



## شبیه سازی CFD پیل سوختی اکسید جامد پایه آندی

عارف شاهی<sup>۱</sup>، نسیمه حاجیلری<sup>۲\*</sup> و ماشالله رضا کاظمی<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup> پژوهشگر، دانشکده نفت آبادان، دانشگاه صنعت نفت، آبادان، ایران

<sup>۲\*</sup> استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

<sup>۳</sup> استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی و مواد، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۸/۳۰؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۷/۰۹/۱۱؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۱۱/۳۰

### چکیده

یک مدل سه بعدی دینامیک سیالات محاسباتی از پیل سوختی اکسید جامد پایه آندی، در این تحقیق ارائه شده است. این مدل در بردارنده پدیده‌های مهم انتقال در پیل سوختی از قبیل، انتقال حرارت، انتقال جرم، سینتیک الکتروود و میدان پتانسیل است. نتایج شبیه سازی مدل با داده‌های آزمایشگاهی موجود در منابع در شرایط مشابه مقایسه شد و تطابق خوبی را نیز نشان داد. در این مدل تأثیر پارامترهای مختلف از جمله، دما، فشار، استوکیومتری و ضخامت الکتروولیت روی عملکرد پیل سوختی، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده از این مدل توزیع گونه‌ها اعم از واکنشگرها و محصولات، توزیع دما، توزیع پتانسیل و توزیع چگالی جریان موضعی را به خوبی مشخص می‌کند. نتایج نشان داد، دما، فشار و استوکیومتری آند، تأثیر به سزایی بر عملکرد پیل می‌گذارند، به نحوی که افزایش هر کدام از پارامترها به بهبود عملکرد پیل سوختی کمک می‌کند. از سوی دیگر، افزایش ضخامت الکتروولیت می‌تواند اثرات نامطلوبی را بر عملکرد پیل سوختی بگذارد.

**کلمات کلیدی:** مدل CFD سه بعدی؛ واکنش‌های الکتروشیمیایی؛ SOFC؛ ضخامت الکتروولیت.

## CFD Simulation of Anode Solid Oxide Fuel Cell

A. shahi<sup>1</sup>, N. Hajilary<sup>2\*</sup>, Ma. Rezakazemi<sup>3</sup>

<sup>1</sup> M.Sc. Graduated, (Researcher) Chem. Eng., Petroleum Univ., Abadan, Iran.

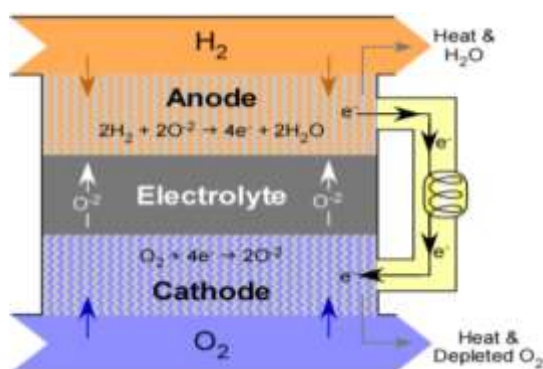
<sup>2\*</sup> Assis. Prof., Chem. Eng., Eng Fac, Golestan Univ., Gorgan, Iran.

<sup>3</sup> Assis. Prof., Chem. Eng., Shahrood Univ., Shahrood, Iran.

### Abstract

A 3D model of computational fluid dynamics for an anode solid oxide fuel cell is presented. This model incorporates important transport phenomena in a fuel cell such as heat transfer, mass transfer, electrode kinetics, and potential field. The simulation results of the model were compared with the available laboratory data in the same conditions that shows good agreement with other references. In this model, the effect of different parameters such as temperature, pressure, stoichiometry and electrolyte thickness on the fuel cell performance was investigated. The results of this model clearly describe the distribution of species, including reactants and products, temperature distribution, distribution potential, and distribution of current density. The results showed that the temperature, pressure and stoichiometry of the anode have a great effect on the performance of the cell so that each parameter increases the performance of the fuel cell performance. On the other hand, increasing the thickness of the electrolyte can have a negative effect on the performance of the fuel cell.

**Keywords:** 3D CFD Model; Electrochemical Reactions; SOFC; Electrolyte Thickness.



شکل ۱- قسمت های مختلف پیل سوختی اکسید جامد و نحوه عملکرد آن [۱]

شود. هزینه و زمان لازم برای انجام آزمایش برای بررسی تأثیر هر یک از پارامترها روی عملکرد سیستم بالاست. بنابراین ابزارهای پیشگوی عملی تری مورد نیاز هست. مدل های ریاضی در سطوح جزئی مانند بررسی عملکرد هر جزء تا بررسی کل سیستم توسعه یافته اند تا اثرات پارامترهای مختلف را به ازای هر مقیاس طولی بررسی کنند. پیشرفت های قابل توجهی در زمینه مدل سازی پیل های سوختی در سنوات اخیر صورت گرفته است. با وجود اینکه تعداد محققان ارائه کننده مدل ها در مقیاس استک رو به افزایش است؛ اما تحقیقات عمدتاً روی مقیاس های پیل و اجزاء آن صورت پذیرفته است [۱]. در اوایل قرن ۲۱ گروه های تحقیقاتی زیر اثرات غلظت، انتقال حرارت و جریان سیال و وضعیت الکتروشیمیایی را در یک پیل سوختی اکسید جامد در یک هندسه نصف کانال مدل کردند [۵-۱]. یاکابه<sup>۱</sup> و همکاران [۵] در سال ۲۰۰۰ یک پیل سوختی اکسید جامد پایه آندی با در نظر گرفتن نصف کانال با سوخت هیدروژن، کربن مونوکسید و یک واکنش انتقال آب<sup>۲</sup> برای تخمین قطبش غلظتی در نظر گرفتند. روش حجم محدود برای تعیین جریان سیال و توزیع اجزای واکنش گر با فرض برقراری قانون دارسی<sup>۳</sup> در آند مورد استفاده قرار گرفت. آنها بر این عقیده بودند که نتایج آزمایشگاهی می توانند تنها مقدار میانگین حول آند را ارائه دهد؛ در حالی که مدلسازی قادرست، توزیع غلظت را نشان

## ۱- مقدمه

سوخت های فسیلی منابع رو به زوال انرژی هستند. وسعت آلودگی ناشی از سوخت های فسیلی، زندگی بشر را با مشکلات جدی مواجه کرده است و ضرورت انتخاب جایگزین های مناسب ارزان و پاک برای همه آشکار است. از جمله انرژی های مطرح، انرژی الکتریکی تولید شده به وسیله پیل های سوختی است که به دلیل بازدهی بسیار بالا و عدم آلایندهی محیط زیست و نیز مصرف هیدروژن به عنوان سوخت در حال حاضر، راه حل مناسبی برای عبور از تنگنای انرژی و آلودگی های محیط زیستی است. از میان انواع پیل های سوختی، پیل سوختی اکسید جامد به دلیل مزایای متعدد از جمله قابلیت استفاده از سوخت های مختلف، جامد بودن تمامی اجزاء و قابلیت طراحی به اشکال گوناگون، عدم تخریب در دماهای بالا و امکان استفاده از گرما و بخار آب تولیدی در سیکل های ترکیبی بسیار پرکاربرد است. علی رغم هزینه های بالای فناوری پیل سوختی اکسید جامد، این فناوری در حال ورود به عرصه تجاری است و تعداد زیادی از این سامانه ها نصب شده و یا در حال بررسی هستند. پیل های سوختی اکسید جامد، جزء پیل های دما بالا هستند که از هیدروژن یا هیدروکربن به عنوان سوخت و از هوا به عنوان اکسیدان استفاده می نمایند؛ همچنین در آنها از الکترودهای سرامیکی متخلخل برای آند و کاتد استفاده می شود که به وسیله یک الکترولیت سرامیکی غیر متخلخل از یکدیگر جدا شده اند. در حال حاضر پیل های سوختی اکسید جامد، از مقیاس های کوچک مورد استفاده در صنعت اتومبیل سازی گرفته تا مقیاس های بزرگ وجود دارند که در کارخانه ها مورد استفاده قرار می گیرند. اجزای مختلف پیل سوختی اکسید جامد و نحوه عملکرد آن در شکل ۱ نشان داده شده است [۱]. سوخت و هوا به طور پیوسته به کانال های متناظرشان وارد می شوند. در قسمت آند یون های اکسیژن تولید و توسط غشاء به سمت کاتد هدایت می شوند و در کاتد با مولکول های هیدروژن واکنش می دهند که نتیجه نهایی واکنش ها تولید آب، الکتروسیسته و حرارت است.

برای توسعه تکنولوژی پیل های سوختی اثرات طراحی و پارامترهای عملیاتی در هر مقیاس طولی باید در نظر گرفته

<sup>1</sup> Yakabe

<sup>2</sup> Water Shift Reaction

<sup>3</sup> Darcy's Law

های معمول کمک کند. مین [۱۵] مدل دوبعدی رسوب کربن پیل‌های اکسید جامد با تغییرات ناپایای تخلخل را انجام داد. او در این مدل رسوب کربن را در نظر گرفت. معادلات ناویراستوکس انتقال حرارت، جرم و ممنتوم با نرم افزار کامسول حل شدند. در این مدل واکنش‌های شیمیایی فاز گاز برای پیش‌بینی ترسیب کربن،<sup>۲</sup> مورد استفاده قرار گرفتند. تغییرات ناپایای تخلخل آند و رسانایی الکتریکی که به خاطر ترسیب کربن حاصل می‌شود، مورد توجه واقع شد. نتایج نشان داد که تأثیر تغییرات تخلخل آند روی عملکرد الکتریکی پیل حدود ۷٪ است؛ بنابراین در نظر گرفتن تغییرات تخلخل در برابر ترسیب کربن ضروری به نظر می‌رسید. نتایج آنها نشان داد که افزایش نسبت آب / متان ورودی می‌تواند ترسیب کربن را حذف کند؛ اما چگالی جریان را به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد. مارتین اندرسون [۱۳]، مدل دو بعدی پیل اکسید جامد با در نظر گرفتن هیدروژن و مونوکسید کربن به عنوان واکنشگرهای الکتروشیمیایی را ارائه کرد. مونوکسید کربن و هیدروژن به عنوان واکنشگرهای الکتروشیمیایی درون آند در نظر گرفته شدند. نتایج به این صورت بود که توزیع چگالی جریان در راستای جهت اصلی جریان به غلظت‌های موضعی و دما بستگی دارد. درصد بالاتر واکنشگرهای الکتروشیمیایی پتانسیل نرنست<sup>۳</sup> را مانند چگالی جریان افزایش می‌دهند. برای مخلوط‌های سوخت بدون متان دبی حجمی هوای کاتد باید به طور قابل توجهی افزایش یابد تا از بروز گرادیان‌های بالای دما درون پیل هم چنین از دمای بالا در خروجی جلوگیری نماید. حافظیا و همکاران [۱۶]، تأثیر کسر مولی بر میدان حرارتی در پیل اکسید جامد با خوراک متان را بررسی کردند. سوخت ترکیبی از متان، هیدروژن، کربن دی اکسید، کربن مونوکسید و بخار آب و فرآیند تبدیل داخلی یا خارجی در بخش آند ظاهر شد. هدف اصلی بررسی میدان‌های دما تحت تأثیر منابع انرژی بود که به وسیله واکنش‌های تبدیل داخلی مستقیم ایجاد می‌شوند. گرادیان دما برای گاز ورودی با کسرهای مولی متفاوت بررسی شد. نتایج نشان داد که تأثیر کسر مولی سوخت در حضور تبدیل داخلی مستقیم غیر

