

تحلیل عملکرد پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای با مخلوط متان-اکسیژن-نیتروژن تحت شرایط پایا

مجید کامور^۱، مجید قاسمی^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

* تهران، صندوق پستی ۱۹۳۹۵-۱۹۹۹، ghasemi@kntu.ac.ir

چکیده

در مطالعه حاضر عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک‌محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای با مخلوط متان-اکسیژن-نیتروژن تحت شرایط پایا بصورت عددی بررسی می‌شود. هندسه پیل دو بعدی در نظر گرفته می‌شود و ناحیه محاسباتی از محفظه گازی، الکترود آن، الکترود کاتد و الکتروولت تشکیل می‌شود. مخلوط اکسیژن-متان-نیتروژن به ترتیب با کسر جرمی اولیه ۰.۰۷، ۰.۱۴ و ۰.۷۷ به سمت پیل تقدیم می‌شود. تمامی خواص فیزیکی تابع دما درنظر گرفته می‌شود. معادلات غیرخطی کامل‌آ کوبیل شده حاکم شامل معادلات بقاء جرم، اندازه حرکت، گونه شبیه‌سازی و بار الکترونی و یونی می‌باشد که در یک نرم‌افزار تجاری فرمول‌بندی شده و با استفاده از روش المان محدود حل می‌شوند. جهت نشان دادن صحت مدل، نتایج حاصل از مدل با نتایج یک مدل مشابه مقایسه می‌گردد. در پایان تحلیل عملکرد پیل شامل توزیع سرعت، دما و غلظت تمامی گونه‌های گازی مورد بحث قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که ماکریتم دما در سمت الکترود آن اتفاق می‌افتد که دلیل آن واکنش اکسایش متان است که به شدت گرماده می‌باشد. این مقدار افزایش دما ایجاده شده در پیل مزبیتی می‌باشد تا دمای کاری پیل باین تر آید. به علاوه، نشان داده می‌شود که بخش زیادی از هیدروژن به صورت مصرف نشده از محفظه خارج می‌شود که یکی از عوامل اصلی کاهش عملکرد در این نوع از پیل می‌باشد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دربافت: ۰۴ مهر ۱۳۹۵

پذیرش: ۰۳ آبان ۱۳۹۵

ارائه در سایت: ۱۵ دی ۱۳۹۵

کلید واژگان:

پیل سوختی اکسید جامد

نم‌محفظه‌ای

متان

روش المان محدود

Performance analysis of coplanar single chamber solid oxide fuel cell with oxygen-methane-nitrogen mixture under steady state conditions

Majid Kamvar, Majid Ghassemi*

Faculty of Mechanical Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 19395-1999, Tehran, Iran, ghasemi@kntu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 25 September 2016

Accepted 23 November 2016

Available Online 04 January 2017

Keywords:

Solid oxide fuel cell

Single chamber

Methane

Finite element method

ABSTRACT

In this study, performance of a coplanar single chamber solid oxide fuel cell with oxygen-methane-nitrogen under steady state conditions is investigated. The cell geometry is considered two dimensional and the computational domain consists of gas chamber, anode electrode, cathode electrode and electrolyte. Oxygen-methane-nitrogen mixture is fed to the cell with initial mass fraction of 0.07, 0.14 and 0.77 respectively. All physical properties are considered as temperature dependent. The fully coupled nonlinear governing equations including mass, momentum, species and charge conservation equations are formulated in commercial software and solved using finite elements method. To show the model accuracy, the current model results are compared with a similar numerical model. Finally, the cell performance analysis including velocity, temperature and concentration of all species is discussed. The results show that the maximum temperature occurs at anode side. This is due to methane oxidation reaction which is extremely exothermic. This temperature growth is an advantage for the cell to be able to reduce its working temperature. Furthermore, it is shown that a large amount of hydrogen leaves the chamber without any use. This is the main reason of the low performance that occurs in this type of cell.

گاز را به دنبال دارد. نشتی گاز مانع اصلی پیل‌های سوختی اکسید جامد برای

تجارتی کردن آن‌ها می‌باشد [۵,۴,۲]. یک پیشنهاد برای مقابله با این مشکلات استفاده از پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای^۱ می‌باشد که در آن

مخلوطی از سوخت و اکسنده به طور مستقیم به پیل تقدیم می‌شود [۵].

هدف بسیاری از تحقیقات انجام شده در حوزه پیل‌های سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای بهبود عملکرد آن می‌باشد. تا به امروز، اکثر تحقیقات

-۱- مقدمه

پیل‌های سوختی بطور مستقیم الکتریسیته را از منبع خارجی سوخت و اکسنده تولید می‌کنند [۱]. از میان انواع پیل‌های سوختی موجود، پیل‌های سوختی اکسید جامد به دلیل بازدهی بالای آن‌ها و تنوع در انتخاب سوخت توجه بیشتری را به خود جلب کرده است [۲-۶]. همان‌طور که می‌دانیم، پیل‌های سوختی اکسید جامد در محدوده دمای بالا (700°C) کار می‌کنند که این محدوده دمایی بالا مشکلاتی از جمله فرسایش مواد و نشتی

^۱ Single Chamber Solid Oxide Fuel Cell (SCSOFC)

در مطالعات قبلی نشان داده شده است که احتمال وجود واکنش‌های الکتروشیمیایی تا عمق پنجاه میکرون از سطح مشترک الکترود و الکتropolیت وجود دارد که لایه کاتالیستی³ نام دارد [20]. از آنجا که در مطالعه حاضر ضخامت الکتروودها کمتر از 50 میکرون می‌باشد لذا پیل موردنظر از سه لایه تشکیل شده است: لایه کاتالیستی الکتروود آند-الکتropolیت-لایه کاتالیستی الکتروود کاتند. جنس لایه‌ها به ترتیب از اکسید نیکل-زیرکونیای پایدار شده با ایتریا⁴، زیرکونیای پایدار شده با ایتریا و لانتانیوم استرانسیم منگنیت⁵-زیرکونیای پایدار شده با ایتریا می‌باشد. جدول 1 پارامترهای هندسی مسئله را نشان می‌دهد.

فرض می‌شود تمامی گونه‌های گازی رفتار گاز ایده‌آل دارند و جریان پایا، دو بعدی، تراکم‌پذیر و آرام می‌باشد. تمامی خواص سیال تابع دما در نظر گرفته شده و الکتروودهای بعنوان یک جسم کاملاً جامد غیرقابل نفوذ در برابر اجزاء گازی فرض می‌شود که تنها هدایت یونی دارد و عایق در برابر جریان الکتروون می‌باشد.

