科学通报 2026 年 第 71 卷 第 8 期: 1576 ~ 1595
西安交通大学能源与动力工程学院办学105周年专辑 评 述
《中国科学》杂志社 SCIENCE CHINA PRESS

质子交换膜燃料电池的数值仿真及其工程应用综述

陶文铨[1*], 白帆[1], 张卓[1], 何璞[1], 方文振[1], 毋玉同[2], 陈磊[1], 陈黎[1]

1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安 710049
2. 西安交通大学人居与环境工程学院, 西安 710049
* 联系人, E-mail: wqtao@mail.xjtu.edu.cn

2025-08-26 收稿, 2025-11-29 修回, 2025-12-02 接受, 2025-12-03 网络版发表
国家自然科学基金(51836005, 50636050, 5113600, 51911530157, 52206110, 52306112, 52306113, 52506103, 52500604)、中国博士后科学基金(BX20240285M, 2024T170700)、能源陕西实验室科技项目(ESLB202408)、陕西省重点研发计划(2025GH-YBXM-016)、陕西省创新人才推进计划-科技创新团队(2024RS-CXTD-35)和陕西省博士后基金(2023BSHYDZZ41))资助

摘要 质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)将氢气的化学能直接转化为电能, 具有能量转化效率高、零碳排放等优点, 对于我国实现“双碳”目标具有重要的意义. PEMFC内部过程复杂, 传统的理论解析方法难以应用. 实验研究也有成本高、周期长等限制, 难以满足面向工程应用的快速迭代的研发需求. 数值模拟技术已成为面向PEMFC设计的性能预测和参数敏感性分析的有效工具. 本文简要梳理了2006年以来国内外PEMFC电堆数值模拟的研究进展, 具体内容包括8个部分: (1) 膜电极模型, (2) 单电池宏观模型, (3) 单电池多尺度模型, (4) 电堆模型, (5) 运行过程模型, (6) 系统控制模型, (7) 高效分析模型, (8) 数值方法在大功率电堆开发中的应用实践. 文中提出了以下研究建议: (1) 在团聚块模型中考虑电子、质子之间的协同作用; (2) 膜电极的数值计算中需要进一步考核描述液态水在多孔电极内传输的毛细力-液态水饱和度关联式的有效性; (3) 为揭示PEMFC中大量参数综合变化对电池输出特性的影响规律, 亟待开展相似原理和人工智能的深入应用的研究; (4) 需要研究在计算资源可接受的前提下, 获得由几百片单电池组成的整个商业规模电堆的完整多物理量分布特性的仿真方法.

关键词 质子交换膜燃料电池, 数值仿真, 大功率电堆, 智能算法, 工程应用

质子交换膜燃料电池(proton exchange membrane fuel cell, PEMFC)通过电化学反应将氢气的化学能直接转化为电能, 具有能量转化效率高、运行温度低、启动速度快以及零碳排放等突出优势[1,2], 已成为构建清洁低碳、安全高效的新型能源体系的核心设备, 对于我国实现“双碳”目标具有重要意义.

PEMFC内部发生复杂的多物理场耦合过程[3,4], 传统的理论解析方法难以应用. 实验研究(如电化学阻抗谱、X射线断层扫描等)是认识PEMFC内部机理的基础手段, 但现有测试技术受限于时空分辨率等因素, 难以完全捕捉氢燃料电池堆内部发生的与气-水-电-热-力等相关的多物理场规律. 此外, 实验方法成本高、周期长、参数调控范围有限, 难以满足面向工程化应用的快速迭代的研发需求.

数值模拟技术为突破上述研究瓶颈提供了有效途径, 已成为设计PEMFC时性能预测和参数敏感性分析的有力工具. 多尺度多物理场数值仿真方法可以突破实验观测的时空限制, 实现从微观界面反应到宏观电池性能的多尺度精确预测. 建立高保真的PEMFC三维两相非等温模型[5,6]能够深入揭示PEMFC电堆内部气-水-电-热-力多场耦合的作用机制, 定量揭示关键参数对性能的影响, 可为材料优化、结构设计、系统集成及运行调控提供理论依据.

本文系统梳理了2006年以来国内外PEMFC数值模

引用格式: 陶文铨, 白帆, 张卓, 等. 质子交换膜燃料电池的数值仿真及其工程应用综述. 科学通报, 2026, 71: 1576–1595
Tao W-Q, Bai F, Zhang Z, et al. Simulation of proton exchange membrane fuel cells and their engineering applications: a review (in Chinese). Chin Sci Bull, 2026, 71: 1576–1595, doi: 10.1360/CSB-2025-5421

© 2025《中国科学》杂志社

拟的研究进展，旨在总结“膜电极-电池-电堆-系统”各层级的模型及对物理机制的现有认识和数值模拟方法，以促进PEMFC技术从基础研究到工程应用的发展. 作为示例，本文最后给出了作者团队将数值仿真技术应用于PEMFC电堆设计的工程案例.

1 膜电极模型及数值研究

1.1 质子交换膜模型及数值研究

质子交换膜(proton exchange membrane, PEM)是PEMFC的核心组件. 当前主流的PEM, 如以Nafion为代表的全氟磺酸(perfluorosulfonic acid, PFSA)聚合物, 其分子结构由化学惰性的疏水性主链与接枝的亲水性磺酸基团侧链构成[7]. 在水合条件下，这种固有的两亲性驱动了聚合物发生纳米级相分离，形成一个由水分子和磺酸根离子簇集而成、相互贯通的亲水域网络，并嵌入在疏水基质中[8]. PEM承担着三重使命: (1) 传导质子、绝缘电子; (2) 传输水; (3) 阻隔气体, 抑制氢气与氧气的渗透. 针对PEM内迁移过程的模拟, 分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟软件如LAMMPS可提供高精度捕捉纳米级相分离、气体传输以及质子传导细节, 但计算速度较慢; 相比之下, 经验/半经验公式模型则计算速度更快, 适用于单电池性能的快速评估. 这些方法在预测精度与计算成本之间存在显著差异，需要针对具体研究目标进行审慎评估与选择.

1.1.1 质子传导模型

质子传导是PEM最根本的功能，有两种微观传递机制: 格罗特斯(Grotthuss)机制与运载(vehicle)机制[9]. Grotthuss机制认为质子通过由水分子或磺酸根基团形成的氢键网络时，以电荷缺陷的形式进行快速“跳跃”式传递，伴随有氢键的协同断裂与重组[9]; 运载机制涉及质子与一个或多个水分子形成稳定的水合质子络合物. 文献[10]认为运载机制在所有含水量下均可能占据主导地位; 而更多研究指出在极低含水量(水含量$\lambda < 5$)下质子主要以水合离子的形式进行迁移，随着含水量的增加Grotthuss机制的贡献也随之增强.

质子传导网络的特征尺寸处于纳米量级，分子动力学模拟已成为主要研究工具. 有关研究在Xian等人[8]的工作中有所分析. MD基于预设的力场，在处理Grotthuss机制时只能通过分析氢键寿命、配位数等进行间接推断. 从头算分子动力学(*ab initio* molecular dynamics, AIMD)和基于反应力场的经验价键(empirical valence bond, EVB)模型得到了应用. 在未来结合了人工智能的MD模拟, 有望实现对PEM内质子输运全景过程的仿真.

质子电导率(σ)是通过温度T和水含量λ的半经验模型获取, 常用的Springer模型[11]为

$$\sigma(\lambda, T) = (0.5139\lambda - 0.326) \exp[1268(1/303.15 - 1/T)], \quad (1)$$

在原子级模拟中，结合分子动力学模拟与能斯特-爱因斯坦(Nernst-Einstein, NE)方程可获得质子电导率:

$$\sigma = \frac{Nz^2e^2D}{Vk_{\mathrm{B}}T}, \quad (2)$$

其中, D为扩散系数($m^2\ s^{-1}$), N为水合氢离子数量, z为离子电荷, e为基本电荷, k_{B}为玻尔兹曼常数. 由经典MD结合NE方程计算得出的电导率显著低于实验值，因为经典MD力场将水合氢离子视为稳定不可解离的“布朗粒子”, 忽略了对总电导率贡献巨大的Grotthuss跳跃机制.

1.1.2 水传输模型

PEM的质子导电性能高度依赖于膜内水分的动态平衡. 水分子的跨膜迁移通过四种机制实现: 反向扩散(浓度梯度驱动)、电渗拖拽(伴随质子迁移)、液压渗透(毛细压差作用)以及热拖拽(温度梯度诱导). 反向扩散与电渗拖拽共同主导了燃料电池内的水通量，液压渗透通常可被忽略，热拖拽尚缺乏定量描述[12]. 针对反向扩散, 通过Fick定律反推扩散系数; 针对电渗拖曳系数, 通常采用氢同位素(如^{2}H)示踪结合中子成像技术来测定.

水在质子交换膜中的传输过程受多重因素(温度及含水量等)的控制. Chen等人[13]在λ = 3.5、7、12.5、17的Nafion 117模型中，将温度从300 K升至353 K，水分子与H_3O^+的自扩散系数均提高了一个数量级. Li等人[14]通过MD模拟，对比了300与340 K条件下的Fick扩散系数和膜/气相界面传质系数，发现两者均增大近10倍.

1.1.3 气体渗透/交叉模型

气体渗透/交叉是指反应气体在PEM中的非理想跨膜输运过程, 在催化层(catalyst layer, CL)内部产生混合气相、产生寄生电流、造成氮气积累并导致膜组件加速劣化.

跨膜通量可表示为[12]

$$J_i = K_{i,\mathrm{m}}\frac{p_{\mathrm{a}} - p_{\mathrm{c}}}{d_{\mathrm{m}}}, \quad (3)$$

其中, J_i为气体组分i从阳极到阴极跨膜通量($mol\ m^{-2}\ s^{-1}$), $K_{i,\mathrm{m}}$为气体组分i跨膜渗透率($mol\ m^{-1}\ s^{-1}\ Pa^{-1}$); p_{a}和p_{c}分

别是气体组分i在阳极和阴极的分压(Pa); d_m为质子交换膜的厚度(m). Nafion膜对氢气、氧气和氮气的跨膜渗透系数的计算式可见文献[12]. 为减少气体跨膜运输可降低气体的压差、增大膜的厚度、降低气体扩散率.

1.2 催化层模型及数值研究

CL由孔隙、碳载体、催化剂及离聚物组成, 其中离聚物、碳载体及孔隙分别为质子、电子及反应气体提供传输通道. CL内含多级孔隙结构, 氧气传输主要由努森扩散主导. CL内发生着复杂的"气-水-电-热"多物理场耦合传递过程, 其输出性能高度依赖催化层内的能质传递特性, 进而影响燃料电池极化性能. 准确表征CL内部物质传输过程是提升燃料电池性能的重要前提.

1.2.1 催化层宏观尺度传输模型

如图1所示, 现有CL模型包括界面模型、均质模型、团聚块模型和孔尺度模型[15]. 前三种模型为宏观模型, 主要任务是提供电化学反应速率即交换电流的计算式. 孔尺度模型能够捕捉CL微观结构对传输过程的影响, 然而由于其计算量较高, 难以直接集成到燃料电池多物理场耦合模型中. 团聚块模型较均质模型和界面模型能够更加真实地考虑氧气在离聚物内的传输过程, 精度更高, 已得到广泛使用.

