但网络结构在训练过程中固定不变,数据处理能力受到限制,未能实现神经网络模型优化。

上述模型已在燃料电池理论研究与应用方面取得一定成果,但模型结构较为复杂,优化不够充分,或自适应能力较差。鉴于如上问题,本文采用一种动态神经网络建模方法构建 PEMFC 模型,以氢气及氧气进气压力、电池温度、电流密度为模型输入,以单电池输出电压为模型输出,通过敏感度分析确定隐含层神经元对网络输出的影响,以此对敏感度不合理的隐含层神经元进行删除或分裂,实现神经网络模型的动态优化。基于实际双系统燃料电池测试平台运行数据进行实验,证明该建模方法的有效性。

2 PEMFC 概述

PEMFC 是一种以全氟磺酸型固体高分子聚合物为电解质、铂碳为催化剂、氢气为燃料、氧气(或空气)为氧化剂的低温燃料电池,其研发始于上世纪 60 年代,作为目前发展最迅速的一种燃料电池,已在便携式电源、新能源汽车中得到成功应用。

2.1 结构及原理

典型 PEMFC 单电池结构如图 1 所示,主要由集电器、双极板、扩散层、催化层、质子交换膜(电解质膜)构成。单电池输出电压较低,实际使用中通常将多节单电池串联组成燃料电池堆,获得合适的输出电压及功率。

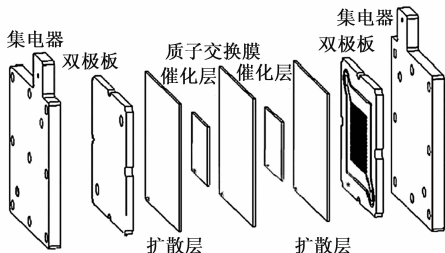
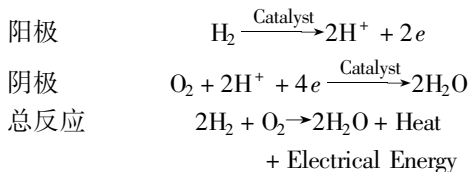


图1 PEMFC单电池结构^[12]

PEMFC 中进行的反应本质上是水电解的“逆”反应,即氢气与氧气发生氧化还原反应生成水,同时将反应放出的化学能转化成电能与热能,具体为:



上述两极反应由质子交换膜隔开,后者是一种具有选择透过性的阳离子交换膜,只允许质子(H^+)通

过^[13]。因此,阳极生成的质子透过质子交换膜迁移到阴极,而电子则受扩散至阴极的质子吸引经由外电路到达阴极,形成电流。PEMFC 反应原理如图 2 所示。

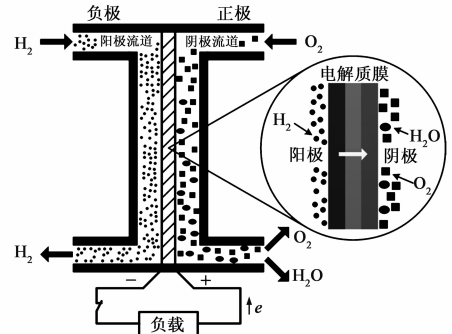


图2 PEMFC反应原理示意图

2.2 性能影响因素

通过实验及文献得知,反应物压力(氢气、氧气输入压力)、电池温度、电流密度为对 PEMFC 性能影响最大的三类因素:

①反应物压力与电极处氢气、氧气分压直接相关,其增大时,气体分压增大,反应物物质的量增加,电化学反应速率加快,电池输出电压升高,反之,电池输出电压降低;

②电池温度的影响较为复杂,当温度升高,水的饱和蒸气压升高,粒子扩散速率加快,电池活化与极化电压降低,第一项会导致膜层脱水,并使气体分压降低,降低电池性能,而后两项则会加快电化学反应速率,提高电池性能;

③电流密度的大小体现化学能-电能实际转换速率,对反应气体分压、质子交换膜水合状态具有重要影响,通常增加电流密度可获得更高输出功率,但若电流密度过大,则会降低输出功率、增加系统不稳定性,甚至对电池产生永久损害。

