



Three-Dimensional Numerical Study of Solid Oxide Fuel Cell Performance with Converging Diverging Flow Field

H. Hesami, M. Borji*, J. Rezapour

Department of Mechanical Engineering, Lahijan Branch, Islamic Azad University, Lahijan, Iran

Review History:

Received: Jul. 28, 2021
Revised: Sep. 21, 2021
Accepted: Nov. 06, 2021
Available Online: Nov. 14, 2021

Keywords:

Solid oxide fuel cell
Converging diverging channels
Bipolar plates design
Transverse flow

ABSTRACT: The main important roles of bipolar plates in solid oxide fuel cells are the uniform distribution of reactants to the reaction sites, the collection of current, and the separation of each cell from another. Therefore, the performance of a solid oxide fuel cell is highly dependent on air and fuel flow channel design. In order to investigate how the geometry of air and fuel flow channels affects performance, current, and power density, simulation results are discussed to evaluate the performance of two types of fuel cells with direct ducts and converging-diverging ducts. In this research, a three-dimensional model of an anode-supported hydrocarbon fueled solid oxide fuel cell is presented. The results show that the pressure difference between the converging diverging channels produces a transverse flow in the channels and ribs which is in favor of better distribution of the reactants in the fuel cell with the converging diverging channels. This transverse velocity causes a 6% increase in fuel consumption in the cell with converging diverging channels than the cell with direct channels at a voltage of 0.7V, but due to the reduction of the reaction area of this cell compared to the usual cell, the current density is 10% lower. At voltages above 0.55V, fuel cells with converging diverging channels have a higher fuel consumption than fuel cells with direct channels due to the presence of transverse flows.

1- Introduction

Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) is an effective energy conversion device that converts chemical energy into electrical energy and heat through electrochemical reactions of fuel and oxidant [1]. A planar SOFC consists of an ion-conducting cermet electrolyte that is sandwiched between two porous electrodes, which in turn are appended by bipolar-plate interconnectors that have flow channels etched in them to supply the fuel and oxidant [2]. The bipolar plate is a layer that is responsible for gas transfer, effective mass transfer, and uniform distribution of reactants and leads to the production of a uniform electric current to increase the power density of the cell. An important role of bipolar plates is the uniform distribution of reactants to reaction sites. These plates also help collect current, maintain a stable temperature, and separate each cell from the other. Gaseous species flow through gas channels. Channel walls collect current from the electrochemical reaction surface and direct it out of the fuel cell. In order to achieve a balance between a larger electrochemical reaction area and a shorter current collection pathway, one must answer the question of how bipolar plates should be designed and what kind of geometry is suitable for having the highest output power density and best cell performance.

A detailed literature review of various SOFC design and

performance optimization has been carried out by Ramadhani et al. [3]. This review shows that studies that have investigated the effect of channel geometry on the performance of solid oxide fuel cells are rare. While many studies have been done on the design of bipolar plates in proton membrane fuel cells. Among the few studies on channel geometry [4-6], a study examining the three-dimensional effect of channel convergence and divergence on solid oxide fuel cell performance has not yet been observed. Also, the fuel used in the anodic channel in all research is hydrogen. Therefore, in this study, in order to investigate the effect of converging diverging channels on the efficiency of solid oxide fuel cells, the performance of two types of fuel cells fed with a modified natural gas mixture including direct channels and converging diverging channels have been compared.

2- Modeling

In this study, two types of cells with normal channels (including three straight channels with a width of 2 mm and a height of 1 mm) and converging diverging channels (including two converging channels and one diverging channel) have been investigated. Fig. 1 shows the top view of both types of fuel cells. Details of cell geometry with normal channels are listed in Table 1. The three dimensional steady-state model for an anode-supported SOFC is used to analyze

*Corresponding author's email: mborji@liau.ac.ir



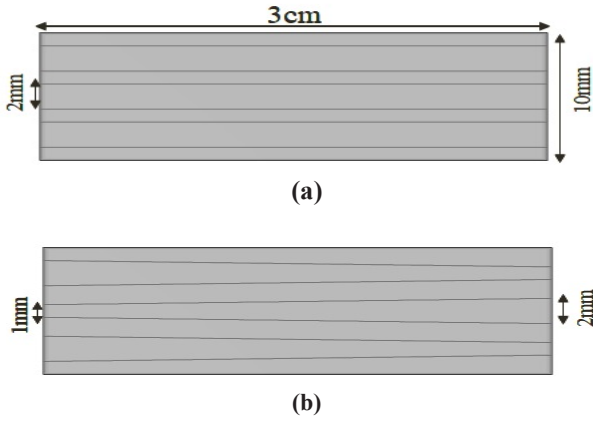


Fig. 1. Top view of fuel cells with a / direct channels b / converging diverging channels

Table 1. Geometric details of simulated fuel cells

Cell geometry parameters	units	Value
Channel length	mm	30
Fuel/Air channel height	mm	1
cell width	mm	10
Interconnect thickness	μm	300
Electrolyte thickness	μm	10
Cathode active layer thickness	μm	20
Cathode support layer thickness	μm	50
Anode active layer thickness	μm	15
Anode support layer thickness	μm	400

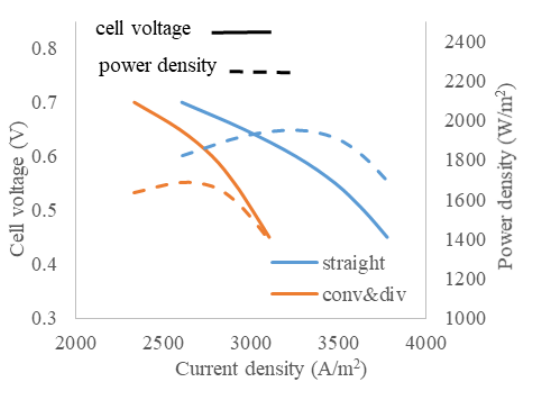


Fig. 2. Polarization and cell power diagrams for both types of channel geometry

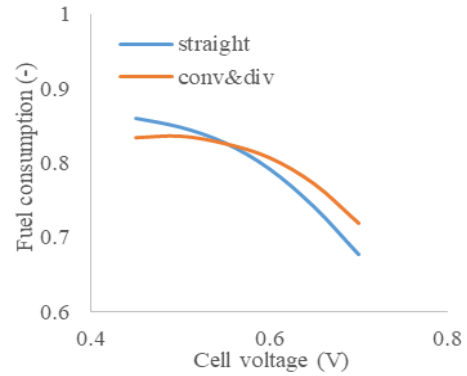


Fig. 3. The effect of convergence and divergence of channels on fuel consumption

the electrochemical reaction coupled with conservation of gaseous species mass, momentum, energy, and charge. The governing equations are solved by the commercial software COMSOL Multiphysics (version 5.4). The computational domain includes interconnecting, fuel and air flow channels, electrodes active and support layer, and electrolyte dividing the total cell into the nine zone. The temperature dependence of thermal conductivity and heat capacity of gas species are taken into account. It is assumed that the gas flow within the channel and electrode is laminar due to the low velocity. Also, in order to reduce the calculation time, local thermal equilibrium between gas and solid phases within the porous electrodes is considered and co-flow configuration is modeled in all channel designs. Finally, an ideal gas is applied for all gaseous species.

3- Results and Discussion

To study the effect of channel convergence and divergence on solid oxide fuel cell performance, simulations were

performed for six different operating voltages (0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, and 0.7 volts). Fig. 2 shows the polarization and power density diagrams for both converging diverging and straight channel geometries. For both channel geometries, the current density increases as the operating voltage decreases. As the current density increases, the power density first increases and then decreases due to the decrease in the cell voltage. This Figure also shows that the fuel cell with direct channels has a higher current and power density than the fuel cell with converging diverging channels. This difference is lower at higher voltages. The reason for the increase in current density in direct channels is a 33% increase in the area of direct channels (the interface between channels and electrodes) compared to converging diverging channels and an increase in the mass flow rate of fuel and air entering these channels. Therefore, a cell with direct channels has better performance than a cell with converging diverging channels, that means convergence and divergence of channels have a negative effect on current density and power. Fig. 3 shows

the fuel consumption coefficient for different cell voltages for both types of cells with different channels. As can be seen, as the cell voltage increases, the fuel consumption coefficient for both types of cells decreases. This diagram also shows that these two curves have an intersection point, that is, up to an operating voltage of 0.55 V, the fuel cell with direct channels has a higher fuel consumption coefficient than the cell with converging diverging channels, however, for voltages higher than 0.55 volts, the fuel cell with converging diverging channels has a higher fuel consumption coefficient. Therefore, at operating voltages below 0.55 volts, the fuel cell with converging diverging ducts has a lower fuel consumption, current, and power density than the fuel cell with direct ducts. At an operating voltage of 0.7 volts, a fuel cell with converging diverging channels has a 6% higher fuel consumption coefficient but a 10% lower current density than a direct-channel fuel cell.

4- Conclusions

In this paper, a three-dimensional mathematical model of an internal reforming planar solid oxide fuel is presented. Numerical solution results are presented to evaluate the performance of two fuel cells with converging diverging channels and ordinary direct channels. The result of these simulations showed that the pressure difference between the converging diverging channels leads to the production of transverse flow in the channels and ribs for better oxygen distribution in the cathodic active layer. For voltages above 0.55 volts, the fuel cell with divergent ducts has a higher fuel consumption coefficient than the fuel cell with direct ducts due to the presence of transverse currents. Increasing the fuel consumption coefficient in the fuel cell with converging

diverging channels improves the performance of this type of cell compared to the cell with normal direct channels in operating voltages higher than 0.55 volts.

References

- [1] J. M. Park, D. Y. Dae Yun Kim, Baek J.D. Baek, Y-J. Yoon, P-Ch. Su, S.H. Lee, Effect of Electrolyte Thickness on Electrochemical Reactions and Thermo-Fluidic Characteristics inside a SOFC Unit Cell, *Energies*, 11 (2018) 1-15.
- [2] R.M. Manglik, Y.N. Magar, Heat and Mass Transfer in Planar Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cells: Effects of Interconnect Fuel/Oxidant Channel Flow Cross Section, *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, 7 (2015) 041003-12.
- [3] F. Ramadhani, M.A. Hussain, H. Mokhlis, S. Hajimolana, Optimization strategies for solid oxide fuel cell (SOFC) application: a literature survey, *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, 76 (2017) 460-84.
- [4] Z. Lin, J.W. Stevenson, M.A. Khaleel, The effect of interconnect rib size on the fuel cell concentration polarization in planar SOFCs, *Journal of Power Sources*, 117 (2003) 92-97.
- [5] Y.N. Magar, R.M. Manglik, Modeling of Convective Heat and Mass Transfer Characteristics of Anode-Supported Planar Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 4 (2007) 185-93.
- [6] I. Khazae, A. Rava, Numerical simulation of the performance of solid oxide fuel cell with different flow channel geometries, *J Energy*, 119 (2017) 235-44.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

H. Hesami, M. Borji, J. Rezapour, *Three-Dimensional Numerical Study of Solid Oxide Fuel Cell Performance with Converging Diverging Flow Field*, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 54(3) (2022) 123-126.

DOI: [10.22060/mej.2021.20214.7193](https://doi.org/10.22060/mej.2021.20214.7193)





بررسی عددی سه‌بعدی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با میدان جریان همگرا واگرا

هانیه حسامی، مهدی برجی بداعی*، جواد رضاپور

دانشکده مهندسی مکانیک، واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، ایران.

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴۰۰/۰۴/۰۷
بازنگری: ۱۴۰۰/۰۶/۳۰
پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۱۵
ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۰۸/۲۳

کلمات کلیدی:

پیل سوختی اکسید جامد
کانال‌های همگرا واگرا
طراحی صفحات دوقطبی
جریان عرضی

خلاصه: نقش مهم صفحات دوقطبی در پیل سوختی اکسید جامد، توزیع یکنواخت واکنش دهنده‌ها به مکان‌های انجام واکنش، جمع‌آوری جریان و جداسازی هر سلول از سلول دیگر است. بنابراین عملکرد یک پیل سوختی اکسید جامد به شدت وابسته به کانال‌های عبور جریان هوا و سوخت می‌باشد. در راستای بررسی چگونگی تأثیر هندسه کانال‌های جریان هوا و سوخت روی عملکرد، چگالی جریان و توان، نتایج شبیه‌سازی برای ارزیابی عملکرد دو نوع پیل سوختی با کانال‌های مستقیم و کانال‌های همگرا واگرا بحث شده‌اند. در این تحقیق یک مدل سه‌بعدی از پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای حمایت شده توسط آند با سوخت هیدروکربنی ارائه شده‌است. نتایج نشان می‌دهد که اختلاف فشار بین کانال‌های همگرا واگرا سبب تولید جریان عرضی در کانال‌ها و دندان‌ها برای توزیع بهتر واکنش دهنده‌ها در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا می‌گردد. این سرعت عرضی سبب افزایش ۶ درصدی مصرف سوخت در پیل با کانال‌های همگرا واگرا نسبت به پیل با کانال‌های مستقیم معمولی در ولتاژ عملکردی ۰/۷ ولت می‌شود اما به دلیل کاهش مساحت کانال‌های این پیل نسبت به پیل معمولی، چگالی جریان در این پیل ۱۰ درصد کمتر از پیل با کانال‌های مستقیم است. در ولتاژهای عملکردی بالاتر از ۰/۵۵ ولت، پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا به علت وجود جریان‌های عرضی مصرف سوخت بیشتری نسبت به پیل سوختی با کانال‌های مستقیم دارد.