界面模型将CL视为无限薄边界, 反应源项以边界条件施加. 均质模型认为CL内各处均匀, 由Bultler-Volmer方程获得交换电流:

$$j = j_0^{\mathrm{ref}} \left(\frac{c_{\mathrm{O_2}}}{c_{\mathrm{O_2}}^{\mathrm{ref}}}\right)\left[\exp\left(\frac{4\alpha_a F}{RT}\eta_{\mathrm{act}}\right) - \exp\left(-\frac{4\alpha_c F}{RT}\eta_{\mathrm{act}}\right)\right], \quad (4)$$

式中, j和j_0^{ref}分别称为交换电流密度与参考交换电流密度(A m^{-3}), $c_{\mathrm{O_2}}$和$c_{\mathrm{O_2}}^{\mathrm{ref}}$分别为孔隙中氧浓度及参考浓度(mol m^{-3}), α为交换系数, η_{act}为阴极活化过电势(V), R、T和F分别为气体常数(J mol^{-1} K^{-1})、温度(K)和法拉第常数(C mol^{-1}). 团聚块模型采用离聚物内氧气浓度或铂表面氧气浓度计算电化学反应速率, 这些浓度的获得需要耦合式(4)与氧气传质模型. 常规团聚块模型通过定义团聚块有效因子E_r描述团聚块内的电化学反应速率而获得交换电流:

$$j = E_r j_0^{\mathrm{ref}} \frac{c_0}{c_{\mathrm{O_2}}^{\mathrm{ref}}}\left[\exp\left(\frac{4\alpha_a F}{RT}\eta_{\mathrm{act}}\right) - \exp\left(-\frac{4\alpha_c F}{RT}\eta_{\mathrm{act}}\right)\right]. \quad (5)$$

该模型无法考虑薄膜和铂分布对氧气传输的影响. 通过假定氧气在薄膜内的一维传输通量与电化学反应通量相等, 可获得修正后的团聚块模型[16]. 为克服该模型认为催化剂在碳载体表面均匀分布这一缺点, 研究者通过孔隙尺度格子Boltzmann方法(lattice Boltzmann method, LBM), 重新定义了膜内氧气的真实传递路径, 获得了修正的离散结构模型的局部传质阻力R_{Pt} (s m^{-1})与电化学反应速率的关系[17]:

$$j = 4F a_{\mathrm{Pt}}(1-\theta_{\mathrm{PtOH}})(c_0 - K c_{\mathrm{Pt}}) / R_{\mathrm{Pt}}, \quad (6a)$$

$$j = (1-\theta_{\mathrm{PtOH}})(1-s_{\mathrm{lq}}) j_0^{\mathrm{ref}} \left(\frac{c_{\mathrm{Pt}}}{c_{\mathrm{O_2}}^{\mathrm{ref}}}\right)^{\gamma} \exp\left(-\frac{4\alpha_c F}{RT}\eta_{\mathrm{act}} - \frac{\beta\theta_{\mathrm{PtOH}}}{RT}\right), \quad (6b)$$

式中, θ_{PtOH}表示催化剂表面氧化物覆盖度, K为离聚物表面氧气分配系数. 采用该团聚模型, 能够完全捕捉到不同CL结构参数(如混合碳比例、铂碳比以及离聚物含量)影响下的氧气传质阻力. Zhang等人[18]提出一种考虑CL内碳颗粒接触和重叠影响的颗粒重叠结构模

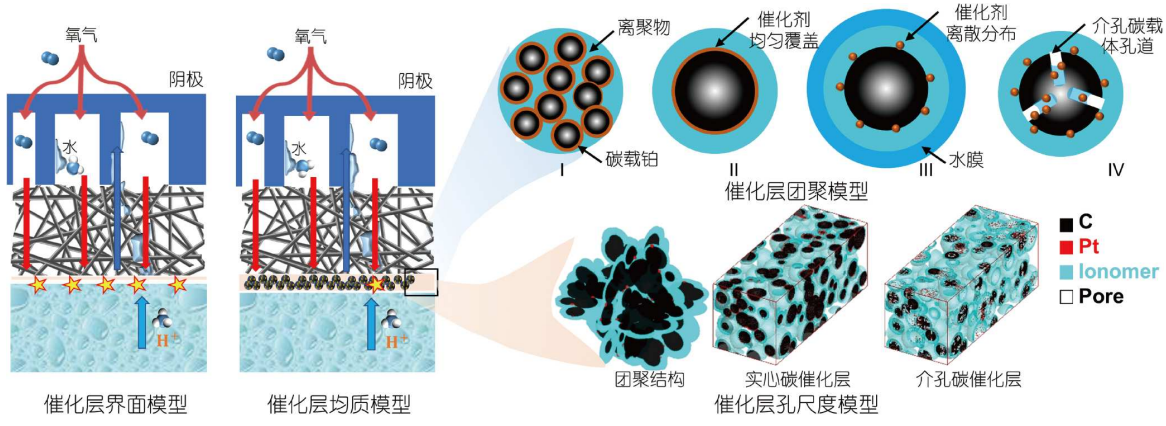


图 1 催化层模型: 包括界面模型、均质模型、团聚块模型和孔尺度模型

Figure 1 Catalyst layer model, including interface model, homogenous model, agglomeration model and pore scale model

型. 上述团聚块模型未能考虑电子、质子之间的协同作用. 构建考虑真实CL微观结构的物理模型, 有望为探究低铂高性能CL的设计提供更精细的指导.

1.2.2 催化层孔隙尺度传输模型

CL的重构方法包括有序重构、随机重构、图像重构和函数重构. 针对孔隙尺度下CL内各功能组分界面之间存在的复杂的氧气传输、质子传递、电子传输和电化学反应耦合传递过程, Mu等人[19]提出了统一的耦合界面数值处理方法. 在介孔碳载体微孔内, 水蒸气发生毛细凝聚可为质子传递提供通道. Zhang等人[20]提出了一种亚格子尺度的液膜处理方法. Cetinbas等人[21]采用孔隙尺度模型发现, 考虑努森扩散机制时, 氧气有效扩散系数和质子电导率远低于采用Bruggeman方程的预测值, 并探究了介孔碳在不同相对湿度下的局部传质阻力. Mu等人[19,22,23]采用CL孔尺度模型探究了气体传质阻力的来源机理. Li等人[24]分析了介孔碳载体形貌及铂分布对电池性能的影响, 并基于机器学习方法优化获得了最优的碳载体结构.

目前, 研究学者在CL孔隙尺度模型研究方面已取得了显著的成果, 获得了CL结构参数对CL输运特性参数和氧气局部传质阻力的影响规律. 然而, 鲜有研究全面考虑CL内发生的热-质-电多相多物理场耦合传递过程. 孔隙尺度向宏观尺度的传递过程仅为单向传递, 宏观模型预测得到的空间物理量分布难以实时传递到孔隙尺度模型.

1.3 气体扩散层模型及数值研究

气体扩散层(gas diffusion layer, GDL)是PEMFC的关键组件之一. 主流的GDL是以纤维为基质的多孔介质, 其厚度约为200 μm, 孔隙率范围为0.6~0.9. 在平面内(in-plane, IP)和垂直平面(through-plane, TP)两个方向上, GDL的输运性质呈现出各向异性. GDL的作用包括: (1) 传递气体和液态水; (2) 传导电子和热量; (3) 支撑CL和微孔层(micro pore layer, MPL), 为PEMFC组装提供压缩空间. 这三大功能背后所蕴含的物理现象彼此耦合. GDL作为多孔介质, 其模型同样包括基于体积平均法的宏观模型和基于真实结构的孔隙尺度模型, 前者所需计算资源少、计算速度快但无法描述孔隙尺度细节, 而后者精度更高但所需计算资源大.

1.3.1 气体扩散层宏观尺度传输模型

宏观电池模型中GDL需要求解多个控制方程, 如气体混合物质量方程、动量方程、组分方程、能量方程等. GDL中水管理为关键问题, 此处给出液压方程:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_{\mathrm{lq}}\varepsilon s_{\mathrm{lq}}) = \nabla\cdot\left(\rho_{1\mathrm{q}}\frac{Kk_{\mathrm{lq}}}{\mu_{\mathrm{lq}}}\nabla p_{\mathrm{lq}}\right)+S_{\mathrm{lq}}, \tag{7}$$

式中, ρ_{lq}为液态水密度(kg m^{-3}), ε为GDL孔隙率, K为GDL的绝对渗透率(m^2), k_{lq}为液态水的相对渗透率, μ_{lq}为液态水的动力黏度(Pa s), p_{lq}为液态水压力(Pa), S_{lq}为液态水的质量源项(kg m^{-3} s^{-1}). 式(7)中的气液相变源项表示如下:

$$S_{\mathrm{lq}} = S_{\mathrm{v-l}} = \begin{cases}\gamma_{\mathrm{v-l}}\varepsilon\left(1-s_{\mathrm{lq}}\right)(c_{\mathrm{H_2O}}-c_{\mathrm{sat}})M_{\mathrm{H_2O}} & c_{\mathrm{H_2O}}>c_{\mathrm{sat}}\\ \gamma_{\mathrm{l-v}}\varepsilon s_{\mathrm{lq}}(c_{\mathrm{H_2O}}-c_{\mathrm{sat}})M_{\mathrm{H_2O}} & c_{\mathrm{H_2O}}<c_{\mathrm{sat}}\end{cases}, \tag{8}$$

式中, $\gamma_{\mathrm{v-l}}$为水的气液相变速率(s^{-1}), s_{lq}为液态水饱和度, $c_{\mathrm{H_2O}}$为局部水蒸气摩尔浓度(mol m^{-3}), c_{sat}为局部饱和水蒸气浓度(mol m^{-3}), $M_{\mathrm{H_2O}}$为水的摩尔质量(kg mol^{-1}).

式(7)中的p_{lq}与毛细压力有关. 文献中常用Leverett-J方程描述毛细压力-饱和度变化[25]:

$$p_{\mathrm{c}} = p_{\mathrm{g}}-p_{\mathrm{lq}} = \sigma\cos\theta\left(\frac{\varepsilon}{K}\right)^{0.5}J(s_{\mathrm{nw}}), \tag{9}$$

$$J(s_{\mathrm{nw}}) = 1.42s_{\mathrm{nw}}-2.12s_{\mathrm{nw}}^2+1.26s_{\mathrm{nw}}^3, \tag{10}$$

式中, p_{c}为毛细压力(Pa), p_{g}为气相压力(Pa), σ为液态水表面张力系数(N m^{-1}), θ为接触角(°), s_{nw}为非润湿相的饱和度, 对于疏水GDL, $s_{\mathrm{nw}}=s_{\mathrm{lq}}$, 对于亲水GDL, $s_{\mathrm{nw}}=1-s_{\mathrm{lq}}$. 该方程用一个整体的接触角值描述多孔介质内的润湿性.

宏观模拟中, 液相的相对渗透率为s_{lq}^n, 气相的相对渗透率为$(1-s_{\mathrm{lq}})^n$. Hwang等人[26]的研究发现碳纸型GDL的TP方向的幂次值n在3.5~4之间, 而IP方向幂次较小, 在1.5~2.5之间. Kumbur等人[27]提出了下列方程来描述多孔介质内的毛细压力-饱和度关系:

$$p_{\mathrm{c}} = 2^{0.4C}\sigma\left(\frac{\varepsilon}{K}\right)^{1/2}K(s_{\mathrm{nw}})\quad \theta<90°, \tag{11}$$

$$K(s_{\mathrm{nw}}) = \begin{cases}(\mathrm{wt\%})\left[0.0469-0.00152(\mathrm{wt\%})-0.0406s_{\mathrm{nw}}^2\right.\\ \left.+0.143s_{\mathrm{nw}}^3\right]+0.0561\ln s_{\mathrm{nw}},\ 0<s_{\mathrm{nw}}\leqslant 0.50\\ (\mathrm{wt\%})\left[1.534-0.0293(\mathrm{wt\%})-12.86s_{\mathrm{nw}}^2\right.\\ \left.+18.824s_{\mathrm{nw}}^3\right]+3.416\ln s_{\mathrm{nw}},\ 0.50<s_{\mathrm{nw}}\leqslant 0.65\\ (\mathrm{wt\%})\left[1.7-0.0324(\mathrm{wt\%})-14.1s_{\mathrm{nw}}^2\right.\\ \left.+20.9s_{\mathrm{nw}}^3\right]+3.79\ln s_{\mathrm{nw}},\ 0.65<s_{\mathrm{nw}}<1.00\end{cases}, \tag{12}$$

式中, C为压缩时给GDL的压力(MPa), wt%为聚四氟乙烯(polytetrafluoroethylene, PTFE)质量分数.

1.3.2 气体扩散层孔隙尺度传输模型

实际的GDL结构中同时存在亲水、疏水表面, Leverett-J函数以单一的接触角描述整个结构内的润湿特性不能准确表征GDL内部的流动过程. 自2007年以来LBM逐渐成为GDL孔隙尺度模拟的主要方法. Wang等人[28]基于LBM模拟发现PTFE含量的双层和三层分布相对于均匀分布更有利于排水; Guo等人[29]发现通过提高GDL-MPL界面上的疏水性, 可提高PEMFC性能.

液态水在GDL中的水淹现象主要通过毛细压力-饱和度曲线描述, 该曲线是PEMFC宏观模型封闭所必需的方程. Hao与Cheng[30]通过LBM基于孔隙尺度模型模拟了GDL结构的毛细压力-饱和度曲线, 证明了LBM模拟能提供比Leverett-J函数更好的预测结果, 并提出了一个改进后的毛细压力-饱和度预测方程. Li等人[31]模拟了GDL结构内渗水过程, 发现相对有效热导率随着饱和度线性上升, 而相对有效扩散系数与饱和度呈指数关系.

2 单电池宏观模型及数值研究

本节将对单电池宏观尺度相关的传递与性能仿真研究展开论述. 由于有限容积法(finite volume method, FVM)具有严格满足物理守恒性和兼容复杂几何与非结构化网格的优势, 是求解PEMFC中输运过程最合适的数值方法. 本章下述单电池的相关数值仿真研究, 除特别说明外均基于此方法实施.

