ISSN: 2476-6909; Modares. Mech. Eng. *;*(*):*-*

Modares Mechanical Engineering

DOI:
journal homepage: mme.modares.ac.ir

Three-Dimensional Multiphysics Modeling and Analysis of Mass Transport and Electrochemical Reactions in a Solid Oxide Electrolysis Cell with Realistic Geometry

Ghasem Arab[1*]

[1] Department of Mechanical Engineering, Yadegar-e-Imam Khomeini (RAH) Shahre Rey Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

ARTICLEINFO

Article Type
Original Research

Article History
Received: **** **, *
Revised: **** **, *
Accepted: *** **, *
ePublished: **** **, *

ABSTRACT

A three-dimensional multiphysics model was developed to investigate the coupled transport and electrochemical behavior of a solid oxide electrolysis cell (SOEC) with a 45 cm² active area and a realistic geometry based on an experimentally established cell configuration. The model simultaneously accounts for ionic and electronic charge transport, Butler–Volmer electrochemical kinetics, multicomponent gas transport using the Maxwell–Stefan formulation, and gas flow through free and porous regions using the Brinkman approach. The main contribution of this study lies in combining full-area three-dimensional modeling of a realistic 45 cm² cell, coupled multicomponent transport on both electrode sides, and independent consistency checks of current, species, and total-mass conservation with Faraday-law consistency. The results show that increasing current density intensifies steam consumption and hydrogen production on the fuel-electrode side while increasing oxygen enrichment on the oxygen-electrode side. The three-dimensional fields reveal pronounced spatial non-uniformities in gas velocity, species distribution, and electrochemical reaction rate across the active area. At 0.9 A cm^{-2}, the predicted cell voltage agreed with the reference value within about 4%, while current, species, and total-mass balances showed deviations below 0.5%. Agreement between outlet compositions and Faraday-law predictions further confirms the physical consistency of the model.

Keywords: Solid oxide electrolysis cell (SOEC), Three-dimensional multiphysics modeling, Mass transport, Electrochemical reactions, Hydrogen production.

How to cite this article
G. Arab, Three-Dimensional Multiphysics Modeling and Analysis of Mass Transport and Electrochemical Reactions in a Solid Oxide Electrolysis Cell with Realistic Geometry. Modares Mechanical Engineering; *(*): ****-****.

*Corresponding author's email: gh.arab@iau.ac.ir
*Corresponding ORCID ID: 0000-0002-1058-9854.

Copyright© 2026, TMU Press. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

Pre-Proof Version

شاپا: ۲۴۷۶-۶۹۰۹، مهندسی مکانیک مدرس. *؛*(*):*_*

مهندسی مکانیک مدرس

DOI:

صفحه اصلی مجله: mme.modares.ac.ir

مدل‌سازی سه‌بعدی چندفیزیکی و تحلیل انتقال جرم و واکنش‌های الکتروشیمیایی در یک سلول الکترولیز اکسید جامد با هندسه واقعی

قاسم عرب [۱*]

[۱] گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، تهران، ایران

اطلاعات مقاله

نوع مقاله
مقاله پژوهشی

تاریخچه مقاله
دریافت: **/**/****
بازنگری: **/**/****
پذیرش: **/**/****
ارائه آنلاین: **/**/****

چکیده

در این پژوهش یک مدل سه‌بعدی چندفیزیکی برای تحلیل عملکرد یک سلول الکترولیز اکسید جامد با سطح فعال ۴۵ سانتی‌متر مربع و هندسه مبتنی بر یک پلتفرم واقعی توسعه داده شد. مدل، انتقال بار یونی و الکترونی، سینتیک باتلر–ولمر، انتقال جرم چندجزئی ماکسول–استفان و جریان در کانال‌ها و الکترودهای متخلخل را به‌صورت کوپل‌شده در بر می‌گیرد. وجه تمایز این پژوهش، مدل‌سازی سه‌بعدی تمام‌سطح یک سلول با هندسه واقعی، تحلیل همزمان انتقال چندجزئی در دو سمت الکترود و بررسی سازگاری نتایج از طریق موازنه مستقل جریان، گونه‌ها، جرم کل و قانون فارادی است. نتایج نشان داد افزایش چگالی جریان با مصرف بیشتر بخار، تولید بیشتر هیدروژن و غنی‌شدن اکسیژن در سمت مقابل همراه است و همزمان ناهمگنی فضایی سرعت، ترکیب گاز و نرخ واکنش در سطح فعال تشدید می‌شود. میدان‌های سه‌بعدی نشان دادند رفتار موضعی سلول را نمی‌توان تنها از منحنی پلاریزاسیون استنباط کرد. در نقطه مرجع $0.9\ A\ cm^{-2}$، ولتاژ مدل با داده تجربی حدود 4% اختلاف داشت و موازنه‌های جریان، جرم و گونه‌ها نیز با خطای کمتر از 0.5% بسته شدند. سازگاری ترکیب خروجی با قانون فارادی، قابلیت اتکای چارچوب عددی را برای تحلیل فیزیکی رفتار سه‌بعدی SOEC تایید کرد.

کلیدواژه‌ها: سلول الکترولیز اکسید جامد (SOEC)، مدل‌سازی سه‌بعدی، انتقال جرم، تولید هیدروژن.

نحوه ارجاع به این مقاله

قاسم عرب، مدل‌سازی سه‌بعدی چندفیزیکی و تحلیل انتقال جرم و واکنش‌های الکتروشیمیایی در یک سلول الکترولیز اکسید جامد با هندسه واقعی، مهندسی مکانیک مدرس. * (*): ****-****.

*پست الکترونیکی نویسنده عهده‌دار مکاتبات: gh.arab@iau.ac.ir

*شناسه ارکید نویسنده عهده‌دار مکاتبات: 0000-0002-1058-9854

Copyright© 2026, TMU Press. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

Press, Proof of Version

۱- مقدمه

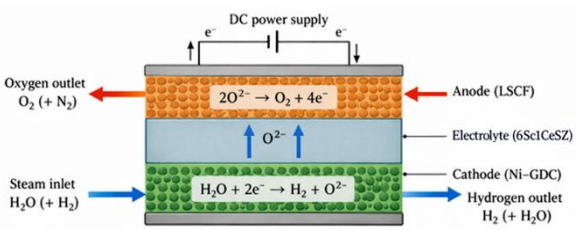
افزایش سهم منابع تجدیدپذیر در سبد انرژی کشورها، نیاز به فناوری‌هایی را برجسته کرده است که بتوانند انرژی الکتریکی را به یک حامل شیمیایی قابل ذخیره، انتقال و مصرف در بخش‌های مختلف تبدیل کنند. هیدروژن در این چارچوب به دلیل کاربرد در صنایع فرایندی، تولید سوخت‌های سنتزی، ذخیره‌سازی بلندمدت انرژی و امکان استفاده در سامانه‌های برق و حرارت، جایگاه ویژه‌ای یافته است. الکترولیز آب یکی از مسیرهای اصلی تولید هیدروژن کم‌کربن است؛ به‌ویژه زمانی که برق مورد نیاز آن از منابع تجدیدپذیر تأمین شود. ماهیت این فرایند بر تأمین انرژی لازم برای شکافت آب و جداسازی الکتروشیمیایی هیدروژن و اکسیژن استوار است و از این رو توسعه الکترولایزرهای کارآمد، بادوام و مقیاس‌پذیر یکی از محورهای مهم پژوهش در زنجیره هیدروژن به شمار می‌رود [۱-۳].

فناوری‌های الکترولیز آب عمدتاً در چهار گروه الکترولیز قلیایی (AWE)، الکترولیز غشای تبادل پروتون (PEMWE)، الکترولیز غشای تبادل آنیون (AEMWE) و الکترولیز اکسید جامد (SOEC) طبقه‌بندی می‌شوند. AWE از بالغ‌ترین و اقتصادی‌ترین گزینه‌ها برای ظرفیت‌های بزرگ است، در حالی که PEMWE به دلیل چگالی جریان بالا و پاسخ دینامیکی سریع، برای کوپل‌شدن با منابع تجدیدپذیر متناوب مزیت دارد، هرچند وابستگی به مواد گران‌قیمت و محیط اسیدی هزینه آن را افزایش می‌دهد. AEMWE با هدف ترکیب مزایای محیط قلیایی و معماری غشایی در حال توسعه است. در مقابل، SOEC با استفاده از الکترولیت سرامیکی رسانای یون اکسیژن در دمای بالا کار می‌کند و از نظر تقسیم نیاز انرژی میان برق و گرما، مسیر متفاوتی برای الکترولیز آب فراهم می‌سازد [۱-۵].

در SOEC، بخشی از انرژی لازم برای تجزیه بخار آب از طریق گرمای دمای بالا تأمین می‌شود؛ در نتیجه سهم انرژی الکتریکی نسبت به بسیاری از فناوری‌های دما پایین کاهش می‌یابد. این ویژگی، همراه با سینتیک سریع‌تر الکترودی، امکان استفاده از گرمای اتلافی صنعتی، قابلیت کارکرد برگشت‌پذیر و امکان هم‌الکترولیز H_2O/CO_2، SOEC را به گزینه‌ای جذاب برای تولید هیدروژن و گاز سنتز تبدیل کرده است. در مقابل، دمای کاری بالا موجب افزایش حساسیت سامانه به تنش حرارتی، آب‌بندی، سازگاری شیمیایی لایه‌ها، تخریب ریزساختار و دوام بلندمدت می‌شود. بنابراین مزیت ترمودینامیکی این فناوری با پیچیدگی قابل توجه در طراحی مواد، کنترل شرایط عملیاتی و توزیع یکنواخت جریان و واکنش همراه است [۱-۶].

همزمانی بازده بالقوه بالا و پیچیدگی فیزیکی، دلیل اصلی تداوم پژوهش در حوزه SOEC است. مطالعات جدید بر توسعه مواد مقاوم‌تر، بهبود الکترودها و فصل‌مشترک‌ها، کاهش نرخ تخریب، طراحی میدان جریان، مدل‌سازی چندفیزیکی و چندمقیاسی، مدیریت ناهمگنی‌های جریان و دما، مقیاس‌افزایی از سلول به استک و استفاده از روش‌های داده‌محور برای پیش‌بینی و طراحی متمرکز شده‌اند [۶-۱۴ و ۲۶-۲۹]. از منظر مدل‌سازی، پدیده‌های الکتروشیمیایی، انتقال بار، انتقال جرم چندجزئی و جریان در کانال‌ها و محیط متخلخل به‌شدت به یکدیگر وابسته‌اند؛ بنابراین تحلیل آن‌ها، به‌ویژه در سلول‌های با سطح فعال چند ده سانتی‌متر مربع، نیازمند چارچوب سه‌بعدی است. مدل‌های یک‌بعدی یا دوبعدی می‌توانند برای مطالعات پارامتری سریع مفید باشند، اما ناهمگنی‌های جانبی ناشی از هندسه واقعی جریان را به‌طور کامل بازنمایی نمی‌کنند [۱۶-۲۴].

در شکل ۱ شماتیکی از سلول الکترولیز اکسید جامد و اجزای آن نمایش داده شده است.



