

شبیه‌سازی عددی پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای با نرم افزارهای فلوئنت و کامسول مولتی فیزیک و مقایسه نتایج

جاماسب پیرکندي*

ابراهيم افشاري

عباس طربى

چکیده

در این تحقیق برای دستیابی به کارکرد مؤثر از لحاظ طراحی و جنبه ترکیبی گرمایی و الکتروشیمیایی، مدل‌سازی پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای انجام شده است. برای ایجاد مدلی که یک تحلیل سه بعدی و کامل گرمایی و الکتروشیمیایی از جریان سیال ارائه دهد، از نرم افزار FLUENT استفاده شده و کارایی مدل در شرایط متفاوت برای دمای کاری، ضخامت الکتروولیت و مقدار تخلخل الکترودها مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده از این تحقیق با نتایج کارهای مشابه سایر مقالات مقایسه و تأیید شد که می‌توان از این مدل به عنوان مدل پایه‌ای برای تحقیقات آتی پیامون پیلهای سوختی اکسید جامد استفاده کرد. در ادامه تحقیق برای اعتبارسنجی نتایج عددی به دست آمده از نرم افزار فلوئنت (بر مبنای حجم محدود)، از یک نرم افزار دیگر تحت عنوان Comsol Multi Physics (بر مبنای المان محدود) استفاده شد. نتایج به دست آمده از دو نرم افزار اختلافی کمتر از ۶ درصد برای چگالی توان و کمتر از ۷ درصد برای ولتاژ خروجی نشان می‌دهند.

واژه‌های کلیدی: پیل سوختی اکسید جامد، شبیه‌سازی عددی، فلوئنت، کامسول مولتی فیزیک.

Numerical Simulation of a Tubular Solid Oxide Fuel Cell with FLUENT and Comparison the Results with COMSOL Multiphysics

J. Pirkandi

Department of Aerospace Engineering, Malek-Ashtar University of Technology, Tehran, Iran

E. Afshari

Department of Mechanical Engineering, University of Isfahan, Isfahan, Iran

A. Tarabi

Department of Aerospace Engineering, Malek-Ashtar University of Technology, Tehran, Iran

Abstract

In an attempt to achieve efficient operation with respect to design and combined thermal and electrochemical perspective, a computational model of tubular SOFC is presented. The FLUENT software was used for the development of the model. The particular model, after validation against experimental observations for selected benchmark cases, was demonstrated to be a basic model for further research in this area. For validation of obtained result, i.e. COMSOL Multiphysics, was used which is based on Finite Element Method (FEM). The results showed that the difference of them is less than of 6% for power density and less than 7% for output voltage and so both software are acceptable.

Keywords: Solid Oxide Fuel Cell, Numerical Simulation, COMSOL Multiphysics, FLUENT.

جمله بازدهی بالای انرژی، آلایندگی کمتر، امکان مصرف سوخت‌های مختلف و کاربرد در تولید همزمان برق و گرمایی به عنوان دستگاه‌های تبدیل انرژی امیدبخش مورد توجه قرار گرفته‌اند. پیلهای سوختی اکسید جامد در دماهای بالا در بازه 600°C تا 1000°C کار می‌کنند [۲]. دمای کاری بالا امکان تولید همزمان هیدروژن از سوخت‌های هیدروکربنی را در پیل سوختی اکسید جامد ممکن می‌سازد که در دیگر انواع پیلهای سوختی امکان‌پذیر نیست. همچنین این پیل، تولید بخار کیفیت بالا را تسهیل می‌کند که کاربردهای مختلفی دارد. نخستین مدل پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای توسط بست و همکاران [۳] ارائه شد که عوامل الکتروشیمیایی و گرمایی را در پیل لوله‌ای مشابه طراحی و ستینگ‌های سیمی در نظر می‌گرفت. در این تحقیق داده‌های مورد نیاز برای تحلیل یا از معادلات اساسی به دست آمدند و یا به صورت مستقل اندازه‌گیری شدند تا از هر اشتباہی در ارزیابی جلوگیری شود. اختر و همکاران کارآیی هیدرودینامیکی و الکتروشیمیایی پیل سوختی اکسید جامد را بررسی

۱- مقدمه

در سال‌های اخیر، انرژی به مهمترین و چالش برانگیزترین موضوع تبدیل شده و برای توسعه روش‌های نوین و ارتقاء یافته تولید انرژی تلاش‌های بسیاری صورت گرفته است. منابع مختلف انرژی، چه تجدیدپذیر و چه تجدیدناپذیر، در صنعت برق مورد استفاده قرار گرفته‌اند اما به علت محدودیت و کمبود منابع تجدیدپذیر همچون سوخت‌های فسیلی و عوارض جانی آنها مثل تولید گازهای آلایندگ، در سال‌های اخیر تمرکز بیشتری بر روی تولید الکتریسیته با استفاده از منابع تجدیدپذیر صورت پذیرفته است. به همین دلیل، پیلهای سوختی همراه با دیگر منابع انرژی تجدیدپذیر، همچون انرژی باد، خورشید که می‌توانند منابع کارآمد و پاک برای تولید انرژی الکتریکی باشند، مورد توجه قرار گرفته‌اند. ابتدای تاریخ پیل سوختی به قرن نوزدهم میلادی بر می‌گردد، وقتی که سر ویلیام گراو کشف کرد که امکان تولید الکتریسیته با معکوس کردن فرآیند الکتروولیز آب وجود دارد [۱]. پیلهای سوختی اکسید جامد به علت مزایای بالقوه‌شان، از

* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: jpirkandi@mut.ac.ir

تاریخ دریافت: ۹۴/۱۰/۰۸

تاریخ پذیرش: ۹۴/۱۲/۱۵

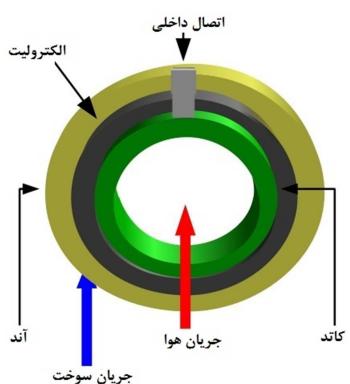
در این مقاله هدف آن است که علاوه بر به دست آوردن اطلاعاتی در مورد ویژگی‌های ساختار پیل سوختی با استفاده از مدل‌سازی عددی، عملکرد نرم‌افزار FLUENT نسخه ۶.۳.۲ و Comsol که اولی بر پایه روش حجم محدود و دومی براساس روش المان محدود می‌باشد، مورد مقایسه قرار گیرد تا مزایا و معایب هر یک معین شود. مهم‌ترین ویژگی‌های نرم‌افزار Comsol شامل مدل‌سازی پدیده‌های چندفیزیکی، مدل‌سازی شبکه‌بندی‌های درشت، گرافیکی بودن و استفاده آسان از آن و پردازش و ارائه نتایج آسان‌تر است. در مقابل معایب آن شامل عدم مدل‌سازی مناسب جریان مغشوش و سرعت کم پردازش به دلیل کوپلینگ بالای بین معادلات در مسائل ساده می‌شود. مهم‌ترین ویژگی‌های نرم‌افزار FLUENT سرعت بالای پردازش، قابلیت اطمینان بالا، مدل‌سازی بسیار خوب جریان مغشوش است و در مقابل معایب آن شامل ضعف در مدل‌سازی پدیده پخش، استفاده از نرم‌افزارهای جانبی دیگر برای شبکه‌بندی و پردازش نتایج می‌باشد [۵].

۲- مدل‌سازی پیل سوختی

هنده‌سه لوله‌ای استفاده شده در شکل ۱ نشان داده شده و ابعاد آن در جدول ۱ آورده شده است. در این طراحی ورودی‌ها برای کanal‌های سوخت و هوا در یک سمت بوده و جریان به صورت موازی است.

جدول ۱- ابعاد هندسی مدل [۵]

بعاد (mm)	ناحیه
۴	قطر داخلی کاتد
۶	قطر خارجی کاتد
۷	قطر خارجی آند
۸	قطر خارجی پیل
۰.۰۴	ضخامت الکتروولیت
۵۰۰	طول پیل سوختی



شکل ۱- سطح مقطع پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای

جمع‌کننده‌های جریان بلوك‌های رسانای جامدند که به دو الکترود متصل شده‌اند تا ارتباط الکتریکی میان آن‌ها را فراهم کنند. جنس الکتروولیت جامد، یعنی نامتخلفل و دارای رسانش یونی بالا است. الکترودها سرامیک‌های جامد متخلفل هستند و لایه‌های میانی آنها به صورت یک جفت سطح دیواره و دیوار سایه مدل شدند.

