



مدل سازی و بهینه سازی یک تک پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای

محمد علی فرزاد¹، حسن حسن زاده^{2*}

1- کارشناس ارشد مهندسی مکانیک، شرکت کویرتایر بیرجند، بیرجند

2- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه بیرجند، بیرجند

* بیرجند، صندوق پستی 97175/615، h.hassanzadeh@birjand.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 25 شهریور 1393

پذیرش: 26 آبان 1393

ارائه در سایت: 03 دی 1393

کلید واژگان:

پیل سوختی

اکسید جامد

صفحه ای

مدل سازی

بهینه سازی

چکیده

در این مقاله، یک تک پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای با اصلاح داخلی و جریان همسو مدل سازی و بهینه سازی شده است. این تک پیل سوختی، جزئی از توده یک سیستم پیل سوختی است که جهت تولید همزمان حرارت و کار مورد استفاده قرار می گیرد. معادلات حاکم شامل معادلات بقای جرم، بقای ممتوم، بقای انرژی و روابط الکتروشیمیایی است که توسط نرم افزار جی پرامز (gPROMS Software) حل و به کمک داده های موجود در مقالات اعتبارسنجی شده است. در این مدل سازی، اثر کمیت هایی مانند ضریب مصرف سوخت، میزان هوای اضافی، درصد پیش اصلاح سوخت ورودی و غیره روی ولتاژ و توان خروجی همچنین راندمان های انرژی و آگرژی پیل بررسی شده است. نتایج نشان می دهند که در میان پارامترهای مختلف، درصد پیش اصلاح سوخت، اثر موثرتری بر عملکرد پیل سوختی دارد و با افزایش آن، توان، ولتاژ خروجی و راندمان انرژی افزایش می یابد. نقطه کاری بهینه پیل سوختی با سه تابع هدف توان خروجی، حاصلضرب توان خروجی در راندمان ولتاژ و حاصلضرب توان خروجی در راندمان انرژی تعیین شده است. نتایج همچنین نشان می دهند که نقطه بهینه در چگالی جریانی کمتر از چگالی جریان حداکثر توان است و در این نقطه، توان خروجی و راندمان انرژی با شرط کمترین اتلاف انرژی به ترتیب $1/11 \text{ w/cm}^2$ و 42% و با شرط کمترین اتلاف انرژی به ترتیب برابر $1/46 \text{ w/cm}^2$ و 24% می باشند.

Modeling and optimization of a single planar solid oxide fuel cell

Mohammad Ali Farzad¹, Hassan Hassanzadeh^{2*}

1- Birjand Kavir Tire Company, Birjand Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran

* P.O.B. 615/97175 Birjand, h.hassanzadeh@birjand.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 16 September 2014
Accepted 17 November 2014
Available Online 26 December 2014

Keywords:
Planar
Solid Oxide
Fuel Cell
Modeling
Optimization

ABSTRACT

In this paper, a single solid oxide fuel cell with internal reforming and parallel flow is modeled and optimized. The single fuel cell is a part of a stack of fuel cell system used for cogeneration of heat and work. The governing equations including the conservation equations of mass, momentum, energy and electrochemistry relations are solved by gPROMS software and validated using the data available in literature. The effect of quantities such as the rate of fuel consumption, amount of excess air and the percentage of pre reforming of fuel on the power and the efficiency of the fuel cell were evaluated. The results show that the percentage of the fuel pre reforming on the performance of fuel cell is more effective than other parameters and the power output and energy efficiency increase with it as well. Optimal working point of fuel cell with three objective functions (output power, the product of output voltage in voltage efficiency and output power in energy efficiency) has been obtained. The optimal current density is less than the current density of maximum power output. The optimal power output and energy efficiency taking minimum energy dissipation into account are 1.11 W/cm^2 and 42% respectively and by considering minimum exergy are 1.46 W/cm^2 and 24% , respectively.

1- مقدمه

پیل های سوختی وسایلی الکتروشیمیایی هستند که انرژی شیمیایی سوخت را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل کرده و محدودیت سیکل کارنو را ندارند [1, 2]. در میان پیل های سوختی مختلف، پیل سوختی اکسید جامد بدلیل دمای کار بالا (1000-600 درجه سلسیوس [3]) تنوع منابع سوختی، پایین بودن سطح آلاینده های خروجی NO_x و SO_x ، مقاومت در مقابل سولفور، عدم حساسیت به منواکسید کربن (CO)، عدم نیاز به کاتالیست گران قیمت، پتانسیل بالای تولید همزمان و غیره از اهمیت خاصی در بخش خانگی

و نیروگاهی برخوردار است [4].

پیل های سوختی اکسید جامد معمولاً در دو شکل هندسی صفحه ای و لوله ای ساخته می شوند. نوع لوله ای مزیت هایی نسبت به نوع صفحه ای دارد که می توان به تنش های حرارتی کمتر و آب بندی بهتر آن اشاره کرد، اما در نوع صفحه ای چگالی قدرت بالاتر و هزینه ساخت آن کمتر است. علاوه بر این، انتخاب مسیر جریان سوخت و اکسیدکننده در صفحات توزیع کننده می تواند به سادگی انجام شود. تغییر آرایش جریان در صفحات توزیع کننده (هم جهت، مختلفاً جهت و متقاطع) تأثیر قابل ملاحظه ای روی توزیع دما و توزیع

چگالی جریان در پیل سوختی صفحه ای دارد. با توجه به مزایای فوق، در این تحقیق پیل سوختی نوع صفحه ای انتخاب شده است [5].

هر پیل سوختی اکسید جامد مطابق شکل 1 از دو الکترومد متخلخل ساخته شده که توسط یک الکترولیت جامد، غیر متخلخل و هادی یون اکسید (O^{2-}) از یکدیگر جدا شده اند. مطابق این شکل، اکسیژن ورودی به الکترومد کاند با الکترون های انتقال یافته از الکترومد آند واکنش داده و یون اکسید تشکیل می شود. بعد از آن، یون های اکسید از الکترولیت جامد عبور کرده و در کاتالیست آند با ملوکول های سوخت ترکیب می شود. در نتیجه این واکنش، آب تشکیل شده و الکترون آزاد می شود و بدین ترتیب مدار کامل می شود.

به دلیل پیچیدگی فرآیندهای پیل های سوختی و عدم امکان به دست آوردن اطلاعات تجربی مورد نیاز، مدل سازی امری اجتناب ناپذیر است. مدل سازی می تواند صفر بعدی، یک بعدی و یا مدل پیچیده چند بعدی باشد، ولی اغلب مدل هایی که از آنها برای مدلسازی توده یک سیستم پیل های سوختی استفاده می شوند، مدل هایی ساده هستند تا پیچیدگی محاسباتی و به تبع آن زمان اجرای برنامه کمتر شود. به این دلیل در این تحقیق از مدلی یک بعدی استفاده شده است.

در دهه گذشته مقالات متعددی در زمینه پیل های سوختی اکسید جامد در داخل و خارج از کشور منتشر شده است که هر کدام از آنها جنبه های مختلفی از این پیل ها را مدل کرده اند. پترسن و همکاران [6] مدلی صفر بعدی و پایدار از پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای با جریان هم سو ارائه کرده اند. در این مدل واکنش های داخلی پیل سوختی شامل الکترواکسیداسیون هیدروژن، اصلاح بخاری متان و جابجایی آب- گاز را نیز بررسی کرده اند. در بررسی دو واکنش اصلاح بخاری متان و جابجایی آب- گاز از فرض تعادلی بودن واکنش ها استفاده شده است. آگویار و همکاران [7,8] یک تک پیل سوختی صفحه ای را به صورت یک بعدی در حالت پایدار مدل کرده اند. در این مدل معادلات بقای گونه ها و معادله بقای انرژی حل شده است بدون اینکه اثر تغییر خواص، تغییر فشار و سرعت در طول کانال در نظر شود. همچنین اثر تغییر جهت جریان سوخت و هوا (جریان همسو یا غیر همسو) را بررسی کرده و نشان دادند که در شرایط مشابه، در جریان غیر همسو ولتاژ خروجی، چگالی توان و راندمان بیشتر از جریان همسو است ولی در جریان غیر همسو دمای متوسط پیل بیشتر و گرادیان دما شدیدتر است، که این از نقاط ضعف این نوع چیدمان است. آیورا و همکاران [9] اثر تغییرات محلی خواص ترموفیزیکی با دما، فشار و سرعت را به مدل قبل (آگویار و همکاران) اضافه و اثر آنها را روی رفتار استاتیکی و دینامیکی

مدل بررسی کرده اند. نتایج نشان می دهد که با وجودی که اختلاف دمای محلی بین دو مدل کمتر از 7 کلوین و راندمان کمتر از 1% است، ولی با افزایش چگالی جریان میزان انحراف افزایش می یابد. چدی و مونرو [10] یک مدل یک بعدی پیل سوختی بدون اصلاح داخلی سوخت را برای شبیه سازی در زمان واقعی توسط نرم افزار متلب ارائه کرده اند. به دلیل کاهش حجم محاسبات و اجتناب از حل تکراری، آنها از فرضیات ساده کننده ای زیادی استفاده کرده اند. این مفروضات شامل یکپارچگی حرارتی کانال های سوخت و هوا و صفحات دو قطبی، یکپارچگی آند، کاند و الکترولیت، توزیع یکنواخت جریان در طول پیل و محاسبه اتلافات ولتاژ در دمای متوسط پیل است که نهایتاً نتایج با یک مدل یک بعدی کامل اعتبارسنجی شده است. نتایج این مدلسازی نشان می دهد که با افزایش عرض کانال ها، می توان مقدار قابل ملاحظه ای افت فشار را کاهش و در نتیجه کار پمپ را کم کرد. کانگ و