۱- مقدمه

کانال، جریان را از سطح واکنش الکتروشیمیایی جمع کرده و به بیرون پیل سوختی هدایت می‌کنند. به منظور دستیابی به تعادل بین سطح واکنش الکتروشیمیایی و مسیر جریان کوتاه‌تر، سوالی که باید پاسخ داده شود این است که چگونه صفحات دوقطبی باید طراحی شوند و چه نوع هندسه‌ای برای داشتن بیشترین چگالی توان خروجی و بهترین عملکرد پیل مناسب است؟

تحقیقات زیادی در مورد جنبه‌های مختلف پیل‌های سوختی اکسید جامد انجام شده‌است. برجی و همکاران [۳] یک مدل یک بعدی از پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای حمایت‌شده توسط آند و تغذیه شده با متان پیش‌اصلاح شده را ارائه کردند. در تحقیقات دیگری که توسط برجی و همکاران [۴ و ۵] انجام گرفت، ادغام پیل سوختی اکسید جامد با فرایندهای گازی‌سازی و میکروتوربین گاز به صورت عددی و توسط کدنویسی بررسی و بهینه‌سازی شد. پترسن و همکاران [۶] پیل سوختی اکسید جامد را به صورت پایدار و توده‌ای شبیه‌سازی کردند. در این مدل، واکنش‌های داخلی پیل سوختی شامل اکسیداسیون هیدروژن، واکنش‌های تبدیل متان با بخار و جابجایی

پیل سوختی اکسید جامد یک ابزار مؤثر تبدیل انرژی است که انرژی شیمیایی را از طریق واکنش‌های الکتروشیمیایی سوخت و اکسیدکننده به انرژی الکتریکی و گرما تبدیل می‌کند [۱]. یک پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای، شامل یک الکترولیت سرامیکی هدایت‌کننده یون است که بین دو الکترود متخلخل فشرده شده‌است که توسط رابط‌های صفحه دوقطبی متصل می‌شوند. این رابط‌ها دارای کانال‌های جریان در داخل خود هستند تا سوخت و اکسیدکننده را تأمین کنند [۲]. صفحه دوقطبی لایه‌ای است که وظیفه انتقال گاز، انتقال جرم مؤثر، توزیع یکنواخت واکنش دهنده‌ها را بر عهده دارد و منجر به تولید جریان الکتریکی یکنواخت برای افزایش چگالی توان پیل می‌شود. نقش مهم صفحات دوقطبی توزیع یکنواخت واکنش دهنده‌ها به مکان‌های انجام واکنش است. این صفحات هم‌چنین به جمع‌آوری جریان، حفظ دمای پایدار و جداسازی هر پیل از دیگری کمک می‌کنند. گونه‌های گازی از طریق کانال‌های گاز جریان می‌یابند. دیواره‌های

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: mborji@liau.ac.ir

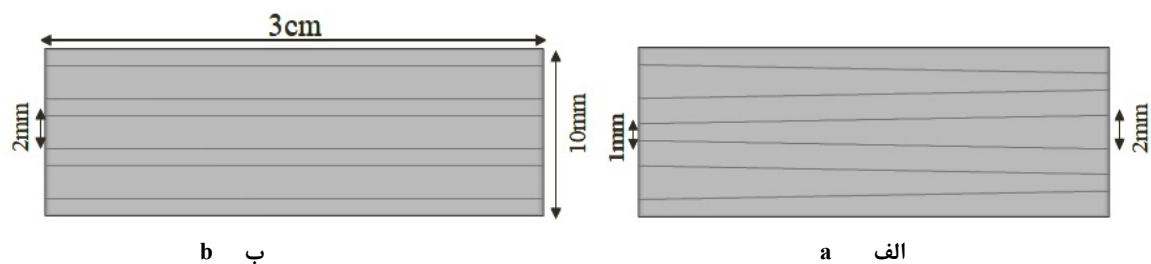


آب - گاز بررسی شده است. آگویار و همکاران [۷ و ۸] مدلی برای پیل‌های صفحه‌ای بر اساس انتقال جرم و گرمای یک‌بعدی در کانال‌های جریان سوخت و هوا، انتقال حرارت یک‌بعدی در ساختار کاتد-الکترولیت-آند و متصل‌کننده، انتقال جرم یک‌بعدی گونه‌های سوخت و هوا داخل الکترودهای متخلخل ارائه کردند. نتایج تحقیقات آنها نشان داد که آند، الکترولیت، کاتد و متصل‌کننده می‌توانند به صورت ساختار همگن فشرده در آنالیز انتقال حرارت در نظر گرفته شوند. آن‌ها همچنین اثر تغییر جهت جریان سوخت و هوا را بررسی کردند و نشان دادند که در شرایط مشابه، ولتاژ خروجی، چگالی توان و راندمان در جریان غیر همسو بیشتر از جریان همسو است ولی در جریان غیر همسو، دمای متوسط پیل بیشتر و گرادیان دما شدیدتر است.

با دقت و تأمل بیشتر در تحقیقات انجام گرفته در زمینه پیل سوختی اکسید جامد مشخص می‌شود که مطالعاتی که تأثیر هندسه کانال را روی عملکرد پیل‌های سوختی اکسید جامد بررسی کرده‌اند، نادر هستند در حالی که مطالعات فراوانی در زمینه طراحی صفحات دو قطبی در پیل‌های سوختی غشا پروتونی انجام شده است [۱۳-۹]. یکی از تحقیقات منحصر به فردی که در زمینه هندسه کانال‌های پیل سوختی غشا پلیمری انجام شده شبیه‌سازی عددی کاتد برای بررسی اثر کانال‌های همگرا و واگرا روی کارایی پیل سوختی غشا پروتونی می‌باشد که توسط رضایی و همکاران [۱۴] انجام گرفت. نتایج این بررسی نشان داد که با به کارگیری زاویه 0.3° درجه برای کانال‌ها توان خروجی الکتریکی خالص در مقایسه با مدل پایه 16% افزایش می‌یابد.

لین و همکاران [۱۵] یکی از اولین بررسی‌ها را در زمینه تأثیر سایز دندان متصل‌کننده روی افت غلظتی در پیل‌های سوختی اکسید جامد صفحه‌ای انجام دادند. در این بررسی نشان داده شد که هنگامی که عرض دندان کوچک است، غلظت گاز یکنواخت و کارایی الکتروشیمیایی بهتر است در حالی که زمانی که عرض دندان بزرگ است، افت غلظت بالاتر اما افت اهمی کمتر است. میجر و منگلیک [۱۶]، تأثیر عمق متصل‌کننده‌های مستطیلی و ضخامت لایه آند روی فرایند انتقال حرارت جابجایی جریان سوخت و اکسیدکننده و رفتار انتقال حرارت و جرم گونه‌ها را بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که کانال‌های کم‌عمق تمایل به فراهم آوردن خنک‌کاری بهتر با کاهش مقاومت جابجایی و ضریب انتقال حرارت بالاتر دارند. افزایش ضخامت لایه آند هر دو مقاومت حرارتی و هیدرودینامیکی را کاهش داده که منجر به کاهش دمای پیل به همراه توزیع انتقال جرم یکنواخت‌تر هیدروژن و بخار آب می‌شود. آندرسون و همکاران [۱۷] یک پیل سوختی

اکسید جامد حمایت شده توسط آند، رفتار انتقال حرارت و گونه‌های آن و کوپل انتقال بار به همراه انتقال جرم و گرما را شبیه‌سازی کردند. نتیجه این تحقیق نشان داد که کانال‌های گاز پهن‌تر و نازک‌تر با فشرده‌گی بیشتر، چگالی جریان پیل را فقط کمی کاهش می‌دهند اما جریان حجمی پیل را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌دهند. بهاتاچاریا و همکاران [۱۸] کارایی هندسه سیستم ماریچ کانال‌های اکسیدکننده و سوخت را با کانال‌های مستقیم مقایسه کردند. نتایج بررسی آنها نشان داد که هندسه ماریچ توزیع یکنواخت‌تر چگالی جریان یونی و توان خروجی و کارایی سوخت بالاتری در مقایسه با هندسه کانال مستقیم ارائه می‌دهد اگرچه این کانال‌ها با افت فشار بیشتری همراه هستند. شبیه‌سازی انتقال جرم و حرارت در پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای حمایت شده توسط آند با شکل‌های متفاوتی از کانال جریان (مستطیلی، دوزنقه‌ای و مثلثی) توسط منگلیک و میجر [۲] انجام شد. نتیجه این بررسی ضریب انتقال حرارت بزرگتر و افت اصطکاک کمتر جریان سوخت سمت آند در مقایسه با جریان اکسیدکننده سمت کاتد می‌باشد. همچنین جریان‌های سوخت و اکسیدکننده در کانال مستطیلی، ضرایب انتقال حرارت یا ناسلت بالاتر و فاکتورهای اصطکاک (fRe) پایین‌تری در مقایسه با سطح مقطع مثلثی و دوزنقه‌ای دارند. خزائی و روا [۱۹] در زمینه شبیه‌سازی عددی کارایی پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای با هندسه‌های کانال جریان متفاوت (مستطیلی - مثلثی - دوزنقه‌ای) تحقیق کردند و نشان دادند که هندسه کانال جریان اهمیت زیادی روی توزیع صحیح واکنش دهنده‌ها در ناحیه سه فازی و در نتیجه تأثیر مهمی روی کارایی پیل سوختی اکسید جامد دارد. بررسی‌های آنها نشان داد که کارایی کانال‌های آندی و کاتدی با هندسه مستطیلی در مقایسه با هندسه مثلثی و دوزنقه بالاتر است. کنگ و همکاران [۲۰] متصل‌کننده به شکل X را توضیح داده و با متصل‌کننده معمولی مقایسه کردند. نتایج بررسی‌های آنها نشان داد که متصل‌کننده به شکل X، مسیر جریان را کاهش داده و عملکرد پیل سوختی اکسید جامد را بهبود می‌بخشد. در میان تحقیقات اندک در زمینه هندسه کانال‌ها، مطالعه‌ای که به صورت سه‌بعدی تأثیر همگرایی و واگرایی کانال‌ها را بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد بررسی کند تاکنون مشاهده نشده است. همچنین سوخت به کاررفته در کانال آندی در تمامی تحقیقات از نوع هیدروژن است. بنابراین در این تحقیق به منظور بررسی تأثیر کانال‌های همگرا-واگرا بر کارایی پیل سوختی اکسید جامد، عملکرد دو نوع پیل سوختی تغذیه شده با مخلوط اصلاح شده گاز طبیعی شامل کانال‌های مستقیم و کانال‌های همگرا-واگرا با یکدیگر مقایسه شده‌اند.



شکل ۱. نمای بالای پیل‌های سوختی با الف-کانال‌های همگرا-واگرا و ب- کانال‌های مستقیم

Fig. 1. Top view of fuel cells with a- converging diverging channels and b- direct channels

جدول ۱. جزئیات هندسی پیل‌های سوختی شبیه‌سازی شده

Table 1. Geometric details of simulated fuel cells

اندازه	واحد	اجزای پیل
۰/۰۳	متر	طول پیل
۱	میلیمتر	ارتفاع کانال سوخت
۱	میلیمتر	ارتفاع کانال هوا
۱۵	میکرومتر	ضخامت لایه فعال واکنشی آند
۴۰۰	میکرومتر	ضخامت لایه پخش گاز آند
۲۰	میکرومتر	ضخامت لایه فعال واکنشی کاتد
۵۰	میکرومتر	ضخامت لایه پخش گاز کاتد
۱۰	میکرومتر	ضخامت الکترولیت
۱۰	میلیمتر	عرض پیل
۳۰۰	میکرومتر	ضخامت متصل‌کننده

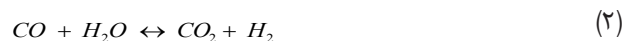
۲- مدلسازی

در این تحقیق دو نوع پیل با کانال‌های معمولی (شامل سه کانال مستقیم با عرض ۲ میلی‌متر و ارتفاع ۱ میلی‌متر) و کانال‌های همگرا واگرا (شامل دو کانال همگرا و یک کانال واگرا) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. شکل ۱ نما از بالای هردو نوع پیل سوختی را نشان می‌دهد. جزئیات هندسه پیل با کانال‌های معمولی در جدول ۱ لیست شده‌است.

۲-۱- فرضیات

در این مدلسازی فرضیات زیر به کار گرفته شده‌اند.

در مطالعه حاضر، مدل ریاضی رفتار و عملکرد پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای حمایت شده توسط آند با ریفرمینگ داخلی شبیه‌سازی شده‌است. بنابراین واکنش‌های تبدیل متان با بخار و جایجایی آب- گاز نیز باید لحاظ شوند.



۱- گاز طبیعی ۳۰٪ پیش اصلاح شده شامل ۲۶/۲۶٪ هیدروژن، ۴۹/۳۴٪ بخار آب، ۱۷/۱٪ متان، ۲/۹۴٪ منوکسید کربن و ۴/۳۶٪ دی‌اکسید کربن می‌باشد. هوا شامل ۷۹/۲٪ نیتروژن و ۲۰/۸٪ اکسیژن است.

۲- رژیم جریان در کانال‌های گاز به علت سرعت کم، آرام و پیل سوختی در حالت پایدار کار می‌کند.

۳- دماها در ورودی کانال‌ها مشابه است و جریان در کانال‌های گاز هم‌جهت فرض شده‌است.

۴- پیل سوختی عایق است و هیچ ارتباط حرارتی با محیط بیرون ندارد.

۵- فقط هیدروژن در واکنش الکتروشیمیایی شرکت می‌کند. منوکسید کربن در واکنش جابجایی آب- گاز به دی‌اکسید کربن و هیدروژن تبدیل می‌شود.

۶- در این شبیه‌سازی انتقال حرارت تشعشع بین ساختار جامد و کانال‌های گاز نادیده گرفته می‌شود.

۷- الکترومد متخلخل از مواد ایزوتروپیک و همگن ساخته شده‌است.

۸- گاز در داخل پیل سوختی اکسید جامد به صورت گاز ایده‌آل رفتار می‌کند.

۹- خصوصیات مواد بر اساس دمای عملکردی محاسبه می‌شود.

۱۰- از تئوری تعادل دمای محلی برای محیط متخلخل استفاده شده‌است.

۲-۲ معادلات حاکم

۲-۲-۱ معادله بقای بار

واکنش‌های الکتروشیمیایی در آند و کاتد هنگامی که فقط هیدروژن در این واکنش‌ها شرکت می‌کند به ترتیب به صورت زیر است [۲۱]:



دو نوع بار در سیستم‌های پیل سوختی حضور دارند: الکترون‌ها و یون‌ها. معادلات بقا برای هر کدام به شکل زیر است [۲۱-۲۳]:

$$i_l = -\sigma_{eff,l} \nabla \phi_l \quad (5)$$

$$i_s = -\sigma_{eff,s} \nabla \phi_s \quad (6)$$

در معادلات بالا i چگالی جریان، σ_{eff} هدایت مؤثر الکتریکی/یونی و ϕ پتانسیل الکتریکی/یونی است. زیرنویس l و s به معنی یون و الکترون می‌باشد. هدایت‌های الکتریکی در الکترومد (σ_{Ni} و σ_{LSM}) و هدایت یونی در الکتروولیت (σ_{YSZ}) از روابط (۷) تا (۹) بدست می‌آیند [۲۱] و ۲۴ و ۲۵].

$$\sigma_{Ni} = \frac{9.5 \times 10^7}{T} \exp\left(\frac{-1150}{T}\right) \quad (7)$$

$$\sigma_{LSM} = \frac{4.2 \times 10^7}{T} \exp\left(\frac{-1200}{T}\right) \quad (8)$$

$$\sigma_{YSZ} = 3.34 \times 10^4 \exp\left(\frac{-10300}{T}\right) \quad (9)$$

هدایت مؤثر الکترومدها (σ_{eff}) با استفاده از پیچش (τ) و کسرهای حجمی (V) بدست می‌آید [۲۱ و ۲۲ و ۲۶]. الکترون‌ها از طریق جمع‌کننده جریان آند و کاتد به مدار الکتریکی خارجی هدایت می‌شوند. ولتاژ الکترومد در سمت آند، معمولاً صفر تنظیم می‌شود در حالی که ولتاژ الکترومد در سمت کاتد، ولتاژ پیل (۰/۷) ولت در این مقاله) می‌باشد. ولتاژ واقعی پیل بعد از محاسبه افت‌ها به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۷]:

$$V = E^{OCV} - \eta_{act} - \eta_{ohm} - \eta_{conc} \quad (10)$$

در اینجا η به معنی افت و E^{OCV} ولتاژ مدار باز است که برای مخلوط خالص بخار آب- هیدروژن از معادله نرنست تقریب زده می‌شود [۷] و ۲۸].