3 基于敏感度分析的动态神经网络

动态神经网络是一种在应用过程中,同时对连接权值、阈值及网络结构进行优化的神经网络,其采用网络训练算法调整连接权值、阈值,并利用结构评价与修改算法适时优化网络结构,实现信息处理能力与规模间的平衡。网络结构优化主要解决隐含层神经元冗余或不足的问题,前提是对神经元存在合理性进行分析,而敏感度分析能够计算隐含层神经元输出对网络总输出的贡献,因此可作为结构评价算法应用于动态神经网络模型构建中。

3.1 神经网络输出敏感度

单隐含层单输出神经网络(含有 H 个隐含层神经元)输出层神经元输入 I_{O_i} 、输出 O_{O_i} 间的函数关系可表示为

$$O_{OL} = \varphi(I_{OL} + b) = \varphi\left(\sum_{h=1}^H i_{OL,h} + b\right) \quad (1)$$

$$= f(i_{OL,1}, \dots, i_{OL,h}, \dots, i_{OL,H})$$

其中, $\varphi(\cdot)$ 为输出层神经元激活函数, b 为输出层神经元阈值, $i_{OL,h}$ 为隐含层第 h 个神经元输出加权值. $f(\cdot)$ 表示隐含层输出加权值与网络输出间时域上的函数关系.

将隐含层神经元输出加权值作为敏感度分析输入量, 利用下式计算其对网络输出的贡献^[14]

$$S_h = \frac{\text{var}_h[E(O_{OL} | i_{OL,h})]}{\text{var}(O_{OL})} \quad (2)$$

式中, $\text{var}_h[E(O_{OL} | i_{OL,h})]$ 为第 h 个隐含层神经元输出加权值对网络输出方差的影响, $\text{var}(O_{OL})$ 为网络输出方差, S_h 即第 h 个隐含层神经元对应的神经网络输出一阶敏感度.

根据 Parseval 定理,

$$\text{var}(O_{OL}) = 2 \sum_{\omega_n=1}^{+\infty} (A_{\omega_n}^2 + B_{\omega_n}^2) \quad (3)$$

$$\text{var}_h[E(O_{OL} | i_{OL,h})] = 2 \sum_{K=1}^{+\infty} (A_{K\omega_h}^2 + B_{K\omega_h}^2) \quad (4)$$

其中, $A_{(\cdot)}, B_{(\cdot)}$ 为 $i_{OL,h}$ 及 O_{OL} 进行时域-频域转换时相应频率下的傅立叶系数, ω_h 表示选定的合适频率, $K\omega_h$ 为 ω_h 第 K 次谐波的频率. 则

$$S_h = \frac{\sum_{K=1}^{+\infty} (A_{K\omega_h}^2 + B_{K\omega_h}^2)}{\sum_{\omega_n=1}^{+\infty} (A_{\omega_n}^2 + B_{\omega_n}^2)} \quad (5)$$

由于隐含层神经元输出间无相互作用, 只取基频下的傅立叶振幅计算敏感度^[15],

$$S_h = \frac{A_{\omega_h}^2 + B_{\omega_h}^2}{\sum_{\omega_n=1}^{+\infty} (A_{\omega_n}^2 + B_{\omega_n}^2)} \quad (6)$$

对 S_h 进行归一化处理

$$S_{h,n} = \frac{S_h}{S_{\text{SUM}}} = \frac{S_h}{\sum_{h=1}^H S_h} \quad (7)$$

3.2 神经网络动态优化

通过敏感度分析获得各隐含层神经元对应的神经网络输出敏感度, 以此对隐含层结构进行动态优化. 其主要方法为: 删除敏感度过小的神经元(冗余神经元); 分裂敏感度过大的神经元; 保留敏感度合理的神经元. 神经网络优化过程如图 3 所示, 具体步骤如下:

- ① 设置合理敏感度区间 $[\epsilon_1, \epsilon_2]$ ($0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < 1$);
- ② 计算各隐含层神经元对应的网络输出敏感度;
- ③ 对网络输出敏感度不同的隐含层神经元采用相应的处理方法: (1) 删除 $S_{h,n} < \epsilon_1$ 的神经元; (2) 将 $S_{h,n} > \epsilon_2$ 的神经元分裂为 d 个负载均匀的新神经元, 新神经

元连接权值、阈值为 $w_{h,\text{new}} = w_h/d$, $b_{h,\text{new}} = b_h/d$; (3) 保留 $\epsilon_1 \leq S_{h,n} \leq \epsilon_2$ 的神经元;

④ 在结构优化的基础上, 继续训练神经网络, 直至网络性能满足要求.