همکاران [11] یک مدل یک بعدی ساده شده، از پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای، با اصلاح داخلی ارائه کرده اند. ساده سازی های آنها شامل یکپارچگی دمایی در کل عرض پیل سوختی و توزیع یکنواخت چگالی جریان در طول پیل است. این بدین معنی است که تغییرات دما فقط در پیل در نظر گرفته شده است. این مدلسازی توسط نرم افزار متلب انجام شده و رفتار استاتیکی و دینامیکی مدل، با یک مدل یک بعدی و صفر بعدی مقایسه شده است. نتایج این تحقیق نشان می دهد که این مدل از نظر دقت قابل رقابت با مدل یک بعدی بوده و زمان حل آن بسیار کمتر است، لذا این مدل را برای مدلسازی سیستم های پیل سوختی پیشنهاد کرده اند. بر اساس مقالات منتشر شده، از جمله ذبیحیان و فانگ [12]، انواع روش های مدل سازی سیستم های ترکیبی مبتنی بر پیل سوختی اکسید جامد را مقایسه و طبقه بندی کرده اند. از جمله معیارهای طبقه بندی، می توان به روش مدل سازی توده، نوع سیکل ترکیبی مبتنی بر پیل سوختی اکسید جامد، پیکربندی های مختلف سیستم، بررسی پارامتری و اقتصادی، تنوع سوخت و میزان تولید دی اکسید کربن اشاره کرد. در این تحقیق بر کمبود داده های آزمایشگاهی برای اعتبارسنجی مدل های ریاضی تاکید شده و بیان می شود که از میان 39 منبع منتخب، فقط دو منبع اعتبارسنجی شده است. اکمن و همکاران [13] یک پیل سوختی صفحه ای با سوخت متان را با تکیه بر مدل انتقال جرم در ساختار متخلخل پیل، به صورت دو بعدی توسط نرم افزار فلونت مدل سازی کرده اند. رخنال و همکاران [14]، چایسانتیکولوات و همکاران [15]، واکوفستی و همکاران [16] و مارو و همکاران [17] پیل سوختی اکسید جامد را به صورت سه بعدی مدل کرده اند. در ایران هم مقالاتی در زمینه پیل های سوختی اکسید جامد منتشر شده است. قنبری و غفرانی [18] پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای با سوخت هیدروژن را به صورت صفر بعدی مدل کرده اند. از نقاط قوت این تحقیق می توان به مدل کامل الکتروشیمیایی آن اشاره کرد. پیرکندی و همکاران [19] نیز یک سیستم هیبریدی پیل سوختی اکسید جامد لوله ای و میکروتوربین را به صورت صفر بعدی مدل کرده اند. در این مدلسازی واکنش اصلاح سوخت به صورت تعادلی در نظر گرفته شده و روابط باتلر- وولمر ساده سازی شده است. همچنین کاظمی پور و همکاران [20] نیز کار مشابهی را برای یک سیستم هیبریدی پیل سوختی و توربین گاز انجام داده اند. بزرگمهری و همکاران [21] به طور تجربی ریز ساختارهای یک تک پیل سوختی اکسید جامد را مورد بررسی قرار داده و ثابت های تجربی مفیدی را به دست آورده اند. سپس یک مدل صفر بعدی ارائه و آن را با نتایج خود اعتبارسنجی کرده اند. در بین مقالات یک بعدی منتشر شده کامل ترین پژوهش مربوط به کاظم پور و امی [22] است. مدل فوق مدلی یک بعدی است که دارای شباهت ها و تفاوت هایی با کار حاضر است. هندسه، شرایط مرزی، مدل الکتروشیمیایی و مدل تشعشع مشابه و هردو دائمی هستند ولی فرم معادلات بقا، روش محاسبه افت فشار، خواص ترموفیزیکی، روش حل و اعتبارسنجی ها متفاوت است. علاوه بر این در مقاله حاضر بحث مفصل تری در مورد بهینه سازی پیل سوختی با سه تابع هدف انجام شده است، در حالی که در مقاله فوق، فقط در یک مورد، مقدار بهینه ضریب مصرف سوخت ارائه شده و بحث بیشتری در مورد بهینه سازی انجام نشده است. آقای ملایی و همکاران [23] نیز مدلی سه بعدی از پیل سوختی اکسید جامد صفحه ای ارائه کردند که حاوی اطلاعات ارزشمندی در زمینه پیل های سوختی اکسید جامد است منتها استفاده از این مدل های پیچیده جهت مدلسازی یک سیستم تولید همزمان که دارای چندین جزء است حجم محاسبات را بشدت افزایش می دهد.

مطالب موجود در مقالات، مدلی یک بعدی با اصلاح داخلی، در نظر گرفتن تشعشع حرارتی و هندسه واقعی‌تر ارائه شود تا بتوان از آن در مدلسازی سیستم‌های پیل سوختی استفاده کرد. استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی با توابع هدف مختلف، جهت محاسبه نقاط کار بهینه پیل سوختی، از تفاوت‌های این مدلسازی با سایر مدلسازی‌های ذکر شده است.

2- مدلسازی

جزئیات پیل سوختی مدلسازی شده در شکل 2 نشان داده شده است. با توجه به هندسه تکرار شونده توده پیل سوختی، محاسبات روی یک کانال منفرد انجام شده است. دامنه مسئله به چهار زیر بخش، کانال سوخت، کانال هوا، بخش PEN¹ و صفحات دو قطبی تقسیم شده و ابعاد آنها در جدول 1 آورده شده است.

2-1- مفروضات

پیچیدگی معادلات حاکم بر پیل‌های سوختی و وابسته بودن معادلات یکی از مشکلات مدلسازی پیل‌های سوختی محسوب می‌شود. در حال حاضر استفاده از کدی جامع که بتواند همه این معادلات را حل کند، در صورت وجود، بسیار وقت‌گیر بوده و برای هر کاربردی مطلوب نیست. لذا برای کاهش زمان محاسبات و حذف جزئیات غیر ضروری، در این مدلسازی فرضیات زیر در نظر گرفته شده است:

1- پیل سوختی از نوع صفحه‌ای دما متوسط، با تکیه‌گاه آند و جریان هم جهت در نظر گرفته شده است.

2- مدلسازی یک بعدی است یعنی تغییرات کمیت‌های مورد نظر فقط در طول پیل (امتداد کانال) در نظر گرفته شده است.

3- عدد رینولدز در کانال‌ها از مرتبه 100 است [24]، لذا از اثرات طول ورودی صرف‌نظر شده و جریان در کانال‌های سوخت و هوا آرام و توسعه یافته است.

4- چون عدد پکلت در کانال‌ها بیش از 50 است [24، 7]، لذا از انتقال جرم به دلیل نفوذ در طول کانال‌های سوخت و هوا در مقایسه با جابجایی صرف‌نظر شده است.

5- با توجه به اینکه، در پیل سوختی اکسید جامد با اصلاح داخلی سوخت، اختلاف دمای عرضی بین الکترولیت، کاتد و آند کمتر از 1 درجه سلسیوس است [24]، لذا از گرادیان عرضی دما در ساختار جامد پیل (الکتروود آند-الکتروولیت-الکتروود کاتد) صرف‌نظر شده و این سه بخش به عنوان یک مجموعه یکپارچه (PEN) در نظر گرفته شده است [25].

6- از شرط مرزی عایق برای ابتدا و انتهای PEN و صفحات دو قطبی استفاده شده است.

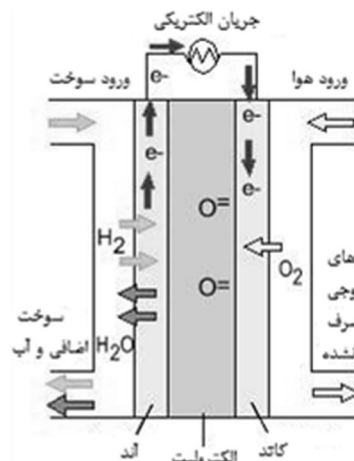
7- با توجه به بالا بودن ضریب هدایت الکتریکی الکتروودها، از تغییرات ولتاژ در طول پیل صرف‌نظر شده است.

8- برای محاسبه تشعشع، فقط به تبادلات تشعشع بین اعضای المان توجه شده و از تبادل تشعشع بین المان‌های مجاور صرف‌نظر شده است [24].

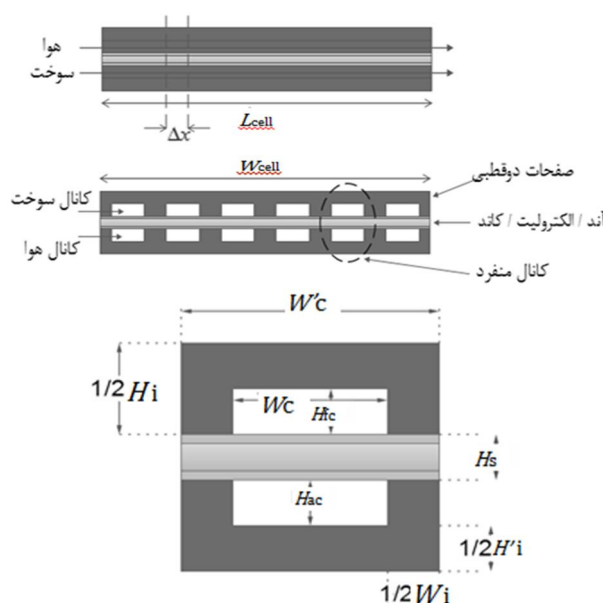
9- معمولاً ضریب صدور گازها کم است لذا گازها بعنوان محیط شفاف در نظر گرفته شده و از تشعشع آنها صرف‌نظر شده است.

10- خواص ترموفیزیکی PEN و صفحات دو قطبی مستقل از دما فرض شده است.

11- گازها از قانون گاز کامل پیروی می‌کنند.



شکل 1 شماتیک پیل سوختی اکسید جامد



شکل 2 شماتیک نمای جانبی، مقطع و المان پایه یک پیل سوختی صفحه‌ای

جدول 1 مشخصات هندسی پیل سوختی [26، 7]

پارامتر	مقدار
طول پیل، L_{cell}	400 میلی‌متر
عرض پیل، W_{cell}	100 میلی‌متر
ارتفاع کانال سوخت، H_{fc}	1 میلی‌متر
ارتفاع کانال هوا، H_{ac}	1 میلی‌متر
عرض کانال‌های سوخت و هوا، W_c	3 میلی‌متر
ضخامت آند، H_{an}	0/5 میلی‌متر
ضخامت کاتد، H_{ca}	0/05 میلی‌متر
ضخامت الکترولیت، H_{el}	0/02 میلی‌متر
ضخامت صفحات دو قطبی، H_i	2/5 میلی‌متر
عرض پایه صفحات دو قطبی، W_i	2/42 میلی‌متر

هر کدام از مقالات بررسی شده دارای معیاری هستند، تعدادی صفر بعدی هستند، تعدادی مدل الکتروشیمی ساده‌ای دارند و در تعدادی کانال‌ها به صورت دو صفحه موازی در نظر گرفته شده است. همچنین در تعدادی از مدل‌ها از انتقال حرارت تشعشع صرف‌نظر شده است و نهایتاً تعدادی از مدل‌ها دو و سه بعدی هستند، که این مدل‌ها برای مدلسازی سیستم‌های پیل سوختی مناسب نمی‌باشند. لذا در این مقاله سعی شده است که با اتکا به

1- Positive Electrode- Electrolyte- Negative Electrode (PEN)

این رابطه بیان می کند که تغییرات زمانی و مکانی سرعت گاز در کانال سوخت به دلیل تغییرات فشار، اصطکاک محوری و اصطکاک در دیواره است. ضریب اصطکاک f_{fc} برای یک جریان توسعه یافته و بدون انتقال جرم فقط تابعی از عدد رینولدز و نسبت طول به عرض کانال است و توسط رابطه ارائه شده در مرجع [5] محاسبه می شود. معادله حاکم بر کانال هوا مشابه با کانال سوخت است.

