DOI: 10.19666/j.rlfd.202505080

碱性电解水制氢系统建模与仿真

黄柳燕[1]，巫志华[1]，张晨曦[1]，陶加银[1]，刘姣姣[2]，韩 涛[3]，赵桦粮[4,5]
（1. 西安航天科技工业有限公司，陕西 西安 710000；
2. 西安航天动力研究所，陕西 西安 710100；
3. 西安航天远征流体控制股份有限公司，陕西 西安 710100；
4. 北京合工仿真技术有限公司，北京 100192；
5. 武汉理工大学现代汽车零部件技术湖北省重点实验室，湖北 武汉 430070）

［摘 要］针对现有碱性电解水制氢技术主要聚焦于电解槽性能试验、电解小室流场优化等方面，鲜有关注制氢系统的整体描述与关键设备的机理建模仿真。采用 gPROMS 过程模拟软件，参考化工流程模拟方法，以某 200 m³/h（标况，下同）碱性电解水制氢系统为研究对象，建立了基于机理分析的分布式参数模型，对系统关键设备进行精细化建模与仿真计算。通过将仿真结果与实验数据进行对比验证，结果表明系统主要性能参数的模拟值与实测数据具有良好的一致性，经计算平均误差小于 5%，验证了模型的有效性，所建立的模型能够描述和预测系统参数的变化，为后续系统设计、优化及控制提供方法及支撑。

［关 键 词］碱性电解水制氢系统；gPROMS 软件；建模；仿真

［引用本文格式］黄柳燕，巫志华，张晨曦，等. 碱性电解水制氢系统建模与仿真[J]. 热力发电，2026，55(3)：110-118.
HUANG Liuyan, WU Zhihua, ZHANG Chenxi, et al. Modeling and simulation of alkaline water electrolysis hydrogen production system[J]. Thermal Power Generation, 2026, 55(3): 110-118.

Modeling and simulation of alkaline water electrolysis hydrogen production system

HUANG Liuyan[1], WU Zhihua[1], ZHANG Chenxi[1], TAO Jiayin[1], LIU Jiaojiao[2],
HAN Tao[3], ZHAO Hualiang[4,5]
(1. Xi'an Aerospace Science and Technology Industry Co., Ltd., Xi'an 710000, China;
2. Xi'an Aerospace Propulsion Institute, Xi'an 710100, China;
3. Xi'an Aerospace Yuanzheng Fluid Control Co., Ltd., Xi'an 710100, China;
4. Beijing Uninsim Technology Co., Ltd., Beijing 100192, China;
5. Hubei Laboratory of Modern Automotive Parts Technology, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: The existing alkaline electrolysis hydrogen production technology primarily focuses on performance testing of electrolyzers and optimization of flow fields in electrolysis cells, and little attention is paid to overall description of the hydrogen production system as well as the mechanism modeling and simulation of key equipment. To solve this problem, using gPROMS process simulation software and referencing chemical process simulation methods, a distributed parameter model based on mechanism analysis was established for a 200 m³/h (standard condition) alkaline water electrolysis hydrogen production system. The key equipment of the system was finely modeled and simulated. By comparing the simulation results with experimental data, the results show that the simulated values of the main performance parameters of the system have good consistency with the measured data. The calculated average error is less than 5%, which verifies the effectiveness of the model. The established model can describe and predict the changes in system parameters, providing methods and support for subsequent system design, optimization, and control.

Key words: alkaline water electrolysis hydrogen production system; gPROMS software; modeling; simulation

收 稿 日 期：2025-05-21 修 回 日 期：2025-06-13 接 受 日 期：2025-06-19
第一作者简介：黄柳燕（1987），女，硕士，高级工程师，主要研究方向为氢能、透平机械相关技术，hera_grace@163.com。
通信作者简介：张晨曦（1999），女，硕士，工程师，主要研究方向为氢能相关技术，1345917731@qq.com。

氢能作为零碳能源，在交通、能源和化工等领域具有广阔的应用前景，其大规模利用将助力我国实现“双碳”目标[1]。根据碳排放强度及制氢方式，氢能可分为绿氢、蓝氢和灰氢。绿氢通过可再生能源电解水制取，几乎无碳排放，是真正的清洁能源。目前全球约有 70 个在建或规划的绿氢项目[2]，其共同特点是“源网荷储一体化”：以风电、光伏等可再生能源为电源，结合电网供电进行电解水制氢，产出的氢气以气态、液态或固态储存，并应用于交通、能源或化工领域。绿氢项目的电源输入和氢气输出方式多样，但电解水制氢的核心工艺相似。

现有研究多聚焦于制氢系统电解槽性能试验[3-4]、小室流场优化[5-8]、气泡动力学[9-11]、电极特性[12-13]或风光制氢系统仿真[14-16]，但大多采用经验公式建模[17-21]或 MATLAB/SIMULINK[22]/Aspen[23]软件仿真，鲜有文献关注制氢系统关键设备的机理建模[24-25]。然而，制氢系统关键设备选型、工艺参数设定、运行策略制定等需基于对系统的全面理解，而目前国内项目仍缺乏启停参数、长期稳定运行及变工况运行数据。

碱性电解水制氢技术成熟、成本低、单槽产能大，是目前绿氢生产的主要方式。针对上述问题，本文基于 gPROMS 软件，借鉴化工过程仿真方法，对碱性电解水制氢系统进行机理性分布式参数建模，采用联立方程法，开展系统仿真研究。

1 制氢系统数学模型

碱性电解水制氢系统主要由碱性电解槽、气液分离器、换热器、循环泵、控制阀组、工艺管道及智能控制系统等核心部件组成。针对系统建模，本研究采用多尺度混合建模方法：1）对电解槽这一核心设备进行机理特性建模，基于化工生产的“三传一反”基础理论（质量传递、动量传递、能量传递、化学反应）构建分布式参数模型，精确描述电极反应动力学、离子传导及气泡效应等微观机制。传统针对电化学反应器（包括电解槽、燃料电池和电镀工艺设备等）的建模多采用集总参数法、等效电路法和伏安曲线法等，这些方法均不考虑设备内部的详细流动、传质、传热和电化学反应过程，仅仅基于少量的宏观实验数据做简单的物质与能量衡算，模型方法不具备动态特性和预测能力；2）对分离器、换热器等辅助设备采用集总参数法建模，通过能量、质量守恒方程表征其宏观特性，在保证精度的同时降低计算复杂度。通过联立方程法对工艺过程中的非线性方程组进行协同求解，实现系统级的仿真计算。制氢系统单元流程见图 1。

