

ویژه نامه توسعه زنجیره فناوری های هیدروژنی

به کارگیری دینامیک سیالات محاسباتی و یادگیری ماشین در پیش بینی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد لوله ای با سوخت آمونیاک

مهدی کیهانپور* و مجید قاسمی

گروه مهندسی مکانیک تبدیل انرژی، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر طوسی، تهران

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۲/۱۶ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۶/۲۴

چکیده

در این پژوهش، یک پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک و دمای کاری متوسط، به وسیله دینامیک سیالات محاسباتی و یادگیری ماشین، شبیه سازی شده و تحت ارزیابی عملکرد قرار گرفته است. نخست، هندسه مسأله به صورت متقارن محوری شبیه سازی شده و معادلات شامل بقای جرم، ممنتوم، گونه ها، انرژی و بار الکتریکی، با استفاده از یک برنامه عددی المان محدود، تعریف، جفت و حل می گردد. سپس برای بررسی الگوریتم یادگیری ماشین، عبارتهای چگالی توان و دمای بیشینه، به عنوان توابع هدف و عبارتهای دمای ورودی، تخلخل الکترودها و سرعت جریانهای سوخت و هوا به عنوان متغیرهای اثرگذار انتخاب می شوند. پس از ایجاد داده های کافی با ششصد و یک بار تکرار حل عددی در حالت های مختلف عبارتهای ورودی، فرآیند یادگیری ماشین با استفاده هشتاد و پنج درصد داده ها بر روی ساختارهای گوناگون الگوریتم شبکه عصبی عمیق آغاز می گردد. نتایج نشان می دهد که در ساختار بهینه الگوریتم، عملکرد ماشین در پیش بینی توابع هدف، مناسب و قابل قبول می باشد. براین اساس، R^2 ماشین در پیش بینی توابع دمای بیشینه و چگالی توان، به ترتیب ۰/۹۹ و ۰/۹۸ می باشند.

کلمات کلیدی: پیل سوختی اکسید جامد، آمونیاک، دینامیک سیالات محاسباتی، یادگیری ماشین، شبکه عصبی عمیق.

مقدمه

در دهه‌های اخیر با افزایش جمعیت بشر و به دنبال آن، افزایش تقاضا برای انرژی، باعث نگرانی‌های جدی در کشورهای گوناگون گردیده است. در همین راستا، با توجه به کاهش و پایان پذیر بودن منابع سوخت‌های فسیلی و همچنین آسیب‌های محیط زیستی، پژوهش‌ها و کوشش‌ها معطوف به منابع انرژی جایگزین پاک و پایدار شده است. پیل سوختی از گزینه‌های نویدبخش و کارآمد به عنوان یک منبع انرژی پاک و پایدار می‌باشد که ضمن سازگاری با محیط زیست، انرژی شیمیایی را با بازدهی نسبتاً بالایی به انرژی الکتریکی تبدیل می‌نماید. پیل سوختی اکسید جامد از انواع پیل سوختی می‌باشد که با توجه به قابلیت کار در محدود دمایی گسترده از ۴۰۰ تا ۷۰۰ °C، دارای ساختار ساده و مقرون به صرفه و همچنین انعطاف در برابر سوخت‌های ورودی مختلف از جمله هیدروژن، کربن مونوکسید، کربن دی اکسید، زیست توده، آمونیاک و ... می‌باشد. هیدروژن با توجه به سینتیک الکتروشیمیایی بالا و انتشار صرفاً بخار آب به عنوان فرآورده، یک سوخت ایده آل برای پیل‌های سوختی می‌باشد. با این حال، به دلیل چالش‌های گوناگون هیدروژن خالص هم‌چون انتقال و ذخیره‌سازی، چگالی انرژی حجمی پایین در فاز گاز و ...، جست و جو برای یک سوخت جایگزین مناسب ضروری می‌باشد. آمونیاک با توجه به ویژگی‌هایی هم‌چون بهای مناسب، قابلیت تولید، حمل و ذخیره‌سازی آسان، چگالی انرژی حجمی قابل توجه و همچنین عدم انتشار کربن در نقطه مصرف، به عنوان یک سوخت جایگزین مناسب برای هیدروژن به منظور استفاده در پیل‌های سوختی اکسید جامد شناخته می‌شود. همچنین آمونیاک به آسانی قابلیت تبدیل به مایع را دارد که در این حالت، چگالی حجمی آمونیاک 108 Kg/m^3 نسبت به هیدروژن مایع 72 Kg/m^3

بیشتر می‌باشد.

امروزه درصد قابل توجهی از آمونیاک طی فرآیند هابر-بوش^۱ تولید می‌شود که حاصل آن ۱٪ از انتشار جهانی گاز کربن دی اکسید می‌باشد. همچنین یکی از منابع مناسب برای تولید آمونیاک، فاضلاب‌ها و پساب‌ها می‌باشند که دارای مقدار قابل توجهی آمونیاک هستند. آمونیاک تولیدی در جهان بیشتر در حوزه کشاورزی، صنایع شیمیایی تولید فیبر، پلاستیک، داروسازی و ... کاربرد دارد [۱]. کشور ایران با تولید ۲۵۰۰ هزار تن آمونیاک دارای رتبه چهاردهم در دنیا می‌باشد که ظرفیت مناسبی را برای استفاده در حوزه انرژی ایجاد می‌نماید. دو رویکرد در سال‌های اخیر درخصوص توسعه صنعت پیل سوختی فراگیر شده است. نخست، استفاده از سوخت‌های جایگزین هم‌چون آمونیاک و دوم، طراحی و ساخت پیل‌های سوختی با دمای کاری متوسط می‌باشد. پیشتر، توسعه پیل‌های سوختی عمدتاً بر مبنای دمای کاری بالا و مدل سینتیکی تامارو^۲ انجام می‌شده است [۲]. ازین‌رو، برای دمای کاری متوسط نیاز به تعریف مدل سینتیکی کاربردی و متناسب دیگری می‌باشد. مدل سینتیکی تمکین-پیژف^۳ برای شبیه‌سازی تجزیه آمونیاک توسط ویلکار و همکارانش برای دمای کاری متوسط تا ۶۶۰ °C معرفی گردید [۳]. برای تحلیل عملکرد پیل سوختی، دو راهکار شبیه‌سازی عددی و پژوهش‌های آزمایشگاهی تا سال‌های اخیر پرکاربرد بوده‌اند. از پژوهش‌های آزمایشگاهی باتوجه به هزینه‌های سنگین تأمین مواد، راه‌اندازی سامانه و صرف زمان طولانی در انجام فرآیندها، استقبال کمتری در مقایسه با بررسی‌های عددی می‌گردد. با این حال، در پژوهش‌های عددی نیز، با توجه به لزوم در نظر گرفتن و حل معادلات غیرخطی و پیچیده ریاضی و همچنین فرآیندهای شیمیایی و فیزیکی گوناگون، بعضاً، فرآیندهای پیش‌بینی و

1. Haber- Bosch Process

2. Tamaru Kinetics Model

3 Temkin- Pyzhev

جریان هوای و دمای پیل سوختی با دو نوع سوخت ورودی هیدروژن و متان، پیش‌بینی گردید. نتایج حاصل حاکی از دقت مناسب پیش‌بینی و خطای محاسباتی بین یک تا چهار درصد برای عبارتهای خروجی مختلف، می‌باشد [۴].