فرض‌های مدل‌سازی برای حل معادلات حاکم عبارتند از [۴]:

نمودند [۴]. فنگ و همکاران [۵] مدل گذراي یک بعدی پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای را ارائه کردند که با ثبت رفتار دینامیکی مشخصات الکتریکی و دما در شرایط باری متغیر، خواص ترمولکتریکی را در نظر می‌گرفت. در این تحقیق سه مورد شرایط گذراي راه اندازی، کاهش مقاومت بار و کاهش جریان هوا برای بررسی رفتار دینامیکی انباره‌های پیل سوختی اکسیدجامد در نظر گرفته شد. آبورا و کامپاناری [۶] مدل حجم محدودی از تک پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای ایجاد کردند و تحلیل حساسیتی انجام دادند که همه تحلیل‌های گرمایی و الکتروشیمیایی از جمله فرآیندهای تبادل گرما و موارد بهسازی داخلی را در نظر می‌گیرد. مدل دو بعدی از پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای کاتد پایه برای در نظر گرفتن خواص گرمایی و الکتروشیمیایی پیل سوختی توسط سوان ورنگ‌کول و همکاران ارائه شد [۷]. این مدل در کار پژوهشی دیگری برای پیش‌بینی اثر ترکیب سوخت گاز سنتز به دست آمده از زیست‌توده بر عملکرد و رفتار پیل نیز به کار رفت [۸]. یک تحلیل عددی گزرا توسط مولایی و همکاران [۹] انجام شد که اثرات انتقال گرما و جرم را با یکدیگر همراه می‌کرد، این کار در مقایسه با مدل‌های یک بعدی نتایج واقعی‌تری به دست داد و علت آن هم در نظر گرفتن گرادیان‌های متغیر حالت در جهت شعاعی بود. در این تحقیق مشاهده شد که ۸۲٪ از تغییرات پارامترهای برقی فوراً پس از تغییر بار و ۱۸٪ بقیه تغییرات، در زمانی طولانی پس از رسیدن به حالت پایدار رخ می‌دهند. استیلر و همکاران [۱۰] مدل‌های حالت پایا هم برای پیل‌های صفحه‌ای و هم برای پیل‌های لوله‌ای با سوخت پیش آمده شده متن ارائه کردند تا کارایی چرخه هیبرید انباره‌های پیل سوختی اکسیدجامد را مطالعه کنند. در کار آنها مشاهده شد که هوا پیش گرم شده از داخل در مورد پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای در بهبود بازده چرخه هیبرید توربین گازی سودمند است. به گونه‌ای که بازده سیستم هیبریدی با استفاده از هر دو هندسه صفحه‌ای و لوله‌ای بیش از ۶۵٪ به دست آمد.

بسته‌های نرم‌افزاری محاسباتی در مدل‌سازی پیل سوختی اکسیدجامد سهم به سزاوی داشته و برای صرفه‌جویی در وقت لازم هستند. تاکنون بسته‌های نرم‌افزاری محاسباتی تجاری همچون Comsol Multi Physics و FLUENT پیل سوختی به کار رفته‌اند. آتسیسر و همکاران [۱۱] با استفاده از FLUENT، ابزار شبیه‌سازی سه بعدی ساختند که انتقال گرمای تابشی را نیز در یک تک پیل در نظر می‌گیرد. ونگ و پاساگولاری [۱۲] با شبیه‌سازی پیل سوختی اکسید جامد در نرم افزار FLUENT ازتابع تعریف شده توسط کاربر استفاده کردند که برای مدل‌سازی واکنش‌های الکتروشیمیایی پیل سوختی اکسیدجامد نوشته شده است. در سال ۲۰۱۰ میلادی نیز اسلیتی و همکاران [۱۳] عملکرد پیل سوختی اکسیدجامد لوله‌ای در دماهای پایین تر و تخلخل کاتد را با استفاده از مژویل پیل سوختی اکسیدجامد در FLUENT تحلیل کردند که این مدل به طراحی شرکت وستینگهاس شبیه است. اختر و همکاران [۴] مدل عددی و سه بعدی با استفاده از Comsol Multi Physics برای طراحی تکاتاکی ارائه کردند که از مخلوط هیدروژن-اکسیژن رقیق شده با نیتروژن برای پیش‌بینی کارآیی هیدرودینامیکی و الکتروشیمیایی پیل سوختی اکسید جامد استفاده می‌کرد.

$$q_{irr} = \eta_{act_e} i_c + \eta_{act_a} i_a \quad (9)$$

$$q_{ohm_e} = \sigma_e^{eff} \nabla V_e \cdot \nabla V_e \quad (10)$$

در تمامی روابط فوق چگالی مخلوط گاز بر اساس چگالی و نسبت جرمی هر جزئی گاز به دست می‌آید.
انتقال جریان الکتریکی به وسیله معادله حاکم برای بقای بار الکتریکی تشریح شده است [۱۸]:

$$\nabla \cdot (\sigma_s \nabla V_s) = 0 \quad (11)$$

الکتروولیت برای گازها تراویش ناپذیر است و فقط اجازه انتقال بار یونی را می‌دهد بنابراین:

$$\nabla \cdot (-\sigma_e \nabla V_e) = 0 \quad (12)$$

از آنجاییکه تولید جریان یونی یا الکتریکی درون الکتروولیت وجود ندارد، سمت راست معادله بالا صفر است.

۱-۳- واکنش‌های الکتروشیمیایی در مرز الکتروولیت و الکتروودها

واکنش‌های الکتروشیمیایی در مرز بین الکتروولیت و الکتروودها به صورت شرط مرزی در نظر گرفته شده است که مقدار شار مولی در مرز الکتروولیت و الکتروودها با استفاده از قانون فارادی تعیین می‌شود [۱۸]. در سمت آند هیدروژن مصرف می‌شود و آب تولید می‌شود بنابراین:

$$S_{H_2} = -\frac{M_{H_2}}{2F} i_a \quad (13)$$

$$S_{H_2O} = +\frac{M_{H_2O}}{2F} i_a \quad (14)$$

در سمت کاتد اکسیژن مصرف می‌شود:

$$S_{O_2} = -\frac{M_{O_2}}{4F} i_c \quad (15)$$

در این روابط، توزیع چگالی جریان آندی و کاتدی که به ترتیب با i_a و i_c نشان داده شده‌اند با استفاده از معادله بالتر-ولمر محاسبه می‌شود [۱۹]:

$$i_a = i_{0,a} \left[e^{\frac{\alpha_a^a \eta_{act,a} F}{RT}} - e^{\frac{-\alpha_c^a \eta_{act,c} F}{RT}} \right] \quad (16)$$

$$i_c = i_{0,c} \left[e^{\frac{\alpha_a^c \eta_{act,a} F}{RT}} - e^{\frac{-\alpha_c^c \eta_{act,c} F}{RT}} \right] \quad (17)$$

در این روابط α_a^a ، α_a^c و α_c^c به ترتیب ضرایب انتقال بار آند-آند، آند-کاتد، کاتد-آند و کاتد-کاتد هستند و چگالی‌های جریان تبدالی آندی ($i_{0,a}$) و کاتدی ($i_{0,c}$) هم به عنوان تابعی از فشار جزئی اجزای شیمیایی تعریف می‌شوند [۱۸]:

$$i_{0,a} = \gamma_a \left(\frac{p_{H_2}}{p_{ref}} \right) \left(\frac{p_{H_2O}}{p_{ref}} \right)^{-0.5} \exp \left(\frac{-E_{act,a}}{RT} \right) \quad (18)$$

$$i_{0,c} = \gamma_c \left(\frac{p_{O_2}}{p_{ref}} \right)^{0.25} \exp \left(\frac{-E_{act,c}}{RT} \right) \quad (19)$$

فشار مرجع در محفظه گاز یعنی فشار کلی یک اتمسفر است.

- جریان به علت سرعت‌های پایین آرام فرض می‌شود.

- کارکرد حالت پایا مورد بررسی است.

- گازهای موجود در مدل از قانون گاز ایده‌آل پیروی می‌کنند.

- فرض می‌شود همه اجزا ابسط گرمایی مشابهی دارند.

- اثرات انتقال گرمایی تابشی ناچیز است.

- واکنش‌ها در یک مرحله روی می‌دهند.

- واکنش‌ها در مرز تماس الکتروولیت و الکتروودها صورت می‌پذیرد.

- پس تولید و مصرف اجزا یک شرط مرزی داخلی می‌باشد.

- واکنش انتقال بار یک واکنش محدود کننده است.

۳- معادلات حاکم

معادلات مورد استفاده برای مدل‌سازی شامل معادلات بقا جرم، مومنتوم، اجزا، انرژی و شارژ است. معادله بقا جرم در سرتاسر پیل به صورت معادله زیر می‌باشد.

