基于Bagging神经网络集成的燃料电池性能预测方法

闫飞宇, 李伟卓, 杨卫卫*, 何雅玲

西安交通大学能源与动力工程学院, 西安 710049

* E-mail: yangww@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期: 2018-11-05; 接受日期: 2018-12-11; 网络版发表日期: 2019-03-18

国家自然科学基金(批准号: 51876159)和陕西省青年科技新星项目(编号: 2016KJXX-56)资助

摘要 利用三维质子交换膜燃料电池数学模型模拟研究了电池流道进、出口高度对电池性能的影响, 然后将数值模拟结果作为神经网络模型的训练数据. 以流道进、出口高度和电池电压值作为输入变量, 以电池电流密度作为输出变量, 建立了3层反向传播神经网络模型; 然后利用Bagging集成学习方法对神经网络模型进行集成, 构建了燃料电池性能预测方法. 研究发现: 与单一神经网络模型相比, Bagging神经网络集成模型预测精度更高, 且所需模型训练数据量更少. 此外对于超出训练数据以外的情形, Bagging神经网络集成模型仍然能够准确地预测燃料电池的性能, 且精度良好, 表明Bagging神经网络集成模型的鲁棒性较好, 可用于更宽工况范围内燃料电池性能的快速预测.

关键词 质子交换膜燃料电池, BP神经网络, Bagging, 数值模拟, 性能预测

1 引言

燃料电池是一种电化学能量转换器, 能够将燃料的化学能直接转换成电能^[1]. 由于在能量转换过程中几乎不产生污染环境的含氮和含硫氧化物, 燃料电池被认为是一种对环境友好的能量转换装置, 可被广泛用于便携式电子设备的电源、车辆的动力源、住宅以及分布式电力系统中^[2].

在大多数燃料电池系统控制应用中, 设计人员需要考虑燃料电池的输入和输出, 以及电池系统结构与运行参数之间的关系. 获取这些关系并进行准确预测,

可以使设计人员能够控制电池的输入以获得期望的输出(即电池的电压或电流), 这样的预测可以通过训练人工神经网络(artificial neural network, ANN)来实现^[3-6]. 相比于经验模型(模型自适应差)和机理模型(复杂偏微分方程组难以求解), 神经网络模型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. 目前, 研究人员已经将人工神经网络用于预测燃料电池电堆电压、电池运行电流以及电池运行温度等研究工作. 例如, Lee^[7]构建了一个3层神经网络模型作为设计和分析质子交换膜燃料电池模型的工具来预测电池性能, 其研究以放电电流、反应气进气温度、

引用格式: 闫飞宇, 李伟卓, 杨卫卫, 等. 基于Bagging神经网络集成的燃料电池性能预测方法. 中国科学: 技术科学, 2019, 49: 391-401
Yan F Y, Li W Z, Yang W W, et al. Prediction of fuel cell performance based on Bagging neural network ensemble model (in Chinese). Sci Sin Tech, 2019, 49: 391-401, doi: 10.1360/N092018-00368

相对湿度、进气压力和电池温度作为输入变量来预测燃料电池的输出电压. Saengrung等人^[8]则构建两种神经网络模型(反向传播神经网络和径向基神经网络), 来预测电堆性能, 并进行了对比研究. 他们以空气进气量、电堆温度为输入变量, 电堆电压和电流密度为输出量, 研究了ANN数据前处理方式、训练误差精度、训练算法、网络结构(隐藏层层数、节点个数)对性能预测准确度的影响. Puranik等人^[9]建立了基于二层递归神经网络的PEMFC模型, 通过数值模拟获取600组仿真结果作为训练数据, 其中输入变量为温度、电流、阴阳极压力等, 输出参数为电池电压. 他们研究了这种模型下燃料电池的稳态性能、暂态性能和对噪声的鲁棒性. Han和Chung^[10]将两种数据驱动模型(ANN与支持向量机)用于预测并分析燃料电池性能, 研究中以923组实验数据训练神经网络, 另外使用454组实验数据作为结果测试组. 对比发现, 相比于支持向量机模型, ANN模型在电池性能预测方面表现更好; 并利用ANN模型进一步研究了电堆温度、进气压力和氧气相对湿度对电堆性能的影响. Seyhan等人^[11]提出一种波浪形流道结构, 并通过实验对比分析了不同温度、阴阳极不同进气量对不同“振幅”的波浪形流道电池的性能影响, 并基于实验获取的980组实验数据, 构建了一个4层神经网络来预测不同振幅流道的电池性能, 结果显示神经网络能够精确地预测燃料电池性能. Chávez-Ramírez等人^[12]通过实验收集了1000组实验数据来训练和测试神经网络模型, 以燃料电池电堆电流、空气和氢气流量、阴阳极入口温度以及产物水

