

DOI: 10.13382/j.jemi.B2307011

融合多特征选择和自注意力机制的 LSTM 燃料电池退化预测方法^{*}

刘晓倩¹ 崔焕勇^{1,2} 刘海宁¹ 付 宇³ 曾文胜⁴ 李发家¹

(1. 济南大学机械工程学院 济南 250022; 2. 山东理工大学 淄博 255000; 3. 上海骥翀氢能科技有限公司 上海 201800;
4. 中国航发湖南动力机械研究所 株洲 412002)

摘 要:质子交换膜燃料电池的反应过程涉及多物理场、多部件、多因素的强耦合作用,其运行不可避免地伴随着长期的性能衰退及局部性能波动。然而,从多重耦合的众多监测参数中有效识别出关键特征并捕捉整体性能的衰退趋势变得异常困难。针对以上问题,提出一种基于 XGBoost 和 Self-Atten-LSTM 的 PEMFC 退化预测模型。首先,利用小波阈值去噪的方法剔除 PEMFC 原始数据中的噪声干扰;然后,采用 XGBoost 算法从众多参数中选择出对 PEMFC 性能影响显著的主要特征,实现关键特征的精确提取;最后,在 LSTM 中引入自注意力机制(self-attention)解决了其在处理长序列时的全局建模和多维向量间复杂交互关系不足的问题,通过自适应加权,更充分地利用了 PEMFC 的退化信息。与 LSTM、Bi-LSTM、GRU 模型相比,所提模型无论在稳态条件还是在动态条件下,都能较准确地预测燃料电池的退化,且模型平均绝对误差减小 56.34%~77.04%,预测精度可达 99.09%。该方法可广泛应用于制定车辆运行维护策略、提高系统可靠性等方面。

关键词: PEMFC;退化预测;XGBoost;自注意力机制;深度学习

中图分类号: TM911.48 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 510.40

Integrating multiple feature selection and self-attention mechanism in LSTM for fuel cell degradation prediction

Liu Xiaoqian¹ Cui Huanyong^{1,2} Liu Haining¹ Fu Yu³ Zeng Wensheng⁴ Li Fajia¹

(1. School of Mechanical Engineering, University of Jinan, Jinan 250022, China; 2. Shandong University of Technology, Zibo 255000, China; 3. Shanghai Jichong Hydrogen Energy Technology Co., Ltd, Shanghai 201800, China;
4. China Aviation Hunan Power Machinery Research Institute, Zhuzhou 412002, China)

Abstract: The process of proton exchange membrane fuel cells (PEMFC) involves strong coupling of multiple physical fields, components, and factors, inevitably leading to prolonged performance degradation and local performance fluctuations during operation. However, effectively identifying key features from the multitude of parameters under the multiple couplings and capturing the overall performance degradation trend becomes exceptionally challenging. In response to these issues, a PEMFC degradation prediction model based on XGBoost and Self-Atten-LSTM is developed. First, a wavelet threshold denoising method is employed to remove noise interference from the original PEMFC data. Then, the XGBoost algorithm is used to select the main features significantly affecting PEMFC performance from the numerous parameters, achieving precise feature selection. Finally, the introduction of the self-attention mechanism in LSTM addresses its limitations in global modeling and complex interaction among multi-dimensional vectors when dealing with long sequences. Through adaptive weighting, it more effectively utilizes PEMFC degradation information. Compared to traditional LSTM, Bi-LSTM, and GRU models, the developed model can more accurately predict fuel cell degradation under both steady-state and dynamic conditions. The model exhibits a reduction in the average mean absolute error by 56.34% to 77.04%, with a predictive accuracy of up to 99.09%. This approach can find broad applications in developing vehicle operation and maintenance strategies and enhancing system reliability.

Keywords: PEMFC; degradation prediction; XGboost; self-attention; deep learning

收稿日期:2023-10-31 Received Date: 2023-10-31

^{*} 基金项目:山东省基金(ZR2021ME101)、山东省科技型中小企业创新能力提升工程(2021TSGC1413)项目资助

0 引言

质子交换膜燃料电池 (proton exchange membrane fuel cells, PEMFC) 为一种将化学能转变为电能的新型发电装置,具有发电过程零排放 (仅生成水)、转换效率高 (60%)、噪声小、启动快、温度低 (80 °C 左右) 等特点,已逐渐在家用轿车、公交车和有轨电车等交通领域得到推广应用,被认为是 21 世纪最有前途的“绿色能源”装置^[1-2]。然而,PEMFC 运行过程受多种因素的影响,不可避免地存在退化问题。这种退化问题可能会引发安全隐患,降低能源转换效率并缩短其使用寿命^[3]。因此,准确地预测 PEMFC 的退化进程对于优化电池设计、制定车辆运行维护策略以及提高燃料电池系统可靠性至关重要。

燃料电池的退化模型通常可分为两类:基于模型和数据驱动方法。基于模型的方法使用机理退化模型或经验退化模型来实现 PEMFC 的预测,由于其中一些退化机制尚未完全了解,很难建立准确的数学模型来预测退化。为了提高退化模型的适应性和准确性,数据驱动的退化预测和诊断方法被广泛应用于燃料电池相关领域^[4]。典型的数据驱动方法有支持向量机、灰色模型、神经网络等^[5]。Chen 等^[6]提出了一种基于支持向量机的 PEMFC 性能衰退预测方法,并通过灰狼优化器算法对支持向量机的超参数进行优化,以提高预测精度。Zou 等^[7]提出了一种结合粒子群优化算法 (particle swarm optimization, PSO) 和移动窗口法的灰色神经网络 (grey neural network, GNN) 模型,用于预测 PEMFC 在不同工况下的性能退化。

燃料电池系统的运行必然伴随着长期的性能衰退现象。其性能衰减过程中表现出的强非线性、随机性、不确定性都极大地增加了预测难度^[8]。神经网络具有卓越的非线性适应性,深度学习进一步提高了其解决复杂问题的能力。近年来,通过长短期记忆网络 (long short-term memory, LSTM) 进行时间序列分析、捕捉其整体退化趋势,成为 PEMFC 预测的重要工具。与传统循环神经网络 (recurrent neural network, RNN) 相比, LSTM 能够有效避免梯度爆炸和梯度消失问题^[9],使短期记忆持续较长时间。Liu 等^[10]采用 LSTM 神经网络对 PEMFC 的性能衰退进行预测,相较于传统的 BP 神经网络预测方法, LSTM 展现出更好的预测性能。蓝煜等^[11]提出一种将小波阈值去噪算法与 LSTM 相结合的预测方法,利用实际电压变化趋势对预测结果进行验证。Ma 等^[12]在 LSTM 的基础上提出了一种网格长短期记忆 (G-LSTM) 神经网络,对 3 种不同类型的 PEMFC 进行退化预测,与一般的 RNN 算法相比,该方法提高了训练网络的广度和深度,更适合长时间的寿命预测。以注意力机制为核心的 Transformer

