نشریه علمی- پژوهشی سوخت و احتراق
سال دوم، شماره اول، بهار و تابستان ۱۳۸۸

مدل‌سازی پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای برای سیستم‌های ترکیبی گرما و الکتریسته

پژمان کاظم پور* و فتح الله امی**
دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده فنی و مهندسی، بخش مهندسی مکانیک
(دریافت: ۱۳۸۷/۱۰/۱۴، پذیرش: ۱۳۸۸/۴/۲۷)

در این مقاله مدل تفصیلی از پیل سوختی اکسید جامد صفحه‌ای (SOFC) ارایه می‌شود که به طور ویژه برای ارزیابی عملکرد این پیل سوختی در سیستم‌های ترکیبی گرما و الکتریسته توسعه یافته است. مدل توسعه یافته شامل تحلیل جرمی، ممنتوم، گرمایی و الکتروشیمیایی به همراه مدل‌های سینتیک واکنش‌های هیدروکربن است. مدل الکتروشیمیایی ارزیابی کامل هر سه تلفات اهمی، فعال‌سازی و غلظت را شامل می‌شود. به منظور افزایش دقت مدل؛ واکنش‌های تبدیل متان و شیفت آب- گاز، پنج لایه دمایی، مدل انتقال گرمای تشعشعی و ویژگی‌های مواد متغیر با دما در مدل به کار گرفته شده است. مدل بر اساس مقادیر عددی و تجربی موجود برای یک پیل سوختی دما بالا با تبدیل داخلی سوخت معتبرسازی شده است که نشان از توانایی و دقت بالای مدل برای پیش‌گویی عملکرد این نوع پیل سوختی را دارد. سرانجام، به منظور ارزیابی تاثیر متغیرهای اساسی، تحلیل حساسیت بر روی متغیرهای فاکتور مصرف سوخت و نرخ هوای اضافی انجام شده است.

واژگان کلیدی: پیل سوختی اکسید جامد، حجم کنترل، مدل‌سازی سیستم، تلفات ولتاژ

مقدمه

استفاده از پیل سوختی اکسید جامد (SOFC) در چرخه‌های ترکیبی گرما و الکتریسته (CHP) یک روش بسیار پربازده و پاک برای تولید الکتریسته بوده است و انتظار می‌رود در آینده نقش بسیار مهمی در تولید انرژی جهان به ویژه در کاربردهای خانگی، صنعتی و نیروگاهی داشته باشد. سرمایه‌گذاری و تحقیق بر روی این پیل سوختی در طول ۲۰ سال گذشته نشان از اهمیت این موضوع دارد، به طوری که هم اکنون حدود ۳۰ کشور، تحقیقات بنیادی و کاربردی را در این زمینه شروع کرده‌اند[۱]. بررسی‌های حاضر نشان می‌دهد که به منظور توسعه‌ی هرچه بیش‌تر سیستم‌های پیل سوختی، تحقیقات آتی در زمینه توسعه‌ی مواد، طراحی سلول و استک (Stack)، شرایط کارکرد و کاهش هزینه از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

با توجه به توضیحات بالا، تا کنون مدل‌های مختلفی برای بررسی و شبیه سازی پیل سوختی SOFC ارایه شده است که با توجه به پیچیدگی‌های موجود، بسیاری از آن‌ها از مدل‌های جعبه سیاه (Black box model) برای مدل‌سازی استفاده کرده‌اند[۲]. مدل‌سازی در این روش بدین صورت است که کل استک به صورت یک حجم کنترل در نظر گرفته شده است و قوانین بقای مکانیکی و الکتروشیمیایی برای آن نوشته می‌شود. خروجی این مدل‌ها نمی‌تواند هیچ‌گونه پیش‌گویی از متغیرهای داخلی استک از جمله توزیع دما، جریان و کسر مولی گازها داشته باشد.

مدل‌های تفصیلی به کار رفته در شبیه سازی SOFC دارای مشخصات مختلفی بوده و رهیافت‌های به کار رفته در آن‌ها بسیار متنوع است. درتعدادی از این تحقیقات تنها مدل‌سازی الکتروشیمیایی با در نظر گرفتن یک دمای واحد برای کل استک انجام شده است[۳]. در نمونه‌هایی از تحقیقات دیگر لایه‌های مختلف دما از یک، دو، سه[۴و۵] چهار[۶و۷] و پنج لایه[۸] استفاده شده است. مفهوم لایه دمایی در قسمت‌های بعد توضیح داده می‌شود. واکنش‌های تبدیل داخلی سوخت و سینتیک

* دکترای مهندسی مکانیک (ایمیل: p_kazempoor@modares.ac.ir)
** استادیار- نویسنده مخاطب (ایمیل: fommi@modares.ac.ir)

Archive of SID
www.SID.ir

واکنش آن نیز از جمله مواردی است که در بسیاری از مدل‌ها از آن صرف‌نظر شده است. به عبارتی قابلیت استفاده از ترکیبات مختلف گازی به عنوان سوخت در این مدل‌ها وجود ندارد[۲]. از جمله موارد اختلاف دیگر در مدل‌ها، تعیین خصوصیات مواد است که در بسیاری از آن‌ها از خواص ثابت برای مدل‌سازی استفاده شده که با توجه به دمای بالای عملکرد SOFC و تغییرات زیاد دما، فرض مناسبی نیست[۹]. تشعشع بین اجزا و محاسبه افت فشار در کانال‌ها نیز از جمله اختلاف‌های موجود در بین مدل‌های ارایه شده است[۱۰].

با توجه به توضیحات بالا هدف این تحقیق ارایه یک مدل تفصیلی اما سریع از پیل سوختی SOFC برای تحلیل سیستم‌هایی است که شامل استک این پیل سوختی‌اند. سیستم‌های اشاره شده با توجه به قابلیت‌های SOFC می‌توانند یک سیستم متمرکز و یا نامتمرکز تولید الکتریسته یا سیستم ترکیبی گرما و الکتریسته در یک منزل مسکونی یا تجاری باشند. بدین منظور معادلات اساسی بقا برای یک سلول به همراه معادلات الکتروشیمیایی و فرایند تبدیل داخلی سوخت به صورت عددی حل شده است. مدل‌سازی کامل فرایندهای الکتروشیمیایی، در نظر گرفتن فرایند تبدیل داخلی مستقیم سوخت (SR) و واکنش شیفت آب- گاز (WGS)، در نظر گرفتن تشعشع بین اجزا، ۵ لایه دمایی، شبیه سازی افت فشار و اصلاح آن برای استک و تعیین دقیق خواص مواد از خصوصیات بارز این مدل است که آن را از مدل‌های دیگر متمایز می‌کند.

اساس کار SOFC

پیل‌های سوختی اکسید جامد به منظور کاهش قیمت و بهینه‌سازی عملکرد پیل‌های‌سوختی دیگر به ویژه پیل سوختی کربنات مذاب پیشنهاد شده‌اند. الکترولیت به کار رفته در این نوع پیل‌ها از جنس سرامیک است. با توجه به جامد بودن تمامی اجزا، در شکل دهی پیل محدودیتی وجود ندارد و می‌توانند بر اساس نوع کاربرد طراحی شوند. دمای عملکرد این پیل‌ها حدود ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد است تا امکان رسانش یونی وجود داشته باشد. از این رو جایگزین مناسبی برای انواع دیگر پیل‌های سوختی‌اند که تحمل دمای بالا را ندارند[۱]. هرچند دمای بالای عملکرد باعث افزایش سرعت واکنش‌ها بدون دخالت فلزات بی‌اثر می‌شود، اما در انتخاب مواد به کار رفته در ساختمان آن محدودیت ایجاد می‌کند. با توجه به دمای بالای پیل، نیازی به مبدل سوخت نیست، زیرا امکان تبدیل داخلی سوخت در داخل سلول‌ها وجود دارد. به علت دمای بالای عملکرد، گرمای خروجی از سیستم در سیکل‌های ترکیبی قابل استفاده است که بدین ترتیب بازدهی سیستم افزایش می‌یابد به طوری که مقادیر بازده الکتریکی بالای۷۰ درصد (بر اساس ارزش گرمایی پایین یا LHV) برای سیستم‌های ترکیبی SOFC و میکرو توربین گازی پیشنهاد شده است[۱۱].

در شکل (۱) نمونه‌ای از یک سلول SOFC نشان داده شده است. این سلول از دو الکترود متخلخل تشکیل شده است که توسط یک الکترولیت جامد از هم جدا شده‌اند. در ناحیه سه فازی بین کاتد، الکترولیت و گاز اکسیژن، اکسیژن یک الکترون دریافت می‌کند و یون‌های اکسیژن از درون الکترولیت گذر می‌کنند. سوخت نیز از سمت آند وارد می‌شود که می‌تواند یک هیدروکربن یا هیدروژن خالص باشد. به دلیل دمای بالای پیل سوختی، هیدروکربن‌ها در طول کانال‌های عبور سوخت تبدیل به هیدروژن و CO می‌شوند. CO می‌تواند در واکنش الکتروشیمیایی شرکت و یا توسط واکنش شیفت به هیدروژن و CO_2 تبدیل شود. CO و H_2 در درون آند متخلخل و سطح الکترولیت نفوذ کرده و با یون‌های اکسیژن واکنش می‌دهند. الکترون‌ها نیز توسط مدار خارجی از آند به کاتد با ایجاد جریان الکتریکی، جریان می‌یابند. در شکل (۱) تمامی فرایندهای اشاره شده نشان داده شده است.