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

درون کانال‌ها معادلات پایستگی ممتد برقرار است.

$$\rho(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} - \frac{2}{3} \mu \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (2)$$

در الکتروودهای متخلخل که نیروهای لزجت بر نیروهای جابجایی غلبه پیدا می‌کنند و معادله ممتد از معادله ناویر-استوکس به معادله برینکمن تصحیح می‌شود [۱۶-۱۴]:

$$\frac{\mu}{\kappa} \vec{v} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \vec{v} - \frac{2}{3} \mu \nabla(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (3)$$

معادله پایستگی اجزای شیمیایی نیز به صورت معادله ۴ است.

$$\nabla \cdot \rho \vec{v} Y_i = \nabla \cdot \vec{J}_i \quad (4)$$

\vec{J}_i هم بردار شار جرمی نفوذی چندگانه است که با استفاده از قانون عمومی فیک بیان می‌شود [۵]:

$$\vec{J}_i = \sum_{j=1}^{N-1} \rho D_{ij} \nabla Y_j \quad (5)$$

در این معادله N تعداد اجزاء شیمیایی موجود در مخلوط و D_{ij} ضریب نفوذ چندگانه است که با استفاده از ضریب نفوذ ماسکول-استفان محاسبه می‌شود که در داخل الکتروودها برای اعمال اثرات تخلخل به صورت زیر تصحیح شده است (ϵ تخلخل و τ انحصار می‌باشد) [۱۵ و ۱۶]:

$$D_{ij}^{eff} = \frac{\epsilon}{\tau} D_{ij} \quad (6)$$

معادله پایستگی انرژی در الکتروودهای نفوذ گازی با در نظر گرفتن طبیعت متخلخل الکتروودها مدل شده است [۱۷].

$$\nabla \cdot (\rho C_p)_{eff} \vec{v} T = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + S_e \quad (7)$$

خواص موثر در محیط متخلخل مطابق [۱۷] تعریف شده است. در معادله (۷)، S_e جمله چشمی گرمایی، به واسطه واکنش‌هایی الکتروشیمیایی و تلفات اهمی است [۱۷].

$$S_e = q_{irr} + q_{ohm_e} \quad (8)$$

گرمای ناشی از برگشت‌ناپذیری، q_{irr} ، و گرمای اهمی ناشی از مقاومت یونی، q_{ohm_e} ، از عبارات زیر محاسبه می‌شوند [۵]:

جدول ۳- خواص الکتریکی پیل سوختی اکسید جامد [۱۳]

مقدار	خاصیت
۱۰۸	جريان کلی سیستم (A)
۰/۱	مقاومت الکتروولیت (ohm-m)
۰/۳	ضریب تخفیف جریان
$۱/۰۰ \times ۱۰^{-۷}$	چگالی جریان تبادلی آند (A)
۵۱۲	چگالی جریان تبادلی کاتد (A)
۰/۵	ضریب انتقال آند و کاتد
۳۳۳۳۰	رسانندگی آند (1/ohm-m)
۷۹۳۷	رسانندگی کاتد (1/ohm-m)
$۱/۵ \times ۱۰^{-۷}$	رسانندگی جمع گننده جریان (1/ohm-m)
$۱/۰۰ \times ۱۰^{-۷}$	مقاومت تماسی آند (ohm-m ²)
$۱/۰۰ \times ۱۰^{-۸}$	مقاومت تماسی کاتد (ohm-m ²)

جدول ۴- خواص مواد سازنده پیل سوختی [۲۲]

الکتروولیت	کاتد	آند	خاصیت
۵۳۷۱	۴۳۷۵	۳۰۳۰	چگالی (kg/m ³)
۵۸۵/۲	تابع دما	۵۹۵/۱	رسانایی گرمایی (W/m.K)
۲/۲	۱/۱۵	۶/۲۳	گرمای ویژه (J/kg.K)

۴- نتایج

۱-۴- شبیه‌سازی با روش حجم محدود

نرمافزار شبکه‌بندی GAMBIT برای ساخت مدل به کار رفته است. ناحیه‌بندی‌ها و شبکه‌بندی ایجاد شده در GAMBIT برای تحلیل بیشتر، به آسانی به نرمافزار FLUENT وارد می‌شود. نرمافزار FLUENT برای حل معادلات پایستگی از روش حجم محدود استفاده می‌کند که پیل سوختی را به عنوان حجم کنترل‌هایی در میدان جریان در نظر می‌گیرد. فرآیند شبکه‌بندی مدل از سطح بیرونی آغاز شد. برای سطوح ابتدایی و انتهایی مدل با توجه به اینکه هندسه استوانه‌ای است و تقارن محوری نیز وجود دارد، شبکه‌بندی در مختصات قطبی و به صورت چهار ضلعی انتخاب شد. با انتخاب این نوع شبکه‌بندی تعداد نهایی شبکه لازم کاهش می‌یابد، در حالیکه دقت حل همچنان بالا است. اما این نوع شبکه برای لوله مرکزی که درواقع لوله جریان هوا می‌باشد، مناسب نیست چون شبکه در مختصات قطبی در مرکز به صورت مثلثی خواهد بود. همچنین اندازه شبکه بسیار ریز خواهد شد که باعث می‌شود انتگرال شارها روی وجههای شبکه دارای دقت کافی نباشد و از سرعت روند حل کاسته شود. به همین دلیل برای شبکه‌بندی سطح ابتدایی و انتهایی لوله مرکزی از شبکه چهار ضلعی ایجاد با دستور Guad نرمافزار GAMBIT استفاده شد.

برای شبکه‌بندی داخل هندسه نیز از شبکه‌بندی شش‌وجهی استفاده شد. دلیل این انتخاب این است که در حد امکان شبکه‌بندی به صورتی انجام شود که در جهت جریان باشند. بنابراین سطح مقطع هر شبکه با توجه به شبکه ایجاد شده روی سطح ابتدایی و انتهایی در طول لوله تصویر شده و شبکه‌های شش ووجهی ایجاد می‌شوند در کل حجم مدل ۷۹۸۶۰ سلول وجود دارد. بزرگ‌ترین نسبت منظری محدود به ۲۰ است. ساختار شبکه‌بندی مدل در شکل ۲ نشان داده شده است.

γ_a و $E_{act,c}$ ضرایب پیش‌نمایی آندی و کاتدی و $E_{act,a}$ و $\eta_{act,a}$ هم به ترتیب انرژی‌های فعال‌سازی آندی و کاتدی هستند.

قطبش‌های فعال‌سازی سمت آند و کاتد به ترتیب به کمک روابط زیر محاسبه شده‌اند [۲۰]:

$$\eta_{act,a} = V_{s,a} - V_{e,a} \quad (۲۰)$$

$$\eta_{act,c} = V_{s,c} - V_{e,c} - V_{ideal} \quad (۲۱)$$

$V_{e,a}$ و $V_{e,c}$ به ترتیب پتانسیل فاز جامد (الکترونی) و فاز الکتروولیتی (یونی) در آند، $V_{s,c}$ و V_{ideal} پتانسیل الکترونی و یونی کاتد هستند و V_{ideal} نیز ولتاژ مدار باز (ولتاژ نرنست) است که با استفاده از رابطه انرژی آزاد گیبس به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۱]:

$$V_{ideal} = V^0 + \frac{RT}{4F} \ln \left(\frac{P_{H_2} P_{O_2}}{P_{H_2 O}}^{1/2} \right) \quad (۲۲)$$

به واسطه قطبش‌های مختلف (اهمی، فعال‌سازی، غلظتی) ولتاژ کاری سلول (V_{cell}) همیشه کمتر از ولتاژ نرنست (مدار باز) است. ولتاژ کاری سلول می‌تواند بدین صورت بیان شود:

$$V_{cell} = V_{ideal} - \eta_{act}(i) - \eta_{ohm}(i) - \eta_{conc}(i) \quad (۲۳)$$

در رابطه فوق η_{act} قطبش فعال‌سازی در دو الکترود، η_{ohm} قطبش اهمی (یونی و الکترونی) و η_{conc} قطبش غلظتی در دو الکترود است.

۲-۳- شرایط مرزی

در ورودی محفظه گاز، سرعت، کسر جرمی و دمای کاری تعیین شده است. در دیواره‌ها شرط مرزی عدم لغزش برای جریان و عایق برای گرما به کار رفته است. شرط مرزی جریان خروجی فشار ثابت است. در سطح بیرونی آند و کاتد به ترتیب شرط مرزی ولتاژ صفر و $V_{s,a} = 0$ ولتاژ کاری $V_{s,c} = V_{cell}$ تعریف شده است. این شرط مرزی ولتاژ عملیاتی پیل سوختی را تعریف می‌کند و مدار جریان بسته می‌شود. شرایط کاری مورد استفاده در جدول ۲ خلاصه شده است.