میلوفسکی و همکارانش با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی، یک شبکه عصبی مصنوعی را مورد آموزش و آزمایش قرار دادند. در این پژوهش، دما و دبی جریان‌های ورودی به دسته^۱ پیل سوختی به‌عنوان عبارتهای ورودی و ولتاژ و جریان الکتریکی به‌عنوان عبارتهای خروجی انتخاب شدند. نتایج حاکی از دقت و سرعت بالای شبکه بوده و نشان می‌داد که بسته به در نظر گرفتن حالت‌های مختلف، حدود یک تا هفت درصد خطای محاسباتی وجود خواهد داشت [۵].

چایچانا و همکارانش، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با بازبای مستقیم درونی^۲ و سوخت ورودی شامل متان، هیدروژن و کربن مونوکسید را پیش‌بینی نمودند. دمای کاری، کسر مولی هیدروژن و متان در ولتاژهای اعمالی گوناگون به‌عنوان عبارتهای ورودی برای پیش‌بینی توان پیل سوختی انتخاب شده و پس از آموزش و آزمودن شبکه، نتایج بیانگر دقت مناسب و درصد خطای زیر یک درصد، می‌باشد [۶].

چدی، برخلاف مدل‌های مرسوم پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک که دارای دمای کاری بالا می‌باشند، دمای کاری متوسط را مورد مطالعه و بررسی قرار داد. باتوجه به ویژگی‌های هیدروژن در فرآیند تجزیه آمونیاک در دمای کاری متوسط، مدل سینتیکی تمکین-پژوف را استفاده نمود. نتایج نشان داد که ضمن امکان تولید توان مناسب، تنش‌های حرارتی در مقایسه

تحلیل سامانه را زمان‌بر و سخت می‌نماید. ازین‌رو، استفاده از هوش مصنوعی، برای پیش‌بینی دقیق و به‌صرفه عملکرد پیل سوختی در زمان مناسب، می‌تواند یک راهکار قابل اطمینان و مفید باشد. یادگیری ماشین، به‌عنوان یک موضوع کاربردی در حوزه هوش مصنوعی، شامل سه مرحله کلی، آموزش^۱، اعتبار سنجی و آزمودن^۲ می‌باشد. برای آموزش ماشین به‌منظور محاسبه و پیش‌بینی تابع‌های هدف، باید یک مجموعه داده‌های کافی، دقیق و قابل اعتماد در حالت‌های گوناگون تولید گردد. براین اساس، می‌بایست با تغییر عبارتهای ورودی انتخاب شده در بازه‌های کاربردی، اطلاعات لازم برای آموزش ماشین را ایجاد نمود.

در این پژوهش، با استفاده از هوش مصنوعی و دینامیک سیالات محاسباتی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای (مقارن محوری^۳) با سوخت آمونیاک و دمای کاری متوسط، بررسی می‌گردد. پس از شبیه‌سازی هندسه و تعیین معادلات حاکم باتوجه به وجود پیچیدگی‌های مختلف از جمله گستره دمای کاری، ترکیب سوخت ورودی، واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی، ویژگی‌های ترمودینامیکی گونه‌ها و مخلوط‌ها، ساختار فیزیکی و هندسی و ...، عبارتهای ورودی اثرگذار انتخاب شده و عملکرد پیل سوختی در حالت‌های گوناگون محاسبه می‌شود. سپس، فرآیند یادگیری ماشین با استفاده از الگوریتم شبکه عصبی عمیق^۴، انجام و سنجیده می‌شود. در ادامه، شماری از پژوهش‌های مرتبط با پیل سوختی و هوش مصنوعی، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

مروری بر پژوهش‌های پیشین

آریاگادا و همکارانش، پیش‌بینی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی^۵ مورد بررسی قرار گرفت. پس از آموزش شبکه با استفاده از داده‌های حاصل از یک مدل محاسباتی، توابع هدف گوناگون شامل جریان الکتریکی، سرعت

1. Train
2. Test
3. Axisymmetric
4. Deep Neural Network (DNN)
5. Artificial Neural Network (ANN)
6. Stack
7. Direct Internal Reforming (DIR)

سوختی اکسید جامد صفحه‌ای با سوخت آمونیاک، اثر حالت‌های گوناگون ورود سوخت و هوا بررسی نمودند، در این پژوهش، با استفاده از هوش مصنوعی و مطالعه پارامتریک، حالت بهینه بیشترین بازدهی و کمترین تنش حرارتی محاسبه گردید. نتایج نشان داد که بازدهی و عملکرد پیل سوختی در حالت جریان هم‌سو، کمتر از حالت‌های جریان ناهم‌سو و ضربدری می‌باشد [۱۲]. وایرو و همکارانش، با استفاده از یادگیری ماشین به شناسایی ایرادهای خطرناک در پیل سوختی اکسید جامد مورد استفاده در صنعت کشتیرانی پرداختند. در این پژوهش با استفاده از روش گرادیان تقویب شده درخت تصمیم پس از شبیه‌سازی عددی، عملکرد پیل سوختی و احتمال نشت هیدروژن با دقت مناسب مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت [۱۳]. بوکانیک و همکارانش به معرفی یک مدل جانشین با استفاده از هوش مصنوعی برای استفاده به جای معادله باتلر-والمر^{۱۰} اقدام نمودند [۱۴]. در این پژوهش، پس از گردآوری داده‌های آزمایشگاهی در دماهای گوناگون، با استفاده از یادگیری ماشین، تلفات ترمودینامیکی در الکتروود پیل سوختی با دقت مناسبی، پیش‌بینی گردید. اچاباری و همکارانش با سه الگوریتم یادگیری ماشین، عملکرد پیل سوختی پلیمری را بررسی نمودند. در این پژوهش از روش‌های ماشین بردار پشتیبان، شبکه عصبی و گرادیان تقویت شده برای پیش‌بینی ولتاژ-جریان استفاده گردید. نتایج حاکی از کارایی مناسب‌تر روش گرادیان تقویت شده پس از انتخاب عبارت‌های ورودی با روش کاهش ابعاد تحلیل شاخصه‌های اصلی هسته^{۱۱}، در

با دمای کاری بالا، به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد [۷]. ژو و همکارانش، با ترکیب یادگیری عمیق^۱ و شبیه‌سازی عددی به بهینه‌سازی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با سوخت متان پرداختند. داده‌ها با متغیرهای ورودی شامل دمای کاری، دبی جریان سوخت و هوا، تولید و برای آموزش شبکه به‌کار گرفته شدند. در پایان با پیش‌بینی عبارت‌های شیب دما و حرارت تولیدی و به‌کارگیری الگوریتم ژنتیک، عملکرد پیل سوختی در نقطه امن، بهینه‌سازی گردید [۸].