شکل ۱ شماتیک ساده شده سلول الکترولیز اکسید جامد (SOEC)

Fig. 1 Simplified schematic of a solid oxide electrolysis cell (SOEC).

در پژوهش حاضر، هندسه پایه بر مبنای سلول‌های واقعی مورد استفاده در برنامه‌های زولیخ/آیفر (Jülich/EIFER) انتخاب شده است. فعالیت آیفر در الکترولیز دمابالا از سال 2004 آغاز شد و طی آن آزمون‌های متعددی روی تک‌سلول‌ها و استک‌های 5 تا 25 سلولی با زمان‌های کارکرد حدود 1000 تا 9000 ساعت انجام شد؛ همچنین سلول‌های دایره‌ای با سطح فعال 45 cm^2 در چگالی جریان نزدیک 1 A cm^{-2} به‌طور بلندمدت آزمایش شدند [۳۰-۳۲]. در نسل الکترولیت‌پشتیبان این پلتفرم، شفولد و همکاران کارکرد بیش از 11000 ساعت و سپس بیش از 23000 ساعت را گزارش کردند؛ در آزمون 11000 ساعته، در دمای 847 °C، چگالی جریان 0.9 A cm^{-2} و تبدیل بخار 51%، ولتاژ 1.185 V اندازه‌گیری شد [۳۳-۳۴]. این سابقه عملیاتی و وجود داده‌های تجربی مستند، سلول 45 cm^2 زولیخ/آیفر را به مبنایی مناسب برای بازسازی هندسه و شرایط کاری یک سامانه واقعی تبدیل می‌کند. با وجود پیشرفت مدل‌سازی سه‌بعدی سلول‌های الکترولیز اکسید جامد، تحلیل همزمان تأثیر جریان جانبی در دو سمت سلول، انتقال جرم چندجزئی در نواحی متخلخل و توزیع موضعی واکنش‌های الکتروشیمیایی در مقیاس تمام‌سطح، همراه با ارزیابی مستقل موازنه‌های بقا، کمتر در قالب یک چارچوب یکپارچه بررسی شده است. در این راستا، پژوهش حاضر با توسعه یک مدل سه‌بعدی چندفیزیکی مبتنی بر هندسه معادل سلول واقعی 45 cm^2، انتقال چندجزئی ماکسول–استفان، جریان در کانال‌ها و الکترودهای متخلخل و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی را به‌صورت همزمان در دو سوی سلول در نظر می‌گیرد. این چارچوب امکان بررسی ارتباط میان توزیع جریان گاز، گرادیان غلظت گونه‌ها و ناهمگنی مکانی واکنش را فراهم می‌سازد و سازگاری نتایج نیز از طریق موازنه‌های مستقل جریان، جرم کل، گونه‌های گازی و قانون فارادی ارزیابی می‌شود.

۲- مروری بر ادبیات تحقیق

ادبیات SOEC را می‌توان از دو مسیر مکمل دنبال کرد: مطالعات تجربی که عملکرد، دوام و سازوکارهای تخریب را روشن می‌کنند و مطالعات عددی که کمیت‌های موضعی دشوار برای اندازه‌گیری را بازسازی می‌کنند. در مسیر تجربی، آزمون‌های Jülich/EIFER از نخستین شواهد مهم درباره امکان کارکرد طولانی‌مدت سلول‌های 45 cm^2 در چگالی جریان بالا هستند. بریس و شفولد آزمون‌های 1000 تا 9000 ساعته را گزارش کردند و کارهای بعدی شفولد و همکاران روی سلول‌های الکترولیت‌پشتیبان، کارکرد 11000 و در ادامه بیش از 23000 ساعت را نشان داد؛ در دوره طولانی شدت جریان 0.9 A cm^{-2} نرخ افت ولتاژ حدود 0.57% در 1000 ساعت گزارش شد [۳۰-۳۴]. این نتایج نشان‌دهنده قابلیت کارکرد بلندمدت سلول‌های الکترولیت‌پشتیبان در چگالی جریان بالا هستند. بااین‌حال، مقاومت اهمی، شرایط الکترودی و تغییرات ریزساختاری در طول بهره‌برداری می‌توانند بر پایداری عملکرد و نرخ تخریب سلول اثر بگذارند.

یافته‌های جدیدتر با تصویربرداری مستقیم نانومقیاس نیز تجمع اکسیژن و تکامل ساختاری در فصل مشترک الکترود اکسیژن را به‌عنوان یکی از مسیرهای مهم تخریب آشکار کرده‌اند [۲۵].

مرورهای تحقیقات سال‌های اخیر نشان می‌دهند تمرکز پژوهش‌ها از اثبات امکان‌پذیری اولیه به سمت افزایش دوام، طراحی مواد اختصاصی برای حالت الکترولیز و مقیاس‌افزایی حرکت کرده است. Wolf و همکاران در مرور مواد صنعتی SOEC تأکید کردند که بسیاری از مواد متداول در اصل برای SOFC توسعه یافته‌اند و دستیابی به نرخ‌های تخریب مناسب برای بهره‌برداری چندساله همچنان یک معیار کلیدی است [۱۱]. کیو و همکاران و گو و همکاران نیز توسعه الکترولیت‌ها و الکترودهای جایگزین را برای الکترولیز H_2O/CO_2 و معماری‌های متقارن بررسی کرده‌اند [۱۲-۱۳]. از سوی دیگر، تحقیقات لاریچی، شو و آیر بر ضرورت همزمان بهبود مواد، طراحی کانال، پاسخ دینامیکی، مدل‌های چندفیزیکی و توسعه استک/سامانه تأکید دارند [۷-۹]. پژوهش‌های جدیدتر نیز مدل‌سازی چندمقیاسی، روش‌های یادگیری ماشین و بهینه‌سازی داده‌محور را به‌عنوان ابزار مکمل برای تشخیص تخریب و کاهش هزینه محاسباتی مطرح کرده‌اند [۲۶-۲۹].

در حوزه مدل‌سازی، لی و همکاران چارچوب‌های چندمقیاسی SOEC را مرور و نشان دادند که مدل‌های سلولی باید انتقال جرم، بار و واکنش را در کنار اثرات ریزساختار و شرایط عملیاتی در نظر گیرند [۱۶]. ناواسا و همکاران یک مدل سه‌بعدی چندفیزیکی در کامسول توسعه دادند که انتقال تکانه، جرم، گونه، گرما و الکتروشیمی را کوپل کرده و امکان محاسبه فشار جزئی و اضافه‌پتانسیل موضعی را فراهم می‌کرد [۱۷]. این مطالعه نشان داد که پاسخ متوسط سلول برای ارزیابی شرایط تخریب کافی نیست و توزیع‌های موضعی در ضخامت و سطح الکترود اهمیت دارند. جانگ و همکاران نیز با استفاده از کامسول، هندسه‌های قابل ساخت با چاپ سه‌بعدی را ارزیابی کردند و نشان دادند که طراحی هندسی مستقیماً بر مقاومت انتقالی و توزیع واکنش اثر می‌گذارد [۱۸]. تمرکز مطالعات سه‌بعدی جدیدتر به‌طور مشخص به سمت میدان جریان و ناهمگنی فضایی حرکت کرده است. ژائو و همکاران در کامسول استفاده از فوم فلزی را به‌عنوان میدان جریان بررسی کردند و در 10000 A m^{-2} افزایش تبدیل بخار از 72.2% به 76.2% و افزایش شار نفوذ بخار را گزارش کردند [۱۹]. چی و همکاران مدل سه‌بعدی خود را با آزمایش‌های قطعه‌بندی‌شده اعتبارسنجی کردند و نشان دادند افزایش بهره‌برداری بخار، اگرچه برای بازده سامانه مطلوب است، می‌تواند نسبت جریان پایین‌دست به بالادست را کاهش و ناهمگنی را تشدید کند [۲۰]. لیم و همکاران با یک چارچوب یکپارچه CFD–FEM، انتقال گونه، بار، گرما و تنش را در یک هندسه 100 cm^2

In Press Pre-Proof Version

بررسی کردند و بر پیوند میان رفتار الکتروشیمیایی و پاسخ مکانیکی تأکید نمودند [۲۱]. توو و همکاران نیز با مقایسه سه شکل کانال، اثر هندسه بر غلظت، دما، چگالی جریان و تنش حرارتی را نشان دادند [۲۲].

مدل‌های اخیر از مقیاس سلول فراتر رفته و ارتباط ریزساختار و میدان‌های چندفیزیکی را نیز هدف قرار داده‌اند. ژانگ و همکاران یک SOEC فلزپشتیبان را با مدل سه‌بعدی شامل بقای جرم، تکانه، انرژی، انتقال گونه و الکتروشیمی تحلیل کردند و سهم افت‌های فعال‌سازی و اهمی را در عملکرد نشان دادند [۲۳]. جیانو و همکاران با ترکیب مدل فازمیدان، بازسازی سه‌بعدی FIB–SEM و مدل اجزای محدود چندفیزیکی، مهاجرت نیکل را به گرادیان پتانسیل الکتروشیمیایی پیوند دادند [۲۴]. در ادامه، صلیحی و همکاران از یک مدل سه‌بعدی در ANSYS Fluent برای تولید داده و ساخت مدل جانشین چندلایه استفاده کردند و نشان دادند که ضخامت و تخلخل لایه‌های عملکردی می‌توانند به‌صورت همزمان بر ولتاژ و هزینه اثر بگذارند [۲۹]. این روند بیانگر آن است که مدل سه‌بعدی نه فقط ابزاری برای بازتولید منحنی پلاریزاسیون، بلکه بستری برای فهم ناهمگنی، طراحی و ارزیابی مکانیسم‌هاست.

همچنین پژوهش‌هایی در زمینه سامانه‌های اکسید جامد و تولید هیدروژن انجام شده است. علیزاده خارکشی [۳۵] یک سامانه ترکیبی مبتنی بر پیل سوختی اکسید جامد را از دیدگاه انرژی، اگزرژی و اقتصاد بررسی کرد. همچنین طرقی و همکاران [۳۶] یک سامانه تولید هیدروژن مبتنی بر انرژی خورشیدی را بهینه‌سازی کردند. این پژوهش‌ها با تمرکز بر تحلیل انرژی، اگزرژی و بهینه‌سازی سامانه‌های تولید و تبدیل انرژی، دیدگاه مکملی نسبت به مطالعات سلول‌محور ارائه می‌کنند. در مقابل، بررسی توزیع سه‌بعدی جریان، انتقال گونه‌ها و واکنش‌های الکتروشیمیایی در مقیاس سلول، نیازمند مدل‌های تفصیلی چندفیزیکی است.

مطالعات مرورشده نشان می‌دهند که هندسه میدان جریان، ویژگی‌های ریزساختاری الکترودها و شرایط عملیاتی، نقش مهمی در توزیع گونه‌ها، افت‌های الکتروشیمیایی و یکنواختی جریان دارند. در سلول‌هایی با سطح فعال گسترده، بازتوزیع جریان گاز و تغییر ترکیب مخلوط در امتداد مسیر می‌تواند موجب تفاوت قابل توجه میان عملکرد موضعی و پاسخ متوسط سلول شود. ازاین‌رو، تحلیل همزمان میدان‌های سه‌بعدی جریان، انتقال جرم و واکنش الکتروشیمیایی در کنار شاخص‌های عملکرد کلی، امکان شناخت دقیق‌تر رفتار سلول را فراهم می‌کند. جدول ۱، مطالعات منتخب را از نظر مقیاس هندسی، روش مدل‌سازی، پدیده‌های فیزیکی و نتایج اصلی مقایسه می‌کند.