2.1 气体流道排水模型

PEMFC中生成的液态水最终通过气体通道排出PEMFC. 界面捕捉和界面追踪方法成为研究气体通道中液态水动态行为的有力工具[32]. 针对促进液态水排出的气体通道结构优化, 已有诸多文献报道. 例如, Zhang等人[33]研究了弯曲的正弦构型通道、波纹型+子通道流道、挡风板和引流板设计等. Ashrafi等人[34]针对Z型平行流道研究了原始结构和改进型(在进出口采用楔形通道及挡板)中的两相流动, 发现改进通道中水分布更均匀, 显著降低了压降和寄生功耗. Bao等人[35]重构了丰田第一代Mirai中采用的三维精细网格流场板并开展两相流仿真, 发现除了极低空气流速条件外, 液态水在空气吹扫下均能够附着在挡板表面并移动至挡板上方, 避免GDL表面被液态水覆盖. Lv等人[36]建立了包含三维精细网格流场板和GDL多孔结构的计算区域, 发现精细网格流场能够显著降低气体通道和GDL中的液态水饱和度, 进而缓解了水淹. Zhang等人[33]的研究发现渐缩-渐扩流道使反应气体流速增大, 液滴排出时间较传统直流道明显缩短. Chen等人[37]构建了一个包含气体通道、GDL和CL的半电池模型, 详细研究了进口速度、润湿特性等对氧气浓度及电流密度分布的影响.

2.2 单电池宏观尺度多物理场耦合模型

PEMFC工作过程包括复杂的多物理场、多尺度耦合传输过程. 若仅关注单电池内的某种特性则可相应地简化, 见Zhang等人[38]的工作. 本节针对PEMFC多物理场耦合模型展开讨论.

2.2.1 不同空间维度的PEMFC宏观尺度模型

PEMFC宏观耦合机理模型可分为零维(0D)、一维(1D)、二维(2D)和三维(3D). 为兼顾计算耗时与物理场精细程度, 近年来亦出现了一些1D+1D、2D+1D或3D+1D的混合模型[39]. 此处仅对前述四种模型展开论述.

0D模型即集中参数模型, 仿真耗时短, 多用于系统控制[40]、热力学分析等. 0D模型通过经验公式表征电池内活化、浓差和欧姆损失, 其中的经验参数由实验数据标定获得. PEMFC 1D机理模型最早由Springer[11]提出, 有关文献及其应用可见Wang等人[41]的工作. 近年来陆续发展出各类型的准2D(1+1D)及2D模型以考虑流场板-膜电极间耦合输运过程. 准2D模型仅在TP方向上开展数值计算, 而在另一维度则解析求解. 多数准2D模型中, 除膜电极厚度方向还增加沿流道方向这一维度. 有关研究可见Keller等人[42]的工作. PEMFC 3D机理模型能够准确考虑电池内各方向上的物理量传递过程, 是保真度最高的单电池宏观尺度模型. 表1中列出了采用两流体模型的PEMFC 3D模型的控制方程组, 详细含义见文献[43]. 各物理场的传递过程由对应的控制方程描述, 通过源项和输运参数等实现相互耦合.

对表1需要指出三点: (1) 本表中以求解变量来命名各控制方程, 也可以从各种守恒原理来命名, 详见文献[44]. (2) 在电子势、质子势的源项中会出现阴阳极的交换电流, 其确定方法见节1.2. (3) 就控制方程的计算区域而言, 有整场(全流场板)及典型单元两种. 文献[45]对于蜿蜒流道与扩缩流道, 采用典型单元仅需300万网格, 而全场模拟需要2亿多网格, 极化曲线的差别小于2%. 对于不需要获得全场物理量分布的情形, 典型流道模拟是一种可取的方法.

表 1 三维宏观机理模型控制方程[43]

Table 1 Governing equations of the three dimensional macroscopic mechanistic model[43]

物理量	控制方程
气体密度ρ_g	$\frac{\partial}{\partial t}\left[\varepsilon\left(1-s_{lq}\right)\rho_g\right]+\nabla\cdot\left(\rho_g\vec{u}_g\right)=S_m$
混合气体速度	$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\rho_g\vec{u}_g}{\varepsilon\left(1-s_{lq}\right)}\right]+\nabla\cdot\left[\frac{\rho_g\vec{u}_g\vec{u}_g}{\varepsilon^2\left(1-s_{lq}\right)^2}\right]=-\frac{2}{3}\mu_g\nabla\left\{\nabla\cdot\left[\frac{\vec{u}_g}{\varepsilon\left(1-s_{lq}\right)}\right]\right\}+S_u$ $-\nabla p_g+\mu_g\nabla\cdot\left\{\nabla\left[\frac{\vec{u}_g}{\varepsilon\left(1-s_{lq}\right)}\right]+\nabla\left[\frac{\vec{u}_g^{\,T}}{\varepsilon\left(1-s_{lq}\right)}\right]\right\}$
组分质量分数Y_i	$\frac{\partial[\varepsilon(1-s)\rho_g Y_i]}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho_g\vec{u}_g Y_i\right)=\nabla\cdot\left(\rho_g D_i^{eff}\nabla Y_i\right)+S_i$
电子势ϕ_{ele}	$0=\nabla\cdot\left(\kappa_{ele}^{eff}\nabla\phi_{ele}\right)+S_{ele}$
质子势ϕ_{ion}	$0=\nabla\cdot\left(\kappa_{ion}^{eff}\nabla\phi_{ion}\right)+S_{ion}$
液态水压力p_{lq}	$\frac{\partial(\rho_l\varepsilon s_{lq})}{\partial t}=\nabla\cdot\left(\rho_l\frac{Kk_{lq}}{\mu_{lq}}\nabla p_{lq}\right)+S_{lq}$
液态水饱和度s_{lq}	$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon s_{lq}\rho_l)+\nabla\cdot\left(\rho_l\frac{\mu_g}{\mu_l}\frac{K_l}{K_g}u_g\right)=\nabla\cdot\left(\rho_l D_{lq}\nabla s_{lq}\right)+S_{lq}$(多孔电极) $\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon s_{lq}\rho_l)+\nabla\cdot\left(\rho_l\vec{u}_l\right)=S_m$(流道)
膜态水λ_{mw}	$\frac{\rho_{MEM}}{EW}\frac{\partial(w\lambda_{mw})}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\frac{n_d}{F}\nabla I_{ion}\right)=\frac{\rho_{mem}}{EW}\nabla\cdot(D_{mw}^{eff}\nabla\lambda_{mw})+S_{mw}$
温度T	$\frac{\partial\left[(\rho c_p)^{eff}T\right]}{\partial t}+\nabla\cdot\left[\left(\rho C_p\vec{u}\right)^{eff}T\right]=\nabla\cdot(k^{eff}\nabla T)+S_E$

2.2.2 *宏观尺度模型中的两相流动建模*

早期模型往往忽略液态水的存在. 如Liu等人[2]较早地建立了单相等温模型. 笔者团队[1]在2006年提出, 在大电流密度下, 采用两相模型能够更好地反映电池在大功率下的性能. Wang等人[46]首次在PEMFC模拟中使用了混合模型, Berning和Djiali[47]采用了双流体模型, 并通过定义相变速率来计算非平衡水相变.

在两流体模型中, 对多孔电极内液态水在界面的条件可基于液态水饱和度守恒或液态水压力守恒. 前者以液态水饱和度作为求解变量在GDL和CL等不同区域内连续变化. Wu等人[48]进一步完善了膜电极中水分子生成和转化的建模方式. Meng[49]指出不同多孔区域间在界面处应满足液态水通量和液态水压力连续的条件. Zhang等人[50]开发的3D多相模型中均采用了在不同多孔层界面处气体和液体压力及其差(即毛细压力)连续. 宏观模型中多孔层界面处液态水压力连续已逐渐成为共识.

早期模型中通常假设流道内液态水可快速排出, 流道内气体单相流动而液相体积分数为0[50]. Jiao等人[3]将通道视为多孔介质并应用两相达西定律描述了流道内的多相流. Zhang与Jiao[51]进一步在流道内引入了Eulerian-Eulerian模型考虑流道内气液两相间的拖曳力等.

2.2.3 *宏观尺度模型的其他改进与发展*

除两相流动建模外, 大量学者也对3D两相模型做了其他相关改进发展, 如Inagaki等人[52]对气液相变速率与湿度提出修正等. 宏观性能模型仍有许多细节待完善, 如描述液态水在多孔电极内传输的毛细力-液态水饱和度的Leverrete-J关联式最早是根据液态水在松散砂砾中的传导总结得到的经验公式, 至今仍被广泛采用. 近年来许多学者对此提出了新的计算式, 这方面亟待进一步的改进完善.

2.3 单电池宏观尺度模型的验证及应用

在应用上述单电池宏观尺度多场耦合模型开展设计分析前, 需对模型准确性进行验证. PEMFC极化曲线

是多物理场耦合作用的综合结果，也是应用中最常见的性能表征手段. 随着分区测试技术的进步，对PEMFC内多种物理量空间分布的验证正逐渐得到重视，可见Xie等人[39]的工作. 经过充分验证的仿真模型，可应用于设计，简要举例如下:

(1) 流场板型式的设计. 流场板具有收集电流、排出液态水、导出热量、分配反应气体等关键传输功能. Zhang等人[33]按照流道中是否有垂直方向的扰流结构，将流场分为2D流场、3D流场和变截面流场、泡沫金属流场[53]. Kahraman与Coban[54]报道了利用数值仿真改进流场板设计的研究. 3D流场与变截面流场可促进反应物进入多孔电极，可见Zhang等人[33]的工作. 当前对大面积流场板的研究日益得到重视，大面积流场板由主流区、分配区和汇合区构成，这方面的研究可参见Zhang等人[55]的工作.

(2) 膜电极和操作参数的分析优化. 应用单电池宏观尺度多场耦合模型可探究膜电极孔隙特征、材料特性等对性能的影响，可参见He等人[43]的研究. 探明各操作参数对PEMFC性能的影响是进一步开展优化的前提，有关数值研究可见Zhang等人[56,57]和Bai等人[58]的结果. PEMFC机理模型包含了大量的膜电极和操作参数，但相关参数的选取仍缺乏统一标准，尤其是在极化曲线的验证过程中，在不同极化阶段主导电池性能的参数亟待明确.

3 单电池多尺度模型及数值研究

PEMFC中发生的多场耦合过程呈现典型的多尺度特性，空间尺度跨越了8~9个数量级. 由于网格量巨大，难以在单电池尺度考虑CL、MPL、GDL的详细微观结构. 因此，需要发展多尺度模拟的方法. 根据Tao与He的研究[59]，流动与传热的多尺度问题可分为多尺度系统(如数据中心中的流动与传热)及多尺度过程(如燃料电池中的传递过程)两大类. 在多尺度过程中，不同尺度区域有不同的数值模拟方法，数值求解方法有“分区计算、界面耦合”和“分层计算、尺度提升”. 下面简要介绍之.

(1) 分区计算、界面耦合的多尺度方法. “分区计算、界面耦合”方法分别采用不同的数值方法模拟不同的子区域，在子区域的交界处交换信息. 譬如Chen等人[60]采用FVM方法模拟气体通道中的流动传质过程，用LBM模拟GDL和CL中的过程. 此法的关键在于不同求解子区域界面上的信息交换: 在FVM中求解的是宏观量，如速度、压力、温度、浓度等，而在LBM中求解的是各类分布函数. 基于上述思路，Shimpalee等人[61]进行了类似的研究. 此法的缺点在于整体计算区域的大小受到严重限制，计算区域的尺寸离工程实际需求还有很大差距.

(2) 分层计算、尺度提升的多尺度方法. 研究PEMFC这种多尺度过程更为有效的方法是“分层计算、尺度提升”. 在这种方法中，先用微纳尺度数值模拟研究微纳组件中的反应输运过程；随后基于微纳尺度的结果进行统计平均，获得相应的亚网格模型或关联式；最后将上述模型或者关联式提升到PEMFC宏观模型中，进而提升宏观尺度模型的准确性. PEMFC宏观方程中有很多的经验参数或者经验关联式，包括宏观输运系数、毛细力-饱和度关联式、相变速率-压力差(或温度差)关联式等. 这些经验参数或者模型原则上均可以通过微细尺度的数值仿真获得. Fang等人[62]进行了相关研究. “分层计算、尺度提升”方法也是提供宏观方程中的源项的途径，相关工作可见Zhang等人[63]的研究. 这种方法在电池老化方面也有应用，Zhang等人[64]开展了相关研究，见图2.

4 电堆模型及数值研究

PEMFC的单电池输出电压较低，在1 V以内. 在PEMFC实际商业应用中，通常需要数十至数百片单电池串联组成电堆(图3)，以保证所需的输出功率. 本节介绍因单电池串联组装成电堆而产生的问题，包括装配力作用的数值分析和电堆的一致性分析.