سوبوتیک و همکارانش، حالت‌های مختلف ساختار شبکه عصبی مصنوعی را به‌منظور بهبود عملکرد و به‌دست آوردن حالت بهینه، بر روی یک پیل سوختی اکسید جامد به‌کار بردند. برای آموزش شبکه ترکیبی از داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی عددی مورد استفاده قرار گرفته است. برای ارتقاء دقت پاسخ، عبارت‌های شبکه شامل تابع فعال‌سازی^۲، لایه‌های پنهان^۳، نورون‌های هر لایه^۴ و تعداد ایپاک‌ها^۵ تحت تغییر قرار گرفته تا شرایط بهینه برای پیش‌بینی عبارت‌های هدف، حاصل شود [۹]. منشادی و همکارانش با استفاده از روش حافظه طولانی کوتاه-مدت^۶ که از روش‌های یادگیری عمیق می‌باشد، توان الکتریکی توربین‌های بادی بی‌پره را پیش‌بینی نمودند. در این پژوهش، پس از شبیه‌سازی عددی و ایجاد داده‌های لازم، با در نظر گرفتن متغیرهای ورودی زمان، تندی باد، میزان انحراف توربین و نیروی درگ، مقدار توان تولیدی توربین پیش‌بینی گردید [۱۰]. سو و همکارانش، الگوریتم‌های متداول در زمینه یادگیری ماشین را در حوزه پیل سوختی بررسی نمودند. در این پژوهش، ضمن توضیح مزیت‌های استفاده از یادگیری ماشین به جای انجام کارهای آزمایشگاهی و عددی، روش‌های کاربردی شامل شبکه عصبی مصنوعی، ماشین بردار پشتیبان^۷، مدل جنگل تصادفی^۸ و درخت تصمیم^۹ تشریح گردید [۱۱]. عمر و همکارانش نخست با شبیه‌سازی پیل

1. Deep Learning

2. Activation Function

3. Hidden Layers

4. Neurons of Per Hidden Layer

5. Epochs

6. Long Short- Term Memory

7. Support Vector Machine (SVM)

8. Random Forest Model (RFM)

9. Decision Tree

10. Butler- Volmer

11. Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

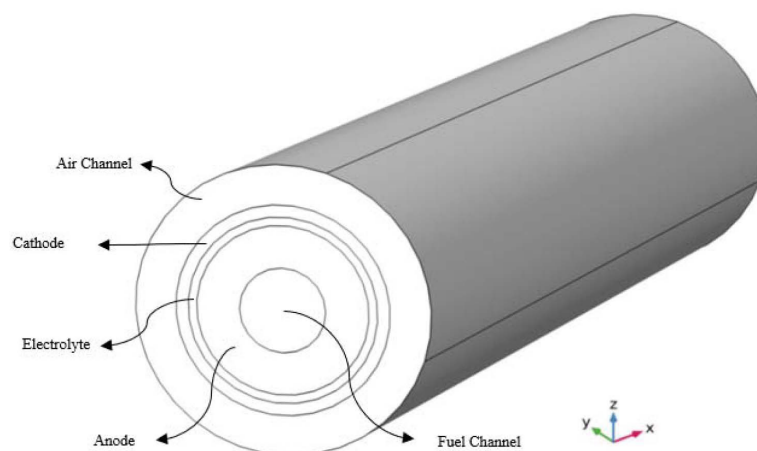
هندسه‌ها، فیزیک‌ها و معادلات غیرخطی گوناگون و پیچیده در پیل سوختی، منجر به صرف هزینه‌های سنگین محاسباتی و مدت زمان طولانی، می‌گردد. از این‌رو و باتوجه به اینکه تا کنون، کارآیی یادگیری ماشین برای پیش‌بینی عمل‌کرد پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک و دمای کاری متوسط، مورد بررسی قرار نگرفته است، در این پژوهش، توانایی و دقت الگوریتم شبکه عصبی به‌عنوان یکی از روش‌های شناخته شده و پرکاربرد یادگیری ماشین، برای پیش‌بینی عمل‌کرد پیل سوختی مورد بررسی و مطالعه قرار می‌گیرد. در همین راستا، داده‌های کافی برای آموزش و آزمودن ماشین، پس از مدل‌سازی، با تغییر عبارت‌های ورودی اثرگذار و انجام محاسبات عددی در حالت‌های گوناگون، تولید می‌گردد.

مدل‌سازی عددی

در این بخش، نخست، شبیه‌سازی عددی یک پیل سوختی اکسید جامد، توسعه پیدا کرده و پس از حل عددی، داده‌های لازم برای استفاده در فرآیند یادگیری ماشین، تولید می‌گردد. برای این منظور، هندسه سه‌بعدی پیل سوختی لوله‌ای مطابق با **شکل ۱** مدل‌سازی می‌گردد [۱۸].

مقایسه با روش‌های دیگر می‌باشد [۱۵]. وانگ و همکارانش، با استفاده از روش‌های شبکه عصبی و سطح پاسخ^۱ عملکرد و طراحی لایه نفوذ گاز^۲ در پیل سوختی پلیمری را مورد بررسی قرار دادند. همچنین، داده‌های لازم با استفاده از شبیه‌سازی عددی تولید شده است. نتایج نشان داد که زمانی که شمار نمونه‌ها برای آموزش ماشین اندک است، عملکرد روش سطح پاسخ مناسب است ولی با افزایش شمار نمونه‌ها، عملکرد شبکه عصبی بهبود قابل ملاحظه‌ای می‌یابد [۱۶]. مدهاوان و همکارانش، از روش‌های شبکه عصبی و تقویت گرادیان را در پیش‌بینی کیفیت روکش صفحه‌های پیل سوختی استفاده نمودند. پس از ایجاد داده‌های لازم از راه محاسبات عددی و پژوهش‌های میدانی، نتایج نشان داد که عملکرد یادگیری ماشین در پیش‌بینی تابع هدف اطمینان بخش و با دقت می‌باشد [۱۷].

همان‌گونه که در پژوهش‌های صورت گرفته، اشاره گردید، محاسبه و بررسی عملکرد پیل سوختی از اهداف اصلی در پژوهش‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های عددی می‌باشد. پژوهش‌های آزمایشگاهی باتوجه به سختی‌ها و پیچیدگی‌های ساخت و راه‌اندازی بستر آزمایش و چالش‌های اجرایی، زمان‌بر و گران قیمت می‌باشند. پژوهش‌های عددی نیز، با توجه به وجود



شکل ۱ هندسه سه‌بعدی پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای

1. Response Surface Methodology (RSM)
2. Gas Diffusion Layer (GDL)

فیزیک‌ها و معادلات مربوطه

باتوجه به جریان‌های سیال سوخت و هوا در کانال‌ها و محیط‌های متخلخل، واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی گونه‌ها، انتقال جرم، اثر تغییرات دما و همچنین جریان‌های الکتریکی، برای شبیه‌سازی عددی، می‌بایست، فیزیک‌ها و معادلات مربوطه تعریف و حل گردد. در این پژوهش، حل معادلات در حالت پایا می‌باشد و از معادله حالت گاز کامل برای بررسی رفتار گونه‌های موجود در پیل سوختی، استفاده شده است. در معادله بررسی رفتار سیال، جریان تراکم‌پذیر مفروض گردیده است. همچنین در تعریف ویژگی‌های ترمودینامیکی گونه‌ها و مخلوط، اثر کسر مولی، دما و فشار در نظر گرفته شده است.

