

引文格式:

宋昌熙, 郑春花, 车硕源. 基于人工神经网络的固体氧化物燃料电池性能预测模型开发 [J]. 集成技术, 2020, 9(5): 27-33.
Song CH, Zheng CH, Cha SW. Development of a simulation model for polarization characteristics of solid oxide fuel cells based on an artificial neural network [J]. Journal of Integration Technology, 2020, 9(5): 27-33.

基于人工神经网络的固体氧化物燃料电池性能 预测模型开发

宋昌熙¹ 郑春花² 车硕源¹

¹(首尔大学机械工程系 首尔 151742)

²(中国科学院深圳先进技术研究院 深圳 518055)

摘要 固体氧化物燃料电池 (Solid-Oxide Fuel Cell, SOFC) 因其能量转换效率高而备受关注, 但其相关技术非常复杂, 技术成熟度比质子交换膜燃料电池、直接甲醇燃料电池等其他类型的燃料电池低。SOFC 的微观结构是影响其性能的因素之一, 为加速 SOFC 的商业化应用, 需要对其复杂微观结构进行有效优化。同时, SOFC 性能测试实验耗时长、费用高, 而高可靠性的 SOFC 计算机模型可用来缩短 SOFC 微观结构优化时间和降低研发成本。该研究根据阳极支撑 SOFC 结构变化对应的性能实验数据, 开发了一种基于人工神经网络的、根据结构特性来预测其性能的 SOFC 计算机模型。实验过程利用部分数据对该神经网络进行训练, 并利用另一部分数据对其进行验证。结果显示, 所开发的 SOFC 模型能够准确地根据微观结构的变化呈现其性能变化, 适合用于 SOFC 微观结构的优化。

关键词 固体氧化物燃料电池; 性能预测模型; 神经网络; 微观结构

中图分类号 TG 156 文献标志码 A doi: 10.12146/j.issn.2095-3135.20200514001

Development of a Simulation Model for Polarization Characteristics of Solid Oxide Fuel Cells Based on an Artificial Neural Network

SONG Changhee¹ ZHENG Chunhua² CHA Suk Won¹

¹(Department of Mechanical Engineering, Seoul National University, Seoul 151742, South Korea)

²(Shenzhen Institutes of Advanced Technology, Chinese Academy of Sciences, Shenzhen 518055, China)

Abstract Solid oxide fuel cells (SOFCs) have gained lots of attentions owing to their high energy conversion efficiency, however, because of the complex technology, their application is not mature as compared with

收稿日期: 2020-05-14 修回日期: 2020-06-28

基金项目: 深圳市小孔雀项目 (KQJSCX20180330170047681); 深圳无人驾驶感知决策与执行技术工程实验室项目 (Y7D004); 深圳电动汽车动力平台与安全技术重点实验室项目

作者简介: 宋昌熙, 博士研究生, 研究方向为固体氧化物燃料电池模型开发; 郑春花 (通讯作者), 博士, 副研究员, 博士研究生导师, 研究方向为新能源汽车能量管理以及燃料电池, E-mail: ch.zheng@siat.ac.cn; 车硕源 (通讯作者), 博士, 教授, 研究方向为新一代燃料电池、混合动力汽车; E-mail: swcha@snu.ac.kr.

other types of fuel cells such as proton-exchange membrane fuel cells and direct methanol fuel cells. The micro-structure is one of important factors on the SOFC performance, therefore, in order to expedite the commercialization of SOFCs, it is crucial to develop an effective method to optimize the complicated micro-structure of SOFCs. The experiment of the SOFC performance test is time-consuming and cost-ineffective, thus it is necessary to develop an SOFC simulation model with high reliability to save the time and cost of the micro-structure optimization. This research proposes an artificial neural network (ANN)-based SOFC simulation model according to the experimental data of an anode-supported SOFC performance, in which the polarization characteristics of SOFCs are estimated from their structural characteristics. After training the ANN based on a part of the experimental data, the rest part of data are used to evaluate the effectiveness of the proposed SOFC model. Results show that the proposed SOFC simulation model accurately presents the polarization characteristics of SOFCs according to the structural characteristics, and this indicates that the model is suitable for the micro-structure optimization for SOFCs.