شرح مدل، فرضیات

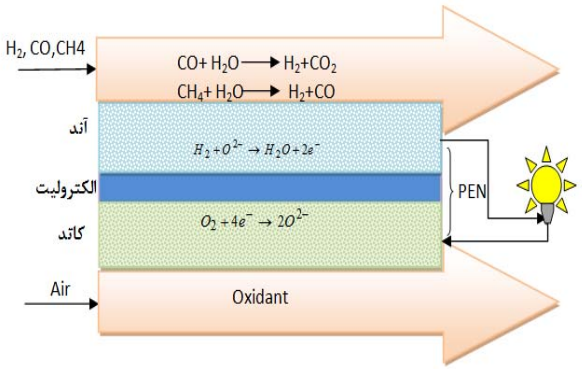
مدل‌سازی پیل‌های سوختی SOFC می‌تواند در سطوح مختلفی از قبیل سطح نانو (مدل‌سازی الکتروشیمیایی، بررسی تبادل یون، تاثیر کاتالیست)، سطح میکرو (برای مدل‌سازی الکترود)، سطح سانتی‌متر و متر (برای مدل‌سازی سلول و استک) و سطح سیستم انجام شود. با توجه به این گستردگی، به دست آوردن مدلی که بتواند تمامی مقیاس‌ها را شامل شود، از دید نظری و

Archive of SID

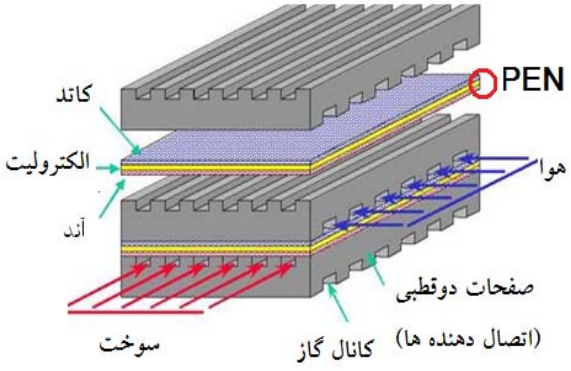
www.SID.ir

عملی تقریبا ناممکن است[۴]. به طور مثال در شبیه‌سازی استک SOFC از روش عددی عملا نمی‌توان شبکه‌ای تولید کرد که از مقیاس نانو تا سانتی‌متر و متر را شامل شود.

همان‌طور که اشاره شد، هدف اصلی این مقاله به دست آوردن یک مدل تفصیلی و دقیق از پیل سوختی SOFC برای تحلیل استک این پیل سوختی در کنار سایر اجزای سیستم از قبیل پمپ، مبدل گرمایی، اجکتور و غیره است. در شکل (۲) قسمتی از استک مورد بررسی در این تحقیق که یک پیل سوختی SOFC با ساختار صفحه‌ای (Planar) است نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دو الکترود متخلخل (آند و کاتد) توسط یک لایه الکترولیت جامد چگال جدا شده و سلول‌ها توسط صفحات دوقطبی مجزا شده‌اند. در حقیقت این صفحات اتصال الکتریکی بین سلول‌ها را برقرار کرده‌اند.



شکل ۱- مفاهیم اصلی پیل سوختی SOFC



شکل ۲- پیل سوختی اکسید جامد با ساختار صفحه‌ای

دلیل انتخاب ساختار صفحه‌ای آن است که در دامنه توان مورد بررسی در این تحقیق (۱ تا ۲۰ کیلووات)، این پیل سوختی کارایی خوبی دارد[۶،۸و۱۲]. طراحی گازها در یک ساختار جریان موازی، مخالف و متقاطع وارد پیل می‌شوند که البته نتایج نشان می‌دهند که مقادیر چگالی جریان و ولتاژ خروجی از ساختار متقاطع بین دو جریان موازی و مخالف قرار دارد و در بررسی سیستم تنها بررسی دو ساختار موازی و مخالف کافی است.

خلاصه‌ای از معادلات و کمیت‌های مورد نیاز برای شبیه سازی در زیر اشاره شده است و در قسمت‌های بعد این معادلات و روش‌های مربوط به حل آن‌ها با جزییات بیشتر ارایه می‌شود.

۱- بالانس بار یا پتانسیل برای قسمت جامد ۲- هیدرودینامیک فاز گازی در کانال‌های سوخت و هوا ۳- بالانس جرم برای مولفه‌ها در کانال های سوخت و هوا ۴- به عنوان بخشی از بالانس مواد، نرخ مربوط به واکنش شیمیایی و الکتروشیمیایی اتفاق افتاده در الکترود و سطح تداخل الکترود-الکترولیت ۵- بالانس انرژی برای فازهای جامد و گازی شامل هدایت، جابه‌جایی، تشعشع و گرمای تولید شده توسط واکنش الکتروشیمیایی ۶- شرایط مرزی شامل ترکیبات ورودی، شارهای جرمی و دمای سوخت و هوا در ورودی به استک و تلفات گرمایی به چندراهه بیرونی یا محفظه توسط تشعشع ۷- مقادیر و اطلاعات مربوط به سینتیک واکنش‌ها، ویژگی‌های ترمودینامیکی و فیزیکی اجزای جامد و هم‌چنین مشخص کردن ویژگی‌های ترمودینامیکی گازهای واکنش دهنده بر حسب تابعی از دما.

با توجه به ماهیت غیر خطی شدید معادلات اشاره شده، لازم است ساده‌سازی‌هایی برای کاهش پیچیدگی در نظر گرفته شود. خلاصه‌ای از فرضیات به کار رفته در این تحقیق عبارت‌اند از[۵،۶،۸،۱۰و۱۳]:

۱- در نظر گرفتن مسیر یک بعدی در طول کانال‌های هوا و سوخت

۲- توزیع یکنواخت گازهای ورودی بین هر سلول از استک و بین کانال‌های هر سلول

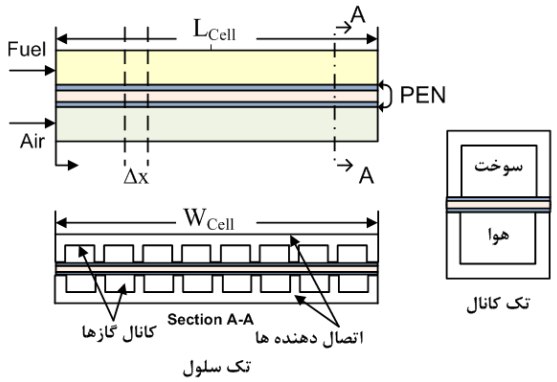
۳- هر یک از کانال‌های گاز در یک سلول واحد به عنوان CSTR (کاملا مخلوط شده در هر المان محاسباتی) در نظر گرفته شده‌اند که بر این اساس تمامی المان‌های محاسباتی به عنوان یک مبدل جریان قالبی (Plug Flow) در نظر گرفته می‌شوند.

Archive of SID
www.SID.ir

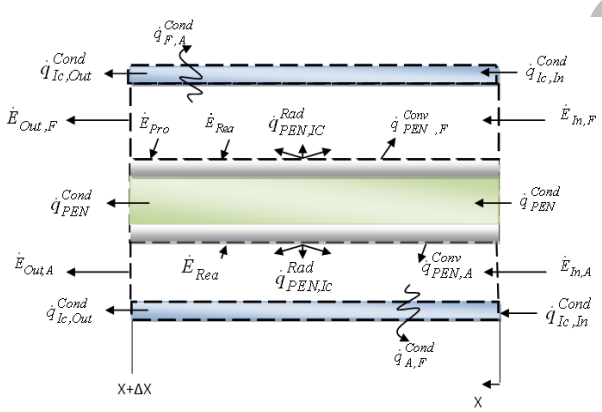
۴- با توجه به گرادیان دمای بسیار کم بین لایه‌های مختلف PEN (حدود ۱ درجه)، دمای یکسان برای قسمت جامد سلول که شامل آند، الکترولیت و کاتد است در نظر گرفته شده است.
۵- فرض مرزهای بی‌دررو یا مقدار ثابت تلفات در ورودی و خروجی سلول (سمت راست و چپ میدان محاسباتی)
۶- سطوح هم پتانسیل برای الکترودها و جمع‌کننده‌های جریان.
۷- پیل سوختی با ۱۰۰ درصد بازده جریان عمل می‌کند (بدون هیچ‌گونه نشت گازهای واکنش‌دهنده یا واکنش‌های جانبی)
۸- سطح زیر اتصال دهنده‌ها ۱۰۰درصد الکترواکیتو در نظر گرفته شده است.
۹- محاسبات در حالت جریان دایم انجام می‌شود.

با توجه به دمای عملکرد بالای SOFC، ترکیب مختلفی از گازها می‌تواند به عنوان سوخت ورودی انتخاب شود که بدین منظور مدل به صورتی طراحی شده است که هر گونه ترکیب دلخواه از H_2، CO، CO_2، H_2O و CH_4 N_2 می‌تواند به عنوان سوخت ورودی در نظر گرفته شود.

متغیرهای ورودی به مدل عبارت‌اند از: ابعاد هندسی کانال‌ها، مشخصات ترموفیزیکی و الکتریکی PEN، دما و ترکیب ورودی سوخت و هوا، دبی سوخت یا فاکتور مصرف سوخت (Fuel utilization) و دبی هوا یا نرخ هوای اضافی(Air excess ratio). مهم‌ترین متغیرهای خروجی از سیستم نیز توزیع ولتاژ، توان خروجی از سلول، بازده سلول، شکل مقطع (Profile) دما در طول سلول و ترکیب گازها در داخل کانال‌هاست. نمونه‌ای از متغیرهای ورودی به مدل در جدول (۱) نشان داده شده است. در شکل (۳) نیز المان‌های محاسباتی به کار رفته در این تحقیق نشان داده شده است. در این شکل Δx، L_{Cell} و W_{Cell} به ترتیب طول المان‌های محاسباتی، طول سلول و عرض سلول‌اند.