جدول ۲- شرایط کاری مورد استفاده در مدل سازی [۱۲ و ۱۳]

مقدار	خاصیت
۱×۱۰^{-۳}	مقاومت لزجت برای ناحیه متخلخل ($1/m^2$)
$۲/۵ \times ۱۰^{-۷}$	دبی جرمی سوخت (kg/s)
$۱/۳۵ \times ۱۰^{-۵}$	دبی جرمی هوا (kg/s)
۷۰۰	دمای ورودی سوخت و هوا (°C)
۷۰۰	دمای ورودی هوا (°C)
۱۰۱۳۲۵	فشار کاری (Pa)
۰/۵۲۵	کسر جرمی ورودی آب
۰/۴۷۵	کسر جرمی ورودی هیدروژن
۰/۲۹۲	کسر جرمی ورودی اکسیژن
۳	فاکتور انحصار آند/کاتد
۰/۳۵	ضریب تخلخل آند / کاتد

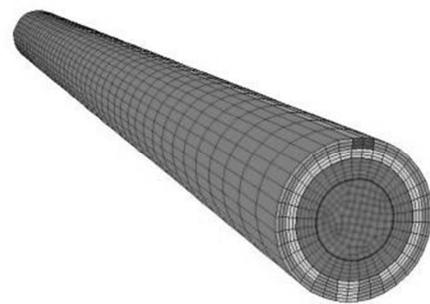
علاوه بر شرایط مرزی پارامترهای عددی مساله نیز همچون خواص فیزیکی مواد به کار رفته در مدل باید تعیین شود. پارامترهای الکتریکی مورد استفاده در این تحقیق در جدول ۳ و خواص فیزیکی مواد برای اجزای مختلف نیز در جدول ۴ فهرست شده است [۲۲].

$$\frac{1}{A} \int \varphi dA = \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n \varphi_i |A_i| \quad (24)$$

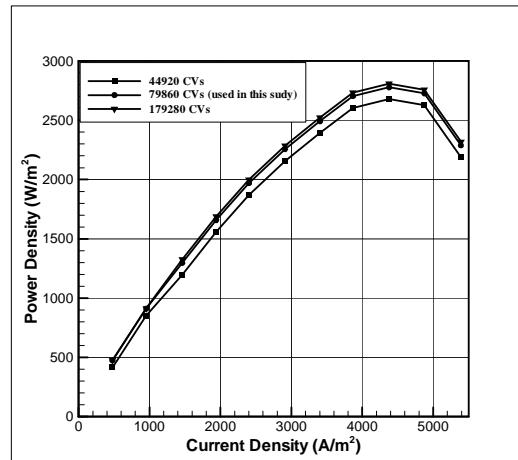
شکل ۴ نتیجه کار حاضر برای مقدار ولتاژ خروجی سیستم در برابر چگالی جریان کلی را در مقایسه با نتایج سایر مقالات نشان می‌دهد. این مقالات شامل نتایج حاصل از کار آزمایشگاهی هگیوارا و همکاران [۲۳] و شبیه‌سازی عددی اسلیتی و همکاران [۱۳] و یون لی و همکاران [۲۴] است. مشاهده می‌شود که مقدار ولتاژ برای مدل محاسباتی حاضر و نتایج آزمایشگاهی در مقایسه با سایر مدل‌ها اختلاف بیشتری دارد، به گونه‌ای که برای مقدار چگالی جریان کمتر از 250 mA/cm^2 اختلاف با نتایج آزمایشگاهی به بیش از 15 درصد می‌رسد. این موضوع را می‌توان با توجه به عدم امکان کنترل دقیق شرایط آزمایشگاهی توضیح داد. در کارهای آزمایشگاهی معمولاً اتفاق‌های نامشخصی به دلیل ناخالصی در خواص مواد استفاده شده وجود دارد. همچنین عوامل محیطی که مدل‌سازی ریاضی آنها به علت ماهیت غیرکمی دشوار است، باعث ایجاد خطأ در نتایج می‌شود. این عوامل موجب اتفاق‌هایی در ولتاژ آزمایشگاهی یعنی کاربردهای عملی می‌شوند که در نهایت منجر به ولتاژ کمتر، به ویژه در چگالی‌های جریان پایین که مقدار مقاومت زیاد است، می‌شود. علاوه بر این در کارهای آزمایشگاهی، گاهی اوقات امکان تطابق دقیق پارامترها به دلیل محدودیت‌های مختلف تحمیلی بر مدل وجود ندارد. برای مثال اندازه کوچک پیل‌سوختی اکسید‌جامد و دمای کاری بالای آن، اندازه‌گیری پارامترها به صورت تجربی در پیل‌سوختی را دشوار می‌سازد.

مقایسه نتایج کار حاضر با نتایج کارهای محاسباتی دیگر در شکل ۴ نشان می‌دهد که اختلاف نتایج در این مورد کمتر است به گونه‌ای که مقدار ولتاژ برای مدل محاسباتی حاضر و سایر مدل‌ها اختلافی کمتر از 5 درصد را نشان می‌دهد. در این بین نتایج کار حاضر، با نتایج تحقیق اسلیتی و همکاران [۱۳] همخوانی بیشتری دارد به گونه‌ای که برای مقدار ولتاژ در نواحی با چگالی جریان کم اختلاف به کمتر از 3 درصد می‌رسد. در تحقیق اسلیتی و همکاران [۱۳] طول کانال‌های سوخت و هوا در ابتدای آن امتداد شده است تا جریان سیال قبل از ورود به ناحیه الکتروولیت و الکترودها به حالت کاملاً توسعه یافته برسد، بنابراین یکی از دلایل اختلاف بیشتر نتایج در چگالی جریان‌های بالا و به عبارت دیگر ابتدای کانال می‌تواند این موضوع باشد، چون در مدل تحقیق حاضر ابتدای کانال‌های جریان سوخت و هوا با الکتروولیت و الکترودها یکی است و در قسمت ابتدایی پیل‌سوختی، جریان توسعه یافته نمی‌باشد. علت اختلاف 5 درصدی نتایج کار حاضر با مقاله تحقیقاتی ییون لی و همکاران [۲۴] نیز به این دلیل است که آنها یک مدل شبیه دو بعدی از پیل‌سوختی اکسید‌جامد لوله‌ای ارائه کردند و همان‌طور که در مقاله خود اشاره کرده‌اند که باعث کاهش دقت حل می‌شود و خودشان پیشنهاد داده‌اند که این مدل‌ها باید بهبود بخشنند. مطابق شکل ۴ به نظر می‌رسد که مدل استفاده شده در تحقیق آنها برای قطبش غلظتی مناسب نیست؛ چون مقادیر ولتاژ در چگالی جریان بالا که در قطبش غلظتی نقش مؤثرتری دارد در مقایسه با کارهای دیگر بسیار بیشتر است.

قبل از شبیه‌سازی پیل‌سوختی و استخراج نتایج باید از عدم وابستگی نتایج به شبکه‌بندی اطمینان حاصل نمود. برای همین منظور در شکل ۳ نمودار چگالی توان بر حسب چگالی جریان برای شبکه‌بندی‌های مختلف ارائه شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، شبکه انتخاب شده برای مدل‌سازی مناسب است و می‌توان اطمینان حاصل نمود که نتایج مستقل از شبکه هستند چون با افزایش تعداد شبکه اختلاف مشاهده می‌شود که با افزایش چگالی جریان، توان خروجی از آن به بیشینه مقدار خود در بازه A/m^2 $4000-5000$ رسیده و در ادامه با افزایش بیشتر توان به شدت افت می‌کند. اگرچه به نظر می‌رسد مقدار بهینه طراحی در نقطه بیشینه نمودار رخ می‌دهد ولی نزدیک بودن آن به ناحیه افته‌های ناشی از غلظت برای پیل به شدت خطرناک است.



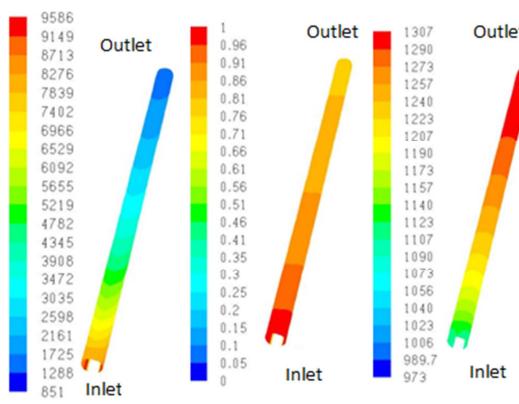
شکل ۲- ساختار شبکه‌بندی مدل در GAMBIT



شکل ۳- استقلال نتایج از شبکه برای مدل‌بایه (دمای ورودی 700°C و تخلخل٪ 30)

۱-۱-۴- اعتبارسنجی نتایج

چون مدل‌سازی در این تحقیق به صورت سه بعدی است، برای رسم این نمودار لازم است با در نظر گرفتن مختصات استوانه‌ای برای هندسه لوله‌ای مورد استفاده، در جهت زاویه‌ای از پارامترهای مختلف مثل چگالی جریان و توان و یا ولتاژ میانگین‌گیری انجام شود تا در واقع به ازای هر نقطه در طول پیل‌سوختی یک مقدار میانگین برای نمایش در نمودار وجود داشته باشد. در این تحقیق میانگین سطحی پارامترها با تقسیم مجموع حاصل ضرب متغیر میدانی انتخابی و مساحت وجه بر مساحت کل سطح و طبق معادله (۲۴) انجام می‌شود.