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

$$\eta_{ohm} = R_{tot} \cdot i \quad (۱۷)$$

R_{tot} ، مقاومت داخلی کلی در پیل است. بر اساس معادله باتلر-ولمر، سینتیک انتقال بار، توصیف کننده چگالی جریان انتقال بار است. معادله سینتیک انتقال بار زیر، در آند و کاتد برقرار است [۲۴ و ۲۵]:

$$i_{v,a} = AV_e i_{o,ref}^{H_2} \left(\frac{c_{H_2}}{c_{H_2,ref}} \right)^{\gamma_{H_2}} \times \left\{ \exp \left[\alpha \frac{n_e F \eta_{act,a}}{RT} \right] - \exp \left[-(1-\alpha) \frac{n_e F \eta_{act,a}}{RT} \right] \right\} \quad (۱۸)$$

$$i_{v,c} = AV_e i_{o,ref}^{O_2} \left(\frac{c_{O_2}}{c_{O_2,ref}} \right)^{\gamma_{O_2}} \times \left\{ \exp \left[\alpha \frac{n_e F \eta_{act,c}}{RT} \right] - \exp \left[-(1-\alpha) \frac{n_e F \eta_{act,c}}{RT} \right] \right\} \quad (۱۹)$$

در این روابط، AV_e ، نسبت سطح فعال الکتروشیمیایی به حجم، $i_{(o,ref)}^{(H_2)}$ و $i_{(o,ref)}^{(O_2)}$ چگالی جریان تبدیلی مرجع در سطح فعال برای اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن، c_{H_2} و $c_{H_2,ref}$ غلظت هیدروژن و مقدار مرجع آن، c_{O_2} و $c_{O_2,ref}$ غلظت اکسیژن و مقدار مرجع آن است. α ضریب انتقال بار است که مقداری بین صفر و یک دارد. γ_{H_2} و γ_{O_2} مرتبه واکنش برای اکسایش هیدروژن و کاهش اکسیژن هستند.

۲-۲-۲- معادله بقای گونه‌ها

بقای گونه‌ها در داخل پیل سوختی اکسید جامد به علت طبیعت چندگونه انتقال گونه‌ها توسط جابجایی در کانال‌ها و از طریق نفوذ در الکترودهای متخلخل، پیچیده است. معادله بقای هر گونه توسط رابطه (۲۰) بیان می‌شود [۳۰ و ۳۱]:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (\omega_i) + \rho (u \cdot \nabla) \omega_i = \nabla \left[\rho \omega_i \sum D_{eff,ij} \cdot \nabla x_j + (x_j - \omega_j) \frac{\nabla P}{P} + D_i^T \cdot \frac{\nabla T}{T} \right] + S_i \quad (۲۰)$$

به طوریکه ω_i ، کسر جرمی، x_j کسر مولی، ρ چگالی، $D_{eff,ij}$

در معادله (۱۱)، T دما، R ثابت گاز ایده‌آل، F ثابت فارادی، P_j فشار جزئی گونه‌ها و E^0 ولتاژ برگشت پذیر وابسته به دما که بر اساس معادله (۱۲) بدست می‌آید [۲۶ و ۲۲ و ۲۱].

$$E^0 = 1.253 - 2.4516 \times 10^{-4} T \quad (۱۲)$$

عبارات افت فعالسازی برای الکترودهای آند و کاتد به صورت زیر محاسبه می‌شوند [۱۹ و ۲۱]:

$$\eta_{act,a} = \phi_s - \phi_l \quad (۱۳)$$

$$\eta_{act,c} = \phi_s - \phi_l - E^{OCV} \quad (۱۴)$$

زیرنویس a بر آند و زیرنویس c بر کاتد دلالت دارد. به علت مقاومت نفوذ در الکترودهای متخلخل، غلظت گونه‌های واکنش دهنده در مرزهای سه‌فازی آندی و کاتدی نسبت به نقاط دیگر متفاوت است. با بازنویسی معادله نرنست، با استفاده از غلظت گونه‌های گازی در مرزهای سه‌فازی، پتانسیل مدار باز کمتری نتیجه می‌شود و این تفاوت به صورت افت غلظتی تعریف می‌شود [۷ و ۲۲]:

$$\eta_{conc,a} = \frac{RT}{n_{e,a} \cdot F} \ln \left[\frac{P_{H_2O,TPB} \cdot P_{H_2,b}}{P_{H_2,TPB} \cdot P_{H_2O,b}} \right] \quad (۱۵)$$

$$\eta_{conc,c} = \frac{RT}{n_{e,c} \cdot F} \ln \left[\frac{P_{O_2,b}}{P_{O_2,TPB}} \right] \quad (۱۶)$$

در این معادلات b ، فصل مشترک بین کانال گاز و الکتروده است. تلفات اهمی به علت مقاومت جریان یون‌های اکسیژن در الکترولیت و مقاومت جریان الکترون‌هاست. بر اساس قانون اهم، بین چگالی جریان و افت ولتاژ رابطه خطی وجود دارد. افت اهمی به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۳ و ۲۹]:

جدول ۲. عبارات چشمه و چاه در آند و کاتد

Table 2. Expressions of sink and source terms in the anode and cathode

$S_i \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3 \text{s}^{-1}} \right)$	لایه فعال آند	لایه حمایتی آند	لایه فعال کاتد
H ₂	$(3r_{MSR} + r_{WGSR})M_{H_2} - \left(\frac{i_{v,a}}{2F}\right)M_{H_2}$	$(3r_{MSR} + r_{WGSR})M_{H_2}$	0
CH ₄	$-r_{MSR}M_{CH_4}$	$-r_{MSR}M_{CH_4}$	0
CO	$(r_{MSR} - r_{WGSR})M_{CO}$	$(r_{MSR} - r_{WGSR})M_{CO}$	0
H ₂ O	$(-r_{MSR} - r_{WGSR})M_{H_2O} + \left(\frac{i_{v,a}}{2F}\right)M_{H_2O}$	$(-r_{MSR} - r_{WGSR})M_{H_2O}$	0
CO ₂	$r_{WGSR}M_{CO_2}$	$r_{WGSR}M_{CO_2}$	0
O ₂	0	0	$-\left(\frac{i_{v,c}}{4F}\right)M_{O_2}$

$$k_{WGSR} = 0.0171 \exp\left(\frac{-103191}{RT}\right) \quad (25)$$

ضریب نفوذ مؤثر بین گونه i و j ، T دما، D_i^T ضریب نفوذ حرارتی (در این مطالعه صفر فرض شده است) و S_i عبارات چشمه برای گونه i به علت واکنش‌های الکتروشیمیایی داخل آند و کاتد و ریفرمینگ داخلی در آند می‌باشند که در جدول ۲ لیست شده‌اند.

$$K_{eq,WGSR} = \exp(-0.2935Z^3 + 0.6351Z^2 + 4.1788Z + 0.3169) \quad (26)$$

r_{WGSR} ، r_{MSR} در جدول ۲ به ترتیب نرخ واکنش برای واکنش‌های تبدیل متان با بخار و جابجایی آب-گاز می‌باشد که به صورت زیر بیان می‌شوند [۳۰ و ۳۱].

$$Z = \frac{1000}{T} - 1 \quad (27)$$

$$r_{MSR} = k_{MSR} \cdot \left(P_{H_2O} \cdot P_{CH_4} - \frac{(P_{H_2})^3 \cdot P_{CO}}{K_{eq,MSR}} \right) \quad (21)$$

ضریب نفوذ مولکولی (D_{ij}) برای سیستم مخلوط گاز چند جزئی توسط معادله (۲۸) [۱۹ و ۲۸] محاسبه می‌شود درحالی‌که ضریب نفوذ نادسن ($D_{k,ij}$) توسط رابطه (۲۹) قابل محاسبه است [۲۷].

$$k_{MSR} = 2395 \cdot \exp\left(-\frac{231266}{RT}\right) \quad (22)$$

$$D_{ij} = \frac{k_d T^{1.75}}{P \left(\nu_i^{\frac{1}{3}} + \nu_j^{\frac{1}{3}} \right)^2} \left[\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (28)$$

$$K_{eq,MSR} = 1.0267 \times 10^{10} \times \exp\left(\frac{-0.2513Z^4 + 0.3665Z^3 + 0.5810Z^2 - 27.134Z + 3.277}{RT} \right) \quad (23)$$

$$D_{k,ij} = \frac{2}{3} \bar{r} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_{ij}}} \quad (29)$$

$$r_{WGSR} = k_{WGSR} \cdot \left(P_{H_2O} \cdot P_{CO} - \frac{P_{H_2} \cdot P_{CO_2}}{K_{eq,WGSR}} \right) \quad (24)$$

$$\frac{\rho}{\varepsilon} \left[\frac{\partial u}{\partial t} + (u \cdot \nabla) \frac{u}{\varepsilon} \right] = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\frac{1}{\varepsilon} \left\{ \mu (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot u) I \right\} \right] - \left[\frac{\mu}{\kappa} + \frac{Q_{br}}{\varepsilon^2} \right] \cdot u + F \quad (33)$$

$$Q_{br} = \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \rho) + \nabla \cdot (\rho u) \quad (34)$$

در معادلات بالا، ε تخلخل، F بردار نیروی حجمی، μ ویسکوزیته دینامیکی، κ قابلیت نفوذ محیط متخلخل ($1/76 \times 10^{-11} \text{ m}^2$) [۳۵] و Q_{br} چشمه یا چاه جرمی می‌باشد. معادلات حاصل برای انتقال مومنتوم در کانال‌های جریان معمولاً معادلات مومنتوم هستند.

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u = -\nabla P + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot u) I \right] + F \quad (35)$$

$$\nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (36)$$

چگالی مخلوط با فرض گاز کامل بدست می‌آید [۱۹ و ۳۶]. ویسکوزیته‌های دینامیکی (μ_j) برای هر گونه و همچنین برای مخلوط گازهای شرکت‌کننده به دمای محلی بستگی دارد و از روابط بحث شده در مرجع [۳۷] محاسبه می‌شوند.

۲-۲-۴- معادله بقای انرژی

معادله بقای انرژی تعادل حرارتی را داخل پیل سوختی اکسید جامد بیان می‌کند و به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۱ و ۲۶ و ۲۸]:

$$\left(\rho C_p \right)_{eq} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p u \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k_{eq} \nabla T) + Q \quad (37)$$

که k_d و ν به ترتیب، نفوذ مرجع و حجم انتشار می‌باشند [۲۸ و ۳۲ و ۳۳]، \bar{r} شعاع متوسط سوراخ (که در این مطالعه 0.34 میکرومتر فرض شده‌است)، R ثابت جهانی گاز و M_{ij} به صورت زیر محاسبه می‌شود [۲۲ و ۲۷]:

$$M_{ij} = \frac{2}{\frac{1}{M_i} + \frac{1}{M_j}} \quad (30)$$

M_i و M_j به ترتیب جرم مولکولی گونه i و j هستند. ضرایب نفوذ مؤثر در کانال‌های گاز و الکترودهای متخلخل به ترتیب از معادلات (۳۱) و (۳۲) به صورت زیر محاسبه می‌شوند [۲۷ و ۳۴]:

$$D_{eff,ij} = \frac{1-x_i}{\sum_{j \neq i} \frac{x_j}{D_{ij}}} \quad (31)$$

$$D_{eff,ij} = \frac{\varepsilon}{\tau} \left(\frac{1}{\sum_{j \neq i} \frac{x_j}{D_{ij}} + \frac{1}{1-x_i} + \frac{1}{D_{k,ij}}} \right) \quad (32)$$

۲-۲-۳- معادلات بقای جرم و مومنتوم

معادلات مومنتوم برای تعیین تغییرات سرعت و فشار سیال در میدان‌های سه‌بعدی که شامل جریان آزاد در کانال‌های جریان آندی و کاتدی و جریان محیط متخلخل است حل می‌شوند. آند و کاتد از مواد متخلخل ساخته شده‌اند و فرض شده‌است که پارامترهای میکروساختاری آن‌ها (تخلخل، پیچش، شعاع متوسط سوراخ و قابلیت نفوذ) در مختصات فضایی همگن و ایزوتروپ است. مدل‌های متفاوتی برای توصیف جریان در محیط متخلخل وجود دارد. معادله دارسی-برینکمن مناسب‌ترین مدل برای انتقال مومنتوم می‌باشد که در این معادله، نفوذ ویسکوز تابعی از قابلیت نفوذ محیط است [۱۸ و ۱۹ و ۲۴ و ۲۸]:

در هر واکنش می‌باشد. r_{MSR} ، r_{WGSR} ، ΔH_{MSR} و ΔH_{WGSR} به ترتیب نرخ واکنش و تغییر آنتالپی برای واکنش‌های تبدیل متان با بخار و جابجایی آب-گاز می‌باشد که تغییر آنتالپی واکنش‌ها از مراجع [۲۱ و ۲۲ و ۳۰ و ۳۱] بدست می‌آیند. برخی پارامترهای مدل‌سازی پیل در جدول ۴ و پارامترهای مواد جامد در جدول ۵ لیست شده‌اند.

۲-۳- پارامترهای ورودی و شرایط مرزی

شرایط مرزی ورودی در این شبیه‌سازی سرعت ورودی است. سرعت ورودی در کانال سوخت و هوا به ترتیب ۰/۱ و ۱ متر بر ثانیه است. در دیواره‌ها شرط مرزی عدم لغزش برقرار است. همچنین فشار خروجی، فشار اتمسفریک تنظیم شده‌است. دمای ورودی کانال‌های سوخت و هوا ۱۰۲۳ کلوین می‌باشد. تمامی دیواره‌ها عایق هستند. پتانسیل در جمع‌کننده جریان آند و کاتد به ترتیب برابر صفر و ولتاژ عملکردی پیل (در این مقاله ۰/۷ ولت) تنظیم شده‌است. سایر مرزهای خارجی و فصل مشترک‌ها از نظر الکتریکی عایق هستند. چگالی جریان یونی در فصل مشترک لایه حمایتی آند/کاتد و لایه فعال آند/کاتد و همچنین چگالی جریان الکتریکی در فصل مشترک لایه فعال آند/کاتد و الکترولیت برابر صفر می‌باشد.

۳- بحث و نتیجه‌گیری

در این مدل، فرآیندهای عملکردی پیل سوختی اکسید جامد با انتقال جرم و گرما، انتقال یون و الکترون و واکنش‌های ریفرمینگ داخلی توأم است. در این شبیه‌سازی معادلات با استفاده از نرم افزار کامسول مولتی فیزیکس ورژن ۵/۴ بر اساس روش المان محدود حل شده‌اند. در این مدل‌سازی، پیل سوختی اکسید جامد شامل الکترولیت، الکترودهای آند و کاتد، کانال‌های سوخت و هوا و متصل‌کننده‌ها می‌باشد. هر کدام از الکترودهای آند و کاتد شامل لایه حمایتی و لایه فعال واکنشی می‌باشند. جزئیات هندسه پیل با کانال مستطیلی مشابه هندسه بکاررفته برای کانال‌های همگرا و اگر است با این تفاوت که پیل بکار رفته برای اعتبارسنجی یک پیل سوختی با کانال مستطیلی با عرض ۲ میلی‌متر است. به منظور بررسی عدم وابستگی حل به شبکه‌بندی، پنج شبکه‌بندی متفاوت، تولید شده‌است. باید اشاره شود که شبکه‌بندی نزدیک فصل مشترک الکترود/الکترولیت ریزتر است در حالی که برای کانال‌های سوخت و هوا و متصل‌کننده‌ها شبکه‌بندی درشت‌تری انجام شده‌است. چنین آرایش شبکه‌ای، اساساً به این دلیل است که انتقال بار و واکنش‌های الکتروشیمیایی (که بر معادلات انتقال یون، الکترون، گونه‌های

که $(\rho C_p)_{eq}$ ظرفیت حرارتی حجمی معادل در فشار ثابت، T دما، C_p ظرفیت حرارتی مخلوط گاز در فشار ثابت، k_{eq} هدایت حرارتی معادل و Q عبارت چشمه حرارتی (تولید یا مصرف گرما) است. ظرفیت حرارتی ویژه و هدایت حرارتی برای هر یک از گونه‌های گازی مطابق معادلات (۳۸) و (۳۹) تعریف می‌شود [۳۷].

$$C_{p,j} = \sum_{K=1}^7 a_K \left(\frac{T}{1000} \right)^K \quad (38)$$

$$k_j = 0.01 \sum_{K=1}^7 C_K \left(\frac{T}{1000} \right)^K \quad (39)$$

مقادیر هدایت حرارتی و گرمای ویژه برای مخلوط گونه‌ها در آند، کاتد و کانال‌های جریان به صورت زیر قابل محاسبه‌است.

$$C_p = \sum_j x_j C_{p,j} \quad (40)$$

$$k_g = \sum_i x_i k_i \quad (41)$$

ضریب هدایت حرارتی معادل (k_{eq}) به شکل زیر محاسبه می‌شود [۲۶ و ۳۸ و ۳۹]:

$$k_{eq} = \varepsilon k_g + (1 - \varepsilon) k_s \quad (42)$$

در معادله بالا، k_s ضریب هدایت جامد و k_g ضریب هدایت مخلوط گاز است.