سیال

برای بررسی رفتار سیال گازی شکل سوخت و هوا در کانال‌های آند و کاتد، معادله‌های بقای جرم و ممنتوم در حالت تراکم‌پذیر (عدد ماخ کوچکتر از ۰/۳) و آرام به‌صورت ذیل تعریف و حل شده است [۲۰]:

$$\nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (2)$$

$$\rho(\nabla \cdot \nabla)V = \nabla \cdot [-pI + K] + F \quad (3)$$

$$K = \mu(\nabla V + (\nabla V)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla V)I \quad (4)$$

در عبارات فوق، کمیت‌های ρ ، V ، F ، p و μ به‌ترتیب میدان سرعت، چگالی جریان سیال، نیروی حجمی وارده به سیال، میدان فشار و لزجت دینامیکی مخلوط جریان سیال می‌باشند.

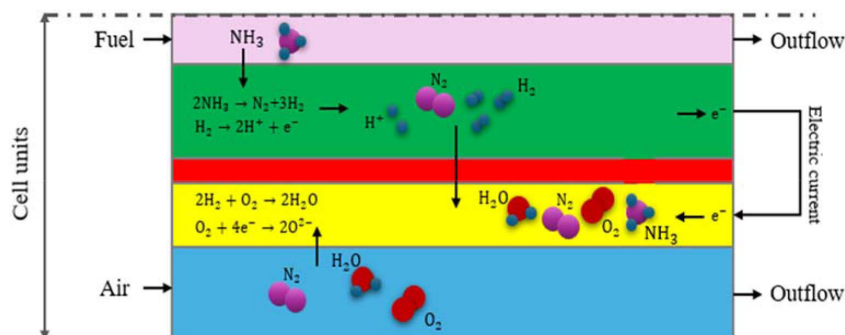
باتوجه به عملکرد پیل سوختی در دمای متوسط و سوخت عامل آمونیاک، از مدل سینتیکی تمکین-پژوف استفاده می‌گردد. براین اساس، جریان‌های آمونیاک و هوا به ترتیب از کانال‌های درونی و بیرونی، وارد محیط پیل سوختی شده و با گذشتن از الکترودهای آند و کاتد و انجام واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی، جریان الکتریکی برقرار می‌شود. واکنش شیمیایی تجزیه آمونیاک در محیط متخلخل آند مطابق ذیل می‌باشد [۱۹]:

$$r_{NH_3} = 6 \times 10^7 \exp\left(-\frac{95600}{RT}\right) \left(\frac{P_{NH_3}^2}{P_{H_2}^3}\right)^{0.209} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، r_{NH_3} نرخ انجام واکنش شیمیایی، P_{NH_3} و P_{H_2} به‌ترتیب فشارهای جزئی آمونیاک و هیدروژن و T و R به‌ترتیب دمای انجام واکنش و ثابت جهانی گازها می‌باشند. باتوجه به فرض امکان نشت الکترولیت، عبور گونه‌های مختلف از محیط متخلخل الکترولیت، امکان پذیر می‌باشد. در شکل ۲، به‌صورت دوبعدی، واکنش‌ها و گونه‌ها نمایش داده شده است [۱۸]. در جدول ۱ اندازه بخش‌های مختلف پیل سوختی نشان داده شده است.

جدول ۱ اندازه بخش‌های مختلف پیل سوختی

عبارت‌ها	اندازه (mm)
شعاع کانال سوخت	0.5×0.35
پهنای الکتروآند	0.35
پهنای الکترولیت	0.01
پهنای الکتروکاتد	0.06
پهنای کانال هوا	0.35
درازای پیل سوختی	10



شکل ۲ واکنش‌های شیمیایی، الکتروشیمیایی و گونه‌های پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک

$$D_{e,ik} = f_e(\varepsilon_p, \tau_F) D_{ik} \quad (10)$$

$$d_k = \nabla x_k + \frac{1}{p} [(x_k - \omega_k) \nabla p] \quad (11)$$

$$x_k = \frac{\omega_k}{M_k} M_n \quad (12)$$

$$M_n = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (13)$$

در عبارات فوق، کمیت‌های D_{ik} ، f_e ، $D_{e,ik}$ ، d_k ، M_i و M_n به ترتیب عامل محرک نفوذ، ضریب نفوذ دوتایی مؤثر، عامل انتقال مؤثر، پیچ خوردگی، ضریب نفوذ دوتایی، کسر مولی گونه‌ها، جرم مولی میانگین و جرم مولی گونه‌ها می‌باشند. کمیت f_e تابع دو مقدار تخلخل و پیچ خوردگی می‌باشد که در این پژوهش با فرض مدل براگمن، ضریب نفوذ دوتایی مؤثر مشخص می‌گردد.

$$f_e = \frac{\varepsilon_p}{\tau_F} \quad (14)$$

$$\tau_F = \varepsilon_p^{-\frac{1}{2}} \quad (15)$$

شار الکتریکی

واکنش‌های الکتروشیمیایی باعث ایجاد جریان‌های یونی و الکتریکی می‌گردد. برای بررسی جریان‌های تولید شده از معادله بقای شارژ (اهم) استفاده می‌گردد [۱۸]:

$$-\nabla \cdot (\sigma_e \nabla \phi_e) = j_e \quad (16)$$

$$-\nabla \cdot (\sigma_i \nabla \phi_i) = j_i \quad (17)$$

در روابط فوق، σ_e ، σ_i ، ϕ_e و ϕ_i به ترتیب معرف، رسانندگی الکترونی و یونی و پتانسیل‌های الکترونی و یونی می‌باشند. همچنین کمیت‌های j_e و j_i به ترتیب مشخص کننده چشمه یا چاه جریان‌های الکترونی یا یونی هستند که در پیل سوختی تولید یا مصرف می‌شوند. برای تعیین ارتباط بین جریان و پتانسیل اضافی فعال سازی از رابطه باتلر-والمر استفاده می‌گردد:

$$j = A_a i_0 \left(C_r \exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta\right) - C_0 \exp\left(\frac{\alpha_c F}{RT} \eta\right) \right) \quad (18)$$

باتوجه به انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی و شیمیایی در الکترودها، تغییرات جرم رخ می‌دهد و برای برای حل بقای ممتنم جریان سیال در محیط متخلخل رابطه دارسی-برینکمن تعریف گردیده است، براین اساس، برای تحلیل جریان‌های سیال در محیط متخلخل الکترودها و الکترولیت معادلات به قرار ذیل می‌باشند:

$$\nabla \cdot (\rho V) = S_m \quad (5)$$

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \rho(V \cdot \nabla) V - \frac{1}{\varepsilon_p} \nabla \cdot [-pI + K_1] + F - (\mu \kappa^{(-1)} + \frac{S_m}{\varepsilon_p^2}) V \quad (6)$$

$$K_1 = \frac{1}{\varepsilon_p} \mu (\nabla V + (\nabla V)^T) - \frac{2}{3} \mu \frac{1}{\varepsilon_p} (\nabla V) I \quad (7)$$

در عبارت‌های فوق، کمیت‌های K_1 ، S_m ، ε_p و κ به ترتیب تنسور تنش سطحی، چشمه جرمی، تخلخل محیط و ضریب نفوذپذیری می‌باشند.