Keywords solid-oxide fuel cell; performance prediction model; artificial neural network; micro-structure

1 引 言

在能源与环境问题日益严峻的背景下, 燃料电池作为一种效率高、污染少的新能源能量转换装置备受关注。燃料电池是一种通过氧化还原反应将燃料中储存的化学能直接转化为电能的装置, 又称为电化学发电器^[1]。由于燃料电池不经过燃烧, 不受卡诺循环的限制, 因此其能量转换效率较高。此外, 燃料电池电化学反应清洁, 很少产生有害物质, 且燃料电池装置不含或含有很少的运动部件, 运行安静^[1]。与其他类型的燃料电池, 如质子交换膜燃料电池 (Proton-Exchange Membrane Fuel Cell)、直接甲醇燃料电池 (Direct Methanol Fuel Cell) 等相比, 固体氧化物燃料电池 (Solid-Oxide Fuel Cell, SOFC) 展现出更高的能量转换效率, 因此 SOFC 是燃料电池领域重要的研究方向^[2-4]。

SOFC 阳极厚度、阴极厚度、电解质厚度等微观结构是影响其性能的重要因素。其中, 电极的厚度与结构主要影响 SOFC 的极化电阻和浓差电阻^[5]; 电解质的厚度则主要影响 SOFC 的欧姆

电阻^[6]。因此, 在同样的工作环境下, 随着电极和电解质厚度的变化, SOFC 将呈现出不同的性能, 故开发一种有效优化 SOFC 复杂微观结构的方法至关重要。由于 SOFC 的性能测试实验耗时长、费用高, 所以先对不同微观结构的 SOFC 进行测试, 然后通过分析测试结果再来优化其微观结构的方法显然不是很现实。为缩短 SOFC 的开发周期并降低开发成本, 可通过搭建高可靠性的 SOFC 计算机模型来对其微观结构进行优化研究。搭建燃料电池模型方法可分为两种, 即基于模型的方法和数据驱动的方法。在传统基于模型的方法中, 一般根据能斯特方程 (Nernst Equation) 或 Butler-Volmer 方程等物理方程来搭建燃料电池模型^[7-9]。该方法不需要通过大量数据来搭建燃料电池模型, 对结果进行因果关系的分析也较容易, 但用于体现燃料电池复杂特性的很多因子还没有被充分定义, 因此, 准确模拟实际燃料电池特性仍存在一定的难度。

随着大数据、机器学习及人工智能等技术的迅速发展, 数据驱动的燃料电池模型也受到了很多关注。该方法主要采用基于支持向量机

(Support Vector Machine)^[10-12]、神经网络(Artificial Neural Network, ANN)等机器学习方法或人工智能方法开发燃料电池模型^[13-17]。其中, ANN 方法适合挖掘输入与输出之间复杂、非线性的特性, 因此适合用于搭建具有复杂非线性特性系统的模型, 已在控制、信息、医学、经济、交通等领域得到广泛的应用。ANN 方法可通过实际测试数据获取燃料电池复杂、非线性特性的模型, 而为了模型的可靠性, 需要一定量以上的数据。已有研究主要侧重于探索电流密度、工作温度、燃料和空气流量等工作条件对 SOFC 性能的影响。例如, 吴小娟等^[13]与吴大中等^[14]搭建了一种基于 ANN 的通过电流密度和温度来预测 SOFC 输出电压的模型; Milewski 与 Świrski^[15]搭建了一种基于氢气流量来预测 SOFC 输出电压的 ANN 模型, 并采用粒子群算法对 ANN 相关参数进行了优化, 从而提高预测精度。Costamagna 等^[16]开发了一种以电流密度、温度、燃料和空气流量等工作条件来预测 SOFC 输出电压的 ANN 模型; Wu 等^[10]、Costamagna 等^[11]、Zhang 等^[12]与许朝雄等^[17]将数据驱动的方法用于 SOFC 的故障识别与故障诊断。目前关于 SOFC 阳极厚度、阴极厚度、电解质厚度等微观结构对 SOFC 性能影响的研究仍较少。