عبارات تولید یا مصرف حرارت (Q)، به علت واکنش‌های الکتروشیمیایی و ریفرمینگ داخلی، انتقال الکترون و یون و افت فعالسازی و غلظتی در جدول ۳ آمده‌است:

که ΔS_r تغییر آنتروپی واکنش‌ها در معادلات (۳) و (۴)، i چگالی جریان، σ هدایت یونی/الکتریکی و n_e تعداد الکترون‌های منتقل شده

جدول ۳. عبارات چشمه و چاه در معادله انرژی

Table 3. Expressions of sink and source in Energy equation

اجزای مختلف پیل	چشمه و چاه حرارتی $\left(\frac{W}{m^3}\right)$
لایه فعال آند	$\sigma_{eff,l}(\nabla\phi_l)^2 + \sigma_{eff,s}(\nabla\phi_s)^2 + i_{v,a}(\eta_{act,a} + \eta_{conc,a}) + i_{v,a} \frac{T \cdot \Delta S_a}{2F} + r_{MSR} \Delta H_{MSR} + r_{WGSR} \Delta H_{WGSR}$
لایه حمایتی آند	$\sigma_{eff,s}(\nabla\phi_s)^2 + r_{MSR} \Delta H_{MSR} + r_{WGSR} \Delta H_{WGSR}$
لایه فعال کاتد	$\sigma_{eff,l}(\nabla\phi_l)^2 + \sigma_{eff,s}(\nabla\phi_s)^2 + i_{v,c}(\eta_{act,c} + \eta_{conc,c}) + i_{v,c} \frac{T \cdot \Delta S_c}{4F}$
لایه حمایتی کاتد و متصل کننده	$\sigma_{eff,s}(\nabla\phi_s)^2$
کانالها	0

جدول ۴. پارامترهای استفاده شده در شبیه سازی

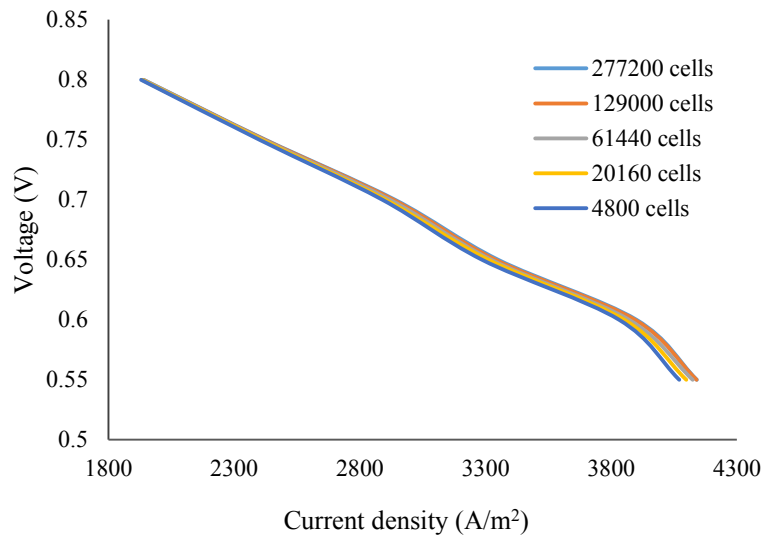
Table 4. Parameters used in the simulation

واحد	پارامتر
	پارامترهای الکتروشیمیایی
۰/۴۲	کسر حجمی هدایت کننده یون [۲۶]
۰/۲۸	کسر حجمی هدایت کننده الکترون [۲۶]
۰/۳	ضریب تخلخل [۲۶]
۱۰	فاکتور پیچش هدایت کننده یون [۲۶]
۱۰	فاکتور پیچش هدایت کننده الکترون [۲۶]
۳	فاکتور پیچش فاز گاز [۲۶]
۱۳۲۰	A/m ² چگالی جریان تبدیلی مرجع برای اکسیداسیون هیدروژن [۲۵]
۴۰۰	A/m ² چگالی جریان تبدیلی مرجع برای کاهش اکسیژن [۲۵]
۱۰/۷۸	mol/m ³ غلظت هیدروژن مرجع [۲۴]
۲/۳۸	mol/m ³ غلظت اکسیژن مرجع [۲۴]
۰/۵	مرتبه واکنش برای اکسیداسیون هیدروژن [۲۴]
۰/۵	مرتبه واکنش برای کاهش اکسیژن [۲۴]
	پارامترهای نفوذ
۶/۱۲	cm ³ /mol حجم انتشار هیدروژن [۳۲]
۱۶/۳	cm ³ /mol حجم انتشار اکسیژن [۳۲]
۱۸/۵	cm ³ /mol حجم انتشار نیتروژن [۳۲]
۲۶/۹	cm ³ /mol حجم انتشار دی اکسید کربن [۳۲]
۱۸	cm ³ /mol حجم انتشار منو کسید کربن [۳۲]
۲۵/۱۴	cm ³ /mol حجم انتشار متان [۳۳]
۱۳/۱	cm ³ /mol حجم انتشار آب [۳۲]
۳/۱۶ × ۱۰ ^{-۸}	m ² /s نفوذ مرجع [۱۹]

جدول ۵. خصوصیات مواد جامد به کار گرفته شده در پیل سوختی

Table 5. Characteristics of solids used in fuel cells

اجزای پیل	هدایت حرارتی ($\frac{W}{mK}$) [۲۶]	چگالی ($\frac{kg}{m^3}$) [۲۲]	گرمای ویژه ($\frac{J}{kg.K}$) [۲۶]
آند (Ni/YSZ)	۱۱	۳۳۱۰	۴۵۰
کاتد (LSM/YSZ)	۶	۳۰۳۰	۴۳۰
الکترولیت (YSZ)	۲/۷	۵۱۶۰	۴۷۰
متصل کننده (فولاد ضد زنگ)	۲۰	۳۰۳۰	۵۵۰

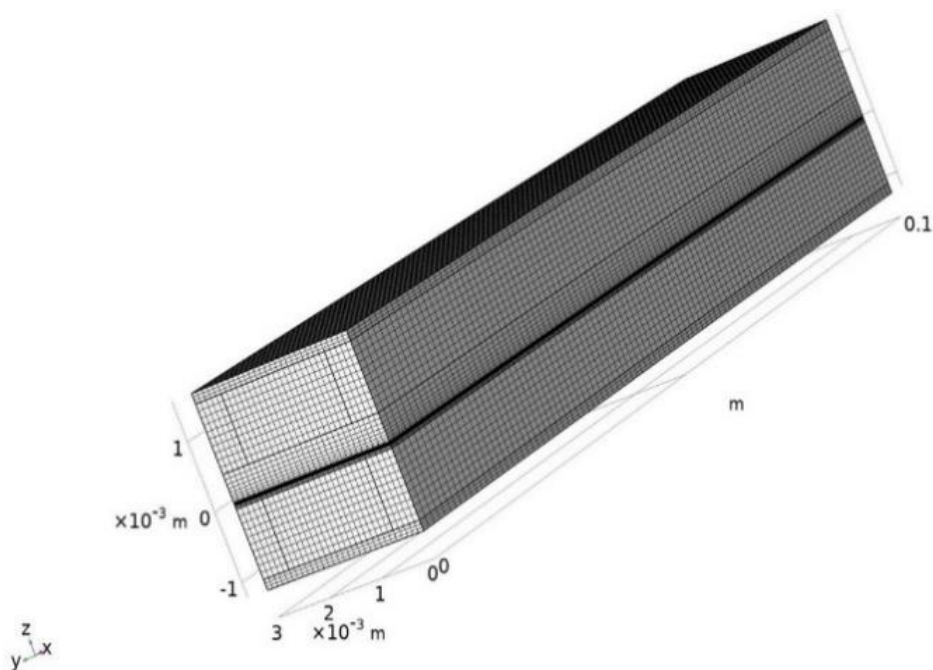


شکل ۲. بررسی عدم وابستگی نتایج شبیه‌سازی به شبکه بندی مدل

Fig. 2. Investigation of the grid independence of simulation

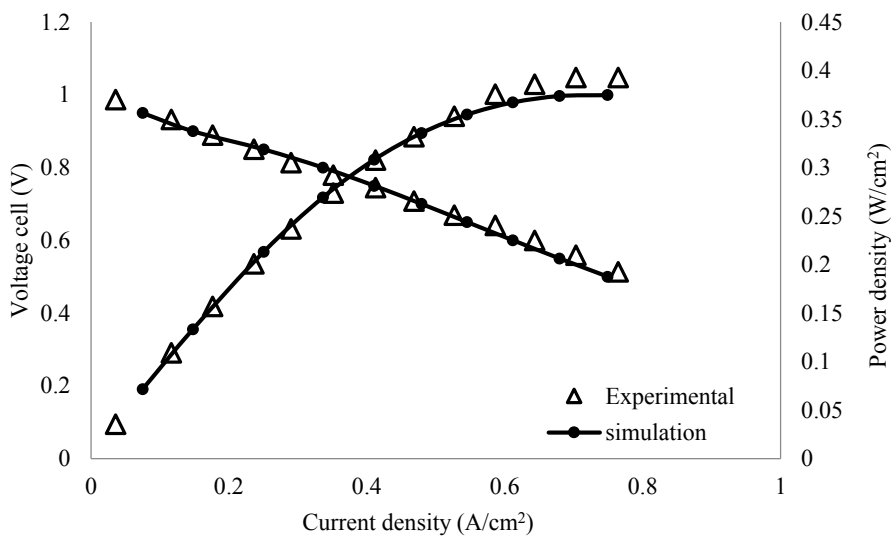
انتخاب گردیده‌است. شکل ۳ نمایش فضایی شبکه بندی در هندسه سه بعدی پیل سوختی را نشان می‌دهد. برای اعتبارسنجی این مدل تئوری، عملکرد تک پیل سوختی اکسید جامد با داده‌های تجربی بدست آمده از موسسه فناوری و مهندسی مواد نینگبو مقایسه شده‌است [۴۰]. در این آزمایش دبی جریان سوخت و هوای ۸۰۰ و ۲۰۰۰ سانتی متر مکعب در دقیقه در شرایط استاندارد وارد کانال‌های سوخت و هوا می‌شود. منحنی‌های قطبش و چگالی توان در مقابل چگالی جریان بدست آمده از مدل حاضر با نتایج تجربی مقایسه شده و در شکل ۴ نشان داده شده‌است. نتایج شبیه‌سازی توافق قابل قبولی را با داده‌های تجربی نشان می‌دهد، مخصوصاً هنگامی که ولتاژ پیل

فازگازی، گرما و مومنتوم تأثیر می‌گذارد) فقط در نواحی نزدیک فصل مشترک الکتروود/الکترولیت رخ می‌دهند. در شکل ۲، به مقایسه منحنی‌های قطبش مرتبط با هر کدام از شبکه بندی‌ها با یکدیگر پرداخته شده‌است. در محدوده ولتاژهای عملکردی تا ۰/۷ ولت، تفاوت قابل ملاحظه‌ای میان منحنی‌های موجود، مشاهده نمی‌گردد، اما در ادامه با کاهش بیشتر ولتاژ عملکردی، اختلاف منحنی‌ها نمایان می‌شود. با بررسی این شکل مشخص می‌گردد، که تفاوت مابین منحنی‌های قطبش شبکه‌های با ۱۲۹۰۰۰ سلول و ۲۷۷۲۰۰ سلول بسیار کم است تا جایی که این دو منحنی تقریباً بر هم منطبق هستند. بنابراین، شبکه بندی با ۱۲۹۰۰۰ سلول، به عنوان شبکه محاسباتی مناسب



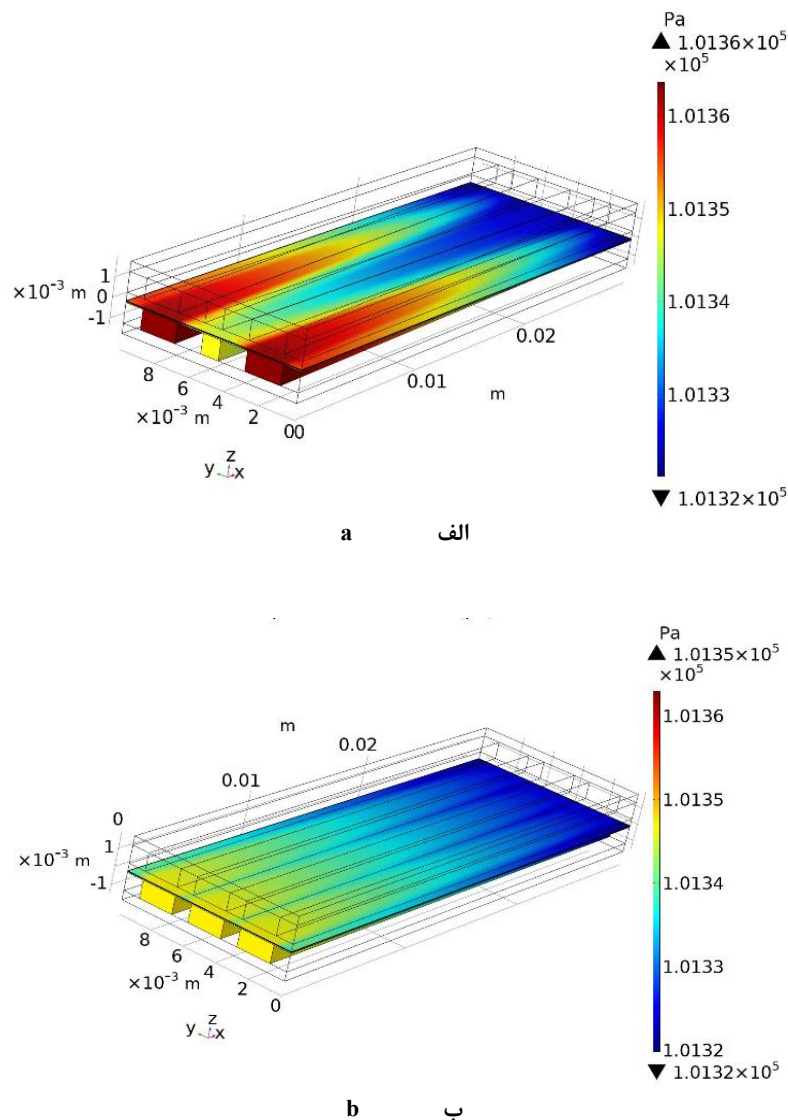
شکل ۳. نمایش فضایی شبکه بندی در هندسه سه بعدی پیل سوختی