的温度作为神经网络的输入变量, 以电堆电压和阴极出口温度作为输出变量来研究神经网络模型对于电池性能预测的准确性.

上述研究表明神经网络模型需要大量的数据进行训练, 并且模型输入变量越多, 映射关系越复杂, 则需要的训练数据量越多, 从而增加了获得数据的成本和耗时^[7,13,14]. 因此, 很有必要对神经网络模型进行优化, 在保证模型预测准确度和及时性的前提下, 减少模型训练所需的数据量. 本文利用集成学习中的Bagging方法对单一神经网络模型进行集成, 发展可用于燃料电池性能预测的Bagging神经网络集成模型, 该集成模型不仅能够提高电池性能的预测精度, 并且有效地降低模型训练数据的需求.

2 燃料电池数学模型与Bagging集成神经网络模型

2.1 燃料电池数学模型

本文首先建立了一个三维稳态单通道燃料电池模型, 研究变截面尺寸对电池性能的影响. 图1为模型几何结构. 几何结构参数见表1. 为方便建模, 在模型建立过程中引入如下简化假设:

- (1) 气体混合物为理想气体;
- (2) 流道内的气体流动为不可压缩层流流动, 且物性参数为常数;
- (3) 电池在稳态条件下运行;
- (4) 扩散层、催化层、质子交换膜为均匀各向同

图1 (网络版彩图)三维单通道燃料电池几何结构

表 1 几何参数

组件名称	数值 (mm)	参考文献
电池宽度	2.0	[15]
流道宽度	1.0	[15]
流道高度	1.0	[15]
流道长度	40.0	
肋宽	0.5	[15]
扩散层厚度	0.3	[15]
催化层厚度	0.0129	[15]
质子交换膜厚度	0.108	[15]

性的多孔介质;

(5) 忽略接触电阻等.

氢氧质子交换膜燃料电池中的流动、传热、传质及电化学反应耦合过程可使用连续性方程、动量守恒方程、能量守恒方程、组分传输方程和电化方程来描述. 由于模型为稳态模型, 忽略非稳态项. 相应源项见表2, 物性关联式见表3.

质量守恒方程:

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

其中, S_m 是质量源项.

动量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\varepsilon \nabla p + \nabla \cdot (\varepsilon \mu \nabla \mathbf{u}) + S_{\text{mom}}, \quad (2)$$

其中, S_{mom} 是动量源项.

能量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho C_p \mathbf{u} T) = \nabla \cdot (k^{\text{eff}} \nabla T) + S_h, \quad (3)$$

其中, S_h 是能量源项.

组分守恒方程:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \rho \mathbf{u} c_i) = \nabla \cdot (D_i^{\text{eff}} \nabla c_i) + S_i, \quad (4)$$

其中, S_i 为组分源项, D_i^{eff} 为组分有效扩散系数.

Butler-Volmer方程:

$$R_{\text{an}} = (\varepsilon_{\text{an}} j_{\text{an}}^{\text{ref}}) \left(\frac{[\text{H}_2]}{[\text{H}_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{an}}} \left(e^{\frac{\alpha_{\text{an}} F \eta_{\text{an}}}{RT}} - e^{\frac{-\alpha_{\text{cat}} F \eta_{\text{an}}}{RT}} \right), \quad (5)$$

$$R_{\text{cat}} = (\varepsilon_{\text{cat}} j_{\text{cat}}^{\text{ref}}) \left(\frac{[\text{O}_2]}{[\text{O}_2]_{\text{ref}}} \right)^{\gamma_{\text{cat}}} \left(-e^{\frac{\alpha_{\text{an}} F \eta_{\text{cat}}}{RT}} + e^{\frac{-\alpha_{\text{cat}} F \eta_{\text{cat}}}{RT}} \right), \quad (6)$$