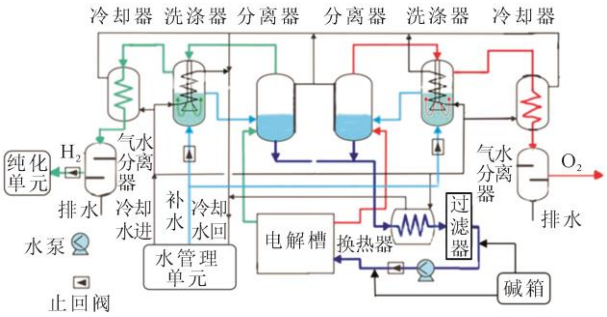


图 1 制氢系统单元流程

Fig.1 Flowchart of hydrogen production system units

1.1 碱性电解槽数学模型

碱性电解槽一般为压滤式电解槽，由数十个到上百个电解单元按规律叠压而成。每个电解单元即为一个电解小室。每个电解小室由极板、流道、电极和隔膜组成。碱性电解槽为制氢系统中关键部件，通常采用半经验公式进行模拟计算[26]，本文采用机理建模方法。以下为碱性电解槽各部件的计算方程。

1.1.1 极板

能量守恒方程为：

$$C_p\rho\frac{\partial T}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)+\frac{I_e^2}{\sigma_e} \tag{1}$$

电流与电势方程为：

$$\frac{\partial I_e}{\partial z}=0 \tag{2}$$

$$I_e=-\sigma_e\frac{\partial U_e}{\partial z} \tag{3}$$

式中：C_p 为极板材料比热容，J/(kg K)；ρ为密度，kg/m^3；T 为温度，K；t 为时间，s；z 为厚度方向；λ为热导率，W/(m K)；I_e 为电子电流密度，A/cm^2；σ_e 为电子导电率，S/m；U_e 为电势，V。

1.1.2 流道

质量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p\rho_p w_c)=-\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_p\rho_p u_p w_c)+J_c \tag{4}$$

能量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_p(\alpha_p\rho_p h_p)=-\sum_p\frac{\partial}{\partial x}(\alpha_p\rho_p u_p h_p)+Q_{BP}+Q_{BL} \tag{5}$$

动量守恒方程为：

$$-\frac{\partial p}{\partial t}=\rho u\frac{\partial u}{\partial t}+f_1\mu u+f_2\rho u^2 \tag{6}$$

式中：α_p 气/液相体积分数；w_c 为组分 c 质量分数；x 为流动方向；u_p 为气/液相速度，m/s；J_c 为 c 组分传质源项；h_p 为气/液相比焓，kJ/kg；Q_{BP} 为与主机板热流密度，W/m^2；Q_{BL} 为多孔电极热流密度，W/m^2；p 为流体压力，Pa；f_1、f_2 为流阻系数；μ为流体动力黏度，Pa s。

1.1.3 电极

质量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon\alpha_p\rho_p w_c)=-\varepsilon\frac{\partial}{\partial z}(\alpha_p J_c)-\frac{\partial}{\partial z}(uw_c)+\frac{\nu_c H_R}{nF} \tag{7}$$

能量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_p C_p T+\varepsilon\sum\nolimits_p(\alpha_p\rho_p h_p))=\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\lambda}{\delta}\frac{\partial T}{\partial z}\right)-\sum\nolimits_p\frac{\partial}{\partial z}(u_p\alpha_p\rho_p h_p)-\sum\nolimits_p\frac{\partial}{\partial z}(h_c J_c)+\frac{I_e^{\,2}}{\sigma_e}+\frac{I_l^{\,2}}{\sigma_i}+H_R\varphi+\frac{H_R}{nF}\left(U_0-RT\ln\left(\prod\nolimits_i\left(\frac{w_c}{w_0}\right)^{\nu_i}\right)\right) \tag{8}$$

动量守恒方程为：

$$-\frac{\partial p}{\partial z}=\frac{\mu}{K}u \tag{9}$$

电子电流与电势方程为：

$$\frac{\partial I_e}{\partial z}=H_R \tag{10}$$

$$I_e=-\sigma_e\frac{\partial U_e}{\partial z} \tag{11}$$

离子电流与电势方程为：

$$-(1-\varepsilon)\frac{\partial I_l}{\partial z}=H_R \tag{12}$$

$$I_l=-(1-\varepsilon)\sigma_l\frac{\partial U_l}{\partial z} \tag{13}$$

能斯特方程为：

$$U_b=-\frac{\Delta G_b}{n_{e,b}F}-\frac{RT}{n_{e,b}F}\lg\left(\prod\nolimits_b\left(\frac{x_{s,l}P}{P_{ref}}\right)^{\nu_{i,j}}\right) \tag{14}$$

过电势计算方程为：

$$\eta_{an,b}=(U_{an,e}-U_{an,l})-U_{an,b} \tag{15}$$

$$\eta_{ca,b}=U_{ca,b}-(U_{ca,e}-U_{ca,l}) \tag{16}$$

Butler-Volmer 方程为：

$$I_j=n_{e,j}J_j\exp\left(-\frac{E_{a,j}}{R}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_{ref}}\right)\right)\prod\nolimits_j\left(\frac{x_{s,i}p}{p_{ref}}\right)^{\nu_{R,i,j}}\left(\exp\left(\frac{a_{rd,j}n_{e,j}F\eta_j}{RT}\right)-\exp\left(\frac{-a_{ox,j}n_{e,j}F\eta_j}{RT}\right)\right) \tag{17}$$