Fig. 3. Spatial representation of the 3-D grid of the fuel cell



شکل ۴. مقایسه منحنی های ولتاژ پیل و چگالی توان در مقابل چگالی جریان حاصل از شبیه سازی و داده های تجربی

Fig. 4. Comparison of current simulation results with available experimental data



شکل ۵. توزیع فشار در کاتد و کانال‌های کاتدی در پیل سوختی با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

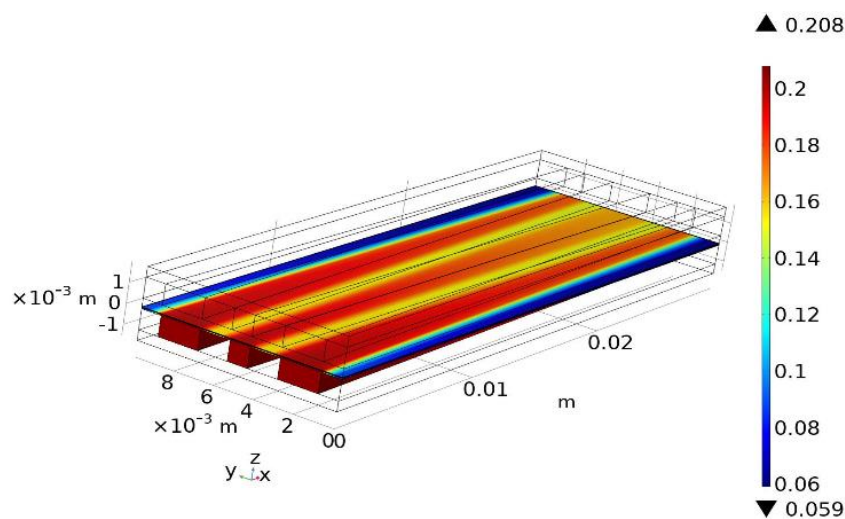
Fig. 5. Pressure distribution at the cathode and cathode channels in the cell with a- converg-diverging channels, b- direct channels

۳-۱- مقایسه عملکرد پیل با کانال‌های مستقیم و پیل با کانال‌های همگرا-واگرا

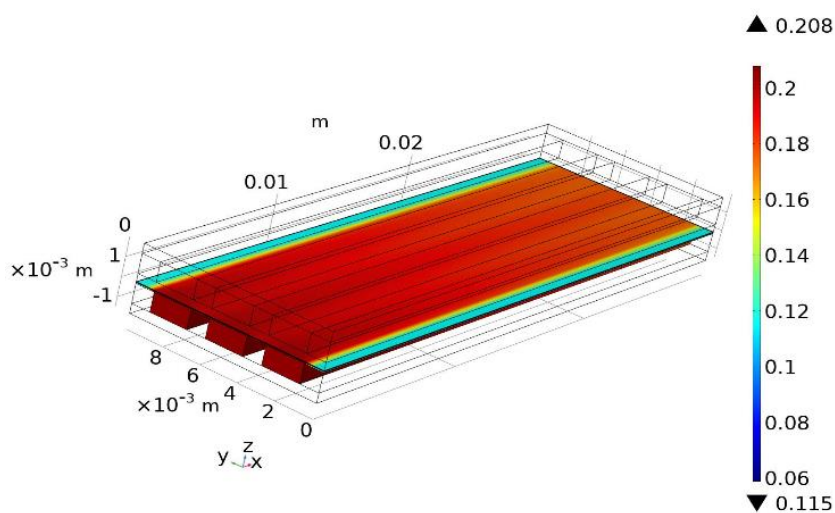
شکل‌های ۵- الف و ۵- ب توزیع فشار در طول کانال کاتدی برای دو پیل با کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم را در ولتاژ عملکردی ۰/۷ ولت نشان می‌دهند. در هر دو شکل با پیشروی جریان در جهت اصلی (X)، کاهش فشار اتفاق می‌افتد. این اختلاف فشار در کانال‌های همگرا واگرا

بین ۰/۵ تا ۰/۸ ولت است. این اختلاف اساساً به علت فرضیات استفاده شده در این مدل است.

در این بخش، ابتدا به مقایسه کانتورهای مختلف پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم معمولی در ولتاژ عملکردی ۰/۷ ولت پرداخته می‌شود سپس عملکرد دو پیل در شرایط مختلف ولتاژ، سرعت سوخت و هوای ورودی با یکدیگر مقایسه می‌گردند.



الف a



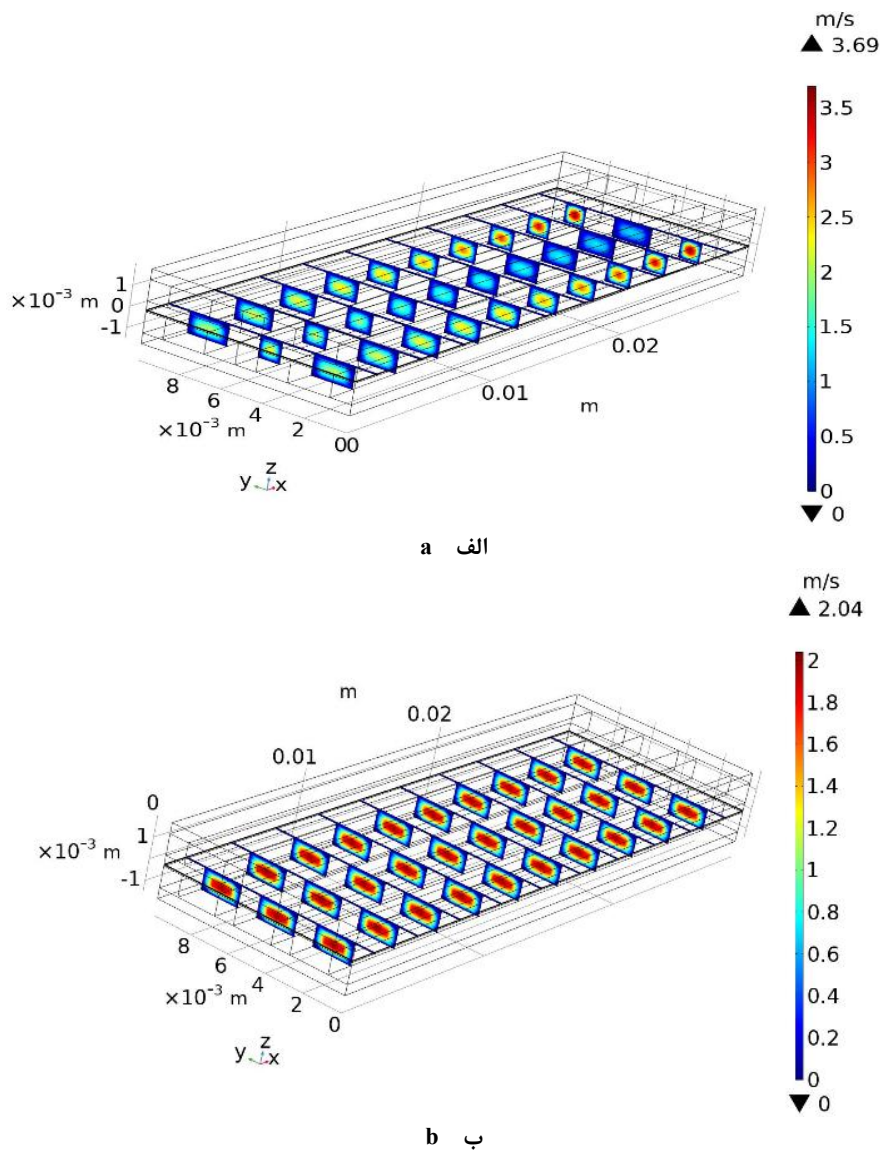
ب b

شکل ۶. توزیع کسر مولی اکسیژن در کاتد در پیل سوختی با الف-کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

Fig. 6. Distribution of oxygen molar fraction at the cathode in the cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

توزیع بهتر اکسیژن در لایه فعال کاتدی می‌شود. شکل‌های ۶- الف و ۶- ب، توزیع کسر مولی اکسیژن برای پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم را در ولتاژ ۰/۷ ولت نشان می‌دهند. در هر دو مورد، کسر مولی اکسیژن به دلیل انجام واکنش الکتروشیمیایی در جهت اصلی جریان کاهش می‌یابد. این کاهش در پیل سوختی با کانال‌های مستقیم تقریباً روند یکنواختی دارد اما در پیل سوختی با

نسبت به کانال‌های مستقیم ۵۴ درصد بیشتر است. همچنین همانطور که در این شکل‌ها ملاحظه می‌شود، اختلاف فشاری بین کانال همگرا و کانال واگرای مجاورش وجود دارد به طوری که فشار، همواره در کانال همگرا بیشتر از کانال واگرای مجاورش است اما اختلاف فشار واضحی بین کانال‌های همسایه در شکل ۶- ب مشاهده نمی‌شود. در نتیجه، اختلاف فشار بین کانال‌های همگرا واگرا سبب تولید جریان عرضی در کانال‌ها و دندان‌ها برای

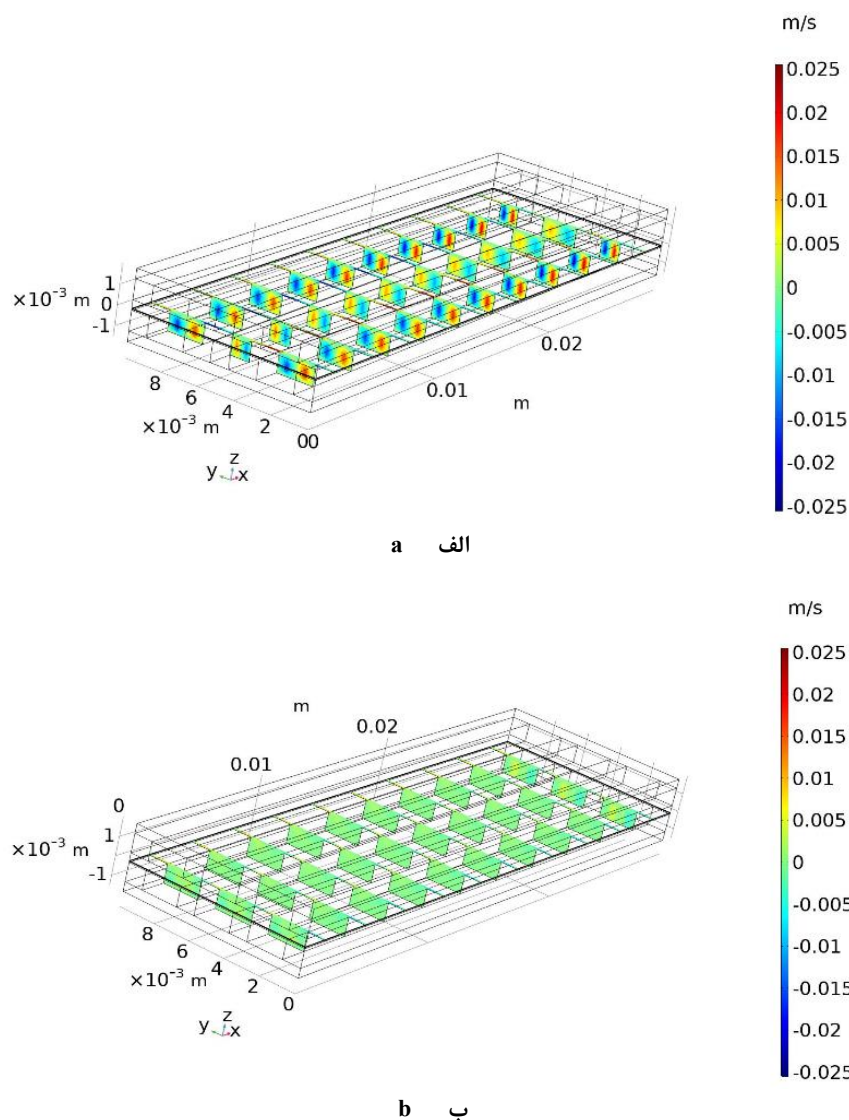


شکل ۷. بزرگی سرعت در کاتد برای پیل سوختی با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

Fig. 7. Velocity at the cathode for the fuel cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

واگرا نسبت به کانال‌های مستقیم بسیار محسوس‌تر است. در پیل سوختی با کانال‌های مستقیم گرادیان کسر مولی بین کانال‌ها در کاتد بسیار کم است و گرادیان نسبتاً شدیدی در ابتدا و انتهای پیل در راستای y وجود دارد، این گرادیان در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا بسیار شدیدتر است. کانتور اندازه سرعت در بخش کاتدی برای پیل‌های سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و مستقیم در دو شکل ۷-الف و ۷-ب نمایش داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، در هر دو شکل، سرعت در قسمت مرکزی

کانال‌های همگرا واگرا یکنواخت نیست بلکه به دلیل وجود کانال‌های همگرا و واگرا و وجود جریان‌های عرضی، در کانال واگرا اکسیژن بیشتری نسبت به دو کانال همگرای مجاور مصرف می‌شود به طوری که در کانال واگرا ۱۹ درصد اکسیژن مصرف می‌شود اما در کانال‌های همگرای مجاور ۱۲ درصد اکسیژن مصرف می‌شود. علاوه بر گرادیان کسر مولی اکسیژن در جهت اصلی، گرادیان کسر مولی دیگری در جهت y به علت دندانه‌ها و مقاومت جریان دیده می‌شود. این تغییرات برای پیل سوختی با کانال‌های همگرا



شکل ۸. مؤلفه عرضی سرعت در کاتد برای پیل سوختی با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

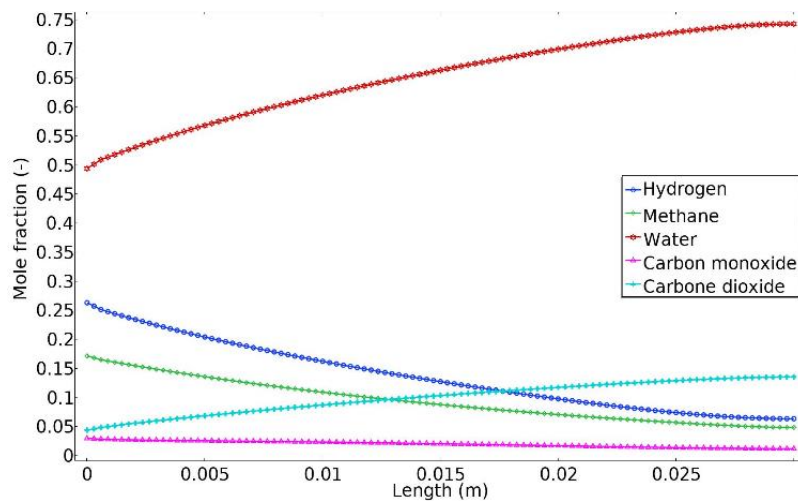
Fig. 8. Transverse component of velocity at the cathode for the fuel cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

همسایه، سرعت عرضی (سرعت در راستای محور y) نیز وجود دارد. این سرعت عرضی برای پیل سوختی با کانال مستقیم بسیار جزئی است. وجود این سرعت‌های عرضی در بخش کاتدی پیل، مخصوصاً برای پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا در شکل‌های ۸-الف و ۸-ب مشخص است. این شکل نشان‌دهنده انتقال هوا از کانال‌های همگرا به کانال واگراست که نتیجه اختلاف فشار بین کانال‌های همسایه است.