本研究参考以往研究中阳极支撑 SOFC 微观结构变化对应的性能实验数据, 开发了一种基于 ANN 的、根据微观结构特性来模拟其性能的 SOFC 计算机模型。实验中, 首先采用部分实验数据对 ANN 进行训练, 然后采用另一部分数据对模型进行验证。结果显示, 本研究开发的 SOFC 模型能够准确地根据微观结构的变化呈现其性能变化, 模型预测数据与测试实验数据的均方差(Mean Squared Error, MSE)小于 6.13×10^{-5} , 表明该模型可充分应用于 SOFC 微观结构的优化研究。

2 固体氧化物燃料电池模型开发

SOFC 的性能主要由不同电流密度条件下的输出电压决定, 该电压值受燃料电池中各种电阻(包括极化电阻、欧姆电阻和浓差电阻)的影响, 而这些电阻又受到 SOFC 阳极厚度、阴极厚度、电解质厚度等微观结构的影响。为探索 SOFC 微观结构与输出电压之间复杂的非线性关系, 本研究利用 ANN 开发了阳极支撑 SOFC 的计算机模型。

2.1 固体氧化物燃料电池模型数据

为分析阳极支撑 SOFC 微观结构与输出电压的关系, Zhao 与 Virkar^[18]开展了系统性的测试实验研究, 并取得了充分的实验数据。本研究在搭建基于 ANN 的 SOFC 模型时参考了该研究的部分数据。Zhao 与 Virkar^[18]研究中阳极支撑 SOFC 的膜电极(Membrane Electrode Assembly, MEA)结构如下: (1)多孔 Ni+氧化钇稳定的氧化锆(Yttria-Stabilized Zirconia, YSZ)阳极支撑体; (2)多孔 Ni+YSZ 阳极功能层; (3)致密 YSZ 电解质; (4)多孔掺杂锶的镧锰氧复合氧化物(Sr-doped LaMnO₃, LSM)阴极功能层; (5)多孔 LSM 阴极, 具体如图 1 所示。该研究选取电解质厚度、阳极支撑体厚度、阳极支撑体孔隙率、阴极功能层厚度 4 个参数作为阳极支撑 SOFC 微观结构的代表性设计参数, 并分别测试了不同参数对 SOFC 输出电压的影响。实验中, 当对任意 1 个设计参数进行测试评价时, 其他 3 个参数均设为参考值。4 个设计参数的参考值如下: 电解质厚度为 8 μm; 阳极支撑体厚度为 1 mm; 阳极支撑体孔隙率为 48%; 阴极功能层厚度为 20 μm。不同设计参数的测试范围设定如下: (1)电解质厚度, 4~20 μm; (2)阳极支撑体厚度, 0.5~2.45 mm; (3)阳极支撑体孔隙率, 32%~76%; (4)阴极功能层厚度, 6~105 μm。在测试过程中, 所有设计参数在测试范围中分别

取4个级别的测试值,具体如表1所示。

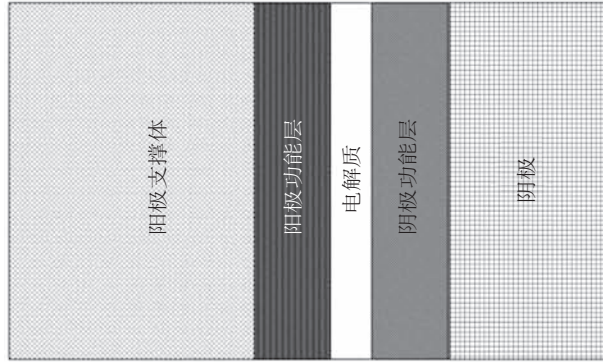


图1 阳极支撑SOFC的结构图

Fig.1 Schematic diagram of anode-supported SOFC structure

表1 设计参数取值情况

Table 1 Levels of design parameters

测试值 级别	电解质厚 度 (μm)	阳极支撑体 厚度 (μm)	阳极支撑体 孔隙率 (%)	阴极功能层 厚度 (μm)
级别 1	4	500	32	6
级别 2	8	1 000	48	20
级别 3	15	1 450	57	56
级别 4	20	2 450	76	105