式中：ε为孔隙率；ν_c、ν_i 为反应计量数；H_R 为电子生产率，C/(m^3 s)；n 为反应电子数；F 为法拉第常数，C/mol；h_c 为组分 c 比焓，kJ/kg；I_l 为离子电流密度，A/cm^2；ε_l为离子电导率，S/m；φ为活化极化电势，V；U_0 为参考平衡电位，V；w_0 为参考质量分数；U_l 为离子电势，V；U_b 为半电池电势，V；ΔG_b 为吉布斯自由能，J/mol；$n_{e,j}$ 为交换电子数；$x_{s,j}$ 为表观摩尔分数；p_{ref} 为参考压力，Pa；$\nu_{j,i}$ 为 j 反应组分 i 的计量数；$\eta_{an,b}$、$\eta_{ca,b}$ 为阳极、阴极过电势，V；$U_{an,1}$、$U_{ca,1}$ 为阳极、阴极离子电势，V；$U_{an,b}$、$U_{ca,b}$ 为阳极、阴极半电池电势，V；$U_{an,e}$、$U_{ca,e}$ 为阳极、阴极电子电势，V；I_j 为电流密度，A/cm^2；J_j 为参考电流密度，A/cm^2；$E_{a,j}$ 为活化能，J/mol；T_{ref} 为参考温度，K；$\nu_{R,i,j}$ 为反应级数；$a_{rd,j}$、$a_{ox,j}$ 为还原、氧化反应传输系数；R 为气体常数，J/(mol K)。

1.1.4 隔膜

能量守恒方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}((1-\varepsilon)\rho_s C_p T+\varepsilon\rho_l h_l)=-\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)+\frac{I_e^{\,2}}{\sigma_e}+\frac{I_i^{\,2}}{\sigma_i} \tag{18}$$

电子电流与电势方程为：

$$I_e=-\sigma_e\frac{\partial U_e}{\partial z} \tag{19}$$

离子电流与电势方程为：

$$I_i=-\sigma_i\frac{\partial U_i}{\partial z} \tag{20}$$

隔膜扩散计算方程为：

$$k_{diff,i}=k_{diff,i,ref}\exp\left(-E_{diff,i}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \tag{21}$$

隔膜渗透计算方程为：

$$k_{p,i}=k_{p,i,ref}\exp\left(-E_{p,i}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \tag{22}$$

式中：ρ_s、ρ_l 分别为固体、液体密度，kg/m^3；h_l 为液相比焓，kJ/kg；$k_{diff,i,ref}$、$k_{diff,i}$ 分别为组分 i 在参考温度下的扩散系数、扩散系数，m^2/s；$E_{diff,i}$ 为组分 i 参考温度下扩散系数活化能，J/mol；$k_{p,i,ref}$、$k_{p,i}$ 分别为组分 i 在参考温度下的渗透系数、渗透系数，m^2/s；$E_{p,i}$ 为组分 i 在参考温度下渗透系数活化能，J/mol。

1.1.5 电导率计算修正

电子导电率计算方程为：

$$\sigma_e=\sigma_{e,ref}\exp\left(-k_{\sigma e}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_{ref}}\right)\right) \tag{23}$$

离子导电率计算方程为：

$$\sigma_{\mathrm{i}}=(f_{\mathrm{con}}+f_{\mathrm{line}}(1-x_{\mathrm{H_2O}}))\exp\left(-k_{\sigma\mathrm{i}}\left(\frac{1}{T}-\frac{1}{T_{\mathrm{ref}}}\right)\right) \quad (24)$$

式中：σ_{e}、$\sigma_{\mathrm{e,ref}}$ 分别为电子导电率及参考温度下的电子导电率，S/m；$k_{\sigma\mathrm{e}}$ 为参考温度下电子导电率活化能，J/mol；$k_{\sigma\mathrm{i}}$ 为参考温度下离子导电率活化能，J/mol；$x_{\mathrm{H_2O}}$ 为液态水摩尔分数；f_{con} 为离子导电率常数项；f_{line} 为 KOH 浓度影响因子。

1.2 分离框架模型

在制氢系统中，分离框架指气液分离器、换热器、循环泵、控制阀组等用于气液分离的设备，主要采用集总参数法进行建模，不考虑内部物理量的分布特性。

1.2.1 气液分离器模型

质量守恒方程为：

$$\hat{V}\frac{\mathrm{d}\tilde{m}_i}{\mathrm{d}t}=F_{\mathrm{in}}w_{\mathrm{in},i}-F_{\mathrm{L}}x_i-F_{\mathrm{V}}y_i \quad (25)$$

能量守恒方程为：

$$\hat{V}\frac{\mathrm{d}\hat{u}}{\mathrm{d}t}=F_{\mathrm{in}}h_{\mathrm{in}}+Q_{\mathrm{in}}-F_{\mathrm{L}}h_{\mathrm{L}}-F_{\mathrm{V}}h_{\mathrm{V}}-Q_{\mathrm{wall}} \quad (26)$$

$$\hat{u}=\tilde{m}_{\mathrm{T}}h-100p \quad (27)$$

$$Q_{\mathrm{wall}}=A_{\mathrm{in}}H_{\mathrm{in}}(T-T_{\mathrm{wall}}) \quad (28)$$

$$V_{\mathrm{wall}}\frac{\mathrm{d}\hat{u}_{\mathrm{wall}}}{\mathrm{d}t}=Q_{\mathrm{wall}}-Q_{\mathrm{out}} \quad (29)$$

$$\hat{u}_{\mathrm{wall}}=\rho_{\mathrm{wall}}C_{\mathrm{wall}}T_{\mathrm{wall}} \quad (30)$$

$$Q_{\mathrm{out}}=A_{\mathrm{out}}H_{\mathrm{out}}(T_{\mathrm{wall}}-T_{\mathrm{out}}) \quad (31)$$

相平衡方程为：

$$\frac{y_i\phi_{i,\mathrm{V}}}{\sum_{i\in C}\left(\frac{y_i}{M_{\mathrm{w},i}}\right)}=\frac{x_i\phi_{i,\mathrm{L}}}{\sum_{i\in C}\left(\frac{x_i}{M_{\mathrm{w},i}}\right)} \quad (32)$$

$$\sum_{i\in C}x_i=1 \quad (33)$$

$$\sum_{i\in C}y_i=1 \quad (34)$$

$$\tilde{m}_{\mathrm{T}}=\tilde{m}_{\mathrm{V}}+\tilde{m}_{\mathrm{L}} \quad (35)$$

$$\tilde{m}_{\mathrm{T}}w_i=\tilde{m}_{\mathrm{V}}y_i+\tilde{m}_{\mathrm{L}}x_i \quad (36)$$

$$h\tilde{m}_{\mathrm{T}}=h_{\mathrm{V}}\tilde{m}_{\mathrm{V}}+h_{\mathrm{L}}\tilde{m}_{\mathrm{L}} \quad (37)$$