گونه‌ها

جریان‌های سیال ورودی به کانال‌های آند و کاتد، شامل مخلوط‌های گازی می‌باشند. جریان هوا شامل گونه‌های بخار آب، اکسیژن و نیتروژن و جریان سوخت ورودی به صورت آمونیاک خالص می‌باشند. گاز آمونیاک پس از تجزیه، به صورت مخلوط نیتروژن، هیدروژن و آمونیاک خواهد گردید. برای تحلیل انتقال این گونه‌ها با توجه به ویژگی‌های ترموفیزیکی و سیالاتی مخلوط، از معادله ماکسول-استفان که مطابق ذیل می‌باشد، استفاده می‌شود [۷]:

$$\nabla \cdot J_i + \rho (V \cdot \nabla) \omega_i = R_i \quad (8)$$

همان‌طور که در رابطه (۸) مشاهده می‌گردد، تغییر و انتقال در وضعیت گونه‌ها شامل سه بخش تولید یا مصرف گونه‌ها، انتقال از طریق نفوذ و انتقال کپه‌ای می‌باشد. چشمه مولی گونه‌ها R_i ، کسر حجمی گونه‌ها و J_i عبارت شار جرمی نفوذ گونه‌ها می‌باشند [۲۱].

$$J_i = -(\rho \omega_i \sum_k D_{e,ik} d_k) \quad (9)$$

به صورت ذیل مشخص می گردد:

$$k_{\text{eff}} = \varepsilon_p k_f + (1 - \varepsilon_p) k_s \quad (22)$$

چشمه حرارتی Q_h شامل گرمای تولیدی یا مصرفی در بخش های مختلف پیل سوختی می باشد که به صورت ذیل تعریف می گردد:

$$\sigma_i^{\text{el}} (\nabla \phi_e^{\text{el}})^2 + Q_{\text{elec}} \quad \text{الکترولیت}$$

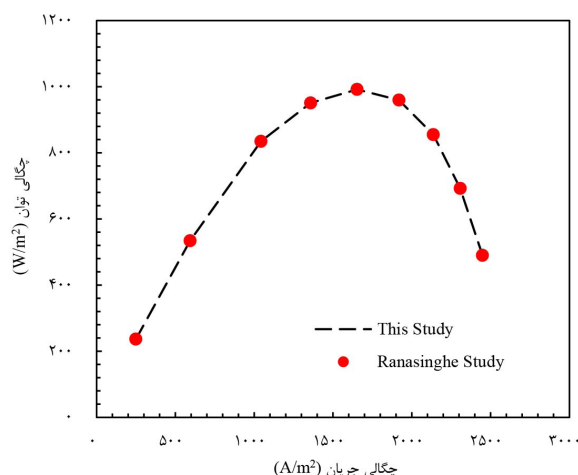
$$Q_h = \sigma_i^c (\nabla \phi_e^c)^2 + \sigma_e^c (\nabla \phi_e^c)^2 + i\eta \quad \text{کاتد} \quad (23)$$

$$\sigma_i^a (\nabla \phi_e^a)^2 + \sigma_e^a (\nabla \phi_e^a)^2 + i\eta + Q_{\text{chem}} \quad \text{آند}$$

در عبارت های فوق، $\sigma_i^{\text{el}} (\nabla \phi_e^{\text{el}})^2$ ، Q_{elec} ، $i\eta$ و Q_{chem} به ترتیب چشمه حرارتی حاصل از واکنش های الکتروشیمیایی، اتلاف حرارتی اهمی، تلفات حرارتی پتانسیل اضافی و واکنش شیمیایی ناشی از تجزیه آمونیاک می باشد. همچنین آنتالپی حرارتی واکنش گرماگیر تجزیه آمونیاک، ۴۶ kJ بر مول می باشد.

حل عددی و اعتبار سنجی

به منظور اعتبار سنجی حل عددی، پژوهش عددی راناسینگ و همکارانش شبیه سازی و بررسی گردید. نتایج نمودار چگالی توان - چگالی آمپر در نمودار **شکل ۳** با یکدیگر مقایسه شد. همان طور که در شکل واضح است، نتایج بر یکدیگر هم پوشانی دارند [۲۳].



شکل ۳ اعتبار سنجی

A_a ، i_0 ، F ، α_c ، α_a و η به ترتیب سطح فعال الکتروشیمیایی، چگالی جریان تبدیلی مرجع، ضریب انتقال شارژ آندی و کاتدی، ثابت فارادی و پتانسیل اضافی می باشند. همچنین عبارت های C_r و $0C$ به ترتیب نسبت های کاهش یافته و اکسایش شده غلظت گونه ها به مقادیر مرجع غلظت می باشند. پتانسیل اضافی فعال سازی (η) به صورت ذیل تعریف می شود:

$$\eta = \phi_e - \phi_i - V_{\text{ocv}} \quad (19)$$

V_{ocv} پتانسیل مدار باز می باشد که در لایه کاتالیستی آند برابر صفر و در کاتد به صورت ذیل تعیین می گردد:

$$V_{\text{ocv}} = 1.253 - 0.00024516T + \frac{RT}{2F} \ln \frac{p_{\text{H}_2} (p_{\text{O}_2})^2}{p_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (20)$$

انرژی

بررسی پیل سوختی به صورت غیر هم دما با توجه به پژوهش کیهانپور و قاسمی اثر قابل ملاحظه ای بر عملکرد پیل سوختی می گذارد. از طرفی وجود واکنش گرماگیر تجزیه آمونیاک، واکنش های الکتروشیمیایی و حرارت حاصل از جریان های درونی الکترولیت و الکتروود، اهمیت مطالعه توزیع دما را دوچندان می نماید. براین اساس تغییرات دمایی پیل سوختی در ولتاژهای کاری مختلف و محل بیشینه مقدار دما می تواند در طراحی و بررسی پیل سوختی مفید واقع شود. برای محاسبه توزیع دما، معادله انرژی در دو بخش ۱- سیال های گازی در کانال های سوخت و هوا و ۲- محیط های متخلخل الکتروود و الکترولیت (جامد و سیال) تعریف و حل می شود. معادله انرژی به صورت ذیل می باشد [۲۲]:

$$\rho C_p V \cdot \nabla T + \nabla \cdot (-k_{\text{eff}} \nabla T) = Q_h \quad (21)$$