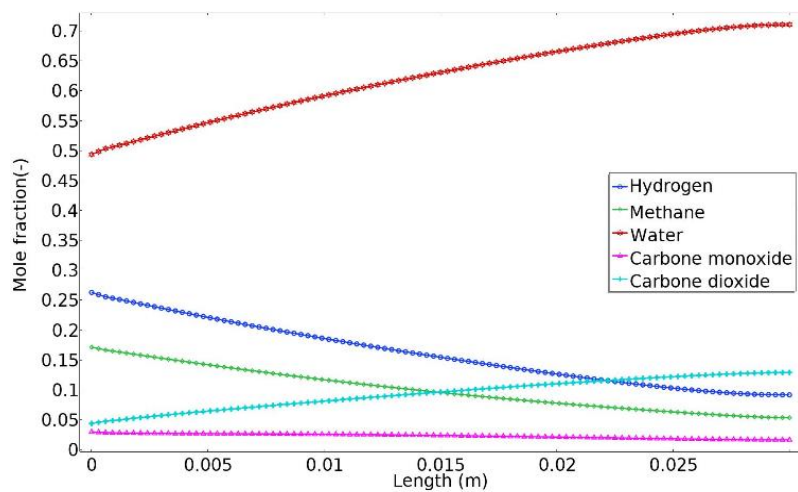
کسر مولی گونه‌های آندی در فصل مشترک کانال سوخت و لایه فعال آندی در طول پیل برای هر دو پیل در شکل‌های ۹-الف و ۹-ب نشان داده شده

کانال‌ها بیشینه است و به دلیل اینکه در کانال‌های مستقیم افت فشار چندانی وجود ندارد، افزایش سرعت چندانی نیز در طول پیل مشاهده نمی‌شود اما همان‌طور که در شکل ۷-الف ملاحظه می‌گردد، در کانال‌های همگرا به دلیل گرادیان فشار بیشتر، سرعت هوا افزایش یافته تا جایی که در خط مرکزی انتهای کانال به مقدار بیشینه ۳/۶۹ متر بر ثانیه می‌رسد اما در کانال واگرا به دلیل قوانین اساسی مکانیک سیالات، کاهش سرعت مشاهده می‌شود.

علاوه بر سرعت طولی (سرعت در راستای محور x) برای پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، به دلیل شکل کانال‌ها و اختلاف فشار بین کانال‌های



الف ا



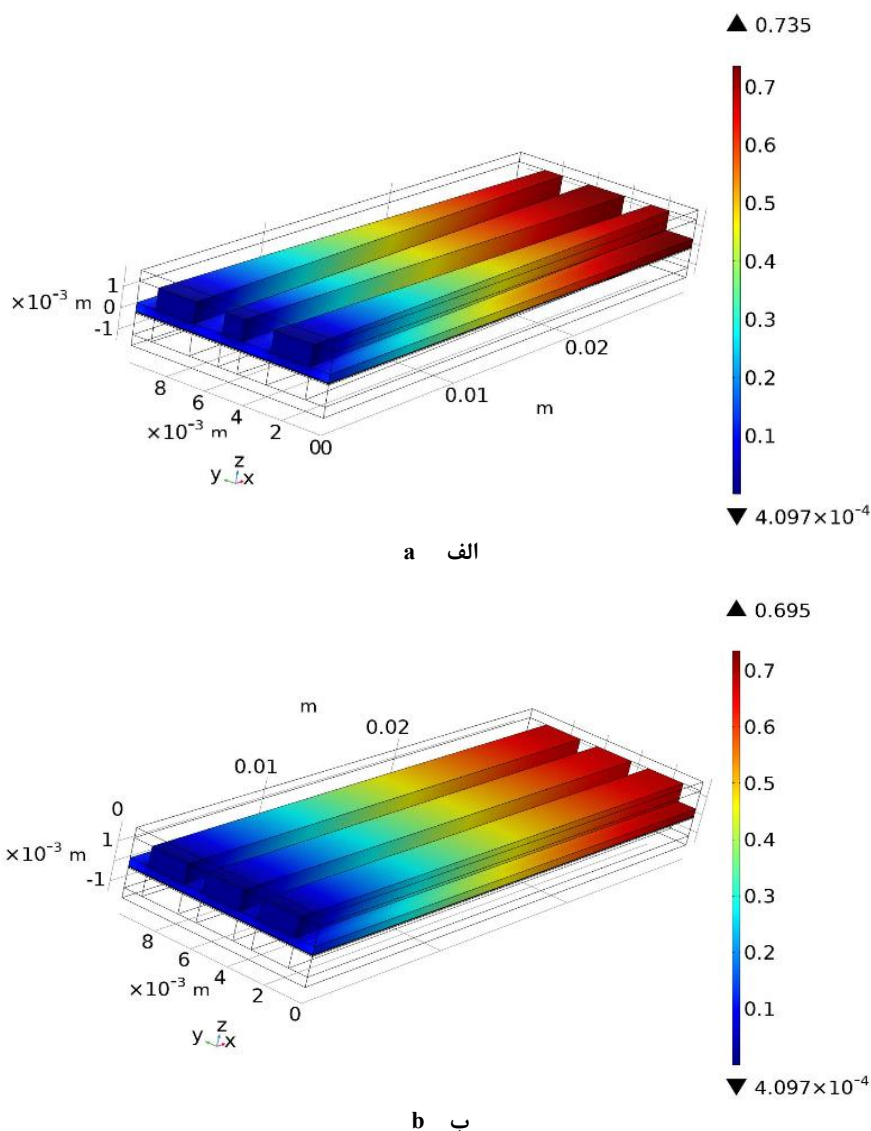
ب ب

شکل ۹. کسر مولی گونه‌های گازی شرکت کننده در طول پیل الف- با کانال‌های همگرا واگرا، ب- با کانال‌های مستقیم

Fig. 9. Molar fraction of gaseous species along the cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

در صورتی که در پیل سوختی با کانال‌های مستقیم، مقدار هیدروژن مصرف شده ۶۶ درصد است. بخار آب در واکنش‌های الکتروشیمیایی تولید شده اما در واکنش‌های تبدیل متان با بخار و جابجایی آب-گاز مصرف می‌شود. از آنجایی که در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا هیدروژن بیشتری مصرف می‌شود در نتیجه انتظار می‌رود که در این نوع پیل سوختی، بخار آب بیشتری نیز تولید می‌شود به طوری که کسر مولی بخار آب خروجی از پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، ۳ درصد بیشتر از پیل سوختی با کانال‌های مستقیم

است. هیدروژن در جهت اصلی جریان، به علت واکنش‌های الکتروشیمیایی نزدیک فصل مشترک آند/الکترولیت مصرف شده اما در واکنش‌های تبدیل متان با بخار و واکنش جابجایی آب-گاز تولید می‌شود. همان‌طور که در شکل ۹-الف مشخص است، در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، به دلیل وجود جریان‌های عرضی، هیدروژن بیشتری در واکنش‌های الکتروشیمیایی شرکت کرده و در نتیجه هیدروژن بیشتری مصرف می‌شود به طوری که در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، ۷۷ درصد هیدروژن مصرف شده



شکل ۱۰. ضریب مصرف سوخت در پیل سوختی با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

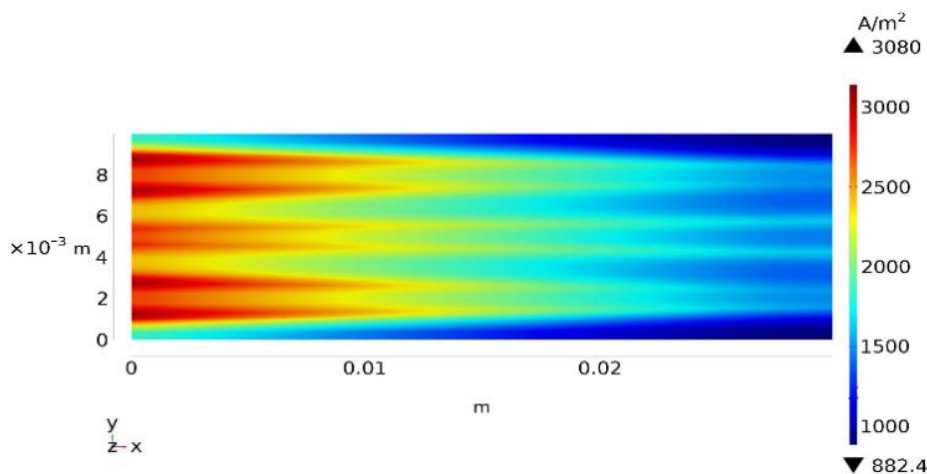
Fig. 10. Fuel consumption coefficient in the cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

جابجایی آب-گاز تولید می‌شود و از طریق آند به کانال سوخت و سپس به خارج پیل هدایت می‌شود. همان‌طور که انتظار می‌رود دی‌اکسیدکربن بیشتری در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا تولید می‌شود.

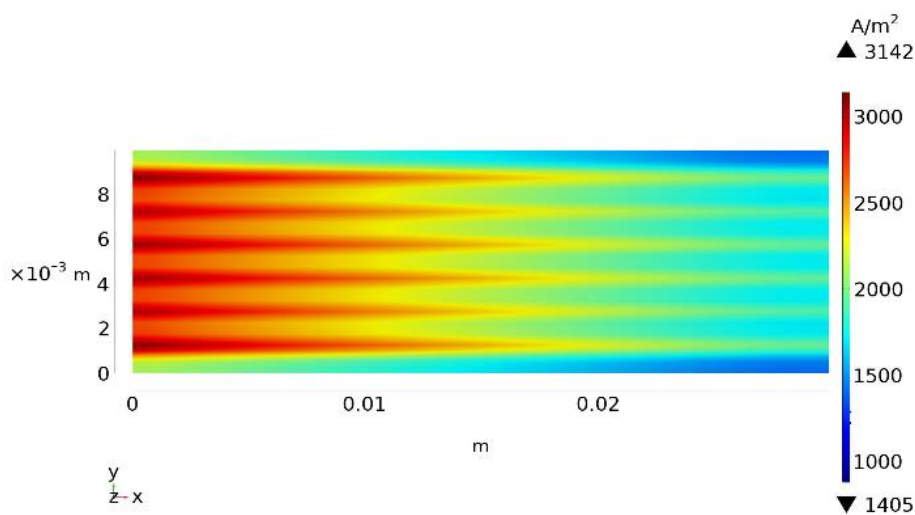
شکل‌های ۱۰-الف و ۱۰-ب، ضریب مصرف سوخت برای هر دو نوع پیل را در طول پیل نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل‌ها نیز مشخص است، با پیشروی جریان، سوخت بیشتری مصرف شده و ضریب مصرف سوخت نیز افزایش می‌یابد.

چگالی جریان الکتروود برای هر دو نوع پیل در فصل مشترک کاتد/

است. متان در واکنش تبدیل متان با بخار مصرف می‌شود بنابراین کسر مولی متان در جهت اصلی جریان کاهش می‌یابد. از آنجایی که در پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، بخار آب بیشتری تولید می‌شود و همچنین به دلیل وجود جریان‌های عرضی در این نوع پیل، مقدار مصرف متان نیز در این پیل بیشتر است به طوری که در پیل با کانال‌های همگرا واگرا، ۷۲ درصد متان مصرف می‌شود در صورتی که مصرف متان در پیل با کانال‌های مستقیم، ۶۹ درصد است. منوکسیدکربن در واکنش تبدیل متان با بخار تولید می‌شود اما در واکنش جابجایی آب-گاز مصرف می‌شود. دی‌اکسیدکربن نیز در واکنش



الف ا



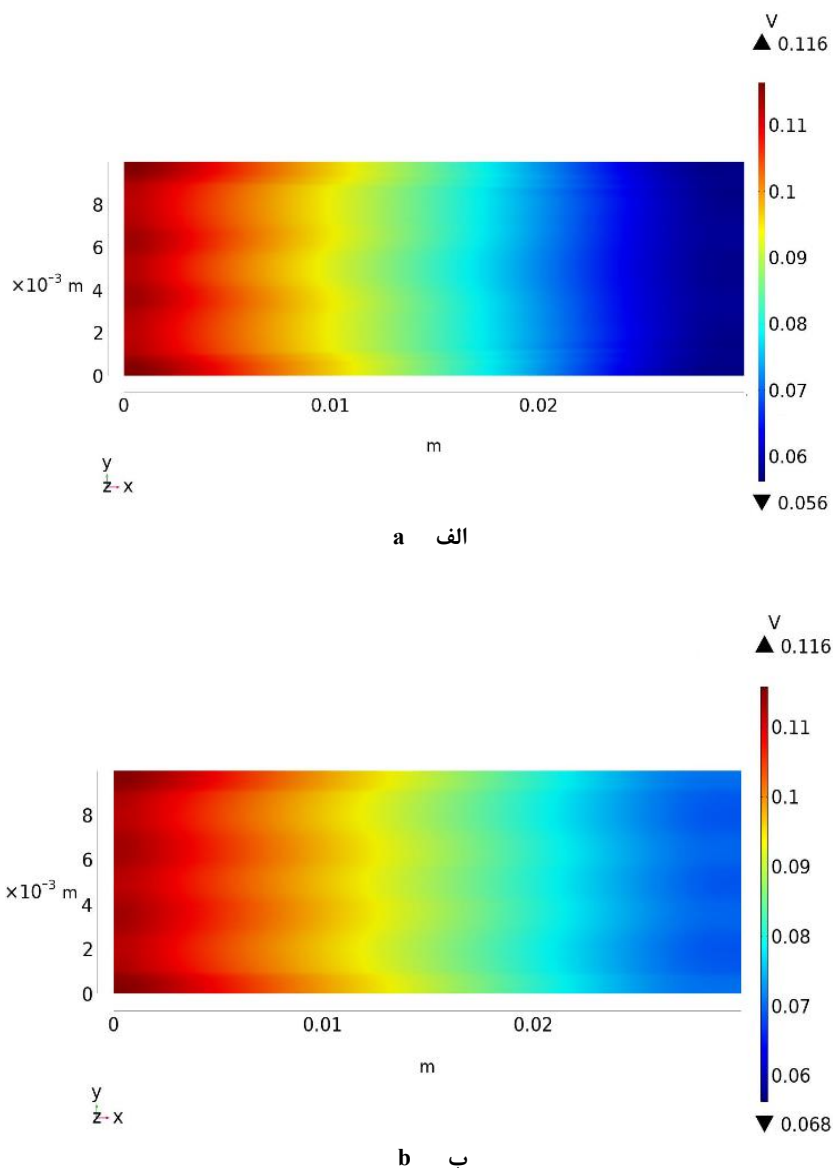
ب ب

شکل ۱۱. چگالی جریان الکتروود در فصل مشترک کاتد/الکتروولیت در پیل با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

Fig. 11. Electrode current density at the cathode / electrolyte interface at the cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

آب در جهت اصلی جریان کاهش می‌یابد. همچنین در هر دو پیل، چگالی جریان الکتروود نزدیک فصل مشترک کانال جریان / دنداندارای بیشترین مقدار است. با نزدیک شدن به محور تقارن در هر کانال مقدار آن کاهش می‌یابد، یعنی بیشترین چگالی جریان در گوشه‌های دنداندار / کاتد به علت غلظت بالای اکسیژن و فاصله انتقال الکترون کوتاه وجود دارد همچنین مقدار آن به علت مقاومت الکترون‌ها در فضای متخلخل برای رسیدن به وضعیت‌های میانی کانال‌ها کاهش می‌یابد البته همان‌طور که در شکل‌های