دهد. یاکابه و همکاران [۶] در سال ۲۰۰۱ این کار را توسعه دادند تا غلظت، دما، پتانسیل و توزیع‌های چگالی جریان یک پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای برای جریان‌های همسو و ناهمسو شبیه‌سازی کنند. پایستگی جرم، انرژی و بار الکتریکی برای تعیین اثر اندازه پیل، ولتاژ عملیاتی و رسانایی حرارتی روی بازدهی در مدل گنجانده شد. بر اساس توزیع دمای حاصل، توزیع تنش با استفاده از روش المان محدود محاسبه شد. نتایج نشان داد، تبدیل بخار می‌تواند منجر به تنش‌های داخلی بزرگ شود. به طور مشابه یوان و همکاران [۷] در سال ۲۰۰۷، یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی (CFD)<sup>۱</sup> برای حل جریان گاز و انتقال حرارت روی نیمی از کانال پیل سوختی اکسید پلیمری ارائه کردند. این آنالیز به پیل‌های اکسید جامد پایه آندی و پیل‌های اکسید جامد دما متوسط تا زمانی تعمیر داده شد که تنها جریان به صورت تک فاز در هر دو در نظر گرفته شوند. آنها یک فاکتور اصطکاک فاینینگ و عدد ناسلت که به ترتیب برای انتقال همرفت درممنتوم و معادله حرارت استفاده می‌شوند را به خدمت گرفتند. همچنین اثرات ضخامت لایه‌های متخلخل، چگالی جریان، تراوایی و رسانایی‌های گرمایی روی انتقال سیال و انتقال حرارت بررسی شد. اهمیت قطبش غلظتی در پیل‌های پایه آندی و اثر هندسه مجرا روی توزیع گاز نشان داده شد. گروه‌های تحقیقاتی دیگری نیز در زمینه رسوب کربن و استفاده از سوخت‌های هیدروکربنی و بیوگاز مطالعاتی را انجام داده اند [۱۳-۸]. والری [۱۴] تحلیل عددی یک پیل سوختی اکسید جامد با تبدیل داخلی متان را ارائه کرد. در این مدل بازگشت خروجی‌های آند به عنوان راه حلی برای کاهش رسوب کربن به کار گرفته شد. از مدل جامع CFD استفاده شد که ممنتوم، حرارت و جرم و انتقال بار را با واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی کوپل می‌کند. میزان رسوب کربن در آند با در نظر گرفتن واکنش‌های شکست برای شرایط مختلف سوخت انجام گرفت. وی بر این عقیده بود که برگشت سوخت خطر تشکیل رسوب را کاهش می‌دهد؛ اما قادر به حذف آن نیست. نتایج نشان داد، بازگردانی جریان‌های آندی می‌تواند به دامنه عملکرد پیل‌های با تبدیل داخلی مستقیم برای سطوح پایین رطوبت سوخت نسبت به حالت

<sup>۲</sup> Carbon Sequestration<sup>۳</sup> Nernst Potential<sup>۱</sup> Computational Fluid Dynamic

قابل اغماض است. رزبانی [۱۷] مدل سه بعدی پیل‌های اکسید جامد پایه الکترولیتی و با خوراک بیوگاز عاری از متان را با کمک نرم افزار کامسول ارائه کرد. برای اثبات نتایج شبیه سازی یک ستاپ حاوی یک استک متشکل از شش پیل ساخته شد. دمای پیل و اندازه گیری‌های جریان-ولتاژ برای اعتبارسنجی نتایج شبیه سازی استفاده شدند. اعتبارسنجی دمایی علاوه بر اعتبارسنجی معمول جریان-ولتاژ این اطمینان را می‌دهد که عملکرد مدل در پیش بینی فشارهای موضعی مانند واکنش‌های شیمیایی به خوبی صورت گیرد. تینگ<sup>۱</sup> [۱۸] مطالعه پارامتریک اثرگذرای رسوب کربن روی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای را با ارائه یک مدل دو بعدی با استفاده از نرم افزار کامسول صورت داد. ترسیب کربن، فعالیت کاتالیست، نرخ واکنش و میدان‌های دما بدست آمدند تا مکانیزم ترسیب کربن در پیل برای زمان‌های عملکرد مختلف آنالیز شود. اثرات ولتاژ عملیاتی، کسر مولی هیدروژن ورودی، فشار و دمای عملیاتی روی عملکرد پیل به دقت بررسی شد. نتایج نشان داد، بزرگترین تغییرات ایجاد شده در عملکرد به وسیله ترسیب کربن در ناحیه ورودی لایه نفوذ آند اتفاق می‌افتد. افزایش ولتاژ عملیاتی، کسر مولی هیدروژن ورودی، فشار و دما باعث سرعت بخشیدن به فرآیند ترسیب کربن می‌شوند. واکفتسی<sup>۲</sup> [۱۹] مدل CFD سه بعدی پیل اکسید جامد صفحه‌ای با خوراک مخلوط بیوگاز و بخار آب را ارائه کرد. توزیع اجزاء گازی، چگالی جریان و پتانسیل‌ها و گرادیان‌های دما پیش‌بینی شد. نتایج نشان داد، بیوگاز با نسبت مولی برابر متان/کربن دی اکسید منجر به بهبود عملکرد می‌شود، اما اضافه کردن مقادیر کم می‌تواند از ترسیب کربن جلوگیری کند. مارتین اندرسن [۱۲]، مدل سه بعدی بر اساس روش المان محدود برای پیل سوختی با رسانایی حرارتی غیر همسانگرد را تعریف کرد. منحصر به فرد بودن کار او در این بود که برای لایه نفوذ گاز و لایه واکنشی آند خاصیت غیر همسانگرد<sup>۳</sup> در نظر گرفته شد. مطالعه پارامتری نشان داد، افزایش رسانایی الکتریکی (افزایش در لایه‌های واکنشی آند و کاتد و لایه‌های نگهدارنده)، در جهت خاص به فصل مشترک الکتروود/

الکترولیت عملکرد را افزایش خواهد داد. از طرف دیگر نتایج نشان دادند، افزایش رسانایی حرارتی عمود بر مسیر انتقال سوخت الکتروود به میزان قابل توجهی چگالی جریان را افزایش می‌دهد. می‌توان نتیجه گرفت، افزایش رسانایی الکتریکی موازی با الکتروود/الکترولیت و عمود بر مسیر انتقال سوخت و گازها در الکتروود فعال بازدهی چگالی جریان را افزایش می‌دهد. بهینه‌سازی عملکرد پیل نیازمند در نظر گرفتن رسانایی غیرهمسانگرد است که برای توسعه مدل‌های سه بعدی مورد نیاز است. به هر ترتیب از مطالعات صورت گرفته جایگاه ویژه این فناوری به خوبی مشخص می‌شود. هدف از این تحقیق، بررسی پدیده‌های انتقال درون یک پیل سوختی اکسید جامد با خوراک هیدروژن به منظور بدست آمدن عملکرد کلی آن است. برای این منظور، یک مدل CFD سه بعدی از پیل سوختی معرفی شده توسعه داده شده است. با کمک نتایج بدست آمده از مدل توزیع‌های موضعی از قبیل، دما، غلظت و موارد دیگر مورد بحث و بررسی قرار گرفته است. در مطالعات پیشین بیشتر بر توزیع دما، توزیع جریان گاز، ترکیب درصد گاز و توزیع دانسیته جریان گاز تمرکز نموده‌اند؛ در حالیکه در این مقاله اثر جریان و توزیع دما بر توان خروجی و تغییرات گونه‌ها در طول کانال‌های پیل سوختی اکسید جامد، تغییرات فشار در کانال‌های آند و کاتد، توزیع چگالی جریان و تأثیر ضخامت الکترولیت بر عملکرد پیل سوختی بررسی شده است که کمتر مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. برای حل معادلات حاکم از نرم افزار فلوئنت و ماژول پیل سوختی موجود در آن استفاده شده است.

## ۲- هندسه مدل

در شکل‌های ۲ و ۳ هندسه مورد مطالعه و نحوه شبکه‌بندی مربوطه نشان داده شده است. مش‌ها در تمام هندسه به صورت شش وجهی‌های منظم بوده و در لایه‌های الکترولیت، آند و کاتد ریزتر و در کانال‌های سوخت و اکسند و در صفحات اتصال‌دهنده درشت‌تر هستند. به منظور کسب اطمینان از مستقل بودن حل از اندازه شبکه ایجاد شده، شبکه‌های مختلفی به صورت با سازمان و با سلول‌هایی به شکل مکعب مستطیل هشت وجهی، با اندازه‌های مختلف ایجاد و نتایج حل آن‌ها مطابق جدول ۱ با هم مقایسه گردید که در نهایت شبکه‌ای با ۵۵۹۷۶ گره انتخاب شد (ولتاژ

<sup>1</sup> Ting Ma

<sup>2</sup> Vakouftsi

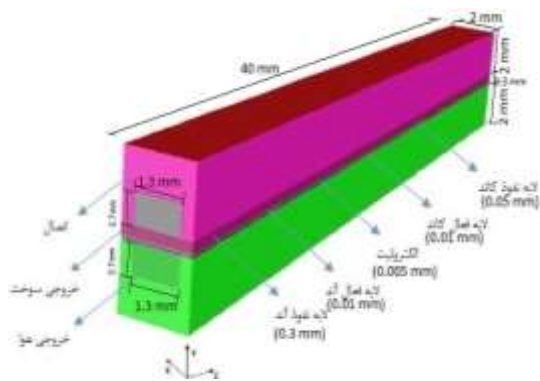
<sup>3</sup> Anisotropic

$$\nabla(\rho_{eff}U) = S_m \quad (1)$$

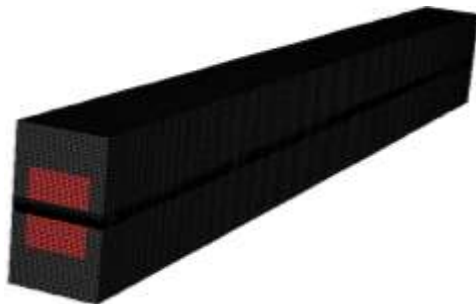
که در آن  $U$  بردار سرعت متوسط حجمی مخلوط گازی است. جمله مربوط به چشمه  $S_m$  برای تولید و مصرف به واسطه واکنش‌های الکتروشیمیایی (در لایه‌های واکنشی) است. ضمن اینکه ترم‌های چشمه می‌توانند با استفاده از نرخ تولید/مصرف حجمی اجزاء به خاطر واکنش‌های الکتروشیمیایی بیان شوند

جدول ۱- استقلال از مش مدل هندسی صحت سنجی شده

تعداد گره	دانشیته جریان [ $A/cm^2$ ]
۴۹۵۰۰	۰/۱۶
۵۲۲۵۳	۰/۱۷
۵۵۹۷۶	۰/۱۸
۵۸۳۵۱	۰/۱۸



شکل ۲- هندسه مدل و بخش‌های مختلف آن



شکل ۳- شبکه بندی هندسه

مرجع در تمامی گره‌ها ۰/۷۵ ولت می‌باشد). همگرایی حل زمانی برقرار می‌شود که خطای نسبی بین دو تکرار متوالی، ۵-۱۰ باشد. در نهایت استقلال از شبکه به ازای ۵۶۰۰۰ المان به دست آمد؛ به این معنی که با افزایش تعداد مش‌ها دیگر تغییراتی در نتایج مشاهده نشد. شکل ۲ مشخصات قسمت‌های مختلف پیل را نشان می‌دهد.