از آنجا که هدایت الکترونی الکتروودها در مقایسه با هدایت یونی آن‌ها بسیار بیشتر می‌باشد از گرمایش اهمی به‌واسطه انتقال الکترون صرف‌نظر می‌شود.

در واقعیت سنتیک شیمیایی موجود در الکتروودهای پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای بسیار پیچیده می‌باشد و این به‌دلیل آمیختگی اکسنده و سوخت در این نوع از پیل می‌باشد اما چنانچه الکتروودها کاملاً ایده‌آل⁶ در نظر گرفته شوند مدل سازی پیل آسانتر می‌گردد. با این فرض، واکنش‌های شیمیایی موجود در الکتروودها به تفکیک در معادلات (1) تا (5) آورده می‌شود:

$$\bullet \quad \text{اکسایش جزئی}^7 \text{ متان در الکتروود آند:}$$



که در آن k_{POX} سرعت نرخ واکنش اکسایش جزئی متان می‌باشد.

$$\bullet \quad \text{رفمینگ بخار در الکتروود آند:}$$



که در آن k_{SR} سرعت نرخ واکنش رفمینگ بخار می‌باشد.

$$\bullet \quad \text{انتقال آب-گاز}^9 \text{ در الکتروود آند:}$$

جدول 1 داده‌های هندسی

Table 1 Geometrical data

مقدار (mm)	علامت	عنوان
10	L	طول محفظه
0.8	h	ارتفاع محفظه
0.1	t_e	ضخامت الکتropolیت
1.6	w_e	عرض الکتropolیت
0.02	t_a	ضخامت الکتروود آند
0.45	w_a	عرض الکتروود آند
0.02	t_c	ضخامت الکتروود کاتند
0.5	w_c	عرض الکتروود کاتند

³ Catalyst layer

⁴ YSZ

⁵ LSM

⁶ Selective

⁷ Partial oxidation

⁸ Steam reforming

⁹ Water-gas shift

محدود به مطالعات آزمایشگاهی پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای می‌باشد که این مطالعات تنها اطلاعاتی از عملکرد کلی پیل فراهم می‌کند و دسترسی به اطلاعات جزئی اجزاء پیل مانند غلظت گونه‌های شیمیایی و گردایان دما در مقاطع مختلف پیل میسر نمی‌کند [17-7,4,2]. مطالعات عددی انجام گرفته در این حوزه اندک می‌باشد و نیاز به ارائه یک مدل جامع عددی در این حوزه ضروری می‌باشد.

چانگ و همکارانش [3] در سال 2006 عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای مورد بررسی قرار دادند. دمای پیل K 773 ثابت فرض شد و حل معادلات شامل معادله حرکت سیال (ناوبراستوکس)، معادلات نفوذ اجزاء درون الکتروودهای متخلخل با استفاده از نرم‌افزار فملب¹ حل شد. تأثیرات ضخامت الکتropolیت و همچنین فاصله بین الکتروودهای کاتند و آند از هم و در نهایت جهت جریان مخلوط بر روی الکتروودها از هم کمتر باشد و ضخامت الکتropolیت نیز بیشتر باشد در این صورت عملکرد پیل بهتر خواهد بود. نکته قابل توجه ترکیب مخلوط در نظر گرفته شده می‌باشد که آن‌ها از مخلوط اکسیژن و هیدروژن استفاده کردند بدون این که اینمی مخلوط بررسی شود که آیا انفجاری ممکن است با این مخلوط رخ دهد یا خیر. آن‌ها دریافتند هنگامی که جریان مخلوط بصورت عمود بر محور الکتروود و زمانی که ابتدا به الکتروود کاتند می‌رسد عملکرد پیل بهتر است و این به دلیل کم شدن تلفات غلظت می‌باشد.

چانگ و همکارانش در مطالعه دیگری در سال 2007 مطالعه قبلی خود را کامل تر کردند [18]. آن‌ها این بار تغییرات دمایی پیل را نیز در مدل خود لحاظ کردند و سوخت متان در ترکیب با اکسیژن و نیتروژن به عنوان مخلوط ورودی انتخاب کردند که از اینمی بیشتری برخوردار است. آن‌ها در این مطالعه تأثیر نسبت ترکیب سوخت و همچنین مقدار دمای ورودی را بر عملکرد پیل مورد بررسی قرار دادند.

کامور و همکارانش اخیراً در مطالعه‌ای تأثیر آرایش‌های مختلفی از چیدمان الکتروودها بر روی الکتropolیت در یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای را مورد بررسی قرار دادند [19]. ترکیب جریان ورودی مخلوطی از هیدروژن و اکسیژن بود که برای حفظ اینمی سیستم با گاز حامل نیتروژن رقیق شده بود. آن‌ها دریافتند که تلفات اهمی بیشترین تأثیر را بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای دارد. آن‌ها با معرفی یک آرایش بهینه که بالاترین عملکرد را نشان می‌دهد دریافتند که با استک کردن دوتا پیل مشابه به صورت سری مقدار توان ماکریزم خروجی دو برابر می‌شود.

هدف از مطالعه حاضر توسعه مطالعه پیشین [19] جهت در بر گرفتن جزء گازی متان در مدل و تحلیل کاملی از رفتار پیل شامل توزیع دما، غلظت و سرعت می‌باشد.

2- تعریف مسئله

"شکل 1" نمای شماتیکی از مسئله را نشان می‌دهد. مطابق شکل مخلوطی از متان و اکسیژن به سمت یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای جریان می‌باشد که این مخلوط با نیتروژن بعنوان یک گاز حامل رقیق شده است. همان‌طور که نشان داده شده است مجموعه الکتروودهای مثبت و منفی و الکتropolیت² در وسط یک محفوظه گازی قرار گرفته است.

