

工业技术

碱性电解水制氢系统的动态仿真

李默^{1,2}, 黄思达^{1,2}, 周永哲³, 付佳辉³, 代岩^{3*}

(1.上海福克斯波罗有限公司北京分公司,北京100102; 2.施耐德电气(中国)有限公司,北京100102; 3.大连理工大学盘锦产业技术研究院,辽宁省化学助剂合成与分离重点实验室,辽宁盘锦124221)

摘要:使用动态模拟仿真软件 AVEVA Dynamic Simulation 构建了碱性电解水制氢系统的高精度动态机理模型,精准刻画了多槽协同工作下的系统温度变化规律、气液分离系统压差响应特性、氢氧交叉扩散浓度变化等动态行为,设计了电流密度、碱液流量与操作压力的多变量协同调控方案,并通过真实碱性电解水制氢系统的快速变负荷、冷启动场景加以验证,为可再生能源波动场景下大规模制氢系统的模块化设计、安全评估与运行优化提供了可靠的理论工具和关键技术支持。

关键词:可再生能源;电解水;氢能;工艺系统;动态仿真

中图分类号:TK91

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2026)02-0226-06

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.02.035

Dynamic simulation of hydrogen production system by alkaline water electrolysis

LI Mo^{1,2}, HUANG Si-da^{1,2}, ZHOU Yong-zhe³, FU Jia-hui³, DAI Yan^{3*}

(1.Beijing Branch, Shanghai Foxboro Co., Ltd., Beijing 100102, China; 2.Schneider Electric (China) Co., Ltd., Beijing 100102, China; 3.Panjin Institute of Industrial Tehnology, Dalian University of Technology, Liaoning Key Laboratory of Synthesis and Separation of Chemical Additives, Panjin 124221, China)

Abstract: Hi-fidelity dynamic model for hydrogen production by alkaline water electrolysis was established using AVEVA Dynamic Simulation. Dynamic behaviors upon multi-electrolyzer working simultaneously conditions, such as system temperature change, pressure difference response characteristic of gas-liquid separation system, hydrogen-oxygen cross diffusion, were described precisely. A coordinated control philosophy considering current density, alkaline solution flowrate, and operation pressure was designed, and validated by fast load change and cold start scenarios of an alkaline water electrolysis system. This simulation work provides a reliable theoretical tool and key technical support for modular design, safety evaluation, and operation optimization of large-scale hydrogen production system using fluctuated renewable energy.

Key words: renewable energy; water electrolysis; hydrogen energy; process system; dynamic simulation

碱性电解水制氢因设备成熟度高、规模化成本优势显著,已成为绿氢规模化制备的核心技术手段,在可再生能源消纳与能源系统低碳转型中具有重要战略意义^[1-3]。随着风电、光伏等波动性可再生能源的大规模并网,电解水制氢系统需具备快速响应电力波动、适应宽负荷范围运行的能力^[4-5]。然而,传统碱性电解槽以稳态工况运行为设计基准,缺乏动态特性的模拟仿真,这与可再生能源的间歇性、波动性需求间存在显著矛盾^[6]。尤其在万吨级绿氢项目中,多电解槽集群化变负荷运行引发的系统耦合效应,如气液分离装置压力振荡、氢氧气体交叉扩散等,可能突破单设备安全边界,威胁系统运行稳定性。

当前针对碱性电解槽动态特性的研究多局限于单台设备层面:Ulleberg^[7]通过系统仿真揭示了电解槽变载过程中的温度迟滞效应;Sakas等^[8]建立了涵盖电化学极化与热力学平衡的动态模型,但其研究尺度局限于单槽内部过程。Dang等^[9]通过变负荷实验证实了单槽温度响应的非线性特征,但未揭示多槽并联时气液分离系统的压差传播机制;Khan等^[10]虽构建了电化学生态模型,却未集成工艺系统级的质量-能量耦合关系,缺乏对工艺系统的整体模拟。上述局限性导致现有模型难以准确预测工业化场景下氧中氢、氢中氧浓度的瞬态超标风险以及多槽协同控制对压差、温度分布的影响,制约了大型绿氢项目的设计和运营。

收稿日期:2025-09-04;修回日期:2025-12-13

基金项目:辽宁省兴辽英才计划项目(XLYC2402009);辽宁省自然科学基金项目(2023-MS-353);辽宁省化学助剂合成与分离重点实验室开放课题(ZJKF2304)

作者简介:李默(1988-),男,博士,工程师,研究方向为化工过程模拟与优化,mo.li@se.com;代岩(1983-),男,博士,教授级高级工程师,研究方向为膜分离过程,通讯联系人,daiyan@dlut.edu.cn。

本文中以典型碱性电解水制氢工艺系统^[11]为研究对象,利用高精度化工流程动态仿真软件 AVEVA Dynamic Simulation 搭建了包含工艺系统和控制系统的动态模型,重点研究:①多电解槽同步变负荷过程中气液分离系统的压力波动;②系统冷启动、变负荷阶段氢氧气体纯度动态变化规律;③不同控制策略对系统安全边界的影响。