4.1 装配力作用

本节将按照不同尺度，依次论述在PEMFC关键器件、单电池和电堆层级装配力的数值分析现状和进展.

(1) 装配力对PEMFC关键部件的影响. PEMFC端板是装配力作用的直接承力部件. Zhang等人[65]引入拓扑优化使端板质量显著减轻，同时保持了足够的刚性和应力分布均匀性. Yao等人[66]通过对不同橡胶材料开展老化试验分析，筛选出在压缩永久变形等方面表现出色的密封材料. Yang等人[67]提出一种交错匹配的双极板设计，可减少装配误差对电池性能的影响.

膜电极是装配力影响下最受关注的区域. CL和PEM在装配力作用下应变量较小(不超过10%)，二者的裂纹拓展、溶胀行为是力学研究的重点，这里不再展开. GDL占据膜电极90%以上厚度，且其弹性模量(小

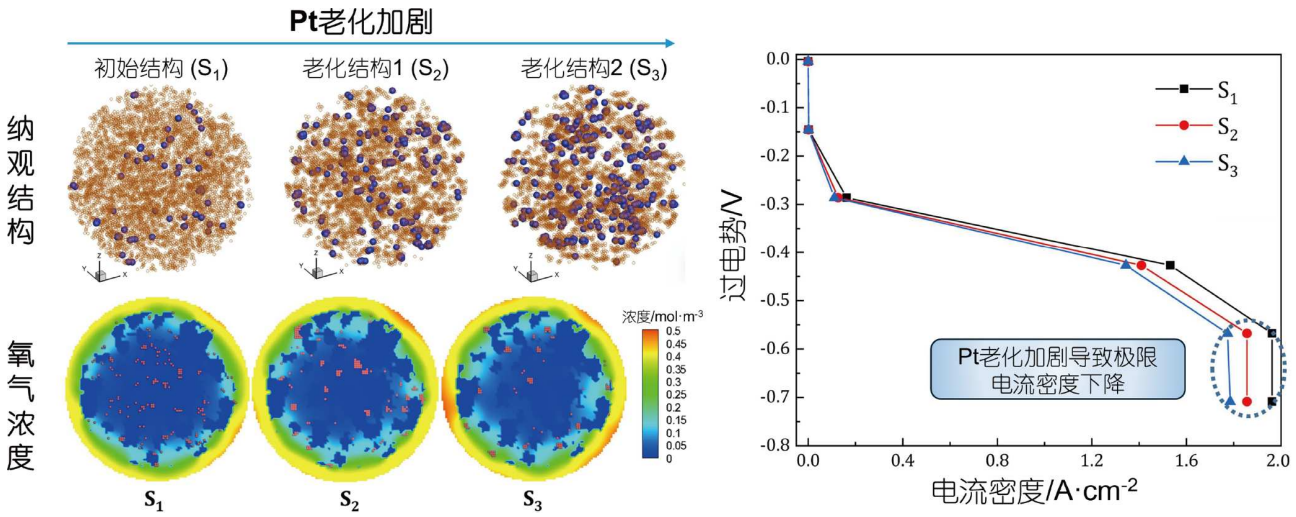


图 2 采用多尺度方法研究阴极催化层内Pt颗粒老化对电池宏观性能的影响[64]

Figure 2 Investigation of the impact of the Pt particle degradation in cathode catalyst layer on the PEMFC performance using multiscale methodology[64]

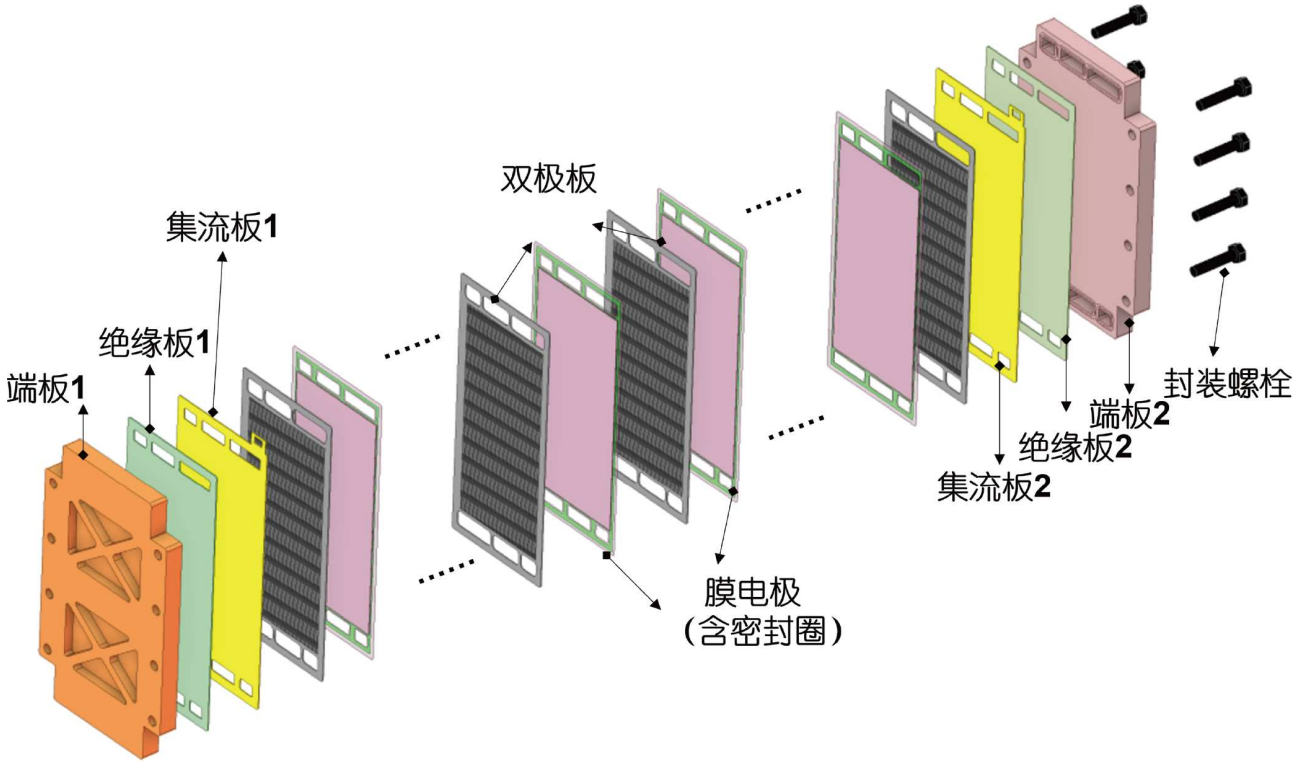


图 3 质子交换膜燃料电池堆装配示意图

Figure 3 Assembly diagram of proton exchange membrane fuel cell stacks

于10 MPa)远低于PEM(200~300 MPa)和双极板(GPa量级)，大量装配力研究集中在此. GDL为长径比碳纤维层状堆叠构成的薄片状结构，是典型的各向异性材料，其垂直方向杨氏模量远低于面内方向. 多数数值仿真中忽略其微结构而将其视作整体，此时获取准确的GDL材料属性至关重要. Zhang等人[68]基于随机碳纤维堆积微结构，构建了弹性力学模型，率先揭示了碳纸中孔隙和碳纤维接触引起的非线性应力应变规律.

(2) 装配力对单电池性能的影响. 装配力对单电池性能影响显著. Zhang与Tao[69]取单流道作为典型单元, 研究封装载荷引起传输机理变化, 发现封装的影响与是否考虑接触电阻有很大关系. Sun等人[70]仿真表明最优组装力需考虑GDL结构变形和接触电阻的综合影响.

(3) PEMFC电堆装配研究. Carral与Mélé[71]建立了电堆三维模型, 研究电堆装配力对膜电极机械状态的影响. Zhang等人[72]提出了一种基于代表性体积单元RVE方法的等效建模方法, 仿真结果与试验结果吻合良好.

4.2 三腔分配均匀性

在PEMFC电堆中, 氢气、空气和冷却液分别由总入口流入, 经歧管分配后到达各片电池[73]. 流量分配的不均匀会导致PEMFC内出现局部缺气、局部温度升高等现象, 对输出特性造成不利影响. 同时, 考虑到木桶效应, 分配不均匀会进一步影响整堆寿命. 电堆中气体分配均匀性建模分析方法有流动网络模型、一维连续介质模型和计算流体动力学(CFD)模型三种.

流动网络模型是一种集中参数模型, 它通过将电堆内流动管路网络比拟为电路网络对分配进行建模, 可参见Xian等人的有关研究[74], 此法被学者广泛使用. 一维连续介质模型通过建立一维微分方程来展开分析研究, 由Costamagna等人[75]引入到PEMFC研究中, 求得的解析解与数值仿真的结果吻合较好. Wang获得了U型方案[76]和Z型方案[77]下分配特性的解析解, 采用三个通用参数揭示了各种流动条件和几何形状组合下电堆的分配特性. CFD模型基于所建立的包含分配歧管的整个电堆的多维模型, 从数值结果中统计获得各片单电池分配的流量. 各片单电池通常不分辨其详细流道结构, 简化为多孔介质区域. Chen等人[78]用二维CFD模型进行研究, 发现提高单电池阻力、提高歧管宽度及降低化学计量比有利于提高电堆流量分配的均匀性. Dong等人[79]设计了一种树型空气腔分配歧管, 分配均匀性达到约0.985~0.992. Chen等人[80]分别采用田口方法、人工神经网络和多元自适应样条回归函数(multivariate adaptive spline regression, MARS)等方法优化电堆尺寸. 结果显示, 人工神经网络和MRAS预测所得压力均匀性的相对偏差较低. Huang等人[81]通过几何结构控制各片单电池内的阻力, 将U型和Z型空气腔的分配均匀性分别提高了85%和25%. Bai等人[73]分析优化了不同偏心度和辐角的金属端头下的水腔分配均匀性, 优化后的结构分配均匀性改善了4.04倍. 随后他们考虑电化学反应消耗的氢气和生成的水蒸气, 开发了氢气腔分配仿真模型[82].

针对三腔均匀性仿真研究, 流动网络模型和一维连续介质模型所需计算资源较少, 其中所考虑的各种现象均源于流体力学机理, 但基于它们的研究难以考虑电堆金属端头. 考虑金属端头后, 分配歧管中可能出现漩涡, 且漩涡状态及其对分配均匀性的影响受多种因素影响. 计算流体动力学模型对电堆中漩涡等复杂流动现象的考虑更全面准确, 但所需计算资源较大.

4.3 整堆性能仿真

受计算资源的限制, PEMFC三维多物理场耦合仿真多集中在典型单元尺度至单电池尺度, 而电堆尺度的仿真研究集中在歧管中的流动分配现象. 仅对分配特性的研究不能完全指导商用规模PEMFC电堆的开发. 现有电堆的仿真模型包含三维整体模型和多尺度模型两类.

三维整体模型是指采取上面介绍的三维场仿真模型直接对整个电堆展开分析. 受限于计算资源、稳定性和收敛性等, 现阶段相关研究通常对活化面积较小、片数较少的电堆进行. Liu等人[83]将流道区域简化为多孔介质, 分析了一款活化面积为8 cm^2、六片单电池的风冷电堆的热管理特性. Shimpalee等人[84]基于均相模型, 对一个包含6片单电池的双蛇形流道的小型电堆进行全三维仿真. 近年来, 随着高性能计算机的普及, 越来越多的学者采用三维整体模型对电堆内的输运过程展开分析. 例如, Zhang等人[85]采用基于液体压力连续的三维两相非等温模型, 对一个活化面积为50.4 cm^2的包含5片单电池的小型电堆展开了研究, 比较了定温边界和对流换热边界下电堆的性能. 电堆中最高温差达30 ℃, 进而导致电堆中氧气浓度、液态水、电流密度和膜态水分布不均匀. 中部电池较两侧电池性能低, 且与定温边界相比, 对流换热边界下中部电池性能更差. 相关研究还有Zhu等人[86]、Deng等人[87]报道的工作.

电堆的多尺度模型基于三腔分配模型预测出电堆内各片单电池的真实边界条件, 采用单电池尺度的模型预测各片单电池的性能, 进而评估整堆的整体和局部性能. 根据对物理场刻画的保真度, 可分为两大类.

电压预测模型采用三腔分配模型获得的各片电池的实际工作工况, 来预测各片电池的电压[88]. 物理场分析模型在此基础上可以预测各片单电池内的物理场[89,90]. 其中Bai等人[90]基于本征正交分解方法, 构建了代理模型, 采用迭代的方法在电堆尺度仿真中更新流动阻力, 最终实现了164片活化面积为292.5 cm^2的商用规模电堆中各片单电池典型单元内多物理量三维分布.