$$\tilde{m}_{\mathrm{L}}=f_{\mathrm{LVol}}\rho_{\mathrm{L}} \quad (38)$$

$$\tilde{m}_{\mathrm{V}}=(1-f_{\mathrm{LVol}})\rho_{\mathrm{V}} \quad (39)$$

$$w_i=\frac{\tilde{m}_i}{\tilde{m}_{\mathrm{T}}} \quad (40)$$

压降方程为：

$$p_{\mathrm{out}}-p=10^{-5}\rho_{\mathrm{L}}glz_{\mathrm{vessel}} \quad (41)$$

式中：$\hat{V}$ 为有效体积，m^3；$\tilde{m}_i$ 为组分 i 单位体积质量，$\mathrm{kg/m}^3$；F_{in} 为入口质量流量，kg/s；F_{L} 为出口液体质量流量，kg/s；F_{V} 为出口气体质量流量，kg/s；$w_{\mathrm{in},i}$ 为入口组分 i 质量分数；x_i 为组分 i 在液相中质量分数；y_i 为组分 i 在气相中质量分数；$\hat{u}$ 为单位体积流体能量，$\mathrm{kJ/m}^3$；h_{V} 为出口气体比焓，kJ/kg；h_{in} 为入口单位质量焓值，kJ/kg；h_{L} 为出口液体比焓，kJ/kg；Q_{in} 为供给流体热流率，kJ/s；Q_{wall} 为流体传到壁面热流率，kJ/s；Q_{out} 为壁面传到外界热流率，kJ/s；T_{out} 为环境温度，K；T_{wall} 为壁面温度，K；V_{wall} 为壁面体积，m^3；H_{in} 为流体与壁面换热系数，$\mathrm{W/(m^2\,K)}$；H_{out} 为壁面与外界换热系数，$\mathrm{W/(m^2\,K)}$；A_{in} 为内壁面换热面积，m^2；A_{out} 为外壁面换热面积，m^2；ρ_{wall} 为壁面密度，$\mathrm{kg/m}^3$；C_{wall} 为壁面热容，J/(kg K)；$\phi_{i,\mathrm{L}}$ 为组分 i 在液相中的逸度系数；$\phi_{i,\mathrm{V}}$ 为组分 i 在气相中的逸度系数；$\tilde{m}_{\mathrm{L}}$ 为液体单位体积质量，$\mathrm{kg/m}^3$；$\tilde{m}_{\mathrm{V}}$ 为气体单位体积质量，$\mathrm{kg/m}^3$；$\tilde{m}_{\mathrm{T}}$ 为容器内总物质单位体积质量，$\mathrm{kg/m}^3$；f_{LVol} 为液体的体积分数；w_i 为组分 i 总质量分数；l 为容器相对高度；z_{vessel} 为容器高度，m；$M_{\mathrm{w},i}$ 为组分 i 分子量，g/mol；C 为所有组分的集合。

1.2.2 阀门模型[27]

流体通过阀门假定是绝热过程，因此流体经过阀门焓值不变。

压降计算方程为：

$$\Delta p=p_{\mathrm{out}}-p_{\mathrm{in}} \quad (42)$$

流量计算方程为：

$$F=10^3C_v x\Delta p \quad (43)$$

阀门开度方程为：

$$\tau\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=x_{\mathrm{sp}}-x \quad (44)$$

式中：ΔP 为压降，kPa；p_{in}、p_{out} 分别为入口、出口压力，kPa；F 为质量流量，kg/s；C_{v} 为流阻系数；x 为阀门实际开度；x_{sp} 为阀门设置开度；τ 为时间常数。

1.2.3 泵模型

$$\Delta p=p_{\mathrm{out}}-p_{\mathrm{in}} \quad (45)$$

$$h_{\mathrm{out}}=h_{\mathrm{in}} \quad (46)$$

1.2.4 换热器模型

能量守恒方程为：

$$F_{\mathrm{out}}h_{\mathrm{out}}=F_{\mathrm{in}}h_{\mathrm{in}}+Q \quad (47)$$

质量守恒方程为：

$$F_{\mathrm{out}}=F_{\mathrm{in}} \quad (48)$$

$$w_{\mathrm{out},i}=w_{in,i} \quad (49)$$

式中：h_{in}、h_{out} 分别为入口、出口比焓值，kJ/kg；p_{in}、p_{out} 分别为入口、出口压力，kPa；F_{in}、F_{out} 分别为入口、出口质量流率，kg/s；Q 为热交换功率，kW；$w_{in,i}$、$w_{out,i}$ 分别为组分 i 入口、出口质量分数。

1.2.5 管道模型[28]

基本流动系数方程为：

$$F = 10^5 C_v (p_{in} - p_{out}) \tag{50}$$

流体速度和雷诺数方程为：

$$v = \frac{F}{A_{cross}\rho} \tag{51}$$

$$Re = \frac{v\rho d_i}{\mu} \tag{52}$$

平均管道压力方程为：

$$p_{avg} = \frac{p_{in} - p_{out}}{2} \tag{53}$$

管道压降方程（伯努利方程）为：

$$10^5 (p_{in} - p_{out}) + \rho g (z_{in} - z_{out}) = \frac{32\mu L v}{d_i^2} + \frac{K\rho v^2}{2},\ Re < \frac{16}{f_F} \tag{54}$$

$$10^5 (p_{in} - p_{out}) + \rho g (z_{in} - z_{out}) = \frac{\rho v^2}{2}\left(\frac{4 f_F L}{d_i} + K\right),\ Re \geqslant \frac{16}{f_F} \tag{55}$$

完全湍流阻力系数方程为：

$$\frac{1}{\sqrt{f_F}} = -4\lg\left(\frac{\varepsilon}{3.7 d_i}\right) \tag{56}$$

式中：A_{cross} 为横截面积，m^2；d_i 为管道内径，m；v 为平均流体速度，m/s；μ为流体动力学黏度，m/s；Re 为流动雷诺数；p_{avg} 为平均管道压力，kPa；L 为管道长度，m；K 为等效流阻系数；z_{in}、z_{out} 分别为进、出口高度，m；ε为壁面粗糙度，m；f_F 为湍流摩擦因子。

1.3 控制模型[29]