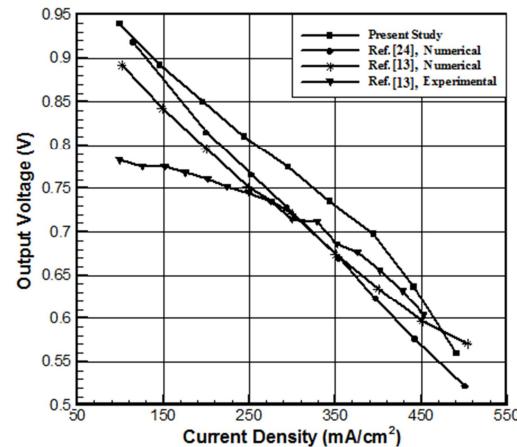


شکل ۶- توزیع دما، چگالی جریان و ولتاژ نرنست بر روی الکتروولیت برای مدل پایه (دما $\text{ی ورودی } 700^\circ\text{C}$ و تخلخل 20%)

شکل نشان می‌دهد که ولتاژ نرنست پیل‌سوختی در طول آن کاهش می‌یابد اما مقدار آن بسیار کم است، چون در واقع این ولتاژ نشان‌دهنده اختلاف پتانسیل موجود بین دو الکتروود است که به فشار جزیی اجزای شیمیایی بستگی دارد. دیده می‌شود که توزیع چگالی جریان در طول پیل‌سوختی از ورودی به سمت خروجی کاهش می‌یابد. بیشترین چگالی جریان در نزدیکی ورودی مشاهده می‌شود چون در طول پیل‌سوختی با انجام واکنش‌های شیمیایی بین واکنش‌دهنده‌ها، سوخت و هواهی ورودی به پیل مصرف می‌شوند (مطابق شکل ۵) و همان‌طور که قبلاً در شکل ۳ نشان داده شد، با کاهش چگالی جریان در طول پیل‌سوختی توان خروجی آن نیز کاهش می‌یابد. از مجموعه این نتایج می‌توان به عنوان پارامترهای تعیین کننده در طول بهینه پیل‌سوختی در در یک سیستم انباشتہ نام برد، چون هرچه به سمت خروجی می‌رویم چگالی جریان و چگالی توان کاهش می‌یابند که در واقع بیانگر کاهش بهره‌وری پیل‌سوختی هستند. همچنین افزایش دما محدودیت‌هایی برای جنس اجزای سازنده پیل ایجاد می‌کند.

۳-۱-۴- وابستگی دمایی و اثرات تخلخل

بررسی بستگی دمایی این مدل با شبیه‌سازی آن برای سه دمای مختلف و ثابت نگه داشتن سایر پارامترها صورت پذیرفته است. این روش ارزیابی توسط اسلیتی و همکارانش [۱۲] برای مدل لوله‌ای مشابه تقویت شده کاتدی برای دمای‌های متوسط (50°C تا 700°C) استفاده شد. در این تحقیق شبیه‌سازی‌ها برای دمای‌های اولیه بالاتر یعنی بین 700°C تا 900°C انجام شده است. شکل ۷ ولتاژ کل پیل برای دمای‌های مختلف و همچنین برای بررسی تخلخل کاتد بر روی ولتاژ خروجی پیل‌سوختی را نشان می‌دهد. نتایج برای تخلخل کاتد 10°C درصد و 30°C درصد برای دمای ورودی ثابت 700°C نشان داده شده‌اند. تخلخل فضای حفره‌ای (خالی) الکتروود به فضای کلی آن است و دلیل استفاده از مواد متخلخل برای الکتروود این است که باعث توزیع جرم به طور محلی در جایگاه‌های فعال الکتروود در پیل‌سوختی می‌شود و در نتیجه اجزای شیمیایی به طور مناسب‌تری با یکدیگر در تماس قرار می‌گیرند و با هم واکنش می‌دهند. درصد تخلخل بر مقدار اکسیژن و هیدروژن انتقال داده شده تاثیر مستقیم دارد.

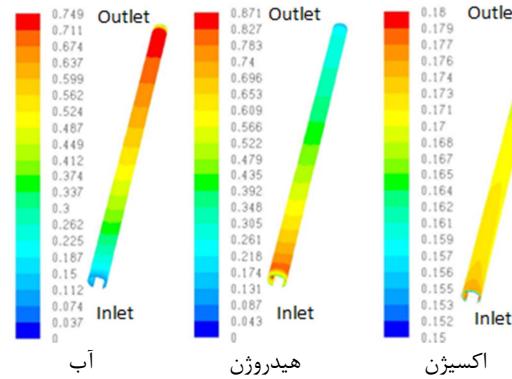


شکل ۴- نتایج تحقیق حاضر و نتایج تجربی و عددی سایر مقالات

پس از تأیید موفق مدل پیل‌سوختی، لازم است چند بررسی پارامتری روی مدل انجام شود. در نتایج بیان شده در ادامه، مشخصات اصلی مانند شکل هندسی، خواص مواد و شرایط کاری مانند مدل پایه در نظر گرفته می‌شوند مگر اینکه به طور صریح بیان شود.

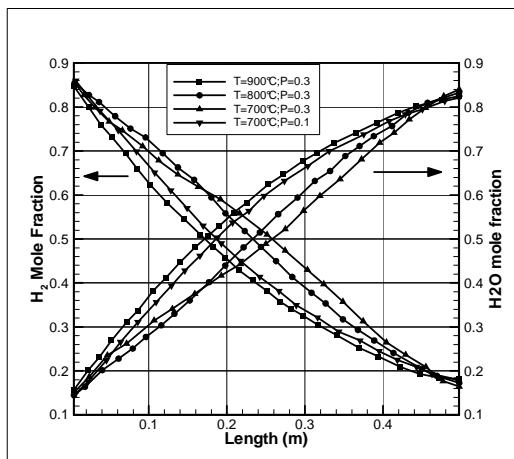
۴-۲-۱- بررسی مشخصه‌های مختلف پیل‌سوختی

شکل ۵ کسر مولی اجزای شیمیایی پیل‌سوختی را در سمت آند و کاتد نشان می‌دهد. در این شکل دیده می‌شود که مقدار اکسیژن و هیدروژن در طول پیل‌سوختی کاهش و مقدار آب افزایش می‌یابد، در واقع این موضوع به خاطر واکنش‌های الکتروشیمیایی است که در پیل‌سوختی رخ می‌دهد و اکسیژن در ترکیب با هیدروژن تولید آب می‌کند که در واقع یکی از عملکردهای مهم پیل‌سوختی که تولید آب است، در اینجا مشاهده می‌شود.



شکل ۵- کسر مولی اکسیژن، هیدروژن و آب در طول پیل‌سوختی برای مدل پایه (دما $\text{ی ورودی } 700^\circ\text{C}$ و تخلخل 20%)

شکل ۶ توزیع پارامترهای مهمی همچون دما، چگالی جریان و ولتاژ نرنست را روی سطح مشترک الکتروولیت و الکتروود آند، در ساختار پیل‌سوختی اکسید‌جامد برای مدل پایه نشان می‌دهند. شکل نشان می‌دهد که در طول پیل‌سوختی دما افزایش می‌یابد که باعث می‌شود دمای سیال‌های موجود در پیل‌سوختی هم افزایش یابد و همان‌طور که در بخش‌های قبل گفته شد می‌توان از گرمای این سیالات برای کاربردهای جانبی استفاده نمود.



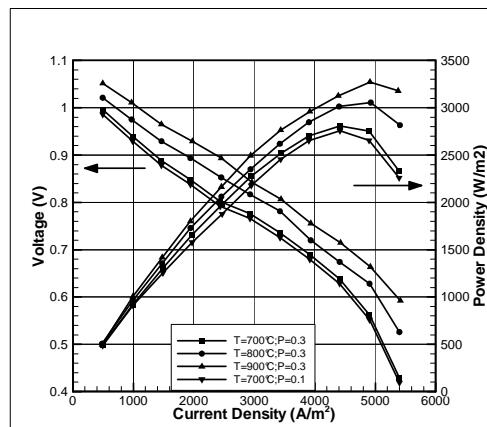
شکل ۸- کسر مولی هیدروژن و آب در طول پیل سوختی

در طول پیل با افزایش دمای عملکرد پیل، نسبت مولی هیدروژن کاهش یافته و با افزایش ضریب تخلخل (در یک دمای مشخص) این نسبت افزایش می‌یابد. روند تغییرات کسر مولی آب بر حسب دما و ضریب تخلخل بر عکس کسر مولی هیدروژن است. این شکل کاهش در کسر مولی H_2 و افزایش کسر مولی H_2O که نتیجه واکنش‌های شیمیایی است، را نشان می‌دهد.