在PEMFC电堆仿真的研究中尚存在诸多问题. 例如, (1) 针对电堆装配力作用的数值分析, 鲜有从多尺度考虑封装载荷下电堆性能的演化; (2) 针对PEMFC电堆的性能预测, 如何在计算资源可接受的前提下, 仿真获得整个商业PEMFC电堆的完整多物理量分布特性, 是后续研究的一大挑战.

5 运行过程模型及数值研究

本节简要梳理数值仿真在气体吹扫、低温冷启动、余热回收与运行优化等方面的研究现状.

5.1 气体吹扫

当PEMFC在间歇排氢或循环供氢工况运行时, 阴极侧的水和氮气易扩散至阳极使得阳极出现水淹和欠气, 需要对电堆进行吹扫以缓解相应故障; 当PEMFC在低温条件下工作时, 电池内部的水会结冰, 导致冷启动失败. 燃料电池各组件内存在液态水、气态水和膜态水等多种相态水之间的相变与转化过程. 实验测试主要选择质子交换膜高频阻抗(high frequency resistance, HFR)作为吹扫效果的判断依据. HFR不仅取决于膜态水含量, 同时还受到膜的温度及膜的类型影响, 实验方法难以全面揭示燃料电池各组件内部水的状态, 数值仿真可提供更加详细的结果.

PEMFC多孔介质内液态水吹扫速率与液态水饱和度密切相关. 根据液态水在多孔介质内的吹扫过程, 可将其分为三个阶段: 第一阶段为表面蒸发控制机制, 液态水在孔隙内的含量充足, 吹扫速率最快; 随着多孔介质内液态水含量逐渐减少, 液态水的毛细驱动流率与表面蒸发速率相等, 称为恒速蒸发阶段; 当毛细驱动流率不足以满足表面蒸发速率时, 多孔介质内的水仅以表面蒸发为主, 称为蒸发速率衰减阶段.

数值仿真一般假设PEMFC干燥过程按照流道、GDL、CL最后到PEM连续发生. Ding等人[91]开发了一维吹扫分析模型并给出吹扫策略的选取方法. 研究发现, 膜电极干燥过程主要受进口水蒸气流量影响. Mu等人[92]全面探究了吹扫过程中水在不同组件内的排出过程, 发现膜电极的干燥过程主要受进口加湿氮气中水蒸气流量的影响, 膜电极对流排水特性对其影响较小.

研究学者开展了吹扫策略对燃料电池性能的影响研究, 为吹扫过程的优化及电池性能的提升奠定了理论基础. 然而, 鲜有研究全面考虑电堆吹扫过程中进气不一致性对吹扫性能的影响. 吹扫效果方面不仅需考虑HFR, 同时需要考虑吹扫效率和能耗, 可借助人工智能方法开展多目标过程优化, 融合机理和数据模型, 实现吹扫策略的快速制定.

5.2 低温冷启动

零下温度下PEMFC的启动面临巨大挑战, 冷启动能力是当前PEMFC技术研发的重要课题. PEMFC冷启动过程是一个高度非线性的瞬态多相问题, 需要综合仿真模型方可揭示其内部的多物理场耦合机理. Lei等人[93]建立了一维冷启动模型, 同时求解了传质、相变、传热和电化学反应过程. 对于微观尺度模型, He等人[94]通过基于焓法的LBM模拟了燃料电池气体扩散层内冰的融化过程, 揭示了孔隙率、Rayleigh数和Stefan数等参数对融化速率与热传递特性的影响, 为理解PEMFC冷启动中冰的微观相变机制提供了介观尺度依据. 宏观一维模型的相关研究可见文献[93,95]. 宏观二维模型的相关研究可见文献[96]. Luo等人[97]报道了有关宏观三维模型的研究. 他们发现, 边缘电池因散热多而积冰严重, 中间电池结冰相对较慢.

5.3 余热利用

利用PEMFC的产热构成热电联供系统(PEMFC-combined heat and power system, PEMFC-CHP)是近年来的发展趋势, 已经在海水淡化[98]、数据中心[99]及分布式供能[100]等领域得到应用. 我国在2022年发布的《氢能产业发展中长期规划(2021–2035年)》中明确提出: 需根据各地现有能源基础设施条件和经济承受能力, 以因地制宜的原则, 布局PEMFC分布式热电联供设施. 现有部分研究可参见Ning等人[101,102]、Yuan等人[103]、Lyu等人[104]的工作.

5.4 运行过程优化

PEMFC电堆运行的优化涉及以下三个关键问题: (1) 优化目标; (2) 决策变量; (3) 如何实现高效优化.

5.4.1 优化目标

目前采用的优化目标函数有以下几种. (1) 最大功率密度, 定义为单位电极面积所能输出的最大电功率. (2) 燃料利用率与能量利用效率. (3) 性能目标与耐久性目标的协同设定. (4) CFD、数字孪生技术和优化模型相结合的优化框架. 如Bai等人[58]提出了一种以温度、相对湿度、压力和化学计量比为变量对电池性能进行优化的方法, 提出了优化目标的数学表达式. (5) 多目标优化. Li等人[105]结合方差分析、代理模型和非支配排序遗传算法, 定义了系统效率.

5.4.2 决策变量

电堆运行中的参数分为操作参数和控制参数, 这些参数的动态耦合与优化控制直接决定了电堆系统的综合性能表现. 关于操作参数的优化可见Yu等人[106]和Wang等人[107]的研究. 关于控制参数方面的研究可见Lei等人[93]、Chen等人[40,108]、Mu等人[92]的研究, 其中Lei等人[93]关于操作参数对冷启动的影响示于图4中, 其中Case 1到Case 5代表了冷启动时加载电流的不同模式, 例如Case 1代表加载恒定电流的模式.

5.4.3 优化方法

优化方法由数值仿真模型、替代模型和优化算法组成. PEMFC的高效优化涉及两个关键问题: (1) 开发准确高效PEMFC数值模型为替代模型的构建生成数据; (2) 构建准确替代模型. 这方面的研究有Bai等人[58]、Yu等人[106]及Wang等人[107]报道的工作.

6 系统控制模型及数值研究

PEMFC系统主要由PEMFC电堆、氢气/空气供应子系统和热管理子系统等组成. 下文分别简述三类系统的温度控制策略研究进展.

6.1 空冷PEMFC系统

目前应用于空冷系统温度控制的策略包括传统比例积分微分(proportional integral derivative, PID)控制[109]以及自抗扰控制(active disturbance rejection control, ADRC)[110]、滑膜控制(sliding mode control, SMC)[111]等先进方法. 针对空冷电池, 作者团队开发了利用一种人工神经网络技术的径向基函数-反向传播-

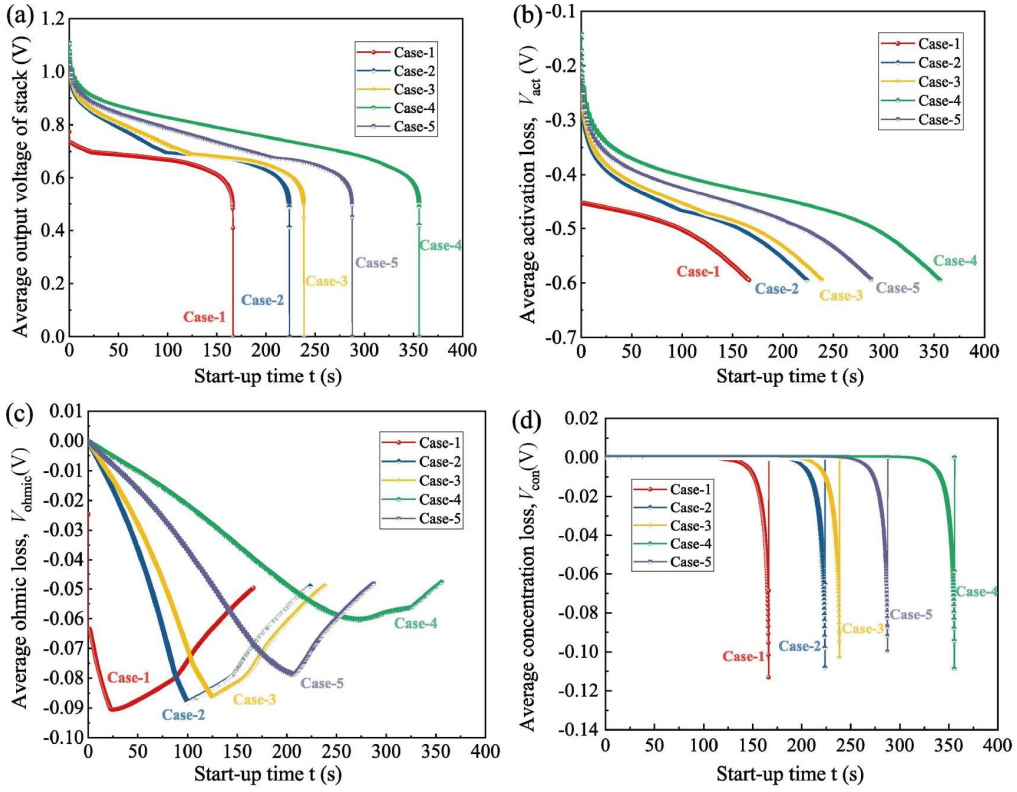


图 4 不同的冷启动控制策略对电堆输出电压(a)、活化损失(b)、欧姆损失(c)及浓差损失(d)演化规律的影响[93]

Figure 4 The impact of different cold start strategies on the evolutions of stack output voltage (a), activation loss (b), ohmic loss (c) and concentration loss (d)[93]

PID(radial basis function-back propagation-PID, RBF-BP-PID)复合控制器[112].

6.2 水冷PEMFC系统

水冷系统需要协调控制水泵和风扇两个执行器以实现双重控制目标[113], 最常用的控制方案是在冷却回路中采用两个PID控制器分别控制水泵和散热风扇. 当对温度控制品质要求提高时, 需引入各类控制算法: 线性二次型调节器(linear quadratic regulator, LQR)、模型预测控制(model predictive control, MPC)、SMC、自适应控制(adaptive control, AC)以及ADRC等. 这些先进控制方法因其对模型的精确性、计算资源和控制器整定等方面要求较高, 在实际工程应用中仍有一定困难. 作者团队探索了一种融合解耦控制和PID控制的实用方案[40], 如图5所示.

6.3 PEMFC热电联供系统

当前针对PEMFC-CHP系统大多侧重于运行参数优化和能量管理以提高总效率[104], 需要开展CHP系统的精准温度控制的研究.

7 高效分析模型及数值研究

本节简要综述如何提升PEMFC分析及优化的效率, 包括人工智能及相似原理.

在整体输出性能预测的角度, 学者获得了输入条件(如操作条件等)与输出性能(如极化曲线、功率密度)的非线性关系, 实现性能的快速预测. Fang等人[114,115]建立的数据驱动模型获得了多孔电极微观结构和燃料电池宏观性能的关系, 并基于遗传算法对多孔电极进行优化, 使得功率密度大幅提升.

为建立物理场与相关参数之间的映射关系, 有机器学习、模态分解、混合降阶模型三种主要模型. 例如, Wang等人[116]结合高保真仿真数据与数据驱动模型, 将三维仿真生成数据库训练代理模型, 实现电流密度、温度等物理量的快速预测, 为实时监控提供了高效工具. 模态分解技术通过构建以物理场特征为基函数的低阶空间, 来实现物理场的降阶, 显著节省了计算时间. Bai等人[73]采用高精度CFD模型仿真获得了不同偏心度下冷却液腔流量分配曲线, 基于本征正交分解(proper orthogonal decomposition, POD)和插值法构建了代理模型, 建立了冷却液腔分配曲线随偏心度的显式关联式. 随后, 他们也采用高精度CFD模型生成了不同极板温度、入口化学计量比下PEMFC多物理场数据库, 基于POD插值[58,90]、机器学习[58,117]、自适应回归[58]等方法构建了典型单元内温度场、膜态水含量场和液态水饱和度场预测的代理模型, 可在1秒内实现物理场的构建. 其中, 基于智能算法和模态分解技术耦合建立的降阶模型[58,117]称为混合降阶模型. PEMFC智能化快速仿真技术通常仅可预测部分物理量, 当前至多