معادله پایستگی جرم برای اجزاء فاز گازی درون پیل به کار می‌رود و برای کانال‌های سوخت و هوا و الکترودهای نظیر آن‌ها حل می‌شود. معادلات حاکم برای انتقال ممنتوم معادلات ناویر استوکس هستند که در کانال‌های سوخت مورد استفاده قرار می‌گیرند و برای الکترودهای متخلخل ترم داری به آن اضافه می‌شود. به دلیل پایین بودن عدد رینولدز جریان درون کانال‌های آند و کاتد آرام در نظر گرفته می‌شود. از معادله انرژی برای جریان همرفت انرژی، رسانش حرارت از درون جامد و مخلوط سوخت، شار حرارت به علت نفوذ اجزاء گازی سوخت و یک ترم چشمه استفاده می‌شود.

از معادلات پایستگی اجزاء برای آند و کاتد نیز استفاده شد. برای نفوذ جرم، مدل dusty-gas در این کار مورد استفاده قرار گرفت. در الکترودهای متخلخل، فرض می‌شود که مسیر آزاد متوسط مولکول‌ها بزرگتر از اندازه منافذ است؛ یعنی برخورد بین مولکول‌ها و دیواره‌ها بیشتر از برخورد با دیگر مولکول‌هاست. معادله پایستگی بار برای انتقال بار درگیر در فاز یونی / الکترونی حل می‌شود. معادله پواسون برای میدان الکترونی/یونی در تمام نواحی استفاده شد.

در کانال آند، سوخت (هیدروژن و مقداری آب) و هوا در کانال کاتد وارد می‌شود. واکنشگرها با نفوذ و همرفت به مرزهای فازی سه‌گانه منتقل می‌شوند، جایی که واکنش‌های الکتروشیمیایی رخ می‌دهند. ولتاژ مدار باز با ترکیب درصد و دما در الکترودها تغییر می‌کند که می‌تواند به وسیله معادله نرنست برای واکنش هیدروژن و اکسیژن خالص محاسبه گردد.

### ۳- معادلات حاکم

#### ۳-۱- معادله پایستگی جرم

معادله ۱ برای توصیف پایستگی جرم برای اجزاء فاز گازی درون پیل به کار می‌رود و برای کانال‌های سوخت و هوا و الکترودهای نظیر آن‌ها حل می‌شود [۲]:

گونه  $i$  است. پارامترهای مؤثر برای ناحیه متخلخل، از قبیل رسانایی حرارتی مؤثر و حرارت ویژه مؤثر طبق روابط ۶ و ۷ محاسبه می شوند:

$$k_{eff} = \varepsilon k_f + (1 - \varepsilon)k_s \quad (6)$$

$$C_{p,eff} = \varepsilon C_{p,f} + (1 - \varepsilon)C_{p,s} \quad (7)$$

که  $\varepsilon$  تخلخل،  $k_f, k_s$  به ترتیب مربوط به رسانایی حرارتی سیال و ساختار جامد است.  $C_{p,s}$  و  $C_{p,f}$  حرارت ویژه مخلوط گازی و قسمت جامد ماده متخلخل است.

### ۳-۴- معادله پایستگی اجزاء

معادلات پایستگی اجزاء به طور کلی با رابطه ۸ بیان می شود [۲]:

$$\nabla(\rho_{eff} U Y_i) = \nabla(D_{i,eff} \nabla Y_i) + S_{g,i} \quad (8)$$

که در آن  $Y_i$  کسر مولی  $D_{i,eff}$  ضریب نفوذ جرمی مؤثر،  $S_{g,i}$  نرخ تولید یا مصرف اجزاء است.

در لایه واکنشی آند / کاتد:

$$S_{g,i} = A_{ve} \times R_e \times M_i \quad (9)$$

برای نفوذ جرم، مدل dusty-gas در این کار مورد استفاده قرار گرفت.

### ۳-۵- انتقال یون و الکترون

معادله پایستگی بار برای انتقال بار درگیر در فاز یونی / الکترونی حل می شود. معادله پواسون<sup>۱</sup> برای میدان الکترونی/یونی در تمام نواحی به صورت رابطه ۱۰ است [۲]:

$$-\nabla(\sigma_{eff} \nabla \phi) = S_\phi \quad (10)$$

که در آن  $\sigma_{eff}$  رسانایی الکتریکی / یونی در الکترولیت یا اتصال دهنده میانی است و ترم چشمه  $S_\phi$  برای توصیف جریان انتقالی بین فازهای الکتریکی و یونی درون لایه های واکنشی آند و کاتد مورد استفاده قرار می گیرد. در جایی دیگر در کانال های گاز، لایه های نفوذ، اتصال دهنده های میانی و الکترولیت  $S_\phi$  صفر است؛ یعنی معادله پواسون به لاپلاس تبدیل می شود.

که در مرز سه فازی رخ می دهند. برای پیل های سوختی اکسید جامد، ترم چشمه متناظر است با مصرف هیدروژن و تولید آب در قسمت آند و مصرف اکسیژن در بخش کاتد.

برای لایه واکنشی آند:

$$S_m = (J_{H_2} + J_{H_2O}) \frac{A_{active}}{V} \\ = \left( -\frac{I_{A,act,a}}{2F} M_{H_2} + \frac{I_{A,act,a}}{2F} M_{H_2O} \right) \frac{A_{active}}{V} \quad (2)$$

برای لایه واکنشی کاتد:

$$S_m = J_{O_2} \cdot \frac{A_{active}}{V} = -\frac{I_{A,act,c}}{2F} M_{O_2} \cdot \frac{A_{active}}{V} \quad (3)$$

برای کانال ها و لایه نفوذ داریم  $S_m = 0$  همچنین در معادلات ۲ و ۳،  $M_i$  وزن مولکولی گونه ها،  $V$  حجم مربوط به حجم کنترل در سایت های فعال،  $A_{active}$  سطح فعال الکتروشیمیایی به ازای واحد حجم هستند.  $F$  ثابت فارادی،  $I_{A,act,a/c}$  جریان انتقالی حجمی واکنشگرها در آند و کاتد و  $A_{ve} = \frac{A_{active}}{V}$  هستند.

### ۳-۲- معادله بقاء ممنتوم

معادلات حاکم برای انتقال ممنتوم معادلات ناویر استوکس هستند که در کانال های سوخت، مورد استفاده قرار می گیرند و برای الکترودهای متخلخل ترم داری به آن اضافه می شود. به دلیل پایین بودن عدد رینولدز جریان درون کانال های آند و کاتد آرام در نظر گرفته می شود. معادله ممنتوم به صورت رابطه (۴) است [۲]:

$$\nabla(\rho_{eff} U U) = -\nabla P + \nabla(\mu_{eff} \nabla U) + S_d \quad (4)$$

### ۳-۳- معادله حرارت

معادله حرارت را طبق رابطه ۶ می توان تعریف کرد [۲]:

$$\nabla(\rho_{eff} C_{p,eff} U T) \\ = \nabla \left( k_{eff} \nabla T - \sum_i^n m_i h_i \right) + S_T \quad (5)$$

معادله ۵ موازنه بین جریان همرفت انرژی، رسانش حرارت از درون جامد و مخلوط سوخت، شار حرارت به علت نفوذ اجزاء گازی سوخت و یک ترم چشمه  $S_T$  است.  $h_i$  آنتالپی جزئی

<sup>1</sup> Poisson

### ۳-۶- واکنش های الکتروشیمیایی

در کانال آند، سوخت (هیدروژن) و هوا در کانال کاتد وارد می‌شود. واکنشگرها با نفوذ و همرفت به TPBs<sup>1</sup> منتقل می‌شوند، جایی که واکنش‌های الکتروشیمیایی رخ می‌دهند. ولتاژ مدار باز با ترکیب درصد و دما در الکترودها تغییر می‌کند که می‌تواند به وسیله معادله نرنست برای واکنش هیدروژن و اکسیژن خالص محاسبه گردد [۲].

$$OCV = E^0 - \frac{RT}{2F} \ln \left( \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2} \sqrt{P_{O_2}}} \right) \quad (11)$$

$E^0$  پتانسیل واکنش اکسیداسیون هیدروژن در دما و فشار استاندارد است. پتانسیل مدار باز بیشترین پتانسیلی است که می‌توان از سوخت گرفت، در صورتی که هیچ جریانی اعمال نشود. ولتاژ واقعی پیل E، یعنی اختلاف پتانسیل بین کاتد و آند، از مقدار مربوط به OCV زمانی که جریان اعمال گردد کمتر خواهد بود. اختلاف بین OCV و ولتاژ واقعی به خاطر افت‌های پتانسیل مختلف است. در تحقیق صورت گرفته افت اهمی در بخش جامد پیل، افت‌های فعال‌سازی و غلظتی در TPBs در نظر گرفته شده است؛ بنابراین ولتاژ عملیاتی پیل با معادله زیر بیان می‌شود:

$$E = OCV - \eta_{act,a/c} - \eta_{conc,a/c} - I \times R_{ohm} \quad (12)$$

که I چگالی جریان موضعی است. جملات دوم تا چهارم در سمت راست معادله افت‌های فعال‌سازی و غلظتی در لایه‌های واکنشی الکتروود را بیان می‌کنند و افت‌های اهمی به خاطر جریان الکترون‌ها و یون‌هاست. افت غلظتی زما می‌دهد که نرخ انتقال جرم به سایت‌های واکنشی خیلی کمتر از مقداری است که مقدار واکنش‌گر مورد نیاز برای واکنش‌ها را تأمین می‌کند. این موضوع مخصوصاً در چگالی‌های بالای جریان اتفاق می‌افتد، زمانیکه سرعت واکنش‌ها خیلی بالاست. افت فعال‌سازی بیانگر انرژی از دست رفته به خاطر کندی واکنش-های الکتروشیمیایی در لایه‌های واکنشی آند و کاتد است. یک اختلاف پتانسیل در فصل مشترک بین الکتروود (فلز برای الکترون‌ها) و ماده الکتروولیت (YSZ برای یون‌ها) برای هدایت واکنش از حالت تعادل مورد نیاز است. در تعادل واکنش‌های رفت و برگشت با سرعت یکسان رخ می‌دهند. دو

<sup>2</sup> Triple Phase Boundaries

افت پتانسیل فعال‌سازی وجود دارد که یکی برای لایه واکنشی آند و دیگری برای لایه واکنشی کاتد است.