شکل ۳- المان‌های در نظر گرفته شده



شکل ۴- بالانس انرژی برای یک المان در حجم کنترل با در نظر گرفتن ۵ لایه دمایی

مدل‌سازی الکتروشیمیایی

یکی از مهم‌ترین جنبه‌های طراحی در پیل سوختی، توزیع ولتاژ و جریان در سلول است. توزیع این کمیات وابسته به توزیع دمای حاصل از موازنه انرژی و هم‌چنین واکنش‌های الکتروشیمیایی در الکترود است. از طرف دیگر، فرایندهای الکتروشیمیایی نیز تولیدکننده توان الکتریکی و گرما هستند که باید از تولید گرمای اضافی و بیش از اندازه به منظور جلوگیری از تنش‌های گرمایی و پایداری سازه پیل سوختی جلوگیری کرد.

بیش‌ترین ولتاژ نظری تولید شده توسط پیل سوختی در صورتی به دست می‌آید که هیچ جریانی تولید نشود. بنابراین به آن ولتاژ مدار باز گفته می‌شود. ولتاژ مدار باز توسط رابطه‌ی نرنست به صورت زیر محاسبه می‌شود[۱۴]:

$$V_{Nernst} = E^0 + \frac{RT_{PEN}}{2F}\ln\left(\frac{X^b_{H2}.X^{b\ 0.5}_{O2}}{X^b_{H2O}}\right) + \frac{RT_{PEN}}{4F}\ln\left(\frac{P_C}{P_0}\right) \qquad (۱)$$

www.SID.ir

در این رابطه، E_0 پتانسیل نرنست، R ثابت گازها، T_{PEN} دمای قسمت جامد شامل الکترولیت، آند و کاتد، F ثابت فارادی، X کسر مولی، P_C فشار کاتد و P_0 فشار در شرایط استاندارد است. در عمل، هنگام عبور جریان، پیل سوختی در ولتاژی پایین‌تر از پتانسیل نرنست کار می‌کند که دلیل آن نیز بازگشت ناپذیری‌های مرتبط با انتقال بار (فعال‌سازی)، انتقال جرم (غلظت) و مقاومت اهمی مربوط به عبور جریان از داخل مواد با هدایت محدود است. تلفات فعال‌سازی و غلظت در هر دو الکترود اتفاق افتاده و تلفات اهمی ناشی از هدایت یونی و الکترونی جریان در داخل مولفه‌های سلول است. ولتاژ سلول می‌تواند با بالانس پتانسیل(با کاهش موارد اشاره شده از رابطه نرنست) به صورت زیر نوشته شود[۳]:

$$U = V_{Nernst} - (\eta_{ohm} + \eta_{act} + \eta_{diff}) \qquad (۲)$$

در رابطه‌ی بالا η تلفات ولتاژ مرتبط با فعال‌سازی (act)، غلظت ($diff$) و مقاومت یونی و الکتریکی اجزا (ohm) است. تلفات فعال‌سازی در تمامی چگالی‌های جریان اتفاق می‌افتد ولی مقدار آن در چگالی جریان پایین برجسته‌تر بوده و با کندی سینتیک واکنش در الکترودها در ناحیه سه فازی واکنش ارتباط دارد (می‌توان از این تلفات به عنوان مقاومت در مقابل شروع واکنش‌ها در الکترودها نام برد). عملکرد دما بالای SOFC باعث افزایش سینتیک واکنش شیمیایی در آند (متشکل از نیکل و سرمت) شده و در نتیجه تلفات فعال‌سازی می‌تواند در مقایسه با سایر پیل‌های دما پایین کم باشد.

تلفات اهمی که ناشی از مقاومت در مقابل عبور بار در داخل اجزای مختلف سلول است، رابطه‌ی خطی با جریان دارد. تلفات اهمی ناشی از هدایت الکترونیکی جریان در الکترودها و اتصال دهنده‌ها (معمولا با مقدار کوچک) و در عرض محل اتصال و تداخل اجزا (با مقدار بزرگ) است. تلفات اهمی هم‌چنین می‌تواند ناشی از مقاومت در مقابل هدایت یونی آنیون‌های اکسیژن در داخل الکترولیت جامد باشد. عمده‌ی تلفات اهمی (۸۰ درصد از کل) مربوط به هدایت بار (الکترونیک و یونی) در داخل اجزای سلول است. هدایت یونی مواد به کار رفته در SOFC به صورت نمایی با افزایش دمای سلول افزایش می‌یابد.

تلفات غلظت مربوط به مقاومت در مقابل انتقال نفوذی واکنش‌دهندها به و یا از سایت‌های واکنش است. همانند تلفات فعال‌سازی، تلفات غلظت در تمامی دامنه‌های عملکرد سلول اتفاق می‌افتد اما سهم آن در تلفات کل، در چگالی جریان‌های بالا نمایان‌تر است. هنگام عملکرد پیل سوختی در این دامنه، واکنش دهنده‌ها نمی‌توانند در نرخ مورد نیاز واکنش الکترود وارد سلول شوند. در حالت کلی، تلفات فعال‌سازی و غلظت تابع هر دو کمیت دما و جریان بوده و کاملا غیرخطی‌اند. بزرگی تلفات غلظت در پیل‌سوختی اکسید جامد با تقویت آندی بزرگ‌تر از ساختار تقویت شده الکترولیتی است که دلیل آن نیز افزایش مقاومت در مقابل انتقال جرم در پیل های سوختی ضخیم است.

با توجه به پیچیدگی معادلات حاکم برای تعیین افت‌های اشاره شده در این مقاله تنها به منابع و روش‌های به کار رفته اشاره می‌شود. در منابع اشاره شده برای هر موضوع جزییات کامل معادلات به کار رفته نشان داده شده است.

به منظور محاسبه‌ی تلفات اهمی در این تحقیق از روش ارایه شده توسط مرجع [۵و۷] استفاده شده است. در این روش هر کانال به دو قسمت تقسیم شده است و مقاومت معادل برای آن‌ها نوشته می‌شود. مقاومت معادل نهایی نیز می‌تواند با به دست آوردن مقاومت معادل برای دو مقاومت موازی محاسبه شود. از آنجا که برای تعیین مقاومت معادل هر جزء به مقاومت مخصوص برحسب دما نیاز است، لذا از نتایج تجربی ارایه شده در مرجع [۱۵] استفاده شده است. با محاسبه مقاومت معادل برای اجزا، تلفات اهمی می‌تواند با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه شود:

$$\eta_{ohm} = i.R_{ohm} \qquad (۳)$$

در این رابطه، i و R_{ohm} به ترتیب جریان الکتریکی سلول و مقاومت اهمی آن هستند.

به منظور تعیین تلفات فعال‌سازی، در این مقاله از رابطه‌ی باتلر- ولمر استفاده شده است. در بسیاری از تحقیقات از شکل کامل آن صرف‌نظر شده و از رابطه‌ی تفل یا خطی شده استفاده شده است[۸]. در این تحقیق از شکل کامل این معادله به صورت زیر استفاده شده است.

$$j = i_0 \left\{ \exp\left(\beta \frac{n_e F \eta_{act} i}{RT_{PEN}} \right) - \exp\left[-(1-\beta) \frac{n_e F \eta_{act}}{RT_{PEN}} \right] \right\} \qquad (۴)$$

Archive of SID

www.SID.ir

در این رابطه، i_0 چگالی جریان مبادله، j چگالی جریان، n_e تعداد الکترون‌های مبادله شده در واکنش، β ضریب ثابت و η_{act} انرژی فعال‌سازی است. به منظور حل این معادله کمیت چگالی جریان مبادله در آند و کاتد باید مشخص شود که بدین منظور از معادلات ارایه شده توسط مرجع [۱۶] استفاده شده است. در این معادلات چگالی جریان مبادله برحسب توابعی از فشار جزیی هیدروژن و بخار آب در کانال‌ها بیان می‌شود که با توجه به نامشخص بودن این مقادیر لازم است معادله غیرخطی اشاره شده نیز همراه با سایر معادلات به صورت همزمان حل شوند.

برای تعیین تلفات غلظت در این تحقیق برخلاف تحقیقات مشابه از دو سطح نفوذ بین جریان توده سیال و سطح آند و سطح آند و ناحیه واکنش ارایه شده توسط[۱۳] استفاده شده است که بدین منظور با نوشتن معادلات نفوذی بین سطوح اشاره شده، غلظت هر جزء گازی در سطح آند و هم‌چنین در سطوح متخلخل و ناحیه واکنش محاسبه شده است. لازم به ذکر است که برای تعیین میزان غلظت هر جزء بر روی سطح آند تنها نفوذ از نوع باینری به همراه معادله فولر و برای تعیین غلظت در نواحی واکنش از هر دو نوع نفوذ باینری و نادسن استفاده شده است. روابط زیر با در نظر گرفتن توضیحات بالا می‌تواند برای محاسبه‌ی تلفات غلظت استفاده شود:

$$\eta_{diff,Ca} = \frac{RT_{PEN}}{4F} ln\left(\frac{X_{O2,b}}{X_{O2,TPB}}\right) \qquad (۵)$$

$$\eta_{diff,An} = \frac{RT_{PEN}}{2F} ln\left(\frac{X_{H2,b}X_{H2O,TPB}}{X_{H2O,b}X_{H2,TPB}}\right) \qquad (۶)$$

در این رابطه‌ها، b نشان دهنده‌ی جریان توده‌ی سیال (Bulk) در کانال‌های سوخت و هوا، TPB نشان دهنده‌ی ناحیه سه فازی واکنش و X نیز همان‌طور که اشاره شد کسر مولی اجزا است.