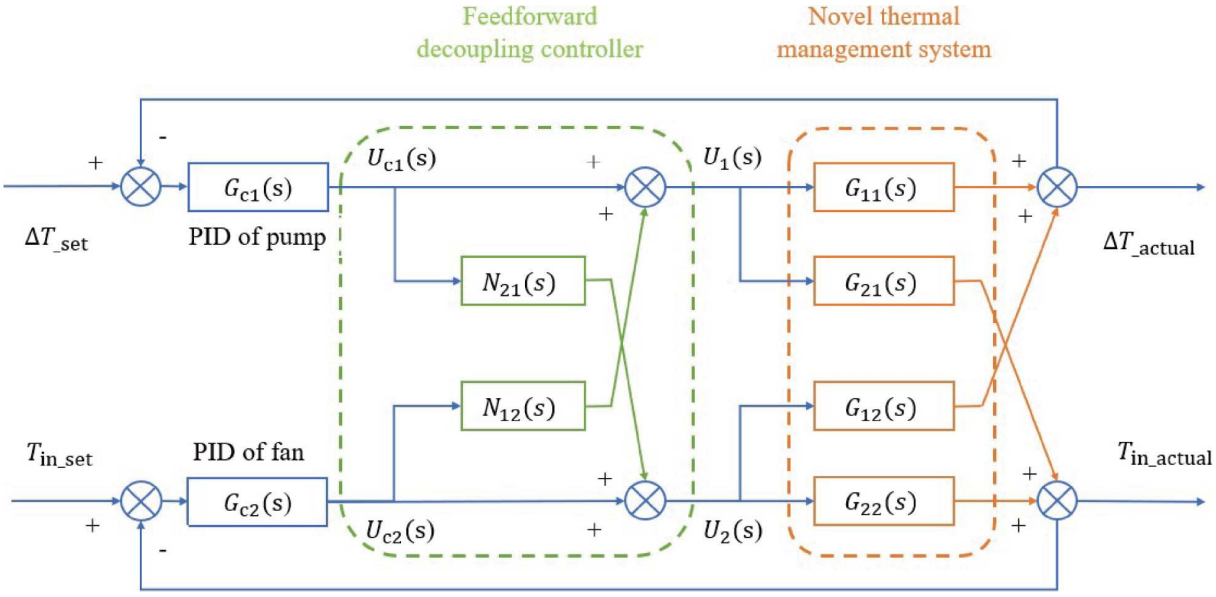


图 5 水冷燃料电池前馈解耦温度控制[40]
Figure 5 Feedforward decoupling temperature control of water cooling proton exchange membrane fuel cell[40]

预测了典型单元内的多物理场，后续研究应关注如何预测更大规模的物理场(如单电池、电堆)、如何提高模型的预测精度及参数规模，并进一步揭示PEMFC参数综合变化对电池输出特性的影响.

PEMFC模型中参数通常达几十个，如何揭示PEMFC输入参数任意变化对输出特性或物理场的影响是一大难题. 相似原理可以将大量的输入参数整理为少量的相似准则数，大大减少实验数量. 近二十年来，学者们针对PEMFC内的多种部件或现象展开了一系列研究[118]，包括流道气体扩散层、膜电极性能、污染特性及电化学动力学的分析等. 近年来，Bai等人[119]针对PEMFC总体输入输出特性开展了研究，对PEMFC的三维单相等温CFD仿真模型开展了相似分析，将数十个输入参数整理为7种输入准则数，验证了所导出的准则数在PEMFC输入输出关系表征中的有效性，见图6. 文献[120]中获得了无量纲极化曲线和活化现象相关准则数的通用映射关联图. 如何整理出和非等温现象、两相流现象相关的相似准则数，并进一步获得无量纲极化曲线随所有输入准则数的通用映射关系，是后续研究的一大挑战.

8 数值方法在大功率电堆开发中的应用实践

研发PEMFC的高效数值模拟方法的根本目的是将其应用于工程开发与制造. 不同于以往相关文章，本综述增加了作者团队与陕西旭氢时代科技有限公司合作开发的“氢跃”系列车用电堆过程中的实践经历，供国内外同行参考.

8.1 电堆开发流程与数值仿真的介入

大型PEMFC电堆的开发一般经历以下五个阶段: (1) 建立模型: 包括单电池电化学模型、传热传质模型及堆级系统模型等; (2) 设计方案: 根据性能指标和约束进行组件和结构设计; (3) 仿真样机: 利用数值仿真手段对设计方案进行虚拟样机测试和优化迭代; (4) 物理样机: 加工制造试验电堆并进行实验测试; (5) 集成验证: 将优化后的电堆集成到系统中进行整车或台架验证. 数值仿真贯穿上述多个阶段并在关键节点介入. 作者团队搭建的PEMFC试制及仿真一体化平台即体现了这种融合，在和陕西旭氢时代科技有限公司合作开发过程中完整实施了上述各个环节. 下面以流场板开及三腔结构改进为例予以说明.

8.2 双极板流场开发中的流场仿真

双极板流场设计影响燃料电池的反应气体分配、水热管理和压降损失，是电堆设计中首先面临的关键问题. 在其设计分析中，基于我们前期的大量研究结果[53,55~57]，提出了传统蜿蜒流场与缩扩相间流场方案. 蜿蜒流场在弯道处形成高速区域，有利于冲刷产水，但末端可能出现供氧不足区域; 相较之下，缩扩流道通过交替收缩和扩张通道截面，在局部产生湍动和次级流，增强了气体传质和液态水带出效果，显著改善了反应气浓度分布和电流密度均匀性. 仿真结果表明，缩扩流场设计下电池发生局部缺氧和积水的区域

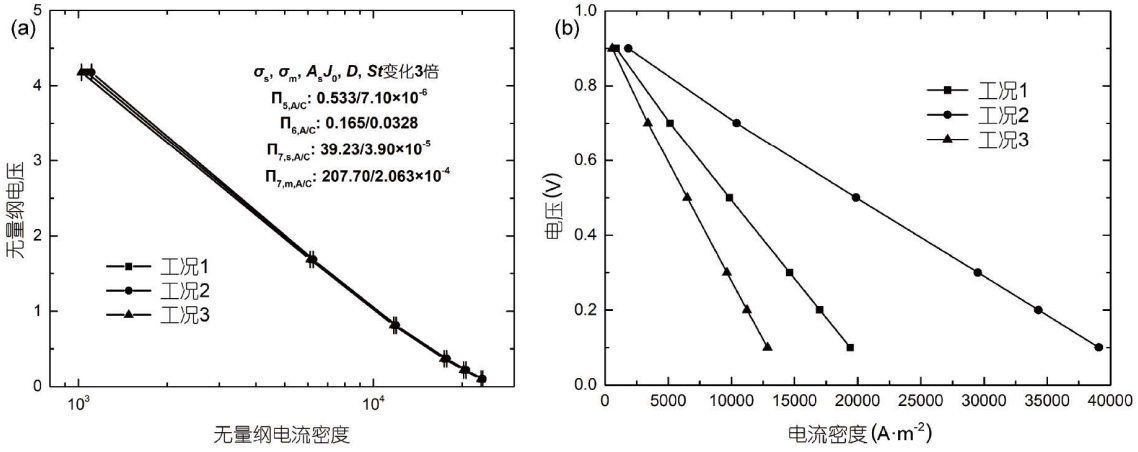


图 6 相似原理所导出准则数在燃料电池输入输出关系表征中的有效性[119]. (a) 无量纲极化曲线; (b) 有量纲极化曲线

Figure 6 Application effectiveness of the derived criteria using similarity theory in the characterization of the correlation between PEMFC input parameters and output parameters[119]. (a) Dimensionless polarization curve; (b) dimensional polarization curve

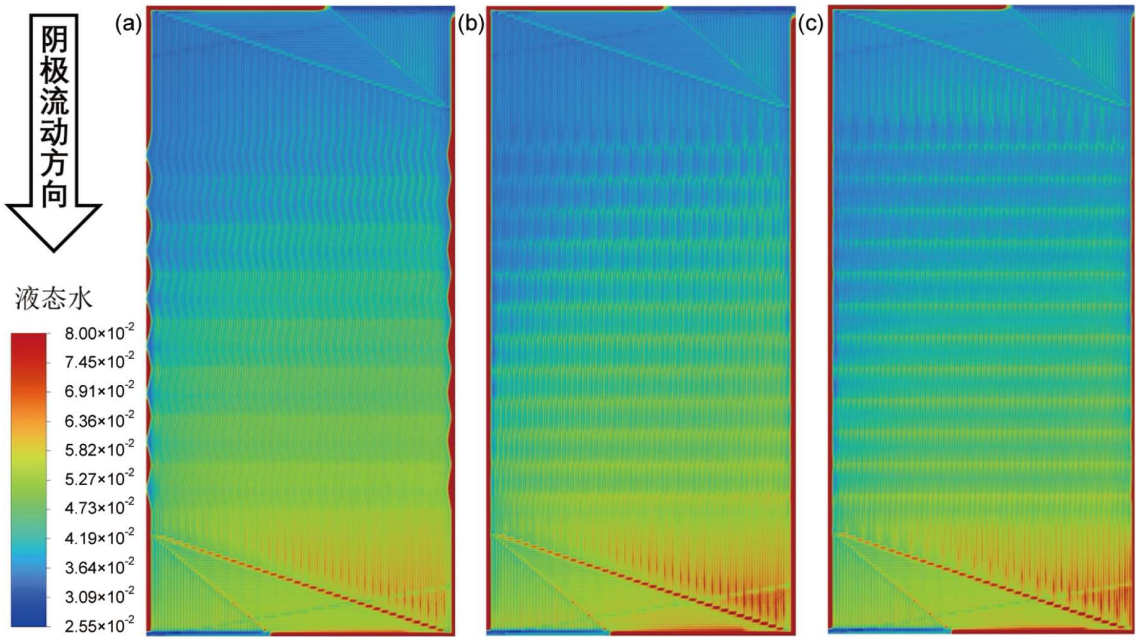


图 7 三种流道燃料电池阴极催化层中间平面液态水饱和度分布(1.8 A cm^{-2}). (a) 蜿蜒流道; (b) 缩扩流道25%; (c) 缩扩流道50%

Figure 7 Liquid water saturation distribution on the middle plane of the cathode catalyst layer for three types of gas flow channel (1.8 A cm^{-2}). (a) Waveform; (b) convergent-divergent pattern 25%; (c) convergent-divergent pattern 50%

明显减少, 平均电流密度提高, 同时在高湿条件下体现出更优的水管理性能. 仿真分析结果(图7)帮助我们定量权衡了流场强化传质与增压降之间的矛盾. 据估算, 在不超过设计泵功的前提下, 新型缩扩流场方案比传统蛇形流场的极限电流提升约两成, 功率密度亦有所提高.

8.3 三腔气体分配仿真与结构优化

在确定了单电池模型和流场设计后, 我们基于以前的研究[73,82]对电堆内部"三腔"流体分配, 即阳极氢气腔、阴极空气腔和冷却液腔在电堆各单池间的流量分配情况进行了仿真. 结果发现, 原始对称设计下靠近空气进口端的电池获得的流量明显高于远端电池, 存在"入口富、末端贫"的偏流现象. 类似地, 冷却液在电堆首末端的温差也由于流量不均而偏大. 针对这一问题, 我们对空气和冷却公用腔体结构进行了优化设计. 一个有效措施是引入"偏心结构[73], 即将空气入口位置相对腔体几何中心适当偏移, 并调整腔体截面形状, 使流场形成非对称分布以补偿原有的偏流. 经偏心优化后, 空气在各层电池间的流量分布更加均匀, 原先末端供气不足的情况大为缓解. 同时, 冷却液进口处也采用了类似偏心导流的设计, 以平衡各电池冷却通道的流量. 仿真计算定量表明, 改进后的空气腔设计使各单电池间空气流量标准差降低了约30%. 通过这一系列三腔分配仿真与优化, 成功将电堆内部气体和冷却分配的不均匀性控制在合理范围内.

致谢 衷心感谢上海汽车集团股份有限公司、上海捷氢科技股份有限公司、上海神力科技有限公司、东方电气(成都)氢燃料电池科技有限公司、氢鹏科技(浙江)有限公司和陕西旭氢时代科技有限公司的合作与资助. 感谢西安交通大学热流科学与工程系郑春宇老师在文献检索及插图版权获取等方面的帮助.