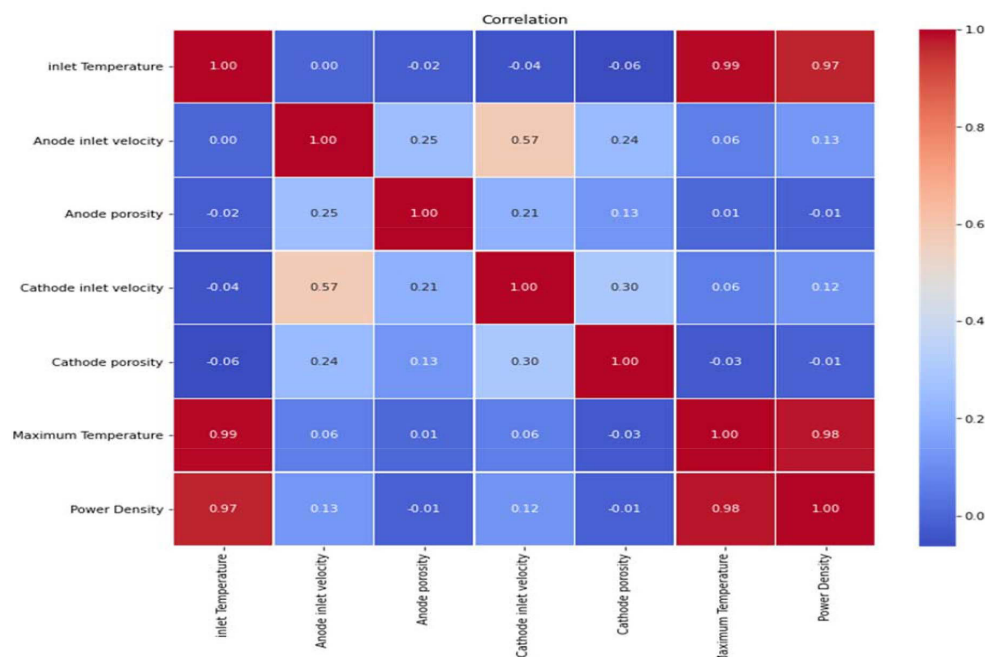
در معادله (۲۱)، Q_h و k_{eff} به ترتیب ظرفیت گرمایی ویژه مخلوط گازی، دما، چشمه های گرمایی حاصل از واکنش های شیمیایی و الکتروشیمیایی و ضریب رسانندگی گرمایی مؤثر می باشد. k_{eff}

یادگیری ماشین

پس از شبیه‌سازی و اعتبارسنجی عددی، عبارت‌های ورودی و خروجی انتخاب و داده‌های لازم جهت آموزش و آزمودن ماشین، تولید می‌گردد. عبارت‌های هدف برای پیش‌بینی توسط ماشین، چگالی توان و بیشینه دمای پیل سوختی می‌باشد، برای این منظور، عبارت‌های گوناگون ورودی که ضمن برخورداری از قابلیت تغییر، می‌توانند بر عبارت هدف نیز اثرگذار باشند، انتخاب می‌شوند. عبارت‌های ورودی به‌ترتیب، دمای اولیه پیل سوختی، تخلخل آند و کاتد و همچنین سرعت جریان‌های سوخت و هوا، در نظر گرفته می‌شوند.

جدول ۲ وضعیت آماری و کمی عبارت‌های ورودی و خروجی

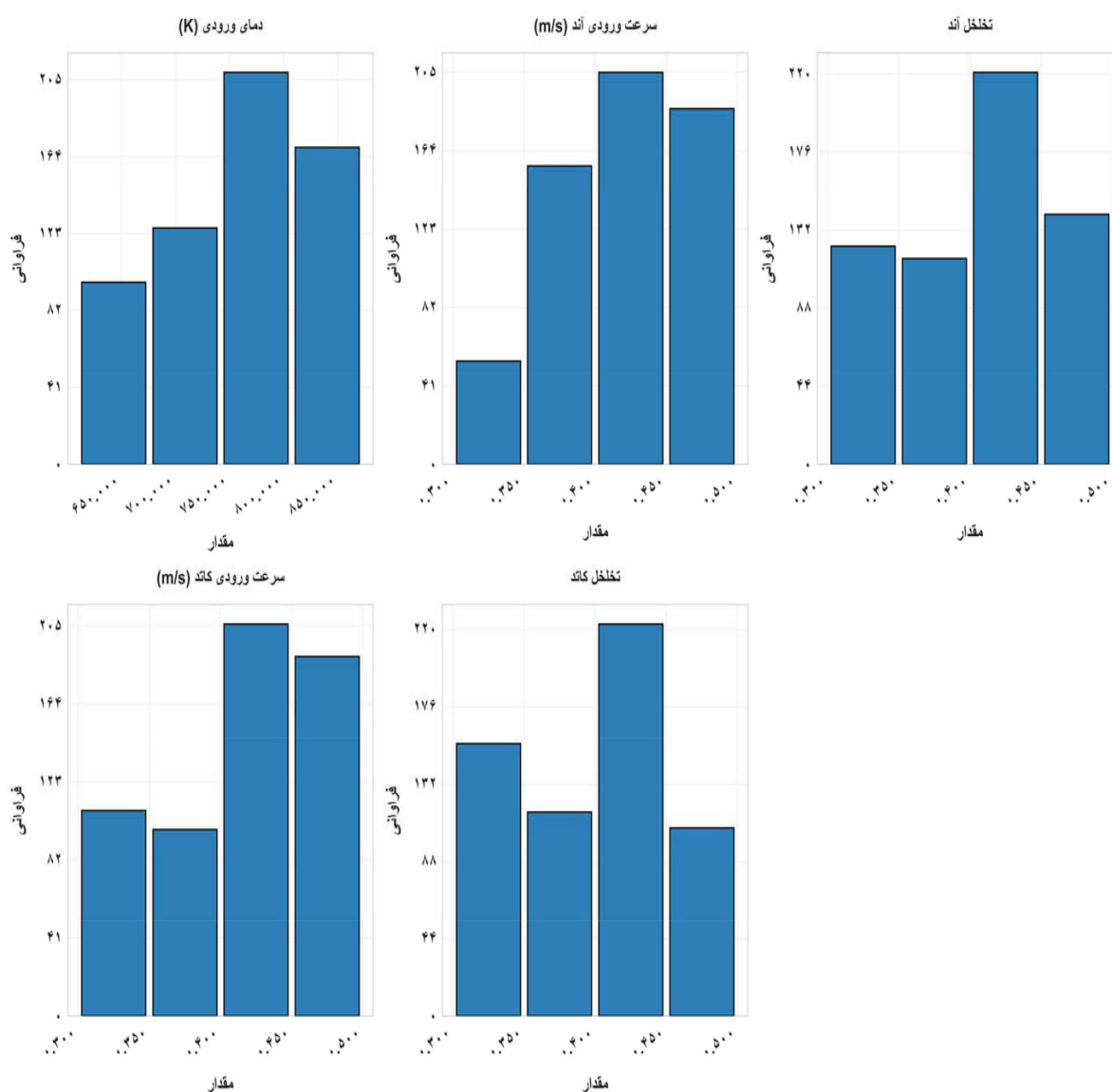
عبارت	دمای ورودی	سرعت سوخت ورودی	تخلخل آند	سرعت هوای ورودی	تخلخل کاتد	دمای بیشینه	چگالی توان
شمار داده	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱
میانگین	۷۶۷/۲۲۹۶	۰/۴۱۳۴	۰/۳۹۴۰	۰/۴۰۴۶	۰/۳۸۵۴	۷۳۸/۰۷۸۶۸۵۷	۰/۰۱۸۵
انحراف معیار	۷۰/۲۰۸۸	۰/۰۵۷۳	۰/۰۶۵۴	۰/۰۶۲۶	۰/۰۶۷۳	۵۷/۲۱۳۷	۰/۰۰۷۵
کمینه اندازه	۶۱۰	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۶۰۳/۹۳	۰/۰۰۱۵
بیشینه اندازه	۸۷۳	۰/۵	۰/۵	۰/۵	۰/۵	۸۳۵/۳۱۷۹	۰/۰۳۴۹