¹ FEMLAB

² Positive electrode/Electrolyte/Negative electrode (PEN)

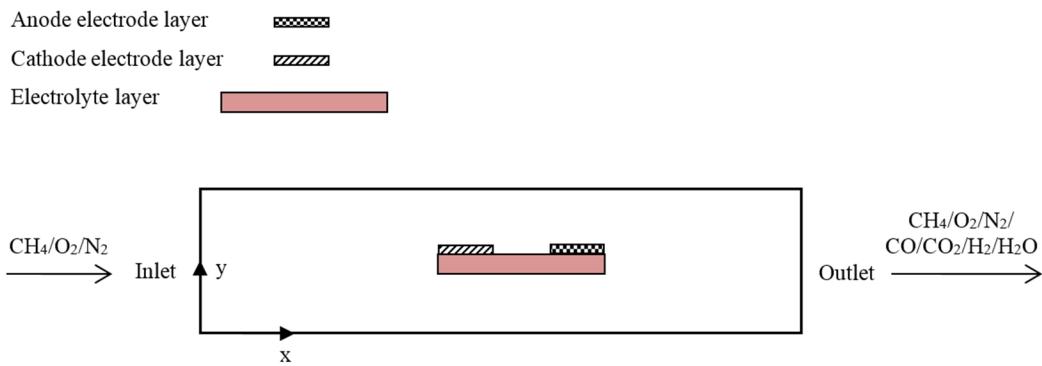


Fig. 1 Schematic of problem

شکل ۱ نمای شماتیکی از مسئله

۲-۲-بقای گونه‌های گازی

معادله بقاء برای یک جزء گازی مانند i به صورت معادله (9) نوشته می‌شود:
[21]

$$\nabla \cdot j_i + \rho(u \cdot \nabla)\omega_i = R_i \quad (9)$$

که در آن j_i بردار شار جرمی نسبی، ω_i کسر جرمی و R_i عبارت چشمی یا چاه مربوط به تولید یا مصرف جزء i ام می‌باشد. با استفاده از روابط استفان ماکسول^۱ برای سیستم‌های چندجزوی، عبارت بردار شار جرمی به صورت معادله (10) می‌تواند نوشته شود [21]:

$$j_i = -\rho\omega_i \sum_k D_{ik} d_k \quad (10)$$

که در آن d_k نیروی محرك برای نفوذ جزء i ام در یک مخلوط ایده‌آل می‌باشد و D_{ik} ضریب نفوذ فیک^۲ در سیستم چند جزوی می‌باشد و مقدار آن با استفاده از رابطه (11) تعیین می‌شود [21]:

$$D_{ik} = 1.883 \times 10^{-2} T^{1.5} \times \frac{\left(\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}\right)^{0.5}}{(p \sigma_{ik}^2 \Omega)} \quad (11)$$

که در آن T دما، M جرم مولکولی گاز، σ و Ω به ترتیب مشخصه طولی^۳ بر حسب آنگستروم و انگرال برخورد نفوذی^۴ می‌باشد که نحوه محاسبه آن‌ها در مرجع [21] تشریح شده است. جهت به حساب آوردن مقاومت انتقال جرم در الکترودهای متخلخل و همچنین تأثیر برخورد مولکول‌ها به جداره دیواره‌ها ضریب نفوذ فیک با رابطه (12) اصلاح می‌شود [19]:

$$D_{DGM,ik}^{\text{eff}} = \left(\frac{\varepsilon}{\tau} \right) \frac{D_{ik} \times D_{KN,ik}}{(D_{ik} + D_{KN,ik})} \quad (12)$$

که در آن $D_{DGM,ik}^{\text{eff}}$ ضریب نفوذ مؤثر مدل گاز-داستی^۵، τ میزان انحناء و ضریب نفوذ نادسن^۶ می‌باشد. از رابطه تجربی برای محاسبه ضریب نفوذ نادسن در معادله (13) استفاده می‌شود [19]:

$$D_{KN,ik} = \frac{4}{3} r_{\text{eff}} \sqrt{RT \frac{(M_i + M_k)}{(\pi M_i \times M_k)}} \quad (13)$$

که در آن r_{eff} شعاع مؤثر روزنه در محیط متخلخل و R ثابت جهانی گازها می‌باشد.



که در آن k_{shift} سرعت نرخ واکنش انتقال آب-گاز می‌باشد.
• واکنش اکسایش هیدروژن در الکترود آند:



• واکنش کاهش اکسیژن در الکترود کاتد:



در ادامه فرمول‌بندی ریاضی معادلات حاکم به تفکیک به همراه شرایط مرزی آورده می‌شود.

۱-۱-بقای جرم و اندازه حرکت خطی

از آنجا که در کانال گازی و الکترودهای متخلخل جریان گونه‌های گازی وجود دارد. معادله بقاء جرم یا همان پیوستگی در معادله (6) نوشته شده است [21]:

$$\nabla \cdot (\rho u) = \sum_j R_j \quad (6)$$

که در آن ρ چگالی مخلوط، u بردار سرعت می‌باشد. طرف راست معادله (6) بیانگر مجموع عبارت‌های چشمی یا چاه گونه‌های شیمیایی به واسطه هریک از واکنش‌های (1) تا (5) می‌باشد. جهت جلوگیری از زیاده‌نویسی خواننده جهت نحوه محاسبه هر یک از این عبارت‌ها به مراجع [18,14] رجوع داده می‌شوند.

معادله اندازه حرکت خطی حاکم بر الکترودهای متخلخل براساس قانون دارسی در معادله (7) بیان می‌شود [11]:

$$\rho u \cdot \nabla u = \nabla \cdot \left(-pI + \frac{\mu}{\varepsilon} (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2\mu}{\varepsilon} (\nabla \cdot u) I \right) + \rho g - \left(\frac{\mu}{\kappa} \right) u + B \quad (7)$$

که در آن p فشار، μ لزجت دینامیکی، ε تخلخل، g بردار شتاب، κ نفوذپذیری، و B بردار نیروهای خارجی وارد بر حجم واحد سیال می‌باشد. با اعمال فرض استوکس-برینکمن، سمت چپ معادله (7) برای محیط متخلخل حذف می‌شود. در مورد جریان در محفظه گازی که یک محیط آزاد می‌باشد در رابطه (7) کافی است تخلخل را برابر مقدار واحد و نفوذپذیری را برابر بی‌نهایت قرار دهیم در این صورت معادله اندازه حرکت خطی حاکم در محفظه گازی به صورت معادله (8) بازنویسی می‌شود [11]:

$$\rho u \cdot \nabla u \rho u \cdot \nabla u = \nabla \cdot \left(-pI + \mu (\nabla u + (\nabla u)^T) - 2\mu (\nabla \cdot u) I \right) + B \quad (8)$$

¹ Maxwell-Stefan

² Fick's diffusivity

³ Characteristic length

⁴ Collision diffusion integral

⁵ Dusty Gas Model (DGM)