其中, η 为活化过电势, 表示如下:

$$\eta_{\text{an}} = \phi_s - \phi_m, \quad (7)$$

$$\eta_{\text{cat}} = \phi_s - \phi_m - V_{\text{eq}}. \quad (8)$$

电流守恒方程:

$$\int_{\text{anode}} R_{\text{an}} dV = \int_{\text{cathode}} R_{\text{cat}} dV. \quad (9)$$

电势守恒方程:

$$\nabla \cdot (\sigma_s \nabla \phi_s) + S_{\text{sol}} = 0, \quad (10)$$

$$\nabla \cdot (\sigma_m \nabla \phi_m) + S_{\text{mem}} = 0, \quad (11)$$

其中, σ_s 为固相区域的电导率, σ_m 为质子交换膜的电导率.

液态水形成、传输方程:

表 2 控制方程中的源项表达

源项	双极板	流道	扩散层	阳极催化层	阴极催化层	膜
S_m	—	—	—	$-\frac{M_{\text{H}_2}}{2F} R_{\text{an}} - \frac{n_d M_{\text{H}_2\text{O}}}{F} R_{\text{an}}$	$-\frac{M_{\text{O}_2}}{4F} R_{\text{cat}} + \frac{M_{\text{H}_2\text{O}}}{2F} R_{\text{cat}} + \frac{n_d M_{\text{H}_2\text{O}}}{F} R_{\text{cat}}$	—
S_{mom}	—	—	$-\frac{\mu}{k_{\text{GDL}}} \varepsilon^2 \mathbf{u}$	$-\frac{\mu}{k_{\text{CL}}} \varepsilon^2 \mathbf{u}$	$-\frac{\mu}{k_{\text{CL}}} \varepsilon^2 \mathbf{u}$	—
S_h	$\frac{I^2}{\sigma_{\text{BP}}}$	$r_w h_L$	$\frac{I^2}{\sigma_{\text{GDL}}} + r_w h_L$	$\frac{I^2}{\sigma_{\text{CL}}} + r_w h_L + \eta R_{\text{an}}$	$\frac{I^2}{\sigma_{\text{CL}}} + r_w h_L + \eta R_{\text{cat}}$	$\frac{I^2}{\sigma_{\text{mem}}}$
S_i	—	—	—	$\text{H}_2: -\frac{M_{\text{H}_2}}{2F} R_{\text{an}}$ $\text{H}_2\text{O}: -\frac{n_d M_{\text{H}_2}}{F} R_{\text{an}} - r_w$	$\text{O}_2: -\frac{M_{\text{O}_2}}{4F} R_{\text{cat}}$ $\text{H}_2\text{O}: \frac{M_{\text{H}_2\text{O}}}{2F} + \frac{n_d M_{\text{H}_2}}{F} R_{\text{cat}} - r_w$	—
S_{sol}	—	—	—	$-R_{\text{an}}$	R_{cat}	—
S_{mem}	—	—	—	R_{an}	$-R_{\text{cat}}$	—

表 3 物性关联式^{a)}

物性	表达式
气相扩散率	$D_i = \varepsilon^{1.5} (1-s)^{2.5} D_i^0 \left(\frac{101325}{p} \right) \left(\frac{T}{300} \right)^{1.5}$
膜质子电导率	$\sigma_{\text{mem}} = (0.514\lambda - 0.326) e^{1268 \left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T} \right)}$
渗透阻力系数	$n_d = 2.5 \frac{\lambda}{22}$
水含量	$\lambda = 0.043 + 17.18a - 39.85a^2 + 36a^3, a < 1$ $\lambda = 14 + 1.4(a-1), a > 1$
水活性	$a = \frac{P_{\text{wv}}}{P_{\text{sat}}} + 2s$
水蒸汽分压	$P_{\text{wv}} = x_{\text{H}_2\text{O}} P$ $\log_{10} P_{\text{sat}} = -2.1794 + 0.02953(T - 273.17)$
水饱和和蒸汽压	$-9.1837 \times 10^{-5} (T - 273.17)^2$ $+ 1.4454 \times 10^{-7} (T - 273.17)^3$

a) Fluent Inc Fluent Manual & Theory Guide. U.S., 2015. See also: Accessed through: www.ansys.com.