在碱性电解水系统模型中，除电解槽和辅助部件模型外，还需搭建控制模型。实际系统主要包含 4 种闭环控制策略。

氢侧液位控制　调节氢出口阀开度，维持氢氧液位差（PID 控制）。

氧侧压力控制　调节氧出口阀开度，稳定氧侧压力（PID 控制）。

碱液温度控制　调节冷却水阀开度，控制温度（PID 控制）。

补水控制　基于氢侧液位高度进行阶梯式补水（上下限单点控制）。

根据仿真需求，部分算例会简化控制模型（如用完美控制替代 PID 控制）。

PID 控制器基于理想 PID 算法，建立过程变量（P_V）与操作变量（M_V）的关系。

基本方程为：

$$M_V = B + (P + I + D) \tag{57}$$

误差信号为：

$$e = S_P - P_V \tag{58}$$

比例项 P 为：

$$P = K_c e \tag{59}$$

积分项 I 为：

时域

$$I = \frac{K_c}{\tau_I}\int_0^t e(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{60}$$

拉普拉斯域

$$I = \frac{K_c}{\tau_I s} \tag{61}$$

微分项 D 为：

时域

$$D = K_c \tau_D \frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t} \tag{62}$$

拉普拉斯域

$$D = K_c \tau_D s \tag{63}$$

拉普拉斯域传递函数为：

$$M_V = B + K_c\left(1 + \frac{1}{\tau_I s} + \tau_D s\right)e \tag{64}$$

输入输出归一化为：

$$P_V \to \frac{P_V}{P_{V_{max}} - P_{V_{min}}} \tag{65}$$

$$M_V \to \frac{M_V}{M_{V_{max}} - M_{V_{min}}} \tag{66}$$

式中：M_V、P_V 分别为操作变量、过程变量；$P_{V_{max}}$、$P_{V_{min}}$ 分别为过程变量的最大值和最小值；$M_{V_{max}}$、$M_{V_{min}}$ 分别为操作变量的最大值和最小值；B 为无错误时操作值；P、I、D 分别为 PID 控制中的比例项、积分项、微分项；e 为误差信号；S_p 为比例项设定值；K_c 为控制器增益；s 为拉普拉斯算子；τ_I、τ_D 分别为积分时间常数、导数时间常数。

2 模型验证

电解槽模型如图 2 所示。为验证关键设备−电解槽建模方法及算法准确性，以某 200 m^3/h（标况，

下同）电解水制氢碱性电解槽结构参数和材料关键参数为边界条件，通过式(1)—式(24)进行求解，常数项参数见表 1。

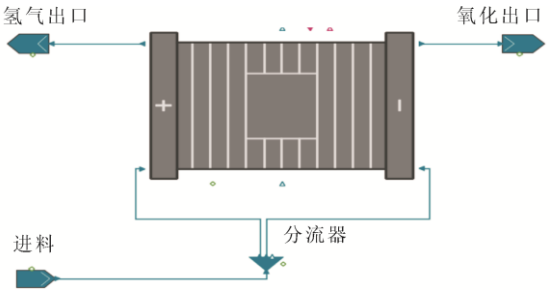


图 2 电解槽模型
Fig.2 Simulation model of the electrolyzer

表 1 某 200 m³/h 碱性电解槽常数
Tab.1 Constants of a 200 m³/h alkaline electrolyzer

项目	数值
电堆数	2
小室数量	50（串联）
参考温度/℃	25
参考压力/MPa	0.1
阴极参考电流密度/(A m^{-2})	2.954 580×10^{-12}
阴极活化能/(kJ mol^{-1})	101.168 350
阳极参考电流密度/(A m^{-2})	2.722 973×10^{-10}
阳极活化能/(kJ mol^{-1})	51.446 179
离子电导率常数项/(S m^{-1})	6.454 031 89
离子电导率 KOH 浓度影响因子/(S m^{-1})	2.400 475 00
离子导电率活化能/(kJ mol^{-1})	209.445 789

模拟不同电密、系统压力、碱液流量、碱液进口温度条件下，电解小室电压值。对应的试验工况见表 2。

表 2 多因素正交试验工况
Tab.2 Multi-factor orthogonal test conditions

工况	电密/(A m^{-2})	槽压/MPa	流量/(m^3 h^{-1})	温度/℃	小室电压/V	
					仿真值	试验值
Exp1	2 748	0.7	12	55	2.10	2.11
Exp2	2 748	1.0	15	60	2.10	2.09
Exp3	2 748	1.3	18	65	2.10	2.11
Exp4	2 748	1.6	21	70	2.09	2.09
Exp5	2 499	1.0	12	65	2.05	2.06
Exp6	2 499	0.7	15	70	2.05	2.05
Exp7	2 499	1.6	18	55	2.10	2.10
Exp8	2 499	1.3	21	60	2.10	2.09
Exp9	1 997	1.3	12	70	1.99	2.00
Exp10	1 997	1.6	15	65	2.02	2.02
Exp11	1 997	0.7	18	60	2.04	2.03
Exp12	1 997	1.0	21	55	2.06	2.08
Exp13	997	1.6	12	60	1.91	1.91
Exp14	997	1.3	15	55	1.93	1.93
Exp15	997	1.0	18	70	1.89	1.83
Exp16	997	0.7	21	65	1.90	1.90

小室电压仿真数据与试验数据的对比结果如图 3 所示。从图 3 可以看出，在不同电流密度、压力、流量、碱液入口温度条件下，电解小室电压仿真平均值与试验值结果整体吻合好，最大误差小于 3.5%，验证了仿真模型的有效性。

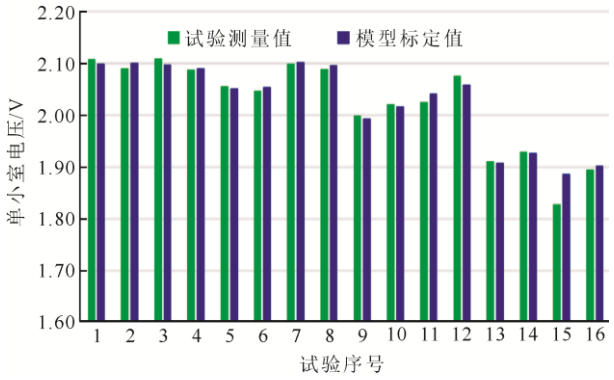


图 3 不同工况下试验值与仿真值对比
Fig.3 Comparison between the experimental and simulation results under different conditions