2-2-3- معادله بقای انرژی

نرخ تولید حرارت در پیل سوختی وابسته به نرخ واکنش های شیمیایی و الکتروشیمیایی است که در آن رخ می دهند. با انتخاب حجم کنترل مناسب در کانال سوخت و نوشتن معادله بقای انرژی برای این المان، رابطه (7) را داریم:

$$\begin{aligned} & \rho_f \frac{\partial (C_{v-f} T_f)}{\partial t} + \rho_f u_f \frac{\partial (C_{v-f} T_f)}{\partial x} \\ & = \dot{\rho} \Delta h / H_{fc} + \frac{Nu_{fc} k_f (T_s - T_f) / H_{fc}}{D_{H-fc}} \\ & + \frac{Nu_{fc} k_f (T_i - T_f) \frac{W_c + 2H_{fc}}{W_c}}{D_{H-fc}} / H_{fc} \\ & - \frac{\partial p_f}{\rho_f} / H_{fc} - p_f \frac{\partial u_f}{\partial x} + \frac{4}{3} \mu_f \left(\frac{\partial u_f}{\partial x} \right)^2 \end{aligned} \quad (7)$$

این رابطه بیان می کند که تغییرات زمانی و مکانی دمای مخلوط ناشی از تولید/جذب حرارت، انتقال حرارت جابجایی، کار نیروی فشاری و اتلافات ناشی از لزجت است. Δh فقط ناشی از واکنش اصلاح (اصلاح بخاری و جابجایی آب-گاز) است. عدد ناسلت Nu_{fc} برای یک جریان توسعه یافته تابعی از عدد رینولدز و ابعاد کانال است که برای شرط مرزی دما ثابت بر اساس رابطه ارائه شده در مرجع [28] محاسبه می شود. معادله بقای انرژی کانال هوا نیز مشابه با کانال سوخت است با این تفاوت که جمله تولید/جذب انرژی در آن وجود ندارد.

الکتروکاتد، الکترولیت و الکتروکاتد به صورت یک بخش واحد (PEN) در نظر گرفته شده است. معادله بقای انرژی به صورت زیر است [5]:

$$\begin{aligned} \rho_s C_s \frac{\partial T_s}{\partial t} & = k_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} - \frac{Nu_{fc} k_f (T_s - T_f) \frac{W_c}{W_c H_s}}{D_{H-fc}} \\ & - \frac{Nu_{ac} k_a (T_s - T_a) \frac{W_c}{W_c H_s}}{D_{H-ac}} \\ & - \frac{2\sigma (T_s^4 - T_i^4) \frac{W_c}{W_c H_s}}{\frac{1}{\epsilon_s} + \frac{(1-\epsilon_l) W_c}{\epsilon_l (W_c + H_l + H_a)}} - P_e^* \frac{W_c'}{W_c H_s} \\ & + \dot{\rho}_f^* (h_{fuel} + h_{air} - h_{products}) \frac{W_c'}{W_c H_s} \end{aligned} \quad (8)$$

این رابطه بیان می کند که، تغییرات زمانی و مکانی دمای PEN ناشی از انتقال حرارت جابجایی و تشعشع، کار الکتریکی و واکنش الکتروشیمیایی است.

صفحات دو قطبی، صفحاتی غیر متخلخل هستند که وظیفه توزیع واکنش دهنده ها و جمع آوری و انتقال محصولات واکنش و الکترون ها را بر عهده دارند. این صفحات در یک توده پیل سوختی، به صورت پشت به پشت قرار گرفته و اتصال الکتریکی بین پیل های مجاور را فراهم می کنند. معادله بقای انرژی برای صفحات دو قطبی نیز مشابه رابطه (8) است، با این تفاوت که فاقد دو جمله آخر، یعنی کار الکتریکی و واکنش الکتروشیمیایی است. برای ارزیابی انتقال حرارت تشعشع، با فرض سطوح خاکستری، از رابطه انتقال حرارت تشعشع در یک محفظه دو سطحی (شکل 3) استفاده شده است.

2-2-4- روابط الکتروشیمیایی

اصلی ترین بخش مدل سازی پیل سوختی، محاسبه ولتاژ خروجی آن است که

12- در آند متان، هیدروژن، بخار آب، مونواکسید کربن و دی اکسید کربن و در کاتد، اکسیژن و نیتروژن حضور دارند.

13- در پیل سوختی، فقط واکنش های اکسیداسیون هیدروژن ($H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$)، اصلاح بخاری متان ($CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO + 3H_2$) و جابجایی آب -گاز ($CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$) در نظر گرفته شده است که واکنش اول در PEN و دو واکنش دیگر در کانال سوخت واقع می شوند.

2-2-2- معادلات حاکم

معادلات حاکم شامل معادلات بقای جرم، بقای مومنتوم، بقای انرژی و روابط الکتروشیمیایی است.

1-2-2-1- قانون بقای جرم

قانون بقای جرم تغییرات مولی جریان را به نرخ واکنش های شیمیایی و الکتروشیمیایی در کانال های سوخت و هوا مرتبط می سازد [5]. طبق رابطه (1) داریم:

$$\frac{\partial C_{i-f}}{\partial t} + \frac{\partial (u_f C_{i-f})}{\partial x} = - \frac{C_{i-f}^*}{H_{fc}} \quad (1)$$

این رابطه بیان می کند که نرخ زمانی و مکانی تغییر غلظت هر گونه ناشی از تولید یا مصرف آن گونه به دلیل واکنش های شیمیایی و الکتروشیمیایی است. C_{i-f}^* نرخ تغییر غلظت گونه i در کانال آند است که ناشی از واکنش های داخلی بر واحد سطح مشترک الکتروکاتد-کانال است که به صورت رابطه (2) بیان می شود:

$$C_{i-f}^* = - \sum_k v_{i,k} R_k \quad (2)$$

که ضرایب استوکیومتریک $v_{i,k}$ برای واکنش گران منفی و برای محصولات مثبت است. روابط حاکم در کانال هوا مشابه کانال سوخت است با این تفاوت که در آن، هیچ واکنشی واقع نمی شود لذا، C_{i-f}^* برابر صفر است.

نرخ واکنش اکسیداسیون هیدروژن توسط قانون فارادی $R_E = j/n_e F$ بیان می شود. رابطه فوق با منظور کردن سطح فعال واکنش به صورت رابطه (3) اصلاح شده است:

$$R_E = \frac{W_c' j}{W_c n_e F} \quad (3)$$

در رابطه (3) کسر W_c'/W_c نشان دهنده نسبت سطح فعال واکنش به سطح مشترک کانال - الکتروکاتد است، بدین معنی که از سطح زیر پایه ها صرف نظر شده است.

بر اساس تئوری سینیتیک گازها، نرخ واکنش اصلاح بخاری توسط یک رابطه مرتبه اول بیان می شود [24,7]. طبق رابطه (4) داریم:

$$R_R = k_0 p_{CH_4} \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_f}\right) \quad (4)$$

نرخ واکنش جابجایی آب - گاز، توسط یک رابطه تعادلی محدود شده از مرتبه اول نسبت به غلظت مونواکسید کربن بیان می شود [27,7]. طبق رابطه (5) داریم:

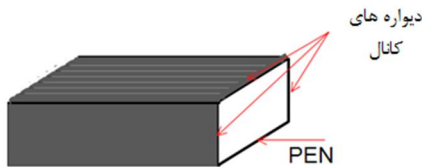
$$R_S = k_0 p_{CO} \left(1 - \frac{p_{CO_2} p_{H_2}}{p_{CO} p_{H_2O} K_{eq}}\right) \quad (5)$$

لازم به ذکر است که واکنش الکتروشیمیایی اکسیداسیون هیدروژن سطحی، ولی واکنش های شیمیایی اصلاح بخاری متان و جابجایی آب-گاز حجمی هستند.

2-2-2-2- معادله بقای اندازه حرکت

قانون بقای اندازه حرکت در کانال سوخت به صورت رابطه (6) است [5]:

$$\begin{aligned} & \rho_f \frac{\partial u_f}{\partial t} + \rho_f u_f \frac{\partial u_f}{\partial x} \\ & = - \frac{\partial p_f}{\partial x} + \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_f \frac{\partial u_f}{\partial x} \right) - 2 f_{fc} \frac{\mu_f u_f}{D_{H-fc}^2} \end{aligned} \quad (6)$$



شکل 3 شماتیک محفظه دو سطحی برای مدل تشعشع کانال

جدول 2 ثابت های روابط الکتروشیمیایی [7]

پارامتر	مقدار
σ_{an}	$80,000 (\Omega^{-1} \cdot m^{-1})$
σ_{ca}	$8,400 (\Omega^{-1} \cdot m^{-1})$
σ_{el}	$1/12 (\Omega^{-1} \cdot m^{-1})$
D_{eff}^{an}	$0/0000366 (m^2/s)$
D_{eff}^{ca}	$0/0000137 (m^2/s)$
β	$0/5$
k_0^{an}	$6/54 \times 10^{11} (\Omega^{-1} \cdot m^{-2})$
k_0^{ca}	$2/35 \times 10^{11} (\Omega^{-1} \cdot m^{-2})$
E_{act}^{an}	$140 (kJ/mol)$
E_{act}^{ca}	$137 (kJ/mol)$

در مدل حاضر، این مشخصه ها عبارتند از: ضریب مصرف سوخت¹، که به صورت کسری از سوخت ورودی تعریف می شود که در پیل سوختی مصرف می شود. مقدار عملی این کمیت در محدوده 0/85-0/9 تغییر می کند. مقادیر بیشتر ضریب مصرف سوخت، می تواند منجر به اکسید شدن محلی نیکل در آند شود [25]. مقدار هوای اضافی²، به صورت نسبت هوای ورودی به هوای مصرفی (ضریب استوکیومتریکی) تعریف شده و مقدار آن در محدوده 3-10 تغییر می کند [24]. توان تولیدی، که نشان دهنده کل توان الکتریکی مفید پیل سوختی است. راندمان ولتاژ که به صورت نسبت ولتاژ تولیدی مفید به حداکثر ولتاژ پیل سوختی (ولتاژ مدار باز) تعریف می شود. این راندمان مشابه راندمان قانون دوم ترمودینامیک است که برای موتورهای حرارتی تعریف می شود، لذا حداکثر مقدار آن برابر با واحد است. راندمان انرژی یا راندمان قانون اول ترمودینامیک که به صورت نسبت توان خروجی پیل سوختی به توان (سوخت) ورودی آن تعریف می شود. با توجه به دمای کاری بالای پیل سوختی اکسید جامد، توان ورودی بر اساس ارزش حرارتی پایین سوخت محاسبه می شود.