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_1 s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{V}_1 s) = r_w, \quad (12)$$

其中, 下标1代表液态水, s 为液态水体积分数, 即水饱和度和, r_w 为冷凝速率, 如下所示:

$$r_w = c_i \max \left\{ \left[(1-s) \frac{P_{\text{wv}} - P_{\text{sat}}}{RT} M_{\text{w,H}_2\text{O}} \right], [-s \rho_1] \right\}. \quad (13)$$

冷凝速率项 r_w 仅应用于扩散层和催化层, 其中冷凝速率常数为 $c_i = 100 \text{ s}^{-1}$. 在流道中, 假定气相速度与液相速度相等, 即液态水呈细雾状. 在多孔介质中, 采用毛细扩散项替代方程(12)中的对流项, 即

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_1 s)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\rho_1 \frac{K s^3}{\mu_1} \frac{dP_c}{ds} \nabla s \right] = r_w, \quad (14)$$

其中毛细压力为

$$P_c = \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon} \right)^{0.5}} (1.417(1-s) - 2.12(1-s)^2 + 1.263(1-s)^3), \quad \theta_c < 90^\circ, \quad (15)$$

$$P_c = \frac{\sigma \cos \theta_c}{\left(\frac{K}{\varepsilon} \right)^{0.5}} (1.417s - 2.12s^2 + 1.263s^3), \quad \theta_c > 90^\circ, \quad (16)$$

其中, ε 为孔隙率, σ 为表面张力(N m^{-2}), θ_c 为接触角, K

为绝对渗透率.

本文采用GAMBIT进行几何建模与网格划分, 然后将生成网格导入ANSYS FLUENT 15.0进行计算求解. 模型的工况、电化学及传输参数见表4. 为了验证模型的精确度和预测结果的准确性, 本文分别进行了网格独立性考核和模型验证, 如图2和3所示. 从图2中可以看出, 网格数量为68000和92000两种情况下的电流密度已相差很小, 所以本文选择网格数量68000进行计算. 数值模拟数据与Wang^[15]的实验数据对比如图3所示, 从中可以看出模拟数据与实验数据吻合得很好. 因此, 本文利用该模型计算获得的模拟数据作为神经网络模型的基础训练数据.

2.2 单一神经网络模型

神经网络是由具有适应性的简单单元组成的广泛并行互连的网络, 神经网络相邻层之间各神经元进行全连接, 而每层各神经元之间无连接. 它的组织能够模拟生物神经系统对真实世界物体所作出的交互反应^[17]. 反向传播(Back Propagation, BP)神经网络模型是目前应用最广泛的模型之一, 其按误差逆向传播算法训练的多层前馈神经网络. BP神经网络模型先将输入示例提供给输入层神经元, 然后逐层将信号前传, 直

表 4 工况、电化学及传输参数

参数	数值	参考文献
操作温度	343 K	[15]
开路电压	0.95 V	[15]
进口气体相对湿度	100%	[15]
阳极体积交换电流密度	$1.0 \times 10^9 \text{ A/m}^3$	—
阴极体积交换电流密度	$1.0 \times 10^7 \text{ A/m}^3$	—
阳极浓度指数	0.5	[16]
阴极浓度指数	1.0	[16]
交换系数	1.25	—
多相饱和度指数	2.0	[16]
氢气参考扩散率	$3.9 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	—
氧气参考扩散率	$2.275 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	—
水蒸气参考扩散率	$3.9 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	—
其他气体参考扩散率	$5.2 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	—
扩散层孔隙率	0.4	[16]
催化层孔隙率	0.5	[16]
膜孔隙率	0.25	[15]

图 2 网格独立性验证

图 3 数值模型验证

到产生输出层的结果; 然后计算输出层的误差, 再将误差逆向传播至隐藏层神经元, 最后根据隐藏层神经元的误差来对连接权和阈值进行调整。该迭代过程循环进行, 直到达到某些停止条件为止, 例如训练误差已达到一个很小的值^[18]。