جدول ۱ مقایسه تطبیقی مطالعات منتخب در زمینه مدل‌سازی و تحلیل SOEC و جایگاه پژوهش حاضر.

Table 1 Comparative review of selected studies on SOEC modeling and analysis and the position of the present study.

Reference	Year	Type / Scale	Software / Method	Main Physics	Key Finding	Gap Relative to the Present Study
Navasa et al. [17]	2018	3D, planar cell	COMSOL Multiphysics	Momentum, species, heat transfer, electrochemistry	Reconstruction of local partial pressures and overpotentials	Different geometry; focus on degradation
Jang et al. [18]	2022	3D, 3D-printed geometries	COMSOL 5.6	Brinkman flow, mass transport, Butler–Volmer kinetics, ohmic conduction	Effect of geometry on performance and transport resistance	Novel geometrical cells, not the 45 cm² platform
Zhao et al. [19]	2022	3D, metal-foam flow field	COMSOL Multiphysics	Flow, steam transport, electrochemistry	Steam conversion increased from 72.2% to 76.2% at 1 A cm⁻²	Focus on metal foam and one-sided transport
Chi et al. [20]	2023	3D + segmented-cell experiment	Multiphysics model + ANN	Flow, heat transfer, electrochemistry	Higher steam utilization intensified current non-uniformity	Primary focus on optimization and surrogate modeling
Lim et al. [21]	2024	3D, ~100 cm²	CFD–FEM	Species, charge, heat transfer, stress	Linked electrochemical performance with thermal stress	Primary focus on thermo-mechanical behavior
Tu et al. [22]	2024	3D, three channel configurations	Multiphysics model	Concentration, temperature, flow, stress	Effect of channel shape on uniformity and stress	Different geometry and materials
Zhang et al. [23]	2024	3D, metal-supported SOEC	Multiphysics model	Mass, momentum, energy, species, reaction	Separated activation and ohmic losses at 2.4 A cm⁻²	Metal-supported architecture and lower operating temperature
Jiao et al. [24]	2024	3D microstructure + cell	MATLAB + COMSOL/FE	Phase-field, electrochemistry, transport	Explained Ni migration through the potential gradient	Focus on microstructure and durability
Salihi et al. [29]	2025	3D + surrogate model	ANSYS Fluent + MLP	Multiphysics + optimization	Trade-off between performance and cost of functional layers	Primary focus on multi-objective optimization
Present study	—	Full-area 3D, realistic 45 cm² cell	COMSOL Multiphysics 6.1	Two-sided Maxwell–Stefan transport, Brinkman flow, charge transport, Butler–Volmer kinetics	3D field analysis + current/mass/species closure + Faraday consistency check	—

مقایسه مطالعات ارائه‌شده در جدول ۱ نشان می‌دهد که مدل‌سازی سه‌بعدی در شناخت تأثیر هندسه، انتقال جرم، توزیع جریان و شرایط الکتروشیمیایی بر عملکرد سلول‌های اکسید جامد نقش مؤثری داشته است. در ادامه این مسیر، پژوهش حاضر بر تحلیل همزمان میدان‌های انتقالی و الکتروشیمیایی در یک سلول تمام‌سطح با هندسه معادل نمونه واقعی ۴۵ سانتی‌متر مربع متمرکز است. بررسی ارتباط میان توزیع جریان گاز، تغییرات مکانی ترکیب گونه‌ها و شدت واکنش در دو سمت سلول، همراه با ارزیابی موازنه‌های انتگرالی، چارچوب تحلیل نتایج این پژوهش را تشکیل می‌دهد.

۳- روش‌شناسی تحقیق و شبیه‌سازی

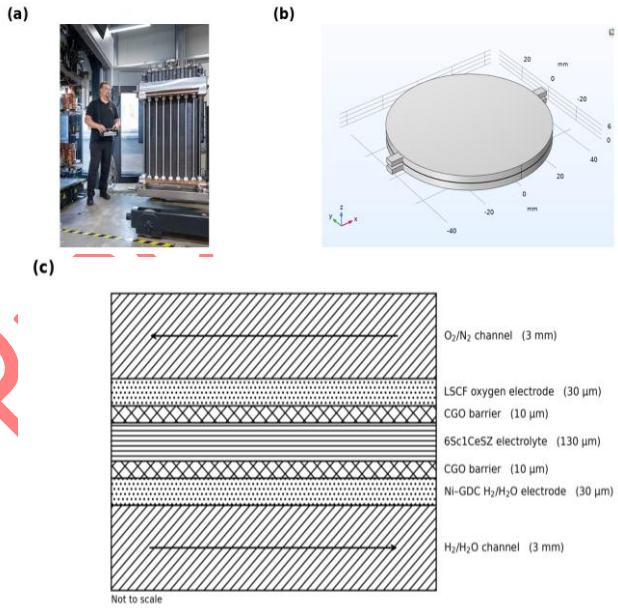
روند پژوهش از انتخاب پلتفرم واقعی و بازسازی هندسه سه‌بعدی آغاز شد. سپس مشخصات لایه‌ها، خواص مؤثر الکترودهای متخلخل، ترکیب و دبی جریان‌های ورودی و نقطه عملیاتی مرجع تعریف گردید. در مرحله بعد، معادلات ترمودینامیکی، انتقال بار، سینتیک واکنش، انتقال چندجزئی گونه‌ها و جریان گاز در نواحی آزاد و متخلخل در یک چارچوب چندفیزیکی به یکدیگر کوپل شدند. پس از تولید شبکه محاسباتی و اجرای راهبرد حل مرحله‌ای، شبیه‌سازی در 14 سطح

چگالی جریان از 0.01 تا 0.9 A cm⁻² انجام شد. در نهایت، پیش از تفسیر میدان‌های سه‌بعدی، پاسخ هر نقطه از نظر موازنه جریان، جرم کل، گونه‌ها و قانون فارادی کنترل شد. حل عددی با COMSOL Multiphysics 6.1 و ماژول Fuel Cell & Electrolyzer انجام شد. انتخاب این محیط به دلیل ماهیت به‌شدت کوپل‌شده مسئله و امکان حل اجزای محدود انتقال بار، واکنش الکتروشیمیایی، جریان و انتقال جرم روی یک هندسه مشترک صورت گرفت. مزیت اصلی برای مطالعه حاضر، دسترسی همزمان به میدان‌های موضعی پتانسیل، چگالی جریان، سرعت، فشار و ترکیب گونه‌ها و امکان انتگرال‌گیری مستقل شارها و چشمه‌های واکنش است.

در ادامه این بخش ابتدا مدل هندسی و داده‌های اولیه معرفی می‌شوند و سپس روابط حاکم، نحوه پیاده‌سازی عددی و راهبرد حل توضیح داده می‌شود.

۳-۱- مدل هندسی انتخاب‌شده و داده‌های اولیه

هندسه محاسباتی بر مبنای یک سلول دایره‌ای الکترولیت‌پشتیبان با سطح فعال 45 cm² بازسازی شد که مشخصات هندسی و عملیاتی آن از پلتفرم آزمایشگاهی زولیخ/ایفر و گزارش‌های تجربی شفولد و همکاران اقتباس شده است [۳۰–۳۴]. این پیکربندی، امکان تحلیل رفتار سلول در مقیاس واقعی و با درنظرگرفتن اثرات جانبی جریان گاز را فراهم می‌کند. شعاع معادل سطح فعال 37.85 mm است. تصویری از نمونه واقعی و مدل هندسی در شکل ۲ نمایش داده شده است.



شکل ۲ ارتباط میان مقیاس عملیاتی و هندسه مدل:
a نمونه‌ای از سامانه واقعی SOEC برای نمایش مقیاس تجهیزات آزمایشگاهی
b نمای سه‌بعدی هندسه تمام‌سطح 45 cm² در مدل حاضر
C برش جانبی بزرگ‌شده از ترتیب کانال‌ها و لایه‌های سلول
ملاحظات: ضخامت‌ها در پنل c به مقیاس ترسیم نشده‌اند. تصویر پنل a صرفاً برای نمایش مقیاس سامانه آزمایشگاهی است؛ تعریف هندسه مرجع بر اساس داده‌های منتشرشده Jülich/EIFER انجام شده است.

Fig. 2 Relationship between the operating scale and model geometry:
(a) representative real SOEC system illustrating the scale of laboratory equipment,
(b) three-dimensional full-area geometry of the 45 cm² cell used in the present model,
(c) enlarged side cross-section showing the arrangement of gas channels and cell layers. The layer thicknesses in panel (c) are not drawn to scale.

برای حفظ اثرات واقعی ورودی–خروجی و جلوگیری از حذف گرادیان‌های جانبی، کل سطح فعال در مدل سه‌بعدی حل شده و از تقارن هندسی استفاده نشده است. در راستای ضخامت، پشته شامل کانال گاز سمت اکسیژن، الکترود LSCF، لایه مانع CGO، الکترولیت 6Sc1CeSZ، لایه CGO دوم، الکترود Ni–GDC و کانال H₂/H₂O است. هندسه کانال‌ها در دو سمت به‌صورت جریان جانبی و در ارتباط مستقیم با الکترودهای متخلخل تعریف شده است. شرایط عملیاتی به‌گونه‌ای انتخاب شد که نقطه مرجع آزمایش بلندمدت سلول 45 cm² بازنمایی شود. دما 847 °C و چگالی جریان هدف 0.9 A cm⁻² در نظر گرفته شد. خوراک سمت هیدروژن شامل 75% بخار آب و 25% هیدروژن و خوراک سمت اکسیژن هوای خشک با 21% اکسیژن و 79% نیتروژن بود. دبی ورودی سمت H₂/H₂O بر اساس مصرف فارادی در جریان کل 40.5 A و هدف تبدیل بخار نزدیک 51% تعیین شد. پارامترهای هندسی و ساختاری اصلی مدل در جدول (۲) و شرایط عملیاتی و ترکیب جریان‌های ورودی در نقطه مرجع در جدول (۳) ارائه شده است.

جدول ۲ پارامترهای هندسی و ساختاری اصلی مدل.
Table 2. Main geometrical and structural parameters of the model.

Parameter	Value	Description
Active area	45 cm²	Full active area of the cell
Equivalent radius of the active region	37.85 mm	Circular geometry
Gas-region height on each side	3 mm	H_2/H_2O and O_2/N_2 channels
Ni–GDC electrode thickness	30 µm	Steam/hydrogen electrode
LSCF electrode thickness	30 µm	Oxygen electrode
CGO layer thickness (each)	10 µm	Barrier/adhesion layer
6Sc1CeSZ electrolyte thickness	130 µm	Oxygen-ion conduction
Electrode porosity	0.40	Effective porous-medium parameter
Permeability	1×10^{-10} m²	Darcy/Brinkman resistance
Effective electronic conductivity	465 S m⁻¹	Electronic charge transport
Effective ionic conductivity	8.2 S m⁻¹	Ionic charge transport
Specific active surface area	1×10^{9} m⁻¹	Conversion of surface current density to a volumetric source term

سطح ویژه فعال الکترودها به‌صورت یک پارامتر مؤثر در توصیف سینتیک حجمی واکنش در نظر گرفته شد و لزوماً بیانگر سطح واکنشی اندازه‌گیری‌شده از ریزساختار واقعی الکترودها نیست.