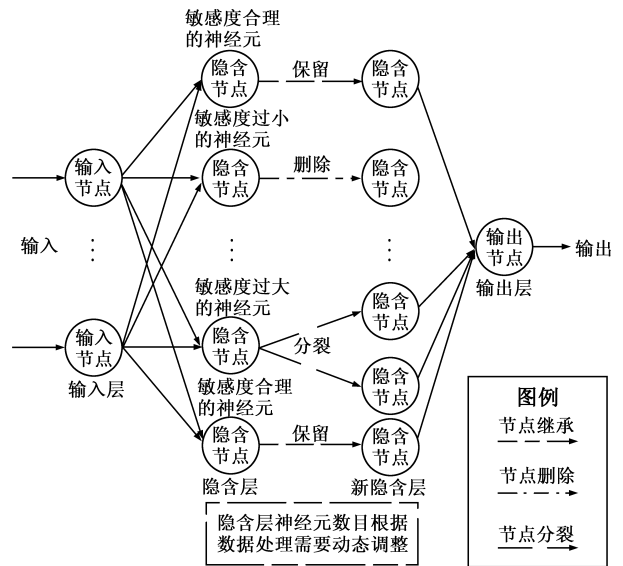


图3 神经网络结构优化示意图

4 建模与仿真

4.1 数据来源

建模数据由实验获得, 实验设备为某型双系统燃料电池测试平台, 如图 4 所示. 针对同一 PEMFC 工作状态进行三次重复实验, 对实验采集数据分三步进行数据处理, 获得建模数据集: 剔除超出极限工作范围的数据; 剔除超出三倍数据样本标准差的数据; 求取采样平均值作为最终建模数据值.



图4 双系统燃料电池测试平台

4.2 PEMFC 动态神经网络模型

选取电池温度、氢气入口压力、空气入口压力、电流密度为模型输入, 单电池输出电压为模型输出, 神经网络采用单隐含层误差回传神经网络. PEMFC 动态神经网络建模流程如图 5 所示.

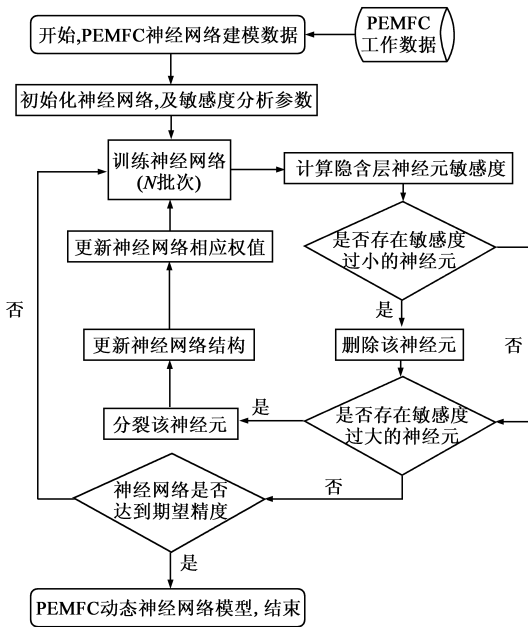


图5 PEMFC动态神经网络建模流程图

从建模数据集中随机选取 2000 组数据, 其中 70% 用模型训练, 30% 用于模型检验, 对原始数据采用线性函数转换法进行归一化处理. 隐含层神经元数目初始设定为 9, 采用 tansig 函数为隐含层激活函数, purelin 函数为输出层激活函数. 通过随机赋值法对连接权值、阈值进行初始化, 利用 Levenberg-Marquardt 算法训练神经网络, 选取均方差函数作为神经网络误差函数, N 设为 150. 敏感度合理区间设为 $[5\%, 40\%]$, 超出此区间上限时, 将神经元分裂为 3 个 ($d = 3$). 上述算法在 MATLAB 软件环境下实现.