本文使用python机器学习框架scikit-learn中的神经网络回归模型——MLP Regressor。以电池流道进口高度、出口高度、电压等作为输入变量, 以电流密度作为输出变量, 建立了一个3层BP神经网络, 其神经网络结构如图4所示。经试验, 隐藏层神经元个数设为4; 隐藏层神经元激活函数采用双曲正切(tanh)函数, 输出

图 4 三层BP神经网络结构图

层激活函数采用线性(purelin)函数, $x_0^{(1)}$, $a_0^{(2)}$ 为偏置单元, 均设为1; 残差值设为 1×10^{-4} , 最大迭代次数设为1000, 当模型训练达到最大迭代次数或残差值降到 1×10^{-4} 以下, 模型训练停止。

$$a = \tanh(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1, \quad (17)$$

$$a = \text{purelin}(x) = x. \quad (18)$$

2.3 Bagging神经网络集成模型

集成学习通过构建并结合多个学习器来完成学习任务。图5显示了集成学习的一般结构, 其先产生一组个体学习器(即基学习器), 再用某种策略将它们结合起来。个体学习器通常由一个现有的学习算法从训练数据产生。集成学习通过将多个学习器进行结合, 常可获得比单一学习器显著优越的泛化性能^[18]。本文采用并行式集成学习方法中最著名的代表Bagging方法^[19], 其原理如下: 给定包含 m 个样本的数据集, 先随

图 5 集成学习示意图

机取出一个样本放入采样集中, 再把该样本放回初始数据集, 使得下次采样时该样本仍有可能被选中. 经过 m 次随机采样操作, 得到含 m 个样本的采样集. 依此方法, 我们可采样出 T 个含 m 个训练样本的采样集, 然后基于每个采样集训练出一个基学习器, 再将这些基学习器进行结合, 这就是Bagging方法的基本流程. 而在本文提出的用于预测燃料电池性能的Bagging集成方法中, 基学习器采用了上述的3层BP神经网络模型, 从而构建了Bagging神经网络集成模型.

3 结果与讨论

3.1 数值模拟结果

本文对不同的流道进、出口高度下的单流道燃料电池性能进行数值模拟研究. 具体的流道进、出口高度值如表5所示, 其中数值模拟计算工况总计38组情形, 这些不同的进、出口高度组合可以表示不同的等截面流道结构与变截面渐缩型流道结构.

通过数值模拟, 研究不同流道进、出口高度值对燃料电池性能的影响规律. 图6(a)和(b)分别给出了等截面流道和渐缩流道燃料电池的性能曲线(即 I - V 曲线). 如图所示, 对于等截面流道类型, 随着流道进、出口高度的降低, 燃料电池的极限电流密度逐渐增大. 在计算工况范围内, 极限电流密度的最大值与最小值之间相差10.89%; 对于渐缩型通道, 在保持流道进口高度不变时, 随着出口流道高度值降低, 燃料电池的极限电流密度也随之增大. 在计算工况范围内, 极限电

流密度的最大值与最小值之间相差5.97%. 正如表5所述, 数值计算工况共计38组情形, 每种工况获得的燃料电池性能曲线由11个数据点构成. 因此, 总计可获得418组模拟结果数据. 这些结果均可作为基础数据用于人工神经网络模型的训练.

3.2 单一ANN模型预测结果

由于在流道尺寸相近的情况下, 燃料电池的性能曲线差异并不明显. 因此, 我们针对表5中选定的33种流道结构(即训练组1), 通过数值模拟获得燃料电池性能曲线, 共计363组数据, 以此作为训练数据送入神经网络模型的输入层进行单一ANN模型训练. 然后利用训练好的ANN模型对上述工况之外的多种流道尺寸下(即预测组1、预测组2和预测组3)燃料电池的性能曲线进行快速预测. 考虑到本文中神经网络模型采用scikit-learn机器学习框架中的神经网络回归模型, 为衡量单一ANN模型的预测精度, 评价标准采用均方误差(mean squared error, MSE)与平均绝对百分比误差(mean absolute percentage error, MAPE)^[12]两个参数, 其定义如下:

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (f_i - y_i)^2}{n}, \quad (19)$$

$$MAPE = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{f_i - y_i}{y_i} \right|}{n} \times 100\%, \quad (20)$$