结合表 2 中小室电压仿真值与试验值可以看出：1）电流密度从 997 A/m^2 升至 2 748 A/m^2 时，小室电压从 1.9 V 增至 2.1 V，高电密区（如 2 499 A/m^2 增至 2 748 A/m^2）电压增幅趋缓，符合电解槽极化曲线规律，即随着电流密度的增大，小室电压总体呈增大趋势，低电密区增幅明显，高电密区增幅缓慢；2）相同电密下（工况 Exp1—工况 Exp4），槽压从 0.7 MPa 升至 1.6 MPa 时，小室电压几乎无变化（2.10±0.01 V），说明槽压对小室电压影响可忽略；3）流量增加（工况 Exp13—工况 Exp16），流量从 12 m^3/h 增加至 21 m^3/h，小室电压或增加或减小，温度从 60 ℃降低至 55 ℃，小室电压从 1.91 V 升至 1.93 V；温度从 55 ℃升高至 70 ℃，小室电压从 1.93 V 降低至 1.90 V 以下，说明电压受温度调制；4）工况 Exp15 小室电压试验值较仿真值偏差大，且与前后组试验值对比，电压偏差 0.07 V 以上，该偏差值比其他组试验偏差值均大，可能原因是试验值存在异常，后续可对工况 Exp15 条件重复试验，确认是否为系统性误差或偶然波动。

3 制氢系统仿真

本文利用 gPROMS 软件，基于某 200 m³/h 碱性电解水制氢系统 PID 图，搭建其系统仿真模型，见图 4。

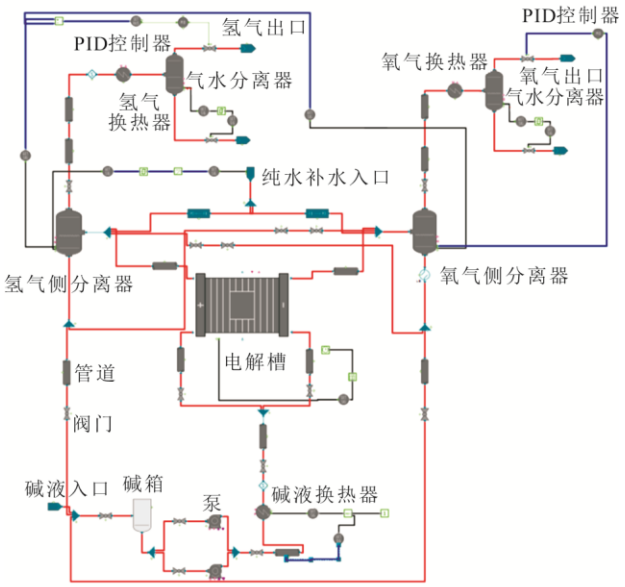
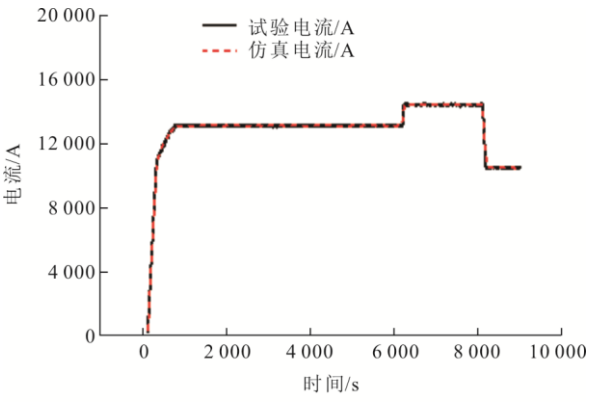


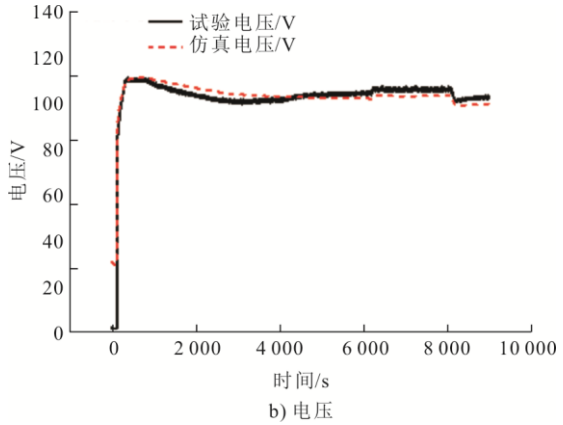
图 4 200 m³/h 碱性电解水制氢系统模型
Fig.4 Model of a 200 m³/h alkaline water electrolysis hydrogen production system

利用上述模型，加载与试验相同的电流边界，对比系统关键参数的动态变化，结果见图 5。从图 5 可以看出，随着电流的加载：1）电压迅速增大而后略有降低并趋于稳定，这是因为随着 负荷增大，电解槽温度升高，产气量大，KOH 溶液浓度随着分离器液位的降低而升高，以上因素均会造成电阻降低，电压减小；2）氢中氧、氧中氢体积分数先升高再降低而后趋于稳定，随着产气的发生，气体穿透膜进入对侧，低负荷和高负荷工况下，气体穿透率几乎无变化，但产气量增加，因此，低负荷下氢中氧、氧中氢浓度高，高负荷下氢中氧、氧中氢浓度低；3）试验中氢、氧分离器液位在启动初期因产气量小未能突破液相阻力，导致气液混合物在分离器中暂时集聚，且初期系统压力上升慢，液相排出管道驱动压差不足，排液速率低于进液速率，这 2 个原因可能造成液位上升，随着产气增多，电解过程不断消耗水，液位逐渐降低，当降到系统控制低液位处时，系统补水，液位不断升高，直至达到控制高液位处；4）仿真计算中氢、氧分离器液位在启动初期一个上升，一个下降是因为初期氧分离器内压力低，氢分离器内压力高，造成液体从氢分离器经联通管流向氧分离器，随着压力平衡，液位逐渐正常。