1 碱性电解水制氢系统工艺流程

1.1 设计要求

基于典型绿氢项目需求(标准状况产氢量 4 000 m³/h,操作弹性 30%~110%),碱性电解水制

氢系统设计需满足以下指标。

(1)电耗:电解槽电流密度 $\geq 2\ 500\ \text{A}/\text{m}^2$,直流电耗 $\leq 4.3\ \text{kWh}/\text{m}^3$,综合能耗 $\leq 47.8\ \text{kWh}/\text{kg}$ 。

(2)动态响应:40 s 内完成 30%~100% 负荷切换,冷启动时间 $\leq 50\ \text{min}$,适配可再生能源波动性。

(3)安全性:氧中氢(H_2/O_2)浓度 $\leq 2.0\%$,氢中氧(O_2/H_2)浓度 $\leq 0.5\%$,气液分离罐压差波动 $\leq 500\ \text{Pa}$ 。

1.2 动态模型的建立

本文中采用 AVEVA Dynamic Simulation 软件搭建了碱性电解水制氢工艺高精度动态模型,如图 1 所示^[11]。

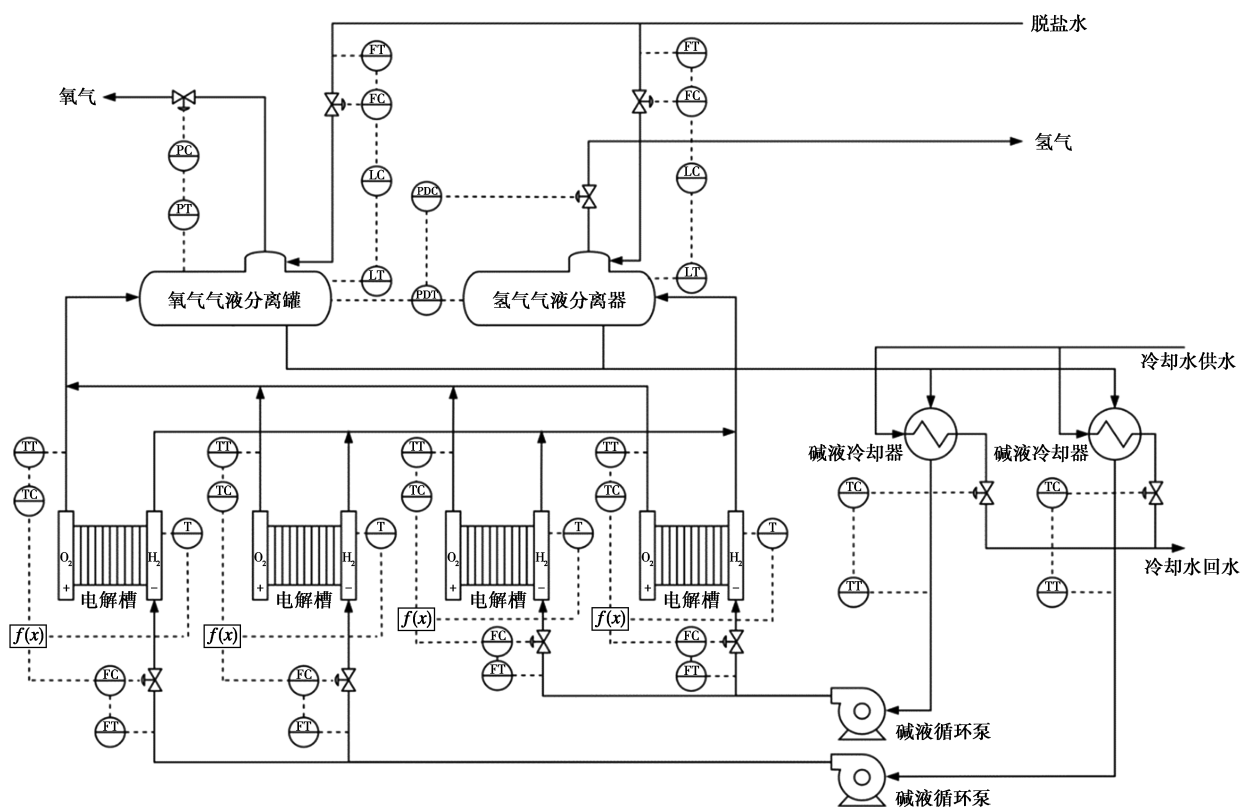
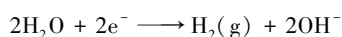


图 1 碱性电解水制氢系统工艺流程简图

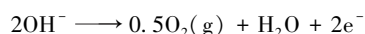
工艺流程包括电解水制氢、气液分离、碱液循环、补水补碱 4 个主要单元,具体描述如下。

(1)电解水制氢单元:80℃ 的质量分数 30% KOH 溶液由离心泵输送至并联的 4 台电解槽,在 1.80 MPa(表压)操作压力、95℃ 操作温度下,发生如下反应。

阴极:



阳极:



(2)气液分离单元:电解产物(H_2/O_2 -碱液混合

物)经气液分离罐分离,出口两路碱液混合后经循环单元返回电解槽,氢气进入下游分离纯化装置,氧气放空或按项目需要进行后续处理。

(3)碱液循环单元:分离后碱液经换热器冷却至设定温度($\leq 80\text{℃}$),过滤后返回电解水制氢单元。

(4)补水补碱单元:去离子水经缓冲罐分别进入氢氧气液分离罐,以维持分离罐液位,KOH 溶液根据循环碱液电导率变化按需补充。

模型中主要设备如下:①4 台碱性电解槽及附属设备;②气液分离设备,包含氢气、氧气气液分离

罐;③辅助设备,含碱液循环泵、补水泵、脱盐水罐、碱液泵、碱液罐、碱液冷却器、碱液过滤器等。

2 碱性电解水制氢系统动态模型的关键设计

2.1 碱液循环量控制方案

碱性电解水制氢过程中,碱液不仅作为反应原料和导电介质,还承担移热与温度调控功能。基于电解槽电化学反应和热平衡关系,提出碱液循环量前馈控制方案,设定值 F_{Alk} 由下式计算:

$$F_{\text{Alk}} = F_0 + (\eta_F \cdot N_{\text{cell}} \cdot I) / 2F + [N_{\text{cell}} \cdot I \cdot (V_{\text{cell}} - V_{\text{ocv}}) - Q_L] / (c_{\text{p,KOH(aq)}} \cdot \Delta T)$$

式中, F_0 为最小碱液循环流量, m^3/h ; η_F 为法拉第效率, %; N_{cell} 为单台电解槽的电解小室数量; I 为电解槽电流, A ; F 为法拉第常数, $96\,485\text{ C/mol}$; V_{cell} 为单小室工作电压, V ; V_{ocv} 为开路电压(由能斯特方程计算), V ; Q_L 为电解槽向环境的散热量, kJ ; $c_{\text{p,KOH(aq)}}$ 为碱液定压比热容, $\text{kJ}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$; ΔT 为电解槽进出口温差, $^\circ\text{C}$ 。

电化学反应项 $[(\eta_F \cdot N_{\text{cell}} \cdot I) / 2F]$: 根据法拉第定律,产氢量与电流成正比,碱液需补偿产氢消耗。

焦耳热-热力学平衡项 $[N_{\text{cell}} \cdot I \cdot (V_{\text{cell}} - V_{\text{ocv}}) - Q_L] / [c_{\text{p,KOH(aq)}} \cdot \Delta T]$: 电解过程产生的焦耳热 $[N_{\text{cell}} \cdot I \cdot (V_{\text{cell}} - V_{\text{ocv}})]$ 通过碱液对流移出,剩余热量 (Q_L) 由环境散热,二者差值决定碱液流量对温升的补偿^[9]。

本文中建立的碱性电解槽热平衡模型,创新性地构建了反应热与极化热的解耦表征体系,将总产热分解为法拉第效率主导的化学反应热 $[(\eta_F \cdot N_{\text{cell}} \cdot I) / 2F]$ 项与欧姆极化主导的焦耳热 $[N_{\text{cell}} \cdot I \cdot (V_{\text{cell}} - V_{\text{ocv}})]$ 项,前者与产氢量线性相关,后者动态反映电极/隔膜性能变化。通过引入 Q_L 项表征环境热损失,当环境温度变化时,系统可对应调节碱液流量。结合电解液物性参数,通过分母 $c_{\text{p,KOH(aq)}} \cdot \Delta T$ 建立溶液热容、温升与流量的定量关系。上述方法为可再生能源波动场景下的碱性电解槽操作提供了可靠的热管理思路。

2.2 氢氧互串机理

在碱性电解水制氢系统中,氧中氢 (H_2/O_2) 与氢中氧 (O_2/H_2) 的浓度超标会引发爆炸风险,是影响系统安全性的核心问题。本文中通过高精度仿真实现了电化学-传质-流体力学多场耦合动态表征,解析了气体交叉扩散的 2 种主要来源。

电解槽内部气体扩散,基于浓度极化理论,构建

电解槽隔膜中氢氧交叉扩散通量模型:

$$F_{\text{cross,H}_2} = D_{\text{H}_2} \cdot [(A_{\text{mem}} \cdot \varepsilon_{\text{mem}} \cdot D_{\text{H}_2,\text{mem}}^{\text{eff}}) / (\tau_{\text{mem}} \cdot Thk_{\text{mem}})] (c_{\text{H}_2}^{\text{cat}} - c_{\text{H}_2}^{\text{ano}})$$

$$F_{\text{cross,O}_2} = D_{\text{O}_2} \cdot [(A_{\text{mem}} \cdot \varepsilon_{\text{mem}} \cdot D_{\text{O}_2,\text{mem}}^{\text{eff}}) / (\tau_{\text{mem}} \cdot Thk_{\text{mem}})] (c_{\text{O}_2}^{\text{cat}} - c_{\text{O}_2}^{\text{ano}})$$