جدول ۳ شرایط عملیاتی و ترکیب جریان‌های ورودی در نقطه مرجع.
Table 3. Operating conditions and inlet gas compositions at the reference operating point.

Quantity	Value
Cell temperature	847 °C
Target current density	0.9 A cm⁻² (9000 A m⁻²)
Corresponding total current	40.5 A
H_2O/H_2 inlet mole composition	75 / 25%
O_2/N_2 inlet mole composition	21 / 79%
H_2/H_2O-side mass flow rate	7.69×10^{-6} kg s⁻¹
O_2/N_2-side mass flow rate	1.59×10^{-5} kg s⁻¹
Experimental reference voltage at 0.9 A cm⁻²	1.185 V
Reference steam conversion	51%

۳-۲- شبیه‌سازی ترمودینامیکی و ریاضی

در الکترولیز بخار، واکنش به‌صورت $H_2O(g) \rightarrow H_2(g) + 1/2\ O_2(g)$ در نظر گرفته شد. سهم انرژی الکتریکی واکنش با تغییر انرژی آزاد گیبس و سهم حرارتی با اختلاف آنتالپی و انرژی آزاد گیبس مرتبط است. بنابراین، با افزایش دما بخشی از نیاز انرژی از حوزه الکتریکی به حوزه حرارتی منتقل می‌شود. ولتاژ برگشت‌پذیر محلی از رابطه نرنست (۱) و بر اساس دما و فشار جزئی گونه‌ها محاسبه شد:

$$E_{eq} = \frac{\Delta G^{\circ}(T)}{2F} + \frac{RT}{2F}\ln\left[\frac{(p_{H_2}/P^0)\cdot(p_{O_2}/P^0)^{0.5}}{p_{H_2O}/P^0}\right] \qquad (۱)$$

که در آن F ثابت فارادی، R ثابت عمومی گازها و p_i فشار جزئی گونه‌ها و P^0 فشار استاندارد و نسبت $\frac{p_i}{P^0}$ فشار جزئی بی‌بُعد گونه i است. تغییر ترکیب گاز در امتداد سلول در نتیجه مصرف H_2O و تولید H_2 و O_2، سبب تغییر موضعی E_{eq} می‌شود و از این مسیر مستقیماً با سینتیک واکنش کوپل است.

انتقال بار در فاز الکترونی و یونی با معادلات بقای جریان و قانون اهم توصیف شد (روابط ۲ و ۳). در شرایط پایا، برای فاز الکترونی و یونی می‌توان نوشت:

$$\nabla \cdot i_s = -i_v, i_s = -\sigma_{s,eff} \nabla \varphi_s \quad (۲)$$

$$\nabla \cdot i_l = i_v, i_l = -\sigma_{l,eff} \nabla \varphi_l \quad (۳)$$

در این روابط φ_l و φ_s پتانسیل‌های الکترونی و یونی، σ_{eff} رسانندگی مؤثر و i_v چگالی جریان واکنش حجمی است. سینتیک واکنش در الکترودهای متخلخل با رابطه باتلر–ولمر (روابط ٤ و ٥) بیان شد:

$$i_{loc} = i_0(c_k, T)\left[\exp\left(\frac{\alpha_a F\eta}{RT}\right) - \exp\left(\frac{-\alpha_c F\eta}{RT}\right)\right] \quad (٤)$$

$$i_v = a_v\, i_{loc} \quad (٥)$$

که در آن η اضافه‌پتانسیل موضعی، i_0 چگالی جریان تبادلی و a_v سطح ویژه فعال است. مصرف و تولید گونه‌ها مستقیماً از نرخ واکنش الکتروشیمیایی به‌دست می‌آید؛ بر این اساس نرخ نظری تولید هیدروژن و اکسیژن از روابط $\dot{n}_{H_2}=I/(2F)$ و $\dot{n}_{O_2}=I/(4F)$ محاسبه می‌شود.

به دلیل تغییر محسوس ترکیب مخلوط در دو سمت سلول، انتقال گونه‌ها با چارچوب Maxwell–Stefan مدل شد تا برهم‌کنش نفوذی اجزای مخلوط به‌جای استفاده از یک ضریب نفوذ فیکی مستقل برای هر گونه لحاظ شود. موازنه پایای گونه k به‌صورت زیر نوشته می‌شود (روابط ۶ و ۷):

$$\nabla \cdot (\rho u \omega_k + J_k) = R_k \quad (٦)$$

$$J_k = -\rho\, \omega_k \sum_{i=1}^{N} \tilde{D}_{ki} d_i \quad (٧)$$

در این روابط ω_k کسر جرمی، J_k شار نفوذی، R_k نرخ تولید یا مصرف و $\tilde{D}_{ki}$ ضریب نفوذ چندجزئی و d_i بردار نیروی محرک نفوذ گونه i در صورت‌بندی انتقال جرم چندجزئی است. ضرایب نفوذ دوتایی در دمای کار با همبستگی‌های مناسب گازهای رقیق تعیین شدند. در نتیجه، کاهش H_2O و افزایش H_2 در یک سمت و افزایش O_2 و رقیق‌شدن نسبی N_2 در سمت دیگر به‌صورت کوپل‌شده در حل گونه‌ها بازنمایی می‌شود.

میدان جریان در کانال‌های آزاد و لایه‌های متخلخل با صورت‌بندی Brinkman حل شد؛ این رویکرد امکان توصیف پیوسته گذار از جریان آزاد به جریان در محیط متخلخل را فراهم می‌کند. فرم عمومی معادله تکانه به‌صورت زیر است (روابط ۸ و ۹):

$$\rho(u \cdot \nabla)u = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla u + \nabla u^T)] - \mu\kappa^{-1}u \quad (٨)$$

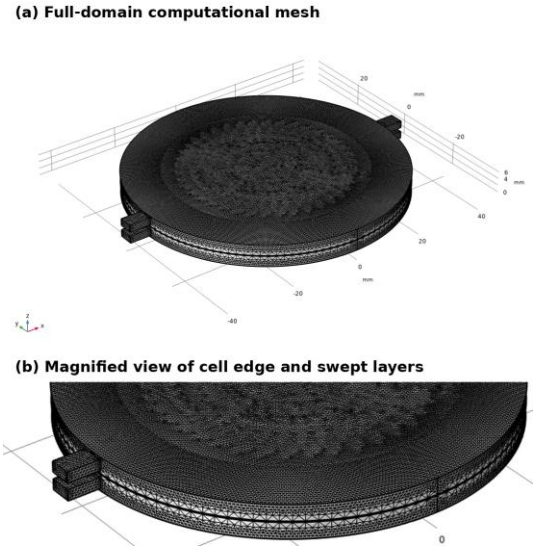
$$\nabla \cdot (\rho u) = Q_m \quad (٩)$$

در روابط فوق، κ تراوایی محیط متخلخل و Q_m جمله چشمه جرم ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی است. شرایط مرزی جریان و انتقال گونه‌ها بر اساس پیکربندی هندسی و مقادیر جدول ۳ تعیین شد. در ورودی سمت هیدروژن، دبی جرمی $7.69*10^{-6}$ kg/s با ترکیب مولی ۷۵٪ بخار آب و ۲۵٪ هیدروژن و در ورودی سمت اکسیژن، دبی جرمی $1.59*10^{-5}$ kg/s با ترکیب مولی ۲۱٪ اکسیژن و ۷۹٪ نیتروژن اعمال گردید. در خروجی‌های دو سمت، فشار گیج صفر با فشار مرجع مطلق برابر یک اتمسفر اعمال شد. روی دیواره‌های جامد شرط بدون لغزش و در مرزهای غیرواکنشی شرط عدم شار گونه‌ها در نظر گرفته شد. از نظر الکتریکی، سمت هیدروژن به‌عنوان مرجع پتانسیل زمین در نظر گرفته شد و چگالی جریان متوسط به الکترود مقابل اعمال گردید. شرایط انتقال بار و مصرف یا تولید گونه‌ها در نواحی فعال الکترودها نیز بر اساس سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی تعیین شد.

معادلات حاکم با روش اجزای محدود و در محیط COMSOL Multiphysics 6.1 به‌صورت سه‌بعدی، پایا و هم‌دما حل شدند. در گسسته‌سازی متغیرهای الکتروشیمیایی و انتقال گونه‌ها از توابع شکل لاگرانژی خطی و برای میدان‌های سرعت و فشار از صورت‌بندی P1+P1 استفاده شد. برای حل دستگاه معادلات غیرخطی، ابتدا توزیع جریان الکتریکی مقداردهی اولیه شد و سپس میدان جریان گاز در سمت هیدروژن و پس از آن در سمت اکسیژن محاسبه گردید. در مرحله نهایی، انتقال بار، جریان سیال و انتقال گونه‌ها به‌صورت هم‌بسته و با استفاده از حلگر تفکیک‌شده در پنج گروه متغیر حل شدند. چگالی جریان اعمالی در یک فرایند ادامه‌دهی ۱۴ مرحله‌ای از ۰٫۰۱ تا ۰٫۹ A/cm² افزایش یافت. تلرانس نسبی حلگر 10^{-4} در نظر گرفته شد و سازگاری پاسخ نهایی نیز از طریق موازنه‌های انتگرالی جریان، جرم و گونه‌ها بررسی گردید.

برای گسسته‌سازی هندسه از شبکه ترکیبی استفاده شد؛ به‌گونه‌ای که نواحی جریان گاز با المان‌های چهاروجهی و لایه‌های نازک الکترود و الکترولیت با المان‌های جاروبی شبکه‌بندی شدند. این آرایش امکان نمایش تغییرات میدان‌ها در راستای ضخامت و در سطح فعال سلول را فراهم می‌کند. در شبکه نهایی، اندازه المان‌ها در نواحی گازی با حدود تعریف‌شده ۰٫۰۲۵ تا ۰٫۶۰ میلی‌متر و در راستای سطح لایه‌های سلول با حدود ۰٫۸ تا ۲ میلی‌متر تنظیم شد. ساختار شبکه محاسباتی در شکل ۳ نمایش داده شده است.

حساسیت نتایج به شبکه با استفاده از سه سطح گسسته‌سازی بررسی شد. تغییرات کمیت‌های اصلی الکتروشیمیایی، سرعت متوسط جریان و ترکیب متوسط گونه‌ها بین دو شبکه نهایی کمتر از ٥٪ بود؛ ازاین‌رو شبکه نهایی برای تحلیل میدان‌های سه‌بعدی انتخاب شد. پس از تکمیل محاسبات، ولتاژ، میدان سرعت، توزیع گونه‌ها، نرخ واکنش و شاخص‌های عملکرد استخراج و سازگاری پاسخ از طریق موازنه جریان، جرم کل، گونه‌های گازی و قانون فارادی ارزیابی شد. نتایج حاصل در ادامه ارائه می‌شوند.