2-2-7- روش حل معادلات و اعتبارسنجی

دستگاه معادلات ارائه شده از نظر ریاضی معین است؛ ولی علاوه بر شرایط مرزی و پارامترهای ذکر شده، لازم است شرایط کاری پیل سوختی نیز معین باشد تا بتوان این دستگاه معادلات را حل کرد. این پارامترها عبارتند از: 1- دبی مولی جریان سوخت ورودی، 2- دبی مولی جریان هوا یا میزان هوای اضافی و 3- ولتاژ خروجی یا توزیع چگالی جریان الکتریکی و یا متوسط چگالی جریان است که بایستی معلوم باشد.

معادلات ریاضی ارائه شده جهت مدل سازی سیستم توسط نرم افزار جی پرآم مدل ساز³ در حالت پایدار حل شده است. در این نرم افزار، معادلات نوشته شده به یک دستگاه معادلات جبری - دیفرانسیلی جزئی تبدیل شده و سپس به کمک حل کننده های عددی پیشرفته حل می شود. این نرم افزار از الگوریتم فاکتورگیری LU برای حل معادلات جبری خطی، از الگوریتم های سه قطری سازی مثلث و نیوتن برای حل معادلات جبری غیرخطی، از

معمولاً در محدوده 0.6-0.7 V تغییر می کند. در این محدوده، تعادلی بین راندمان پیل، چگالی توان، هزینه اولیه و شرایط کارکرد پایدار وجود داشته و علاوه بر این از اکسید شدن آند در ولتاژهای کم جلوگیری می شود [7]. با کم کردن افت پتانسیل های پیل سوختی از پتانسیل برگشت پذیر، پتانسیل خروجی محاسبه می شود. طبق رابطه (9) داریم:

$$V(i) = E_N - \eta(i) = E_N - \eta_{ohm}(i) - \eta_{conc}^{ca}(i) - \eta_{conc}^{an}(i) - \eta_{act}^{an}(i) - \eta_{act}^{ca}(i) \quad (9)$$

که E_N ولتاژ مدار باز پیل بوده و از رابطه (10) محاسبه می شود.

$$E_N = \frac{-\Delta G}{n_e F} - \frac{R_u T_s}{n_e F} \ln \left(\frac{p_{H_2O}^{fc}}{p_{H_2}^{fc} p_{O_2}^{ac1/2}} \right) \quad (10)$$

که ΔG تغییر انرژی آزاد گیبس واکنش کلی در دمای کارکرد پیل است.

افت مقاومتی نیز با صرف نظر کردن از مقاومت های تماسی محاسبه می شود. طبق رابطه (11) داریم:

$$\eta_{ohm} = \left(\frac{H_{an}}{\sigma_{an}} + \frac{H_{el}}{\sigma_{el}} + \frac{H_{ca}}{\sigma_{ca}} \right) j \quad (11)$$

افت های غلظتی در الکترودها به صورت روابط (12-15) محاسبه می شوند:

$$\eta_{cons}^{an} = -\frac{R_u T_s}{n_e F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_s^{an}} \right) + \frac{R_u T_s}{n_e F} \ln \left(1 + \frac{p_{H_2}^{fc} j}{p_{H_2O}^{fc} j_s^{an}} \right) \quad (12)$$

$$j_s^{an} = \frac{n_e F p_{H_2}^{fc} D_{eff}^{an}}{R_u T_s H_{an}} \quad (13)$$

$$\eta_{cons}^{ca} = -\frac{R_u T_s}{2n_e F} \ln \left(1 - \frac{j}{j_s^{ca}} \right) \quad (14)$$

$$j_s^{ca} = \frac{2n_e F p_{O_2}^{ac} D_{eff}^{ca}}{R_u T_s H_{ca}} \cdot \frac{p^{ac}}{p^{ac} - p_{O_2}^{ac}} \quad (15)$$

افت های فعال سازی با در نظر گرفتن تغییر غلظت روی ناحیه سه فاز (جایی که فاز جامد کاتالیست با فاز گازی واکنش دهنده و الکترون ها در تماس اند) توسط معادله باتلر - لمر، محاسبه می شود [7]. طبق روابط (16-18) داریم:

$$j = j_0^{an} \times \left\{ \left(1 - \frac{j}{j_s^{an}} \right) \exp \left[\frac{\beta n_e F \eta_{act}^{an}}{R_u T_s} \right] - \left(1 + \frac{p_{H_2}^{fc} j}{p_{H_2O}^{fc} j_s^{an}} \right) \exp \left[-\frac{(1-\beta)n_e F \eta_{act}^{an}}{R_u T_s} \right] \right\} \quad (16)$$

$$j = j_0^{ca} \times \left\{ \left(1 - \frac{j}{j_s^{ca}} \right) \exp \left[\frac{\beta n_e F \eta_{act}^{ca}}{R_u T_s} \right] - \exp \left[-\frac{(1-\beta)n_e F \eta_{act}^{ca}}{R_u T_s} \right] \right\} \quad (17)$$

$$j_0^{electrode} = \frac{R_u T_s}{n_e F} k_0^{electrode} \exp \left(\frac{-E_{act}^{electrode}}{R_u T_s} \right) \quad (18)$$

ثابت های روابط فوق در جدول 2 آورده شده است. این ثابت ها در دمای متوسط پیل سوختی محاسبه شده اند.

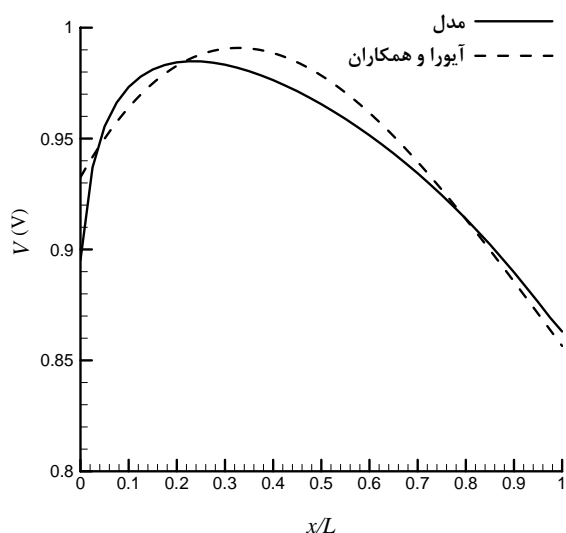
2-2-5- سیستم معادلات و شرایط مرزی

معادلات نوشته شده 13 معادله است که با احتساب رابطه گاز کامل برای کانال های سوخت و هوا، با تعداد مجهولات (15) تا برابر می شوند. معادلات بقای گونه ها، معادلات بقای اندازه حرکت و معادلات بقای انرژی در کانال های سوخت و هوا همگی از مرتبه اول هستند. این معادلات فقط نیازمند یک شرط مرزی هستند که به کمک غلظت گونه ها، فشار و دمای مخلوط سوخت و هوا در ورود، محاسبه می شوند. در مقابل، معادلات بقای انرژی در PEN و صفحات دو قطبی از مرتبه دوم هستند، که با فرض آدیاباتیک بودن میدان در ابتدا و انتهای دامنه، حل می شوند.

2-2-6- مشخصه های کارایی

مشخصه های کارایی کمیت هایی هستند که جهت بررسی خصوصیات کارکردی سیستم های پیل سوختی تعریف می شوند.

1- fuel utilization factor
2- excess air
3- gProms model build 3.4.0



شکل 6 توزیع ولتاژ مدار باز و مقایسه آن با مقادیر آیورا و همکاران [9]

جدول 3 پارامترهای ورودی مدل [7, 9]

مقدار	پارامتر
75	ضریب مصرف سوخت، U_f (%)
8/5	میزان هوای اضافی، λ_a
1023	دمای سوخت ورودی، T_f^0 (K)
1023	دمای هوای ورودی، T_a^0 (K)
1	فشار سوخت ورودی، P_{f0}^0 (bar)
1	فشار هوای ورودی، P_{a0}^0 (bar)
5000	چگالی جریان متوسط، \bar{j} (A/m ²)
28/1 متان	
12 هیدروژن	درصد مولی اجزای سوخت ورودی (%)
56/7 بخار آب	(با فرض 10% اصلاح سوخت در نسبت هوا به کربن برابر 2)
0/5 مونواکسید کربن	
2/7 دی اکسید کربن	
21 اکسیژن	
79 نیتروژن	درصد مولی اجزای هوای ورودی (%)

علت انتخاب دما جهت مقایسه این است که اثر آن بر دیگر کمیت‌ها چشمگیر است. همان‌طور که مشاهده می‌شود این نتایج از دقت خوبی برخوردار بوده و حداکثر خطا حدود 2% است. در این شرایط همچنین ولتاژ خروجی، چگالی توان و راندمان انرژی با نتایج این مرجع مقایسه شده است. مقادیر این کمیت‌ها به ترتیب برابر 0.0677 V، 0.338 W/cm² و 47/8% هستند که مقدار آنها نسبت به مقادیر ارائه‌شده توسط آیورا و همکاران [9] کمتر از 2% اختلاف دارد.