模型在各类深度学习任务上表现出优异的潜质。高明等^[13]提出了一种将长短期记忆神经网络与注意力机制结合的复合深度神经网络 AACNN-LSTM。该方法用以多维时间序列预测,但其决定系数为 0.843 6,预测精度还有提高的潜力。

PEMFC 的反应过程涉及多物理场、多部件、多因素的强耦合作用,从多重耦合的众多监测参数中有效识别出关键特征成为特征工程中最具挑战的一环。其中,极端梯度提升算法 (XGBoost) 具备线性模型求解器和树学习算法的独特能力,逐渐成为各领域重要的特征选择算法。Ding 等^[14]首次引入人工智能 (artificial intelligence, AI) 辅助模型来确定基于非贵金属电催化剂的 PEMFC 的关键参数以预测和分析 PEMFC 的性能,在对比的 16 种算法中, XGBoost 算法在确定高性能 MEA 的关键因素方面显示出良好的准确性,有效地避免了 MEA 开发过程中的不必要实验。常家康等^[15]提出了一种结合 XGBoost-RFECV 算法和 LSTM 的剩余寿命预测方法,实现了 97.4% 的预测准确度,尽管未充分考虑 PEMFC 在动态工况下的适用性。

在上述研究的基础上,针对 PEMFC 退化预测中难以从多重耦合的众多监测参数中有效识别出关键特征并捕捉整体性能的退化趋势的问题。同时,结合自注意力模块,提出了一种基于 XGBoost 和 Self-Atten-LSTM (XGBoost-Self-Atten-LSTM, XSAL) 的 PEMFC 退化预测数据驱动模型。

1 基于 XSAL 的 PEMFC 退化预测模型

1.1 模型构建

图 1 描述了基于 XSAL 的 PEMFC 退化预测模型,展示了所提出的深度学习预测方法的实施步骤。首先,对收集的原始测试数据进行数据预处理及特征选择。采用小波阈值去噪方法剔除了 PEMFC 原始数据中的噪声干扰,并通过 XGBoost 算法从众多参数中选择出对 PEMFC 性能影响显著的主要特征,实现关键特征的精确提取。其次,运用滑动窗口法实现对数据集的划分。最后,引入自注意力机制 (self-attention),解决了 LSTM 在处理长序列时的全局建模和多维向量间复杂交互关系不足的问题。此外,相应地设计了自注意力层权重向量计算和网格搜索算法,通过自适应加权, PEMFC 的退化信息得到了更充分地利用,所提模型可以同时捕捉整体退化趋势和详细的退化信息。

1.2 小波阈值去噪算法

小波阈值去噪是基于小波变换的一种信号去噪分析方法^[16],它通过将原始信号分解为不同频段的子信号,

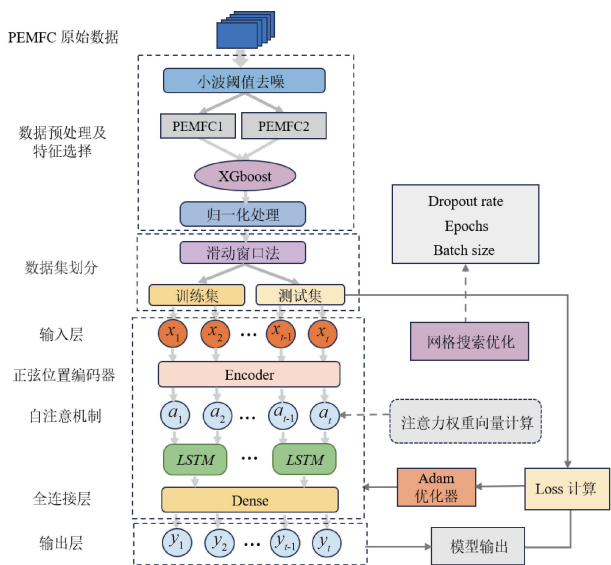


图1 基于XSAL的PEMFC退化预测模型

Fig.1 PEMFC degradation prediction model based on XSAL

并利用噪声信号的高频和低能量特征,采用适当的阈值函数来过滤掉高频部分信息,从而实现去噪。相对于傅里叶变换,小波变换在时频处理方面更强大,适用于处理复杂噪声条件下的信号。本文选用 db5 小波基、Minimax 原理进行阈值选择、阈值函数选用软阈值进行去噪处理,其流程图如图2所示。

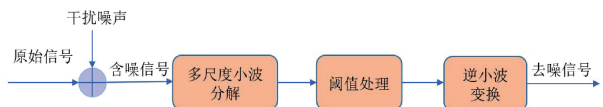


图2 小波阈值去噪原理

Fig.2 Wavelet threshold denoising schematic diagram

1.3 归一化处理

为了提高深度学习模型的预测精度和收敛速度,通常需要对输入数据进行归一化处理,这里采用 Min-Max 归一化方法,将每个特征值转换为[0,1]的范围,并使用滑动窗口法构造模型的训练样本,XSAL 模型的训练样本 x 由所选的7个特征构成。计算公式为:

$$x = \frac{x' - \min(x')}{\max(x') - \min(x')} \quad (1)$$

其中, x' 表示燃料电池原始特征值, x 表示缩放后的特征值。

1.4 XGBoost 模型

XGBoost 是一种改进的梯度提升算法,对梯度提升决策树进行了优化。它通过不断生成新树来拟合前一棵树的残差,从而提高分类或预测的精度。模型由 K 棵决策树组成,其预测结果为:

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i) \quad (2)$$

式中: $\hat{y}_i$ 是通过映射关系 f_k 计算出的预测值; f_k 表示 k 个子模型, x_i 表示第 i 个输入特征; XGBoost 的目标函数由损失函数和正则项两部分组成:

$$Obj = \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_i(x_i)) + \Omega(f_k) \quad (3)$$

$$\Omega(f_k) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T \omega_j^2 \quad (4)$$