شکل ۳ شبکه محاسباتی مدل: (الف) نمای کلی شبکه سه‌بعدی؛ (ب) بزرگ‌نمایی ناحیه لایه‌های سلول و شبکه جاروبی در راستای ضخامت.

Fig. 3 Computational mesh of the model: (a) full three-dimensional mesh; (b) magnified view of the cell layers and swept mesh through the thickness.

۴- نتایج و بحث

نتایج با یک مسیر از پاسخ کلی سلول به پدیده‌های موضعی ارائه می‌شوند. ابتدا نقطه‌کاری مرجع و پاسخ ولتاژ–جریان بررسی شده و سپس تغییر ترکیب خروجی و سازگاری آن با قانون فارادی تحلیل می‌شود. در ادامه، میدان‌های سه‌بعدی سرعت و گونه‌ها برای شناسایی منشأ ناهمگنی انتقال جرم بررسی می‌شوند و پس از آن توزیع واکنش و چگالی جریان در نواحی فعال تفسیر می‌شود. در پایان، نرخ تولید هیدروژن، توان و مصرف ویژه انرژی الکتریکی جمع‌بندی می‌شوند.

۴-۱- عملکرد الکتروشیمیایی و نتایج نقطه مرجع

در چگالی جریان 0.9 A cm⁻²، جریان کل متناظر با سطح فعال 45 cm² برابر 40.5 A است. مدل ولتاژ 1.23 V را پیش‌بینی کرد که در مقایسه با مقدار 1.185 V گزارش‌شده برای سلول مرجع در دمای 847 °C و تبدیل بخار 51%، اختلافی حدود 4% دارد [۳۳]. اختلاف ولتاژ محاسباتی و مقدار مرجع را می‌توان ناشی از تفاوت مقاومت‌های تماس و فصل‌مشترک، تقریب خواص مؤثر الکترودهای متخلخل، ناهمگنی ریزساختاری و عدم قطعیت شرایط عملیاتی دانست. از آنجا که پارامترهای سینتیکی مدل با استفاده از نقطه عملکرد مرجع تنظیم شده‌اند، این مقایسه بیانگر سازگاری پاسخ الکتروشیمیایی مدل با شرایط آزمایشگاهی مبناست. در کنار پاسخ ولتاژ–جریان، موازنه‌های انتگرالی نیز برای بررسی سازگاری میدان‌های انتقالی و الکتروشیمیایی محاسبه شدند. جریان انتگرالی الکترود هیدروژن برابر ٤٠٫٤٩ A و جریان انتگرالی الکترود اکسیژن برابر ٤٠٫٥٦ A بود و اختلاف آن‌ها با جریان اعمالی، به‌ترتیب حدود ۰٫۰۳ و ۰٫۱٤ درصد محاسبه شد. همچنین باقیمانده موازنه چهار گونه در محدوده 0.24 تا 0.44% و خطای جرم کل در هر دو سمت کمتر از 0.04% بود. جدول ٤ خلاصه عملکرد و راستی‌آزمایی مدل را نشان می‌دهد.

جدول ۴ خلاصه عملکرد و راستی‌آزمایی مدل در نقطه کاری 0.9 A cm⁻².

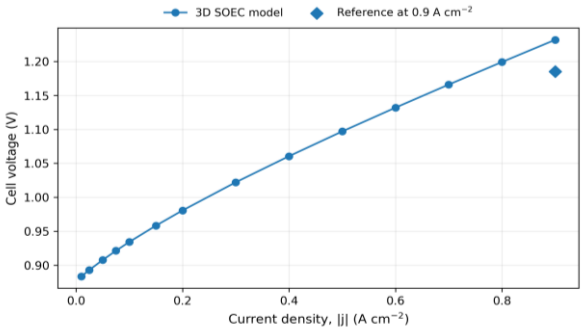
Table 4. Summary of model performance and numerical consistency checks at 0.9 A cm⁻².

Quantity	Result	Comparison / Interpretation
Total current	40.5 A	j×A
Cell voltage	1.23 V	Experimental reference: 1.185 V

In Press. Pre-Proof Version

Voltage deviation	≈4.0%	Consistency with the reference operating point
H_2 / O_2 current-closure error	0.03 / 0.14%	Below 0.15%
H_2O/H_2/O_2/N_2 species residual	0.24 / 0.25 / 0.40 / 0.44%	All below 0.5%
Total mass residual, H_2 side / O_2 side	0.007 / 0.039%	Below 0.04%
H_2O outlet, model / Faraday	36.0 / 36.8%	Absolute difference ≈0.74 percentage points
O_2 outlet, model / Faraday	34.0 / 33.7%	Absolute difference ≈0.33 percentage points
Electrical power	49.9 W	At the reference operating point
Theoretical H_2 production	1.52 g h^{-1}	Based on Faraday's law
Electrical SEC	32.8 kWh kg^{-1}-H_2	Excluding thermal duty

منحنی پلاریزاسیون در شکل ٤ نشان می‌دهد با افزایش چگالی جریان از 0.01 به 0.9 A cm^{-2}، ولتاژ از حدود 0.88 به 1.23 V افزایش می‌یابد. در بارهای پایین، افزایش ولتاژ عمدتاً با فعال‌شدن واکنش و افت‌های اهمی همراه است؛ با افزایش جریان، علاوه بر افت اهمی بزرگ‌تر، مصرف سریع‌تر بخار و تغییر فشار جزئی گونه‌ها سبب افزایش اضافه‌پتانسیل غلظتی و تغییر پتانسیل تعادلی موضعی می‌شود. بنابراین خمیدگی منحنی در بارهای بالاتر حاصل جمع اثرات انتقال بار، سینتیک و انتقال جرم است. مقادیر ولتاژ در محدوده 1.3–1.2 V در جریان‌های نزدیک 0.9–1 A cm^{-2} با عملکرد گزارش‌شده برای سلول‌های الکترولیت‌پشتیبان دمابالا هم‌مرتبه است [۳۰، ۳۳ و ۳۴].

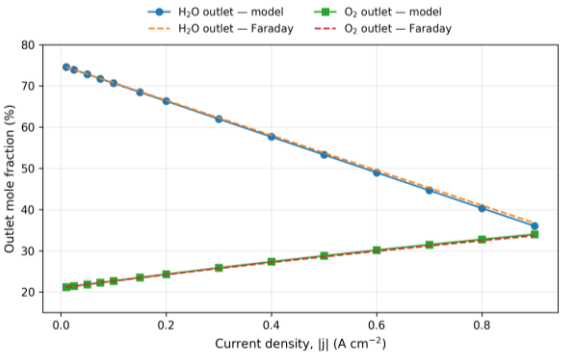


شکل ۴ منحنی پلاریزاسیون مدل سه بعدی و نقطه مرجع تجربی

Fig. 4 Polarization curve of the three-dimensional model and the experimental reference point at 0.9 A cm^{-2}.

۴-۲- تغییر ترکیب گاز و سازگاری با قانون فارادی

تغییر همزمان H_2O و O_2 در شکل ۵ یک تصویر مستقیم از استوکیومتری فرایند ارائه می‌کند. با افزایش چگالی جریان، نرخ مصرف H_2O در الکترود بخار/هیدروژن متناسب با عبور بار افزایش می‌یابد؛ بنابراین کسر مولی H_2O خروجی از حدود 75% در بارهای بسیار پایین به 36.0% در 0.9 A cm^{-2} کاهش می‌یابد. در مقابل، انتقال یون O^{2-} از الکترولیت و اکسایش آن در الکترود اکسیژن، تولید O_2 را افزایش می‌دهد و کسر مولی اکسیژن خروجی از حدود 21% به 34.0% می‌رسد. این دو روند مستقل نیستند و دو سوی یک واکنش کلی واحد را نشان می‌دهند. نزدیکی منحنی‌های مدل به مقادیر فارادی در کل بازه بیانگر سازگاری نرخ واکنش، انتقال گونه و شار خروجی است.



شکل ۵ تغییر کسر مولی خروجی H_2O و O_2 با چگالی جریان و مقایسه با مقادیر حاصل از قانون فارادی.

Fig. 5 Variation of H_2O and O_2 outlet mole fractions with current density and comparison with values predicted by Faraday's law.

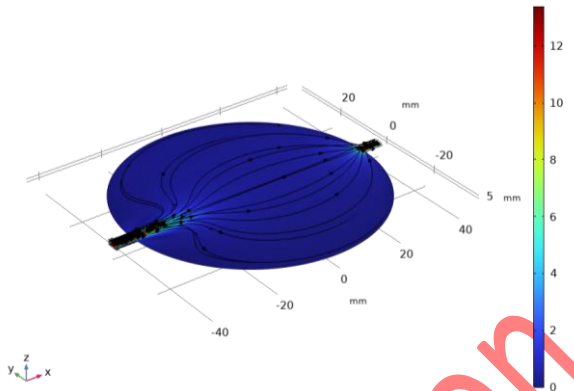
در نقطه نهایی، H_2O خروجی مدل 36.0% و مقدار فارادی 36.8% است؛ برای O_2 نیز مقادیر متناظر 34.0 و 33.7% به‌دست آمد. این اختلاف‌های کوچک در مقایسه با تغییر کلی ترکیب، نشان می‌دهند که پاسخ سه‌بعدی با موازنه استوکیومتری سازگار است. از نظر فیزیکی، کاهش بخار به معنی افزایش نسبت H_2/H_2O در امتداد مسیر و در نتیجه تغییر پتانسیل نرنست و شرایط سینتیکی محلی است. افزایش نسبت هیدروژن به بخار آب، با تغییر فشار جزئی گونه‌ها، شرایط تعادلی واکنش و نیروی محرک انتقال جرم را در امتداد الکترود تغییر می‌دهد؛ ازاین‌رو نواحی مختلف سطح فعال، حتی در یک چگالی جریان کل یکسان، می‌توانند سهم متفاوتی در واکنش الکتروشیمیایی داشته باشند. به همین دلیل افزایش بهره‌برداری بخار می‌تواند هم کارایی مصرف خوراک را افزایش دهد و هم ناهمگنی جریان را تشدید کند؛ روندی که شی و همکاران نیز در مدل/آزمایش قطعه‌بندی‌شده گزارش کردند [۲۰].