۴-۱-۴- اثرات ضخامت الکتروولیت

اگرچه دمای کاری بالای پیل سوختی اکسیدجامد مزایای مختلفی مانند کاهش مقاومت الکتروولیت و اضافه ولتاژهای الکتروولیت دارد و باعث بهبود مناسب عملکرد الکتروشیمیایی می‌شوند اما دمایهای عملیاتی پایین‌تر نیز منجر به افزایش گرینه‌های انتخاب دمای، کاهش مشکلات آب‌بندی و افزایش امکان تجارتی شدن پیلهای سوختی اکسیدجامد می‌شود. یکی از روش‌های کاهش دمای کاری پیلهای سوختی اکسیدجامد در حین حفظ بازدهی الکتروشیمیایی، کاهش ضخامت الکتروولیت به مقادیر دست یافتنی است.

ضخامت الکتروولیت نقش بسیار مهمی در کارکرد پیل سوختی اکسیدجامد دارد. الکتروولیتها در انجام فرآیند انتقال یون در عملیات که گام اول برای شروع واکنش الکتروشیمیایی در سطح مشترک آند-الکتروولیت است، اهمیت دارند. از نظر تئوری، کاهش ضخامت الکتروولیت حاکی از ایجاد مقاومت کم برای جریان یون‌های اکسیژن از سمت کاتد به آند است. شکل ۹ (الف تا ج) تأثیر تغییر ضخامت الکتروولیت را در مدل فعلی نشان می‌دهد. برای انجام این کار، ضخامت الکتروولیت را در مدل فعلی تغییر داده شد و ولتاژ خروجی و چگالی توان از ۲۰ تا ۱۰۰ میکرون تغییر داده شد و ولتاژ خروجی و چگالی توان خروجی هر سیستم به عنوان تابعی از چگالی جریان در این شکل نشان داده شده است. همچنین برای به دست آوردن ضخامت کاری بهینه برای مدل فعلی، شبیه‌سازی‌ها در سه دمای عملیاتی مختلف (۷۰۰، ۷۵۰ و ۸۰۰ درجه سلسیوس) صورت پذیرفتند.



شکل ۷- چگالی توان و ولتاژ کل بر حسب چگالی جریان برای شرایط مختلف دمایی و تخلخل کاتد

دمای کاری اهمیت زیادی در مورد پیلهای سوختی اکسیدجامد دارد، چون ماده الکتروولیت در دمایهای بالاتر رسانایی یونی بیشتری دارد. همان‌طور که در شکل ۷ دیده می‌شود، مدل بررسی شده در دمای بالاتر در مقایسه با دو نمونه دمایی دیگر عملکرد بهتری دارد. برای دمایهای کمتر از دمای 900°C ولتاژ کل کمتری به دست می‌آید. همان‌طور که دیده می‌شود تغییرات جزئی در ضریب تخلخل کاتد تأثیر قابل توجهی بر عملکرد پیل ندارد و مطابق شکل ۷ ولتاژ در تخلخل‌های مختلف برای دمای ورودی 700°C ظاهرًا با تغییرات کمتر از ۲ درصد در مقادیر همراه بوده است. می‌توان از این نمودارها اینطور استنباط کرد که نمونه‌ای با دمای ورودی 900°C بهترین عملکرد را برای ولتاژ خروجی کل در بین سایر موارد مقایسه شده دارد. بتایران می‌توان نتیجه گرفت که دمای کاری بالا نه تنها به پیلهای سوختی اکسیدجامد این قابلیت را می‌دهد که از سوختهای هیدروکربنی استفاده کنند بلکه باعث بهبود عملکرد آنها نیز می‌شود. همچنین در شکل ۷ دیده می‌شود که ولتاژ به جز در مقادیر بالای چگالی جریان تقریباً به صورت خطی افت می‌کند که این بیانگر اینست که قطبش اهمی بیشترین تأثیر را در تلفات ولتاژ دارد اما در مقادیر بالای چگالی جریان، افت ولتاژ به طور ناگهانی بیشتر می‌شود که دلیل آن افزایش قطبش غلطی است. در این شکل دیده می‌شود که بیشترین چگالی توان برای نمونه‌ای با دمای ورودی 900°C به دست می‌آید. علت این امر را می‌توان این گونه توضیح داد که افزایش دمای کاری پیل باعث افزایش فعل و انفعالات شیمیایی در آن شده و این امر به بهبود عملکرد پیل و افزایش چگالی توان آن کمک می‌کند.

شکل ۸ توزیع کسرهای مولی گونه‌های واکنش دهنده را در طرف آندی برای تمام چهار مورد مختلف ذکر شده در بالا نشان می‌دهند.

شده است. می‌توان براساس این مشاهده، برای مدل ضخامت بهینه‌ای را به دست آورد؛ اما مدل محاسباتی ارائه شده، به نشت الکترون که می‌تواند از طریق الکتروولیت به دلیل ضخامت خیلی کم رخ دهد، توجهی نمی‌کند. نشت الکترون می‌تواند منجر به معکوس شدن جریان، کاهش ولتاژ خروجی کل و در نتیجه برق تولید شده توسط پیل سوختی شود. همچنین، ساخت الکتروولیت با ضخامت کم دشوارتر است و فرآیند ساخت را گران‌تر می‌کند. شکل ۹ همچنین نشان داد که تغییر دما تأثیر قابل توجهی بر عملکرد پیل دارد. بدیهی است که بهترین عملکرد مدل در 800°C است. دمای کاری خیلی کم می‌تواند مجدد اتلاف ولتاژی را به دلیل مانع فعال‌سازی وقوع واکنش‌های الکتروشیمیایی که بازدهی کل پیل سوختی را کاهش می‌دهد، ایجاد کند. علاوه بر این، از نمودارهای شکل ۹ دیده می‌شود که ولتاژ خروجی به جز در چگالی جریان‌های بالا تقریباً به صورت خطی تغییر می‌کند و این بدين معناست که در بیشتر طول پیل، تلفات اهمی نقش اساسی را دارد و تنها در چگالی جریان‌های بالاست که قطبش غلظتی غالب شده و ولتاژ خروجی به طور چشمگیری کاهش می‌یابد.

جدول ۵- چگالی توان بیشینه برای ضخامت‌های الکتروولیت متفاوت

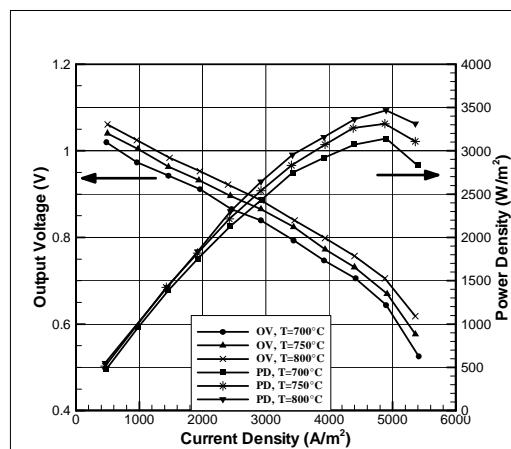
ضخامت الکتروولیت (μm)	چگالی توان بیشینه (W/m^2)
۳۴۳۰	۲۰
۳۲۳۰	۴۰
۲۹۰۰	۱۰۰

۲-۴- نتایج شبیه‌سازی با روش المان محدود

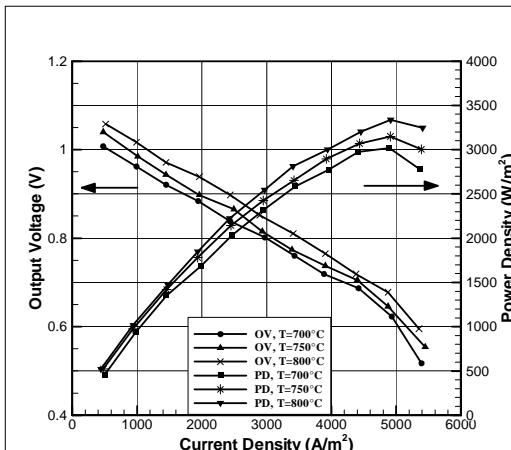
شبکه‌بندی مدل برای نرم‌افزار Comsol در خود آن انجام می‌شود. در مازول پیل سوختی اکسید جامد Comsol، الکتروولیت به صورت یک ناحیه مدل شده است و بنابراین در مدل هندسی آورده شده است. سعی می‌شود، شبکه مورد استفاده تا حد امکان شبیه به شبكه‌بندی ایجاد شده در نرم‌افزار GAMBIT باشد. در کل مدل حجم مدل 58092 المان وجود دارد که 25 درصد کمتر از تعداد حجم کنترل‌های استفاده شده در نرم‌افزار GAMBIT است. قبل از شبیه‌سازی پیل سوختی و استخراج نتایج باید از عدم وابستگی نتایج به شبکه‌بندی اطمینان حاصل نمود. بدين منظور برای شبکه‌بندی‌های مختلف، وابستگی منحنی چگالی توان - چگالی جریان به تعداد شبکه بررسی شده است و شبکه مناسب (با 58092 المان) برای مدل سازی انتخاب شده است.