其中, f_i 为预测值; y_i 为实际值, 此处为数值模拟得到的

表5 不同的流道进、出口高度值及训练数据组和预测组设定

进口高度 H (mm)	出口高度 h (mm)					
	数值模拟工况 (38组)	训练组1(33组)	训练组2(11组)	预测组1-等截面	预测组2-渐缩型	预测组3-渐扩型
0.2	0.2	—	—	0.2	—	0.8/1.3
0.4	0.2/0.4	0.2/0.4	0.2/0.4	—	—	—
0.6	0.2/0.4/0.6	0.2/0.4	0.2/0.4	0.6	—	—
0.7	0.2/0.4	0.2/0.4	—	—	—	—
0.8	0.2/0.4/0.6/0.8	0.4/0.6/0.8	0.4/0.8	—	0.2	—
0.9	0.2/0.4/0.6/0.8	0.2/0.4/0.6/0.8	—	—	—	—
1.0	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0	0.2/1.0	—	—	—
1.1	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0	—	—	—	—
1.2	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0/1.2	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0	0.2/0.8	1.2	—	—
1.3	0.2/0.4/0.6/0.8/1.0/1.2	0.4/0.6/0.8/1.0/1.2	0.4	—	0.2	—

图 6 不同流道尺寸的燃料电池性能曲线. (a) 等截面流道; (b) 渐缩流道

电流密度值. 因此, MSE和MAPE值越小, 表示ANN模型预测效果越好, 准确度越高.

采用训练后的单一ANN模型对等截面流道(预测组1)、渐缩型流道(预测组2)以及渐扩型流道(预测组3)燃料电池的性能曲线进行预测, 并将预测结果与相应的数值模拟结果进行对比. 如图7所示, 整体而言, ANN模型预测的燃料电池放电性能曲线(I - V 曲线)变

化趋势基本合理. 并且ANN模型预测与数值模拟获得的通道尺寸变化对电池性能的影响规律保持一致. 但是, 在大电流密度区域(即浓差极化损失加剧区域), 单一ANN模型的预测结果与数值模拟结果存在明显偏差, 特别是对于渐扩型流道, ANN模型的预测结果与数值模拟结果的偏差非常严重. 对于等截面流道、渐缩型流道和渐扩型流道3种类型, ANN模型预测值与

图 7 单一ANN模型(363组数据训练)预测结果与数值模拟结果对比. (a) 等截面流道; (b) 渐缩流道; (c) 渐扩流道

数值模拟结果的均方误差MSE分别为 2.76×10^{-4} , 9.76×10^{-5} , 3.99×10^{-4} . 绝对百分比误差MAPE分别为22.64%, 18.75%, 12.19%. 很明显, 对于渐扩型通道燃料电池性能的预测, 单一ANN模型预测结果与数值模拟结果的均方误差MSE明显升高. 上述结果说明, 利用363组数据训练的ANN模型可用于燃料电池性能的预测, 但对于超出训练工况以外的情形, 特别是渐扩型流道燃料电池, 其预测效果较差.

若采用更少量的训练数据进行ANN模型训练, 比如采用11种流道进、出口高度组合工况下(即训练组2)获得的121组模拟数据来训练ANN模型. 然后利用训练后的ANN模型分别对等截面流道(预测组1)、渐缩型流道(预测组2)和渐扩型流道(预测组3)结构燃料电池的性能进行预测, 其结果如图8所示, 对于等截面流道、渐缩型流道和渐扩型流道3种类型, ANN模型预测值与数值模拟结果的均方误差MSE分别为 8.32×10^{-4} , 7.51×10^{-4} , 2.03×10^{-3} . 绝对百分比误差MAPE分别为30.77%, 37.91%, 30.16%. 很明显, 对于3种类型通道, ANN模型预测值与数值模拟结果整体的

偏差都非常大. 从图中可看出, ANN模型根本无法捕捉到流道结构尺寸的变化对于燃料电池性能的影响趋势. 不仅如此, 对于渐扩型流道燃料电池, 利用ANN模型预测的燃料电池性能曲线已经完全失真. 因此可以认为, 对于单一ANN模型, 使用的训练数据量越少, 训练出的模型预测效果越差.

总体而言, 单一ANN模型需要的训练数据量大, 且预测效果并不理想. 特别是对于完全超出训练情形以外的工况(如渐扩型流道), ANN模型的效果极差.