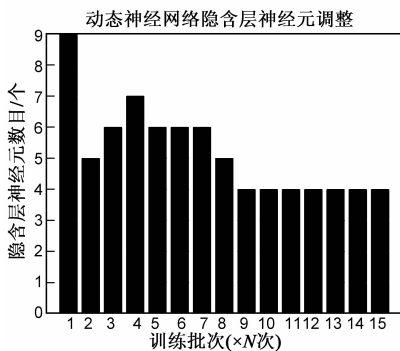


图7 动态神经网络隐含层优化

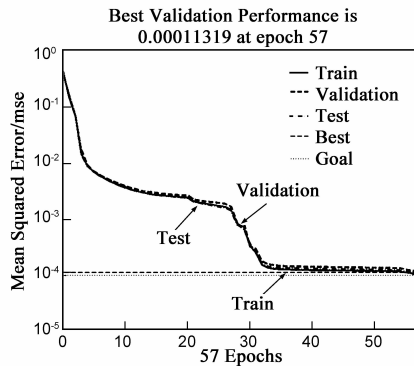


图8 神经网络训练过程

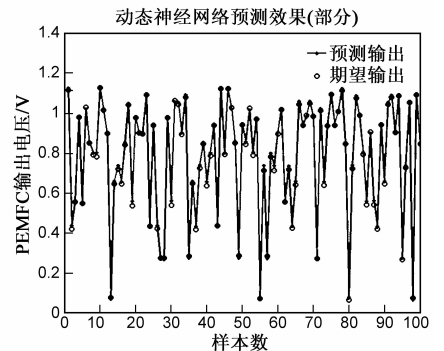


图9 动态神经网络预测效果

初始神经网络经过 N 批次训练后, 由敏感度分析得到各隐含层神经元对应的网络输出敏感度, 如图 6 (a) 所示. 可见隐含层中存在 4 个冗余神经元, 将其删除后继续训练神经网络, 并每隔 N 批次重复进行敏感度分析, 并修改神经网络结构, 图 6 (b)、图 6 (c) 为训练过程中敏感度分析结果. 最终, 隐含层神经元数目稳定在 4 个, 对应网络输出敏感度如图 6 (d) 所示, 均在合理区间内. 图 7 显示了完整的隐含层结构优化过程.

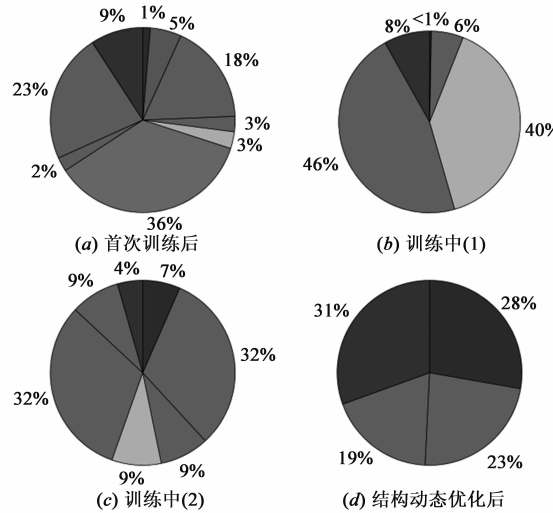


图6 隐含层神经元所对应的输出敏感度

神经网络结构优化与训练同时进行, 因此在前者结束后, 神经网络能够较快收敛. 由图 8 可见, 在结构优化基础上, 神经网络仅经过 57 个训练批次即达到设计性能指标. 神经网络逼近效果、相对误差如图 9、图 10 所示, 平均相对误差为 1.7%.

PEMFC 动态神经网络模型与静态神经网络模型 (采用相同数据集、初始结构、训练算法) 比较结果如表 1 所示, 前者隐含层结构经过调整, 神经元数目更少, 但在训练批次、训练时间、逼近精度方面优于后者.

表 1 动态与静态神经网络建模结果对比

神经网络类型	隐含层神经元数目	训练批次	训练时间	逼近精度
动态	9→4	57 *	3s *	1.1e-4 *
静态	9	80	7s	1.3e-4

* 动态神经网络建模最终结果数据.