۴-۳- تحلیل سه‌بعدی میدان جریان و انتقال گونه‌ها

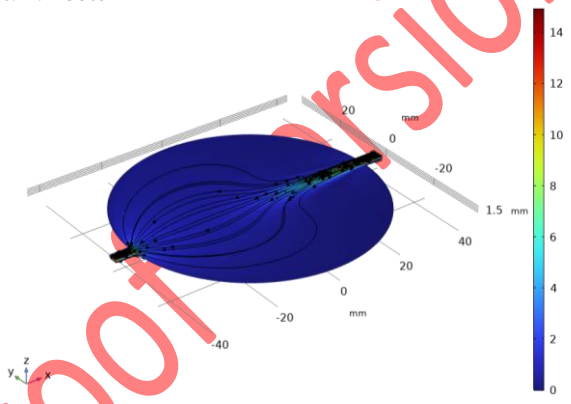
نتایج میدان سرعت نشان می‌دهد که هندسه جریان جانبی موجب توزیع غیریکنواخت گاز در سطح فعال سلول می‌شود. در چگالی جریان 0.9 A cm^{-2}، سرعت متوسط در سمت H_2 / H_2O حدود 0.38 m s^{-1} و در سمت O_2/N_2 حدود 0.41 m s^{-1} است. بااین‌حال، سرعت موضعی در نواحی محدود ورودی و خروجی به‌مراتب بیشتر از مقدار متوسط بوده و به‌ترتیب تا حدود ۱۳/۴ و ۱۴/۹ m s^{-1} افزایش می‌یابد. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، جریان پس از ورود از مجرای جانبی در سطح دیسکی سلول بازتوزیع شده و مسیرهای متفاوتی را تا خروجی طی می‌کند. اختلاف طول مسیرهای جریان و تغییر سطح مقطع مؤثر عبور گاز موجب ایجاد گرادیان‌های سرعت و تفاوت زمان اقامت در نواحی مختلف می‌شود. این شرایط، علاوه بر تغییر شدت انتقال همرفتی، بر توسعه لایه‌های مرزی غلظت و میزان دسترسی واکنشگرها به سطح الکترود تأثیر می‌گذارد. ارتباط میان هندسه میدان جریان و ناهمگنی انتقال جرم در مطالعات ژائو و تو نیز گزارش شده است [۱۹، ۲۲].

توزیع سه‌بعدی کسر مولی گونه‌ها در نقطه 0.9 A cm^{-2} در شکل ۷ ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود پیامد مستقیم ناهمگنی جریان، ایجاد گرادیان‌های فضایی در ترکیب گازهاست. در دامنه Ni–GDC، کسر مولی متوسط H_2O حدود 47.8% است، اما بین 28.5 و 74.7% تغییر می‌کند. این دامنه وسیع نشان می‌دهد بخشی از سطح فعال در مجاورت خوراک بخار غنی قرار دارد، در حالی که نواحی پایین‌دست همزمان تحت اثر مصرف واکنشی و زمان اقامت بیشتر، بخار کمتری دارند. به‌طور متناظر، H_2 در جهت مخالف غنی می‌شود. در سمت اکسیژن نیز متوسط O_2 در LSCF حدود 35.4% و بازه موضعی آن 20.7 تا 48.2% است؛ افزایش O_2 در امتداد مسیر محصول مستقیم تولید الکتروشیمیایی آن است، در حالی که N_2 واکنش نمی‌دهد و از نظر کسر مولی رقیق‌تر می‌شود. تفاوت الگوی توزیع گونه‌ها در دو سمت سلول، ناشی از ماهیت متفاوت واکنش‌ها و ترکیب جریان‌های ورودی است. در سمت هیدروژن، مصرف بخار و تولید همزمان هیدروژن موجب ایجاد گرادیان‌های معکوس کسر مولی این دو گونه می‌شود؛ در حالی که در سمت اکسیژن، تولید اکسیژن و افزایش مقدار کل گاز، سهم مولی نیتروژن را با وجود عدم مشارکت آن در واکنش کاهش می‌دهد. در نتیجه، میدان ترکیب هر دو سمت به‌طور همزمان تحت تأثیر انتقال همرفتی، نفوذ چندجزئی و نرخ واکنش الکتروشیمیایی قرار دارد.

In Press, Pre-Proof Version



a: H2/H2O side

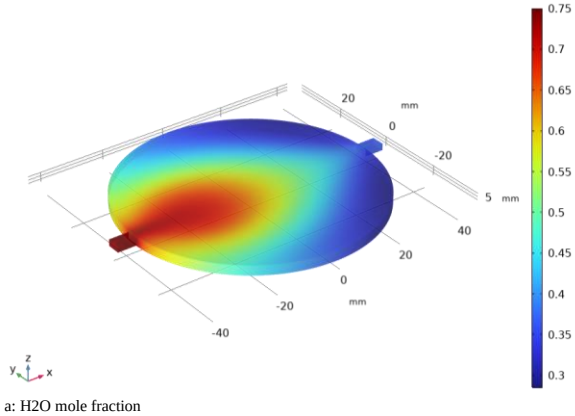


b: O2/N2 side

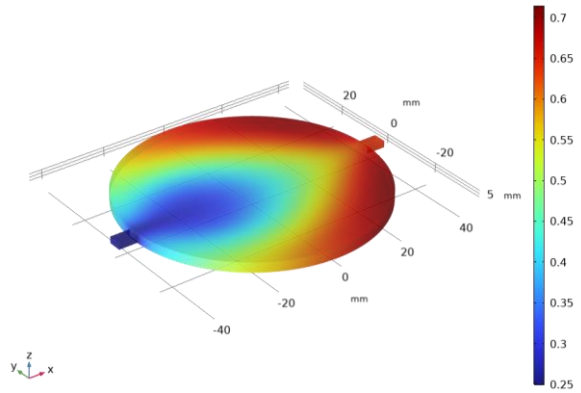
شکل ۶ میدان سه‌بعدی سرعت و خطوط جریان در نقطه 0.9 A cm⁻² a سمت H_2/H_2O و b سمت O_2/N_2.

Fig. 6 Three-dimensional velocity magnitude fields (m s⁻¹) and streamlines at 0.9 A cm⁻²: (a) H_2/H_2O side and (b) O_2/N_2 side.

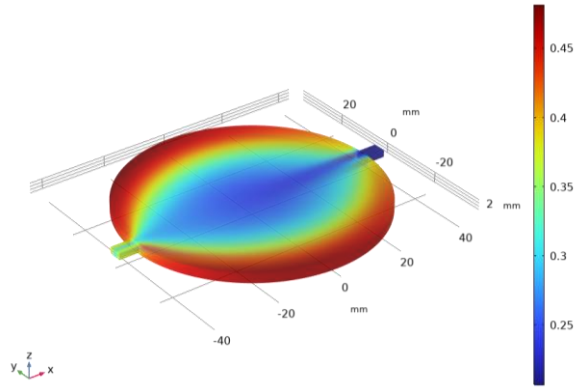
در اینجا اهمیت استفاده از چارچوب Maxwell–Stefan روشن می‌شود؛ زیرا تغییر یک جزء صرفاً به شار همان گونه محدود نیست و گرادیان‌های ترکیب و فشار بر انتقال سایر اجزای مخلوط نیز اثر می‌گذارند. بنابراین توزیع H_2O/H_2 و O_2/N_2 حاصل برهم‌کنش همرفت، نفوذ چندجزئی، انتقال در محیط متخلخل و چشمه/چاهک واکنشی است. مشاهده دامنه‌های موضعی بزرگ در شکل ۷ نشان می‌دهد استفاده از یک ترکیب متوسط برای کل سطح فعال می‌تواند شرایط واقعی الکترود را پنهان کند. این نتیجه با مطالعات سه‌بعدی Navasa و Lim که بر ضرورت بررسی فشار جزئی و توزیع گونه‌ها در مقیاس محلی تأکید کرده‌اند سازگار است [۱۷ و ۲۱].



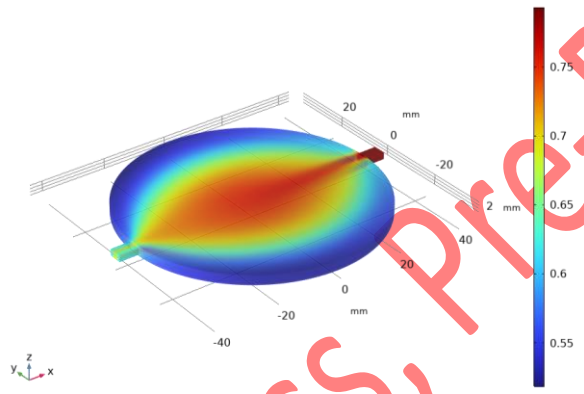
a: H2O mole fraction



b: H2 mole fraction



c: O2 mole fraction



d: N2 mole fraction

شکل ۷ توزیع سه‌بعدی کسر مولی گونه‌ها در نقطه 0.9 A cm⁻² a H_2O b H_2 c O_2 d N_2

Fig. 7 Three-dimensional distributions of dimensionless mole fractions at 0.9 A cm⁻²: (a) H_2O, (b) H_2, (c) O_2, and (d) N_2.

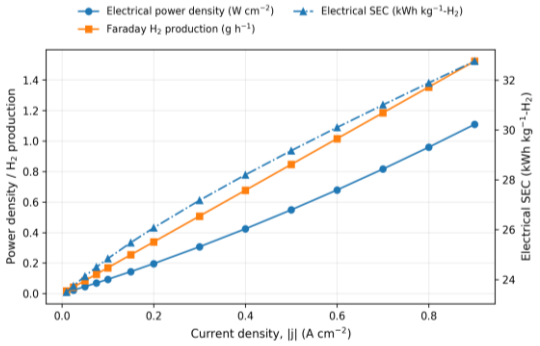
۴- توزیع سه‌بعدی واکنش الکتروشیمیایی و جریان

ناهمگنی میدان سرعت و ترکیب گاز در نهایت بر توزیع مکانی واکنش‌های الکتروشیمیایی اثر می‌گذارد. شکل ۸ توزیع چگالی جریان واکنش حجمی در دو الکترود و مؤلفه چگالی جریان یونی در الکترولیت را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، توزیع واکنش در سطح فعال یکنواخت نیست و نواحی با شدت واکنش بیشتر، با الگوی تغییرات ترکیب گاز و مسیر انتقال جریان ارتباط دارند. در سمت هیدروژن، دسترسی موضعی به بخار آب و تغییر نسبت H_2O/H_2 بر فشار جزئی واکنشگرها و اضافه‌پتانسیل مؤثر تأثیر می‌گذارد؛ در سمت اکسیژن نیز تجمع موضعی اکسیژن و تغییر فشار جزئی آن، شرایط واکنش را در نقاط مختلف الکترود تغییر می‌دهد. علاوه بر این، مقاومت انتقال بار در فازهای یونی و الکترونی موجب می‌شود شدت واکنش صرفاً تابع غلظت گونه‌ها نباشد، بلکه از توزیع پتانسیل نیز تأثیر بپذیرد. برهم‌کنش این پدیده‌ها موجب ایجاد نواحی تمرکز واکنش می‌شود؛ به‌گونه‌ای که عملکرد متوسط سلول لزوماً بیانگر شرایط موضعی تمامی نواحی فعال نیست.

In Press, Pre-Proof Version

۴-۵- شاخص‌های عملکرد و تولید هیدروژن

بر اساس قانون فارادی، نرخ نظری تولید H_2 تقریباً متناسب با جریان افزایش می‌یابد؛ در نتیجه با افزایش چگالی جریان از 0.01 تا $0.9\ A\ cm^{-2}$، تولید هیدروژن از حدود 0.017 به $1.52\ g\ h^{-1}$ می‌رسد. توان الکتریکی به دلیل افزایش همزمان جریان و ولتاژ، سریع‌تر از نرخ تولید هیدروژن رشد می‌کند. در نقطه مرجع، توان الکتریکی 49.9 W و چگالی توان $1.11\ W\ cm^{-2}$ است. در شکل ۹ تغییر همزمان چگالی توان الکتریکی و نرخ نظری تولید هیدروژن و مصرف ویژه انرژی ارائه شده است و نتایج نشان می‌دهد نرخ تولید و چگالی توان هر دو با بار افزایش می‌یابند، اما مصرف ویژه انرژی الکتریکی نیز از حدود 23.5 به 32.8 kWh kg^{-1}-H_2 افزایش می‌یابد؛ علت آن افزایش ولتاژ لازم برای عبور هر واحد بار در اثر افت‌های اهمی، فعال‌سازی و انتقال جرم است.