### ۴- شرایط عملیاتی و پارامترهای ورودی

در این بخش شرایط عملیاتی و پارامترهای ورودی برای مدل توضیح داده شده است. سوخت با دبی  $2 \times 10^{-4}$  kg/s با ترکیب درصد ۹۵٪ هیدروژن و ۵ درصد آب در دمای ۱۰۷۳ کلوین وارد پیل می‌شود. هوا با دبی  $8 \times 10^{-7}$  kg/s با ترکیب درصد ۲۳/۳٪ اکسیژن و ۷۶/۷ درصد نیتروژن در دمای ۱۰۷۳ کلوین نیز وارد پیل می‌شود. دیواره بالا اتصال آند، صفر ولت و دیواره پایین اتصال کاتد، ۰/۷ ولت و هر دو بصورت آدیاباتیک می‌باشند. پتانسیل در جمع‌کننده جریان قسمت آند، صفر و در جمع‌کننده جریان کاتد به عنوان ولتاژ عملیاتی پیل روی ۰/۷ تنظیم شده است. تمام مرزهای خارجی دیگر و فصل مشترک‌ها از نظر الکتریکی عایق هستند. برای هر دو لایه نفوذ آند و کاتد تراوایی  $10^{-1}$  m<sup>2</sup>، نسبت سطح فعال به حجم  $2 \times 10^5$  m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>، ظرفیت گرمایی ویژه ۴۵۰ J/kg.K و هدایت حرارتی W/m.K ۱۱ در نظر گرفته شده است. برای هر دو لایه فعال آند و کاتد تراوایی  $2 \times 10^{-11}$  m<sup>2</sup>، نسبت سطح فعال به حجم  $1 \times 10^5$  m<sup>2</sup>/m<sup>3</sup>، ظرفیت گرمایی ویژه ۴۳۰ J/kg.K و هدایت حرارتی W/m.K ۶ در نظر گرفته شده است. تخلخل کلیه قسمت‌های متخلخل ۰/۳ است. الکتروولیت و صفحه اتصال نیز دارای ظرفیت گرمایی ویژه ۵۵۰ J/kg.K و بترتیب هدایت حرارتی W/m.K ۲/۷ و ۲۰ می‌باشند.

پارامترهای مرجع برای واکنش‌های الکتروشیمیایی از مرجع [۲۰ و ۲۱] دریافت شده است.

### ۵- شبیه‌سازی و نتایج

اولین مرحله پس از توسعه هر مدلی بر اساس اصول ریاضی و محاسباتی بررسی صحت و اعتبار آن است. اعتبار سنجی معمولاً با مقایسه نتایج مدل با نتایج آزمایشگاهی صورت می‌گیرد. برای اعتبارسنجی موفق یک مدل، ضروری است که پارامترهای مستقل تا حد امکان برای مقایسه انطباق داشته باشند، گرچه گاهی فرصت کمتری برای انطباق دقیق پارامترها با مقادیر آزمایشگاهی به خاطر محدودیت‌های مدل به واسطه فرض‌های ساده‌کننده اعمالی در آن وجود دارد.

### ۵-۱- نمودار توان خروجی بر حسب جریان

شکل ۴ تغییرات توان خروجی از پیل سوختی نسبت به چگالی جریان را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار بهترین محدوده کار پیل سوختی اکسید جامد بین ۱/۶ تا ۲ آمپر بر سانتی متر مربع است. به منظور مشخص کردن حداکثر توان تولیدی و بهترین دامنه آمپر، توان خروجی در چگالی‌های مختلف در شکل ۴ ارائه شده است. این افزایش و سپس کاهش توان خروجی بدلیل حالت وارونگی افزایش جریان و اثر معکوس آن در تولید توان خروجی است.

### ۵-۲- توزیع دما

روند تغییرات دما در کل پیل و توزیع دما پیش بینی شده در سلول در شکل ۵ نشان داده شده است که درجه حرارت در ورودی آنود و کاتد پایین ترین (۱۰۷۰ کلوین) است، سپس در طول جریان افزایش می‌یابد و در مناطق نزدیک به

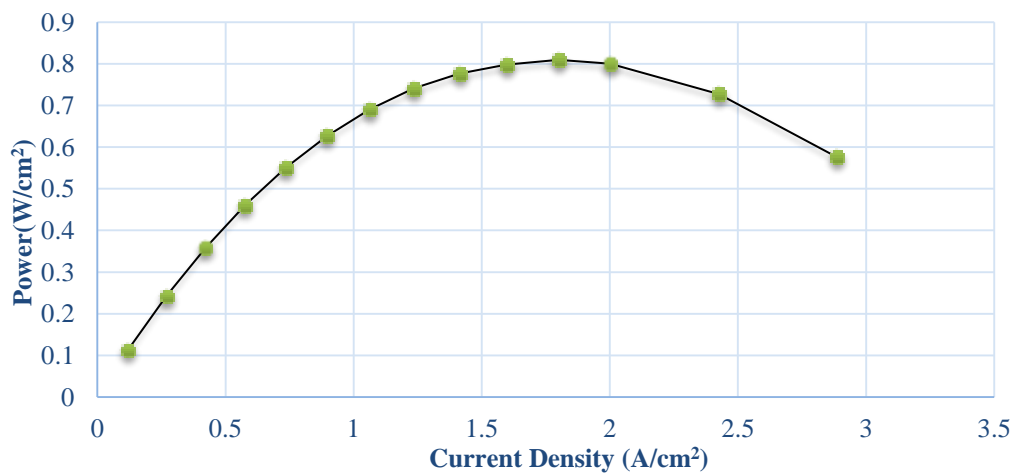
فرض‌های بکار گرفته شده در این شبیه‌سازی: شرایط حاکم به صورت پایا در نظر گرفته می‌شود، مخلوط گاز در آند و کاتد ایده آل فرض می‌شوند، با توجه به پایین بودن سرعت، جریان گاز آرام و غیر قابل تراکم است، لایه‌های نفوذ گاز، کاتالیست و غشاء به صورت متخلخل همسانگرد فرض می‌شوند، از مقاومت الکتریکی تماسی بین اجزای به کار گرفته شده صرف‌نظر شده است، غشاء نسبت به گازهای واکنشگر غیر قابل نفوذ است. جدول ۲ مقایسه نتایج مدل و داده های آزمایشگاهی ارائه شده در مرجع [۱] نشان داده شده است.

از جدول ۲ می‌توان دریافت که نتایج مدل تطابق قابل قبولی با داده‌های آزمایشگاهی و هندسه ارائه شده در منابع [۲] را نشان می‌دهد. از این رو می‌توان گفت، این مدل قابلیت پیش‌گویی میزان تأثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد پیل سوختی هندسه این مطالعه را داراست.

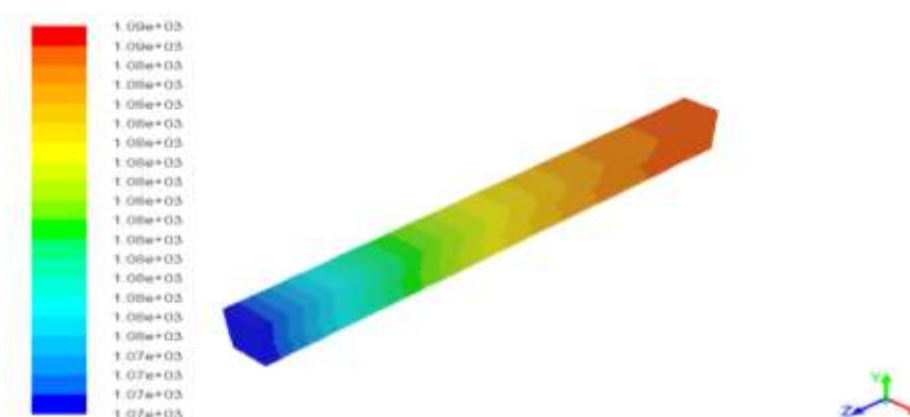
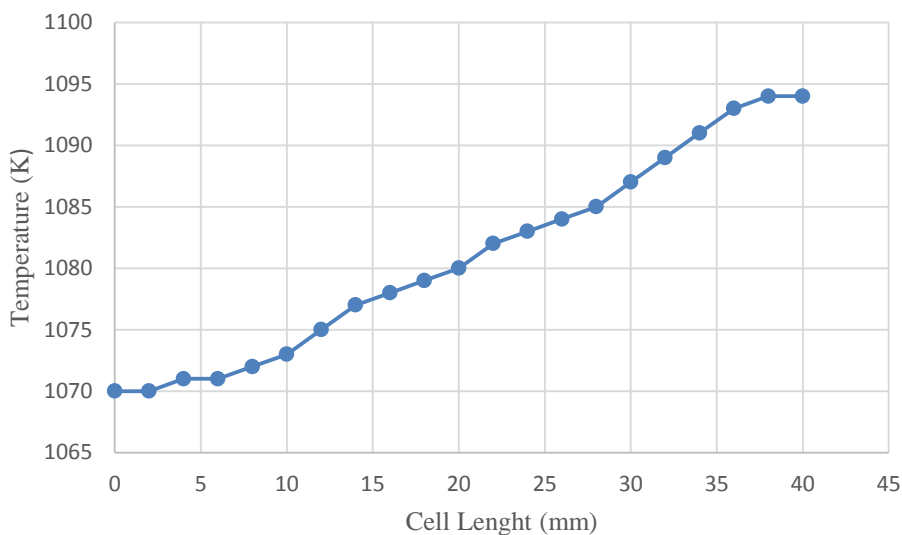
جدول ۲- مقایسه نتایج شبیه سازی و داده های تجربی در شرایط عملیاتی مشابه

Current Density (A/cm <sup>2</sup> )	Voltage (V) - Experiment	Voltage (V) - Model	Error (%)
0.244	0.93	0.955	2.688172
0.369	0.91	0.924	1.538462
0.430	0.88	0.892	1.363636
0.498	0.83	0.841	1.325301
0.562	0.82	0.828	0.97561
0.620	0.8	0.805	0.625
0.684	0.77	0.774	0.519481
0.748	0.75	0.754	0.533333
0.809	0.73	0.733	0.410959
0.876	0.70	0.704	0.571429
0.937	0.69	0.692	0.289855
0.998	0.67	0.673	0.447761
1.060	0.65	0.652	0.307692
1.200	0.62	0.623	0.483871





شکل ۴- توان خروجی SOFC بر حسب چگالی جریان به ازای ولتاژ ۰/۷



شکل ۵- توزیع دما در کل پیل سوختی اکسید جامد برای ولتاژ ۰/۷

تأثیر پذیری تغییرات ولتاژ در راستای طول کانال است که با این بررسی میتوان میزان بهینه ولتاژ جریان را بدست آورد؛ در نتیجه می توان به این نتیجه رسید که در ولتاژهای پایین تر طول کانال تأثیر زیادی در روند تغییرات دارد و تغییرات در طول کانال بصورت خطی است، در حالی که در ولتاژهای بالاتر تغییرات بصورت تدریجی است.