⁶ Knudsen diffusivity

2-3-بقای بار

با اعمال قانون اهم، معادلات بقای بار الکترونی و یونی به ترتیب در معادلات (14) و (15) نوشتند می شود [19]:

$$-\nabla \cdot (\sigma_{el} \nabla \phi_{el}) = j_{el} \quad (14)$$

$$-\nabla \cdot (\sigma_{io} \nabla \phi_{io}) = j_{io} \quad (15)$$

که در آن $\phi_{el(io)}$ رسانایی الکتریکی (یونی) و پتانسیل الکتریکی (یونی) می باشد. j_{el} و j_{io} چشمی یا چاه مربوط به تولید یا مصرف به ترتیب الکترون و یون می باشد. مطابق واکنش های الکتروشیمیایی (4) و (5) تولید و یا مصرف برای های الکترونی و یونی در لایه های کاتالیستی آند و کاتد اتفاق می افتد که مقادیر آن ها با استفاده از معادله بالتر-ولمر¹ به ترتیب در معادلات (16) و (17) فرمول بندی می شود:

$$j_{io,a} = -j_{el,a} = A_a J_{0,ref}^{H_2} \left(\frac{C_{H_2}}{C_{H_2,ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \times \left[\exp\left(\frac{\alpha_a^a F \eta_{act,a}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_a^a F \eta_{act,a}}{RT}\right) \right] \quad (16)$$

$$j_{el,c} = -j_{io,c} = A_c J_{0,ref}^{O_2} \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2,ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \times \left[\exp\left(\frac{\alpha_c^c F \eta_{act,c}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c^c F \eta_{act,c}}{RT}\right) \right] \quad (17)$$

که در آن A مساحت سطح مؤثر الکتروشیمیایی بر واحد حجم الکترود، $J_{0,ref}^{O_2}$ به ترتیب جگالی جریان های انتقالی مرتع باری الکترودهای آند و کاتد می باشد. γ_{H_2} و γ_{O_2} به ترتیب مرتبه واکنش برای اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن در غلظت های مرتع $C_{H_2,ref}$ و $C_{O_2,ref}$ می باشد. ضریب α تثابت فارادی انتقال بار می باشد که مقدار آن بین صفر تا یک می باشد و F ثابت فارادی می باشد که برابر 96487 C/mol است. زیرنویس های a و c به ترتیب اشاره به الکترودهای آند و کاتد دارد. η_{act} اضافه ولتاژ فعالسازی می باشد که مقدار آن در سمت الکترودهای آند و کاتد به ترتیب با استفاده از رابطه های (18) و (19) محاسبه می شود:

$$\eta_{act,a} = \phi_{el} - \phi_{io} \quad (18)$$

$$\eta_{act,c} = \phi_{el} - \phi_{io} - V_{OC} \quad (19)$$

که در آن V_{OC} ولتاژ مدار باز پیل می باشد که به شدت تابع دمای کاری پیل می باشد و مقدار آن با استفاده از رابطه (20) بدست می آید [22]:

$$V_{OC} = 1.317 - 2.769 \times 10^{-4} T + \frac{RT}{2F} \ln \left(\frac{p_{H_2} \times p_{O_2}^{1/2}}{p_{H_2O} \times p_{ref}^{1/2}} \right) \quad (20)$$

2-4-بقای انرژی

معادله بقاء انرژی حاکم بر کل ناحیه بصورت معادله (21) نوشتند می شود [19]:

$$\nabla \cdot (\rho C_p u T - k \nabla T) = Q \quad (21)$$

که در آن C_p گرمای ویژه، k ضریب هدایت حرارتی و Q عبارت چشمی انرژی می باشد که به واسطه هریک از واکنش های (1) تا (5) درون پیل ایجاد می شود. جهت نحوه فرمول بندی این عبارت ها خواننده به مراجع [19,18,10,8] ارجاع داده می شوند. به منظور لحاظ کردن اثر انتقال حرارت درون الکترودهای مخلتلخل از روابط اصلاحی (22) و (23) به ترتیب برای محاسبه طرفیت گرمایی ویژه مؤثر در واحد حجم الکترود (ρC_p) و ضریب رسانش

¹ Butler-Volmer equation

جهت نشان دادن صحت نتایج حاصل از مدل فرایند اعتبارسنجی انجام می شود. برای این منظور نتایج حاضر با نتایج چانگ و همکارانش [18] مقایسه می شود. نکته این که تمامی پارامترهای هندسی و فیزیکی بکسان با مقاله چانگ و همکارانش در نظر گرفته می شود.

4-بحث و نتایج

4-1-اعتبارسنجی

جهت نشان دادن صحت نتایج حاصل از مدل فرایند اعتبارسنجی انجام می شود. برای این منظور نتایج حاضر با نتایج چانگ و همکارانش [18] مقایسه می شود. نکته این که تمامی پارامترهای هندسی و فیزیکی بکسان با مقاله چانگ و همکارانش در نظر گرفته می شود.

جدول 2 پارامترهای ورودی

Table 2 Input parameters

عنوان	علمات	مقدار	واحد
سرعت ورودی	u_{in}	5	$m s^{-1}$
نفوذپذیری	K	$10^{-12} m^2$	
ثابت جهانی گازها	R	8.314	$J mol^{-1} K^{-1}$
ولتاژ کاری پیل	V_{cell}	0.7	V
ضریب رسانش حرارتی آند	k_a	1.86	$W m^{-1} K^{-1}$
ضریب رسانش حرارتی کاتد	k_c	5.84	$W m^{-1} K^{-1}$
ضریب رسانش حرارتی	k_e	2.16	$W m^{-1} K^{-1}$
کتروولت			
ضریب رسانش یونی آند	$\sigma_{io,a}$	0.51364	Sm^{-1}
ضریب رسانش یونی کاتد	$\sigma_{io,c}$	0.51364	$W m^{-1} K^{-1}$
ضریب رسانش یونی کتروولت	$\sigma_{io,e}$	0.64	$W m^{-1} K^{-1}$
ضریب رسانش الکتریکی آند	$\sigma_{el,a}$	13195	$W m^{-1} K^{-1}$
ضریب رسانش الکتریکی کاتد	$\sigma_{el,c}$	801.02	$W m^{-1} K^{-1}$
چگالی آند	ρ_a	3310	$kg m^{-3}$
چگالی کاتد	ρ_c	3030	$kg m^{-3}$
چگالی کتروولت	ρ_e	5160	$kg m^{-3}$
ظرفیت گرمایی ویژه آند	Cp_a	450	$J kg^{-1} K^{-1}$
ظرفیت گرمایی ویژه کاتد	Cp_c	470	$J kg^{-1} K^{-1}$
ظرفیت گرمایی ویژه کتروولت	Cp_e	430	$J kg^{-1} K^{-1}$
تخلخل	E	0.45	-
انحناء	T	3.5	-
قطر روزنه	d_p	10^{-6}	m
مساحت سطح مخصوص موثر	A_v	1.191×10^9	$m^2 m^{-3}$