شکل ۹ تغییر همزمان چگالی توان الکتریکی و نرخ نظری تولید هیدروژن (محور چپ) و مصرف ویژه انرژی الکتریکی (محور راست) با چگالی جریان.

Fig. 9 Variation of electrical power density (W cm^{-2}), theoretical hydrogen production rate (g h^{-1}), and electrical specific energy consumption (kWh kg^{-1}-H_2) with applied current density.

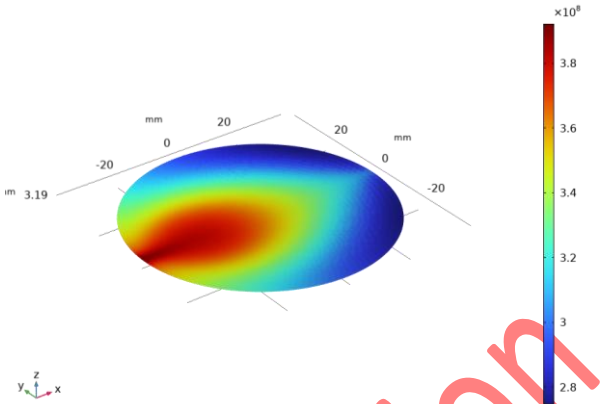
مقدار SEC گزارش‌شده در این پژوهش صرفاً ورودی الکتریکی سلول است و بار حرارتی لازم برای تولید بخار و نگه‌داشت دمای 847 °C را شامل نمی‌شود. این تفکیک برای مقایسه SOEC با الکترولایزرهای دماپایین ضروری است، زیرا مزیت اصلی SOEC دقیقاً در امکان تأمین بخشی از انرژی واکنش به‌صورت حرارتی است [۶ و ۱۰]. در عین حال، ولتاژ حدود 1.23 V و عملکرد نزدیک $0.9\ A\ cm^{-2}$ با محدوده گزارش‌شده برای سلول‌های پیشرفته الکترولیت‌پشتیبان همخوان است [۱۱، ۳۳، ۳۴]. بنابراین افزایش جریان یک مبادله روشن ایجاد می‌کند؛ تولید هیدروژن بیشتر در واحد زمان، در برابر افزایش توان و انرژی الکتریکی ویژه ناشی از رشد تلفات داخلی می‌باشد.

۵- نتیجه‌گیری

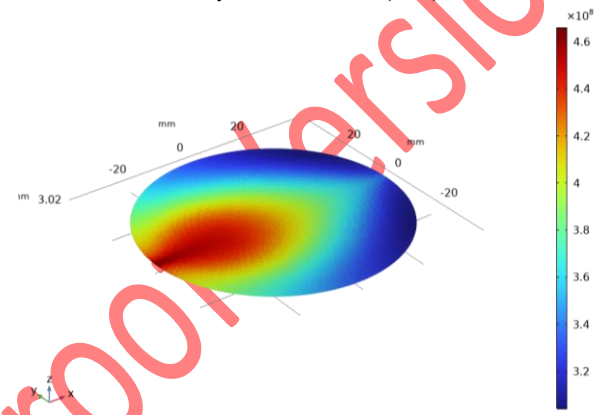
در این پژوهش یک مدل سه‌بعدی چندفیزیکی برای یک SOEC با سطح فعال واقعی $45\ cm^2$ توسعه داده شد که انتقال بار یونی و الکترونی، سینتیک باتلر–ولمر، انتقال چندجزئی Maxwell–Stefan در هر دو سمت و جریان Brinkman در کانال‌ها و الکترودهای متخلخل را به‌صورت کوپل‌شده حل می‌کند. بازسازی هندسه بر اساس اطلاعات منتشرشده از پلتفرم زولیخ/آیفر، امکان بررسی اثرات جریان جانبی، انتقال جرم و توزیع واکنش‌های الکتروشیمیایی را در مقیاس تمام‌سطح یک سلول با سطح فعال $45\ cm^2$ فراهم کرد. در نقطه کاری $0.9\ A\ cm^{-2}$ و 847 °C، ولتاژ مدل 1.23 V و مقدار مرجع تجربی 1.185 V بود که اختلافی نزدیک 4% را نشان می‌دهد. جریان کل 40.5 A با خطای بستار حدود 0.03% در الکترود H_2 و 0.14% در الکترود O_2 بازتولید شد. همچنین باقیمانده موازنه H_2O، H_2، O_2 و N_2 در محدوده 0.24 تا 0.44% و خطای جرم کل در هر دو سمت کمتر از 0.04% بود؛ بنابراین پاسخ نهایی علاوه بر همگرایی عددی، از نظر موازنه‌های انتگرالی نیز سازگار است.

افزایش چگالی جریان موجب مصرف شدیدتر بخار و تولید بیشتر H_2 و O_2 شد. در نقطه نهایی، H_2O خروجی مدل حدود 36.0% در برابر مقدار فارادی 36.8% و O_2 خروجی حدود 34.0% در برابر مقدار فارادی 33.7% بود. میدان‌های سه‌بعدی نشان دادند کسر مولی H_2O در Ni–GDC از 28.5 تا 74.7% و کسر مولی O_2 در LSCF از 20.7 تا 48.2% تغییر می‌کند. این دامنه وسیع نشان می‌دهد عملکرد موضعی الکترودها را نمی‌توان با ترکیب متوسط خوراک یا خروجی به‌تنهایی توصیف کرد.

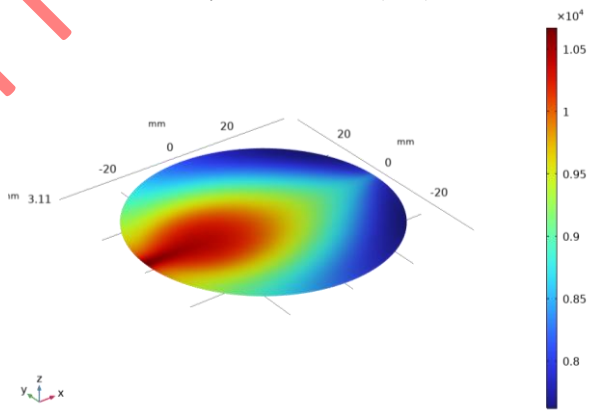
سرعت متوسط گاز در دو سمت H_2/H_2O و O_2/N_2 به‌ترتیب حدود 0.38 و 0.41 $m\ s^{-1}$ بود و بازتوزیع جریان جانبی، الگوی مشخصی از زمان اقامت و انتقال جرم در سطح فعال ایجاد کرد. تفاوت سرعت و زمان اقامت گاز در نواحی مختلف،



a: reaction current density at the H_2 electrode (Am^{-3})



b: reaction current density at the O_2 electrode (Am^{-3})



c: ionic current-density component in the electrolyte (Am^{-2})

شکل ۸ توزیع سه‌بعدی واکنش و جریان در نقطه $0.9\ A\ cm^{-2}$
a چگالی جریان واکنش در الکترود H_2،
b چگالی جریان واکنش در الکترود O_2،
c مؤلفه جریان یونی در الکترولیت.

Fig. 8 Three-dimensional distributions of electrochemical quantities at 0.9 A cm^{-2}: (a) volumetric reaction current density in the Ni–GDC electrode (A m^{-3}), (b) volumetric reaction current density in the LSCF electrode (A m^{-3}), and (c) ionic current-density component in the electrolyte (A m^{-2}).

این توزیع از منظر عملکرد و دوام اهمیت دارد؛ زیرا ناحیه‌ای که سهم بیشتری از جریان کل را حمل می‌کند، همزمان با شار گونه‌ای و اضافه‌پتانسیل بیشتری مواجه است. مطالعات چی و همکاران کاهش سهم جریان پایین‌دست در بهره‌برداری بخار بالا را گزارش کرده‌اند [۲۰] و مدل‌های چندفیزیکی جدید نیز ارتباط میان ناهمگنی جریان، میدان حرارتی و تنش را نشان می‌دهند [۲۱-۲۲].

در پژوهش حاضر، مشاهده مستقیم همزمان میدان گونه و واکنش نشان می‌دهد سرچشمه این ناهمگنی پیش از هر چیز در بازتوزیع جریان گاز و مصرف/تولید موضعی گونه‌ها قرار دارد.

In Press, Pre-Proof Version

همراه با مصرف و تولید موضعی گونه‌ها، موجب شکل‌گیری گرادیان‌های غلظت در سطح الکترودها می‌شود. این تغییرات با تأثیر بر فشار جزئی گونه‌ها، اضافه‌پتانسیل موضعی و شرایط انتقال بار، به توزیع غیریکنواخت واکنش‌های الکتروشیمیایی منجر می‌شوند. بنابراین نتیجه اصلی مدل سه‌بعدی، آشکارکردن ارتباط میان میدان جریان، گرادیان گونه‌ها و تمرکز مکانی واکنش است؛ ارتباطی که از منحنی پلاریزاسیون کلی قابل استنباط نیست.

از منظر عملکرد، در $0.9\ A\ cm^{-2}$ توان الکتریکی $49.9\ W$، نرخ نظری تولید هیدروژن $1.52\ g\ h^{-1}$ و مصرف ویژه انرژی الکتریکی $32.8\ kWh\ kg^{-1}\text{-}H_2$ به‌دست آمد. افزایش جریان نرخ تولید هیدروژن را تقریباً متناسب با جریان افزایش می‌دهد، اما به دلیل رشد ولتاژ و تلفات داخلی، توان و مصرف ویژه انرژی نیز افزایش می‌یابند.

در مجموع، نتایج نشان داد که عملکرد الکتروشیمیایی سلول حاصل برهم‌کنش انتقال جرم، میدان جریان و انتقال بار در سراسر سطح فعال است. سازگاری موازنه‌های انتگرالی و ترکیب خروجی با پیش‌بینی‌های استوکیومتری، در کنار مقایسه عملکرد کلی با نقطه مرجع تجربی، پشتوانه‌ای برای تفسیر نتایج عددی فراهم می‌کند. مدل سه‌بعدی ارائه‌شده امکان بررسی توزیع‌های موضعی و شناسایی نواحی دارای ناهمگنی انتقالی و الکتروشیمیایی را در هندسه مورد مطالعه فراهم می‌سازد.

بیانیه هوش مصنوعی: در تهیه این مقاله از ChatGPT (OpenAI) برای بهبود برخی امور گرافیکی استفاده شده است.

حامی مالی: در تهیه این مقاله از جایی حمایت مالی دریافت نشده است.

نقش نویسندگان: مدل‌سازی، شبیه‌سازی، تحلیل داده‌ها، نگارش، تنظیم و تفسیر نتایج به‌طور کامل توسط نویسنده انجام شده و مسئولیت نهایی محتوای علمی مقاله بر عهده نویسنده است.