#### ۵-۴- تغییرات فشار در کانال های آند و کاتد

مطابق شکل ۹ افت فشار در راستای جریان به علت نفوذ واکنشگرها به ناحیه سه فاز اجتناب ناپذیر به نظر می رسد. با افزایش ولتاژ میزان شرکت واکنشگرها در واکنش دچار افت می شود با مقایسه شکلها به وضوح می توان دید، برای تمام حالات جریان خروجی آند فشار یکسانی داراست که نزدیک به صفر نسبی است، اما تفاوت در نواحی ورودی کانال سوخت است، جایی که بیشترین میزان مصرف واکنشگر اتفاق می افتد. از آنجایی که به ازای ولتاژ بالاتر جریان کمتری قابل استحصال خواهد بود، منطقی به نظر می رسد که فشار نواحی ورودی برای ولتاژهای بالاتر بیشتر باشد؛ چون در واقع واکنشگر کمتری به سمت لایه سه فاز نفوذ خواهد کرد و میزان حضور آن ها در کانال بیشتر است. با توجه به شکل ۹ مشهود است که تغییرات فشار در کانال های آند و کاتد وضعیت های متفاوتی دارند. در کانال آند تغییرات فشار کم و بالعکس در کانال کاتد این تغییرات بیشتر است. با توجه به این که در کانال آند به ازای هر یک مول هیدروژن یک مول بخار آب نیز تولید می شود، انتظار می رود تغییرات فشار در آن چشمگیر نباشد؛ اما در مورد کانال کاتد این موضوع دیگر برقرار نیست و جریان گاز پیوسته رو به کاهش و بنابراین افت فشار بیشتری را به همراه خواهد داشت.

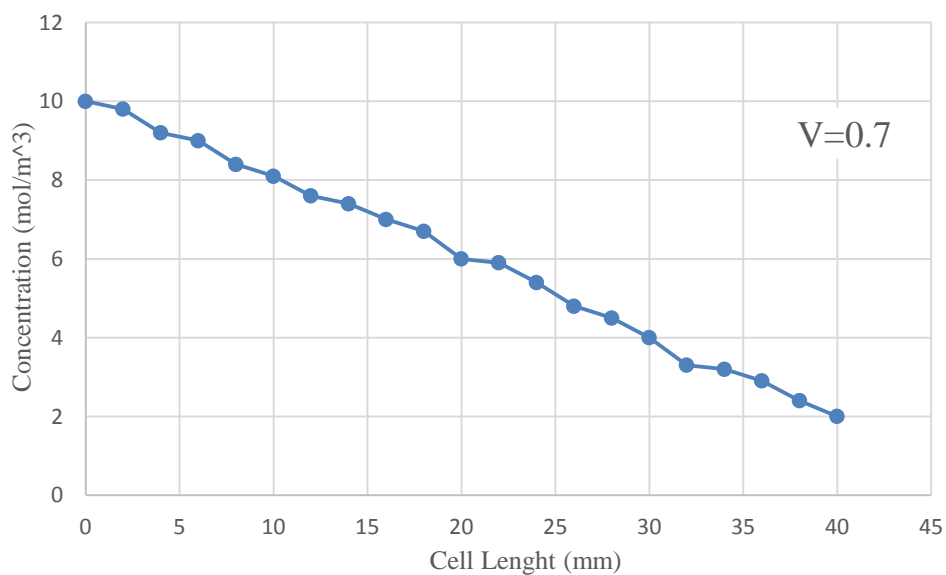
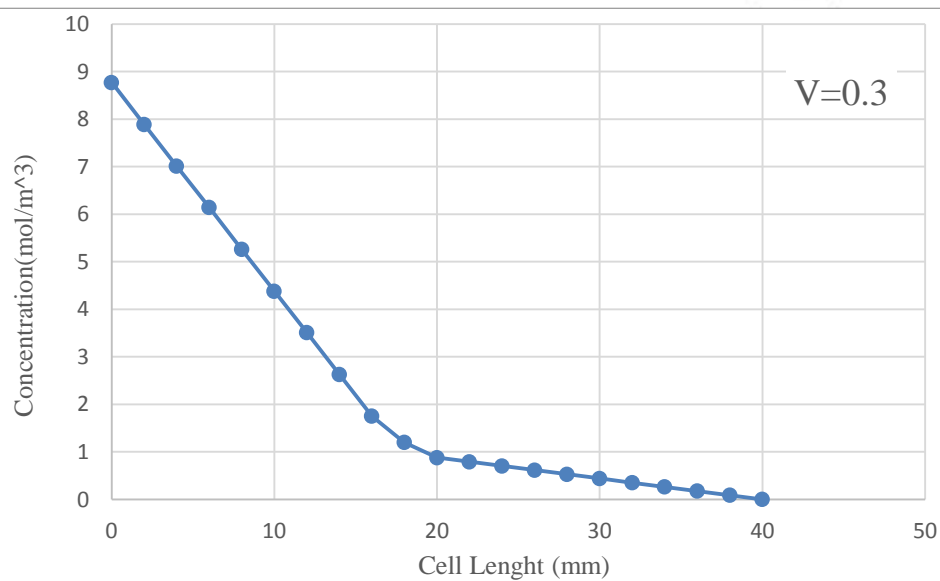
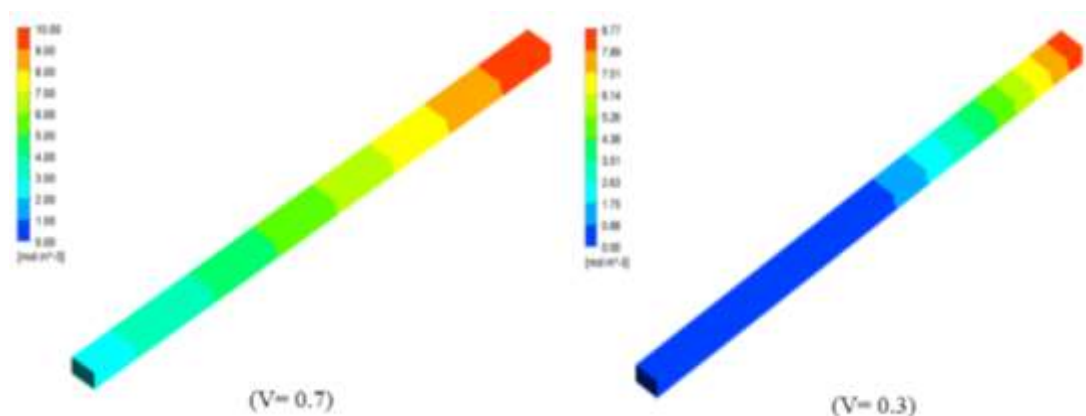
#### ۵-۵- توزیع چگالی جریان

با توجه به شکل های ۱۰ و ۱۱ در جهت جریان به علت کاهش غلظت سوخت و اکسیژن چگالی جریان کاهش می یابد؛ هم چنین ماکزیمم چگالی جریان در لایه واکنشی کاتد بیشتر از آند است، علت آن هم این است که ضخامت الکتروود کاتد خیلی کوچکتر از الکتروود آند است.