۱-۲-۴- اعتبارسنجی نتایج

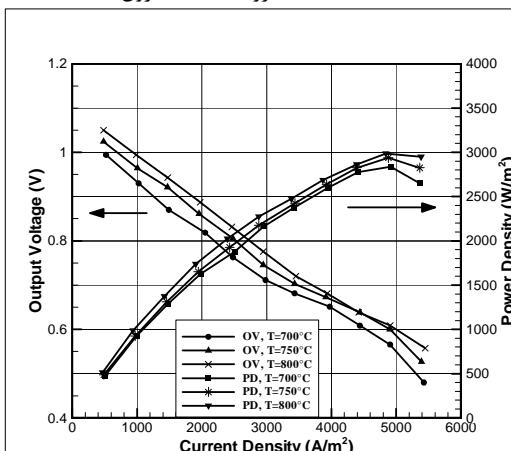
برای مقایسه دو مدل سازی با نرم‌افزار FLUENT و Comsol باید معادلات حاکم، شرایط اولیه، مرزی و سایر پارامترهای مساله یکدیگر مورد تطبیق قرار بگیرند. به دست آوردن تمام پارامترهای موجود نیاز برای شرایط یکسان، به دلیل تفاوت‌های موجود در دو نرم‌افزار، امکان پذیر نمی‌باشد؛ اما سعی شده است که در حد امکان شرایط مشابه استفاده شود. از مهم‌ترین تفاوت‌های موجود بین دو نرم‌افزار نحوه مدل سازی الکتروولیت است. در نرم‌افزار Comsol باقیتی الکتروولیت به صورت یک ناحیه فیزیکی در هندسه آورده و شبکه‌بندی شود. علاوه بر این در نرم‌افزار FLUENT جمع‌کننده‌های جریان باید به صورت یک ناحیه سه بعدی جامد تعریف شوند و به



(الف) ضخامت الکتروولیت 20 میکرون



(ب) ضخامت الکتروولیت 40 میکرون

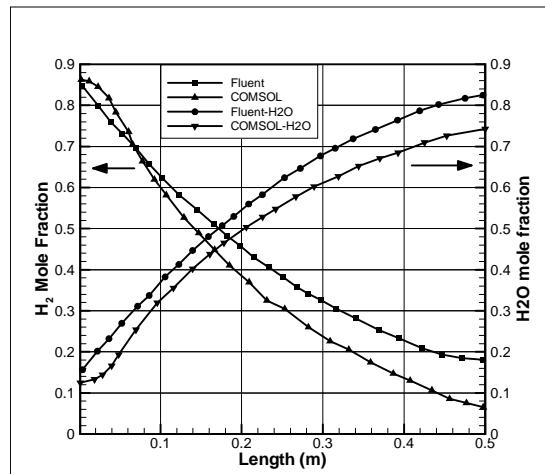


(ج) ضخامت الکتروولیت 100 میکرون

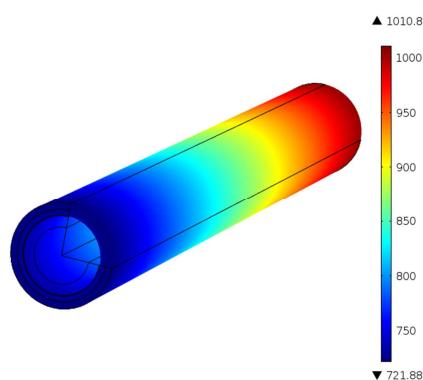
شکل ۹- تغییرات ولتاژ خروجی و چگالی توان بر حسب ضخامت الکتروولیت

نتایج نشان می‌دهد که ضخامت کمتر الکتروولیت باعث افزایش ولتاژ خروجی و چگالی توان و به عبارت دیگر بازدهی بیشتر می‌شود. چون با کاهش ضخامت الکتروولیت، مقاومت اهمی آن کاهش می‌یابد و در نتیجه یون‌های اکسیژن راحت‌تر می‌توانند از آن عبور کنند و در نتیجه واکنش‌ها بهتر رخ می‌دهند. حداکثر مقادیر چگالی توان به دست آمده با تغییر ضخامت لایه الکتروولیت در جدول ۵ نشان داده

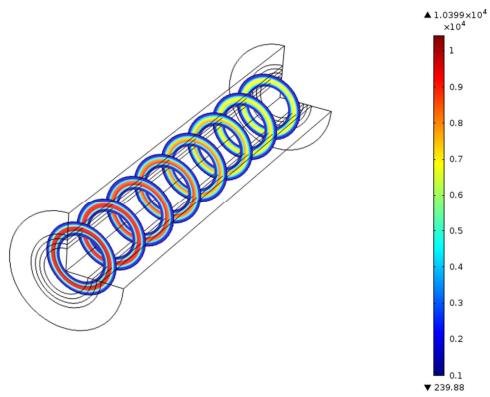
را به صورت گرما خود را نشان می‌دهد. شکل ۱۳ توزیع چگالی جریان روی الکتروولیت را نشان می‌دهد. توزیع چگالی جریان در طول پیل از ورودی به سمت خروجی کاهش می‌یابد. بیشترین چگالی جریان درون الکتروولیت در نزدیکی ورودی است. با کاهش چگالی جریان در طول پیل سوختی توان خروجی پیل نیز کاهش می‌یابد.



شکل ۱۱- کسر مولی آب و هیدروژن در پیل سوختی برای مدل پایه در هر دو نرم افزار (دما ورودی 700°C و تخلخل 30%)



شکل ۱۲- توزیع دما ($^{\circ}\text{C}$) در کانال سوخت برای دمای ورودی 700°C و تخلخل 30%



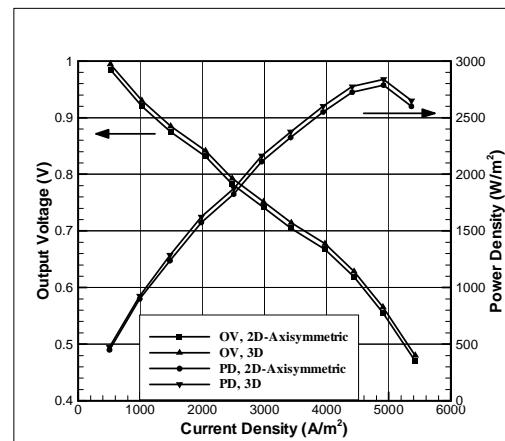
شکل ۱۳- چگالی جریان بر روی الکتروولیت برای دمای ورودی 700°C و تخلخل 30%

۵- نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از آنالیزهای انجام شده روی مدل پیل در شرایط

همین دلیل نرم افزار FLUENT قابلیت مدل سازی دو بعدی پیل سوختی را ندارد و باید مدل سازی سه بعدی صورت پذیرد. نرم افزار Comsol این قابلیت وجود دارد که ناحیه جمع‌کننده جریان به صورت صفحه در مدل سه بعدی و خط در حالت دو بعدی تعریف شود. این امر امکان مدل سازی دو بعدی را فراهم می‌آورد. همچنین، از خروجی‌های مستقیم نرم افزار Comsol، منحنی چگالی جریان - ولتاژ است؛ اما برای به دست آوردن این منحنی در نرم افزار FLUENT، باید نرم افزار چندین بار اجرا شود. یعنی در چندین نقطه باید نرم افزار FLUENT اجرا شده و دانسیته جریان در آن نقاط به دست آید. این امر باعث شده زمان محاسبات عددی در نرم افزار FLUENT به شدت افزایش یابد.