参考文献

1 Liu X, Tan Y, Tao W, et al. A hybrid model of cathode of PEM fuel cell using the interdigitated gas distributor. Int J Hydrogen Energy, 2006, 31: 379–389

2 Liu X, Tao W, Li Z, et al. Three-dimensional transport model of PEM fuel cell with straight flow channels. J Power Sources, 2006, 158: 25–35

3 Jiao K, Li X. Water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells. Prog Energy Combust Sci, 2011, 37: 221–291
4 Sui P C, Zhu X, Djilali N. Modeling of PEM fuel cell catalyst layers: status and outlook. Electrochem Energ Rev, 2019, 2: 428–466
5 Weber A Z, Newman J. Coupled thermal and water management in polymer electrolyte fuel cells. J Electrochem Soc, 2006, 153: A2205
6 Wu H W. A review of recent development: transport and performance modeling of PEM fuel cells. Appl Energy, 2016, 165: 81–106
7 Komarov P V, Khalatur P G, Khokhlov A R. Large-scale atomistic and quantum-mechanical simulations of a Nafion membrane: morphology, proton solvation and charge transport. Beilstein J Nanotechnol, 2013, 4: 567–587
8 Xian L, Li Z, Li S, et al. Elucidating the impact mechanism of temperature and water content on thermal conductivity of hydrated Nafion membranes by molecular dynamics simulation. Int J Heat Mass Transfer, 2023, 208: 124034
9 Kusoglu A, Weber A Z. New insights into perfluorinated sulfonic-acid ionomers. Chem Rev, 2017, 117: 987–1104
10 Feng S, Voth G A. Proton solvation and transport in hydrated Nafion. J Phys Chem B, 2011, 115: 5903–5912
11 Springer T E, Zawodzinski T A, Gottesfeld S. Polymer electrolyte fuel cell model. J Electrochem Soc, 1991, 138: 2334–2342
12 Jiao K, Wang B W, Du Q, et al. Thermal and Water Management of Proton Exchange Membrane Fuel Cells (in Chinese). Beijing: Science Press, 2020 [焦魁, 王博文, 杜青, 等. 质子交换膜燃料电池水热管理. 北京: 科学出版社, 2020]
13 Chen L, He Y L, Tao W Q. The temperature effect on the diffusion processes of water and proton in the proton exchange membrane using molecular dynamics simulation. Numer Heat Transfer Part A-Appl, 2014, 65: 216–228
14 Li Z Z, Chen L, Tao W Q. Molecular dynamics simulation of water permeation through the Nafion membrane. Numer Heat Transfer Part A-Appl, 2016, 70: 1232–1241
15 Qu Z G, Wang N, Zhang G B, et al. Multi-physics Process Modelling and Simulation of Hydrogen Fuel Cells (in Chinese). Beijing: China Machine Press, 2023 [屈治国, 王宁, 张国宾, 等. 氢燃料电池多物理过程建模与仿真. 北京: 机械工业出版社, 2023]
16 Moore M, Wardlaw P, Dobson P, et al. Understanding the effect of kinetic and mass transport processes in cathode agglomerates. J Electrochem Soc, 2014, 161: E3125–E3137
17 Mu Y T, He P, Bai F, et al. Numerical analyses on oxygen transport resistances in polymer electrolyte membrane fuel cells using a novel agglomerate model. Int J Hydrogen Energy, 2023, 48: 3232–3251
18 Zhang R, Chen L, Min T, et al. Multiscale study of reactive transport and multiphase heat transfer processes in catalyst layers of proton exchange membrane fuel cells. Carbon Neutrality, 2024, 3: 119553
19 Mu Y T, Weber A Z, Gu Z L, et al. Mesoscopic modeling of transport resistances in a polymer-electrolyte fuel-cell catalyst layer: analysis of hydrogen limiting currents. Appl Energy, 2019, 255: 113895
20 Zhang R, Min T, Chen L, et al. Pore-scale study of effects of relative humidity on reactive transport processes in catalyst layers in PEMFC. Appl Energy, 2022, 323: 119553
21 Cetinbas F C, Wang X, Ahluwalia R K, et al. Microstructural analysis and transport resistances of low-platinum-loaded PEFC electrodes. J Electrochem Soc, 2017, 164: F1596–F1607
22 Mu Y T, Weber A Z, Gu Z L, et al. Mesoscopic analyses of the impact of morphology and operating conditions on the transport resistances in a proton-exchange-membrane fuel-cell catalyst layer. Sustain Energy Fuels, 2020, 4: 3623–3639
23 Mu Y T, He P, Gu Z L, et al. Modelling the reactive transport processes in different reconstructed agglomerates of a PEFC catalyst layer. Electrochim Acta, 2022, 404: 139721
24 Li X, Fan L, Gong Z, et al. Designing a porous catalyst support to enhance mass transfer for fuel cells using a data-driven pore-scale modeling framework. Cell Rep Phys Sci, 2025, 6: 102557
25 Park S, Oh J, Lee K, et al. Effects of water evaporation and condensation on the operating heating value and system efficiency of polymer electrolyte membrane fuel cells: temperature-dependent phase separation modeling. Chem Eng J, 2025, 516: 163864
26 Hwang G S, Weber A Z. Effective-diffusivity measurement of partially-saturated fuel-cell gas-diffusion layers. J Electrochem Soc, 2012, 159: F683–F692
27 Kumbur E C, Sharp K V, Mench M M. Validated leverett approach for multiphase flow in PEFC diffusion media. J Electrochem Soc, 2007, 154: B1295–1304
28 Wang Y, Xu H, Zhang Z, et al. Lattice Boltzmann simulation of a gas diffusion layer with a gradient polytetrafluoroethylene distribution for a proton exchange membrane fuel cell. Appl Energy, 2022, 320: 119248
29 Guo L, Chen L, Zhang R, et al. Pore-scale simulation of two-phase flow and oxygen reactive transport in gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cells: effects of nonuniform wettability and porosity. Energy, 2022, 253: 124101
30 Hao L, Cheng P. Capillary pressures in carbon paper gas diffusion layers having hydrophilic and hydrophobic pores. Int J Heat Mass Transfer, 2012, 55: 133–139
31 Li B, Cao S, Qin Y. Evaluating the relative effective thermal conductivity and diffusivity of GDL in PEMFC using a pore-scale model considering liquid water effect. Int J Heat Mass Transfer, 2025, 239: 126536

32 Chen L, He Y L, Tao W Q. Effects of surface microstructures of gas diffusion layer on water droplet dynamic behaviors in a micro gas channel of proton exchange membrane fuel cells. Int J Heat Mass Transfer, 2013, 60: 252–262

33 Zhang Z, Bai F, He P, et al. A novel cathode flow field for PEMFC and its performance analysis. Int J Hydrogen Energy, 2023, 48: 24459–24480

34 Ashrafi M, Kanani H, Shams M. Numerical and experimental study of two-phase flow uniformity in channels of parallel PEM fuel cells with modified Z-type flow-fields. Energy, 2018, 147: 317–328

35 Bao Z, Niu Z, Jiao K. Analysis of single- and two-phase flow characteristics of 3-D fine mesh flow field of proton exchange membrane fuel cells. J Power Sources, 2019, 438: 226995

36 Lv X, Li Y, Huang H, et al. Two-phase flow study in the 3D fine-mesh flow field and gas diffusion layer of proton exchange membrane fuel cells. Int J Heat Mass Transfer, 2025, 244: 126987

37 Chen L, Cao T F, Li Z H, et al. Numerical investigation of liquid water distribution in the cathode side of proton exchange membrane fuel cell and its effects on cell performance. Int J Hydrogen Energy, 2012, 37: 9155–9170

38 Zhang Z, Li Z, Lin W, et al. Effect of cooling flow channels on the in-plane temperature distribution in PEMFC. In: Proceedings of the International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, 2023. Düsseldorf, 2024. 644–654

39 Xie B, Ni M, Zhang G, et al. Validation methodology for PEM fuel cell three-dimensional simulation. Int J Heat Mass Transfer, 2022, 189: 122705

40 Chen J H, He P, He Z H, et al. Multi-objective decoupling control of thermal management system for PEM fuel cell. Energy AI, 2024, 18: 100447

41 Wang N, Qu Z G, Jiang Z Y, et al. A unified catalyst layer design classification criterion on proton exchange membrane fuel cell performance based on a modified agglomerate model. Chem Eng J, 2022, 447: 137489

42 Keller N, von Unwerth T. Advanced parametric model for analysis of the influence of channel cross section dimensions and clamping pressure on current density distribution in PEMFC. Appl Energy, 2022, 307: 118132

43 He P, Mu Y T, Park J W, et al. Modeling of the effects of cathode catalyst layer design parameters on performance of polymer electrolyte membrane fuel cell. Appl Energy, 2020, 277: 115555

44 Bai F. Numerical investigation on proton exchange membrane fuel cell transport process at single cell scale and stack scale (in Chinese). Doctor Dissertation. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2023 [白帆. 质子交换膜燃料电池单电池尺度及电堆尺度下传输过程仿真研究. 博士学位论文. 西安: 西安交通大学, 2023]

45 Li Z X. Simulation-based investigation of converging-diverging flow channel atructures in commercial flow field plates for proton exchange membrane fuel cells (in Chinese). Master Dissertation. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2023 [李泽希. 质子交换膜燃料电池单电池尺度及电堆尺度下传输过程仿真研究. 硕士学位论文. 西安: 西安交通大学, 2023]

46 Wang Y, Wang C Y. A nonisothermal, two-phase model for polymer electrolyte fuel cells. J Electrochem Soc, 2006, 153: A1193

47 Berning T, Djilali N. A 3D, multiphase, multicomponent model of the cathode and anode of a PEM fuel cell. J Electrochem Soc, 2003, 150: A1589

48 Wu H, Li X, Berg P. On the modeling of water transport in polymer electrolyte membrane fuel cells. Electrochim Acta, 2009, 54: 6913–6927

49 Meng H. Multi-dimensional liquid water transport in the cathode of a PEM fuel cell with consideration of the micro-porous layer (MPL). Int J Hydrogen Energy, 2009, 34: 5488–5497

50 Zhang G, Fan L, Sun J, et al. A 3D model of PEMFC considering detailed multiphase flow and anisotropic transport properties. Int J Heat Mass Transfer, 2017, 115: 714–724

51 Zhang G, Jiao K. Three-dimensional multi-phase simulation of PEMFC at high current density utilizing Eulerian-Eulerian model and two-fluid model. Energy Convers Manage, 2018, 176: 409–421

52 Inagaki M, Kato A, Kato S, et al. Condensation model to reproduce experimentally observed liquid water distributions in gas diffusion layer for polymer electrolyte fuel cells with variation of cell temperature and relative humidity of inlet gas. Int J Hydrogen Energy, 2024, 58: 14–27

53 Li Z, Bai F, He P, et al. Three-dimensional performance simulation of PEMFC of metal foam flow plate reconstructed with improved full morphology. Int J Hydrogen Energy, 2023, 48: 27778–27789

54 Kahraman H, Coban A. Performance improvement of a single PEM fuel cell using an innovative flow field design methodology. Arab J Sci Eng, 2020, 45: 5143–5152

55 Zhang Z, Quan H B, Cai S J, et al. Design strategies for mainstream flow channels in large-area PEMFC: from typical units to large areas. Appl Energy, 2025, 388: 125628

56 Zhang Z, Wang Q, Bai F, et al. Performance simulation and key parameters in-plane distribution analysis of a commercial-size PEMFC. Energy, 2023, 263: 125897

57 Zhang Z, Cai S, Li Z, et al. Electrical and thermal performance analysis of PEMFC with coolant flow field under steady-state condition. Energy, 2024, 306: 132288

58 Bai F, Tang Z, Yin R J, et al. Optimization of the operational conditions of PEMFC by a novel CFD-DT-GA approach. Appl Energy, 2025, 387:

125620
59 Tao W Q, He Y L. Recent advances in multiscale simulations of heat transfer and fluid flow problems. PCFD, 2009, 9: 150–157
60 Chen L, Feng Y L, Song C X, et al. Multi-scale modeling of proton exchange membrane fuel cell by coupling finite volume method and lattice Boltzmann method. Int J Heat Mass Transfer, 2013, 63: 268–283
61 Shimpalee S, Satjaritanun P, Hirano S, et al. Multiscale modeling of PEMFC using co-simulation approach. J Electrochem Soc, 2019, 166: F534–F543
62 An K B, Fang W Z, Xuan Z H, et al. Mechanisms of oxygen transport resistance of mesoporous carbon-supported catalysts in fuel cells. J Mater Chem A, 2025, 13: 2143–2154
63 Zhang R, He P, Bai F, et al. Multiscale modeling of proton exchange membrane fuel cells by coupling pore-scale models of the catalyst layers and cell-scale models. Int J Green Energy, 2021, 18: 1147–1160
64 Zhang R, Min T, Chen L, et al. Pore-scale and multiscale study of effects of Pt degradation on reactive transport processes in proton exchange membrane fuel cells. Appl Energy, 2019, 253: 113590
65 Zhang Z, Zhang J, Zhang T. Endplate design and topology optimization of fuel cell stack clamped with bolts. Sustainability, 2022, 14: 4730
66 Yao H, Yang D, Lu Y, et al. Screening of sealing materials for PEM fuel cell applications based on weight factor method. J Appl Polym Sci, 2024, 141: e54833
67 Yang Q, Zhang N, Hu X Q, et al. Criss-crossed matching design of the bipolar plate in PEMFC considering unavoidable assembly errors. Int J Hydrogen Energy, 2024, 63: 815–827
68 Zhang Z, He P, Dai Y J, et al. Study of the mechanical behavior of paper-type GDL in PEMFC based on microstructure morphology. Int J Hydrogen Energy, 2020, 45: 29379–29394
69 Zhang Z, Tao W Q. Effect of assembly pressure on the performance of proton exchange membrane fuel cell. Energy Storage Saving, 2023, 2: 359–369
70 Sun X, Wen P, Zhang Q, et al. Numerical investigation of structural deformation of gas diffusion layer and contact resistance under assembly force effect on proton exchange membrane fuel cell performance. J Power Sources, 2025, 630: 236120
71 Carral C, Mélé P. A numerical analysis of PEMFC stack assembly through a 3D finite element model. Int J Hydrogen Energy, 2014, 39: 4516–4530
72 Zhang Z, Fang C, Zhang J, et al. Study of an equivalent mechanical model and experimental validation to predict the impact slippage of a full-dimensional PEMFC stack for commercial trucks. Energy, 2025, 330: 136727
73 Bai F, Yin R J, Liao J Y, et al. Eccentricity design for the coolant distribution optimization of a practical commercial-size proton exchange membrane fuel cell stack using a novel proper orthogonal decomposition based analysis model. Appl Energy, 2023, 347: 121389
74 Xian L, Wang Q, Li Z, et al. Analyzing and optimizing cathode gas distribution uniformity in proton exchange membrane fuel cell stacks based on two-phase flow network model. J Power Sources, 2024, 618: 235182
75 Costamagna P, Arato E, Achenbach E, et al. Fluid dynamic study of fuel cell devices: simulation and experimental validation. J Power Sources, 1994, 52: 243–249
76 Wang J. Pressure drop and flow distribution in parallel-channel configurations of fuel cells: U-type arrangement. Int J Hydrogen Energy, 2008, 33: 6339–6350
77 Wang J. Pressure drop and flow distribution in parallel-channel configurations of fuel cells: Z-type arrangement. Int J Hydrogen Energy, 2010, 35: 5498–5509
78 Chen C H, Jung S P, Yen S C. Flow distribution in the manifold of PEM fuel cell stack. J Power Sources, 2007, 173: 249–263
79 Dong J, Xu X, Xu B. CFD analysis of a novel modular manifold with multi-stage channels for uniform air distribution in a fuel cell stack. Appl Therm Eng, 2017, 124: 286–293
80 Chen W H, Tsai Z L, Chang M H, et al. Geometry optimization and pressure analysis of a proton exchange membrane fuel cell stack. Int J Hydrogen Energy, 2021, 46: 16717–16733
81 Huang F, Qiu D, Peng L, et al. Optimization of entrance geometry and analysis of fluid distribution in manifold for high-power proton exchange membrane fuel cell stacks. Int J Hydrogen Energy, 2022, 47: 22180–22191
82 Yin R J, Zeng W C, Bai F, et al. Study on the effects of manifold structure on the gas flow distribution uniformity of anode of PEMFC stack with 140-cell. Renew Energy, 2024, 221: 119693
83 Liu Z, Mao Z, Wang C, et al. Numerical simulation of a mini PEMFC stack. J Power Sources, 2006, 160: 1111–1121
84 Shimpalee S, Ohashi M, Van Zee J W, et al. Experimental and numerical studies of portable PEMFC stack. Electrochim Acta, 2009, 54: 2899–2911
85 Zhang G, Yuan H, Wang Y, et al. Three-dimensional simulation of a new cooling strategy for proton exchange membrane fuel cell stack using a non-isothermal multiphase model. Appl Energy, 2019, 255: 113865

86 Zhu X, Su L, Wang X, et al. Effects of operating conditions on the performance uniformity of the proton-exchange membrane fuel cell stack. Energy Convers Manage, 2023, 281: 116856

87 Deng Q, Meng K, Chen W, et al. Study on the heat and mass transfer mechanisms of liquid-cooled PEMFC stacks based on non-isothermal model. Energy Convers Manage, 2024, 313: 118628

88 Huang F, Qiu D, Lan S, et al. Performance evaluation of commercial-size proton exchange membrane fuel cell stacks considering air flow distribution in the manifold. Energy Convers Manage, 2020, 203: 112256

89 Fan L, Tu Z, Cai S, et al. Design principles and analysis of manifold design in a large-scale PEMFC stack. Energy, 2025, 319: 135021

90 Bai F, Tang Z, Yin R J, et al. A novel '3D + digital twin + 3D' upscaling strategy for predicting the detailed multi-physics distributions in a commercial-size proton exchange membrane fuel cell stack. Appl Energy, 2024, 374: 124012

91 Ding J, Mu Y T, Zhai S, et al. Numerical study of gas purge in polymer electrolyte membrane fuel cell. Int J Heat Mass Transfer, 2016, 103: 744–752

92 Mu Y T, He P, Ding J, et al. Modeling of the operation conditions on the gas purging performance of polymer electrolyte membrane fuel cells. Int J Hydrogen Energy, 2017, 42: 11788–11802

93 Lei L, He P, He P, et al. A comparative study: the effect of current loading modes on the cold start-up process of PEMFC stack. Energy Convers Manage, 2022, 251: 114991

94 He P, Chen L, Mu Y T, et al. Lattice Boltzmann method simulation of ice melting process in the gas diffusion layer of fuel cell. Int J Heat Mass Transfer, 2020, 149: 119121

95 Lei L, He P, He P, et al. Numerical research on the cold start-up strategy of a PEMFC stack from −30°C. J Therm Sci, 2023, 32: 898–910

96 Wu K, Xie X, Wang B, et al. Two-dimensional simulation of cold start processes for proton exchange membrane fuel cell with different hydrogen flow arrangements. Int J Hydrogen Energy, 2020, 45: 17795–17812

97 Luo Y, Guo Q, Du Q, et al. Analysis of cold start processes in proton exchange membrane fuel cell stacks. J Power Sources, 2013, 224: 99–114

98 Lu X, Du B, Zhu W, et al. Multi-criteria assessment of an auxiliary energy system for desalination plant based on PEMFC-ORC combined heat and power. Energy, 2024, 290: 130163

99 Zhao J, Chang H, Luo X, et al. A novel type of PEMFC-based CCHP system with independent control of refrigeration and dehumidification. Appl Therm Eng, 2022, 204: 117915

100 Cai S, Zou Y, Luo X, et al. Investigations of a novel proton exchange membrane fuel cell-driven combined cooling and power system in data center applications. Energy Convers Manage, 2021, 250: 114906

101 Ning W, Lyu X, Yuan Y, et al. Comprehensive evaluation of proton exchange membrane fuel cell-based combined heat and power system with lithium-ion battery under rule-based strategy. J Energy Storage, 2024, 88: 111620

102 Ning W, Lyu X, Liao P, et al. Performance analysis of a 1-kW PEMFC-CHP system under different rule-based energy management strategies in China. Renew Energy, 2025, 248: 123110

103 Yuan Y, Chen L, Lyu X, et al. Modeling and optimization of a residential PEMFC-based CHP system under different operating modes. Appl Energy, 2024, 353: 122066

104 Lyu X, Yuan Y, Ning W, et al. Investigation and optimization of PEMFC-CHP systems based on Chinese residential thermal and electrical consumption data. Appl Energy, 2024, 356: 122337

105 Li H, Xu B, Lu G, et al. Multi-objective optimization of PEM fuel cell by coupled significant variables recognition, surrogate models and a multi-objective genetic algorithm. Energy Convers Manage, 2021, 236: 114063

106 Yu Y, Lv S, Wang Q, et al. A two-stage framework for quantifying the impact of operating parameters and optimizing power density and oxygen distribution quality of PEMFC. Renew Energy, 2024, 236: 121430

107 Wang Q, Li Z, Xian L, et al. Lifetime and efficiency analysis and optimization of PEMFC-based combined heat and power system with auxiliary heating for battery. Int J Hydrogen Energy, 2024, 91: 843–857

108 Chen J H, He P, Cai S J, et al. Modeling and temperature control of a water-cooled PEMFC system using intelligent algorithms. Appl Energy, 2024, 372: 123790

109 Strahl S, Husar A, Puleston P, et al. Performance improvement by temperature control of an open-cathode PEM fuel cell system. Fuel Cells, 2014, 14: 466–478

110 Sun L, Jin Y, You F. Active disturbance rejection temperature control of open-cathode proton exchange membrane fuel cell. Appl Energy, 2020, 261: 114381

111 Wang Y X, Chen Q, Zhang J, et al. Real-time power optimization for an air-coolant proton exchange membrane fuel cell based on active temperature control. Energy, 2021, 220: 119497

112 He P, Chen J H, Zhang C Z, et al. Optimization of modeling and temperature control of air-cooled PEMFC based on TLBO-DE. Energy AI, 2024, 18: 100430

113 Zhang G, Kandlikar S G. A critical review of cooling techniques in proton exchange membrane fuel cell stacks. Int J Hydrogen Energy, 2012, 37: 2412–2429
114 Xuan Z H, Fang W Z, Zhao G R, et al. Optimal gradient designs of catalyst layers for boosting performance: a data-driven-assisted model. Appl Energy, 2025, 377: 124756
115 Zhao G R, Fang W Z, Hu C Z, et al. Contributions of gradient electrode designs to the performance of PEMFCs: modeling and optimization. Int Commun Heat Mass Transfer, 2025, 167: 109232
116 Wang B, Zhang G, Wang H, et al. Multi-physics-resolved digital twin of proton exchange membrane fuel cells with a data-driven surrogate model. Energy AI, 2020, 1: 100004
117 Bai F, Quan H B, Yin R J, et al. Three-dimensional multi-field digital twin technology for proton exchange membrane fuel cells. Appl Energy, 2022, 324: 119763
118 Bai F, Lei L, Zhang Z, et al. Application of similarity theory in the study of proton exchange membrane fuel cells: a comprehensive review of recent developments and future research requirements. Energy Storage Saving, 2022, 1: 3–21
119 Bai F, Lei L, Zhang Z, et al. Application of similarity theory in modeling the output characteristics of proton exchange membrane fuel cell. Int J Hydrogen Energy, 2021, 46: 36940–36953
120 Bai F, Tao W Q. Projection diagram for determining polarization curves under variation of activation criterion using similarity theory. ACS Omega, 2022, 7: 45556–45561

Summary for “质子交换膜燃料电池的数值仿真及其工程应用综述”

Simulation of proton exchange membrane fuel cells and their engineering applications: a review

Wen-Quan Tao[1*], Fan Bai[1], Zhuo Zhang[1], Pu He[1], Wen-Zhen Fang[1], Yu-Tong Mu[2], Lei Chen[1] & Li Chen[1]

[1] *Key Laboratory of Thermo-Fluid Science & Engineering of MOE, School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*
[2] *School of Human Settlements and Civil Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*
* Corresponding author, E-mail: wqtao@mail.xjtu.edu.cn

Proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) directly convert the chemical energy of hydrogen into electrical energy through electrochemical reactions. PEMFC has the advantages of high energy conversion efficiency, low operating temperature, fast start-up speed, and zero carbon emissions. These advantages make them of significant importance for China to achieve its dual carbon goals. The internal processes of PEMFCs involve complex multi-physical field coupling, making traditional theoretical analytical methods difficult to apply. Experimental research also faces limitations such as high costs, long cycles, and insufficient resolution, which are hard to meet the rapid iteration requirements of engineering applications. Numerical simulation technology offers an effective way to break through these research bottlenecks, enabling in-depth exploration of the multi-field coupling mechanisms within PEMFC stacks, and quantitatively revealing the impact of key parameters on performance. It has become an effective tool for performance prediction and parameter sensitivity analysis in the design of PEMFCs. The author's team has been researching fuel cells since the beginning of this century. In this paper, a brief review is presented for the research progress of numerical simulation of PEMFC stacks worldwide since 2006. The paper consists of eight parts: (1) membrane electrode assembly models, (2) macroscopic models of single cells, (3) multi-scale models of single cells, (4) numerical models of PEMFC stacks, (5) numerical models in operation processes, (6) control models of PEMFC systems, (7) efficient analysis models, and (8) application practice of numerical methods in the development of high-power fuel cell stacks. The following further research needs are proposed. (1) For the catalyst model, it is suggested that the cooperative effect between electrons and protons should be taken into account in the agglomerate model. (2) In the membrane electrode assembly, the empirical Leverett-J equation was originally derived based on summarizing the data of liquid conduction in loose gravel, and is still widely used to date in PEMFCs. Several new calculation formulae were proposed. Further comparison, assessment and improvement are needed. (3) The numerical model of PEMFCs contains a large number of parameters. To reveal the influence of each parameter (or dimensionless quantities composed of several parameters) on the output characteristics, it is urgent to conduct in-depth research on the application of similar principles and artificial intelligence. (4) A comericial-size PEMFC stack is generally composed of hundreds of individual cells. How to simulate and obtain the complete multi-physical quantity distribution characteristics of the entire PEMFC stack under the condition of acceptable computing resources is a major challenge.

proton exchange membrane fuel cell, numerical simulation, high power PEMFC stack, intelligent algorithm, engineering application

doi: 10.1360/CSB-2025-5421