式中: l 是可微凸损失函数,测量预测值 $\hat{y}_i$ 和目标电压 y_i 之间的差异; Obj 表示第 n 次迭代的目标函数, $\hat{y}_i^{(t-1)}$ 表示第 $t-1$ 次迭代的预测值; $\Omega(f_k)$ 表示第 k 次迭代模型的正则项,帮助平滑模型的权重,以避免过拟合; γ 和 λ 表示正则项系数,防止决策树过于复杂; T 表示模型的叶节点数。将式(3)所示的目标函数用泰勒公式展开,并定义 $G_j = \sum g_i, H_j = \sum h_i$ 可得:

$$Obj = \sum_{j=1}^T \left[G_j \omega_j + \frac{1}{2} (H_j + \lambda) \omega_j^2 + \gamma T \right] \quad (5)$$

其中, G_j 和 H_j 表示第 j 个叶节点样本的一阶、二阶导数; ω_j 表示第 j 个叶节点的输出值, I_j 表示第 j 个叶节点值的样本子集。对 ω_j 求导,使导数函数为0,则目标函数可达到 ω_j 的最小值,如式(6)所示:

$$\omega_j^* = - \frac{G_j}{H_j + \lambda} \quad (6)$$

式(7)可用于评价树模型的质量,值越小,树模型越好。可以得到树分裂节点的最小目标函数公式:

$$Obj = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T \quad (7)$$

采用贪心算法,遍历所有的分支,从中选择增益最好的分裂点。增益的计算公式为:

$$Gain = \frac{1}{2} \left[\frac{G_L^2}{H_L + \lambda} + \frac{G_R^2}{H_R + \lambda} - \frac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda} \right] - \gamma \quad (8)$$

式中:第1、2项分别表示左右子树分裂后产生的增益;第3项为不进行子树分裂的增益。算法1给出了 XGBoost 利用 Gain 作为衡量特征重要性的指标进行特征选择的方法。

算法1: XGBoost 的特征选择

输入: 样本集 $D = \{x_1, x_2, \dots, x_n, U_{tot}\}$; d , 特征维度 18

输出: 最优特征子集 $D_0 = \{x_1', x_2', \dots, x_i' \mid i \leq n\}$;

Begin;

初始化增益: Gain ← 0

定义 $G_j \leftarrow \sum g_i, H_j \leftarrow \sum h_i$

for $k = 1$ to d do;

$G_L \leftarrow 0, H_L \leftarrow 0$

for j in 排序 (I, x_{jk}) do;

对每个样本计算其在该特征上的梯度;

$$G_L \leftarrow G_L + g_j, H_L \leftarrow H_L - h_j$$

$$G_R \leftarrow G + G_L, H_R \leftarrow H - H_L$$

计算当前分割点的得分:

$$\max(\text{得分}, \frac{G_L^2}{H_L + \lambda} + \frac{G_R^2}{H_R + \lambda} - \frac{G^2}{H + \lambda})$$

end

保留最大得分的分割点及对应的特征。

End

1.5 LSTM 模型

LSTM 模型^[17]本质上是一种特定形式的 RNN。与 RNN 相比, LSTM 添加了一个状态单元 c_t , 可以存储前一阶段的信息并传递到下一阶段, 避免了出现梯度爆炸和梯度消失的问题。在时刻 t , LSTM 模型包括 3 个输入端、两个输出: 输入特征 $\hat{x}_t'$ 、输出 h_{t-1} 和单元状态 c_{t-1} 、输出 h_t 和单元状态 c_t , 其单元结构如图 3 所示。LSTM 单元包含输入门(i_t)、输出门(o_t)和遗忘门(f_t), 其单元结构如图 3 所示。LSTM 单元中所有变量的数学方程可以总结如下:

$$f_t = \sigma[W_f(\hat{x}_t', h_{t-1}) + b_f] \quad (9)$$

$$i_t = \sigma[W_i(\hat{x}_t', h_{t-1}) + b_i] \quad (10)$$

$$\tilde{c}_t = \tanh[W_c(\hat{x}_t', h_{t-1}) + b_c] \quad (11)$$

$$c_t = f_t \cdot c_{t-1} + i_t \cdot \tilde{c}_t \quad (12)$$

$$o_t = \sigma[W_o(\hat{x}_t', h_{t-1}) + b_o] \quad (13)$$

$$h_t = o_t \cdot \tanh(c_t) \quad (14)$$

其中, σ 为激活函数, W_f 、 W_o 和 W_c 为权重, b_f 、 b_o 、 b_i 和 b_c 为偏置。

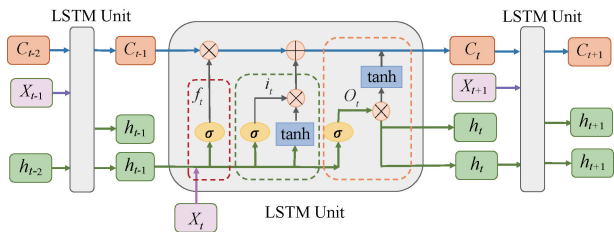


图 3 LSTM 单元结构

Fig. 3 Architecture of the LSTM memory cell

1.6 XSAL 模型的自注意力机制

自注意力机制(Self-Attention)是 Transformer 的一个组成部分, 其优势在于对每个输入特征分配的权重取决于输入特征之间的相互作用, 通过整合来自完整输入序列的全局信息来更新序列的每个组件^[18], 如图 4 所示。

本文所提模型引入了这种机制, 其输入序列为使用 XGBoost 特征选择并归一化处理后的时间序列 $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_i]$ 。加入位置编码, 学习退化特征的序列位置信