در شکل ۱۰ چگالی توان و ولتاژ خروجی در دو نرم افزار Comsol و FLUENT مقایسه شده است. نرم افزار Comsol توان و ولتاژ را کمتر از مقادیر به دست آمده از FLUENT پیش‌بینی می‌کند. اما اختلاف نتایج به دست آمده برای چگالی توان کمتر از ۷ درصد و برای ولتاژ کمتر از ۶ درصد است. یکی از دلایل این موضوع را شاید بتوان به مدل سازی الکتروولیت نسبت داد. چون الکتروولیت در Comsol به صورت یک ناحیه مدل می‌شود، تلفات اهمی ناشی از آن نیز در محاسبات منظور شده است و باعث می‌شود که ولتاژ خروجی نرم افزار Comsol کمتر از FLUENT باشد و در نتیجه آن چگالی توان نیز کمتر باشد.



شکل ۱۰- چگالی توان و ولتاژ برای مدل پایه در هر دو نرم افزار (دما ورودی 700°C و تخلخل 30%)

مقایسه دیگری هم بین نتایج دو نرم افزار براساس مقادیر پیش‌بینی شده کسر مولی صورت پذیرفته است. همان‌طور که در شکل ۱۱ دیده می‌شود، دو نرم افزار با تقریب خوبی نتایج مشابهی را ارائه می‌دهند. از مقایسه نتایج می‌توان این گونه نتیجه گرفت که نتایج به دست آمده از نرم افزار Comsol معتمر بوده و قابل اعتماد هستند.

۴- نتایج شبیه‌سازی پیل سوختی

شکل ۱۲ توزیع دما در کانال سوخت پیل سوختی را نشان می‌دهد. همان‌طور که دیده می‌شود، دما در طول پیل سوختی افزایش می‌یابد که دلیل آن تولید گرمای ناشی از واکنش‌های شیمیایی است. همچنین تلفات اهمی جریان الکتریسیته در قسمت‌های جامد اثر خود

- M. W., Douglas P. L., Entchev E., Mechanistic modelling of a cathode-supported tubular solid oxide fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 154, No. 1, pp. 74-85, 2006.
- [8] Suwanwarangkul R., Croiset E., Pritzker M. D., Fowler M. W., Douglas P. L., Entchev E., Modelling of a cathode-supported tubular solid oxide fuel cell operating with biomass-derived synthesis gas, *Journal of Power Sources*, Vol. 166, No. 2, pp. 386-399, 2007.
- [9] Mollayi Barzi Y., Ghassemi M., Hamed M. H., A 2D transient numerical model combining heat/mass transport effects in a tubular solid oxide fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 192, No. 1, pp. 200-207, 2009.
- [10] Stiller C., Thorud B., Seljebø S., Mathisen Ø., Karoliussen H., Bolland O., Finite-volume modeling and hybrid-cycle performance of planar and tubular solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 141, No. 2, pp. 227-240, 2005.
- [11] Autissier N., Larraín D., Van herle JFavrat., D., CFD simulation tool for solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 131, No. 1-2, pp. 313-319, 2004.
- [12] Pasaogullari U., Wang C. Y., Computational fluid dynamics modeling of solid oxide fuel cells, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 3, pp. 341-348, 2003.
- [13] Sleiti A. K., Performance of tubular Solid Oxide Fuel Cell at reduced temperature and cathode porosity, *Journal of Power Sources*, Vol. 195, No. 17, pp. 5719-5725, 2010.
- [14] Ghias M., Numerical Methods and Computational Softwares in Polymer Researches, *Basparesh Journal*, Vol. 2, pp. 48-58, 2012. (In Persian)
- [15] Berning T., Lu D. M., Djilali N., Three-dimensional computational analysis of transport phenomena in a PEM fuel cell, *Journal of Power Sources*, Vol. 106, No. 1-2, pp. 284-294, 2002.
- [16] Taylor R., Krishna R., Multi-component mass transfer, Pittsburgh: John Wiley and Sons, 1993.
- [17] Janardhanan V. M., Deutschmann O., Numerical study of mass and heat transport in solid-oxide fuel cells running on humidified methane, *Chemical Engineering Science*, Vol. 62, No. 18-20, pp. 5473-5486, 2007.
- [18] Andreassi L., Rubeo G., Ubertini S., Lunghi P., Bove R., Experimental and numerical analysis of a radial flow solid oxide fuel cell, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32, No. 17, pp. 4559-4574, 2007.
- [19] Gazzarri J. I., Kesler O., Non-destructive delamination detection in solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 167, No. 2, pp. 430-441, 2007.
- [20] Guvelioglu G. H., Stenger H. G., Computational fluid dynamics modeling of polymer electrolyte membrane fuel cells, *Journal of Power Sources*, Vol. 147, No. 1-2, pp. 95-106, 2005.
- [21] Liu S., Song C., Lin Z., The effects of the interconnect rib contact resistance on the performance of planar solid oxide fuel cell stack and the rib design optimization, *Journal of Power Sources*, Vol. 183, No. 1, pp. 214-225, 2008.
- [22] Fuel cells Module Manual 12.0, ANSYS Fluent, 2009.
- [23] Hagiwara A., Michibata H., Kimura A., Jaszcza M., Tomlins G., Veyo S. E., Tubular solid oxide fuel cells life test, in Proceedings of third international fuel cells conference, Nagoya, Japan, 1999.
- [24] Li P. W., Suzuki K., Numerical modeling and performance study of a tubular SOFC, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 151, pp. 548-557, 2004.

مختلف نشان می‌دهند مدل محاسباتی طراحی شده برای درک فرآیندهای پیچیده عملیات پیل‌سوختی اکسید‌جامد بسیار مفید است. نتایج حاصل با توجه به توزیع پارامترهای مهم مختلف از لحاظ سه بعدی بسیار کاربردی هستند. نتایج به شرح زیر است. با بررسی تأثیر دما، ثابت شد، عملکرد مدل برای مجموعه مشخصی از پارامترهای ثابت، در دمای بالاتر بهتر است. چون دمای بالا باعث افزایش چگالی توان و ولتاژ خروجی می‌شود. علت این پدیده این است که دمای بالاتر باعث می‌شود واکنش‌های شیمیایی تسریع شوند.

نمودار ولتاژ خروجی در تمامی موارد به جز در چگالی جریان‌های بالا تقریباً به صورت خطی تغییر می‌کرد که این موضوع نشان دهنده این است که در بیشتر طول پیل‌سوختی قطبش اهمی عامل اصلی تلفات است و تنها در چگالی جریان‌های بالا قطبش غلطی تاثیرگذارتر شده و باعث افت شدید در ولتاژ خروجی می‌شود.

علاوه بر این مقایسه نتایج به دست آمده از دو نرم‌افزار نشان می‌دهد که تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و اختلاف نتایج آنها در بیشترین مقدار کمتر از 7 درصد است و می‌توان گفت برای مدل‌سازی پیل‌سوختی اکسید‌جامد می‌توان از هر دو نرم‌افزار Comsol و FLUENT استفاده نمود. تمام رفتارهای پیش‌بینی شده با نرم‌افزار FLUENT به کمک نرم‌افزار Comsol هم قابل دستیابی است. هرچند که مدل مورد استفاده در Comsol با توجه به ماهیت المان محدودی خود، به تعداد کمتری شکنجه نیاز دارد که این باعث کاهش هزینه محاسباتی می‌شود.

نرم‌افزار Comsol امکانات مدل‌سازی متفاوت‌تر و بیشتری در مقایسه با نرم‌افزار FLUENT دارد که به کاربر این اجزه را می‌دهد تا با انتخاب‌های درست شرایط مدل‌سازی را به شرایط واقعی نزدیک‌تر و یا عملکرد پیل‌سوختی را در شرایط گوناگون مورد بررسی قرار دهد. همچنین از آنجایی که فرآیندهای پیل‌سوختی یک پدیده چندفیزیکی است، نرم‌افزار Comsol که براساس پدیده‌های چندفیزیکی طراحی شده است، قابلیت‌های بهتری برای مدل‌سازی ارائه می‌دهد.

۶- مراجع

- [1] History of Fuel cells. Available from: www.sae.org/fuelcells/fuelcells-history.htm
- [2] O'Hayre RCh., S. W., Colella W., Prinz F., *Fuel Cell Fundamentals*, New York: John Wiley & sons, 2009.
- [3] Bessette N., Wepfer W., Winnick J., Mathematical model of a Solid Oxide Fuel Cell, *Journal of Electrochemical Society*, Vol. 142, pp. 11-23, 1995.
- [4] Akhtar N., Decent S. P., Loghin D., Kendall K., 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.
- [5] Jiang W., Fang R., Dougal A. R., Thermoelectric Model of a Tubular SOFC for Dynamic Simulation, *Journal Energy Resource Technology*, Vol. 130, No. 2, pp. 601-611, 2008.
- [6] Campanari S., Iora P., Definition and sensitivity analysis of a finite volume SOFC model for a tubular cell geometry, *Journal of Power Sources*, Vol. 132, No. 1-2, pp. 113-126, 2004.
- [7] Suwanwarangkul R., Croiset E., Pritzker M. D., Fowler