3- نتایج

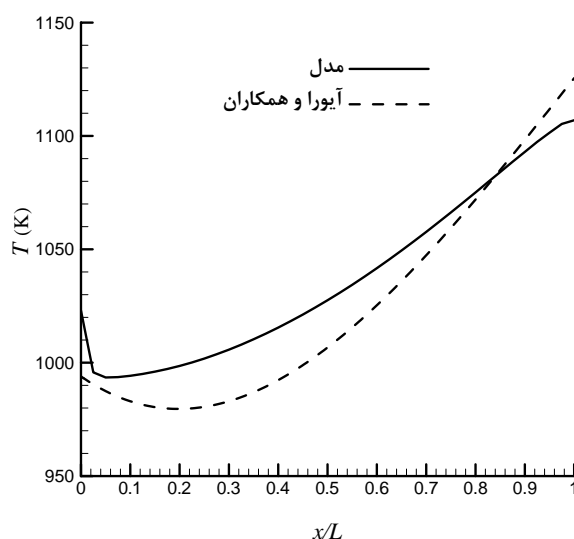
نتایجی که در ادامه ارائه می‌شود در شرایط مرجع (جدول 3) به دست آورده شده است. ابتدا نتایج مدل در دو حالت خواص ترموفیزیکی وابسته به دما و مستقل از دما (یا ثابت) بررسی شد. در حالت اول (وابسته به دما) مقدار هر کمیت در هر نقطه، با توجه به دمای آن نقطه محاسبه شد. در حالت دوم خواص ثابت در نظر گرفته شده و مقدار کمیت‌ها در دمای گازهای ورودی به پیل سوختی محاسبه شده‌اند. نتایج نشان دادند که فرض ثابت بودن کمیت‌های ترموفیزیکی تأثیر ناچیزی روی پارامترهای کاری پیل سوختی دارد، لذا اثر دما بر این کمیت‌های ترموفیزیکی صرف‌نظر شد.

الگوریتم‌های رانگ - کوتا و تفاضل محدود برای معادلات جبری-دیفرانسیلی و از الگوریتم‌های تیراندازی ساده و چند گانه برای حل مسائل بهینه‌سازی استفاده می‌کند [29-31].

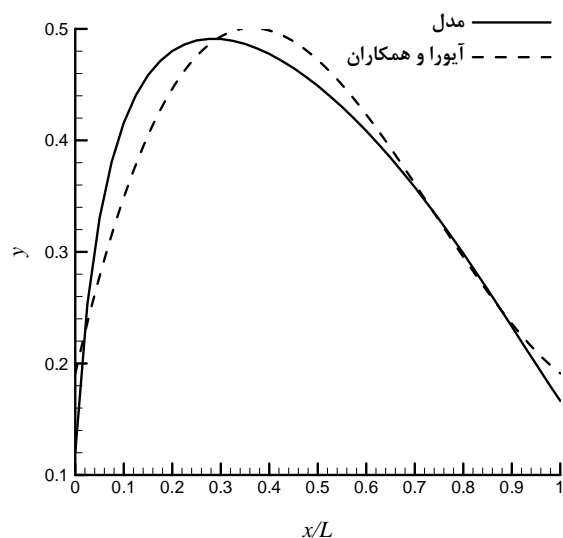
معمولاً با افزایش تعداد نقاط شبکه حل عددی دقیق‌تر می‌شود ولی حجم محاسبات نیز به شدت افزایش می‌یابد، بنابراین پیدا کردن شبکه بهینه در موازنه بین دقت محاسبات و هزینه محاسبات ضروری است. مدل حاضر با استفاده از پارامترهای ورودی مندرج در جدول 3 شبیه‌سازی و وابستگی حل به شبکه مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به اینکه در این مدل انتظار گرادیان شدید کمیت‌ها در دامنه حل وجود ندارد، لذا با بررسی‌های انجام‌شده، از یک شبکه یکنواخت با 40 المان استفاده شده است.

کلیه ثابت‌ها در این مدل از مدل آگویار و همکاران [7] استخراج شده است و اعتبارسنجی این مدل به کمک نتایج آیورا و همکاران [9] صورت گرفته است.

در شکل 4، 5 و 6 در طول کانال به ترتیب منحنی تغییرات دمای سوخت، منحنی تغییرات کسر مولی هیدروژن و منحنی تغییرات ولتاژ مدار باز پیل سوختی با نتایج آیورا و همکاران [9] مقایسه شده‌اند.



شکل 4 توزیع دما در کانال سوخت و مقایسه آن با مقادیر آیورا و همکاران [9]

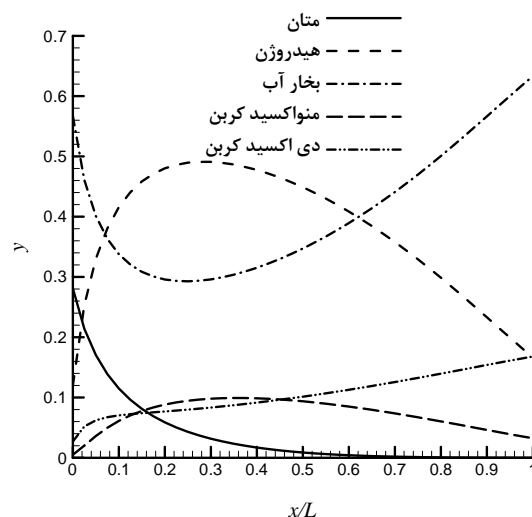


شکل 5 توزیع کسر مولی هیدروژن در کانال سوخت و مقایسه آن با مقادیر آیورا و همکاران [9]

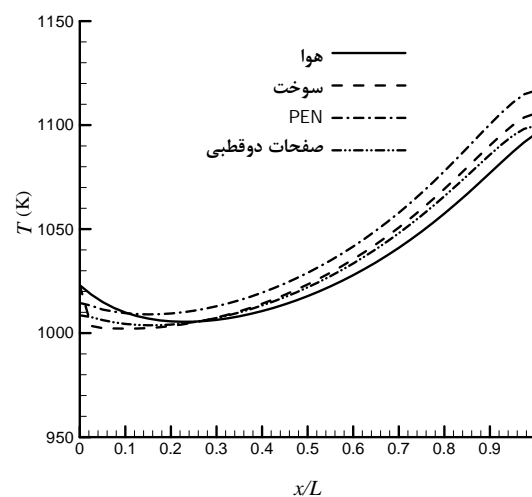
ورودی می گردد. بعد از مصرف بخش قابل ملاحظه ای از متان ورودی، در 20% اولیه طول کانال، غلظت هیدروژن به شدت افزایش یافته و سرعت این واکنش کاهش می یابد در نتیجه واکنش اکسیداسیون، واکنش غالب می گردد. در نتیجه این واکنش، غلظت هیدروژن به تدریج کاهش و غلظت بخار آب افزایش می یابد. به دلیل واکنش اصلاح سوخت، غلظت مونواکسید کربن و سرعت واکنش جابجایی آب- گاز افزایش یافته در نتیجه غلظت دی اکسید کربن به تدریج افزایش می یابد.

در شکل 8 منحنی توزیع دما در طول کانال نشان داده شده است. در ابتدای پیل به دلیل بالا بودن غلظت متان، واکنش اصلاح غالب است، بنابراین دمای پیل کاهش می یابد ولی با کاهش غلظت متان و افزایش غلظت هیدروژن، واکنش اکسیداسیون غالب شده و به تدریج دمای آن افزایش می یابد. بنابراین حداکثر دما در خروجی پیل مشاهده می شود. واکنش اصلاح سوخت نیز که به شدت گرماگیر است، در ورودی پیل باعث کاهش دما می شود. دما به چگالی جریان متوسط پیل سوختی وابسته است لذا در چگالی جریان کم، گرمای کافی وجود ندارد و ممکن است دمای خروجی از دمای ورودی کمتر شود. همچنین این شکل از همبستگی بالایی میان دمای اجزای مختلف پیل حکایت می کند، به طوری که برای ساده تر شدن مدل می توان فقط به بررسی یک ناحیه دمایی پرداخت. با بررسی توزیع گرادیان دما در طول کانال سوخت مشخص است که واکنش اصلاح سوخت منجر به گرادیان شدید دما در ورودی پیل می شود که این می تواند باعث آسیب رسیدن به پیل سوختی شود، لذا باید از حد معینی پایین تر نگه داشته شود. همچنین افزایش دما باعث ایجاد گرادیان شدید دما در خروجی پیل می شود. برای کاهش مقدار گرادیان دما ناشی از واکنش اصلاح سوخت، می توان از چگالی جریان بالاتر و مقدار اصلاح مقدماتی سوخت بیشتر استفاده کرد. به دلیل ساختار سرامیکی PEN، حفظ گرادیان دما در حد پایین آن (به علت جلوگیری از تنش های حرارتی ناخواسته) مهمتر از گرادیان دما در صفحات دو قطبی است. در شکل 9 منحنی های توزیع ولتاژ مدار باز و چگالی جریان در طول پیل ترسیم شده است. ولتاژ مدار باز در هر نقطه توسط معادله نرنست و بر اساس غلظت گونه های واکنش دهنده در آن مقطع محاسبه می شود، بنابراین تغییرات آن مشابه تغییرات غلظت هیدروژن و بخار آب و دمای پیل بوده و شباهت این منحنی به منحنی غلظت هیدروژن به سادگی مشهود است. چگالی جریان نیز تابعی از ولتاژ مدار باز و دمای پیل است. با افزایش دما در طول پیل، مقدار افت ها کاهش یافته و چگالی جریان افزایش می یابد. در نهایت نیز با کاهش ولتاژ مدار باز، چگالی جریان کاهش می یابد.

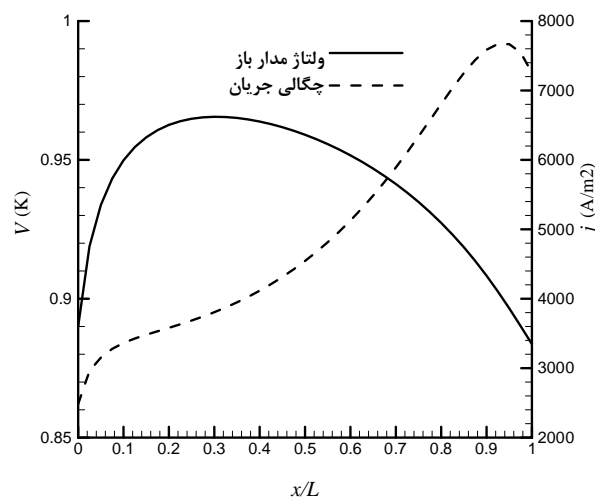
در شکل 10 منحنی های توزیع افت ولتاژهای مختلف نشان داده شده است. همان طور که ملاحظه می شود بیشترین مقدار تلفات ابتدا مربوط به افت فعال سازی در کاتد، سپس افت فعال سازی در آند و نهایتاً افت اهمی است. اگر چه افت غلظتی در الکترود آند بیشتر از افت غلظتی در الکترود کاتد است؛ ولی در کل این دو سهم اندکی از افت های پیل را تشکیل می دهند. افت فعال سازی و افت اهمی بیشتر وابسته به دما هستند، به طوری که با افزایش دما مقدار این افت ها کاهش می یابند. افت های غلظتی، بیشتر از دما به غلظت گونه ها وابسته هستند، بنابراین با کاهش میزان غلظت واکنش دهنده ها و افزایش غلظت محصولات در طول کانال های پیل سوختی، افزایش می یابند. در شکل های 11 و 12 توزیع فشار و سرعت به ترتیب در کانال های سوخت و هوا نشان داده شده است. همان طور که انتظار می رفت، فشار در کانال های سوخت و هوا به دلیل افت اصطکاکی کاهش می یابد. مقدار افت فشار در کانال هوا بیشتر از کانال سوخت است، زیرا دبی هوا نسبت به دبی سوخت، بیشتر است.