2.2 基于人工神经网络的固体氧化物燃料电池模型开发

由于ANN具有很强的模拟非线性系统的能力,所以非常适合具有复杂非线性特征的燃料电池模型的开发应用。因此,本研究将ANN应用于SOFC模型的开发中。根据2.1小节中描述

的测试实验数据,本研究搭建了如图2所示的ANN来模拟SOFC,由此快速体现SOFC微观结构的变化对其性能的影响。该ANN包含隐含层、输入层和输出层。其中,输入层参数包括SOFC电流密度、温度和上述4个设计参数;输出层参数为SOFC的输出电压。每一层中的神经元与下一层各神经元之间都存在相应的权值,这些权值起初都是默认值,并在训练过程中不断得到更新。不同层之间的关系用设定的激活函数表示。本研究中采用公式(1)所示的Hyper-tangent函数作为激活函数。ANN各层具体参数如表2所示。

$$f(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}} \quad (1)$$

表2 ANN相关信息

Table 2 Information on ANN

网络层名称	神经元数量	激活函数
输入层	6	无
隐含层	64	Hyper-tangent
输出层	1	无

ANN的权值在反复的反向传播学习过程中,按照目标函数最小化的方向不断得以更新。本研究中采用公式(2)所示的MSE函数作为目标函数。

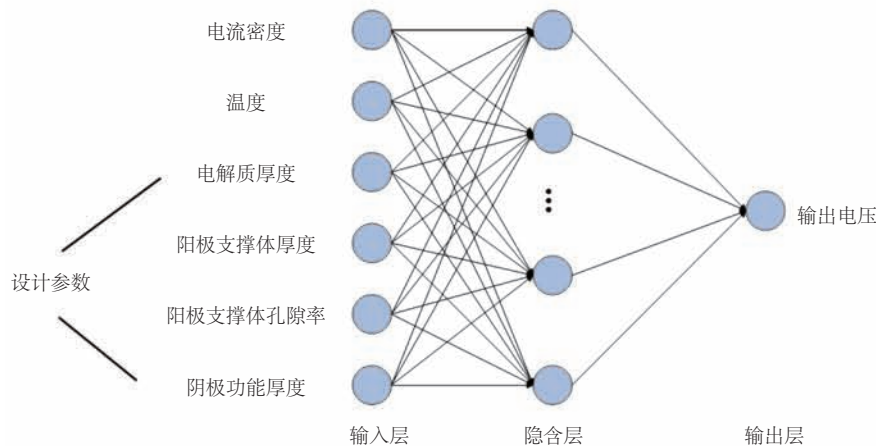


图2 SOFC模型的ANN结构图

Fig. 2 Schematic diagram of ANN structure for SOFC model

$$J = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [y_i - f(x; \theta)]^2 \quad (2)$$

其中, N 为学习样本数量; y_i 为目标电压值; x 为输入层参数; θ 为 ANN 的权值。

本研究中所用到的数据共 525 组^[18], 其中 80% 数据用于 ANN 的训练(即训练数据), 剩余 20% 数据用于模型的验证(即验证数据)。为防止因输入层各参数取值范围不同而导致的不稳定训练, 对各参数进行如公式(3)所示的归一化处理, 从而使每个参数都在 0~1 取值。

$$x_{\text{norm}} = \frac{x - \min x}{\max x - \min x} \quad (3)$$

3 固体氧化物燃料电池模型验证

首先利用训练数据对上述 ANN 进行训练, 结果如图 3 所示。其中, 蓝色曲线为 ANN 的学习曲线, x 轴代表训练次数, y 轴代表目标函数, 即公式(2)中的 MSE 函数。本研究共对 ANN 进行 200 000 次训练。图 3 显示, 从 25 000 次训练开始目标函数值基本趋于稳定, 表明 ANN 得到了足够的训练。图 3 黄色曲线代表对验证数据的学习曲线。从图可知, 黄色曲线与蓝色曲线的趋势基本一致, 这验证了 ANN 的训练