بالانس جرم

تغییر ترکیب گازها در هر کانال به علت واکنش الکتروشیمیایی، شیفت آب- گاز (WGS) و واکنش تبدیل متان (SR) در این قسمت محاسبه می‌شود. گازهای در نظر گرفته شده در کانال سوخت عبارت‌اند از H_2، CO، CO_2، H_2O و CH_4 N_2 و در کانال هوا تنها اکسیژن و نیتروژن در نظر گرفته شده‌اند و بالانس جرم برای آن‌ها نوشته شده است. معادله بقای جرم در هر کانال به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$0 = \left(N_{in,i} - N_{out,i}\right)\frac{1}{V_{An}} + \sum_{j\in\{SR,WGS,Ox\}} \nu_{i,j} r_j \frac{1}{d_{An}} \qquad i \in \{CH_4, CO_2, CO, H_2O, H_2, N_2\} \qquad (۷)$$

$$0 = \left(N_{in,i} - N_{out,i}\right)\frac{1}{V_{Ca}} + \nu_{i,\mathrm{Red}} r_{\mathrm{Red}} \frac{1}{d_{Ca}} \qquad i \in \{O_2, N_2\} \qquad (۸)$$

در این رابطه‌ها، Ox و Red معرف واکنش‌های اکسیداسیون و احیا، r نرخ واکنش، V حجم، ν ضریب نسبت درست شیمیایی (Stoichiometric) جزء در هر واکنش، N نرخ مولی هر جزء در ورود و خروج و d_{an} و d_{ca} قطر کانال سوخت و هواست.

برای هر یک از اجزا موارد زیر باید برای بالانس جرم در نظر گرفته شود:

۱- متان در واکنش SR به هیدروژن و مونوکسید کربن تبدیل می‌شود. ۲- بخار آب توسط واکنش SR و WGS مصرف و در واکنش الکتروشیمیایی تولید می‌شود. ۳- مونوکسیدکربن در واکنش SR تولید و در واکنش WGS مصرف می‌شود. ۴- دی اکسید کربن در واکنش WGS تولید می‌شود. ۵- اکسیژن در واکنش الکتروشیمیایی مصرف می‌شود. ۶- مقدار نیتروژن ثابت است.

نرخ محلی تبدیل محصولات و واکنش دهنده‌ها در واکنش الکتروشیمیایی به جریان الکتریسته می‌تواند توسط قانون فارادی به صورت زیر محاسبه شود[۱۴]:

$$r_{Ox} = r_{Red} = \frac{j}{2F} \qquad (۹)$$

Archive of SID

www.SID.ir

واکنش SR و WGS

همان‌طور که اشاره شد در پیل‌های سوختی دما بالا، هیدروژن می‌تواند توسط واکنش‌های زیر تولید شود:

$$CH_4 + H_2O \leftrightarrow CO_2 + 3H_2 \qquad (SR) \qquad (۱۰)$$

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2 \qquad (WGS) \qquad (۱۱)$$

تاکنون مدل‌های فراوانی برای تبدیل متان بر روی سطح آند SOFC ارایه شده است[۱۷] که در این میان مدل ارایه شده توسط مرجع [۱۶] کاربرد بیش‌تری داشته است. در این تحقیق نیز از این مدل به صورت زیر استفاده شده که در آن نرخ تولید متان وابسته به فشار جزیی آن در جریان گاز آند است.

$$r_{SR} = K\, p_{CH4} \exp\left(-\frac{E_{CH4}}{RT_F}\right) \qquad (۱۲)$$

در این رابطه، K عدد ثابت، p_{CH4} فشار جزیی متان، T_F دمای سوخت در هر المان و E_{CH4} انرژی فعال‌سازی متان است. سه مدل ارایه شده توسط مرجع [۷] نیز به صورت گزینه در کد توسعه یافته به کار رفته است.

به علت سرعت بالای واکنش WGS، روش ثابت تعادل[۴] یا مدل سینتیک[۶] می‌تواند برای تعیین مقدار مونوکسید کربن تبدیل شده استفاده شود که در این تحقیق به منظور افزایش دقت جواب‌ها از رابطه‌ی زیر استفاده شده است.

$$r_{WGS} = K_{WGS}\; p_{CO}\left(1-\frac{p_{CO2}\,p_{H2}}{K_{eq}\,p_{CO}\,p_{H2O}}\right) \qquad (۱۳)$$

در این رابطه، p فشار جزیی هر جزء و k_{WGS} و k_{eq} ثابت‌های تعادل‌اند. مقادیر مربوط به این رابطه، بر اساس مرجع [۶] محاسبه شده است.

بالانس انرژی

در پیل سوختی، توزیع جریان الکتریکی و توزیع دما در داخل اجزای سلول به یکدیگر وابسته‌اند. بنابراین موازنه انرژی به منظور تعیین کمیت‌های الکتروشیمیایی لازم است. نمونه‌ای از فرایندهای مرتبط عبارت‌اند از انرژی آزاد شده توسط واکنش الکتروشیمیایی، انتقال گرمای جابه‌جایی بین سطوح جامد و جریان گازهای آند و کاتد، انتقال گرمای هدایتی در سطوح جامد و انتقال گرمای تشعشعی بین سطوح جامد.

با توجه به پیچیدگی مدل‌سازی در SOFC تاکنون مدل‌های مختلفی برای تحلیل انرژی استفاده شده که تفاوت عمده‌ی آن‌ها در تعداد لایه‌های دمای به کار رفته در محاسبات و انتقال گرمای تشعشعی است. در میان تحقیقات انجام شده، تعداد لایه‌ها برای بالانس انرژی از ۰ تا ۵ متغیر است. در این تحقیق از ۵ لایه دمایی استفاده شده است. این لایه‌ها عبارت‌اند از: PEN، کانال هوا، کانال سوخت، اتصال دهنده طرف هوا و اتصال دهنده طرف سوخت. برای ۵ قسمت اشاره شده با در نظر گرفتن انتقال گرمای تشعشعی، بقای انرژی به صورت زیر نوشته می‌شود:

الف- بالانس انرژی برای PEN:

بالانس انرژی برای این قسمت شامل انتقال گرمای هدایتی در داخل PEN، انتقال گرمای جابه‌جایی بین قسمت جامد و کانال‌های هوا و سوخت، شار انتالپی ناشی از انتقال جرم محصولات و واکنش دهنده‌ها، تشعشع بین PEN و اتصال دهنده‌ها و شار گرمایی ناشی از واکنش‌های الکتروشیمیایی است.

$$\int_x \lambda_{PEN} A_{PEN}^{cond} \frac{\partial^2 T_{PEN}}{\partial x^2} dx - k_F A_{PEN,F}^{conv}\left(T_{PEN} - T_F\right) - k_A A_{PEN,A}^{conv}\left(T_{PEN} - T_A\right) + \frac{i}{2F}\left[h_{H_2}\left(T_F\right) + 0.5 h_{O_2}(T_A) - h_{H_2O}(T_{PEN})\right] + \dot{q}_{rad} - iV_{op} = 0 \qquad (۱۴)$$

Archive of SID

www.SID.ir

در این رابطه، زیرنویس‌های PEN، A و F به ترتیب نشان‌دهنده PEN، جریان هوا و جریان سوخت است. k ضریب انتقال گرمای جابه‌جایی بین کانال سوخت و هوا با PEN، λ ضریب هدایت گرمایی، T دما، $\dot{q}_{rad}$ انتقال گرمای تشعشعی بین PEN و اتصال دهنده‌ها و h انتالپی جزء نشان داده شده در دمای داخل پرانتز است. A نیز سطحی است که در آن انتقال گرما صورت می‌پذیرد که بالانویس $Cond$ و $Conv$ به ترتیب مربوط به انتقال گرمای هدایتی و جابه جایی است. سایر کمیت‌ها نیز قبلا توضیح داده شده است.

ب- بالانس انرژی برای کانال سوخت و هوا

بالانس انرژی برای این قسمت شامل انتقال گرمای جابه جایی بین قسمت جامد و کانال‌های هوا و سوخت، شار انتالپی ناشی از انتقال جرم و واکنش‌های الکتروشیمیایی، شار گرمایی انتقال یافته از اتصال دهنده با کانال‌های مجاور و شار انتالپی ناشی از ورود جرم به حجم کنترل به صورت زیر است:

بالانس انرژی برای کانال سوخت

$$\left(\dot{n}_{In}\bar{h}_{in}\left(T_F\right)-\dot{n}_{Out}\bar{h}_{Out}\left(T_F\right)\right)_F+k_F A_F^{conv}\left(T_{PEN}-T_F\right)+U_{tot}\left(T_F-T_A\right)$$
$$-\frac{i}{2F}\left[h_{H_2}\left(T_F\right)-h_{H_2O}(T_{PEN})\right]=0 \qquad (۱۵)$$

در این رابطه، $\dot{n}_{In}$ و $\dot{n}_{Out}$ نرخ مولی ورودی و خروجی و U_{TOT} ضریب انتقال گرماست که بر اساس روش عددی به کار رفته در مرجع [۸] محاسبه شده است. سایر کمیت‌ها نیز قبلا توضیح داده شده است.

