



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

مجید کامور¹، مجید قاسمی^{2*}

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

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

* صندوق پستی 19395-1999، تهران، ghasemi@kntu.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 04 مهر 1395

پذیرش: 03 آبان 1395

ارائه در سایت: 15 دی 1395

کلید واژگان:

پیل سوختی اکسید جامد

تک محفظه‌ای

متان

روش المان محدود

چکیده

در مطالعه حاضر عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک‌محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای با مخلوط متان-اکسیژن-نیتروژن تحت شرایط پایا بصورت عددی بررسی می‌شود. هندسه پیل دو بعدی در نظر گرفته می‌شود و ناحیه محاسباتی از محفظه گازی، الکترود آند، الکترود کاتد و الکترولیت تشکیل می‌شود. مخلوط اکسیژن-متان-نیتروژن به ترتیب با کسر جرمی اولیه 0.07، 0.14 و 0.77 به سمت پیل تغذیه می‌شود. تمامی خواص فیزیکی تابع دما در نظر گرفته می‌شود. معادلات غیرخطی کاملاً کوپل شده حاکم شامل معادلات بقاء جرم، اندازه حرکت، گونه شیمیایی و بار الکتریکی و یونی می‌باشد که در یک نرم‌افزار تجارتي فرمول‌بندی شده و با استفاده از روش المان محدود حل می‌شوند. جهت نشان دادن صحت مدل، نتایج حاصل از مدل با نتایج یک مدل عددی مشابه مقایسه می‌گردد. در پایان تحلیل عملکرد پیل شامل توزیع سرعت، دما و غلظت تمامی گونه‌های گازی مورد بحث قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که ماکزیمم دما در سمت الکترود آند اتفاق می‌افتد که دلیل آن واکنش اکسایش متان است که به شدت گرماده می‌باشد. این مقدار افزایش دما ایجاد شده در پیل مزیتی می‌باشد تا دمای کاری پیل پایین‌تر آید. به علاوه، نشان داده می‌شود که بخش زیادی از هیدروژن به صورت مصرف نشده از محفظه خارج می‌شود که یکی از عوامل اصلی کاهش عملکرد در این نوع از پیل می‌باشد.

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

Majid Kamvar, Majid Ghassemi*

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

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

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 25 September 2016
Accepted 23 November 2016
Available Online 04 January 2017

Keywords:
Solid oxide fuel cell
Single chamber
Methane
Finite element method

ABSTRACT

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

1- مقدمه

گاز را به دنبال دارد. نشستی گاز مانع اصلی پیل‌های سوختی اکسید جامد برای تجارتي کردن آن‌ها می‌باشد [5,4,2]. یک پیشنهاد برای مقابله با این مشکلات استفاده از پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای¹ می‌باشد که در آن مخلوطی از سوخت و اکسند به‌طور مستقیم به پیل تغذیه می‌شود [5]. هدف بسیاری از تحقیقات انجام شده در حوزه پیل‌های سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای بهبود عملکرد آن می‌باشد. تا به امروز، اکثر تحقیقات

پیل‌های سوختی بطور مستقیم الکتریسیته را از منبع خارجی سوخت و اکسند تولید می‌کنند [1]. از میان انواع پیل‌های سوختی موجود، پیل‌های سوختی اکسید جامد به دلیل بازدهی بالای آن‌ها و تنوع در انتخاب سوخت توجه بیشتری را به خود جلب کرده است [2-9]. همان‌طور که می‌دانیم، پیل‌های سوختی اکسید جامد در محدوده دمای بالا (700-1000°C) کار می‌کنند که این محدوده دمایی بالا مشکلاتی از جمله فرسایش مواد و نشستی

¹ Single Chamber Solid Oxide Fuel Cell (SCSOFC)

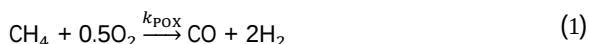
در مطالعات قبلی نشان داده شده است که احتمال وجود واکنش‌های الکتروشیمیایی تا عمق پنجاه میکرون از سطح مشترک الکتروکاتولیت وجود دارد که لایه کاتالیستی³ نام دارد [20]. از آنجا که در مطالعه حاضر ضخامت الکترودها کمتر از 50 میکرون می‌باشد لذا پیل موردنظر از سه لایه تشکیل شده است: لایه کاتالیستی الکتروکاتولیت-لایه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