有效扩散系数 ($D_{\text{gas,mem}}^{\text{eff}}$) 表征气体在隔膜内的扩散能力,与材料孔隙结构、温度及气体种类相关。

浓度梯度驱动项 ($c_{\text{H}_2}^{\text{cat}} - c_{\text{H}_2}^{\text{ano}}$): 反映阴阳极间气体分压差,需结合 Henry 定律修正气体溶解度。

隔膜结构参数如下: A_{mem} 为隔膜的实际传质截面积; ε_{mem} 为隔膜孔隙率; τ_{mem} 为隔膜曲折因子; δ_{mem} 为隔膜厚度。

气液分离罐气体夹带: 在高电流密度 ($\geq 2\,500\text{ A/m}^2$) 下,碱液湍流导致微气泡夹带成为氢氧互串主因。采用 Euler-Lagrange 方法建立夹带模型,通过 Schiller-Naumann 关联式修正曳力系数^[12],模拟表明,当雷诺数 $Re > 10^4$ 时,夹带贡献占比达 58% ~ 72%,与 Trinke 等^[13] 的实验结论一致。基于此,本文中在气液分离罐出口引入夹带量参数,对气液分离进行非平衡计算,实现了氢氧互串现象宏观层面的正确模拟。

3 结果与讨论

3.1 负荷快速切换的动态响应特性

3.1.1 降负荷工况 (100% → 30%)

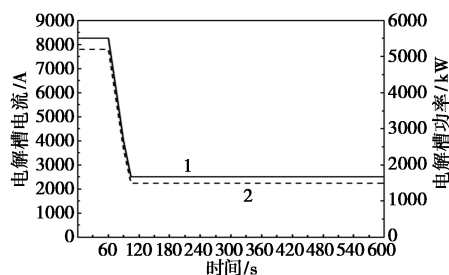
本工况以 100% 额定负荷 (单槽电流 8 250 A) 下的稳态运行为初始条件。动态仿真启动后经 1 min 预运行,各电解槽工作电流以额定电流的 2%/s 速率在 40 s 内同步降低至额定电流的 30%,即 2 500 A [图 2(a)],并维持 90 min。图 2(b) ~ (d) 表明,电解槽主要操作参数在 70% 负荷骤降下呈现显著非线性响应特征。

如图 2(b) 所示,4 个电解槽的碱液循环量在 30 min 内自 84 m^3/h 同步降至 33 m^3/h ,而电解槽温度因热惯性滞后 1.5 h 由 95 $^\circ\text{C}$ 降至 84 $^\circ\text{C}$,降负荷全程温度均维持在正常操作区间内。这一现象与 Dieguez 等^[14] 热电耦合模型预测的 1.2 h 迟滞时间偏差基本一致,验证了热管理系统的动态适应性。

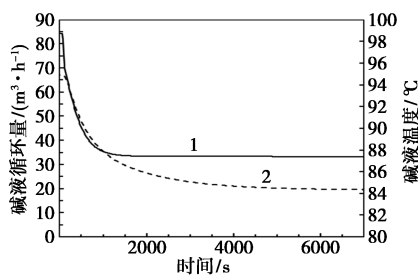
如图 2(c) 所示,随着负荷降低,氧气、氢气产量同时减少,但氧气产量的降幅仅为氢气的 50%,导致氧气/氢气气液分离罐的压差出现波动,瞬时峰值 $\Delta P_{\text{max}} = 340\text{ Pa}$,在 15 min 内恢复至设定值 250 Pa,未触发连锁 ($\Delta P_{\text{max}} = 500\text{ Pa}$)。压力波动期间,氧气气液分离罐最低压力降至 1.78 MPa,在 15 min 内恢

恢复至设定值 1.8 MPa。由此可见,当前的工艺设计与控制策略能够确保在最大速率降负荷期间,气液分离系统的压力和压差保持在正常范围,并且迅速恢复稳定,优于 Yang 等^[15] 同类系统 20~30 min 的恢复时间。

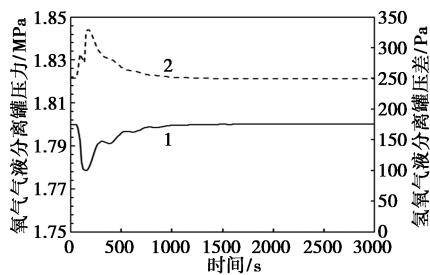
氢气、氧气产品纯度参数的变化趋势如图 2(d) 所示。氧中氢 (H_2/O_2) 浓度从 1.41% 上升至 1.69%, 2 h 后基本稳定; 氢中氧 (O_2/H_2) 浓度从