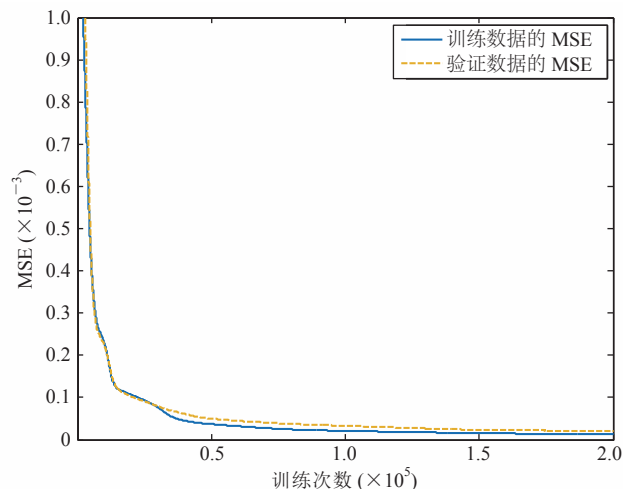


图 3 ANN 学习曲线

Fig. 3 Learning curves of ANN

效果, 表明该 ANN 通过训练已具备对不同数据的泛化能力。表 3 为完成训练后 ANN 的平均绝对误差(Mean Absolute Error)和均方差(MSE)。结果显示, 该 ANN 不仅使训练数据表现出非常小的误差, 而且对验证数据造成的误差也较小, 对验证数据的平均绝对误差值只有 0.02, 这进一步表明该 ANN 已具备了泛化能力。

表 3 训练数据和验证数据的误差

Table 3 Errors for training data and validation data

数据类型	平均绝对误差	均方差
训练数据	0.017	0.000 3
验证数据	0.020	0.000 4

图 4 为不同条件下 ANN 的输出与测试实验结果, 其中实线代表利用 ANN 输出获取的 SOFC 性能曲线, 各数据点代表测试实验结果数据。从图 4 可知, 模型输出结果与实验测试结果基本保持一致, 表明本研究开发的 ANN 可以很好地模拟 SOFC 电解质厚度、阳极支撑体厚度、阳极支撑体孔隙率、阴极功能层厚度等微观结构变化对其输出电压的影响。表 4 为针对图 4 中不同微观结构变化条件下, SOFC 模型输出数据与测试实验数据的均方差。从表 4 可以看出, 该 ANN 模型对阳极支撑体厚度变化(其他结构参数固定)的预测误差最小, 说明在阳极支撑体厚度变化条件下预测的结果最好; 而虽然在阳极支撑体孔隙率变化条件(其他结构参数固定)下预测的结果最差, 但 MSE 值仍然是 6.13×10^{-5} , 表现出了很小的误差。

4 讨论与分析

相比基于物理方程的 SOFC 模型中用于体现燃料电池复杂特性的很多因子还没有被充分定义的现状^[7-9], 本文研究基于 ANN 的方法可通过大量数据获取燃料电池复杂、非线性特性的模型。与以往基于 ANN 的 SOFC 模型偏向于探索电流