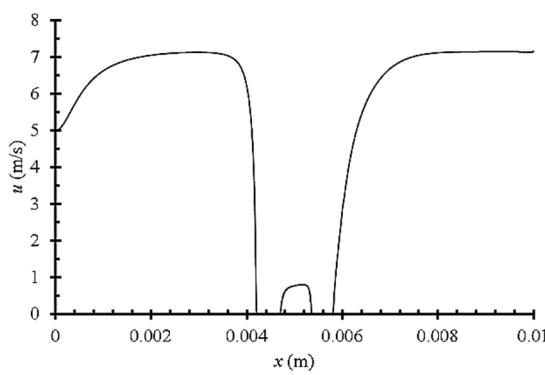


Fig. 3 Velocity distribution

شکل 3 توزیع سرعت

از پیل به مقدار ثابت می‌رسد در استک کردن پیل و قرار دادن پیل دوم حائز اهمیت می‌باشد. در این مطالعه پیل دوم می‌باشد در موقعیت دورتر از $x=8\text{mm}$ از ورودی محفظه تعییه شود.

"شکل 4" توزیع دما را نشان می‌دهد. مطابق شکل دمای سیال تا قبل از رسیدن به پیل تقریباً ثابت می‌ماند اما به محض رسیدن به پیل به دلیل واکنش‌های (1) تا (5) که در کتروودها اتفاق می‌افتد دمای پیل افزایش می‌یابد. نکته حائز اهمیت این است که دما در سمت کتروود آند بیشتر از سمت کتروود کاتد می‌باشد و این به دلیل واکنش اکسایش متان در سمت کتروود آند است. دمای ماکزیمم در لبه سمت راست کتروود آند اتفاق می‌افتد که مقدار آن 1094K می‌باشد. دلیل این پرش دمایی که در لبه

"شکل 2" مقایسه‌ای را بین نتایج حاصل از مدل حاضر و نتایج چانگ و همکارانش را نشان می‌دهد. در "شکل 2" محور عمودی سمت چپ بیانگر ولتاژ کاری پیل و محور عمودی سمت راست چگالی توان الکتریکی می‌باشد. همان‌طور که واضح است تطابق بسیار خوبی بین نتایج حاصل از مدل و نتایج چانگ و همکارانش وجود دارد. تنها اختلاف بین چگالی توان الکتریکی پیل در چگالی جریان‌های الکتریکی بالا (بالاتر از 1250A/m^2) وجود دارد که علت این اختلاف در تفاوت نوع مشبندی و همچنین میزان تراکم مش در دو مدل نسبت داد. لازم به ذکر است که در نتایج چانگ و همکارانش هیچ‌گونه اطلاعات جزئی در خصوص نوع مشبندی داده نشده است.

4-2- تحلیل عملکرد پیل

در این قسمت عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای مورد بررسی قرار می‌گیرد. در ورودی محفظه کسرهای جرمی متان و اکسیژن به ترتیب برابر 0.14 و 0.07 می‌باشد و مقدار دمای ورودی برابر $K = 1073$ ثابت می‌باشد. پارامترهای ورودی مسئله در جدول 2 فهرست شده است. رابطه وابسته به دما تمامی خواصی فیزیکی گونه‌های گازی از مرجع [23] استخراج شده است. بهمنظور تحلیل مناسب از عملکرد پیل، توزیع خواص در راستای محور افقی ترسیم شده است که از میان الکتروودها عبور می‌کند.

"شکل 3" توزیع سرعت سیال را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است در ابتداء سرعت سیال با افزایش اندکی رویرو می‌شود و مقدار سرعت سیال از 5m/s در ورودی محفظه تا مقدار 7.5m/s در فاصله تقریباً 2.5mm از ورودی افزایش می‌یابد. علت این افزایش سرعت رشد لایه‌های مرزی سرعت در جدارهای محفوظه می‌باشد. درون لایه مرزی به دلیل اثر وجود لزجت سیال سرعت کاهش یافته‌است. در این اثر وجود سرعت در خارج لایه مرزی با افزایش همراه خواهد بود. پس از آن که لایه‌های مرزی در دو طرف به یکدیگر می‌رسند مشاهده می‌شود که سرعت سیال تقریباً ثابت می‌ماند. درون الکتروودها متخلل به یکباره سرعت سیال با افت شدید رویرو می‌شود و به مقدار صفر می‌رسد دلیل این افت شدید سرعت نفوذپذیری بسیار پایین الکتروودها می‌باشد که باعث می‌شود افت فشار دارسی در معادله ناویراستوکس افزایش یابد. سیال پس از عبور از سمت الکتروود کاتد سرعت آن تا 0.8m/s افزایش می‌یابد که مشابه جریان سیال از خروجی یک نازل است. پس از عبور سیال از سمت الکتروود کاتد سرعت سیال افزایش یافته و تا مقدار 7.14m/s ثابت می‌شود. موقعیتی که در آن سرعت سیال پس از عبور