الکتروولیت در شکل‌های ۱۱-الف و ۱۱-ب نمایش داده شده‌اند. با نگاهی کلی به شکل‌های ۱۱-الف و ۱۱-ب فهمیده می‌شود که چگالی جریان الکتروود در پیل با کانال‌های همگرا واگرا نسبت به پیل با کانال‌های مستقیم کمتر است. علت بیشتر بودن چگالی جریان در پیل با کانال‌های مستقیم، افزایش ۳۳ درصدی مساحت کانال‌ها (فصل مشترک کانال‌های جریان با الکتروود) در این پیل نسبت به پیل با کانال‌های همگرا واگرا می‌باشد. چگالی جریان الکتروود در هر دو شکل ۱۱-الف و ۱۱-ب با مصرف اکسیژن و هیدروژن و تولید



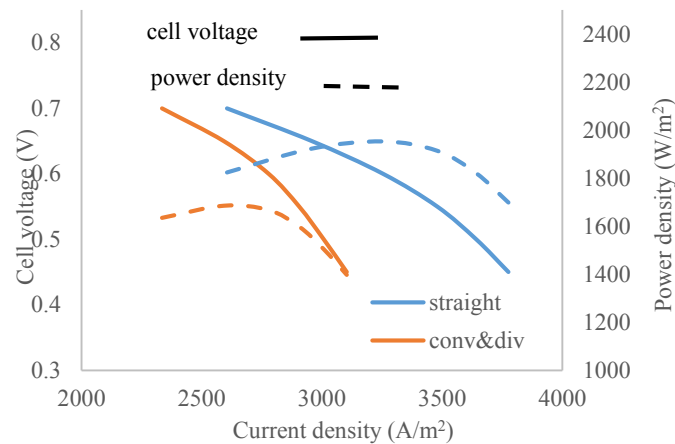
شکل ۱۲. افت فعالسازی در فصل مشترک کاتد/ الکترولیت برای پیل سوختی با الف- کانال‌های همگرا واگرا، ب- کانال‌های مستقیم

Fig. 12. Activation loss at the cathode / electrolyte interface for the cell with a- converging diverging channels, b- direct channels

نواحی دارای کمترین مقدار است. نکته مهم دیگر این است که چگالی جریان در کاتد به علت ضخامت کم الکتروکاتد نسبت به آند چندین برابر بزرگتر از الکتروکاتد است مثلاً بیشینه چگالی جریان، در کاتد پیل‌های سوختی با کانال‌های مستقیم و همگرا واگرا به ترتیب $3/6$ و $4/4$ برابر بزرگتر از مقدار آندی آن است.

شکل‌های ۱۲-الف و ۱۲-ب افت‌های فعالسازی کاتد را در فصل مشترک الکتروکاتد/ الکترولیت برای هر دو نوع پیل نشان می‌دهد. همان‌طور که در این

۱۱-الف و ۱۱-ب ملاحظه می‌شود، چگالی جریان الکتروکاتد در تمام کانال‌های پیل با کانال‌های مستقیم در فصل مشترک کاتد/ الکترولیت یکنواخت است درحالی‌که چگالی جریان الکتروکاتد در کانال‌های همگرای پیل با کانال‌های همگرا واگرا، مقدار بیشتری نسبت به کانال واگرای مجاور دارد که مربوط به سرعت کمتر جریان هوا در کانال واگرا نسبت به کانال همگرای مجاور است. ذکر این مطلب مهم است که چگالی جریان زیر دندانها مخصوصاً زیر اولین و آخرین دندانها در جهت محور y ، به علت غلظت بسیار پایین اکسیژن در آن



شکل ۱۳. نمودار قطبش و توان پیل برای هر دو نوع هندسه کانال

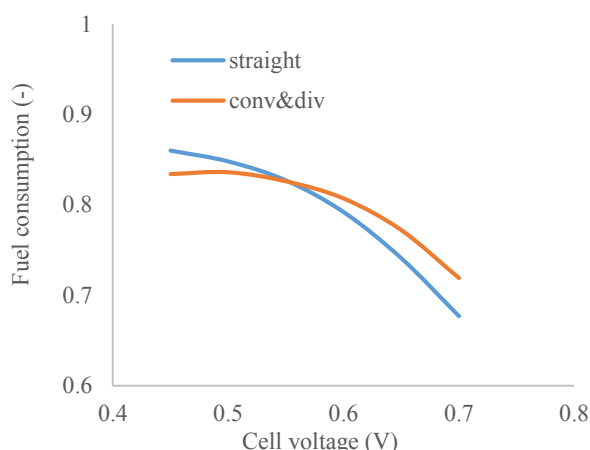
Fig. 13. Polarization and cell power diagrams for both types of channel geometry

و (۱۹) افزایش می‌یابد. برای هر دو هندسه کانال، با کاهش ولتاژ عملکردی، چگالی جریان افزایش می‌یابد. با افزایش چگالی جریان، چگالی توان ابتدا افزایش و سپس به دلیل کاهش ولتاژ پیل، کاهش می‌یابد. همچنین این شکل نشان می‌دهد که پیل سوختی با کانال‌های مستقیم، چگالی جریان و توان بالاتری را نسبت به پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا دارد. این اختلاف در ولتاژهای بالاتر کمتر است. دلیل افزایش چگالی جریان در کانال‌های مستقیم، افزایش ۳۳ درصدی مساحت کانال‌های مستقیم (فصل مشترک کانال‌ها با الکتروود) نسبت به کانال‌های همگرا واگرا و افزایش دبی جرمی سوخت و هوای ورودی به این کانال‌ها می‌باشد. بنابراین پیل با کانال‌های مستقیم عملکرد بهتری نسبت به پیل با کانال‌های همگرا واگرا دارد یعنی همگرایی و واگرایی کانال‌ها تأثیر منفی در چگالی جریان و توان دارد. شکل ۱۴ ضریب مصرف سوخت را به‌ازای ولتاژهای پیل متفاوت برای هر دو نوع پیل با کانال‌های مختلف نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش ولتاژ پیل، ضریب مصرف سوخت برای هر دو نوع پیل کاهش می‌یابد. همچنین این نمودار نشان می‌دهد که این دو منحنی یک نقطه تقاطع دارند، یعنی تا ولتاژ عملکردی ۰/۵۵ ولت، پیل سوختی با کانال‌های مستقیم ضریب مصرف سوخت بالاتری نسبت به پیل با کانال‌های همگرا

شکل‌ها مشخص است، افت فعالسازی در ورودی کانال‌ها به‌علت ولتاژ مدار باز ماکزیمم، بیشینه است از طرف دیگر افت فعالسازی با چگالی جریان طبق معادلات (۱۸) و (۱۹) ارتباط مستقیم دارد. همچنین مشاهده می‌شود که گرادیان افت فعالسازی کاتد در فصل مشترک الکتروود/ الکتروولیت برای پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا شدیدتر از پیل سوختی با کانال‌های مستقیم است به‌علاوه مقدار متوسط افت فعالسازی در این صفحه برای پیل سوختی با کانال‌های مستقیم اندکی بیشتر (۰/۰۵۷ ولت) از پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگراست. ضمناً در هر دو نوع پیل سوختی، ماکزیمم مقدار افت فعالسازی کاتدی زیر متصل‌کننده رخ می‌دهد.

۳-۲- تأثیر ولتاژ عملکردی روی عملکرد پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و مقایسه آن با کانال‌های مستقیم

برای مطالعه تأثیر همگرایی و واگرایی کانال‌ها روی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد، شبیه‌سازی برای شش ولتاژ عملکردی متفاوت (۰/۴۵، ۰/۵، ۰/۵۵، ۰/۶، ۰/۶۵ و ۰/۷ ولت) انجام شد. شکل ۱۳ نمودار پلاریزیشن و چگالی توان برای هر دو هندسه کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم را نشان می‌دهد. کاهش ولتاژ عملکردی به معنی افت ولتاژ بیشتر می‌باشد در نتیجه با افزایش افت ولتاژ، چگالی جریان نیز طبق معادلات (۱۸)



شکل ۱۴. اثر همگرایی و واگرایی کانال‌ها بر مصرف سوخت پیل

Fig. 14. The effect of convergence and divergence of channels on fuel consumption

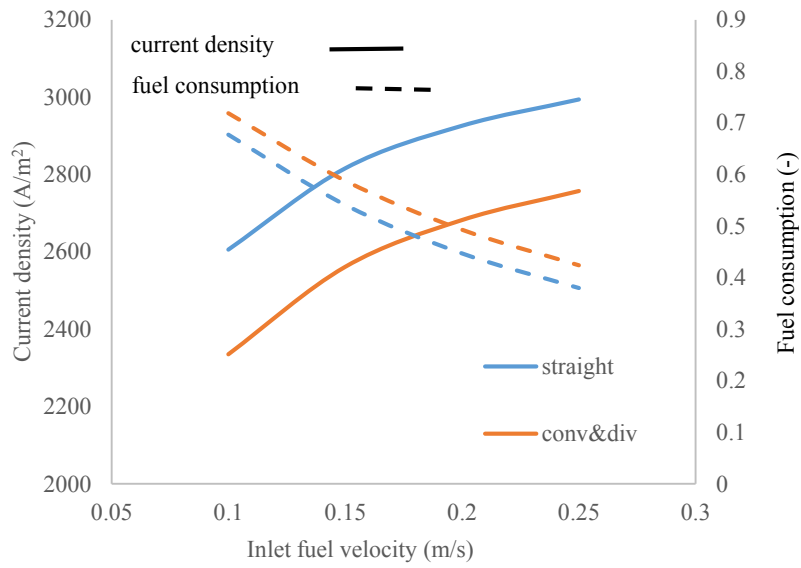
کانال‌های همگرا واگرا به علت کاهش مساحت کانال‌ها نسبت به پیل دارای کانال‌های مستقیم، چگالی جریان پایین‌تری دارد. همچنین افزایش دبی جریان سوخت برای هر دو نوع پیل، تأثیر معکوس روی ضریب مصرف سوخت دارد. در سرعت‌های بالای سوخت ورودی، به علت کاهش نفوذ جرمی در الکترودها، کسر بزرگی از جریان سوخت، کانال گاز را بدون انجام هیچ واکنش الکتروشیمیایی ترک می‌کند در نتیجه ضریب مصرف سوخت کاهش می‌یابد به طوری که با افزایش دو برابری سرعت جریان سوخت از سرعت ۰/۱ متر بر ثانیه، ضریب مصرف سوخت در پیل با کانال‌های مستقیم و همگرا واگرا به ترتیب ۳۴ و ۳۱ درصد کاهش می‌یابد. با توجه به مطالب ذکر شده در قبل، ضریب مصرف سوخت به علت وجود جریان‌های عرضی در کانال‌های همگرا واگرا نسبت به کانال‌های مستقیم بیشتر است. این مسئله به‌وضوح در شکل ۱۵ قابل رویت است.

تأثیر سرعت هوای ورودی روی چگالی جریان و ضریب مصرف سوخت پیل دارای کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم در شکل ۱۶ نشان داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت، در تمام سرعت‌های هوای ورودی، پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، ضریب مصرف سوخت بالاتر و چگالی جریان پایین‌تری نسبت به پیل سوختی با کانال‌های مستقیم دارد. همچنین از نمودارهای شکل ۱۶ مشاهده می‌گردد که نرخ جریان هوای ورودی تأثیر چندانی روی چگالی جریان و ضریب مصرف سوخت پیل‌های سوختی ندارد.

واگرا دارد اما به‌ازای ولتاژهای بالاتر از ۰/۵۵ ولت پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا ضریب مصرف سوخت بالاتری دارد. بنابراین در ولتاژهای عملکردی پایین‌تر از ۰/۵۵ ولت، پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا، ضریب مصرف سوخت، چگالی جریان و چگالی توان کمتری نسبت به پیل سوختی با کانال‌های مستقیم دارد. در ولتاژ عملکردی ۰/۷ ولت، پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا نسبت به پیل سوختی با کانال‌های مستقیم ۶ درصد ضریب مصرف سوخت بالاتر اما ۱۰ درصد چگالی جریان کمتری دارد.

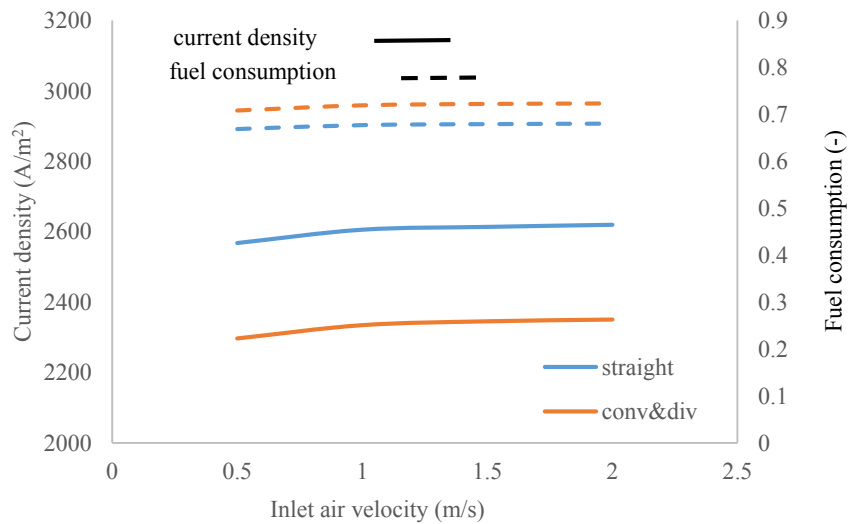
۳-۳- تأثیر سرعت سوخت و هوای ورودی روی عملکرد پیل سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم

شکل ۱۵، تأثیر سرعت سوخت ورودی روی چگالی جریان و ضریب مصرف سوخت پیل‌های سوختی با کانال‌های همگرا واگرا و کانال‌های مستقیم را نشان می‌دهد. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، با افزایش سرعت سوخت ورودی، چگالی جریان افزایش می‌یابد. با افزایش نرخ جریان سوخت برای هر دو هندسه کانال، نرخ واکنش الکتروشیمیایی افزایش یافته و در نتیجه منجر به افزایش چگالی جریان پیل می‌شود به طوری که با افزایش دوبرابری سرعت جریان سوخت از ۰/۱ متر بر ثانیه، چگالی جریان در پیل با کانال‌های مستقیم و همگرا واگرا به ترتیب ۱۲ و ۱۵ درصد افزایش می‌یابد اما همان‌طور که قبلاً بیان شد و در شکل ۱۵ نیز مشخص است، پیل دارای



شکل ۱۵. تأثیر سرعت جریان سوخت روی چگالی جریان و مصرف سوخت برای پیل با کانال‌های همگرا واگرا و مستقیم

Fig. 15. Effect of fuel flow velocity on current density and fuel consumption for cells with converging diverging and direct channels



شکل ۱۶. تأثیر سرعت جریان هوا روی چگالی جریان و مصرف سوخت برای پیل با کانال‌های همگرا واگرا و مستقیم

Fig. 16. Effect of air flow velocity on current density and fuel consumption for cells with converging diverging and direct channels

۴- نتیجه گیری

در این مقاله، مدل سه بعدی ریاضی یک پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای حمایت شده توسط آند با ریفرمینگ داخلی سوخت و جریان‌های هم‌جهت کانال‌های سوخت و هوا ارائه شد. این مدل، معادلات انتقال جرم، مومنتوم، انرژی و هم‌چنین واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی را حل می‌کند. این معادلات بقا با استفاده از نرم‌افزار تجاری کامسول مولتی فیزیکیس ورژن ۵/۴ بر اساس روش المان محدود حل شده‌است. این شبیه‌سازی با داده‌های تجربی موسسه فناوری و مهندسی مواد نینگبو اعتبارسنجی شده‌است. نتایج حل عددی برای ارزیابی عملکرد دو پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر و کانال‌های مستقیم معمولی ارائه شده‌است. نتیجه این شبیه‌سازی‌ها به صورت زیر خلاصه می‌شود:

- اختلاف فشار بین کانال‌های همگرا و اگر سبب تولید جریان عرضی در کانال‌ها و دندان‌ها برای توزیع بهتر گونه‌های واکنش‌دهنده در پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر می‌گردد.