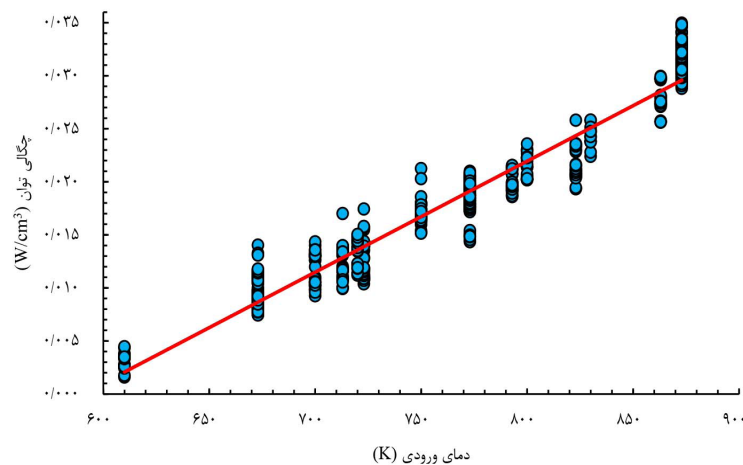
شکل ۴ هم‌بستگی میان داده‌های گوناگون

کلی، با افزایش دما، چگالی توان به‌طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد، به‌طوری‌که اثر سایر عبارت‌ها، کمتر دیده می‌شود. همچنین تغییرات اندک توان در یک دمای مشخص، نشان‌دهنده اثرگذاری اندک تغییرات سایر متغیرها می‌باشد. ازین‌رو، R^2 مربوط به تخمین خطی میان چگالی توان و دمای اولیه ورودی ۰/۹۴ می‌باشد که مقدار نسبتاً مناسبی می‌باشد.

در شکل ۵، توزیع داده‌ها نمایش داده شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، حالات گوناگون متغیرهای اثرگذار ورودی شامل دما، سرعت جریان‌ها و تخلخل الکترودها، طوری انتخاب شده‌اند که تمامی مقادیر ممکن و کاربردی در طراحی پیل سوختی را، دربرگیرند. در شکل ۶، نمودار ارتباط میان اندازه چگالی توان و تغییرات دمای ورودی نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که به‌طور



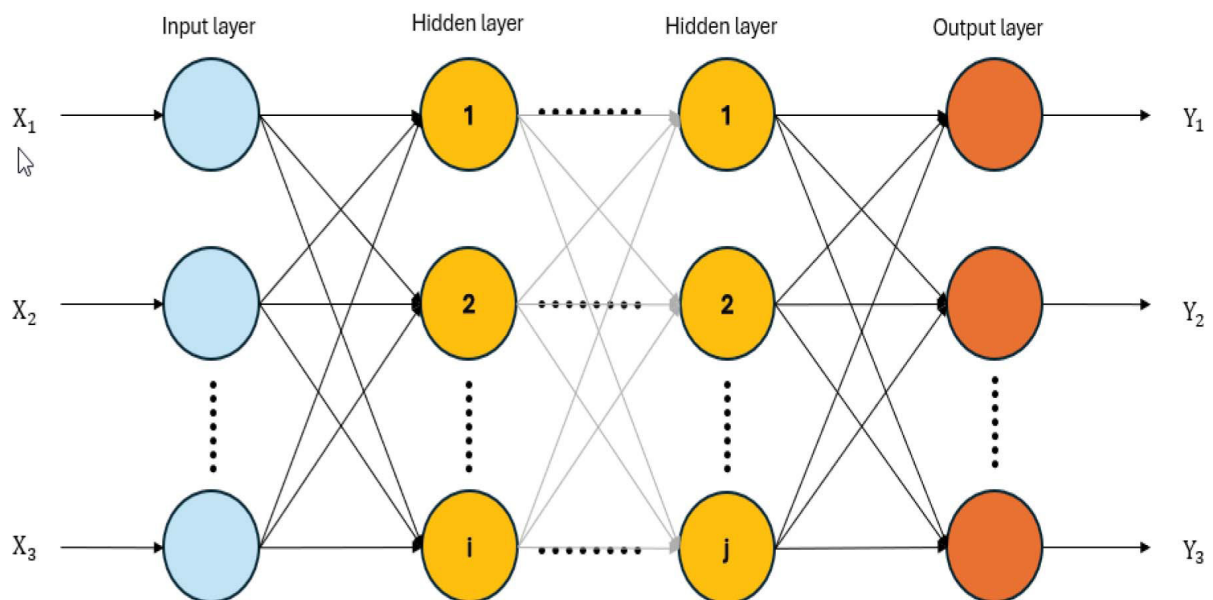
شکل ۵ توزیع داده‌ها



شکل ۶ ارتباط بین دما و چگالی توان

در لایه ورودی دریافت گردیده، پردازش می‌شود. هر نورون همه اطلاعات و داده‌ها را از لایه پیشین دریافت می‌نماید. شبکه عصبی‌ای که بیش از یک لایه پنهانی داشته باشد، شبکه عصبی عمیق نامیده می‌شود. هر نورون همه اطلاعات و داده‌ها را از لایه پیشین دریافت می‌نماید. ساختار یک شبکه عصبی عمیق در شکل ۷ نشان داده شده است.