شکل 7 توزیع کسر مولی گونه ها در طول کانال سوخت



شکل 8 منحنی توزیع دما در طول پیل



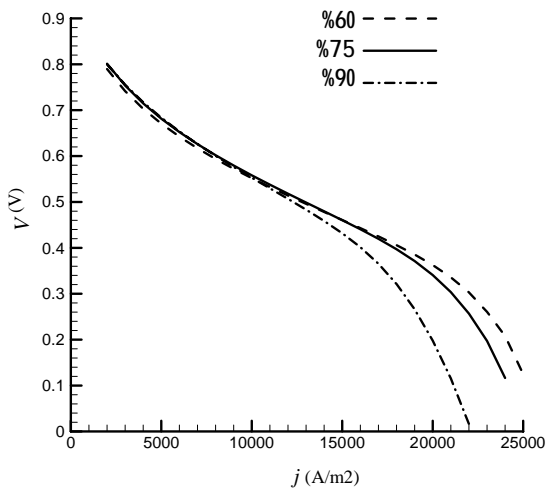
شکل 9 توزیع ولتاژ مدار باز و چگالی جریان در طول پیل

در شکل 7 توزیع غلظت مولی گونه ها در طول کانال سوخت ترسیم شده است. این شکل نتیجه واکنش های همزمان اصلاح سوخت و اکسیداسیون هیدروژن در پیل سوختی را نشان می دهد. به دلیل بالا بودن غلظت متان در ورودی پیل، سرعت واکنش اصلاح سوخت (متان) زیاد است لذا باعث کاهش شدید غلظت متان و بخار آب و افزایش شدید غلظت هیدروژن در ناحیه

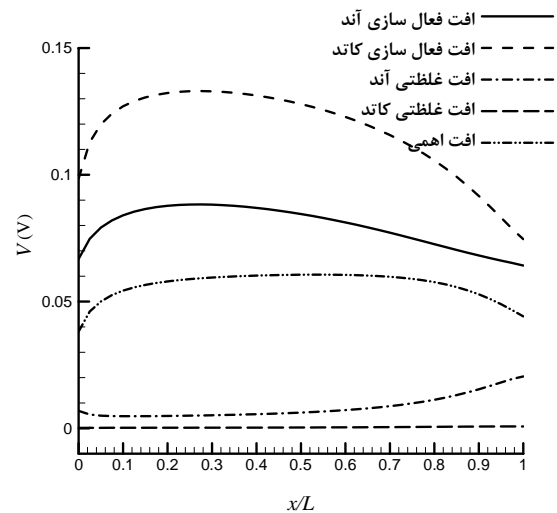
کمیت در جهت مخالف یکدیگر هستند، بدین معنی که انتقال یون های اکسیژن از الکترولیت منجر به کاهش دبی جریان می شود. بنابراین در ابتدای پیل، با کاهش دما، این اثر تقویت شده و موجب کاهش سرعت می گردد، ولی در بقیه طول کانال، با افزایش دما، مقدار سرعت مخلوط افزایش می یابد. در این قسمت اثر پارامترهای مختلف، بر عملکرد پیل سوختی مورد بررسی قرار می گیرد. در هر قسمت، یکی از پارامترها متغیر بوده و بقیه پارامترها در شرایط مرجع ثابت نگه داشته می شوند.

در شکل های 13 و 14 اثر تغییر ضریب مصرف سوخت روی ولتاژ و توان خروجی پیل نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می شود با افزایش چگالی جریان، تلفات افزایش یافته و ولتاژ خروجی پیل سوختی کاهش می یابد. توان خروجی نیز به سبب بالا بودن ولتاژ خروجی، ابتدا افزایش یافته و با کاهش بیشتر ولتاژ خروجی، کاهش می یابد. منحنی توان دارای یک نقطه ماکزیمم است که با توجه به دیگر پارامترهای کاری پیل، باید تلاش کرد که کارکرد پیل در نزدیکی این نقطه واقع شود. با افزایش ضریب مصرف سوخت، چگالی جریان حدی پیل کاهش می یابد و نقطه حداکثر توان به سمت چگالی جریان های کمتر متمایل می شود. با افزایش ضریب سوخت غلظت واکنش دهنده ها در پیل کاهش یافته و توان و ولتاژ خروجی آن کاهش می یابد. همچنین اثر پخ شدگی منحنی ولتاژ در جریان های بالا ناشی از افت غلظتی است. در چگالی های جریان کمتر از نقطه حداکثر توان، تغییر ضریب مصرف سوخت تأثیر قابل ملاحظه ای روی منحنی عملکرد پیل ندارد، چرا که غلظت واکنش گران بالاست، در مقابل، در چگالی های جریان های بیشتر از نقطه حداکثر توان، با کاهش شدید غلظت واکنش گران (در انتهای کانال های سوخت و هوا) این تفاوت به وضوح دیده می شود.

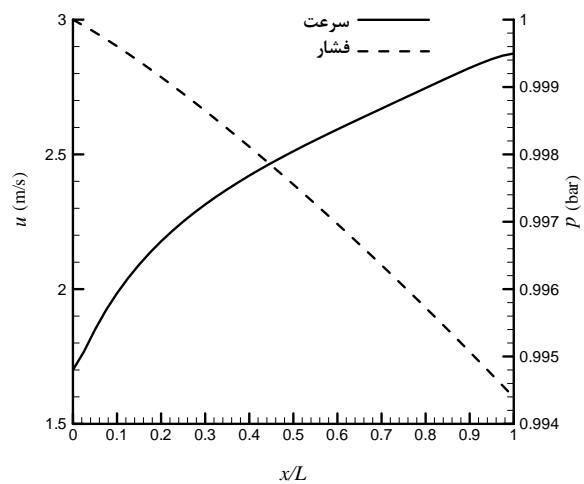
در شکل 15 منحنی های تغییرات حداکثر گرادیان دما در PEN برحسب چگالی جریان به ازای ضرایب مصرف سوخت مختلف نشان داده شده است. با افزایش چگالی جریان، مقدار حرارت تولید شده در واکنش اکسیداسیون هیدروژن افزایش می یابد، لذا در چگالی جریان کم که واکنش اصلاح سوخت واکنش غالب است، این افزایش منجر به ثابت ماندن گرادیان دما می شود. ولی در چگالی توان بالاتر، این واکنش مجدداً واکنش غالب شده و منجر به افزایش دما و همچنین افزایش گرادیان دما می شود. در شکل 16، منحنی تغییرات راندمان انرژی برحسب چگالی جریان به ازای ضرایب مصرف سوخت مختلف ترسیم شده است. راندمان ولتاژ و راندمان انرژی با افزایش چگالی جریان، کاهش می یابند.



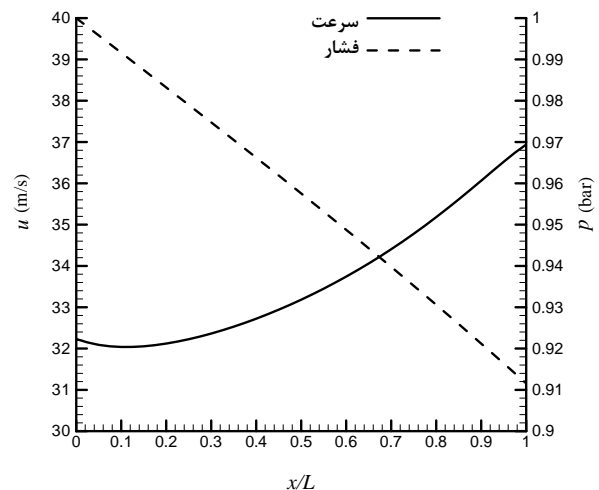
شکل 13 اثر تغییر ضریب مصرف سوخت بر ولتاژ خروجی



شکل 10 منحنی توزیع افت های مختلف در طول پیل



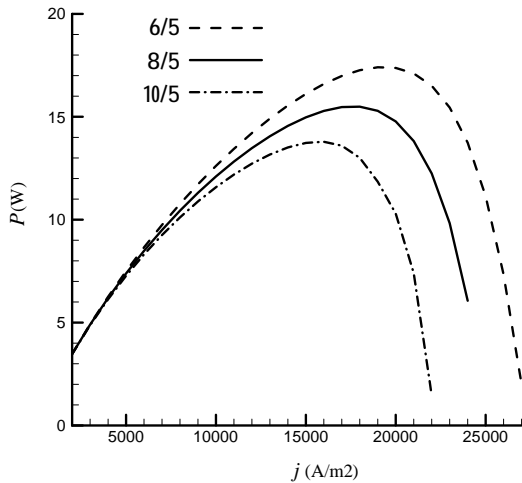
شکل 11 منحنی های توزیع سرعت و فشار در کانال سوخت



شکل 12 منحنی های توزیع سرعت و فشار در طول کانال هوا

3-1- تحلیل پارامتری

سرعت در طول کانال سوخت روند افزایشی دارد؛ زیرا سرعت به دما و دبی جریان وابسته است. در کانال سوخت، به دلیل نفوذ یون های اکسیژن از الکترولیت، دبی مخلوط افزایش می یابد، که این افزایش با افزایش دما هم-جهت بوده و منجر به افزایش سرعت می شود. در عوض، در کانال هوا این دو



شکل 17 اثر تغییر میزان هوای اضافی بر توان خروجی پیل

در شکل 17 اثر هوای اضافی روی توان خروجی پیل سوختی نشان داده شده است. هوای اضافی و ضریب مصرف سوخت اثر مشابهی روی توان خروجی دارند. کاهش هوای اضافی منجر به بالا رفتن دمای پیل می‌شود، که این خود منجر به بالا رفتن توان و ولتاژ خروجی و راندمان انرژی پیل سوختی می‌شود. نکته منفی کاهش هوای ورودی افزایش گرادیان دما در پیل سوختی است.