بالانس انرژی برای کانال هوا

$$\left(\dot{n}_{In}\bar{h}_{in}\left(T_A\right)-\dot{n}_{Out}\bar{h}_{Out}\left(T_A\right)\right)_A+k_A A_A^{conv}\left(T_{PEN}-T_A\right)+U_{tot}\left(T_F-T_A\right)-\frac{i}{4F}h_{O_2}(T_A)=0 \qquad (۱۶)$$

ج- بالانس انرژی برای اتصال دهنده‌ها

بالانس انرژی برای این قسمت شامل انتقال گرمای هدایتی تشعشعی بین PEN و اتصال دهنده‌ها و انتقال گرمای جابه‌جایی بین قسمت جامد و کانال‌های هوا و سوخت است.

$$\int_x \lambda_{IcA}A_{IcA}^{cond}\frac{\partial^2 T_{IcA}}{\partial x^2}dx-k_A A_{IcA,A}^{conv}\left(T_{IcA}-T_A\right)-\dot{q}_{rad}=0 \qquad (۱۷)$$

$$\int_x \lambda_{IcF}A_{IcF}^{cond}\frac{\partial^2 T_{IcF}}{\partial x^2}dx-k_F A_{IcF,F}^{conv}\left(T_{IcF}^{i}-T_F^{i}\right)-\dot{q}_{rad}=0 \qquad (۱۸)$$

در این روابط، IcA و IcF به ترتیب نشان دهنده‌ی اتصال دهنده‌ی طرف کانال هوا و سوخت است. سایر کمیت‌ها نیز قبلا توضیح داده شده است. برای محاسبه انتقال گرمای تشعشعی در این تحقیق از روش مرجع [۱۸] استفاده شده است.

محاسبه افت فشار در کانال‌های سوخت و هوا

در پیل سوختی SOFC، جریان گاز هم‌دما و دایم نیست، اما فرض جریان آرام و کاملا توسعه یافته می‌تواند با دقت زیادی استفاده شود[۱۹]. بنابراین در این حالت معادله‌ی ناویر- استوکس به معادله‌ی هاگن-پوسیله خلاصه می‌شود. در این تحقیق از روش مرجع [۲۰] (که بر پایه معادله‌ی هاگن-پوسیله است) برای محاسبه‌ی افت فشار در کانال‌های هوا و سوخت استفاده شده است. در این روش افت فشار به معادله‌ی زیر خلاصه می‌شود:

$$\dot{m}=\left(\frac{1}{\mathrm{Re}\,f}\frac{D_C A_C}{2L_C}\frac{\rho}{\mu}\right)\left(P_I-P_O\right)=K_C\left(P_I-P_O\right) \qquad (۱۹)$$

در این رابطه، L_C، D_C ، A_C ، ρ، μ، P_I و P_O به ترتیب طول المان، قطر هیدرولیک، سطح مقطع، چگالی، ویسکوزیته، فشار ورودی و فشار خروجی است. چگالی و ویسکوزیته باید برای هر مخلوط از روش‌های ارایه شده در قسمت‌های بعد محاسبه شود.

Archive of SID

www.SID.ir

Ref نیز حاصل‌ضرب عدد رینولدز در ضریب اصطکاک سطح است. در این تحقیق از نتایج به دست آمده توسط مرجع [۱۹] برای محاسبه *Ref* استفاده شده است که این نتایج مربوط به جریان در داخل کانال‌ها همراه با انتقال جرم است.

محاسبه خواص مواد

انتالپی مخلوط در این تحقیق با در نظر گرفتن کسر مولی به صورت تابعی از دما محاسبه شده است. ضرایب انتقال گرمای جابه‌جایی باید به منظور حل معادلات انرژی محاسبه شود. نتایج تحقیقات انجام شده نشان می‌دهد که در داخل کانال‌های پیل‌سوختی، رینولدز بین ۳ تا ۱۰۰ است[۵] و فرض جریان آرام با عدد نوسلت ثابت می‌تواند برای تعیین ضرایب انتقال گرما استفاده شود[۴-۷و۱۸]. با در نظر گرفتن اعداد نوسلت ثابت می‌توان ضریب انتقال گرمای جابه‌جایی مربوط به هر کانال را محاسبه کرد که برای این کار لازم است ضریب هدایت گرمایی مخلوط گازها محاسبه شود. تا کنون روش‌های زیادی به منظور تعیین ویسکوزیته مخلوط (برای محاسبه افت فشار) و ضریب هدایت گرمایی مخلوط گازها ارایه شده[۲۱] که در این تحقیق از روابط زیر استفاده شده است:

$$\mu_m = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mu_i X_i}{\sum_{j=1}^{n} \mu_i \varphi_{ij}} \quad ,\varphi_{ij} = \frac{\left[1 + \left(\mu_i / \mu_j\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(M_j / M_i\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2}{\left[8\left(1 + \left(M_j / M_i\right)\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (۲۰)$$

$$\lambda_m = \sum_{i=1}^{n} \frac{\lambda_i X_i}{\sum_{j=1}^{n} \lambda_i A_{ij}} \quad ,A_{ij} = \frac{\varepsilon\left[1 + \left(\lambda_i / \lambda_j\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(M_j / M_i\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2}{\left[8\left(1 + \left(M_j / M_i\right)\right)\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (۲۱)$$

در این روابط، μ_i و λ_i ویسکوزیته و ضریب هدایت گرمایی هر جزء، M جرم ملکولی و X کسر مولی است.

شرایط مرزی

به منظور حل معادله‌های کاملا غیر خطی اشاره شده در قسمت‌های قبل، شرایط مرزی مناسب و متغیرهای مناسب ورودی باید در نظر گرفته شود. در مدل‌سازی الکتروشیمیایی، چگالی جریان متوسط یا ولتاژ عملکرد سلول می‌تواند به عنوان ورودی در نظر گرفته شود. برای حل معادلات به دست آمده از بقای جرم، ترکیب گازها در ورود مورد نیاز است. از آنجا که از روش بالادست جریان برای جداسازی معادلات در کانال های سوخت و هوا استفاده شده است بنابراین دما در ورود به عنوان شرط مرزی استفاده شده است. برای هدایت گرمایی در PEN و اتصال دهنده‌ها از تقریب مرکزی استفاده شده است. بدین منظور در ابتدا و انتهای کانال‌ها شرایط بی‌دررو استفاده شده است که به دلیل کوچکی ارتفاع کانال‌ها در مقایسه با طول، تقریب قابل قبولی به نظر می‌رسد.

روش حل

معادله‌های به دست آمده از بالانس الکتروشیمیایی، جرم، ممنتوم و انرژی کاملا غیر خطی و وابسته‌اند که بدین منظور باید استراتژی مناسبی برای حل در نظر گرفته شود (حدود ۵۰۰۰ معادله کاملا غیرخطی با در نظر گرفتن ۲۰ المان در طول هر کانال). به منظور حل معادلات اشاره شده در قسمت‌های قبل، در حالت جریان دایم معادلات در محیط نرم افزار EES [۲۲] و

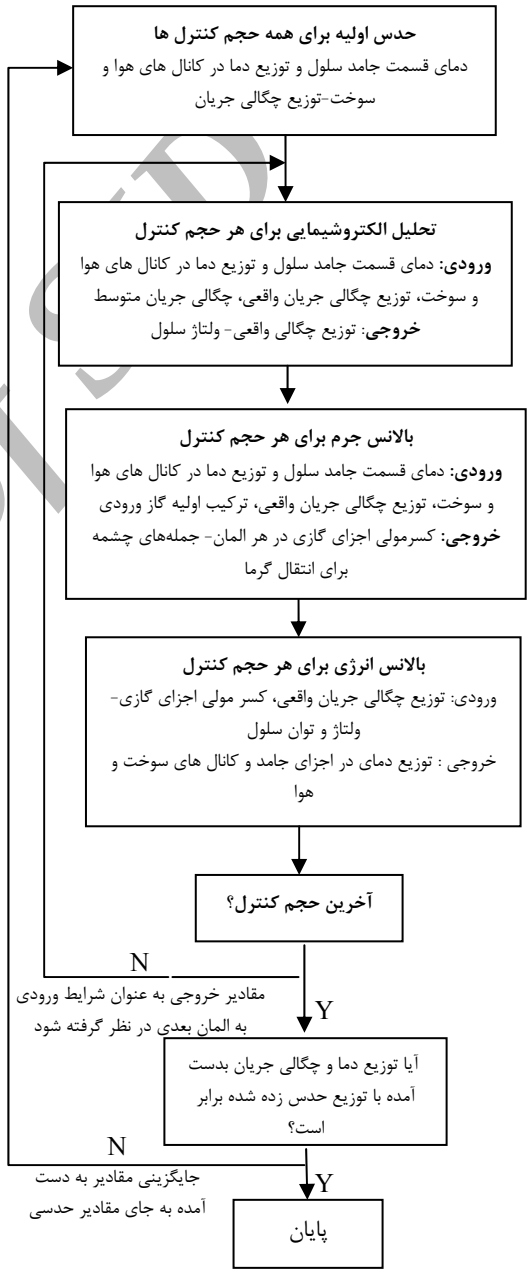
Archive of SID

www.SID.ir

در حالت دینامیکی در محیط نرم افزار MATLAB برنامه‌نویسی شده است (لازم به ذکر است که نتایج مدل دینامیکی در این جا اشاره نشده است). اگرچه الگوریتم‌های متفاوتی در دو محیط برنامه نویسی اشاره شده برای حل در نظر گرفته شده اما الگوریتم حل در حالت کلی در شکل (۵) نشان داده شده است. این الگوریتم کاملا در EES متفاوت است. معیار در نظر گرفته شده برای هم‌گرایی عبارت است از باقی‌مانده نسبی هر متغیر در هر تکرار (مقدار به دست آمده منهای مقدار حدس زده شده تقسیم بر مقدار به دست آمده) که قدر مطلق این عدد برای تمامی متغیرها باید کم‌تر از (۶-)^۱۰×۱ باشد.