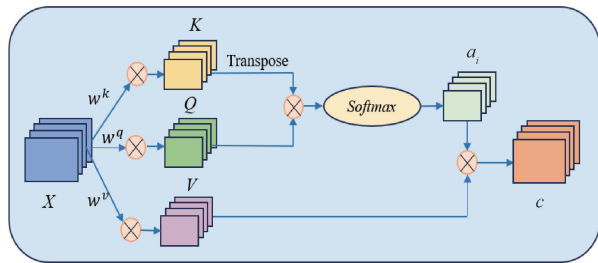


图 4 Self-attention 原理

Fig. 4 Self-attention schematic diagram

息, 并生成带有位置信息的序列 $\hat{\mathbf{X}}_i = [\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_i]$ 。并输入到 Self-Attention 层, 该层计算每个输入的注意力权重分配值 $a_1, a_2, \dots, a_i$, 用于加权求和, 生成新的权重加强的输入特征向量 $\hat{\mathbf{X}}_i' = [\hat{x}_1', \hat{x}_2', \dots, \hat{x}_i']$ 。将输入 LSTM 层, 得到相应的隐藏层向量 $\mathbf{H}_i = [h_1, h_2, \dots, h_i]$ 。最后, 经过 Dense 层进行降维和激活, 通过累加和得到最终的预测电压。具体描述为:

$$\hat{x}_i = x_i + PE(i) \quad (15)$$

$$\text{其中, } PE = \begin{cases} \sin(\frac{pos}{10000^{2i/d}}) \\ \cos(\frac{pos}{10000^{2i/d}}) \end{cases} \text{ 为正弦位置编码器, } pos$$

对应 PEMFC 输入特征的位置, d 为输入的特征维数。

$$\hat{x}_i' = \sum_i (a_i * V) \quad (16)$$

$$h_i = LSTM([\hat{x}_i', \hat{x}_i]) \quad (17)$$

$$y_i = \sum_i Dense(h_i) \quad (18)$$

$$\text{其中, } a_i = softmax(\frac{QK^T}{\sqrt{d_k}}), \sqrt{d_k} \text{ 是缩放因子。} Q, K, V$$

分别代表 query、key、value, 用 W_q, W_k, W_v 3 个参数矩阵分别与 PEMFC 输入序列 $\hat{\mathbf{X}}_i = [\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_i]$ 相乘得到。

2 实验与分析

2.1 数据集

本文基于 IEEE PHM 2014 数据挑战赛的实验数据集实现对 PEMFC 的退化预测^[19], 其耐久性试验平台如图 5 所示^[12]。

对两个相同的燃料电池堆(FC1 和 FC2)进行耐久性测试, 整个燃料电池堆由 5 个单电池组成, 其有效面积为 100 cm^2 。分别向 PEMFC1 施加 70 A 的恒定电流, 向 PEMFC2 提供频率为 5 kHz 的 70 A 的动态电流, 其他运

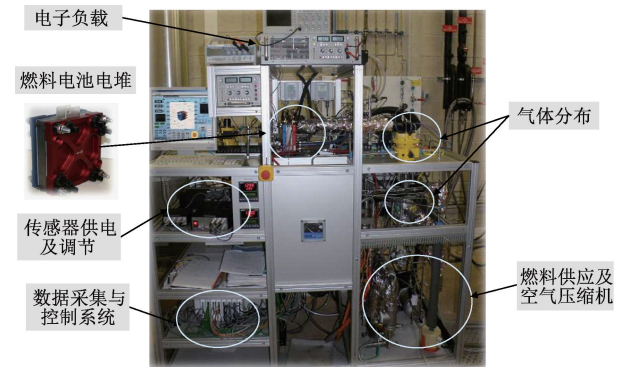


图5 FCLAB 燃料电池耐久性试验台

Fig. 5 FCLAB fuel cell durability test bench

行可控参数如表 1 所示。

表 1 燃料电池运行参数

Table 1 Fuel cell operating parameters

参数	值
燃料电池负载电流	70 A
气体压力	0~2 bar
最高工作温度	80 ℃
氢气流量	4.8 L/min
空气流量	23 L/min
相对湿度	50%
实验时间 (FC1/FC2)	1 154/1 019 h

表 2 总结了在线监测的电压、电流、温度、压力和流量等 24 个工作参数,部分典型监测参数如图 6 所示。由于两种 PEMFC 电堆的工作条件不同,其耐久性数据分布存在一定差异。

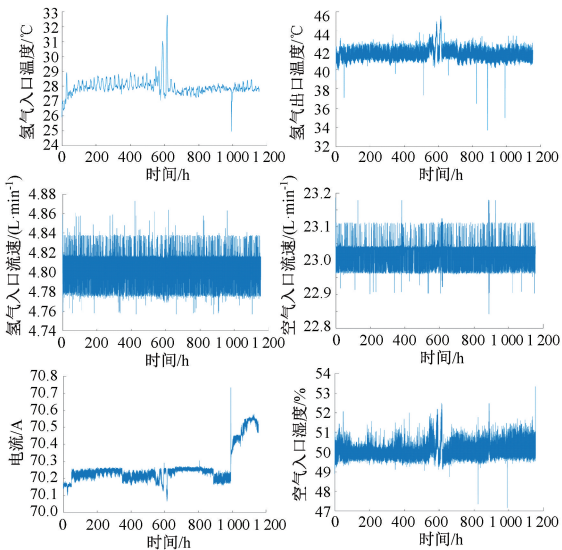
表 2 在线监测参数

Table 2 On-line monitoring parameters

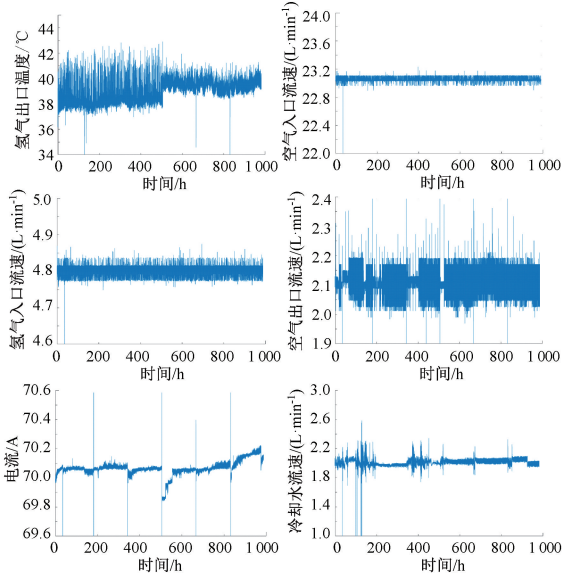
参数	物理意义
Time	退化时间 (h)
U1~U5; U _{tot}	单电池和电堆电压 (V)
I; J	电流 (A); 电流密度 (A/cm ²)
T _{in} H ₂ ; T _{out} H ₂	氢气入口和出口温度 (℃)
T _{in} AIR; T _{out} AIR	空气入口和出口温度 (℃)
T _{in} WAT; T _{out} WAT	冷却水入口和出口温度 (℃)
P _{in} H ₂ ; P _{out} H ₂	氢气入口和出口压力 (mbara)
P _{in} AIR; P _{out} AIR	空气入口和出口压力 (mbara)
D _{in} H ₂ ; D _{out} H ₂	氢气入口和出口流速 (L/min)
D _{in} AIR; D _{out} AIR	空气入口和出口流速 (L/min)
DWAT; H _r AIRFC	冷却水流速 (L/min); 空气入口湿度 (%)