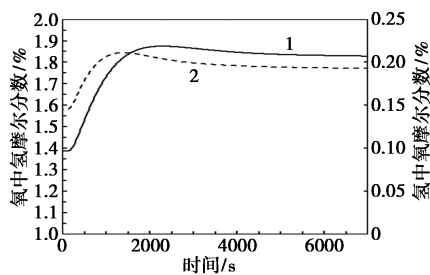
1—电流;2—功率
(a) 电解槽电流和功率



1—循环量;2—温度
(b) 碱液循环量和碱液温度



1—压力;2—压差
(c) 氢氧气液分离罐压力和压差



1—氧中氢;2—氢中氧
(d) 气体产物氧中氢、氢中氧浓度

0.13% 升至 0.25%, 在 1 h 后基本稳定。2 类交叉气体浓度均严格低于 2%/0.5% 的爆炸限值, 证明了当前的工艺设计与控制策略能够在最大速率降负荷期间, 确保杂质浓度均严格控制在安全范围内, 有效抑制了快速变载工况下的气体夹带和爆炸风险。

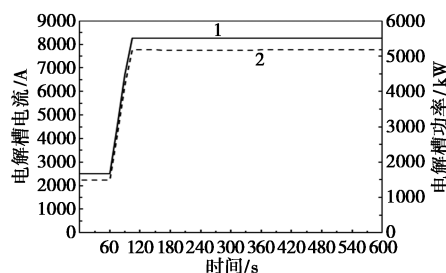
3.1.2 升负荷工况 (30%→100%)

本工况以 30% 额定负荷 (单槽电流 2 500 A) 稳态运行为初始条件。动态仿真启动后经 1 min 预运行, 各电解槽工作电流以额定电流的 2%/s 的速率在 40 s 内同步升至 100% 额定电流, 即 8 250 A [图 3(a)], 并维持 90 min。如图 3(b)~(d) 所示, 电解槽主要操作参数在升负荷过程中呈现显著非线性响应特征。

如图 3(b) 所示, 随电流的升高, 碱液循环量也相应增加, 从 30% 负荷下的 33 m³/h 逐步提升至 100% 负荷下的 84 m³/h, 并在 25 min 后基本稳定。温度响应呈现延迟特性, 从 84℃ 上升至 95℃, 经过 40 min 稳定。这表明当前的工艺设计与控制策略能够确保在最大速率升负荷期间, 电解槽温度保持在正常操作区间。

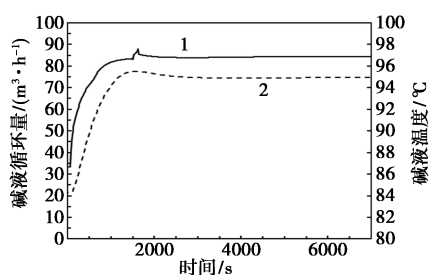
气液分离系统动态特性如图 3(c) 所示, 升负荷后, H₂ 产量增速约为 O₂ 的 2 倍, 分离罐压差瞬时下降至 160 Pa, 但始终未超过最大允许压差 500 Pa, 且 10 min 后稳定回设定值 250 Pa。氧分离罐压力波动峰值为 1.84 MPa, 并在 10 min 内恢复设定值 1.8 MPa。这表明, 当前的工艺设计与控制策略能够确保在最大速率升负荷期间, 气液分离系统压力和压差保持在正常范围, 并能够迅速恢复稳定。

产品气纯度变化如图 3(d) 所示。随着负荷的升高, 氧中氢浓度从 1.67% 降至 1.42%, 这表明高流量碱液对气泡夹带的冲刷作用更强, 与 Sakas 等^[8] 提出的“剪切剥离”机理一致。由此可见, 当前的工艺设计与控制策略能够确保在电解槽以最大速率升负荷期间, 杂质浓度保持在正常范围内, 有效避免了爆炸风险。