جدول ۱-مشخصات SOFC آزمون IBM

مشخصات هندسی		
ضخامت آند	50×10^{-6}	m
ضخامت کاتد	50×10^{-6}	m
ضخامت الکترولیت	150×10^{-6}	m
ضخامت اتصال دهنده ها	2.5×10^{-3}	m
سطح فعال سلول	100×100	mm^2
ارتفاع کانال- طرف سوخت	1×10^{-3}	m
ارتفاع کانال- طرف هوا	1×10^{-3}	m
ضخامت کانال- طرف سوخت و هوا	3×10^{-3}	m
عرض کانال- طرف سوخت و هوا	3×10^{-3}	m
تعداد کانال- طرف سوخت	18	-
تعداد کانال- طرف هوا	18	-
خواص گرمایی مواد		
ضریب هدایت گرمایی- آند	2.0	$Wm^{-1}K^{-1}$
ضریب هدایت گرمایی- کاتد	2.0	$Wm^{-1}K^{-1}$
ضریب هدایت گرمایی- اتصال دهنده	2.0	$Wm^{-1}K^{-1}$
متغیرهای تبدیل متان		
ضریب K_r	4274	-
ضریب m	1.0	-
ضریب n	0.0	-
E_{CH4}	82000	$Jmol^{-1}$
تلفات فعال‌سازی		
انرژی فعال‌سازی- آند	100	$kJmol^{-1}$
انرژی فعال‌سازی- کاتد	117	$kJmol^{-1}$
ضریب قبل از جمله نمایی برای آند	5.5×10^{-8}	Am^{-2}
ضریب قبل از جمله نمایی برای کاتد	7×10^{-8}	Am^{-2}
ضریب m	1.0	-
تلفات غلظت		
قطر حفره‌های آند	1×10^{-6}	m
قطر حفره‌های کاتد	1×10^{-6}	m
تخلخل کاتد	50	%
تخلخل آند	50	%
ضریب پیچایی (Tortuosity) آند	3.0	
ضریب پیچایی (Tortuosity) کاتد	3.0	



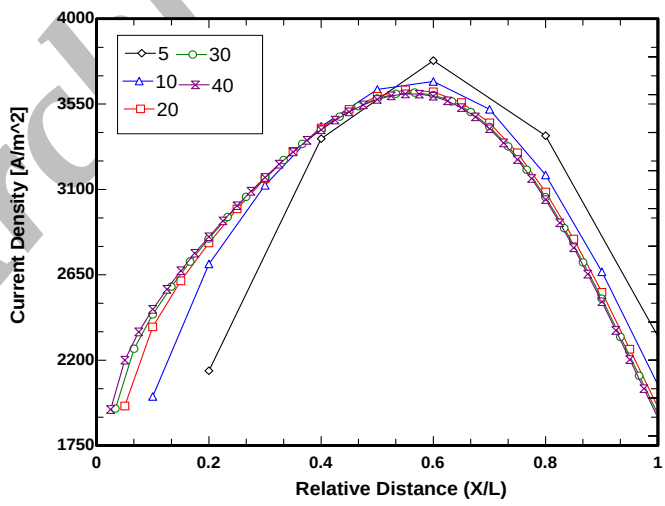
شکل ۵- نمودار جریان حل عددی

www.SID.ir

بررسی استقلال جواب‌ها از شبکه محاسباتی و معتبرسازی آن‌ها

برای بررسی استقلال جواب‌ها و معتبرسازی آن‌ها در این تحقیق مقادیر مربوط به آزمون تجربی IEA-Benchmark (IBM) به عنوان ورودی در نظر گرفته شده[۲۳] و با استفاده از آن‌ها وابستگی جواب‌ها و دقت نتایج بررسی شده است. در آزمون IBM، یک سلول SOFC نوع مسطح با استفاده از هیدروژن به صورت تجربی بررسی شده و سپس نه کد توسعه یافته در مراکز مختلف توسط این مقادیر کالیبره شده و در ادامه این کدها برای شبیه سازی سوخت متان به کار گرفته شده‌اند. لازم به ذکر است که این آزمون با حمایت اتحادیه اروپا برای توسعه SOFC انجام شده و هدف آن ارایه یک نمونه آزمون برای توسعه SOFC است تا بتوان آن را برای معتبر سازی کدهای عددی به کار برد. در جدول (۱) مشخصات سلول SOFC به کار رفته برای آزمون IBM نشان داده شده است. در این آزمون متان با ۳۰ درصد پیش تبدیل و با دمای ورودی ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد و هوا با نرخ اضافی ۷ برابر و دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد به عنوان ورودی به کار رفته است. فرضیات به کار رفته در کدهای توسعه یافته در آزمون IBM به جز فرض ۴ همانند فرضیات به کار رفته در این تحقیق است. لازم به ذکر است که در این تحقیق اتصال‌دهنده‌ها و PEN به صورت لایه‌های مجزای دمایی در نظر گرفته شده‌اند، اما در آزمون IBM، تمامی سطوح جامد سلول به صورت یکپارچه مدل‌سازی شده‌اند. نکته‌ی بسیار مهم در آزمون IBM آن است که به علت پیچیدگی مربوط به محاسبه‌ی تلفات فعال‌سازی و غلظت، تمامی موسسات شرکت‌کننده در این آزمون به منظور مقایسه هر چه بهتر نتایج توافق کرده‌اند که تلفات فعال‌سازی برابر با تلفات اهمی در نظر گرفته شده و از تلفات غلظت صرف‌نظر شود[۷و۲۳].

در شکل (۶) تاثیر تعداد المان بر روی توزیع چگالی جریان در راستای محور x یا به عبارتی در طول کانال‌های سوخت و هوا، در ساختار جریان موازی نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج به دست آمده برای تعداد ۳۰،۲۰ و ۴۰ المان دارای اختلاف کمی هستند. بنابراین مقدار ۲۰ المان می‌تواند به عنوان تعداد المان مورد نیاز در نظر گرفته شود. البته لازم به ذکر است که در اینجا تنها مقدار بیشینه و کمینه منحنی بسیار مهم است و جابه‌جایی عرضی منحنی نشان دهنده تعداد تقسیمات بیش‌تر است. به عبارت دیگر نتایج نشان داده شده در شکل (۶) مربوط به نقطه وسط حجم کنترل‌های در نظر گرفته شده است و بنابراین هنگامی که تعداد المان‌های بیش‌تر مورد استفاده قرار گیرد، به علت تعداد تقسیمات بیش‌تر، جابه‌جایی عرضی منحنی طبیعی است.



شکل ۶- بررسی تاثیر تعداد المان در امتداد کانال ها بر روی توزیع چگالی جریان

مقادیر گزارش شده در گزارش نهایی IBM یکتا نبوده و برای هر متغیر مقادیر بیشینه و کمینه ارایه شده و پیشنهاد شده که مقادیر به دست آمده از کدهای دیگر می‌بایست در دامنه مقادیر گزارش شده باشند. در جدول (۲) نتایج به دست آمده از این تحقیق برای متغیرهای عملکرد سلول در مقایسه با آزمون IBM نشان داده شده است.

Archive of SID
www.SID.ir

علت وجود خطای اندک در مقایسه با IBM، در کنار خطاهای مربوط به محاسبات عددی به ویژه خطای مربوط به گردکردن (به علت دامنه بزرگی گسترده متغیرهای موجود)، می‌تواند به دلایل زیر باشد:

۱- همان‌طور که اشاره شد در آزمون IBM تلفات فعال‌سازی برابر تلفات اهمی در نظر گرفته شده و از تلفات غلظت صرف‌نظر شده است. در نظر گرفتن مدل‌های کامل برای هر سه تلفات در این تحقیق سبب شده که مقدار ولتاژ و توان خروجی سلول با دقت به‌تری در مقایسه با IBM محاسبه شود.

۲- یکی از موارد اختلاف اندک جواب‌ها با مقادیر IBM مربوط به مدل هدایت تشعشعی به کار رفته در این تحقیق است. در نه کد به کار رفته برای به دست آوردن نتایج IBM برای متان هیچ‌گونه اشاره‌ای به مدل تشعشع نشده است.

۳- یکی دیگر از عوامل اختلاف می‌تواند مربوط به تعاریف مختلف از متغیر مصرف سوخت و نرخ هوای اضافی باشد. این متغیرها می‌توانند به صورت‌های مختلفی تعریف شوند که در IBM تعریف آن‌ها مشخص نیست.

۴- قابلیت‌های ویژه به کار رفته در این تحقیق نیز می‌تواند از عوامل وجود اختلاف ناچیز باشد. همان‌طور که اشاره شد، در این تحقیق تمامی متغیرهای الکتریکی، گرمایی و ترمودینامیکی متغیر در نظر گرفته شده است در حالی که در روش به کار رفته در IBM مشخص نیست.

جدول ۲- مقایسه مقادیر به دست آمده در این تحقیق در مقایسه با نتایج IBM

متغیر		ساختار جریان موازی	
		IBM	مدل توسعه یافته
ولتاژ (V)	بالا	0.649	0.634
	پایین	0.633	
توان (W)	بالا	19.47	19.04
	پایین	18.99	
چگالی جریان (A/m^2)	بالا	3665	3583
	پایین	1748	1789
دمای بیشینه PEN (°C)	بالا	1034	1023
	پایین	1021	

بررسی تاثیر متغیرهای مختلف بر عملکرد SOFC

متغیرهای مختلفی می‌توانند بر عملکرد SOFC تاثیرگذار باشند که از مهم‌ترین آن‌ها می‌توان به نرخ هوای اضافی و مصرف سوخت اشاره کرد. در ادامه به علت اهمیت این دو متغیر، عملکرد SOFC با تغییر آن‌ها بررسی خواهد شد.