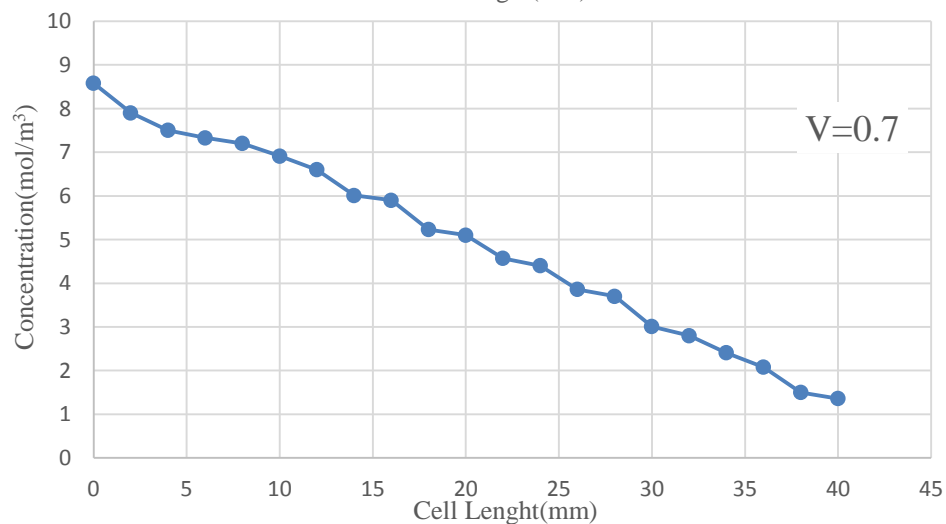
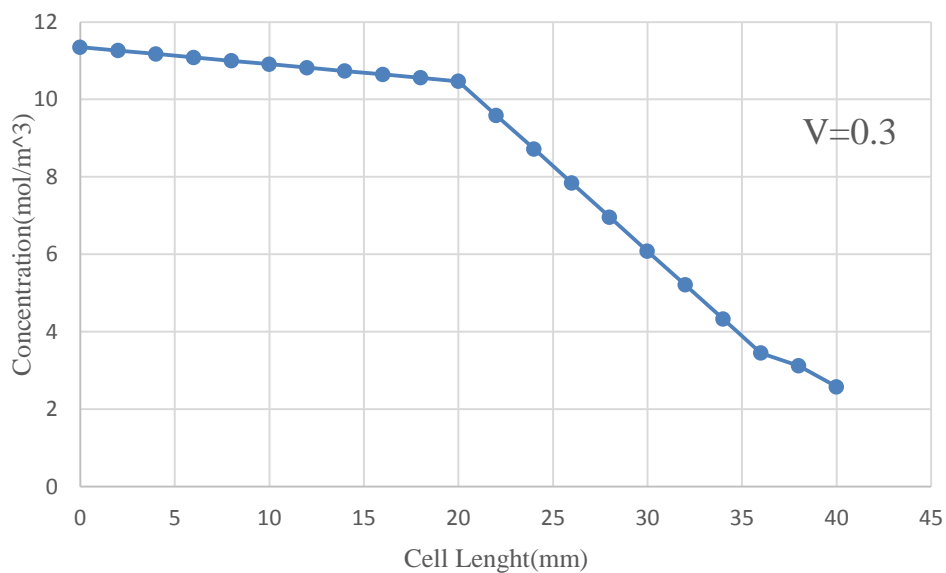
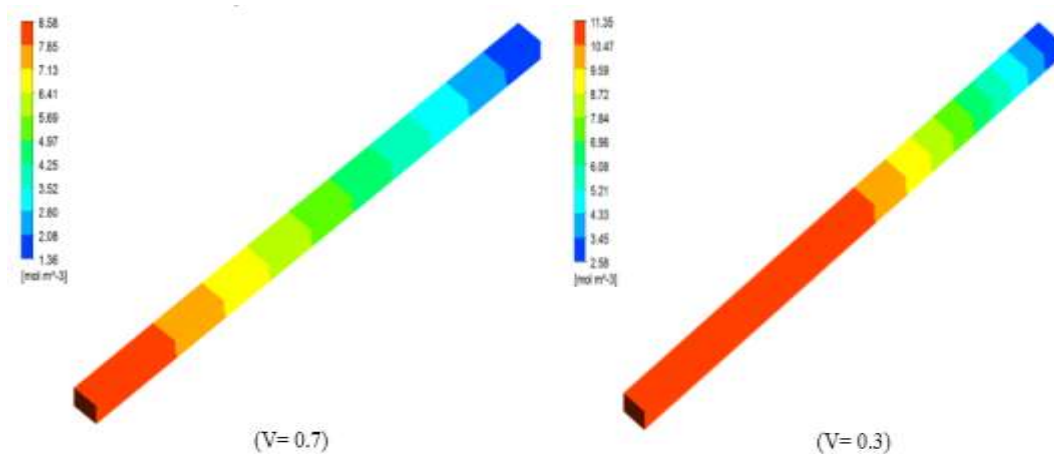
خروجی از کانال های سوخت و هوا، درجه حرارت به حداکثر مقدار حدود ۱۰۹۴ کلوین می رسد. با توجه به وقوع واکنش های گرمازا انتظار می رود، دما در طول پیل افزایش یابد؛ از طرفی شیب تغییرات در ابتدا به علت سرعت بیشتر واکنش ها بیشتر و رفته رفته هر چه به انتهای کانال نزدیکتر می شویم، میزان تغییرات دما کمتر خواهد بود.

#### ۵-۳- روند تغییرات گونه ها در طول کانال های SOFC

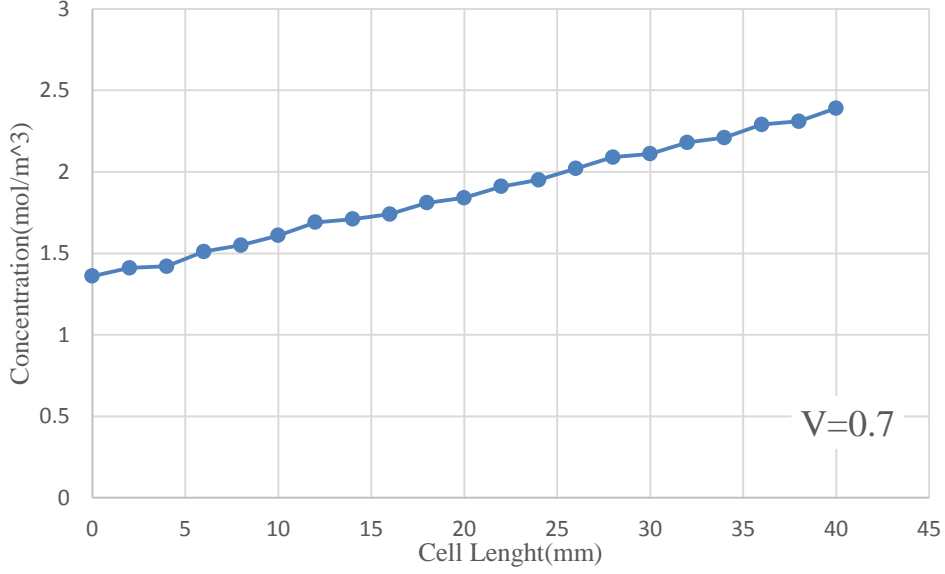
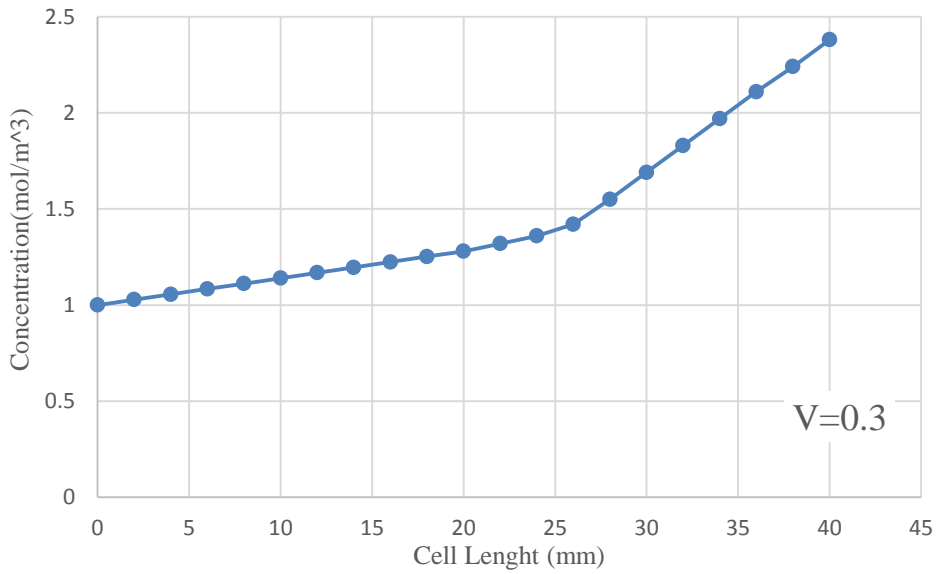
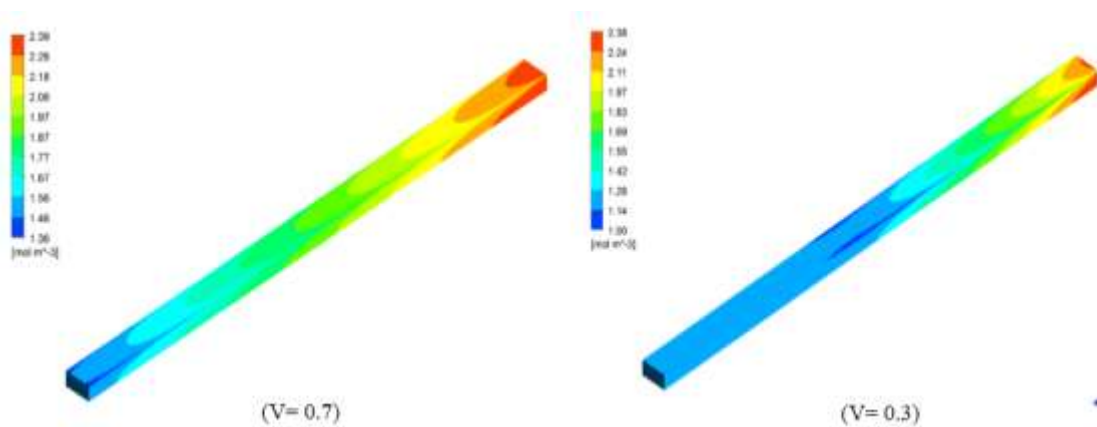
در شکل های ۶ تا ۸ روند تغییرات غلظت مولی هیدروژن، اکسیژن و بخار آب در کانال های سوخت و هوا نشان داده شده است. مطابق شکل ۶ با توجه به مصرف هیدروژن در آند باید در طول کانال تغییرات نزولی غلظت آن را شاهد بود. از طرفی با افزایش ولتاژ باید میزان جریان خروجی کاهش یابد به تعبیر دیگر، واکنش های کمتری انجام شده و طبیعتاً در خروجی کانال آند میزان بیشتری هیدروژن به صورت واکنش نکرده باقی می ماند، بنابراین در ولتاژهای بالا افت کمتر هیدروژن نسبت به ولتاژهای پایین حاصل خواهد شد. برخلاف هیدروژن همانطور که در شکل ۷ نیز دیده می شود، تغییرات غلظت بخار آب باید روند صعودی داشته باشد؛ چراکه بخار آب فرآورده واکنش های سیستم است. از طرفی همانطور که پیش تر عنوان شد، افزایش ولتاژ منجر به کاهش جریان شده که خود معلول کاهش واکنش های آندی است نهایتاً کاهش میزان تولید بخار آب در خروجی کانال آند را به همراه خواهد داشت. به عنوان مثال همانطور که از نمودارها نیز کاملاً مشخص است، برای ولتاژ ۰/۳ ولت خروجی غلظت بخار کانال آند  $11/35 \text{ mol/m}^3$  بوده و به ازای ولتاژ ۰/۷ مقدار برابر  $8/58 \text{ mol/m}^3$  را نشان می دهد. مطابق شکل ۸ با توجه به مصرف اکسیژن بدیهی است، در راستای جریان غلظت آن کاهش یابد. از طرفی طبق ارتباط معکوس ولتاژ و جریان با افزایش ولتاژ میزان کمتری اکسیژن در واکنش ها مصرف شده و بنابراین در خروجی کانال غلظت بیشتری از آن وجود خواهد داشت. هم چنین با مقایسه نمودارهای شکل ۶ مشخص می شود که روند تغییرات در ولتاژ ۰/۳ ولت در ۲۰ میلی متر اول کانال با تغییرات در ۲۰ میلی متر دوم کانال کاملاً متفاوت است؛ در صورتی که در ولتاژ ۰/۷ تغییرات از همان ابتدا بصورت تدریجی بوده است. این تغییرات بعلا