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

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

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

- اکسایش جزئی⁷ متان در الکتروکاتود:



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

- رفرمینگ بخار⁸ در الکتروکاتود:



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

- انتقال آب-گاز⁹ در الکتروکاتود:

جدول 1 داده‌های هندسی

Table 1 Geometrical data

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

³ Catalyst layer

⁴ YSZ

⁵ LSM

⁶ Selective

⁷ Partial oxidation

⁸ Steam reforming

⁹ Water-gas shift

محدود به مطالعات آزمایشگاهی پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای می‌باشد که این مطالعات تنها اطلاعاتی از عملکرد کلی پیل فراهم می‌کند و دسترسی به اطلاعات جزئی اجزاء پیل مانند غلظت گونه‌های شیمیایی و گرادیان دما در مقاطع مختلف پیل میسر نمی‌کند [2, 4, 7, 10-17]. مطالعات عددی انجام گرفته در این حوزه اندک می‌باشد و نیاز به ارائه یک مدل جامع عددی در این حوزه ضروری می‌باشد.

چانگ و همکارانش [3] در سال 2006 عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای از نوع هم‌صفحه‌ای مورد بررسی قرار دادند. دمای پیل 773K ثابت فرض شد و حل معادلات شامل معادله حرکت سیال (ناویراستوکس)، معادلات نفوذ اجزاء درون الکترودهای متخلخل با استفاده از نرم‌افزار فمبل¹ حل شد. تأثیرات ضخامت الکترولیت و همچنین فاصله بین الکترودهای کاتد و آنود از هم و در نهایت جهت جریان مخلوط بر روی عملکرد پیل مورد بررسی قرار گرفت. آن‌ها نشان دادند زمانی که فاصله بین الکترودها از هم کمتر باشد و ضخامت الکترولیت نیز بیشتر باشد در این صورت عملکرد پیل بهتر خواهد بود. نکته قابل توجه ترکیب مخلوط در نظر گرفته شده می‌باشد که آن‌ها از مخلوط اکسیژن و هیدروژن استفاده کردند بدون این‌که ایمنی مخلوط بررسی شود که آیا انفجاری ممکن است با این مخلوط رخ دهد یا خیر. آن‌ها دریافتند هنگامی که جریان مخلوط بصورت عمود بر محور الکتروکاتود و زمانی که ابتدا به الکتروکاتود می‌رسد عملکرد پیل بهتر است و این به دلیل کم شدن تلفات غلظت می‌باشد.

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

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

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

2- تعریف مسئله

"شکل 1" نمای شماتیکی از مسئله را نشان می‌دهد. مطابق شکل مخلوطی از متان و اکسیژن به سمت یک پیل سوختی اکسید جامد تک محفظه‌ای جریان می‌یابد که این مخلوط با نیتروژن به‌عنوان یک گاز حامل رقیق شده است. همان‌طور که نشان داده شده است مجموعه الکترودهای مثبت و منفی و الکترولیت² در وسط یک محفظه گازی قرار گرفته است.

¹ FEMLAB

² Positive electrode/Electrolyte/Negative electrode (PEN)

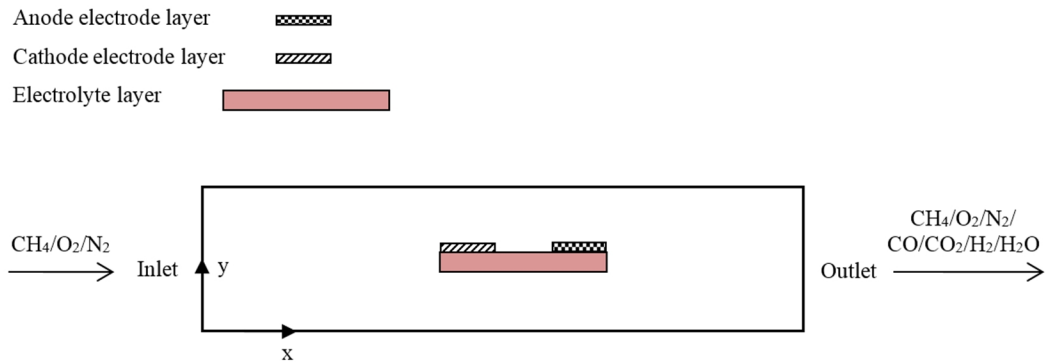


Fig. 1 Schematic of problem

شکل 1 نمای شماتیکی از مسئله

2-2- بقای گونه‌های گازی

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

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

که در آن j_i بردار شار جرمی نسبی، ω_i کسر جرمی و R_i عبارت چشمه یا چاه مربوط به تولید یا مصرف جزء i ام می‌باشد. با استفاده از روابط استفان ماکسول¹ برای سیستم‌های چندجزئی، عبارت بردار شار جرمی به صورت معادله (10) می‌تواند نوشته شود [21]:

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

که در آن d_k نیروی محرک برای نفوذ جزء k ام در یک مخلوط ایده‌آل می‌باشد و D_{ik} ضریب نفوذ فیک² در سیستم چند جزئی می‌باشد و مقدار آن با استفاده از رابطه (11) تعیین می‌شود [21]:

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

که در آن T دما، M جرم مولکولی گاز، σ و Ω به ترتیب مشخصه طولی³ برحسب آنگسترم و انتگرال برخورد نفوذی⁴ می‌باشد که نحوه محاسبه آن‌ها در مرجع [21] تشریح شده است. جهت به حساب آوردن مقاومت انتقال جرم در الکترودهای متخلخل و همچنین تأثیر برخورد مولکول‌ها به جداره دیواره‌ها ضریب نفوذ فیک با رابطه (12) اصلاح می‌شود [19]:

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

که در آن $D_{DGM,ik}^{eff}$ ضریب نفوذ مؤثر مدل گاز-داستی⁵، ε میزان انحناء و $D_{KN,ik}$ ضریب نفوذ نادسن⁶ می‌باشد. از رابطه تجربی برای محاسبه ضریب نفوذ نادسن در معادله (13) استفاده می‌شود [19]:

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

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



که در آن k_{shift} سرعت نرخ واکنش انتقال آب-گاز می‌باشد.

• واکنش اکسایش هیدروژن در الکتروکاتود:



• واکنش کاهش اکسیژن در الکتروکاتود:



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

1-2- بقای جرم و اندازه حرکت خطی

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

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

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

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

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

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

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

¹ Maxwell-Stefan

² Fick's diffusivity

³ Characteristic length

⁴ Collision diffusion integral

⁵ Dusty Gas Model (DGM)

⁶ Knudsen diffusivity

3-2- بقای بار

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

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

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

که در آن $\phi_{el(io)}$ رسانایی الکتریکی (یونی) و پتانسیل الکتریکی (یونی) می‌باشد. j_{io} و j_{el} چشمه یا چاه مربوط به تولید یا مصرف به ترتیب الکترون و یون می‌باشد. مطابق واکنش‌های الکتروشیمیایی (4) و (5) تولید و یا مصرف بارهای الکترونی و یونی در لایه‌های کاتالیستی آند و کاتد اتفاق می‌افتد که مقادیر آن‌ها با استفاده از معادله بالتر-ولمر¹ به ترتیب در معادلات (16) و (17) فرمول‌بندی می‌شود:

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

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

که در آن A مساحت سطح مؤثر الکتروشیمیایی بر واحد حجم الکتروشیمیایی $J_{0,ref}^{H_2}$ و $J_{0,ref}^{O_2}$ به ترتیب چگالی جریان‌های انتقالی مرجع برای الکتروشیمیایی آند و کاتد می‌باشد. γ_{H_2} و γ_{O_2} به ترتیب مرتبه واکنش برای اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن در غلظت‌های مرجع $C_{H_2,ref}$ و $C_{O_2,ref}$ می‌باشد. α ضریب انتقال بار می‌باشد که مقدار آن بین صفر تا یک می‌باشد و F ثابت فارادی می‌باشد که برابر 96487 C/mol است. زیرنویس‌های a و c به ترتیب اشاره به الکتروشیمیایی آند و کاتد دارد. η_{act} اضافه ولتاژ فعالسازی می‌باشد که مقدار آن در سمت الکتروشیمیایی آند و کاتد به ترتیب با استفاده از رابطه‌های (18) و (19) محاسبه می‌شود:

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

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

که در آن V_{oc} ولتاژ مدار باز پیل می‌باشد که به شدت تابع دمای کاری پیل می‌باشد و مقدار آن با استفاده از رابطه (20) به دست می‌آید [22]:

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

4-2- بقای انرژی

معادله بقای انرژی حاکم بر کل ناحیه بصورت معادله (21) نوشته می‌شود [19]:

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

که در آن C_p گرمای ویژه، k ضریب هدایت حرارتی و Q عبارت چشمه انرژی می‌باشد که به واسطه هریک از واکنش‌های (1) تا (5) درون پیل ایجاد می‌شود. جهت نحوه فرمول‌بندی این عبارت‌ها خواننده به مراجع [19,18,10,8] ارجاع داده می‌شوند. به منظور لحاظ کردن اثر انتقال حرارت درون الکتروشیمیایی متخلخل از روابط اصلاحی (22) و (23) به ترتیب برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه مؤثر در واحد حجم الکتروشیمیایی $(\rho C_p)_{eff}$ و ضریب رسانش

حرارتی مؤثر (k_{eff}) استفاده می‌شود [19]:

$$(\rho C_p)_{eff} = \epsilon (\rho C_p)_f + (1 - \epsilon) (\rho C_p)_s \quad (22)$$

$$k_{eff} = \epsilon k_f + (1 - \epsilon) k_s \quad (23)$$

که در آن‌ها اندیس‌های f و s به ترتیب اشاره بر فاز سیال و جامد دارد.

5-2- شرایط مرزی

در ورودی محفظه سرعت، فشار، دما و همچنین کسر جرمی گونه‌های گازی معلوم می‌باشد. روی دیواره‌های محفظه شرط مرزی عدم لغزش حاکم بوده و دما روی این مرز با دمای ورودی ثابت فرض می‌شود. از آن‌جا که امکان نفوذ گونه‌های گازی در دیواره محفظه وجود ندارد شرط مرزی عایق برای فیزیک انتقال جرم اعمال می‌شود. همان‌طور که فرض شد الکتروولت یک ماده جامد غیرقابل نفوذ می‌باشد که در برابر انتقال الکترون عایق می‌باشد لذا شرط مرزی عایق برای فیزیک‌های انتقال جرم و الکترون به ترتیب روی تمامی مرزهای الکتروولت و روی مرزهای سطح مشترک الکتروولت و الکتروشیمیایی حاکم می‌باشد. همانند دیواره‌های محفظه، در مرزهای الکتروولت نیز شرط مرزی عدم لغزش صادق است. جهت ایجاد جریان الکترون از سمت الکتروشیمیایی کاتد به سمت الکتروشیمیایی آند، مقدار ولتاژ کاری پیل روی مرز بالای الکتروشیمیایی کاتد و مقدار ولتاژ صفر روی مرز بالای الکتروشیمیایی آند اعمال می‌شود. شرط مرزی پیوستگی برای مابقی مرزها حاکم است.

3- فرایند حل عددی

تمامی معادلات حاکم غیرخطی شامل معادلات بقای جرم، اندازه حرکت خطی، گونه‌های شیمیایی، انرژی و بارهای الکترونی و یونی در محیط نرم‌افزار کامسول 4.4 فرمول‌بندی می‌شود که یک نرم‌افزار تجارتي می‌باشد که از روش المان محدود برای حل معادلات مولتی فیزیک کاملاً کوپل شده با یکدیگر مورد استفاده قرار می‌گیرد. نوع مش‌بندی به صورت مثلثی انتخاب می‌شود به طوری که توزیع مش به نحوی می‌باشد که در لایه‌های کاتالیستی که بیشترین حجم محاسبات در آن وجود دارد تعداد المان‌های بیشتری در این نواحی وجود داشته باشد. تعداد کل مش‌ها برابر 9620 می‌باشد. به منظور مهار عدم همگرایی حل نهایی، دسته معادلات در چهار مرحله حل می‌شود. ابتدا معادلات انرژی و بقای بار الکتریکی و یونی، مرحله دوم معادلات بقای جرم و اندازه حرکت خطی، مرحله سوم معادلات بقای جرم و اندازه حرکت خطی به همراه بقای گونه شیمیایی و در انتها تمامی دسته معادلات با هم حل می‌شود. فرایند حل به این صورت می‌باشد که نتایج حاصل از حل در هر مرحله ذخیره شده و در مرحله بعدی به عنوان شرط اولیه لحاظ می‌شود. همچنین به منظور بهبود دقت نتایج از المان‌های مرتبه دوم برای کسر جرمی گونه‌ها انتخاب می‌شود. برای مابقی متغیرها از المان‌های خطی استفاده می‌شود. میزان خطای نصبی برای تمامی مراحل حل برابر 10^{-6} در نظر گرفته می‌شود.