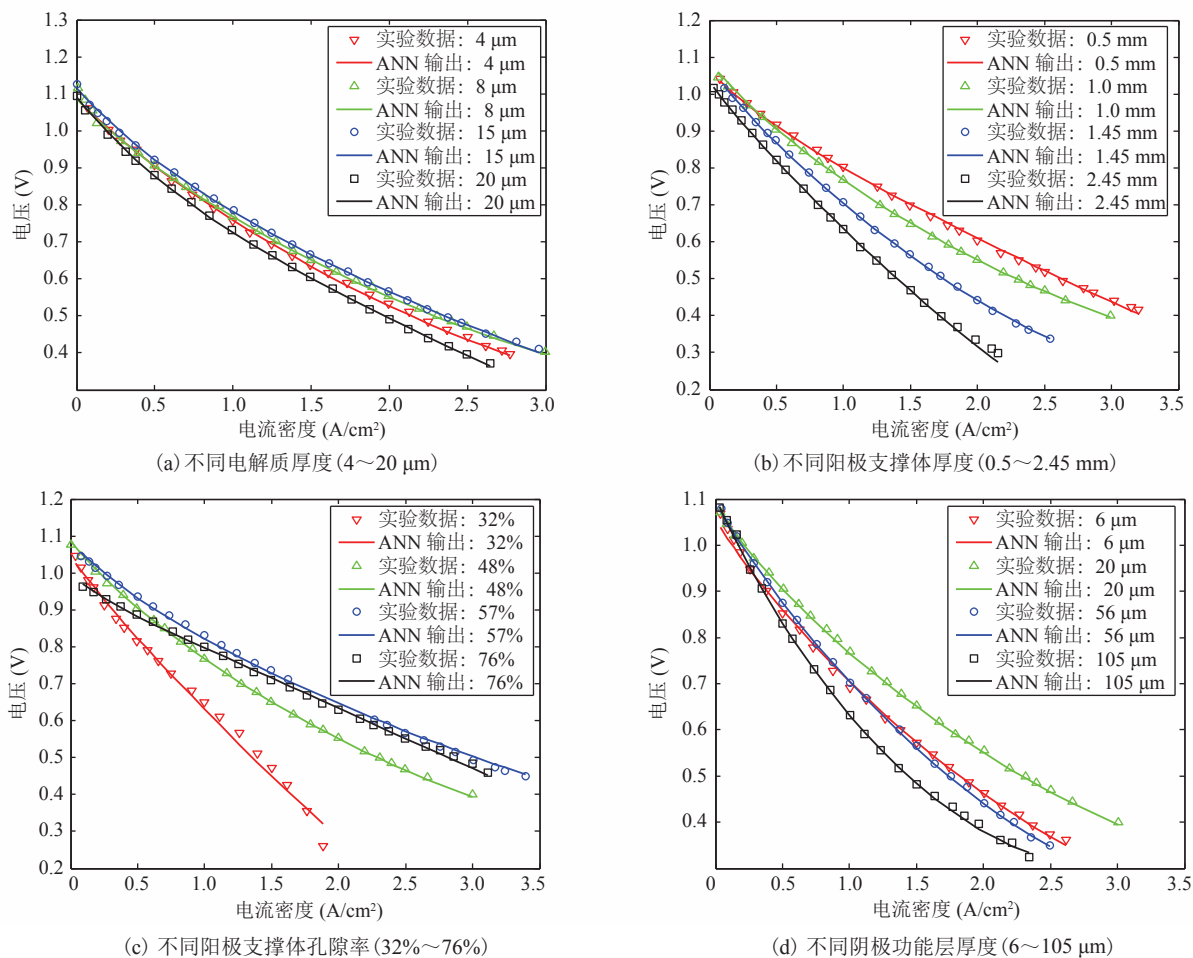


图4 不同条件下ANN输出与测试实验结果

Fig. 4 Comparison between ANN outputs and experimental data under different conditions

表4 针对电池不同参数的训练数据和验证数据的误差

Table 4 Errors between training data and validation data for different cell parameters

电池参数	均方差 ($\times 10^{-5}$)
电解质厚度	2.57
阳极支撑体厚度	1.68
阳极支撑体孔隙率	6.13
阴极功能层厚度	2.16

密度、工作温度、燃料和空气流量等工作条件对 SOFC 性能的影响^[10-16]相比,本研究着重探索电解质厚度、阳极支撑体厚度、阳极支撑体孔隙率、阴极功能层厚度等微观结构对 SOFC 性能的影响。结果显示,本研究所开发的 SOFC 模型能

够准确地预测上述各种微观结构变化对 SOFC 输出电压的影响。

由于基于 ANN 的模型相当于黑箱模型,所以较难对结果进行因果分析。因此,本研究中也很难阐明该 ANN 模型对阳极支撑体厚度变化的预测误差最小,而对阳极支撑体孔隙率变化的预测误差最大(图4)的直接原因。

本研究中用于训练和验证 ANN 模型的数据均来自于参考文献[18],该研究中对指定结构的阳极支撑型 SOFC (2.1 小节已作具体描述)做了大量的测试实验并记录了实验结果数据。因此,本研究所建立的模型只适合该指定结构 SOFC 的性能预测,对于其他结构类型的 SOFC 的 ANN 模