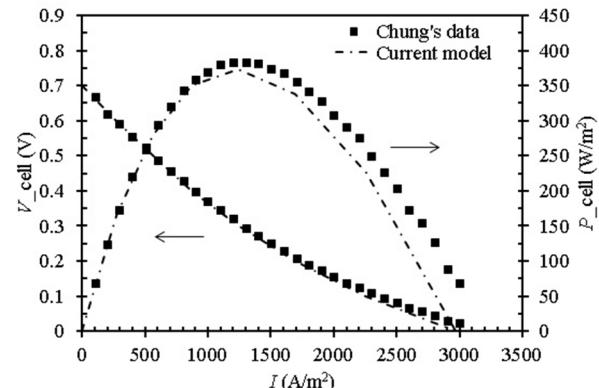


Fig. 2 The current model accuracy compared to Chung's data

شکل 2 دقیقیت مدل حاضر در مقایسه با داده‌های چانگ

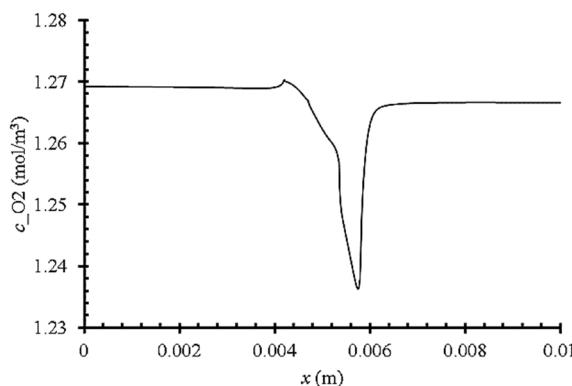


Fig. 6 Oxygen concentration distribution

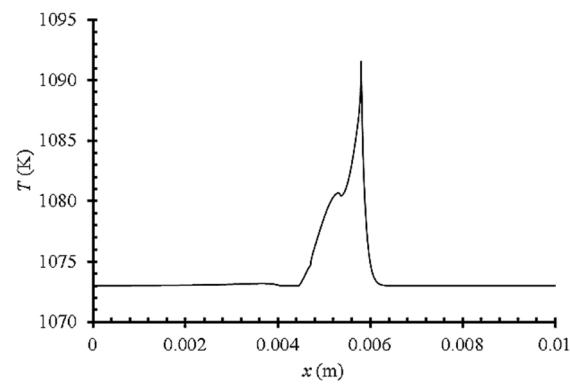


Fig. 4 Temperature distribution

شکل 4 توزیع دما

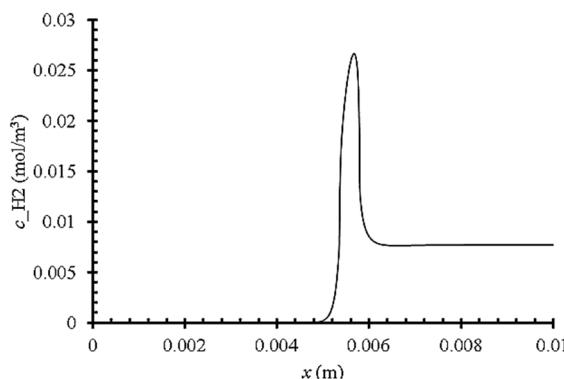


Fig. 7 Hydrogen concentration distribution

شکل 7 توزیع غلظت هیدروژن

می‌شود که تنها بخش اندکی از هیدروژن تولید شده به واسطه واکنش رفرمینگ بخار در واکنش الکتروشیمیایی شرکت کرده و در نهایت غلظت هیدروژن افزایش می‌پابد.

"شکل‌های 6-8" رفتار مشابهی از توزیع غلظت به ترتیب آب، مونوکسید کربن و دی‌اکسید کربن را نشان می‌دهد. آن‌چه مشخص است در هر سه این گونه‌های گازی مانکنیم غلظت در سمت الکترود آند اتفاق می‌افتد که این موضوع بدلیل واکنش‌های اکسایش متان، رفرمینگ بخار، انتقال آب-گاز و اکسایش هیدروژن می‌باشد. نکته دیگر وجود غلظت بیشتری از مونوکسید کربن در مقایسه با دو گونه دیگر می‌باشد تا جایی که غلظت مونوکسید کربن در خروجی از محفظه به مقدار 0.0038 mol/m^3 می‌رسد در حالیکه غلظت آب و دی‌اکسید کربن در خروجی به ترتیب برابر مقدار ناچیز $6 \times 10^{-10} \text{ mol/m}^3$ و $3.49 \times 10^{-16} \text{ mol/m}^3$ است. دلیل این امر تولید مونوکسید کربن از طریق دو واکنش انتقال آب-گاز وجود دارد در حالیکه تولید دی‌اکسید کربن آن در واکنش انتقال آب-گاز وجود دارد در حالیکه تولید دی‌اکسید کربن و آب تنها به ترتیب در واکنش‌های انتقال آب-گاز و اکسایش هیدروژن می‌باشد. بدلیل اثرات مغرب گاز مونوکسید کربن بر روی محیط زیست، وجود گاز دی‌اکسید کربن در خروجی محفظه یکی از ایرادات این پیل می‌باشد که باید با آن مقابله کرد. افزایش غلظت آب تا مقدار $6.14 \times 10^{-5} \text{ mol/m}^3$ نشان‌دهنده این است که نرخ تولید آب به واسطه واکنش الکتروشیمیایی بیشتر از نرخ مصرف آن در واکنش‌های رفرمینگ بخار و انتقال آب-گاز می‌باشد لذا غلظت آب در سمت الکترود آند افزایش می‌پابد.

سمت راست الکترود آند است تلفات اهمی می‌باشد که در پیل اتفاق می‌افتد. مسیر انتقال یون در لبه سمت راست الکترود آند سیار طولانی‌تر بوده و باعث افزایش مقدار گرمایش اهمی در این لبه می‌شود.

"شکل‌های 10-5" توزیع غلظت گونه‌های به ترتیب متان، اکسیژن، هیدروژن، آب، مونوکسید کربن و دی‌اکسید کربن را نشان می‌دهد. مطابق "شکل 5" غلظت متان در سمت الکترود آند با افت شدیدی روبرو می‌شود و این بدلیل مصرف متان به واسطه واکنش‌های اکسایش و رفرمینگ می‌باشد که باعث می‌شود غلظت متان از مقدار 5.077 mol/m^3 تا مقدار 4.97 mol/m^3 کاهش یابد.

مطابق "شکل 6" رفتار مشابه در خصوص توزیع غلظت اکسیژن اتفاق می‌افتد که غلظت اکسیژن از مقدار 1.27 mol/m^3 تا مقدار 1.24 mol/m^3 در سمت الکترود آند افت می‌کند و بخش زیادی از اکسیژن صرف اکسایش متان در سمت الکترود آند می‌شود. اما نکته قابل توجه کاهش بسیار ناچیز غلظت اکسیژن در سمت الکترود کاتد می‌باشد که نشان می‌دهد مقدار مذکور اندکی از اکسیژن در واکنش الکتروشیمیایی در سمت کاتد شرکت می‌کند و این موضوع یکی از دلایل کاهش عملکرد پیل می‌باشد.