2.2 数据预处理

利用小波阈值去噪的方法剔除 PEMFC 原始数据中的噪声干扰。如图 7 所示,在进行了表征测试之后,电压一直在增加,这是一种电压恢复现象,主要是由于连续试



(a) FC1部分典型监测参数
(a) Some typical monitoring parameters of FC1



(b) FC2部分典型监测参数
(b) Some typical monitoring parameters of FC2

图 6 PEMFC 运行参数波形

Fig. 6 Waveform plot of PEMFC operating parameters

验在休息期间中断造成的^[20]。

2.3 特征选择

基于预处理后的 PEMFC 退化特征数据进行 XGBoost 特征选择实验。原始数据集由 18 个特征变量组成,包括电堆电压、电流、氢气/空气/冷却水出入口温度、氢气/空气出入口压力、氢气/空气出入口流速、冷却水流速、空气入口湿度,并将电堆电压作为 XGBoost 特征选择的自变量。

如图 8 可见,FC1、FC2 前 7 个特征的累计贡献率分别为 97%、96%,为影响燃料电池堆退化特性的主要变量,包含了退化数据的大部分信息。同时,图 9 展示了

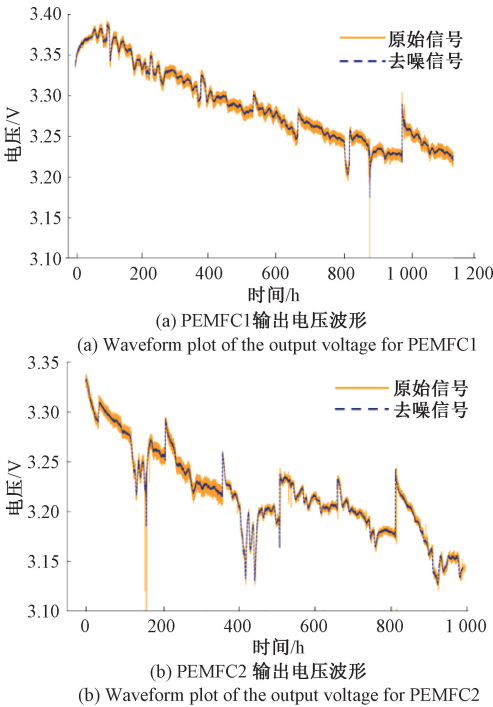


图 7 去噪前后输出电压波形对比

Fig. 7 Comparison of PEMFC output voltage waveforms before and after denoising

FC1 和 FC2 的特征重要度。该排序合理反映了不同变量对燃料电池退化的不同影响机理。其中,FC1 和 FC2 中电压和电流可以很好地反映电池整体输出情况。而入口气体如空气和氢气的流速、入口空气湿度以及气体入口温度等特征变量,由于影响电池反应速率、反应物供给、温度分布和热管理。且与电化学反应、质子传导、水热管理等机理的内在联系,其重要性也较高。值得注意的是,FC1 和 FC2 最优特征子集的组成有一定差异,但大体相同,这表明了 XGBoost 算法可以稳定有效地从复杂耦合的多个监测参数中识别出对模型预测具有重要影响的特征子集。因此,为了达到预测精度和模型复杂度的平衡,选择前 7 个重要特征构成最优特征子集,用于燃料电池的退化预测。

2.4 预测结果与讨论

1) 预测性能指标

在实施预测之前,给出预测性能评价标准以确定预测方法的预测精度至关重要。评价指标采用了平均绝对误差 (mean absolute error, MAE)、均方根误差 (root mean squared error, RMSE) 和决定系数 (R^2) 3 种常用的标准以从多个角度综合评判模型的预测性能。其中,MAE 和 RMSE 值越小,预测越准确,误差越小。与 MAE 和 RMSE 不同, R^2 值越大表示预测越好, $R^2 = 1$ 表示预测与实验数据非常吻合。

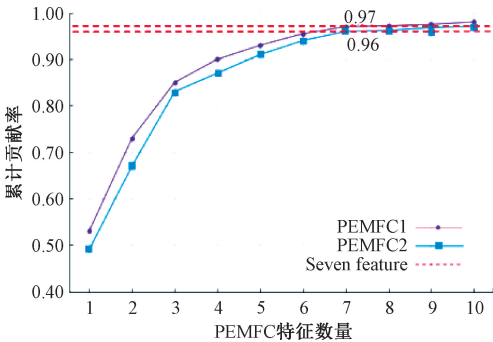


Fig. 8 Cumulative contribution rate of features

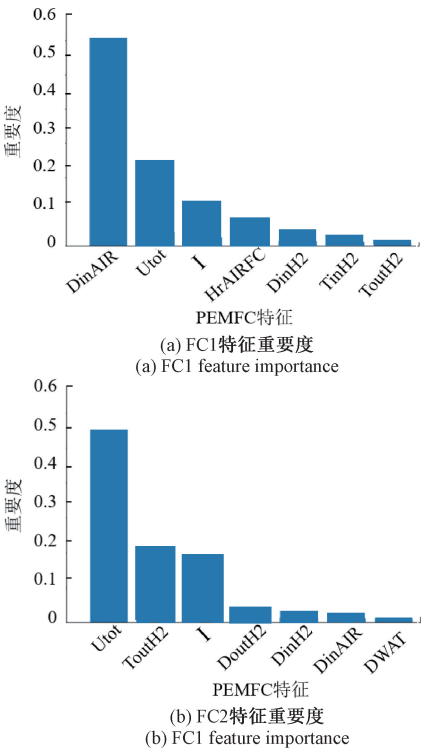


图 9 PEMFC 特征重要度

Fig. 9 PEMFC feature importance

2) 基于 XSAL 模型的退化预测实验

本文的仿真实验平台为:12th Gen Intel (R) Core (TM) i5-12500H 2.50 GHz 处理器和 16 GB 内存,运行环境为 Python 3.10.9.+TensorFlow2.15.0。