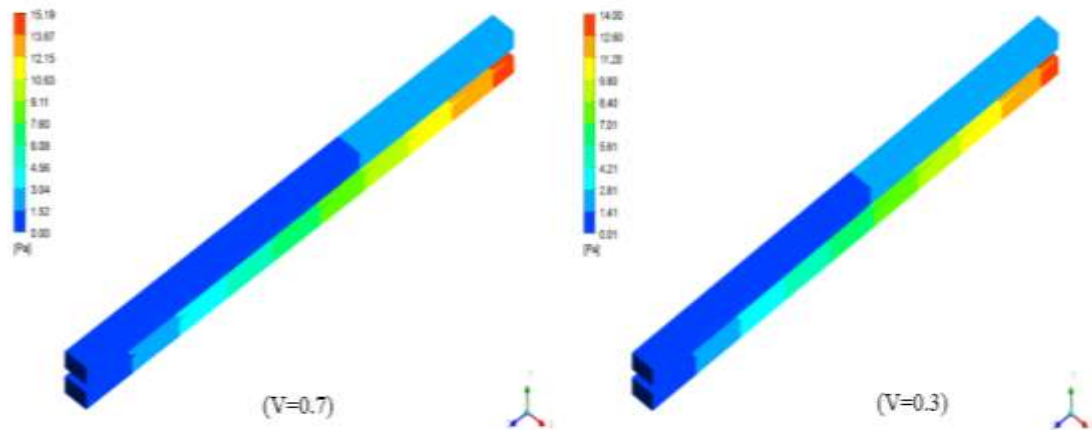
شکل ۶- تغییرات غلظت مولی هیدروژن در طول کانال آند در ولتاژهای عملیاتی مختلف



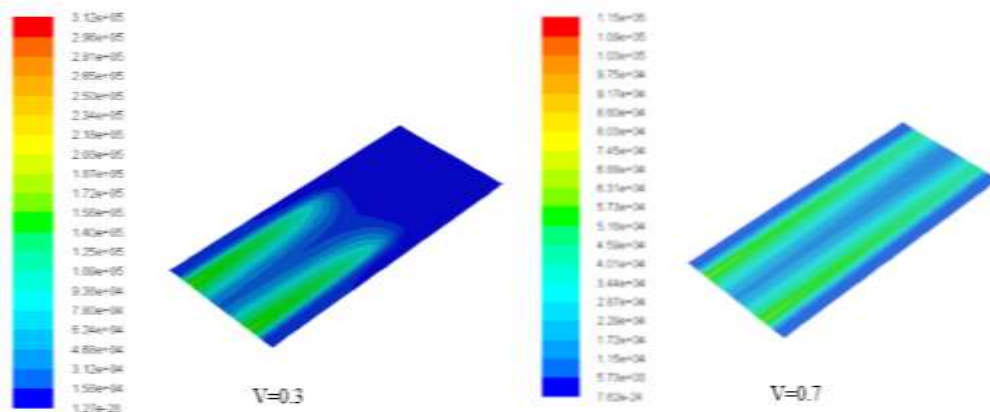
شکل ۷- تغییرات غلظت مولی بخار آب در طول کانال آند در ولتاژهای عملیاتی مختلف



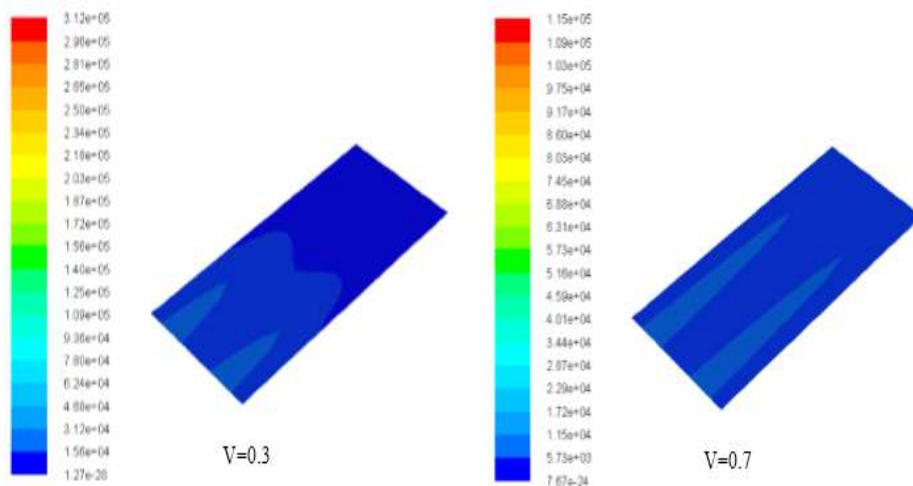
شکل ۸- تغییرات غلظت مولی اکسیژن در طول کانال کاتد در ولتاژهای عملیاتی مختلف



شکل ۹- تغییرات فشار در کانال‌های آند و کاتد در ولتاژهای عملیاتی مختلف



شکل ۱۰- توزیع چگالی جریان در فصل مشترک لایه واکنشی کاتد/ الکترولیت



شکل ۱۱- توزیع چگالی جریان در فصل مشترک لایه واکنشی آند/ الکترولیت

ولتاژ اهمیک به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابد. از شکل ۱۲ می‌توان نتیجه گرفت که افزایش دما اثر مطلوب بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد می‌گذارد. فشار یکی دیگر از پارامترهای عملیاتی است که اثر زیادی روی عملکرد پیل سوختی می‌گذارد. پارامترهای زیر با تغییر فشار تغییر می‌کنند: چگالی جریان، پتانسیل برگشت پذیر الکترودی، ضرایب نفوذ دوتایی. در این مطالعه دمای عملیاتی پیل را در ۱۰۷۳ کلوین ثابت شده است، در حالیکه فشار از ۱ تا ۶ اتمسفر تغییر می‌کند. همانطور که از شکل ۱۳ پیداست افزایش فشار باعث بهبود عملکرد پیل سوختی اکسید جامد می‌گردد. افزایش فشار منجر به افزایش میزان ولتاژ برگشت پذیر می‌شود؛ بنابراین ولتاژهای خروجی هم افزایش می‌یابد که در نهایت منجر به بهبود عملکرد پیل می‌گردد.

#### ۵-۶-۲- تأثیر ضخامت الکترولیت بر عملکرد

در شکل ۱۴ تأثیر ضخامت الکترولیت بر عملکرد SOFC مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که انتظار می‌رود، کاهش ضخامت الکترولیت منجر به بهبود عملکرد پیل سوختی اکسید جامد می‌شود. ضخامت الکترولیت رابطه عکس با افت پتانسیل اهمی دارد و هر چه الکترولیت نازک‌تر باشد، افت اهمی کاهش یافته و برای جریان یکسان ولتاژ بیش تری قابل استحصال خواهد بود.

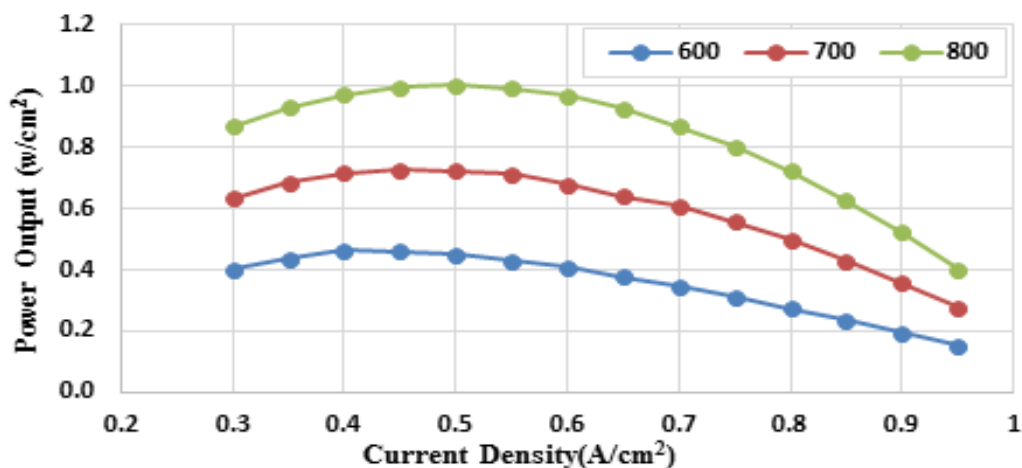
#### ۵-۶-۳- بررسی میزان تأثیر پارامترهای مختلف بر

#### عملکرد پیل سوختی اکسید جامد

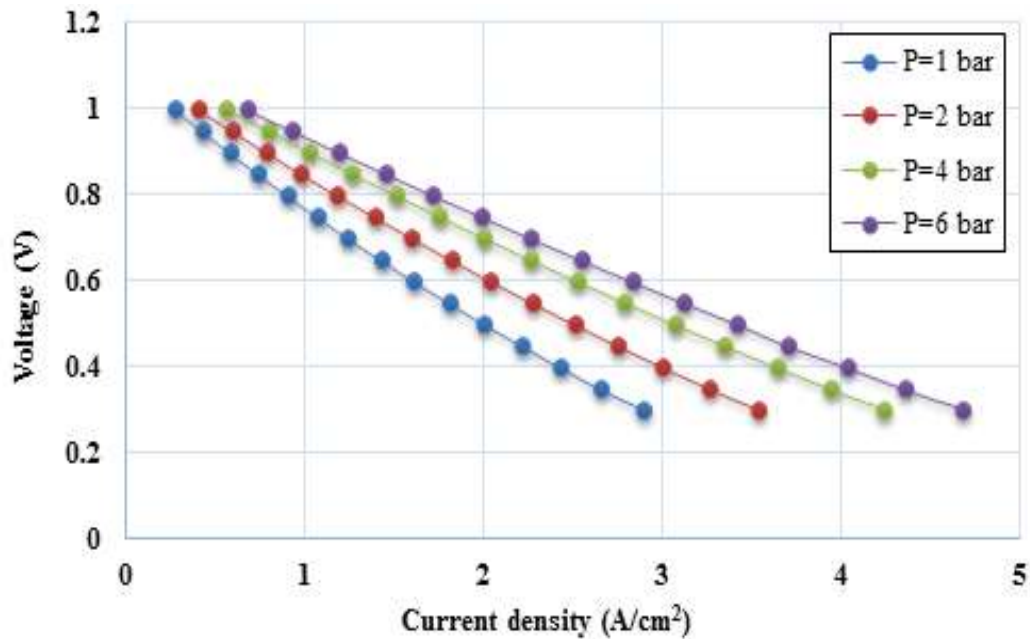
علاوه بر آشکار شدن جزئیات پدیده‌های انتقال درون پیل سوختی، یک مدل جامع سه بعدی می‌تواند جهت بررسی حساسیت پارامترها روی عملکرد پیل مورد استفاده قرار گیرد. مشخصات عملکردی یک پیل سوختی بر پایه پارامترهای مشخص می‌تواند با تغییر پارامترها همزمان با ثابت نگه داشتن تمام پارامترهای دیگر به دست آید. نتایج به دست آمده از این مطالعات پارامتری درک پارامترهای حساس در عملکرد پیل سوختی و هم چنین میزان حساسیت مدل به آن‌ها را میسر می‌کند. مهم‌ترین پارامترهای عملیاتی عبارتند از دما، فشار، تخلخل، رسانایی حرارتی و رطوبت نسبی. اثرات این پارامترها روی عملکرد پیل سوختی در ادامه مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد.