نکته قابل تأمل افزایش غلظت هیدروژن در سمت الکترود آند می‌باشد که به وضوح در "شکل 7" نشان داده شده است. تا قبل از آن غلظت هیدروژن صفر می‌باشد و این عدم حضور هیدروژن در سمت الکترود کاتد مزیتی برای بهبود عملکرد پیل می‌باشد و نقش عامل مزاحم را برای اکسیژن نخواهد داشت. افزایش غلظت هیدروژن تا مقدار 0.0266 mol/m^3 این گونه توجیه

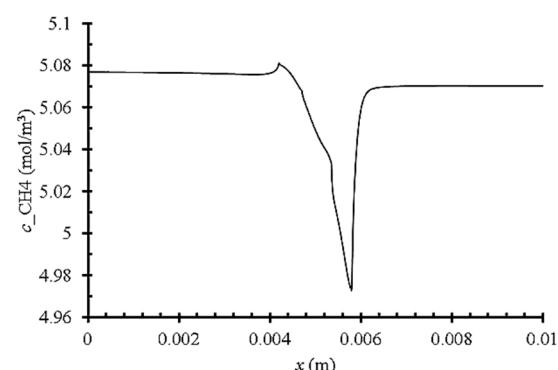


Fig. 5 Methane concentration distribution

شکل 5 توزیع غلظت متان

است. این مسئله مزبته برای این نوع از پیل می‌باشد چرا که امکان پایین آمدن دمای کاری پیل و در نتیجه افزایش طول عمر آن را میسر می‌کند. در پایان توزیع غلظت گونه‌های گازی افزایش جزء گازی هیدروژن را در سمت الکتروود آند نشان داد که بیانگر آن است که تنها بخش اندکی از هیدروژن تولید شده بواسطه واکنش رفمنینگ در واکنش الکتروشیمیایی شرکت می‌کند و مقداری از هیدروژن به صورت از مصرف نشده از محفظه خارج می‌گردد. یک راه عملی برای غلبه بر این مشکل قرار دادن پیل‌های متعدد در مسیر جریان می‌باشد تا با این روش عملکرد پیل بهبود یابد.

6- فهرست عالیم

A	مساحت سطح مؤثر الکتروشیمیایی بر واحد حجم ($\text{m}^2 \text{m}^{-3}$)
B	بردار نیرو (kgms^{-2})
C	غلظت شیمیایی (molm^{-3})
D_{lk}	ضریب نفوذ دوتایی ($\text{m}^2 \text{s}^{-1}$)
C_p	ظرفیت گرمایی ویژه ($\text{Jkg}^{-1} \text{K}^{-1}$)
F	ثابت فارادی (Cmol^{-1})
g	بردار شتاب (ms^{-2})
I	چگالی جریان الکتریکی (Am^{-2})
j	نرخ چشممه یا چاه مربوط به بار (Am^{-3})
j_i	بردار شار جرمی نسبی ($\text{kgm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
k	ضریب رسانش حرارتی ($\text{Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$)
M	جرم مولکولی (kgmol^{-1})
P	فشار ($\text{kgm}^{-1} \text{s}^{-2}$)
P_{cell}	چگالی توان الکتریکی پیل (Wm^{-2})
Q	چشممه حرارتی (Wm^{-3})
r	شعاع روزنه (m)
R	ثابت جهانی گازها ($\text{Jmol}^{-1} \text{K}$)
R_i	نرخ چشممه یا چاه جرمی ($\text{kgm}^{-3} \text{s}^{-1}$)
T	دمای مطلق (K)
u	بردار سرعت (ms^{-1})
V_{cell}	ولتاژ کاری پیل (v)

عالیم بونانی

α	ضریب انتقال بار
γ	مرتبه واکنش
ϵ	ضریب تخلخل
η	اضافه ولتاژ (v)
κ	نفوذپذیری (m^2)
μ	لزجت دینامیکی ($\text{kgm}^{-1} \text{s}^{-1}$)
π	عدد پی
ρ	چگالی (kgm^{-3})
σ	مشخصه طولی (m)
τ	انحناء
ϕ	اختلاف پتانسیل (v)
ω_i	کسر جرمی جزء i ام
Ω	انتگرال برخورد نفوذی