本文构建 XSAL 模型作为 PEMFC 退化预测模型,并以 FC1 数据集对本文所提方法性能进行验证。将数据的 70% 作为训练集,并设置后 30% 的数据为测试集。将训练集数据送入 XSAL 模型中进行训练,其中输出层为电堆的电压;把测试集数据送入训练好的 PEMFC 退化预测模型中,输出预测结果如图 10 所示。可以看出,燃料电池输出电压的预测值基本上跟随实际值的变化而变化。

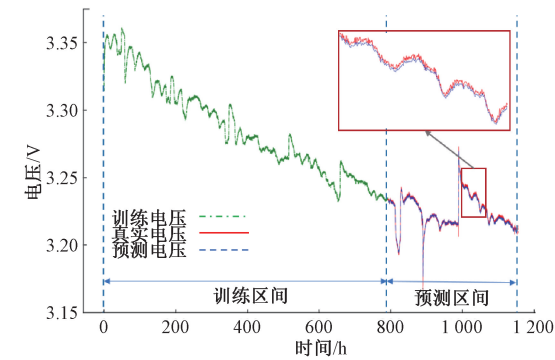


图 10 FC1 退化预测结果

Fig. 10 FC1 degradation prediction results

为了更深入地验证 XSAL 模型的通用性,本文采用了相同的训练方案来评估其在 PEMFC 动态运行下的退化数据上的性能,退化预测结果如图 11 所示。所提模型在动态运行下的退化数据上也能表现出较好的预测性能,其 MAE 为 0.004 32, RMSE 为 0.013 9,而 R^2 达到了 0.940 5,表明该模型在 PEMFC 动态运行条件下,也能准确预测燃料电池堆输出电压,具有较好的泛化效果。

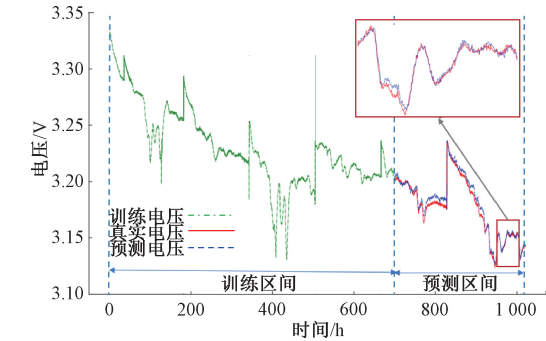


图 11 FC2 退化预测结果

Fig. 11 FC2 degradation prediction results

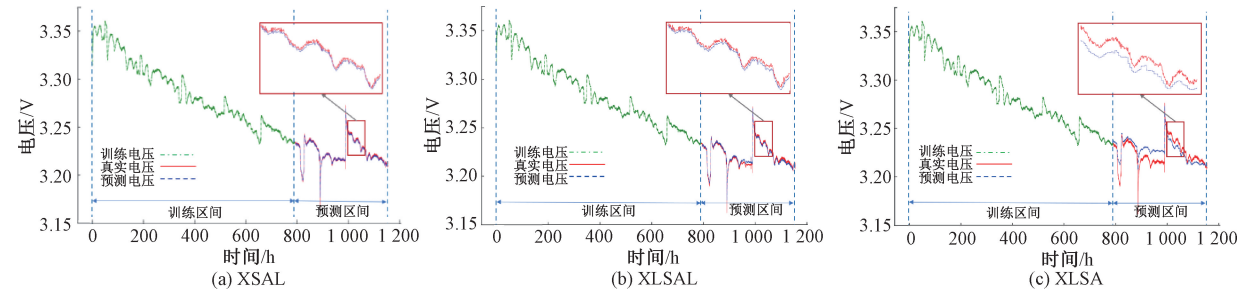


图 12 自注意力层、LSTM 层组合预测结果对比

Fig. 12 Comparison of prediction results of self-attention layer and LSTM layer combination

型、Bi-LSTM 模型、GRU 模型分别降低了 77.04%、59.48%、56.34%, RMSE 分别降低了 57.6%、45.9%、45.7%。图 13 所示, MAE 和 RMSE (左纵坐标) 的低柱状条突显了 XSAL 相对其他模型更小的预测误差, 而 R^2 (右

3) 自注意力层、LSTM 层组合对比试验

本文提出的模型引入了自注意力机制,为了得到更好的预测模型,进行了自注意力层、LSTM 层组合对比试验,并探讨了自注意力层位置变化对模型预测性能的影响。包括将自注意力层置于两个 LSTM 层之前(XSAL 模型)、之间(XLSAL 模型)和之后(XLSA 模型)这 3 种不同的模型结构。并基于 FC1 数据集对这 3 种不同模型的性能进行验证。将数据的 70% 作为训练集,并设置后 30% 的数据为测试集。图 12 为 3 种模型组合的退化预测结果图。由图可以看出,虽然 3 种组合都可以预测 FC1 的退化趋势,但 XSAL 模型退化电压预测值的变化趋势更接近目标值。同时,表 3 显示了各项评价指标结果,可以看出预测效果 XSAL>XLSAL>XLSA。自注意力层位于双层 LSTM 之前的模型组合,其 MAE、RMSE 均为最小,分别为 0.000 62 和 0.001 11, R^2 为 0.990 9,模型预测性能最好。

表 3 不同模型组合的评价结果

模型	XSAL	XLSAL	XLSA
MAE	0.000 62	0.001 66	0.004 15
RMSE	0.001 11	0.002 42	0.005 66
R^2	0.990 9	0.956 4	0.762 5

4) 不同模型对比实验

为了避免实验的偶然性,同时验证模型的泛化效果,将所提模型(XSAL)分别与 LSTM 模型^[15]、Bi-LSTM 模型^[21]、GRU 模型^[21]进行对比,得到的评价结果如表 4 所示。如前文所述,XGBoost 算法可以有效地从复杂耦合的多个监测参数中识别重要特征,自注意力机制可以有效地增强神经网络的信息处理能力,有助于提高预测模型的性能。由表 4 可知,XSAL 模型的 MAE 较 LSTM 模

纵坐标)柱状图的高峰则凸显了 XSAL 模型拥有更好的预测精度。以上预测精度指标验证了本文所提 XSAL 模型的有效性,表明了该模型具有更强的鲁棒性和准确性。

表 4 不同模型组合的评价结果

Table 4 Evaluation results of different model combinations

模型	LSTM	Bi-LSTM	GRU	XSAL
MAE	0.002 7	0.001 53	0.001 42	0.000 62
RMSE	0.003 1	0.001 92	0.001 78	0.001 11
R ²	0.960	0.959 1	0.976 7	0.990 9