#### ۵-۶-۱- اثر دما و فشار

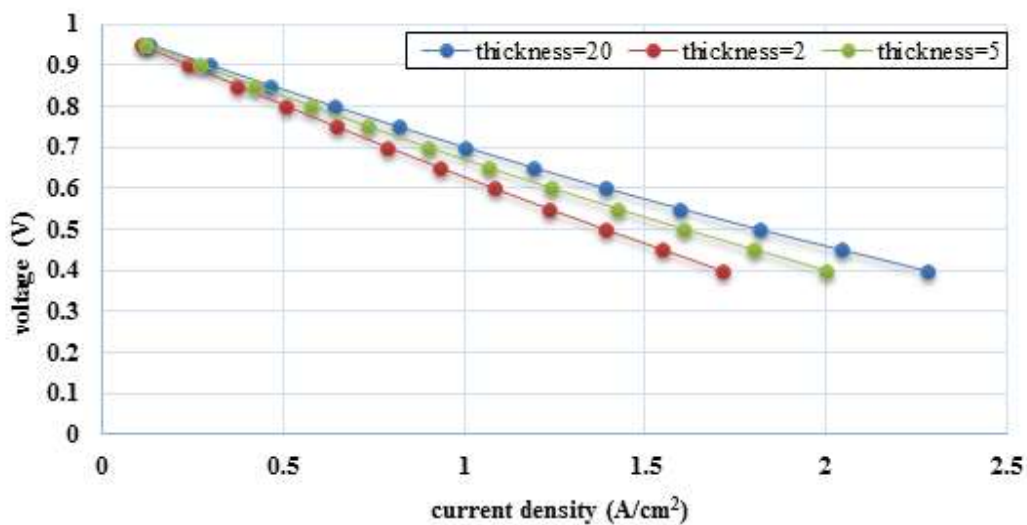
تغییرات دما تمام پدیده‌های انتقال و سینتیک واکنش‌های الکتروشیمیایی درون پیل سوختی را تحت تأثیر قرار می‌دهد؛ از این رو نیازمند اصلاحاتی در شرایط ورودی است که عبارتند از: چگالی جریان تبدیلی، پتانسیل برگشت پذیر، رسانایی غشاء. در این مطالعه فشار را در یک اتمسفر ثابت گرفته، در حالیکه دماها از ۶۰۰ تا ۸۰۰ درجه سانتیگراد تغییر می‌کند. افزایش دما باعث افزایش سرعت واکنش‌ها و هم چنین بهبود رسانایی الکترولیت می‌شود که در نتیجه آن افت



شکل ۱۲- تأثیر تغییرات دما بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد



شکل ۱۳- تأثیر تغییرات فشار بر عملکرد SOFC



شکل ۱۴- تأثیر ضخامت الکترولیت بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد

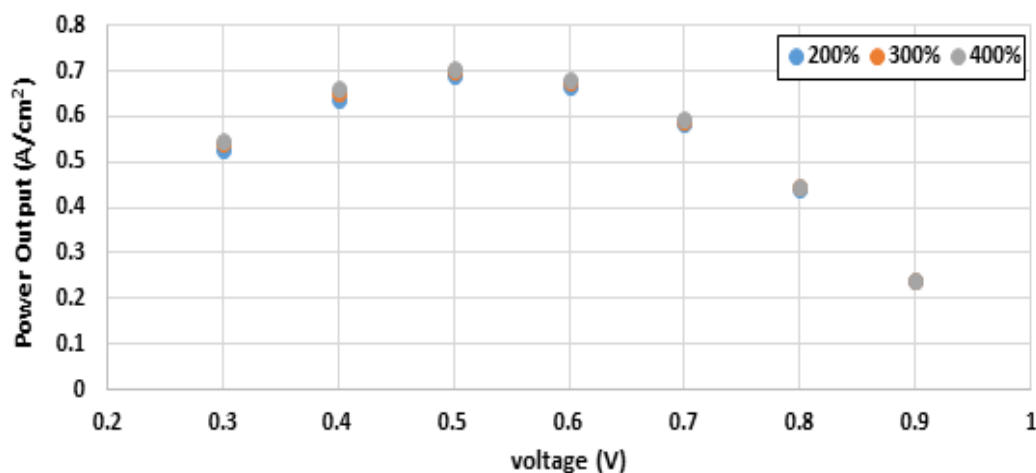
### ۶- نتیجه گیری

در این مطالعه، یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی برای پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای پایه آندی ارائه شد. نتایج مدل انطباق قابل قبول با داده‌های آزمایشگاهی موجود نشان داد. از نتایج بدست آمده توزیع

۵-۶-۳- اثر استوکیومتری آند

نمودار توان بر حسب ولتاژ به ازای سه مقدار مختلف استوکیومتری در شکل ۱۵ رسم شده است. همانطور که از شکل ۱۵ پیداست، افزایش استوکیومتری عملکرد را به میزان محدودی بهبود می‌بخشد.





شکل ۱۵- تأثیر استوکیومتری آند بر عملکرد SOFC

$j$	Current density	$A/cm^2$	دما، فشار، چگالی جریان، میدان پتانسیل و غلظت گونه‌ها در قسمت‌های مختلف پیل به دست آمد و تحلیل شد. نتایج نشان دادند که در عرض پیل توزیع دما به صورت یکنواخت است، توزیع چگالی جریان در طول کانال غیریکنواخت بوده و بیشترین مقدار آن هم مربوط به لایه واکنشی کاتد و در فصل مشترک کانال و الکترودهاست. بررسی نتایج به وضوح نشان می‌دهند که افزایش دما و فشار عملیاتی و نیز استوکیومتری آند اثرات مطلوب بر عملکرد پیل می‌گذارند و بالعکس افزایش ضخامت الکترولیت اثر نامطلوب روی عملکرد آن دارد.
$j_0$	Exchange current density	$A/cm^2$	
$j_L$	Limiting current density	$A/cm^2$	
$L$	Thickness	cm	
$N$	Avogadro's number	$6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	
$p$	Pressure	bar, atm, Pa	
$p$	Power	W	

#### ۷- فهرست علائم اختصاری

	Symbol	Explanation	Common Unit
$R$	Resistance	$\Omega$	
$S$	Entropy	J/K	$cm^2$
$T$	Temperature	K	$ASR$ Area-specific resistance $\Omega \cdot cm^2$
$U$	Internal energy	J	$E$ Electron charge $1.6 \times 10^{-19}$
$V$	Voltage	V	$E$ Thermodynamically ideal voltage V
$V$	Volume	L, $cm^3$	$F$ Faraday constant 96.485 C/mol
$W$	Work	J	$G$ Gibbs free energy J/mol
$\alpha$	Transfer coefficient	Dimensionless	$H$ Enthalpy of reaction J
$\varepsilon$	Efficiency	Dimensionless	$i$ Current A

solid oxide fuel cell. *Journal of Solid and Fluid Mechanics* 4: 147-165.

[10] Martin A, Yuan J, Sundén B (2013) SOFC modeling considering hydrogen and carbon monoxide as electrochemical reactants. *J Power Sources* 232: 42-54.

[11] Min Y (2014) Numerical study on mass transfer performance of a spiral-like interconnector for planar solid oxide fuel cells. *Enrgy Proced* 61: 2347-2350.

[12] Martin A, Yuan J, Sundén B (2010) Review on modeling development for multiscale chemical reactions coupled transport phenomena in solid oxide fuel cells. *Appl Energ* 87(5): 1461-1476.

[13] Afshari E, Pirkandi J (2014) Comparison of PEM fuel cell performance with metal foam and parallel channel as flow-field gas distributor. *Journal of Solid and Fluid Mechanics* 4: 123-136.

[14] Valérie E (2012) Numerical analysis of an internal methane reforming solid oxide fuel cell with fuel recycling. *Appl Energ* 93: 107-115.

[15] Min Y (2012) Numerical study on carbon deposition of SOFC with unsteady state variation of porosity. *Appl Energ* 97: 754-762.

[16] Hafsia A (2015) Thermal field in SOFC fed by CH<sub>4</sub>: Molar fractions effect. *J Assoc Arab Univ Basic Appl Sci* 17: 82-89.

[17] Rezbani O, Assadi M, Andersson M (2013) Three dimensional CFD modeling and experimental validation of an electrolyte supported solid oxide fuel cell fed with methane-free biogas. *Int J Hydrogen Energ* 38(24): 10068-10080.

[18] Ting Ma (2015) Parameter study of transient carbon deposition effect on the performance of a planar solid oxide fuel cell. *Appl Energ* 152: 217-228.

[19] Vakouftsi E (2011) CFD modeling of a biogas fuelled SOFC. *Solid State Ionics* 192(1): 458-463.

[20] Aguiar P, Adjiman CS, Brandon NP (2004) Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: Model-based steady-state performance. *J Power Sources* 138: 120-136.

[21] Patcharavorachor Y, Arpornwichanop A, Chuachuebsuk A (2001) Electrochemical study of a planar solid oxide fuel cell: Role of support structures. *J Power Sources* 93: 130-140.

$\eta_{act}$	Activation losses	V
$\eta_{conc}$	Concentration losses	V
$\eta_{ohmic}$	Ohmic losses	V
$v$	Fuel flow rate	Slpm
$\sigma$	Conductivity	S/cm

#### ۸- مراجع

[1] Robert Takeo N (2013) Computational fluid dynamics modelling of solid oxide fuel cell stacks. Queen's University, Canada.

[2] Zhonggang Z (2013) Three-dimensional CFD modeling of transport phenomena in a cross-flow anode-supported planar SOFC. *Energies* 7(1): 80-98.

[3] Houcheng Z, Chen J, Zhang J (2013) Performance analysis and parametric study of a solid oxide fuel cell fueled by carbon monoxide. *Int J Hydrogen Energ* 38(36): 16354-16364.

[4] Cameron T, Virkar A (2003) A simple model for interconnect design of planar solid oxide fuel cells. *J Power Sources* 113(1): 44-56.

[5] Yakabe H (2000) Evaluation and modeling of performance of anode-supported solid oxide fuel cell. *J Power Sources* 86(1): 423-431.

[6] Yakabe H (2001) 3-D model calculation for planar SOFC. *J Power Sources* 102(1): 144-154.

[7] Syu-Fang L, Chu HS, Yuan P (2006) Effect of inlet flow maldistribution on the thermal and electrical performance of a molten carbonate fuel cell unit. *J Power Sources* 161(2): 1030-1040.

[8] Ping Y, Liu SF (2007) Numerical analysis of temperature and current density distribution of a planar solid oxide fuel cell unit with nonuniform inlet flow. *Numer Heat Tr A-Appl* 51(10): 941-957.

[9] Pirkandi J, Amanloo F (2014) Thermo-economic analysis of the performance of a micro gas turbine power generation unit equipped with a atmospheric