3.3 Bagging集成模型预测结果

本文采用python机器学习框架scikit-learn内置的集成模型——Bagging Regressor, 对电池性能进行回归预测, 其中基学习器设置为上述的单一神经网络回归模型(MLPRegressor). 经试验, 当基学习器的数目 T 为40时, MSE较小, 因此将基学习器的数目设为40.

为了体现Bagging方法对减少训练数据量的优越性, 仅选取表5中训练数据组2(即11种流道尺寸, 共121组数据), 训练基于Bagging方法的神经网络集成模型.

图8 单一ANN模型(121组数据训练)预测结果与数值模拟结果对比. (a) 等截面通道; (b) 渐缩流道; (c) 渐扩流道

利用该神经网络集成模型, 对等截面流道(预测组1)、渐缩型流道(预测组2)和渐扩型流道(预测组3)结构燃料电池的性能曲线进行快速预测, Bagging神经网络集成模型预测结果与数值模拟结果对比如图9所示. 很明显, 尽管使用的数据量非常低, 采用Bagging神经网络集成模型对等截面通道与变截面渐缩通道燃料电池的性能曲线预测趋势合理, 集成模型的预测值与模拟值吻合程度高, 特别是在浓差极化区域, 其结果吻合度较好. 经分析, 对于等截面流道类型, Bagging集成神经网络模型预测值与数值模拟结果的MSE仅为 1.23×10^{-5} , MAPE仅为9.16%. 其误差值较采用大量训练数据(即33种流道尺寸, 共363组数据)的单一ANN模型的预测误差均减小. 同样地, 对于渐缩型流道, Bagging集成神经网络模型预测值与数值模拟结果的误差也均有所降低, 其MSE仅为 1.03×10^{-4} , MAPE仅为7.87%. 上述对比说明, 基于Bagging方法集成后的神经网络模型较单一ANN模型的预测准确度更高, 同时使用的训练数据量更少, 证明了Bagging集成模型在预

测准确度及数据有效利用方面都有着较好的优越性. 更重要的是, 如图9(c)所示, 采用Bagging神经网络集成模型预测渐扩型流道燃料电池的性能时仍然表现良好. Bagging集成模型预测与数值模拟结果吻合非常好, 其误差MSE值为 1.52×10^{-4} , MAPE值为11.45%. 与其形成明显对比的是, 单一ANN模型无法准确预测或者根本无法预测渐扩型流道燃料电池的性能. 由此可说明, Bagging集成模型具有更好的鲁棒性.

4 结论

本文首先建立三维稳态质子交换膜燃料电池模型, 研究了流道的进-出口高度对燃料电池性能的影响, 然后将模拟得到的结果作为神经网络模型的基础训练数据, 以流道进、出口的高度和电池的电压为输入变量, 以电池的电流密度值为输出变量, 建立了3层BP神经网络模型. 利用Bagging集成学习方法对单一神经网络模型进行集成, 构建了基于Bagging神经网络

图9 Bagging神经网络集成模型(121组数据训练)预测结果与数值模拟结果对比. (a) 等截面流道; (b) 渐缩型流道; (c) 渐扩型流道

集成模型的燃料电池性能预测方法。以预测不同流道进、出口高度的燃料电池性能的准确度为判别标准,对比了Bagging神经网络集成模型相对于单一ANN模型的优势。研究表明:相比于单一ANN模型, Bagging集成模型不仅在预测的准确度上表现更好,而且所需的训练数据量更少;尽管采用少量训练数据且训练数据中仅包含等截面流道和渐缩型流道类型,但训练后的Bagging集成模型能够较为准确地预测渐扩型流道类

型的燃料电池的性能,而这一点是单一ANN模型无法实现的,说明本文提出的基于Bagging方法的神经网络集成模型的鲁棒性更好。因此,将Bagging神经网络集成模型作为燃料电池性能预测的工具,不仅能够大幅减少训练数据的获取工作,即实验或仿真模拟的工作量,而且能够更为准确地反映出输入变量与输出变量之间的映射关系,从而用于更宽工况范围内燃料电池性能的快速预测。