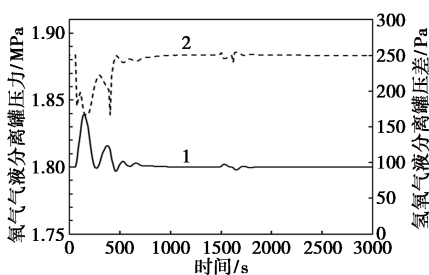


1—电流;2—功率
(a) 电解槽电流和功率

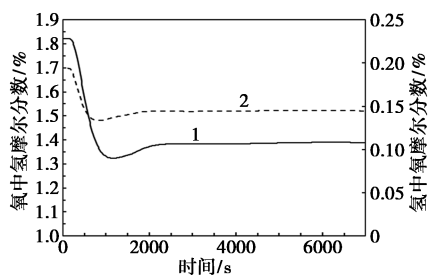
图 2 降负荷阶段电解槽主要操作参数变化趋势



1—循环量;2—温度
(b) 碱液循环量和碱液温度



1—压力;2—压差
(c) 氢氧气液分离罐压力和压差



1—氧中氢;2—氢中氧
(d) 气体产物氧中氢、氢中氧浓度

图 3 升负荷阶段电解槽主要操作参数变化趋势

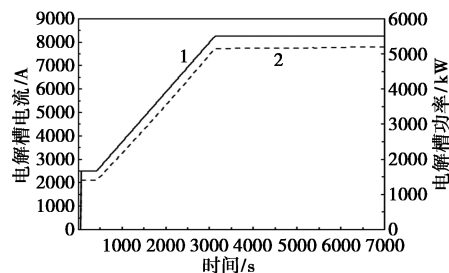
3.2 冷启动策略的安全性对比

3.2.1 碱液循环量-电流同步提升方案

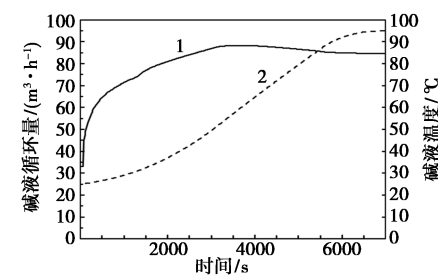
冷启动初始条件如下:系统经氮气吹扫至氧含量低于 1×10^{-6} ,氧气分离罐压力 0.2 MPa,氧/氢分离罐压差为 250 Pa,碱液循环量为 $33 \text{ m}^3/\text{h}$ 。初始条件经 1 min 预稳定后,切断氮气保压,同时电解电流阶跃至 2 500 A,启动原料水泵并将碱液流量切换至前馈控制模式;60 s 后,气液分离罐设置为液位-流量串级控制并将液位设定为 50%,运行 300 s;随后,以 2 A/s 的速率在 2 700 s 内将电解电流线性升至 8 250 A[图 4(a)],同步以 0.06 MPa/min 速率提升氧气分离罐压力设定值至 1.8 MPa;负荷稳定后,将碱液冷却器出口温度设定为 80°C ,继续运行 5 400 s。启动过程中,电解槽关键操作参数的变化趋势如图 4(a)~(d) 所示。

如图 4(b) 所示,碱液流量经前馈控制从初始的 $33 \text{ m}^3/\text{h}$ 增至 $84 \text{ m}^3/\text{h}$,100 min 后稳定。温度响应

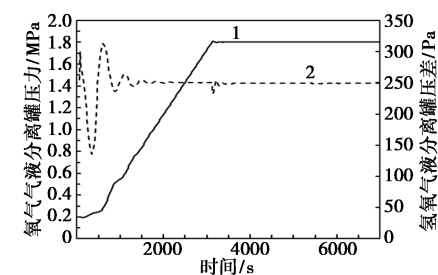
呈现出二阶系统特征,经 120 min 从 25°C 升至 95°C ,温度稳定时间较流量滞后 20 min,且在冷启动全程维持在正常范围内。气液分离系统动态特性如图 4(c) 所示,压力和压差在冷启动初期和碱液流量提升阶段表现出显著波动。氧气/氢气气液分离罐压差在冷启动初期达到最大值 320 Pa,碱液流量提升阶段降至 30 Pa。氧气气液分离罐压力随着设定值逐渐上升,50 min 后稳定至设定值 1.8 MPa。



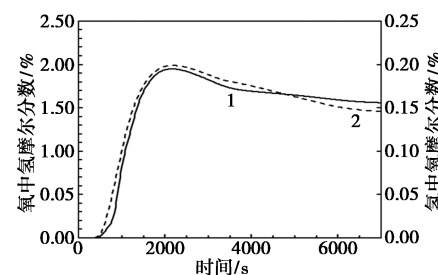
1—电流;2—功率
(a) 电解槽电流和功率



1—循环量;2—温度
(b) 碱液循环量和碱液温度



1—压力;2—压差
(c) 氢氧气液分离罐压力和压差



1—氧中氢;2—氢中氧
(d) 气体产物氧中氢、氢中氧浓度

图 4 冷启动阶段(电解槽电流、碱液循环量同步提升)电解槽主要操作参数变化趋势

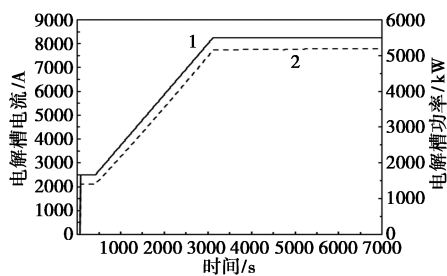
图4(d)表明,产品气纯度呈现非单调变化特征。氧中氢、氢中氧浓度均先升后降,最高分别接近2%和0.2%,约120 min后稳定在1.55%和0.15%。氧中氢浓度瞬时已接近2%的安全限值,存在爆炸风险。因此,采用同时提升电解槽电流和碱液流量的操作方法在冷启动过程中存在显著风险,不建议采用。

3.2.2 碱液循环量延迟调整方案

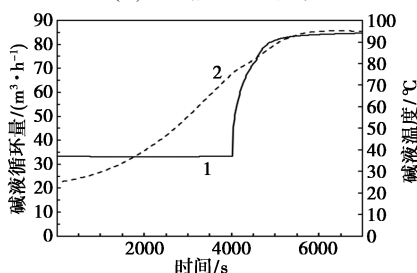
在3.2.1节基础上改进控制方案,初始条件不变,采用电流-流量分阶段调节:如图5(a)、(b)所示,在电解槽升负荷期间(0~2700 s)保持碱液流量恒定,待电流达到额定值8 250 A后,再将碱液循环量控制器设置为前馈模式,30 min内提升碱液流量至84 m³/h。分阶段控制显著改变系统动态特性,优化了热平衡效率——电解槽温度在90 min内从25℃升至95℃,较电流-流量同步调整方案提升34.5%。