تعارض منافع: در این مقاله هیچ تعارض منافعی برای اظهار وجود ندارد.

منابع

[1] M. A. Riaz, P. Trogadas, D. Aymé-Perrot, C. Sachs, N. Dubouis, H. Girault, and M. O. Coppens, “Water electrolysis technologies: the importance of new cell designs and fundamental modelling to guide industrial-scale development,” Energy Environ. Sci., vol. 18, pp. 5190–5214, 2025, doi: 10.1039/D4EE05559D.

[2] A. Vedrtnam, K. Kalauni, and R. Pahwa, “Water electrolysis technologies and their modeling approaches: A comprehensive review,” Eng, vol. 6, no. 4, Art. no. 81, 2025, doi: 10.3390/eng6040081.

[3] S. Sebbahi, A. Assila, A. Alaoui Belghiti, S. Laasri, S. Kaya, E. K. Hlil, S. Rachidi, and A. Hajjaji, “A comprehensive review of recent advances in alkaline water electrolysis for hydrogen production,” Int. J. Hydrogen Energy, vol. 82, pp. 583–599, 2024, doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.07.428.

[4] X. Li, Y. Yao, Y. Tian, J. Jia, W. Ma, X. Yan, and J. Liang, “Recent advances in key components of proton exchange membrane water electrolysers,” Mater. Chem. Front., vol. 8, pp. 2493–2510, 2024, doi: 10.1039/D4QM00086B.

[5] P. Shuhayeu, “Review of AEM electrolysis research from the perspective of developing a reliable model,” Energies, vol. 17, Art. no. 5030, 2024, doi: 10.3390/en17205030.

[6] H. Liu, M. Yu, X. Tong, Q. Wang, and M. Chen, “High temperature solid oxide electrolysis for green hydrogen production,” Chem. Rev., vol. 124, no. 18, pp. 10509–10576, 2024, doi: 10.1021/acs.chemrev.3c00795.

[7] A. Lahrichi, Y. El Issmaeli, S. S. Kalanur, and B. G. Pollet, “Advancements, strategies, and prospects of solid oxide electrolysis cells (SOECs): Towards enhanced performance and large-scale sustainable hydrogen production,” J. Energy Chem., vol. 94, pp. 688–715, 2024, doi: 10.1016/j.jechem.2024.03.020.

[8] Y. Xu, S. Cai, B. Chi, and Z. Tu, “Technological limitations and recent developments in a solid oxide electrolyzer cell: A review,” Int. J. Hydrogen Energy, vol. 50, pp. 548–591, 2024, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.314.

[9] S. Iyer, G. Kaur, N. Haque, and S. Giddey, “Review of experimental and modelling investigations for solid oxide electrolysis technology,” Int. J. Hydrogen Energy, vol. 72, pp. 537–558, 2024, doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.05.312.

[10] A. Hauch, R. Küngas, P. Blennow, A. B. Hansen, J. B. Hansen, B. V. Mathiesen, and M. B. Mogensen, “Recent advances in solid oxide cell technology for electrolysis,” Science, vol. 370, Art. no. eaba6118, 2020, doi: 10.1126/science.aba6118.

[11] S. E. Wolf, F. E. Winterhalder, V. Vibhu, L. G. J. de Haart, O. Guillon, R. A. Eichel, and N. H. Menzler, “Solid oxide electrolysis cells—current material development and industrial application,” J. Mater. Chem. A, vol. 11, pp. 17977–18028, 2023, doi: 10.1039/D3TA02161K.

[12] P. Qiu, C. Li, B. Liu, et al., “Materials of solid oxide electrolysis cells for H_2O and CO_2 electrolysis: A review,” J. Adv. Ceram., vol. 12, no. 8, pp. 1463–1510, 2023, doi: 10.26599/JAC.2023.9220767.

[13] J. Gu, X. Zhang, Y. Zhao, A. Alodhayb, Y. Sun, and Y. Bu, “Advances and challenges in symmetrical solid oxide electrolysis cells: materials development and resource utilization,” Mater. Chem. Front., vol. 7, pp. 3904–3921, 2023, doi: 10.1039/D3QM00410D.

[14] L. A. Jolaoso, I. T. Bello, O. A. Ojelade, A. Yousuf, C. Duan, and P. Kazempoor, “Operational and scaling-up barriers of SOEC and mitigation strategies to boost H_2 production—a comprehensive review,” Int. J. Hydrogen Energy, vol. 48, no. 85, pp. 33017–33041, 2023, doi: 10.1016/j.ijhydene.2023.05.077.

[15] Y. Wang, W. Li, L. Ma, W. Li, and X. Liu, “Degradation of solid oxide electrolysis cells: Phenomena, mechanisms, and emerging mitigation strategies—A review,” J. Mater. Sci. Technol., vol. 55, pp. 35–55, 2020, doi: 10.1016/j.jmst.2019.07.026.

[16] Z. Li, H. Zhang, H. Xu, and J. Xuan, “Advancing the multiscale understanding on solid oxide electrolysis cells via modelling approaches: A review,” Renew. Sustain. Energy Rev., vol. 141, Art. no. 110863, 2021, doi: 10.1016/j.rser.2021.110863.

[17] M. Navasa, C. Graves, C. Chatzichristodoulou, T. L. Skafte, B. Sundén, and H. L. Frandsen, “A three dimensional multiphysics model of a solid oxide electrochemical cell: A tool for understanding degradation,” Int. J. Hydrogen Energy, vol. 43, no. 27, pp. 11913–11931, 2018, doi: 10.1016/j.ijhydene.2018.04.164.

[18] I. Jang, J. C. Alexander, N. M. Farandos, and G. H. Kelsall, “Predicting optimal geometries of 3D-printed solid oxide electrochemical reactors,” Electrochim. Acta, vol. 427, Art. no. 140902, 2022, doi: 10.1016/j.electacta.2022.140902.

[19] J. Zhao, Z. Lin, and M. Zhou, “Three-dimensional modeling and performance study of high temperature solid oxide electrolysis cell with metal foam,” Sustainability, vol. 14, Art. no. 7064, 2022, doi: 10.3390/su14127064.

[20] Y. Chi, K. Yokoo, H. Nakajima, K. Ito, J. Lin, and Y. Song, “Optimizing the homogeneity and efficiency of a solid oxide electrolysis cell based on multiphysics simulation and data-driven surrogate model,” J. Power

In Press, Pre-Proof Version

of solid oxide electrolysis cells: A review," Processes, vol. 13, Art. no. 875, 2025, doi: 10.3390/pr13030875.
[29] H. Salihi, K. Lim, N. Vaz, S. D. Kim, and H. Ju, "A multi-objective optimization framework for functional layer design in solid oxide electrolysis cells," Mater. Des., vol. 257, Art. no. 114486, 2025, doi: 10.1016/j.matdes.2025.114486.
[30] A. Brisse and J. Schefold, "High temperature electrolysis at EIFER, main achievements at cell and stack level," Energy Procedia, vol. 29, pp. 53–63, 2012, doi: 10.1016/j.egypro.2012.09.008.
[31] J. Schefold, A. Brisse, and F. Tietz, "Nine thousand hours of operation of a solid oxide cell in steam electrolysis mode," J. Electrochem. Soc., vol. 159, pp. A137–A144, 2012, doi: 10.1149/2.076202jes.
[32] F. Tietz, D. Sebold, A. Brisse, and J. Schefold, "Degradation phenomena in a solid oxide electrolysis cell after 9000 h of operation," J. Power Sources, vol. 223, pp. 129–135, 2013, doi: 10.1016/j.jpowsour.2012.09.061.
[33] J. Schefold, A. Brisse, and H. Poepke, "Long-term steam electrolysis with electrolyte-supported solid oxide cells," Electrochim. Acta, vol. 179, pp. 161–168, 2015, doi: 10.1016/j.electacta.2015.04.141.
[34] J. Schefold, A. Brisse, and H. Poepke, "23,000 h steam electrolysis with an electrolyte supported solid oxide cell," Int. J. Hydrogen Energy, vol. 42, no. 19, pp. 13415–13426, 2017, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.01.072.
[35] B. Alizadeh Kharkeshi, "Multi-criteria analysis and optimization of a combined solid oxide fuel cell–supercritical CO_2 Brayton–organic Rankine cycle system," Modares Mechanical Engineering, vol. 26, no. 2, p. 91, 2026, doi: 10.48311/mme.2025.117243.82874.
[36] M. Taraghi, E. Yazdi, and M. Moghimi, "Multi-objective optimization of a vanadium chloride thermochemical cycle integrated with solar power plant for hydrogen production," Modares Mechanical Engineering, vol. 26, no. 4, p. 253, 2026, doi: 10.48311/mme.2025.96890.0.
Sources, vol. 562, Art. no. 232760, 2023, doi: 10.1016/j.jpowsour.2023.232760.
[21] K. Lim, Y. Kim, H. Salihi, and H. Ju, "Integrated modeling of electrochemical, thermal, and structural behavior in solid oxide electrolysis cells," Int. J. Heat Mass Transf., vol. 224, Art. no. 125235, 2024, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2024.125235.
[22] Y. Tu, J. Chai, S. Li, F. Han, Z. Zhang, and W. Cai, "The study of multiphysics field coupling and thermal stress in three types of solid oxide electrolysis cells (SOEC)," Int. J. Electrochem. Sci., vol. 19, Art. no. 100789, 2024, doi: 10.1016/j.ijoes.2024.100789.
[23] M. Zhang, E. Wang, H. Hu, M. Ouyang, H. Wang, and L. Lu, "3D simulation and performance analysis of a metal-supported solid oxide electrolysis cell," Trans. Beijing Inst. Technol., vol. 44, no. 1, pp. 69–75, 2024, doi: 10.15918/j.tbit1001-0645.2023.049.
[24] Z. Jiao, Y. Su, W. Yang, J. Zhou, J. Zhang, X. Tong, Y. Shang, and M. Chen, "Integrated 3D modeling unravels the measures to mitigate nickel migration in solid oxide fuel/electrolysis cells," J. Mater. Chem. A, vol. 12, pp. 162–173, 2024, doi: 10.1039/D3TA06563D.
[25] H. Choi, J. Shin, C. Yeon, et al., "Unveiling the high-temperature degradation mechanism of solid oxide electrolysis cells through direct imaging of nanoscale interfacial phenomena," Energy Environ. Sci., vol. 17, pp. 5410–5420, 2024, doi: 10.1039/D4EE00896K.
[26] C. G. Chen, C. Xu, P. F. Sui, G. Deng, Y. C. Wang, J. Mei, E. Zhang, Y. Zhang, and J. Luo, "Recent advances in solid oxide electrolysis cells for solar energy conversion," Electrochem. Energy Rev., vol. 8, Art. no. 11, 2025, doi: 10.1007/s41918-025-00246-z.
[27] G. Fan, H. Chen, T. Wu, L. Wang, and X. Xu, "Towards longevity in solid oxide electrolysis cells: multi-scale modeling and machine learning for degradation diagnosis and mitigation," J. Mater. Chem. A, vol. 13, pp. 26899–26935, 2025, doi: 10.1039/D5TA03711E.
[28] M. Makki Abadi and M. M. Rashidi, "Machine learning for the optimization and performance prediction

In Press, Pre-Proof Version