型, 则需通过再次进行测试实验或检索文献等方法获取相关的数据。

5 结 论

高可靠性的 SOFC 计算机模型对缩短 SOFC 开发周期和降低研发成本都具有重要的意义。本研究根据 SOFC 复杂非线性的特征, 利用 ANN 搭建了 SOFC 的性能预测计算机模型, 并验证了其有效性。结果显示, 本研究所开发的 SOFC 模型能够准确地根据微观结构的变化呈现其性能变化, 模型预测数据与测试实验数据之间的 MSE 小于 6.13×10^{-5} , 表明该模型可充分应用于 SOFC 微观结构的优化研究。

参 考 文 献

- [1] 《中国电力百科全书》编辑委员会, 中国电力出版社《中国电力百科全书》编辑部. 中国电力百科全书-综合卷 [M]. 北京: 中国电力出版社, 2001: 336-337.
- [2] Cho GY, Lee YH, Hong SW, et al. High-performance thin film solid oxide fuel cells with scandia-stabilized zirconia (ScSZ) thin film electrolyte [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2015, 40: 15704-15708.
- [3] Baek JD, Yoon YJ, Lee WY, et al. A circular membrane for nano thin film micro solid oxide fuel cells with enhanced mechanical stability [J]. *Energy and Environmental Science*, 2015, 8(11): 3374-3380.
- [4] Chen G, Luo YD, Sun WK, et al. Electrochemical performance of a new structured low temperature SOFC with BZY electrolyte [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, 43(28): 12765-12772.
- [5] Noh HS, Lee H, Kim BK, et al. Microstructural factors of electrodes affecting the performance of anode-supported thin film yttria-stabilized zirconia electrolyte ($\sim 1\mu\text{m}$) solid oxide fuel cells [J]. *Journal of Power Sources*, 2011, 196(17): 7169-7174.
- [6] Basu RN, Das Sharma A, Dutta A, et al. Processing of high-performance anode-supported planar solid oxide fuel cell [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33(20): 5748-5754.
- [7] Bove R, Lunghi P, Msammes NM. SOFC mathematic model for systems simulations. Part one: from a micro-detailed to macro-black-box model [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2005, 30(2): 181-187.
- [8] Recknagle K, Williford RE, Chic LA, et al. Three-dimensional thermo-fluid electrochemical modeling of planar SOFC stacks [J]. *Journal of Power Sources*, 2003, 113(1): 109-114.
- [9] Tikiz I, Taymaz I, Pehlivan H. CFD modelling and experimental validation of cell performance in a 3-D planar SOFC [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(29): 15441-15455.
- [10] Wu XJ, Zhu XJ, Cao GY, et al. Modeling a SOFC stack based on GA-RBF neural networks identification [J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 167(1): 145-150.
- [11] Costamagna P, Giorgi AD, Moser G, et al. Data-driven fault diagnosis in SOFC-based power plants under off-design operating conditions [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(54): 29002-29006.
- [12] Zhang ZH, Li SH, Xiao YW, et al. Intelligent simultaneous fault diagnosis for solid oxide fuel cell system based on deep learning [J]. *Applied Energy*, 2019, 233/234: 930-942.
- [13] 吴小娟, 朱新坚, 曹广益, 等. 基于神经网络的固体氧化物燃料电池电堆建模 [J]. *系统仿真学报*, 2008, 20(4): 1068-1071.
- [14] 吴大中, 吴丽华. 固体氧化物燃料电池的建模与仿真 [J]. *电子设计工程*, 2012, 20(19): 11-13.
- [15] Milewski J, Świrski K. Modelling the SOFC behaviours by artificial neural network [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2009, 34(13): 5546-5553.
- [16] Costamagna P, Giorgi AD, Moser G, et al. Data driven techniques for fault diagnosis in power generation plants based on solid oxide fuel cells [J]. *Energy Conversion and Management*, 2019, 180: 281-291.
- [17] 许朝雄, 杨煜普. 固体氧化物燃料电池多工况特征提取与多故障识别 [J]. *化工自动化及仪表*, 2018, 9: 709-713.
- [18] Zhao F, Virkar AV. Dependence of polarization in anode-supported solid oxide fuel cells on various cell parameters [J]. *Journal of Power Sources*, 2005, 141(1): 79-95.