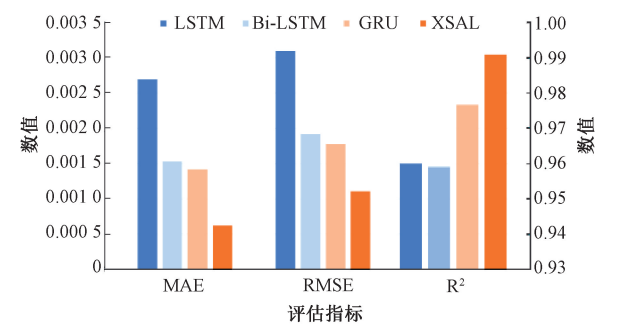


图 13 不同模型的评价指标对比

Fig. 13 Comparison of evaluation indexes of different models

5) 不同训练数据持续时间下的预测性能对比实验

本文还研究了 XSAL 模型在不同训练数据持续时间下的预测性能并以 FC1 数据集进行验证。PEMFC1 在不同训练数据持续时间下的预测性能对比如图 14 所示。

表 5 显示了各项评价指标结果。可以观察到 XSAL 模型随着训练集的增加,其 MAE、RMSE 均逐渐减小。特别值得注意的是,当训练集仅占数据集的 20% 时,其 R² 达到了 0.991 5,这表明模型在使用较少的训练数据集时也能够实现 PEMFC 的短期退化预测,具有重要意义。此外,过多的旧数据会对模型的预测性能产生负面影响,因此训练数据的比例并非越多越好。

3 结 论

本文提出了一种基于 XGBoost 和 Self-Atten-LSTM 的燃料电池退化预测模型,并基于 FCLAB 的退化数据完成了对该模型的验证。采用 XGBoost 算法进行关键特征筛

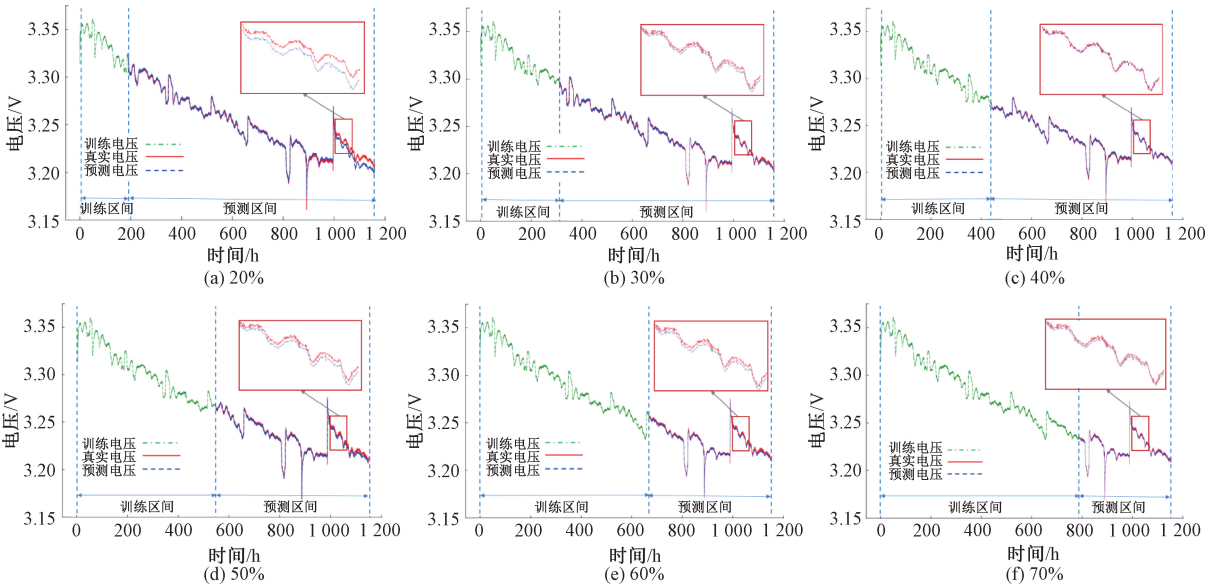


图 14 基于 XSAL 模型不同训练集预测结果

Fig. 14 The prediction results based on different training sets using the XSAL model

表 5 不同训练集的评价结果

Table 5 Evaluation results of different training set

训练集	20%	30%	40%	50%	60%	70%
MAE	0.001 64	0.001 55	0.000 80	0.001 01	0.000 74	0.000 62
RMSE	0.002 75	0.002 13	0.001 20	0.001 34	0.001 12	0.001 11
R ²	0.991 5	0.992 2	0.996 1	0.992 7	0.992 8	0.990 9

选,从多重耦合的众多监测参数中有效地识别出重要的特征信息。融合自注意力机制的 LSTM,进一步提高了模型处理长序列时的全局建模和多维向量间复杂交互关系

的能力,更好的捕捉其整体退化趋势。实验结果表明,将自注意力层置于双层 LSTM 之前的模型组合(XSAL),其 MAE、RMSE 均为最小,模型预测性能最好。且 XSAL 模型无论在稳态条件还是在动态条件下,都能高度准确地预测燃料电池的退化,预测精度可达 99.09%。相较于传统 LSTM、Bi-LSTM、GRU 模型,模型的平均绝对误差减小了 56.34%~77.04%,具有更好的预测性能。