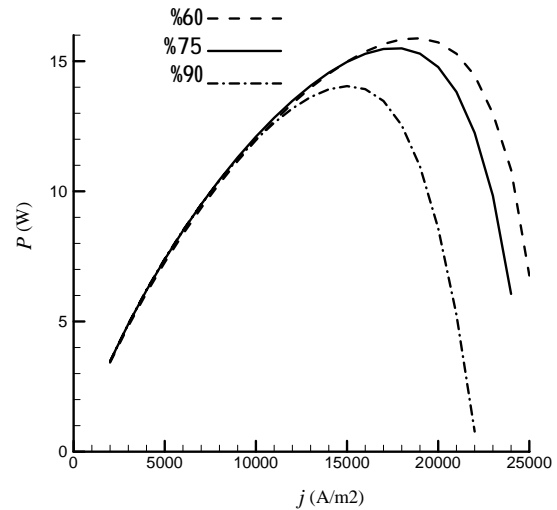
3-2- تعیین نقطه کاری بهینه پیل سوختی

همان‌طور که در قسمت قبل مشاهده شد، پارامترهای مختلف، اثرات متفاوتی بر کارایی پیل سوختی دارند، بنابراین پیدا کردن نقطه کاری بهینه پیل سوختی دارای اهمیت قابل ملاحظه‌ای است. هدف این بخش پیدا کردن نقطه کاری پیل سوختی جهت بهینه‌سازی توده پیل سوختی و به تبع آن مدلسازی یک سیستم تولید همزمان است. جهت مشخص شدن بهترین نقطه کاری، سه تابع هدف یعنی توان خروجی ($MAX(P_{el}^{fuel cell})$)، حاصل‌ضرب راندمان انرژی در توان خروجی ($MAX(\epsilon_E^{fuel cell} P_{el}^{fuel cell})$) و حاصل‌ضرب راندمان ولتاژ در توان خروجی ($MAX(\epsilon_V^{fuel cell} P_{el}^{fuel cell})$) انتخاب شده‌اند. تابع هدف اول بیانگر کارکرد پیل سوختی در حداکثر توان، تابع هدف دوم بیانگر نقطه کاری با کمترین اتلاف انرژی و تابع هدف سوم بیانگر نقطه کار با کمترین اتلاف انرژی می‌باشند. کنترل‌ها و قیدها نیز به ترتیب مطابق جداول 4 و 5 اعمال شده‌اند. این کنترل‌ها جنبه عمومی دارند و بازه مورد بررسی آنها بر اساس مقادیر ذکر شده در منابع مختلف ذکر شده است. در مقابل، قیدها اهمیت خاصی برای کارکرد و دوام پیل سوختی دارند.

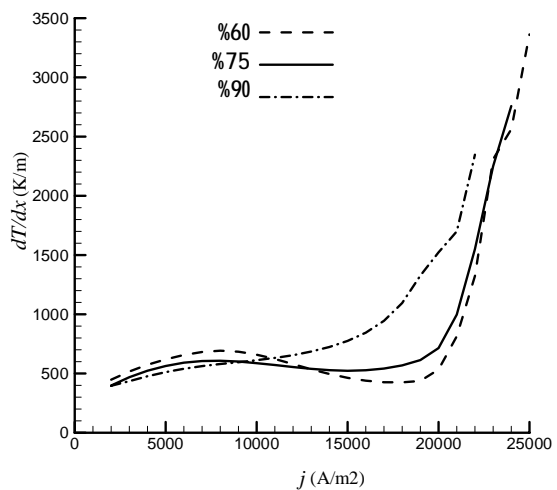
نتایج این بخش در جداول 6 و 7 نشان داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت، دمای ورودی مخلوط سوخت و هوا و میزان اصلاح مقدماتی سوخت به مقادیر بالای دامنه مجاز و مقدار هوای اضافی و نسبت بخار به کربن در سوخت به مقادیر پایین دامنه تمایل دارند. نتایج این بخش نشان می‌دهند که نقطه حداکثر توان پیل سوختی منطبق بر نقاط بهینه پیل سوختی از نظر انرژی و انرژی تلفات نیست زیرا در نقطه حداکثر توان، که معمولاً در چگالی جریان‌های بالا واقع می‌شود، فقط حداکثر شدن توان مورد نظر است و بهینه بودن تلفات مد نظر نیست. در نتیجه چگالی جریان حداکثر توان (تلفات زیادتر) بیشتر از چگالی جریان‌های بهینه پیل سوختی است.

4- نتیجه‌گیری

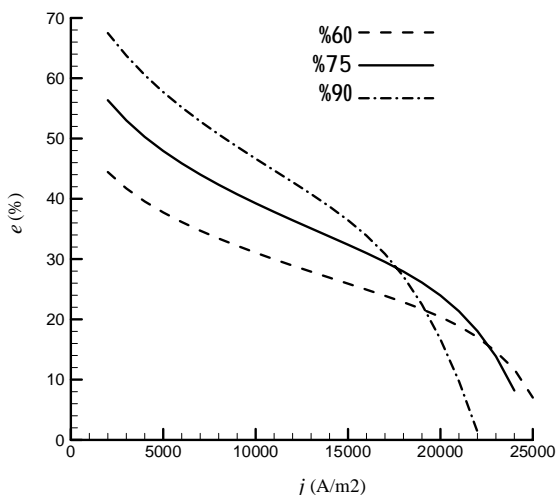
در این مقاله یک تک پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای با جریان همسو و اصلاح داخلی سوخت مدلسازی شده است.



شکل 14 اثر تغییر ضریب مصرف سوخت بر توان خروجی



شکل 15 اثر تغییر ضریب مصرف سوخت بر حداکثر گرادیان دما در PEN



شکل 16 اثر تغییر ضریب مصرف سوخت بر راندمان انرژی

کاهش راندمان ولتاژ، که شبیه راندمان قانون دوم ترمودینامیک است، نشانگر افزایش اتلاف انرژی (به دلیل بازگشت ناپذیری) در پیل سوختی است. با افزایش ضریب مصرف سوخت هر دو راندمان (به دلیل بالا رفتن دمای متوسط پیل) افزایش می‌یابند، اگرچه این تغییر تأثیر کمتری بر راندمان ولتاژ دارد.

همه بیشتر است، سپس افت اهمی و نهایتاً افت های غلظتی در آند و کاتد که سهم اندکی از افت های پیل را تشکیل می دهند. اثر پارامترهای مختلفی چون چگالی جریان، ضریب مصرف سوخت، میزان هوای اضافی، دمای ورودی سوخت و هوا و درصد پیش اصلاح سوخت بر کارکرد پیل سوختی بررسی شد. نتایج نشان می دهد که در میان پارامترهای مختلف، افزایش درصد پیش اصلاح سوخت اثر بهتری روی عملکرد پیل سوختی دارد و منجر به افزایش توان، افزایش ولتاژ خروجی و افزایش راندمان انرژی می شود. در نهایت نیز نقاط کاری پیل سوختی با تکیه بر حداکثر توان و حداقل اتلاف به دست آورده شد.

5- فهرست علائم

C	غلظت مولی (mol/m^3), ظرفیت گرمایی ($\text{J}/\text{mol}\cdot\text{K}$)
C_v	ظرفیت گرمایی حجم ثابت ($\text{J}/\text{mol}\cdot\text{K}$)
D_H	قطر هیدرولیک (m)
D_{eff}	ضریب موثر پخش (m^2/s)
E_a	انرژی فعال سازی واکنش (متغیر)
E_N	ولتاژ ترمودینامیکی (V)
F	ثابت فارادی ($96,485 \text{ C}/\text{mol}$)
H	ضخامت (m)
K_{eq}	ثابت تعادل واکنش
L	طول (m)
LHV	ارزش حرارتی پایین (J/mol)
N	دبی مولی (mol/s)
Nu	عدد ناسلت
P_e	توان الکتریکی (W)
R	سرعت واکنش ($\text{mol}/\text{s}\cdot\text{m}^2$)
R_u	ثابت جهانی گاز ($8.314 \text{ J}/\text{mol}\cdot\text{K}$)
T	دما (K)
U_f	ضریب مصرف سوخت
V	ولتاژ (V)
W	عرض (m)
f	ضریب اصطکاک فانیگ
h	آنتالپی (J/mol)
j	چگالی جریان (A/m^2)
j_0	چگالی جریان مبادله (A/m^2)
j_s	چگالی جریان حدی (A/m^2)
k	ضریب هدایت حرارتی ($\text{W}/\text{m}^2\cdot\text{K}$)
k_0	ضریب واکنش (متغیر)
n_e	تعداد الکترون های مبادله شده در واکنش اکسیداسیون
p	یک مول هیدروژن ($2 \text{ l}/\text{mol}$)
p	فشار (bar)
t	زمان (s)
u	سرعت متوسط (m/s)
x	جهت دیفرانسیل گیری (m)
y	کسر مولی
$4G$	تغییر انرژی آزاد گیبس (J/mol)

علائم یونانی

$4G$ تغییر انرژی آزاد گیبس (J/mol)

جدول 4 کنترل ها جهت پیدا کردن نقطه کاری

کنترل	بازه مورد نظر
چگالی جریان متوسط، $\bar{j}(\text{A}/\text{m}^2)$	2000-35000
دمای ورودی مخلوط سوخت، $T_f^0(\text{K})$	823-1073
دمای ورودی مخلوط هوا، $T_a^0(\text{K})$	823-1073
ضریب مصرف سوخت، $U_f(\%)$	50-90
میزان هوای اضافی، λ_a	2-14
میزان اصلاح مقدماتی سوخت، $X_{\text{Pre-Reforming}}(\%)$	5-30
نسبت بخار به کربن در اصلاح مقدماتی، $SC_{\text{Pre-Reforming}}$	2-10

جدول 5 قیدها جهت پیدا کردن نقطه کاری

قید	شرط
ولتاژ خروجی [9]، V (V)	کمتر از 0/5
حداکثر گرادیان دما در PEN [9]، $\left. \frac{dT_{PEN}}{dx} \right _{max}$ (K/m)	کمتر از 1000