بررسی تاثیر فاکتور مصرف سوخت

فاکتور مصرف سوخت در این تحقیق به صورت نسبت هیدروژن مصرف شده به مقدار سوخت ورودی که همان نرخ مولی ورود متان، CO و هیدروژن است، تعریف شده است.

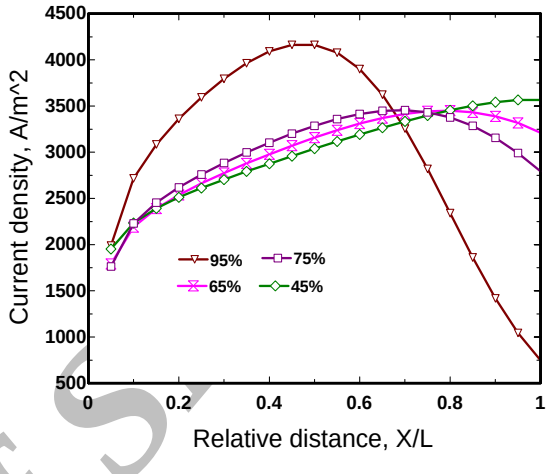
$$U_f = \frac{\dot{n}_{Hydrogen-consumed}}{\left(4\dot{n}_{CH4} + \dot{n}_{CO} + \dot{n}_{H2}\right)_{Cell-In}} * 100 \qquad (۲۲)$$

فاکتور مصرف سوخت یکی از متغیرهای اساسی در عملکرد SOFC است و مقدار آن می‌بایست بر اساس عمکلرد سیستم تعیین شود. مقدار بالای این متغیر یا به عبارتی ۱۰۰ درصد مصرف سوخت هر چند که می‌تواند بازده پیل سوختی را به مقدار

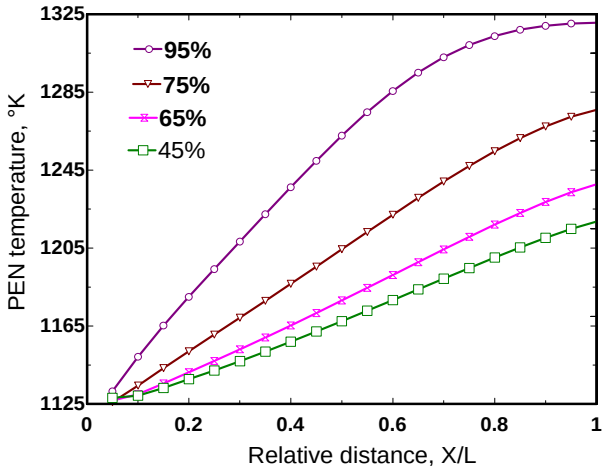
Archive of SID

www.SID.ir

قابل توجهی افزایش دهد، اما باعث می‌شود که در انتهای کانال‌های سوخت، غلظت هیدروژن بسیار کم شده و در نتیجه تلفات ولتاژ به مقدار قابل توجهی افزایش یابد. پایین بودن فاکتور مصرف سوخت نیز اگرچه می‌تواند در کنترل دمای سلول مفید باشد، ولی باعث کاهش شدید بازده سلول می‌شود. در شکل‌های (۷) و (۸) تاثیر این متغیر را بر روی چگالی جریان و دمای سلول می‌بینید.

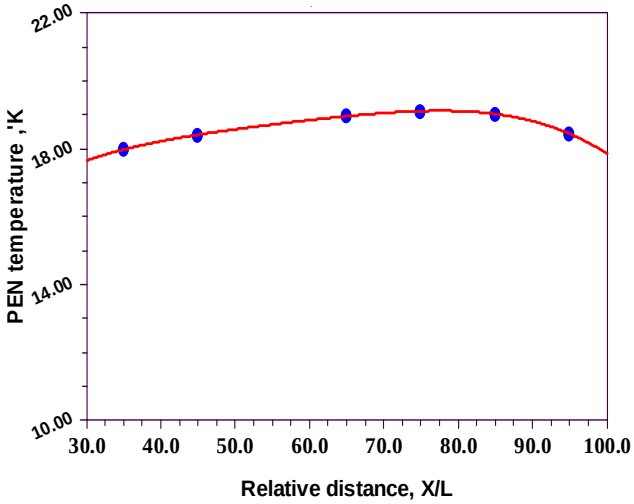


شکل۷- بررسی تاثیر فاکتور مصرف سوخت بر روی چگالی جریان خروجی



شکل ۸- بررسی تاثیر فاکتور مصرف سوخت بر روی دمای PEN

همان‌طور که دیده می‌شود، افزایش فاکتور مصرف سوخت می‌تواند تاثیر بسیاری بر روی چگالی جریان و دمای PEN داشته باشد. افزایش مصرف سوخت می‌تواند به نایکنواختی توزیع چگالی جریان در طول سلول و افزایش بیش از اندازه دمای PEN منجر شود که در نتیجه توان و ولتاژ خروجی از سلول نیز کاهش خواهد یافت. از طرف دیگر افزایش دما نیز باعث از کارافتادگی سلول می‌شود. از طرف دیگر با کاهش فاکتور مصرف سوخت، توان و ولتاژ خروجی مقدار کم‌تری را نشان می‌دهند. به عبارت دیگر برای ساختار به کار رفته در این تحقیق و در نرخ اضافی هوای ورودی ثابت، یک مقدار فاکتور مصرف سوخت بهینه وجود دارد که مقدار آن را می توان با توجه به شکل (۹) برابر ۸۰ درصد پیش‌بینی کرد.



شکل ۹- تعیین نقطه بهینه فاکتور مصرف سوخت

Archive of SID
www.SID.ir

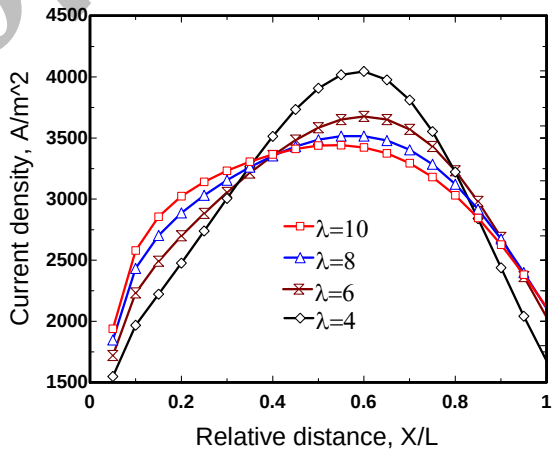
بررسی تاثیر نرخ اضافی ورود هوا

هوای ورودی به SOFC نقش بسیار مهمی در کنترل دمای سلول دارد و بدین دلیل معمولا هوا با نرخ اضافی بالا وارد سلول می‌شود. تعریف این متغیر به صورت زیر است:

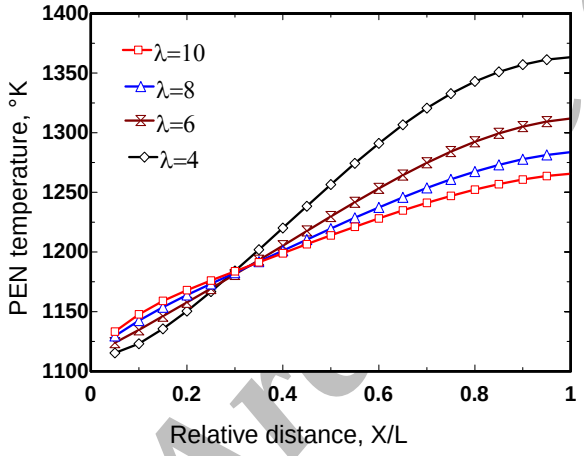
$$\lambda = \frac{\left(\dot{n}_{Oxygen}\right)_{Cell-in}}{\left[2\dot{n}_{CH4} + 0.5\left(\dot{n}_{CO} + \dot{n}_{H2}\right)\right]_{Cell-in}} \qquad (۲۳)$$

به عبارتی نسبت مقدار اکسیژن ورودی به سلول به مقدار سوخت ورودی را نسبت هوای اضافی می‌گویند. هرچند که افزایش نرخ هوای اضافی می‌تواند باعث بهبود عملکرد سلول شود اما نکته بسیار مهم آن است که افزایش این متغیر باعث افزایش بیش از اندازه‌ی توان‌های اجزای جانبی سیستم پیل سوختی می‌شود. از آنجا که کاهش مقدار توان فن یا کمپرسور هوا، در افزایش بازده سیستم بسیار مهم است و مقدار آن بایستی در کم‌ترین مقدار مورد نیاز باشد، بنابراین لازم است که متغیر مقدار هوای اضافی به درستی تعیین شود.

در شکل‌های (۱۰) و (۱۱) تاثیر تغییر مقدار هوای اضافی ورودی به سیستم بر روی شکل مقطع چگالی جریان و دمای PEN نشان داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت در دامنه تغییر استاندارد (دامنه ۳ تا ۷)، تغییر این متغیر تاثیر بسیار زیادی بر روی شکل مقطع خروجی سلول ندارد، اما همان‌طور که دیده می‌شود شکل مقطع دما می‌تواند تغییر زیادی داشته باشد که برای مقادیر کم نرخ هوای اضافی ورودی، مقدار دمای PEN بیش‌تر از مقدار مجاز است. لازم به ذکر است که بر اساس استانداردهای موجود، بیش‌ترین دامنه‌ی مجاز تغییر دما در PEN می‌بایست پایین‌تر از ۱۵۰ [۱۴] درجه سانتی‌گراد باشد. توان خروجی از سلول نیز با تغییر نرخ هوای اضافی متغیر است به طوری که بیش‌ترین مقدار آن در λ=۷ است.