4- بحث و نتایج

1-4- اعتبارسنجی

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

¹ Butler-Volmer equation

جدول 2 پارامترهای ورودی

Table 2 Input parameters

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

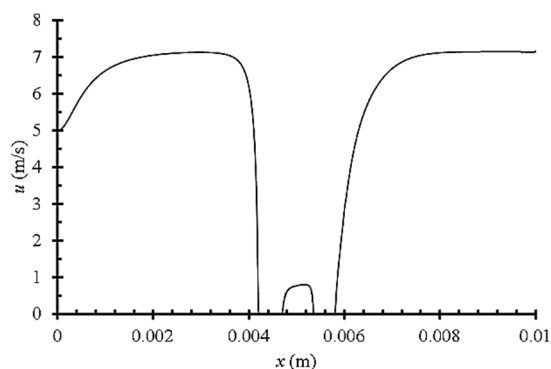


Fig. 3 Velocity distribution

شکل 3 توزیع سرعت

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

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

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

4-2- تحلیل عملکرد پیل

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

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

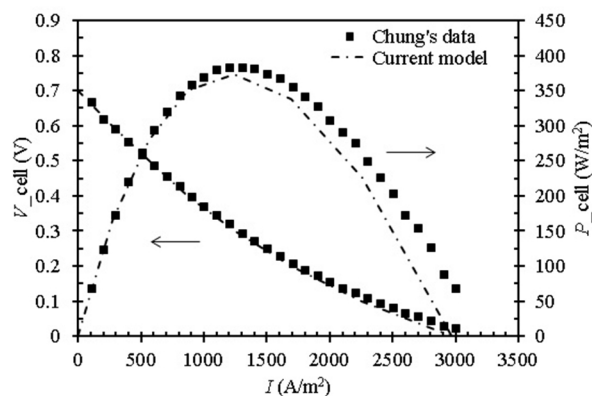


Fig. 2 The current model accuracy compared to Chung's data

شکل 2 دقت مدل حاضر در مقایسه با داده‌های چانگ

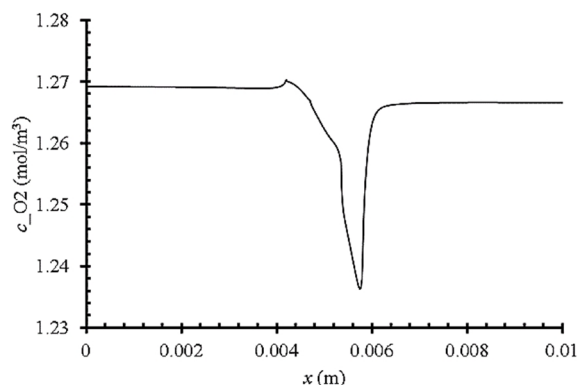


Fig. 6 Oxygen concentration distribution

شکل 6 توزیع غلظت اکسیژن

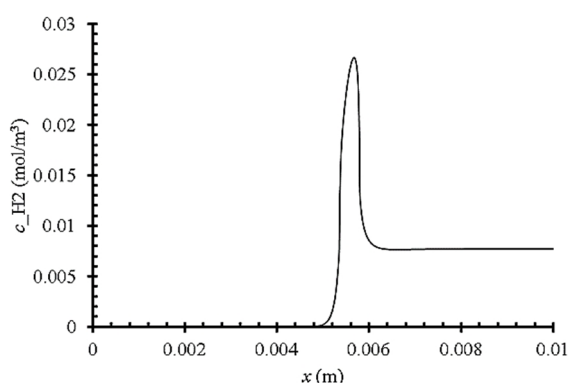


Fig. 7 Hydrogen concentration distribution

شکل 7 توزیع غلظت هیدروژن

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

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

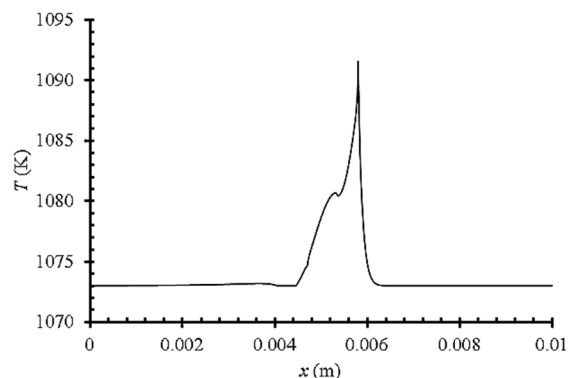


Fig. 4 Temperature distribution

شکل 4 توزیع دما

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