جدول 6 کنترل های کاری پیل سوختی در نقاط بهینه

نقطه کاری	نقطه کاری با		نقطه کاری
	کمترین اتلاف	با کمترین انرژی	
چگالی جریان متوسط (A/m^2)	27,026	19,592	30,204
دمای ورودی مخلوط سوخت (K)	1073	1073	1073
دمای ورودی مخلوط هوا (K)	1073	1073	1073
ضریب مصرف سوخت (%)	50	82/53	50
میزان هوای اضافی	2/66	4/33	2/60
میزان اصلاح مقدماتی (%)	30	30	30
نسبت بخار به کربن در اصلاح مقدماتی	2	2	2

جدول 7 پارامترهای کاری پیل سوختی در نقاط بهینه

نقطه کاری	نقطه کاری با		نقطه کاری
	کمترین اتلاف انرژی	با کمترین اتلاف انرژی	
ولتاژ خروجی پیل (V)	0/57	0/57	0/50
توان خروجی (W)	31/58	24/08	32/69
راندمان انرژی (%)	32/95	41/58	22/18
راندمان ولتاژ (%)	59/08	63/51	54/94
حداکثر گرادیان دما (K/m)	1000	1000	990

از مدل فوق جهت مدلسازی توده یک سیستم پیل سوختی استفاده می شود. ابتدا معادلات حاکم شامل معادلات بقای جرم، مومنوم و انرژی در کانال ها و معادله بقای انرژی برای بخش PEN و صفحات دوقطبی استخراج شد. سپس یک مدل الکتروشیمیایی نسبتاً کامل، با در نظر گرفتن کلیه افت ها، جهت بررسی رفتار پیل سوختی انتخاب و به معادلات قبلی اضافه گردید. در استخراج روابط کلیه وابستگی معادلات به یکدیگر در نظر گرفته شده است. سپس معادلات با استفاده از نرم افزار جی پرآمز حل و با داده های موجود در مراجع اعتبارسنجی شد. با استفاده از پارامترهای ورودی مشخص، مدل سازی انجام شده و توزیع کمیت های مختلف در طول پیل به دست آورده شدند. نتایج نشان می دهند که بعد از اینکه مقدار قابل ملاحظه ای از متان ورودی در 20% اول طول کانال سوخت مصرف شود، غلظت هیدروژن به شدت افزایش یافته و سرعت این واکنش کاهش می یابد. منحنی توزیع دما در طول پیل نشان می دهد که به دلیل واکنش اصلاح بخاری، در ابتدا دما کاهش یافته و سپس (بس از غلبه واکنش اکسیداسیون) دما افزایش می یابد. مقایسه افت ولتاژهای مختلف نشان می دهد که افت فعال سازی در کاتد و آند به ترتیب از

[6] T. F. Petersen, N. Houbak, B. Elmegaard, A ZeroDimensional Model of a 2nd Generation Planar SOFC Using Calibrated Parameters, <i>International Journal of Thermodynamics</i> , Vol. 9, pp. 147-159, 2006.	Δh	آنتالپی واکنش (J/mol)
[7] P. Aguiar, C. S. Adjiman, N. P. Brandon, Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model-based steady-state performance, <i>Journal of Power Sources</i> , Vol. 138, pp. 120-136, 2004.	β	ضریب انتقال بار
[8] P. Aguiar, C. S. Adjiman, N. P. Brandon, Anode-supported intermediate-temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell II. Model-based dynamic performance and control, <i>Journal of Power Sources</i> , Vol. 147, pp. 136-147, 2005.	ϵ_E	راندمان انرژی
[9] P. Iora, P. Aguiar, C. S. Adjiman, N. P. Brandon, Comparison two IT DIR-SOFC models: Impact of variable thermodynamic, physical, and flow properties. Steady-state and dynamic analysis, <i>Chemical Engineering Science</i> , Vol. 60, pp. 2963-2975, 2005.	ϵ_V	راندمان ولتاژ
[10] D. F. Cheddle, N. D. H. Munroe, A dynamic 1D model of a solid oxide fuel cell for real time simulation, <i>Journal of Power Sources</i> , Vol. 171, pp. 634-643, 2007.	ϵ	ضریب گسیل
[11] Y.-W. Kang, J. Li, G.-Y. Cao, H.-Y. Tu, J. Li, J. Yang, A reduced 1D dynamic model of a planar direct internal reforming solid oxide fuel cell for system research, <i>Journal of Power Sources</i> , Vol. 188, pp. 170-176, 2009.	μ	لزجت دینامیک (kg.m/s)
[12] F. Zabihian, A. Fung, A Review on Modeling of Hybrid Solid Oxide Fuel Cell Systems, <i>International Journal of Engineering</i> , Vol. 3, No. 2, 2010.	η	افت ولتاژ (V)
[13] T. Ackmann, L. G. J. d. Haart, W. Lehnert, D. Stolten, Modeling of Mass and Heat Transport in Planar Substrate Type SOFCs, <i>Journal of The Electrochemical Society</i> , Vol. 150, pp. A783-A789, 2003.	ρ	چگالی (kg/m ³)
[14] K. P. Recknagle, S. T. Yokuda, D. T. Jarboe, M. A. Khaleel, <i>Analysis of Percent On-Cell Reformation of Methane in SOFC Stacks: Thermal, Electrical, and Stress Analysis</i> , U.S. Department of Energy, pp. 2006.	σ	ضریب هدایت الکتریکی (m/Ω)
[15] A. Chaisantikulwat, C. Diaz-Goano, E. S. Meadows, Dynamic modelling and control of planar anode-supported solid oxide fuel cell, <i>Computers and Chemical Engineering</i> , Vol. 32, pp. 2365-2381, 2008.	σ	ثابت استفان - بولتزمن (5.67 × 10 ⁻⁸ W/m ² .K ⁴)
[16] E. Vakouftsi, G. Marnellos, C. Athanasiou, F. A. Coutelieris, <i>A detailed model for transport processes in a methane fed planar SOFC</i> , The Institution of Chemical Engineers, 2010.	ν	ضریب استوکیومتری
[17] A. Mauro, F. Arpino, N. Massarotti, P. Nithiarasu, A novel single domain approach for numerical modeling solid oxide fuel cells, <i>International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow</i> , Vol. 20, pp. 587-612, 2010.	زیر نویس و بالانویس	
[18] P. Ghanbari Baversad, M.B. Ghofrani, Modeling and Operation Assessment of a solid oxide fuel cell, <i>21th International Power Systems Conference</i> , pp. 2011-2013, 2006.	.	نرخ تغییر زمانی
[19] J. Pirkandi, M. Ghasemi and M.H. Hamed, Thermodynamic performance analysis of a solid oxide fuel cell and micro gas turbine hybrid cycle in a CHP system, <i>Fuel and Combustion</i> , Vol 2, pp. 67-89, 2011. (In Persian)	'	کمیت مشابه
[20] H. Kazmi Poor, A.A. Alem Rajabi and O. Nemat Allahi, Energy and exergy analysis of a gas turbine and sold oxide fuel cell hybrid system, <i>4th Iranian fuel cell seminar</i> , 2010. (In Persian)	"	بر واحد سطح
[21] S.H. Bozorgmehr, M. Hamed, H. Mohebi, A. Ghobadzade and H. Aslannejad, Operation and micro structure assesment of single cell of solid oxide fuel cell, <i>Energy</i> , Vol 2, pp. 21-36, 2011. (In Persian)	0	شرایط ورودی
[22] P. kazem poor and F.A. Ommi, Modeling of a plannar solid oxide fuel cell for combined heat and power systems, <i>Fuel and Combustion</i> , Vol 1, pp. 25-40, 2009. (In Persian)	E	واکنش الکترواکسیداسیون هیدروژن
[23] Y. Molayi, A. Raofi and H. Kanani, Three dimensional simulation of mass and energy transfer in the planer solide oxide fuel cell with counter flow, <i>25th international power system conference</i> , Tehran, 2010. (In Persian)	R	واکنش اصلاح بخاری متان
[24] R. J. Braun, <i>Optimal Design and Operation of Solid Oxide Fuel Cell Systems for Small-scale Stationary Applications</i> , Ph.D. Thesis, University of Wisconsin, Mdison, 2002.	S	واکنش جابجایی آب - گاز
[25] S. C. Singhal, K. Kendall, <i>High Temperatures Solid Oxide Fuel Cells "Fundamentals, Design and Application"</i> : Elsevier, 2003.	a	هوا
[26] G. Bossel, <i>Final report on SOFC Data "FACTS & FIGURES"</i> , Swiss Federal Office of Energy, Operating Agent Task II, pp. 1992.	ac	کانال هوا
[27] Y.-W. Kang, J. Li, G.-Y. Cao, H.-Y. Tu, J. Li, J. Yang, A reduced 1D dynamic model of a planar direct internal reforming solid oxide fuel cell for system research, <i>Journal of Power Sources</i> , Vol. 188, pp. 170-176, 2009.	act	فعال‌سازی
[28] R. K. Shah, A. L. London, <i>Laminar Convective Heat Transfer in Ducts</i> , 1978.	an	آند
[29] gPROMS Model Developer Guide, Process Systems Enterprise, 2011.	c	کانال
[30] gPROMS ModelBuilder Guide, Process Systems Enterprise, 2011.	ca	کاتد
[31] gPROMS Optimisation Guide, Process Systems Enterprise, 2011.	conc	غلظتی
	f	سوخت
	fc	کانال سوخت
	i	شمارنده گونه شیمیایی، بخش صفحات دوقطبی
	k	شمارنده واکنش
	ohm	مقاومتی
	s	بخش PEN

6- قدردانی

این پژوهش با حمایت مالی کمیته راهبردی پیل سوختی سازمان انرژی‌های نو انجام شده است که بدین وسیله قدردانی می‌شود.

7- مراجع

- [1] H. Hasanzadeh, S. H. Mansouri, Efficiency of ideal fuel cell and carnot cycle from a fundamental prospective, *Journal of Power and Energy*, Vol. 219, No. A, pp. 245-254, 2005.
- [2] Wark K., Jr., *Advanced thermodynamics for engineers*. New York: McGraw-Hill, 1995.
- [3] R. P. O'Hayre, S. Cha, W. G. Colella, F. B. Prinz, *Fuel Cell Fundamentals*, New York, 2009.
- [4] Tae Seok Lee a, J.N. Chung a, Yen-Cho Chen, Design and optimization of a combined fuel reforming and solid oxide fuel cell system with anode off-gas recycling, *Energy Conversion and Management* 52, pp. 3214-3226, 2011.
- [5] M. A. Farzad, *Modeling of a Combined Heat and Power Generation System based on Solid Oxide Fuel Cell and Photovoltaic in Residential Applications in Eastern Regions of Iran*, MS Thesis, University of Birjand, Birjand, 2011. (In Persian)