شکل۱۰- بررسی تاثیر نرخ هوای اضافی ورودی به سلول بر چگالی جریان خروجی از سلول



شکل ۱۱- بررسی تاثیر نرخ هوای اضافی ورودی به سلول بر روی دمای PEN

نتیجه‌گیری

مدل‌های به کار رفته برای تحلیل سیستم SOFC معمولا به صورت جعبه سیاه بوده، بنابراین تنها می‌توانند مشخصات کلی از سیستم را نشان بدهند. تحلیل دقیق سیستم‌های SOFC نیازمند مدل‌هایی با دقت زیاد اما سرعت بالاست که از یک طرف بتوانند جزییات را با دقت بالا نشان دهند و از طرف دیگر بتوان تعداد زیادی متغیر را با آن‌ها بررسی کرد. با توجه به این موضوع، با در نظر گرفتن معادلات بقای جرم، انرژی و شکل ساده شده معادله‌ی بقای ممنتوم به همراه معادلات الکتروشیمیایی و سینتیک واکنش سوخت، در این تحقیق یک مدل تفصیلی به منظور مدل‌سازی استک SOFC ارایه شد. در مدل‌سازی انجام شده سعی شد که فرایندهای فیزیکی با دقت بیش‌تری در مقایسه با تحقیقات مشابه انجام شود که از آن جمله می‌توان به

Archive of SID
www.SID.ir

تحلیل دقیق‌تر انتقال گرما، تعیین ویژگی‌های دقیق مواد با تغییر دما و تحلیل دقیق الکتروشیمیایی اشاره کرد. مدل حاضر با استفاده از نتایج تجربی و عددی معتبر سازی شد که در تمامی موارد، دقت‌های به دست آمده در دامنه مورد نظر بوده و دلیل وجود اختلاف اندک نیز اشاره شد که مهم‌ترین آن‌ها استفاده از مدل تشعشع، تحلیل دقیق الکتروشیمیایی و قابلیت‌های به کار رفته در شبیه سازی در مدل حاضر بود. به منظور نشان دادن جنبه‌ای از قابلیت‌های مدل دو نمونه از تحلیل حساسیت بر روی متغیرهای نرخ هوای اضافی و مصرف سوخت انجام و مقدار بهینه برای آن‌ها انتخاب شد.

در حال حاضر، مدل ارایه شده در این تحقیق جانشین مدل قبلی به کار رفته در پروژه بین المللی[۲۴] IEA Annex 42 برای بررسی عملکرد سیستم SOFC برای مصارف خانگی شده است[۲۵]. لازم به ذکر است که مدل قبلی به کار رفته، یک مدل جعبه سیاه بوده است که اطلاعات تجربی به عنوان ورودی به این مدل لازم است.

قدردانی

بدین وسیله از حمایت مالی سازمان انرژی‌های نو، کمیته راهبردی پیل سوختی در چاپ این مقاله تشکر و قدردانی می‌شود.

مراجع

1. Williams, M. C., Strakey, J. P., and Singhal, S. C., "U.S. Distributed Generation Fuel Cell Program," Journal of Power Sources, 131, no. 1-2, pp. 79-85, 2004.
2. Calise, F., D'Accadia, M. D., Palombo, A., and Vanoli, L., "Simulation and Exergy Analysis of a Hybrid Solid Oxide Fuel Fell (SOFC)-Fas Turbine System," Energy, 31, 2006.
3. Chan, S. H., Khor, K. A., and Xia, Z. T., "A Complete Polarization Model of a Solid Oxide Fuel Cell and its Sensitivity to the Change of Cell Component Thickness," Journal of Power Sources, 93, no. 1-2, pp. 130-140, 2001.
4. Selimovic, A., "Modelling of Solid Oxide Fuel Cells Applied to the Analysis of Integrated Systems with Gas Turbines," Sweden, PhD Thesis, 2002.
5. Campanari S., and Iora, P., "Definition and Sensitivity Analysis of a Finite Volume SOFC Model for a Tubular Cell Geometry," Journal of Power Sources, no. 1-2, pp. 113-126, 2004.
6. Aguiar, P., Adjiman, C. S., and Brandon, N. P., "Anode-Supported Intermediate-Temperature Direct Internal Reforming Solid Oxide Fuel Cell: II. Model-Based Dynamic Performance and Control," Journal of Power Sources, 147, no. 1-2, pp. 136-147, 2005.
7. Nagel, F. P., Schildhauer, T. J., Biollaz, S. M. A., and Wokaun, A., "Performance Comparison of Planar, Tubular and Delta8 Solid Oxide Fuel Cells Using a Generalized Finite Volume Model," Journal of Power Sources, 184, no. 1, pp. 143-164, 2008.
8. Braun, R. J., "Optimal Design and Operation of Solid Oxide Fuel Cell Systems for Small-Scale Stationary Applications," PhD Thesis, 2002.
9. Ozgur Coplan, C., Dincer, A. and Hamdullahpur, F., "A Review on Macro-Level Modeling of Planar Solid Oxide Fuel Cells," International Journal of Energy Research, 32, no. 4, pp. 336-355, 2008.
10. Pacheco, E. H., Sing, D., Hutton, F. N., Patel, N., and Mann, M. D., "A Macro-Level Model for Determining the Performance Characteristics of Solid Oxide Fuel Cells," Journal of Power Sources, 138, no. 1-2, pp. 174-186, 2004.
11. Palsson, J., "Thermodynamic Modeling and Performance of Combined Solid Oxide Fuel Cell and Gas Turbine Systems," Sweden, PhD Thesis, 2002.
12. Finkenrath, M., "Simulation und Analyse des Dynamischen Verhaltens Von Kraftwerken Mit Oxidkeramischer Brennstoffzelle (SOFC)," Julich, PhD Thesis, 2005.
13. Stiller, C., "Design Operation and Control Modeling of SOFC/GT Hybrid Systems," PhD Thesis, Trondheim, Norway, 2006.
14. Bove R., and Ubertini, S., Modeling Solid Oxide Fuel Cells: Methods, Procedures and Techniques, Springer, 2008.
15. Bossel, U. G., "Annex II: Modeling & Evaluation of Advanced SOFC, Final Report on SOFC Data; Facts & Figures," Berne, April,1992.
16. Achenbach E., and Riensche, E., "Methane/Steam Reforming Kinetics for Solid Oxide Fuel Cells," Journal of Power Sources, 52, No. 2, pp. 283-288, 1994.
17. Leinfelder, P., "Reaktionskinetische Untersuchungen zur Methan-Dampf-Reformierung und Shift-Reaktion an Anoden Oxidkeramischer Brennstoffzellen," Erlangen-Nurnberg, Germany, 2004.
18. Xi, H., "Dynamic Modeling and Control of Planar SOFC Power Systems," PhD thesis, 2007.
19. Yuan, J., Rokni, M., and Sunden, B., "Simulation of Fully Developed Laminar Heat and Mass Transfer in Fuel Cell Ducts with Different Cross Sections," International Journal of Heat and Mass Transfer, 46, no. 5, pp. 809-821, 2003.
20. Kee, R. J., Korada, P., Walters, K., and Pavol, M., "A Generalized Model of the Flow Distribution in Channel Networks of Planar Fuel Cells," Journal of Power Sources, 109, no. 1, pp. 148-159, 2002.
21. Poling, B. E., Prausnitz, J. M., and O'Connell, J. P., The Properties of Gases and Liquids, 5th ed., McGraw-Hill, 2004.

Archive of SID
www.SID.ir

22. http://fchart.com/
23. Achenbach, E., "Annex II: Modelling and Evaluation of Advanced Solid Oxide Fuel Cells," IEA Program on R&D on Advanced Fuel Cells, Forschungszentrum Julich, Germany, Final Report of Activity A2, 1996.
24. Kelly, N., and Beausoleil-Morrison, I., Specifications for Modelling Fuel Cell and Combustion-Based Residential Cogeneration Ddevices Within Whole-Building Simulation Programs, IEA ECBCS Annex 42 report, ISBN 978-0-662-47116-5, 2007.
25. Kazempoor, p., Dorer, V., and Ommi, F., "General Stack Model for Building Integrated SOFC System," 6th Symposium on Fuel Cell Modeling and Experimental Validation, Karlsruhe, Germany, 2009.

English Abstract

Modeling a Planar Solid Oxide Fuel Cell for Combined Heat and Power Systems

P. Kazempoor and F. Ommi
Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Tarbiat Modares University

The paper presents a detailed solid oxide fuel cell (SOFC) model that is specifically developed for the performance evaluation of planar SOFC stacks in combined heat and power (CHP) systems. The developed model includes the mass, momentum, thermal and electrochemical analysis, as well as the kinetic models of hydrocarbon reactions. The electrochemical model includes a complete evaluation of ohmic, activation and diffusion polarisations. To increase the accuracy of the model; methane reforming and water-gas shift reactions, several layers of temperature, radiation heat transfer model and material temperature dependent property are also applied to the model. The model is also validated with available numerical and experimental data for a high temperature SOFC with internal reforming, showing the capacity to accurately predict its operating conditions. Finally, sensitivity analyses on fuel utilization factor and on air excess ratio are performed to investigate the effects of different key parameters.

Keywords: Solid oxide fuel cell, Control volume, System modeling, Voltage polarization

Archive of SID

www.SID.ir