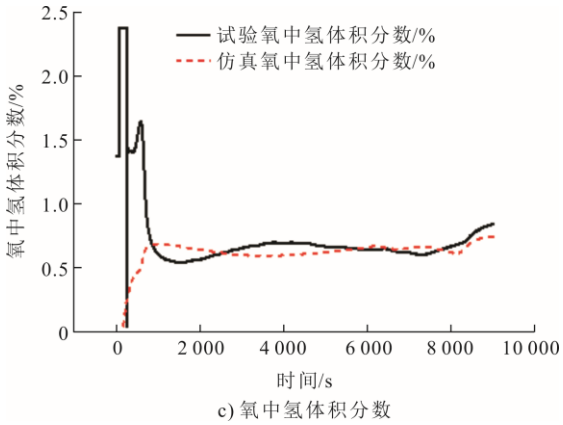
在启动过程中，氢中氧浓度和氧中氢体积分数因制氢系统管道存在空气或氮气使得环境未达到仪表检测要求，从而导致这 2 个值阶跃跳动，故这 2 个试验值在起始阶段无参考意义。



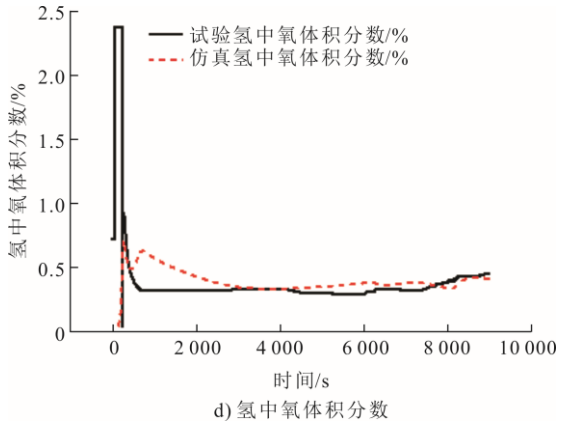
a) 电流



b) 电压



c) 氧中氢体积分数



d) 氢中氧体积分数

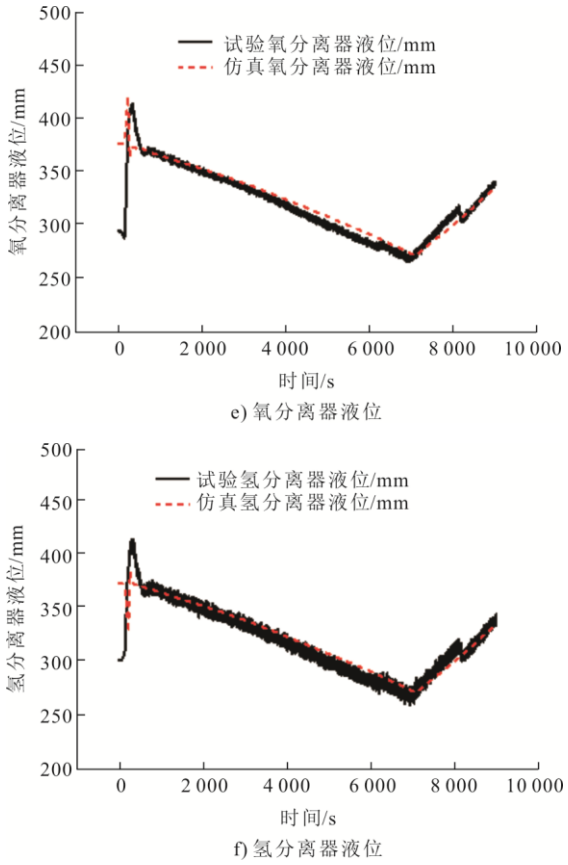


图 5 系统关键参数动态过程仿真与试验对比

Fig.5 Comparative diagram of simulation and experimental results for dynamic process of key system parameters

动态对比过程中，电解槽电压、氧中氢体积分数、氢中氧体积分数、氢分离器液位、氧分离器液位等反映制氢系统能耗和安全运行的关键参数，在整个动态仿真过程中精度都很高，其随时间变化趋势与实验值之间具有良好的一致性，整体误差低，经计算平均误差小于 5%，再次验证了模型的正确性，该仿真模型满足工程应用需求。

4 结　论

本文利用 gPROMS 软件，对系统关键设备采用机理建模法，对辅助设备采用集总参数建模法，借鉴化工工艺过程仿真理念，基于某 200 m³/h 碱性电解水制氢系统 PID 图，先对碱性电解槽关键设备进行模型验证，在变工况条件下，考察电流密度、电解槽压力、碱液流量、碱液温度等参数变化时，电解小室电压仿真值。经与试验值对比，结果吻合良好，最大误差小于 3.5%，验证了模型的可靠性。进一步对制氢系统进行动态模拟仿真，对比动态试验结果，电解槽电压、氧中氢浓度、氢中氧浓度、氢分离器液位、氧分离器液位等反映制氢系统能耗和安全运行的关键参数，在整个动态仿真过程中精度都很高，其随时间变化趋势与实验值匹配性好，整体误差低，经计算平均误差小于 5%，再次验证了系统模型的可靠性。

综上所述，本文所建立的模型能够描述、计算和预测系统参数的变化，此建模仿真方法可为工程上制氢系统设计、优化及控制提供支撑。在后续工作中，该模型可用于确定和比较不同参数变化对电解槽功率、效率和气体产出速率的影响，也可为电解槽性能拓宽提供思路。

［参 考 文 献］

［1］ 国家能源局. 国家能源局关于发布国家重点研发计划“氢能技术”重点专项 2024 年度项目申报指南的通知[R/OL]. (2024-08-15)[2024-08-15]. https://pc.h2cn.org.cn/jtxx42/202408/5a0cca1710e80dc32c85a55a2b0adfe4.html.
National Energy Administration. Notice of the National Energy Administration on Issuing the 2024 Annual Project Application Guidelines for the National Key R&D Program “Hydrogen Energy Technology” Key Special Project[R/OL]. (2024-08-15)[2024-08-15]. https://pc.h2cn.org.cn/jtxx42/202408/5a0cca1710e80dc32c85a55a2b0adfe4.html.

［2］ 刘冰. 京能鄂托克前旗 250 MW 光伏电站及氢能综合利用示范项目可行性研究报告[R]. 北京: 北京能源集团, 2022: 7-8.
LIU Bing. Feasibility study report on Jingneng Ejin Horo Front Banner 250 MW photovoltaic power station and hydrogen energy comprehensive utilization demonstration project[R]. Beijing: Beijing Energy Group, 2022: 7-8.

［3］ 聂知力. 新型碱性电解槽实验研究[D]. 北京: 北京化工大学, 2023: 1.
NIE Zhili. Experimental study of a new alkaline electrolyzer[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2023: 1.