如图5(c)所示,分阶段控制有效抑制了系统波动。在冷启动初始阶段,气液分离罐最小压差160 Pa,峰值300 Pa,20 min后稳定至设定值250 Pa。碱液流量提升阶段压差波动150 Pa,恢复时间缩短至10 min。可见,分阶段控制方案使得冷启动期间气液分离系统的压力和压差更快稳定。

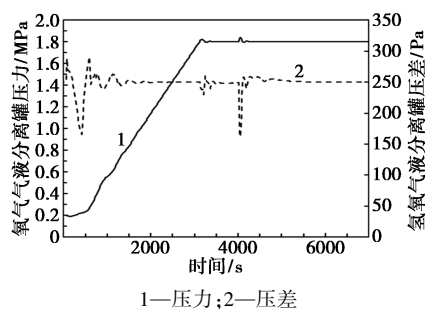
如图5(d)所示,分阶段控制还能改善安全性。负荷升高时,碱液循环量较小,夹带的氢气和氧气含量也较低。在碱液循环量提升后,氢中氧、氧中氢含量再次提升。在2次提升过程中,杂质浓度全程严格低于爆炸限值,最终稳定在1.55%和0.15%。



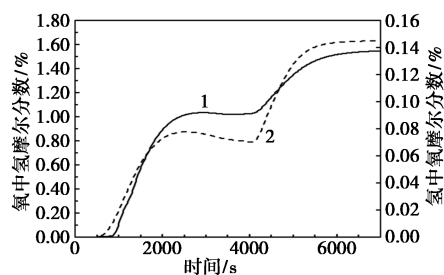
1—电流;2—功率
(a) 电解槽电流和功率



1—循环量;2—温度
(b) 碱液循环量和碱液温度



1—压力;2—压差
(c) 氢氧气液分离罐压力和压差



1—氧中氢;2—氢中氧
(d) 气体产物氧中氢、氢中氧浓度

图5 冷启动阶段(碱液循环量延迟提升)电解槽主要操作参数变化趋势

基于上述结果,建议采用“先电流后流量”的冷启动控制方案。这一改进不仅提高了系统的安全性,还优化了启动效率^[16],为大规模工业应用提供了额外保障。

4 结论

构建了碱性电解水制氢系统的高精度动态模型,能够准确反映电解槽系统冷启动阶段温度变化规律、变负荷过程中气液分离系统压差响应特性,以及氢氧交叉扩散浓度动态变化,为工艺系统设计与控制逻辑开发提供了高保真度仿真平台。在此基础上,建立了电流密度、碱液流量与操作压力的多变量协同调控方案。本文中为可再生能源波动场景下大规模制氢系统的模块化设计、安全评估与运行优化提供了可靠的理论工具和关键技术支持。

参考文献

- [1] 张正,宋凌璐.电解水制氢技术:进展、挑战与未来展望[J].工程科学学报,2025,47(2):282-295.
- [2] 陶誉仁,范松,钟磊.绿氢产业发展面临的挑战和对策分析[J].上海节能,2024(12):1887-1894.
- [3] International Energy Agency. The future of hydrogen: Seizing today's opportunities [R]. Paris: OECD/IEA, 2019.
- [4] 颜祥洲.用于波动性电源的电解水制氢系统及其控制策略分析[J].数字化用户,2021,8(49):236-238.
- [5] 顾慧杰,彭超逸,孙书豪,等.风电-光伏-电制氢-抽蓄零碳电力系统短期生产模拟模型[J].上海交通大学学报,2023,57(5):505-512.

(下转第235页)

集在-0.1~0.1之间的区域,只有一小部分误差的绝对值超过了0.1。与MD-DNN模型相比,MD-RF模型显示出更窄的误差范围,这与之前的分析结果是一致的,进一步证明了其优越的预测能力,具有更高的预测精度。综合考虑所有因素,MD-RF模型的整体预测性能最为出色,能够准确地预测CO₂在ILs中的溶解度,展现了在处理复杂非线性关系和高度特定领域问题时的强大能力。

3 结论

提出了一种基于MD量化ILs结构与DNN、RF 2种不同机器学习算法相结合的用于预测CO₂在不同ILs中溶解度的方法。通过文献收集CO₂在离子液体中不同条件下的溶解度,建立了离子液体MD结构信息数据库。将分子的MD输入DNN、RF机器学习模型,预测了CO₂在离子液体中的溶解度。并利用R²、MSE和RMSE 3种统计指标对模型进行评估,且2个模型的误差都聚集在-0.1~0.1之间。但MD-RF模型的整体预测性能具有更高的精度,展现了在处理复杂非线性关系和高度特定领域问题时的强大能力,能够准确地预测CO₂在ILs中的溶解度。