所提出的方法有效地避免了退化预测数据获取中不必要的实验,该方法也有望与控制策略相结合,构建有助于提高燃料电池耐久性的决策策略。

参考文献

- [1] SHARAF Z O, ORHAN F M. An overview of fuel cell technology: Fundamentals and applications [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2014; 32.
- [2] LIU H, CHEN J, HISSEL D, et al. Prognostics methods and degradation indexes of proton exchange membrane fuel cells: A review [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 123: 109721.
- [3] 李奇, 刘嘉蔚, 陈维荣. 质子交换膜燃料电池剩余使用寿命预测方法综述及展望[J]. 中国电机工程学报, 2019, 39(8): 2365-2375.
- LI Q, LIU J W, CHEN W R. Review and prospect of prediction methods for remaining useful life of proton exchange membrane fuel cells [J]. Chinese Journal of Electrical Engineering, 2019, 39 (8): 2365-2375.
- [4] KWUN F W, ENDALAMAW Z A, HONG J C. A hybrid method for remaining useful life prediction of proton exchange membrane fuel cell stack [J]. IEEE ACCESS, 2021, 9.
- [5] 路凯. 质子交换膜燃料电池动态响应特性分析及寿命预测研究[D]. 北京: 北京交通大学, 2020.
- LU K. Dynamic response characteristics analysis and life prediction of proton exchange membrane fuel cell [D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2020.
- [6] CHEN K, LAGHROUCHE S, DJERDIR A. Remaining useful life prediction for fuel cell based on support vector regression and grey wolf optimizer algorithm [J]. IEEE Transactions on Energy Conversion, 2021, 37 (2): 778-787.
- [7] ZUO B, CHENG J, ZHANG Z. Degradation prediction model for proton exchange membrane fuel cells based on long short-term memory neural network and Savitzky-Golay filter [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46(29): 15928-15937.
- [8] 谢雨岑. 基于深度学习的燃料电池性能衰退预测研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2021.
- XIE Y C. Research on fuel cell performance degradation prediction based on deep learning [D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2021.
- [9] WU Y, YUAN M, DONG S, et al. Remaining useful life estimation of engineered systems using vanilla LSTM neural networks [J]. Neurocomputing, 2018, 275.
- [10] LIU J, LI Q, CHEN W, et al. Remaining useful life prediction of PEMFC based on long short-term memory recurrent neural networks [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(11): 5470-5480.
- [11] 蓝煜, 吴占宽, 姜琦, 等. 基于机器学习的质子交换膜燃料电池寿命预测研究 [J]. 现代机械, 2022(5): 1-5.
- LAN Y, WU ZH K, JIANG Q, et al. Proton exchange membrane fuel cell life prediction based on machine learning [J]. Modern Machinery, 2022(5): 1-5.
- [12] MA R, YANG T, BREAZ E, et al. Data-driven proton exchange membrane fuel cell degradation predication through deep learning method [J]. Applied Energy, 2018, 231.
- [13] 高明, 刘超, 唐加福, 等. 基于注意力神经网络的燃料电池寿命衰减预测 [J/OL]. 中国管理科学: 1-14 [2023-07-19].
- GAO M, LIU CH, TANG J F, et al. Prediction of fuel cell life decay based on attention neural network [J/OL]. China Management Science: 1-14 [2023-07-19].
- [14] DING R, WANG R, DING Y, et al. Designing AI - aided analysis and prediction models for nonprecious metal electrocatalyst - based proton - exchange membrane fuel cells [J]. Angewandte Chemie, 2020, 132(43): 19337-19345.
- [15] 常家康, 吕宁, 詹跃东. 基于 XGBoost-RFECV 算法和 LSTM 神经网络的 PEMFC 剩余寿命预测 [J]. 电子测量与仪器学报, 2022, 36(1): 126-133.
- CHANG J K, LYU N, ZHAN Y D. Residual life prediction of PEMFC based on XGBoost-RFECV algorithm and LSTM neural network [J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2022, 36(1): 126-133.
- [16] 谢丽娟, 路锋, 王旭, 等. 一种用于信号去噪的小波阈值去噪算法 [J]. 国外电子测量技术, 2020, 39(4): 32-36.
- XIE L J, LU F, WANG X, et al. A wavelet threshold denoising algorithm for signal denoising [J]. Electronic Measurement Technology Abroad, 2020, 39 (4): 32-36.
- [17] YU Y, SI X, HU C, et al. A review of recurrent neural networks: LSTM cells and network architectures [J]. Neural Computation, 2019, 31(7): 1235-1270.
- [18] 朱瑞琪, 陆佳敏, 陆佳艳, 等. 一种基于自注意力机制的 CNN-BiLSTM 非侵入式负荷分解方法研究 [J]. 机电信息, 2023(16): 77-81.
- ZHU R Q, LU J M, LU J Y, et al. Research on a CNN-BiLSTM non-invasive load decomposition method based on self-attention mechanism [J]. Electro Mechanical Information, 2023(16): 77-81.
- [19] ELODIE P, MARIE-CÉCILE P, DAVID B, et al.

- Impact of current ripples on the durability of proton exchange membrane fuel cells based on two ageing datasets[J]. Data in Brief, 2022, 45108601-108601.
- [20] JOUIN M, GOURIVEAU R, HISSEL D, et al. Joint particle filters prognostics for proton exchange membrane fuel cell power prediction at constant current solicitation [J]. IEEE Transactions on Reliability, 2015, 65(1): 336-349.
- [21] SAHAJPAL K, RANA K P S, KUMAR V. Accurate long-term prognostics of proton exchange membrane fuel cells using recurrent and convolutional neural networks [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, 48(78): 30532-30555.

作者简介



刘晓倩, 2017 年于临沂大学获得学士学位, 现为济南大学硕士研究生, 主要研究方向为质子交换膜燃料电池的故障诊断与退化预测。

E-mail: 1435951508@qq.com

Liu Xiaoqian received B. Sc. degree from Linyi University in 2017. Now she is a M. Sc candidate at Jinan University. Her main research interests include the fault diagnosis and degradation prediction of proton exchange membrane fuel cells.



崔焕勇, 1993 年于山东工业大学获学士学位, 1996 年于山东工业大学获硕士学位, 2006 年于山东大学获博士学位, 现为济南大学教授、研究生导师, 主要研究方向为机械设计与制造。

E-mail: cuihuanyong@163.com

Cui Huanyong received his B. Sc. degree from Shandong University of Technology in 1993, M. Sc. degree from Shandong University of Technology in 1996, Ph. D. degree from Shandong University in 2006, respectively. Now he is a professor and M. Sc. supervisor at Jinan University. His main research interests include mechanical design and manufacturing.



刘海宁(通信作者), 2005 年于山东大学获学士学位, 2011 年于上海交通大学获博士学位, 现为济南大学副教授、研究生导师, 主要研究方向为设备状态监测与故障诊断。

E-mail: me_liuhn@ujn.edu.cn

Liu Haining (Corresponding author) received his B. Sc. degree from Shandong University in 2005, Ph. D. degree from Shanghai Jiao Tong University in 2011. Now he is an associate professor and M. Sc. supervisor at Jinan University. His main research interests include equipment condition monitoring and fault diagnosis.