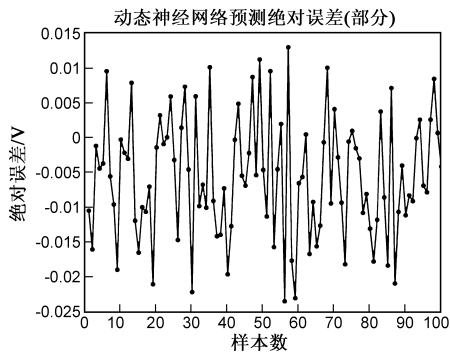


图10 动态神经网络预测绝对误差

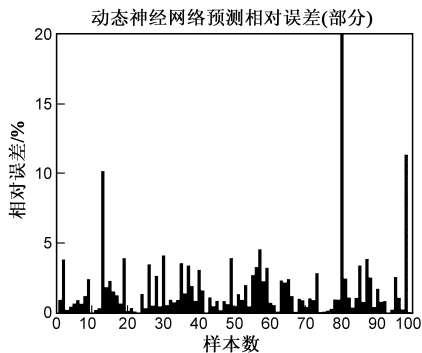


图11 动态神经网络预测相对误差

5 结论

本文以实际 PEMFC 运行工况为研究对象,将基于敏感度分析的动态神经网络建模方法应用于燃料电池模型研究领域,所构建的 PEMFC 动态神经网络模型可根据实际系统需要动态优化隐含层结构,在保证网络逼近精度同时获得更加紧凑的网络结构,实现网络结构与参数双重调整的目标.通过实际燃料电池测试平台工作数据,验证 PEMFC 动态神经网络模型能够较好地模拟燃料电池运行状况,为后期系统仿真与控制奠定基础.

参考文献

[1] Lee W Y, Park G G, Yang T H, et al. Empirical modelling of polymer electrolyte membrane fuel cell performance using artificial neural networks [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2004, 29(9): 961 – 966.

[2] Amphlett J C, Baumert R M, Mann R F, et al. Performance modeling of the Ballard Mark IV solid polymer electrolyte fuel cell II: empirical model development [J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1995, 142(1): 9 – 15.

[3] Kim J, Lee S M, et al. Modeling of proton exchange membrane fuel cell performance with an empirical equation [J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1995, 142(8): 2670 – 2674.

[4] Lee J H, Lalk T R, Appleby A J. Modeling electrochemical performance in large scale proton exchange membrane fuel cell stacks [J]. *Journal of Power Sources*, 1998, 70(2): 258 – 268.

[5] Bernardi D M, Verbrugge M W. Mathematical model of a gas diffusion electrode bonded to a polymer electrolyte [J]. *AIChE Journal*, 1991, 37(8): 1151 – 1163.

[6] Bernardi D M, Verbrugge M W. A mathematical model of the solid-polymer-electrolyte fuel cell [J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1992, 139(9): 2477 – 2491.

[7] Baschuk J J, Li X G. Modeling of ion and water transport in the polymer electrolyte membrane of PEM fuel cells [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2010, 35(10): 5095 – 5103.

[8] Kopanidis A, Theodorakakos A, Gavaises M, et al. Pore scale 3D modelling of heat and mass transfer in the gas diffusion layer and cathode channel of a PEM fuel cell [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2011, 50(4): 456 – 467.

[9] Saengrungs A, Abtahi A, Zilouchian A. Neural network model for a commercial PEM fuel cell system [J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 172(2): 749 – 759.

[10] HU P, Cao G Y, et al. Modeling of a fuel cell stack by neural networks based on particle swarm optimization [R]. *Asia-Pacific Power and Energy Engineering Conference*, 2009.

[11] Puranik S V, Keyhani A, Khorrami F. Neural network modeling of proton exchange membrane fuel cell [J]. *Energy Conversion, IEEE Transactions on*, 2010, 25(2): 474 – 483.

[12] Yuh M F, Ay S. A three-dimensional full-cell CFD model used to investigate the effects [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2007, 32(17): 4466 – 4476.

[13] 李伟. 质子交换膜燃料电池的模型研究 [D]. 杭州: 浙江大学, 2000.

LI W. Study of proton exchange membrane fuel cell models [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2000. (in Chinese)

[14] Saltelli A, Tarantola S, Chan K S. A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output [J]. *Technometrics*, 1999, 41(1): 39 – 56.

[15] 韩红桂, 等. 基于模型输出敏感度分析的动态神经网络结构设计 [J]. *电子学报*, 2010, 38(3): 731 – 736.

HAN H G, et al. Design of dynamic neural network based on the sensitivity analysis of model output [J]. *Acta Electronica Sinica*, 2010, 38(3): 731 – 736. (in Chinese)

作者简介

曹政才 男, 博士, 教授/博导, 主要研究方向: 复杂系统建模、优化与控制. E-mail: giftzc@163.com

李博 男, 硕士, 主要研究方向为复杂过程建模、优化与控制等. E-mail: oberhere@126.com