参考文献

- [1] Heinrich L, Koschinsky A, Markus T, *et al.* Quantifying the fuel consumption, greenhouse gas emissions and air pollution of a potential commercial manganese nodule mining operation [J]. *Marine Policy*, 2020, 114: 103678.
- [2] Dunn C A, Shi Z, Zhou R, *et al.* (cross-linked poly(ionic liquid)-ionic liquid-zeolite) Mixed-Matrix membranes for CO₂/CH₄ gas separations based on curable ionic liquid prepolymers [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019, 58(11): 4704-4708.
- [3] Plechkova N V, Seddon K R. Applications of ionic liquids in the chemical industry [J]. *Chem Soc Rev*, 2008, 37(1): 123-150.
- [4] Chum H L, Koch V R, Miller L L, *et al.* Electrochemical scrutiny of organometallic iron complexes and hexamethylbenzene in a room temperature molten salt [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 1975, 97: 3264-3265.
- [5] Nordness O, Brennecke J F. Ion Dissociation in ionic liquids and ionic liquid solutions [J]. *Chemical Reviews*, 2020, 120(23): 12873-12902.
- [6] Zhan G, Cao F, Bai L, *et al.* Process Simulation and Optimization of ammonia-containing gas separation and ammonia recovery with ionic liquids [J]. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2020, 9(1): 325312.
- [7] Huang X. Experimental and simulation study on the capture and separation of CO₂/CH₄ by alkali metal complex ionic liquid [J]. *Fuel*, 2022, 329: 125444.
- [8] Wang C, Wang Y, Liu J, *et al.* Entropy driving highly selective CO₂ separation in nanoconfined ionic liquids [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 440: 135918.
- [9] Khajeh A, Modarress H, Rezaee B. Application of adaptive neuro-fuzzy inference system for solubility prediction of carbon dioxide in polymers [J]. *Expert Systems with Applications*, 2009, 36(3): 5728-5732.
- [10] Song Z, Shi H, Zhang X, *et al.* Prediction of CO₂ solubility in ionic liquids using machine learning methods [J]. *Chemical Engineering Science*, 2020, 223: 115752.
- [11] Lei Z, Dai C, Chen B. Gas Solubility in ionic liquids [J]. *Chemical Reviews*, 2014, 114(2): 1289-1326.
- [12] 张钰,魏世丞,董超芳,等.定量结构-性质关系(QSPR)中的计算方法研究进展[J].*科学通报*, 2021, 66(22): 2832-2844.
- [13] Stelzer F, Röhm A, Vicente R, *et al.* Deep neural networks using a single neuron: Folded-in-time architecture using feedback-modulated delay loops [J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 5164.
- [14] 张镔滨,陈玉明,吴克寿,等.粒向量驱动的随机森林分类算法研究[J].*计算机工程与应用*, 2024, 60(3): 148-156. ■
- [11] 杨成玉,马军,李广玉,等.大型碱性电解水制氢装备多对一的应用与实践[J].*太阳能*, 2022, (5): 103-114.
- [12] Clift R, Grace J R, Weber M E. *Bubbles, drops, and particles* [M]. Mineola: Dover Publications, 2005.
- [13] Trinke P, Haug P, Bensmann B, *et al.* Hydrogen crossover in PEM and alkaline water electrolysis: Mechanisms, direction comparison, and mitigation strategies [J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 2018, 165(7): F502-F513.
- [14] Dieguez P M, Ursua A, Sanchis P, *et al.* Thermal performance of a commercial alkaline water electrolyzer [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2008, 33(24): 7338-7354.
- [15] Yang J, Zhang J, Liu M, *et al.* Dynamic simulation and performance analysis of alkaline electrolyzers for renewable energy-powered hydrogen production [J]. *Energies*, 2024, 17(19): 4915.
- [16] 王润东,黎静华,韦善阳.基于多物理场耦合模型的碱性水电解槽工作特性[J].*高压电技术*, 2024, 50(7): 3209-3220. ■

(上接第231页)

- [6] 尹诗斌,蒋文杰,文欢.碱性电解槽制氢技术的研究现状及发展趋势[J].*西华大学学报:自然科学版*, 2025, 44(1): 168-180.
- [7] Ulleberg Ø. Modeling of advanced alkaline electrolyzers: A system simulation approach [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2003, 28(1): 21-33.
- [8] Sakas G, Ibanez-Rioja A, Ruuskanen V, *et al.* Dynamic energy and mass balance model for an industrial alkaline water electrolyzer plant process [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47(7): 4328-4345.
- [9] Dang J, Yang F, Li Y, *et al.* Experiments and microsimulation of high-pressure single-cell PEM electrolyzer [J]. *Applied Energy*, 2022, 321: 119351.
- [10] Khan M A, Golsorkhi M S, Ebel T. Modeling the operational dynamics of alkaline electrolyzer [C]. 2024 IEEE Design Methodologies Conference (DMC), IEEE, 2024: 1-6.