［4］ 黄登高, 尹玉国, 胡石林, 等. 碱液流量对水电解槽运行的影响[J]. 河南化工, 2013(33): 26-28.
HUANG Denggao, YIN Yuguo, HU Shilin, et al. Effect of alkali solution flow rate on water electrolyzer operation[J]. Henan Chemical Industry, 2013(33): 26-28.

［5］ 石航博. 碱水制氢电解槽的开发与流场仿真及优化研究[D]. 北京: 北京化工大学, 2023: 1.
SHI Hangbo. Development and flow field simulation of alkaline electrolyzer for hydrogen production[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2023: 1.

［6］ 李军. 压滤式电解槽电解单元内流动特性的模拟研究[D]. 北京: 中国石油大学, 2020: 1.
LI Jun. Simulation study on flow characteristics in the unit of filter-press water electrolyzer[D]. Beijing: China University of Petroleum, 2020: 1.

［7］ GAO L Y, YANG L, WANG C H, et al. Three-dimensional two-phase CFD simulation of alkaline electrolyzers[J]. Journal of Electrochemistry, 2023, 29(9): 1-16.

［8］ 赵欢欢. 碱性固体聚合物水电解槽流道模拟与优化设计[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2010: 1.

ZHAO Huanhuan. Simulation and optimization design on flow channel of alkaline solid polymer electrolyte cell[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2010: 1.

[9] SCHILLINGS J, DOCHE O, DESEURE J. Modeling of electrochemically generated bubbly flow under buoyancy-driven and forced convection[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 85: 292-299.

[10] WEDIN R, DAHLKILD A A. On the transport of small bubbles under developing channel flow in a Buoyant gas-evolving electrochemical cell[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2001, 40: 5228-5233.

[11] BOISSONNEAU P, BYRNE P. An experimental investigation of bubble-induced free convection in a small electrochemical cell[J]. Journal of Applied Electro-chemistry, 2000, 30: 767-775.

[12] OKONKWO C P, BHOWMIK H, MANSIR B I, et al. Effect of electrode spacing on hydrogen production using a home-made alkaline electrolyzer[J]. Materials Letters, 2022, 36: 130841.

[13] FABRIZIO G, LOMBARDO S, SUNSERI C, et al. Nanostructured electrodes for hydrogen production in alkaline electrolyzer[J]. Renewable Energy, 2018, 123: 117-124.

[14] 王琦. 风能光能发电制氢系统的仿真模拟及性能分析[D]. 广州: 华南理工大学, 2021: 1.
WANG Qi. Simulation and performance analysis of wind and solar power to hydrogen system[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2021: 1.

[15] 王侃宏, 赵政通, 罗景辉, 等. 风光互补发电制氢储能系统模拟研究及性能分析[J]. 节能, 2019(11): 79-84.
WANG Kanhong, ZHAO Zhengtong, LUO Jinghui, et al. Simulation and performance analysis of hydrogen storage system for wind and solar complementary power generation[J]. Energy Conservation, 2019(11): 79-84.

[16] 苗伟杰, 窦真兰, 张春雁, 等. 风-光-氢多能互补系统仿真建模方法综述[J]. 上海节能, 2022(1): 46-55.
MIAO Weijie, DOU Zhenlan, ZHANG Chunyan, et al. Overview of simulation modeling methods on wind-solar-hydrogen multi-energy complementary system[J]. Shanghai Energy Conservation, 2022(1): 46-55.

[17] 李洋洋, 邓欣涛, 古俊杰, 等. 碱性水电解制氢系统建模综述及展望[J]. 汽车工程, 2022, 44(4): 567-582.
LI Yangyang, DENG Xintao, GU Junjie, et al. Comprehensive review and prospect of modeling of alkaline water electrolysis system for hydrogen production[J]. Automotive Engineering, 2022, 44(4): 567-582.

[18] OLIVIER P, BOURASSEAU C, BOUAMAMA B. Low-temperature electrolysis system modeling: a review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017, 78: 280-300.

[19] SHEN X J, ZHANG X Y, LIE T T, et al. Mathematical modeling and simulation for external electrothermal characteristics of an alkaline water electrolyzer[J]. Energy Research, 2018, 42: 3899-3914.

[20] ZOUHRI K, LEE S. Evaluation and optimization of the alkaline water electrolysis ohmic polarization: energy study[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2016, 41: 7253-7263.

[21] NIROULA S, CHAUDHARY C, SUBEDI A, et al. Parametric modelling and optimization of alkaline electrolyzer for the production of green hydrogen[J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2023, 1279: 012005.

[22] ABDIN Z, WEBB C J, GRAY E M. Modelling and simulation of an alkaline electrolyser cell[J]. Energy, 2017, 138: 316-331.

[23] WANG Y, REN S L, CHE X J, et al. Dynamic simulation of wind-powered alkaline water electrolysis system for hydrogen production[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, 97: 391-405.

[24] 张立栋, 陈怡冰, 龚明, 等. 质子交换膜电解水制氢影响因素的过程模拟[J]. 综合智慧能源, 2022, 33(5): 88-94.
ZHANG Lidong, CHEN Yibing, GONG Ming, et al. Process simulation of factors affecting proton exchange membrane water electrolysis for hydrogen production[J]. Integrated Intelligent Energy, 2022, 33(5): 88-94.

[25] IREM F E. Thermodynamic and electrochemical assessment of an alkaline electrolyzer (AE) at different operating parameters[J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2022, 10(2): 107225.

[26] SANCHEZ M, AMORES E, RODRIGUEZ L, et al. Semi-empirical model and experimental validation for the performance evaluation of a 15 kW alkaline water electrolyzer[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2018, 43: 20332-20345.

[27] 刘浩. 调节阀机理模型的建模与参数辨识[D]. 杭州: 杭州电子科技大学, 2016: 1.
LIU Hao. Mechanism modeling and parameter identigication of regulating valve[D]. Hangzhou: Hangzhou Dianzi University, 2016: 1.

[28] WHITE M K. Fluid mechanics[M]. 7th ed. New York: Mc Graw-Hill Series in Mechanical Engineering, 2009: 347-453.

[29] 胡寿松. 自动控制原理[M]. 7 版 北京: 科学出版社, 2019: 252-288.
HU Shousong. Automatic control principles[M]. 7th ed. Beijing: Science Press, 2019: 252-288.

（责任编辑 邓玲惠）