- توزیع کسر مولی اکسیژن در کانال‌های پیل سوختی با کانال‌های مستقیم یکنواخت است درحالی‌که در کانال‌های واگرا نسبت به کانال‌های همگرای پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر به میزان ۷ درصد اکسیژن بیشتری مصرف می‌شود.

- وجود سرعت عرضی در کانال‌های پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر باعث می‌شود مصرف سوخت در این پیل نسبت به پیل با کانال‌های مستقیم معمولی ۶ درصد بیشتر شود اما به دلیل کاهش مساحت کانال‌های این پیل نسبت به پیل معمولی، چگالی جریان در این پیل ۱۰ درصد کمتر است.

- افزایش سرعت سوخت ورودی باعث افزایش چگالی جریان و کاهش ضریب مصرف سوخت در هر دو نوع پیل سوختی می‌شود به طوری‌که با افزایش دو برابری سرعت سوخت ورودی، چگالی جریان در پیل با کانال‌های مستقیم و همگرا و اگر به ترتیب ۱۲ و ۱۵ درصد افزایش اما ضریب مصرف سوخت در این پیل‌ها به ترتیب ۳۴ و ۳۱ درصد کاهش می‌یابد. هم‌چنین، سرعت هوای ورودی، تأثیر چندانی روی چگالی جریان و ضریب مصرف سوخت پیل‌های سوختی ندارد.

- به‌ازای ولتاژهای بالاتر از ۰/۵۵ ولت، پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر به دلیل وجود جریان‌های عرضی، ضریب مصرف سوخت بالاتری نسبت به پیل سوختی با کانال‌های مستقیم دارد. افزایش ضریب مصرف سوخت در پیل سوختی با کانال‌های همگرا و اگر سبب بهبود عملکرد این نوع پیل نسبت به پیل با کانال‌های مستقیم معمولی در ولتاژهای عملکردی بالاتر از

۰/۵۵ ولت می‌گردد.

۵- فهرست علائم

علائم انگلیسی	
AV_e	نسبت سطح فعال الکتروشیمیایی به حجم، $m^2 \cdot m^{-3}$
C_{H_2}	غلظت هیدروژن، $mol \cdot m^{-3}$
$C_{H_2,ref}$	غلظت هیدروژن مرجع، $mol \cdot m^{-3}$
C_{O_2}	غلظت اکسیژن، $mol \cdot m^{-3}$
$C_{O_2,ref}$	غلظت اکسیژن مرجع، $mol \cdot m^{-3}$
C	مصرف سوخت
C_p	گرمای ویژه در فشار ثابت، $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
D_{ij}	ضریب نفوذ مولکولی، $m^2 \cdot s^{-1}$
$D_{k,ij}$	ضریب نفوذ نادنس، $m^2 \cdot s^{-1}$
$D_{eff,ij}$	ضریب نفوذ مؤثر، $m^2 \cdot s^{-1}$
E	ولتاژ برگشت پذیر قبل از در نظر گرفتن فشار جزئی، V
E^{OCV}	ولتاژ ایده‌آل بعد از در نظر گرفتن فشار جزئی، V
F	بردار نیروی حجمی، $N \cdot m^{-3}$
F	ثابت فارادی، $96485 / 3 C \cdot mol^{-1}$
ΔH	تغییر آنتالپی واکنش، $J \cdot mol^{-1}$
i	چگالی جریان، $A \cdot m^{-2}$
$i_{o,ref}^{H_2}$	چگالی جریان تبدیلی مرجع اکسایش هیدروژن، $A \cdot m^{-2}$
$i_{o,ref}^{O_2}$	چگالی جریان تبدیلی مرجع کاهش اکسیژن، $A \cdot m^{-2}$
k_d	نفوذ مرجع، $m^2 \cdot s^{-1}$
k	هدایت حرارتی، $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
M_j	وزن مولکولی گونه j ، $kg \cdot mol^{-1}$
n_e	تعداد الکترون‌های منتقل شده در هر واکنش
P	فشار، Pa or bar
Q	چشمه یا چاه حرارتی، $W \cdot m^{-2}$
Q_{br}	چشمه یا چاه جرمی، $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
\bar{r}	شعاع سوراخ، m
r	نرخ واکنش، $mol \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
R	ثابت جهانی گاز، $8 / 314 J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
ΔS_r	تغییر آنتروپی، $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
T	دما، K
u	سرعت متوسط جرمی، $m \cdot s^{-1}$
V_{cell}	ولتاژ پیل، V
V	کسر حجمی
X	کسر مولی
x, y, z	مختصات کارتزین

- of Interconnect Fuel/Oxidant Channel Flow Cross Section, Journal of Thermal Science and Engineering Applications, 7 (2015) 041003-12.
- [3] M. Borji, K. Atashkari, N. Nariman-zadeh, M. Masoumpour, Modeling, parametric analysis and optimization of an anode supported planar solid oxide fuel cell, iMechE, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 229 (2015) 3125-40.
- [4] M. Borji, K. Atashkari, S. Ghorbani, N. Nariman-zadeh, Model-based evaluation of an integrated autothermal biomass gasification and solid oxide fuel cell combined heat and power system, iMechE, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 23 (2017) 672-94.
- [5] M. Borji, K. Atashkari, S. Ghorbani, N. Nariman-zadeh, Parametric analysis and Pareto optimization of an integrated autothermal biomass gasification, solid oxide fuel cell and micro gas turbine CHP system, International Journal of Hydrogen Energy, 40 (2015) 14202-23.
- [6] T.F. Petersen, N. Houbak, B. Elmegaard, A ZeroDimensional Model of a 2nd Generation Planar SOFC Using Calibrated Parameters, International Journal of Thermodynamics, 9 (2006) 147-59.
- [7] P. Aguiar, C.S. Adjiman, N.P. Brandon, Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model based steady-state performance, Journal of Power Sources, 138 (2004) 120-36.
- [8] P. Aguiar, C.S. Adjiman, N.P. Brandon, Anode-supported intermediate temperature direct internal reforming solid oxide fuel cell. I: model based dynamic performance and control, Journal of Power Sources, 147 (2005) 136-47.
- [9] X. Li, I. Sabir, Review of bipolar plates in PEM fuel cells: Flow-field designs, International Journal of Hydrogen Energy, 30 (2005) 359-71.
- [10] H. Heidary, M. J. Kermani, Enhancement of heat exchange in a wavy channel linked to a porous domain; a possible duct geometry for fuel cells, International Communications in Heat and Mass Transfer, 39 (2012) 112-20.
- [11] H. Heidary, A. Abbassi, M. J. Kermani, Enhanced heat

علائم یونانی

ضریب انتقال بار	α
مرتبه واکنش برای اکسایش هیدروژن	γH_2
مرتبه واکنش برای کاهش اکسیژن	γO_2
ضریب تخلخل	ϵ
افت پتانسیل، V	η
پتانسیل، V	ϕ
قابلیت نفوذ، m^2	κ
ویسکوزیته دینامیکی، pa.s	μ
حجم انتشار مولکولی، $cm^3.mol^{-1}$	V
چگالی، $kg.m^{-3}$	ρ
هدایت الکتریکی / یونی، $\Omega^{-1}.m^{-1}$	σ
پیچش	τ
کسر جرمی	ω

زیرنویس‌ها

اولیه	\cdot
آند	a
فعالسازی	act
کاتد	c
غلظتی	$conc$
مؤثر	eff
معادل	eq
فاز گازی	g
مولکول i (فاز گازی)	i
مولکول j (فاز گازی)	j
نفوذ ناسن	k
واکنش تبدیل متان با بخار	MSR
ماده الکترولیت	l
اهمی	ohm
ماده الکتروود، فاز جامد	s
نهایی	tot
واکنش جابجایی آب-گاز	$WGSR$

منابع

- [1] J. M. Park, D. Y. Dae Yun Kim, Baek J.D. Baek, Y-J. Yoon, P-Ch. Su, S.H. Lee, Effect of Electrolyte Thickness on Electrochemical Reactions and Thermo-Fluidic Characteristics inside a SOFC Unit Cell, Energies, 11 (2018) 1-15.
- [2] R.M. Manglik, Y.N. Magar, Heat and Mass Transfer in Planar Anode-Supported Solid Oxide Fuel Cells: Effects

- interconnect designs, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 125 (2018) 506–14.
- [22] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén, SOFC modeling considering electrochemical reactions at the active three phase boundaries, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55 (2012) 773–88.
- [23] K. Takino, Y. Tachikawa, K. Mori, S.M. Lyth, Y. Shiratori, S. Taniguchi, K. Sasaki, Simulation of SOFC performance using a modified exchange current density for pre-reformed methane-based fuels, *International Journal of Hydrogen Energy*, 45 (2020) 6912-25.
- [24] J. Shi, X. Xue, CFD analysis of a novel symmetrical planar SOFC design with micro-flow channels, *Chemical Engineering Journal*, 163 (2010) 119–25.
- [25] M.M. Hussain, X. Li, I. Dincer, Mathematical modeling of planar solid oxide fuel cells, *Journal of Power Sources*, 161 (2006) 1012-22.
- [26] M. Andersson, H. Paradis, J. Yuan, B. Sundén, Three dimensional modeling of an solid oxide fuel cell coupling charge transfer phenomena with transport processes and heat generation, *J Electrochimica Acta*, 109 (2013) 881-93.
- [27] Y. Wang, R. Zhan, Y. Qin, G. Zhang, Q. Du, K. Jiao, Three-dimensional modeling of pressure effect on operating characteristics and performance of solid oxide fuel cell, *International journal of hydrogen energy*, 43 (2018) 20059-76.
- [28] A.N. Celik, Three-dimensional multiphysics model of a planar solid oxide fuel cell using computational fluid dynamics approach, *International journal of hydrogen energy*, 43 (2018) 19730-48.
- [29] T. Choudhary, Sanjay, Computational analysis of IR-SOFC: Thermodynamic, electrochemical process and flow configuration dependency, *International Journal of Hydrogen Energy*, 41 (2016) 10212-27.
- [30] B.A. Haberman, J.B. Young, Three-dimensional simulation of chemically reacting gas flows in the porous support structure of an integrated-planar solid oxide fuel cell, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47 (2004) 3617–29.
- transfer with corrugated flow channel in anode side of direct methanol fuel cells, *Energy Conversion and Management*, 75 (2013) 748-60.
- [12] H. Heidary, M. J. Kermani, Performance enhancement of fuel cells using bipolar plate duct indentations, *International Journal of Hydrogen Energy*, 38 (2013) 5485-96.
- [13] H. Liu, P. Li, K. Wang, Optimization of PEM fuel cell flow channel dimensions—Mathematic modeling analysis and experimental verification, *International Journal of Hydrogen Energy*, 38 (2013) 9835-46.
- [14] N. Zehtabiyani-Rezaie, A. Arefian, M.J. Kermani, A. Karimi Noghabi, M. Abdollahzadeh, Effect of Flow Field with Converging and Diverging Channels on PEM Fuel Cell Performance, *Energy Conversion and Management*, 152 (2017) 31-44.
- [15] Z. Lin, J.W. Stevenson, M.A. Khaleel, The effect of interconnect rib size on the fuel cell concentration polarization in planar SOFCs, *Journal of Power Sources*, 117 (2003) 92-97.
- [16] Y.N. Magar, R.M. Manglik, Modeling of Convective Heat and Mass Transfer Characteristics of Anode-Supported Planar Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of Fuel Cell Science and Technology*, 4 (2007) 185-93.
- [17] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén, SOFC Cell Design Optimization Using the Finite Element Method Based CFD Approach, *J FUEL CELLS*, 14 (2014) 177-88.
- [18] D. Bhattacharya, J. Mukhopadhyay, N. Biswas, R. Nath Basu, P. Kumar Das, Performance evaluation of different bipolar plate designs of 3D planar anode-supported SOFCs, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 123 (2018) 382-96.
- [19] I. Khazaei, A. Rava, Numerical simulation of the performance of solid oxide fuel cell with different flow channel geometries, *J Energy*, 119 (2017) 235-44.
- [20] W. Kong, Zh. Han, S. Lu, X. Gao, X. Wang, A novel interconnector design of SOFC. *Int. J. Hydrogen Energy*, 45 (2020) 20329-38.
- [21] Sh. Zeng, X. Zhang, J S. Chen, T. Li, M. Andersson, Modeling of solid oxide fuel cells with optimized

- 15521-30.
- [37] B. Todd, J.B. Young, Thermodynamic and transport properties of gases for use in solid oxide fuel cell modeling, *Journal of Power Sources*, 110 (2002) 186–200.
- [38] S. Lee, H. Kim, K.J. Yoon, J-W. Son, J-H. Lee, B-K. Kim, W. Choi, J. Hong, The effect of fuel utilization on heat and mass transfer within solid oxide fuel cells examined by three-dimensional numerical simulations, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 97 (2016) 77-93.
- [39] A. Pramuanjaroenkij, S. Kakac, X. Zhou, Mathematical analysis of planar solid oxide fuel cells, *International journal of hydrogen energy*, 33 (2008) 2547 –65.
- [40] M. Andersson, J. Yuan, B. Sundén, T Sh. Li, WG. Wang, Modeling validation and simulation of an anode supported SOFC including mass and heat transport, fluid flow and chemical reactions. *Proceedings of ASME Fuel Cell Science 2011, Engineering and Technology Conference FuelCell*, 2011.
- [31] B. Lin, Y. Shi, M. Ni, N. Cai, Numerical investigation on impacts on fuel velocity distribution nonuniformity among solid oxide fuel cell unit channels, *International Journal of Hydrogen Energy*, 40 (2015) 3035-47.
- [32] B E. Poling, J M. Prausnitz, J P. O’Connell. *The properties of gases and liquid*, 5th ed, McGraw-Hill companies Inc, (2001).
- [33] A. Dutta, Multicomponent gas diffusion and adsorption in coals for enhanced methane recovery, Ms.c. Thesis, Department of energy resources engineering, Stanford University, (2009).
- [34] M. Ni, Modeling and parametric simulations of solid oxide fuel cells with methane carbon dioxide reforming, *Energy Conversion and Management*, 70 (2013)116-29.
- [35] S. Kakaç, A. Pramuanjaroenkij, XY. Zhou, A review of numerical modeling of solid oxide fuel cells, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007) 761 – 86.
- [36] M. Ebadi Chelmehsara, J. Mahmoudimehr, Techno-economic comparison of anode-supported, cathode-supported, and electrolyte-supported SOFCs, *International journal of hydrogen energy*, 43 (2018)

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

H. Hesami, M. Borji, J. Rezapour, *Three-Dimensional Numerical Study of Solid Oxide Fuel Cell Performance with Converging Diverging Flow Field*, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 54(3) (2022) 589-614.

DOI: 10.22060/mej.2021.20214.7193