参考文献

- 1 Frano B. PEM Fuel Cells: Theory and Practice. Cambridge, USA: Elsevier/Academic Press, 2013
- 2 Larminie J, Dicks A. Fuel Cell System Explained. Hoboken: John Wiley & Sons Ltd, 2003
- 3 Bawazeer K, Zilouchian A. Prediction of products quality parameters of a crude fractionation section of an oil refinery using neural networks. In: International Conference on Neural Networks. Houston: IEEE, 1997. 157–162
- 4 Jemei S, Hissel D, Pera M C, et al. Black-box modeling of proton exchange membrane fuel cell generators. In: IEEE 2002 28th Annual Conference of the Industrial Electronics Society. IECON 02. Sevilla: IEEE, 2002. 1474–1478
- 5 Ou S, Achenie L E K. A hybrid neural network model for PEM fuel cells. *J Power Sources*, 2005, 140: 319–330
- 6 Zilouchian A, Jamshidi M. Intelligent Control Systems Using Soft Computing Methodologies. Boca Raton: CRC Press, Inc., 2001
- 7 Lee W. Empirical modeling of polymer electrolyte membrane fuel cell performance using artificial neural networks. *Int J Hydrogen Energy*, 2004, 29: 961–966
- 8 Saengrungs A, Abtahi A, Zilouchian A. Neural network model for a commercial PEM fuel cell system. *J Power Sources*, 2007, 172: 749–759
- 9 Puranik S V, Keyhani A, Khorrami F. Neural network modeling of proton exchange membrane fuel cell. *IEEE Trans Energy Convers*, 2010, 25: 474–483
- 10 Han I S, Chung C B. Performance prediction and analysis of a PEM fuel cell operating on pure oxygen using data-driven models: A comparison of artificial neural network and support vector machine. *Int J Hydrogen Energy*, 2016, 41: 10202–10211
- 11 Seyhan M, Akansu Y E, Murat M, et al. Performance prediction of PEM fuel cell with wavy serpentine flow channel by using artificial neural network. *Int J Hydrogen Energy*, 2017, 42: 25619–25629
- 12 Chávez-Ramírez A U, Muñoz-Guerrero R, Durón-Torres S M, et al. High power fuel cell simulator based on artificial neural network. *Int J Hydrogen Energy*, 2010, 35: 12125–12133
- 13 Jemei S, Hissel D, Pera M C, et al. A new modeling approach of embedded fuel-cell power generators based on artificial neural network. *IEEE Trans Ind Electron*, 2008, 55: 437–447
- 14 Kalogirou S A. Artificial neural networks in renewable energy systems applications: A review. *Renew Sust Energy Rev*, 2001, 5: 373–401
- 15 Wang L. A parametric study of PEM fuel cell performances. *Int J Hydrogen Energy*, 2003, 28: 1263–1272
- 16 Liu Z, Zeng X, Ge Y, et al. Multi-objective optimization of operating conditions and channel structure for a proton exchange membrane fuel cell. *Int J Heat Mass Transfer*, 2017, 111: 289–298
- 17 Kohonen T. An introduction to neural computing. *Neural Netw*, 1988, 1: 3–16
- 18 周志华. 机器学习. 北京: 清华大学出版社, 2016
- 19 Breiman L. Bagging predictors. *Mach Learn*, 1996, 24: 123–140

Prediction of fuel cell performance based on Bagging neural network ensemble model

YAN FeiYu, LI WeiZhuo, YANG WeiWei & HE YaLing

School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

The influence of the inlet and outlet heights of the flow channel on the performance of a proton exchange membrane fuel cell was studied with a three-dimensional fuel cell mathematical model. The numerical results were used as the basic training data of a three-layer back-propagation artificial neural network (ANN) model in which the inlet and outlet heights of the flow channel as well as the cell voltage were set to be the input variables while cell current density is the output variable. Then, applying the Bagging ensemble learning method to integrate the neural network model, a fuel cell performance prediction method is constructed. It was shown that as compared with the ANN model, the Bagging neural network model exhibited higher prediction accuracy and less requirements of model training data. It also can be applied for rapid prediction of fuel cell performance in a wide range of conditions beyond the training data, showing the robustness of the proposed Bagging neural network ensemble model.

proton exchange membrane fuel cell, BP neural network, Bagging, numerical simulation, performance prediction

doi: [10.1360/N092018-00368](https://doi.org/10.1360/N092018-00368)