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

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

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

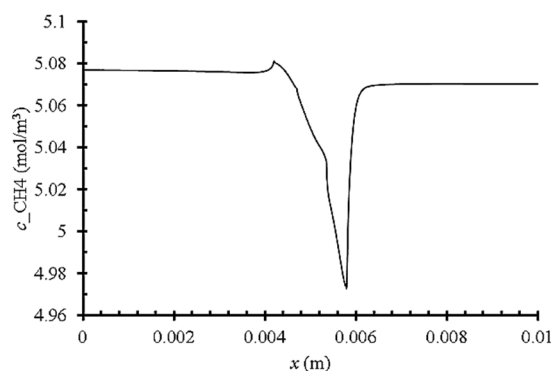


Fig. 5 Methane concentration distribution

شکل 5 توزیع غلظت متان

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

6- فهرست علائم

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

علائم یونانی

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

بالانویس‌ها

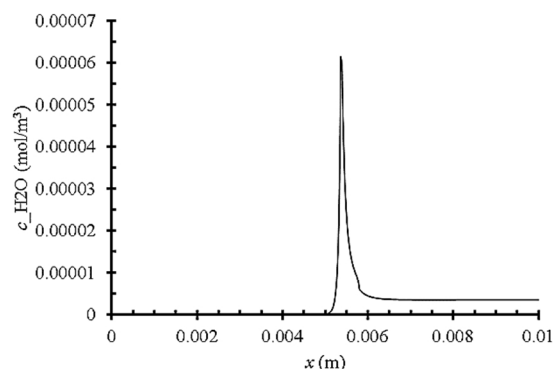


Fig. 8 Water concentration distribution

شکل 8 توزیع غلظت آب

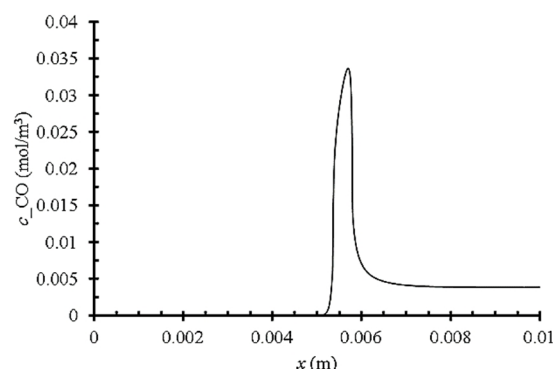


Fig. 9 Carbon monoxide concentration distribution

شکل 9 توزیع غلظت مونوکسید کربن

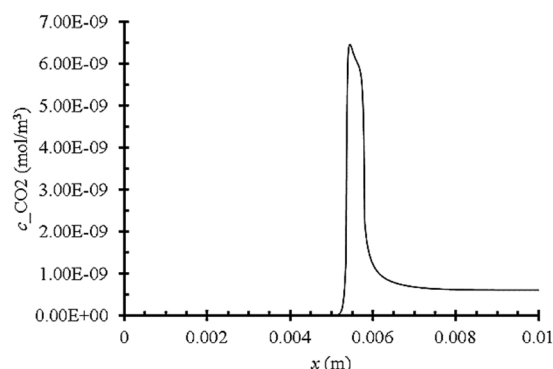


Fig. 10 Carbon dioxide concentration distribution

شکل 10 توزیع غلظت دی اکسید کربن

5- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

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

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

eff موثر

زیر نویس‌ها

a الکتروود آند

act فعالسازی

c الکتروود کاتد

DGM مدل گاز-داستی

e الکتروولیت

eff موثر

el الکتريکی

f سیال

io یونی

KN نادرین

OC مدار باز

ref مرجع

s جامد

7-مراجع

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