بالانویس‌ها

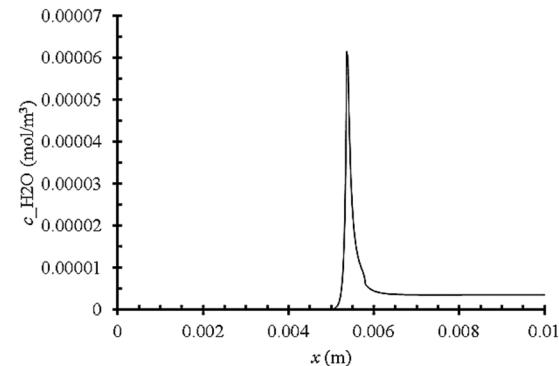


Fig. 8 Water concentration distribution

شکل 8 توزیع غلظت آب

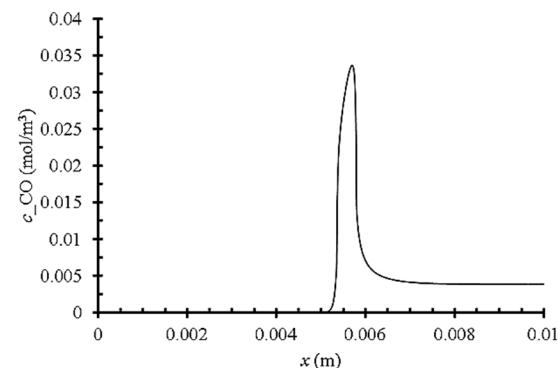


Fig. 9 Carbon monoxide concentration distribution

شکل 9 توزیع غلظت مونوکسید کربن

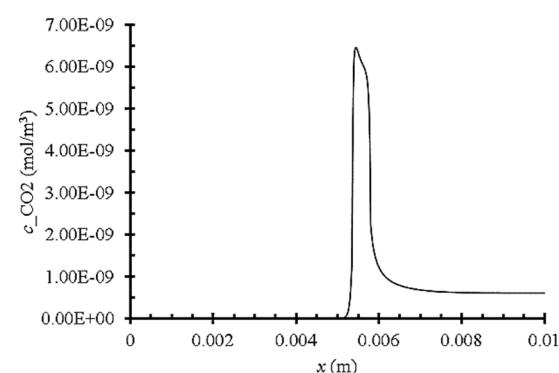


Fig. 10 Carbon dioxide concentration distribution

شکل 10 توزیع غلظت دی اکسید کربن

5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

تحلیل عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای با استفاده از یک مدل دو بعدی عددی بر پایه روش المان محدود انجام شد. نتایج شامل توزیع سرعت، دما و غلظت گونه‌های مختلف گازی در راستای محوری می‌باشد که از میان الکتروودها می‌گذرد. نتایج نشان داد که سرعت سیال در الکترودهای متخلخل به صفر می‌رسد و پس از آن افزایش می‌یابد. یافتن فاصله‌ای از پیل که پس از آن سرعت سیال افزایش می‌یابد در استک کردن پیل حائز اهمیت است. در این مطالعه نشان داده شد که حداقل فاصله مجاز پیل دوم مقدار 8 mm از ورودی محفظه می‌باشد. همینین مشاهده شد که ماکریم دمای پیل در سمت الکتروود آند اتفاق می‌افتد و مقدار آن برابر 1094 K می‌باشد که دلیل آن واکنش اکسایش متان است که یک واکنش گرماده

- Journal of Power Sources*, Vol. 232, No. 1, pp. 42-54, 2013.
- [9] K. Wang, D. Hissel, M.C. Pera, N. Steiner, D. Marra, M. Sorrentino, C. Pianese, M. Monteverde, P. Cardone, J. Saarinen, A Review on solid oxide fuel cell models, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 36, No. 12, pp. 7212-7228, 2011.
- [10] N. Akhtar, *Single-Chamber Solid Oxide Fuel Cells: Modeling and Experiments*, PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of Birmingham, Birmingham, 2010.
- [11] N. Akhtar, S. P. Decent, D. Loghin, K. Kendall, A three dimensional numerical model of a single-chamber solid oxide fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 34, No. 20, pp. 8645-8663, 2009.
- [12] N. Akhtar, S. P. Decent, K. Kendall, A parametric analysis of a micro-tubular, single-chamber solid oxide fuel cell (MT-SC-SOFC), *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 36, No. 1, pp. 765-772, 2011.
- [13] Y. Hao, D. G. Goodwin, Numerical Modeling of Single-Chamber SOFCs with Hydrocarbon Fuels, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 154, No. 2, pp. B207-B217, 2007.
- [14] N. Akhtar, K. Kendall, Micro-tubular, solid oxide fuel cell stack operated under single-chamber conditions, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 36, No. 20, pp. 13083-13088, 2011.
- [15] N. Akhtar, Micro-tubular, single-chamber solid oxide fuel cell (MT-SC-SOFC) stacks: Model development, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 90, No. 6, pp. 814-824, 2012.
- [16] N. Akhtar, Modeling of novel porous inserted micro-tubular, single-chamber solid oxide fuel cells (MT-SC-SOFC), *Chemical Engineering Journal*, Vol. 179, No. 1, pp. 277-284, 2012.
- [17] N. Akhtar, K. Kendall, S. P. Decent, Modeling of co-planar type single-chamber solid oxide fuel cells, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, Vol. 8, No. 4, pp. 410-414, 2011.
- [18] J. H. Cha, Y. CH. Chung, H. R. Kim, J. W. Son, J. H. Lee, H. W. Lee, Computer modeling of single-chamber SOFCs with hydrocarbon fuel, *Journal of Ceramic Processing Research*, Vol. 8, No. 3, pp. 224-228, 2007.
- [19] M. Kamvar, M. Ghassemi, M. Rezaei, Effect of catalyst layer configuration on single chamber solid oxide fuel cell performance, *Journal of Applied Thermal Engineering*, Vol. 100, No. 1, pp. 98-104, 2016.
- [20] M.M. Hussain, X. Li, I. Dincer, Mathematical modeling of planar solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 161, No. 2, pp. 1012-1022, 2006.
- [21] R. Taylor, R. Krishna, *Multicomponent Mass Transfer*, pp. 13-95 first edition, New York: John Willey and Sons, 1993.
- [22] J. Milewski, K. Swirski, M. Santarelli, P. Leone, *Advanced methods of solid oxide fuel cell modeling*, pp. 17-39, First edition, New York: Springer, 2011.
- [23] B. Todd and J.B. Young, Thermodynamic and transport properties of gases for use in solid oxide fuel cell modeling, *Journal of Power Sources*, Vol. 110, No. 1, pp. 186-200, 2002.

eff	موثر
a	الكترود آند
act	فالسازی
c	الكترود كاتد
DGM	مدل گاز-داستی
e	الكترووليت
eff	مؤثر
el	الكتريكي
f	سيال
io	يونی
KN	نادسن
OC	مدار باز
ref	مرجع
s	جامد

7- مراجع

- [1] J. Larminie, A. Dicks, *Fuel Cell Systems Explained*, pp. 1-24, second edition, New York: Wiley, 2003.
- [2] Y. Hao, Z. Shao, J. Mederos, W. Lai, D. G. Goodwin, S. M. Haile, Recent advances in single-chamber fuel cells: Experiment and modeling, *Solid State Ionics*, Vol. 177, No. 19, pp. 2013-2021, 2006.
- [3] Ch. Y. Chung, Y. Ch. Chung, Performance characteristics of micro single-chamber solid oxide fuel cell: Computational analysis, *Journal of Power Sources*, Vol. 154, No. 1, pp. 35-41, 2006.
- [4] S. Ahn, Y. Kim, J. Moon, J. Lee, J. Kim, Influence of patterned electrode geometry on performance of co-planar, single-chamber, solid oxide fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 171, No. 2, pp. 511-516, (2007).
- [5] M. Yano, A. Tomita, M. Sano, T. Hibino, Recent advances in single-chamber solid oxide fuel cells: A review, *Solid State Ionics*, Vol. 177, No. 39, pp. 3351-3359, 2007.
- [6] N. Akhtar, S. P. Decent, D. Loghin, K. Kendall, Mixed-reactant, micro-tubular solid oxide fuel cells: An experimental study, *Journal of Power Sources*, Vol. 193, No. 1, pp. 39-48, 2009.
- [7] M. Liu, X. Qi, Zh. Lu, Q. Meng, Effect of flow geometry on anode-supported single chamber SOFCs arrayed as V-shape, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 38, No. 4, pp. 1976-1982, 2013.
- [8] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén, SOFC modeling considering hydrogen and carbon monoxide as electrochemical reactants,