یکی از روش‌های کاربردی در یادگیری ماشین، شبکه عصبی می‌باشد. یک شبکه عصبی از بخش‌های گوناگونی شامل لایه ورودی، لایه‌های پنهانی میانی و لایه خروجی تشکیل می‌گردد. در هر لایه تعدادی سلول عصبی (نورون) وجود دارد که وظیفه پردازش و تحلیل داده‌ها را دارند. در لایه‌های پنهانی میانی، با استفاده از یک تابع فعال‌سازی، اطلاعاتی که

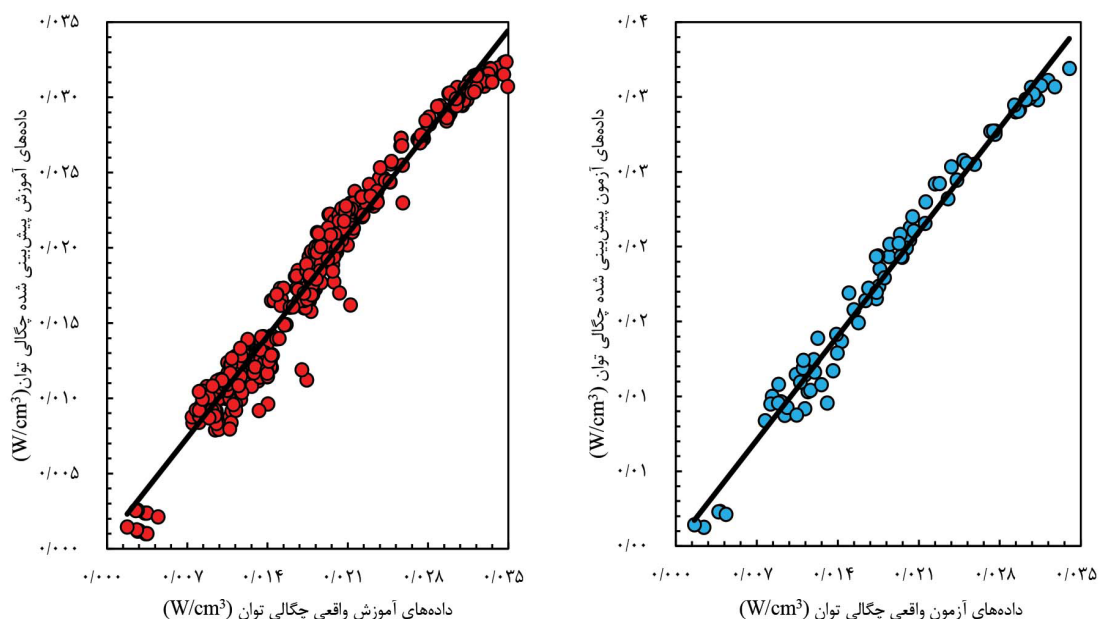


شکل ۷ ساختار شبکه عصبی عمیق

نتایج

بهینه‌سازی حافظه محدود برودن-فلچر-گلدفارب-شانو^۷ که از خانواده روش‌های شبه-نیوتن^۸ می‌باشد، گرادیان کاهشی تصادفی^۹ و تخمین لحظه تطبیقی^{۱۰}، به کار رفته است. برای آموزش ماشین ۸۵٪ داده‌ها اختصاص می‌یابد و باقیمانده برای آزمودن ماشین به کار می‌رود. حالت بهینه عملکرد ساختار شبکه عصبی در پیش‌بینی چگالی توان پیل سوختی، شامل تابع فعال‌ساز شناسایی، حل‌گر حافظه محدود برودن-فلچر-گلدفارب-شانو و دست کم پنج لایه پنهان میانی، می‌باشد. در شکل ۸، نتایج عملکرد ماشین در پیش‌بینی چگالی توان براساس مقادیر ورودی نشان داده شده است. هم‌پوشانی نقاط بر روی محور $Y=X$ نمایشگر عملکرد مناسب ماشین و نزدیکی مقادیر واقعی و پیش‌بینی شده به یکدیگر می‌باشد.

پس از تولید و ایجاد مجموعه داده‌های لازم توسط کد دینامیک سیالات محاسباتی برای آموزش ماشین، با استفاده از برنامه کدنویسی پایتون^۱ ساختار شبکه عصبی آماده‌سازی می‌گردد. به‌منظور یافتن حالت بهینه شبکه، حالت‌های مختلف برای پردازش اطلاعات، استفاده شده است. چهار تابع فعال‌سازی برای پردازش داده‌ها، شامل واحد خطی یکسوسازی شده^۲، شناسایی^۳، محاسبه‌ای^۴ و تانژانت هایپربولیک^۵ در نظر گرفته شده است. در شبکه عصبی هر نورون وزن و اهمیت ویژه‌ای در پیش‌بینی تابع هدف می‌تواند داشته باشد که با استفاده از یک حل‌گر^۶ محاسبه و بهینه‌سازی وزن هر سلول، انجام می‌شود. در این پژوهش، اثر سه حل‌گر متداول شامل الگوریتم



شکل ۸ نمودار رابطه بین داده‌های واقعی و پیش‌بینی شده

1. Python
2. Rectified Linear Unit (ReLU)
3. identity
4. Logistic
5. Tanh
6. Solver
7. Limited- Memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algorithm (LBFGS)
8. Quasi- Newton Method
9. Stochastic Gradient Descent (SGD)
- 10 Adaptive Moment Estimation (ADAM)

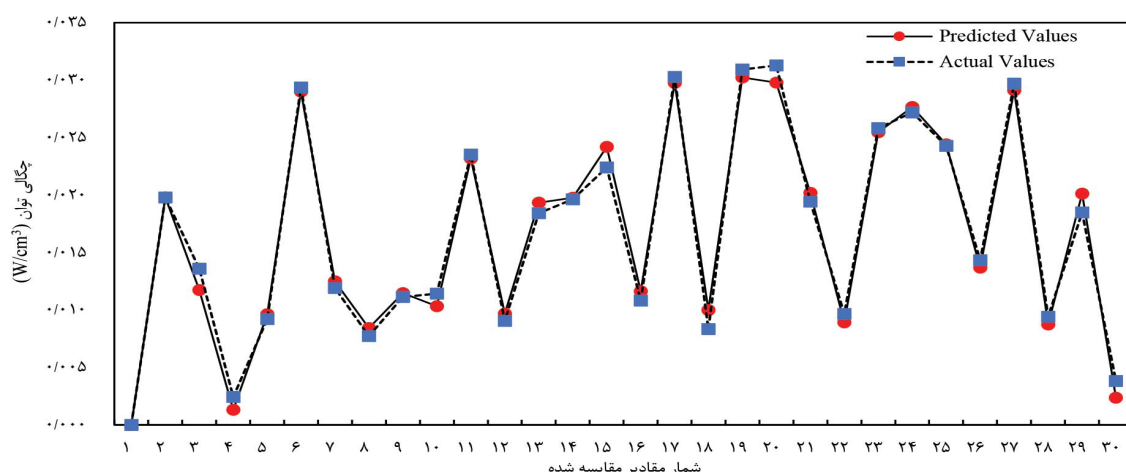
را بدون حل عددی یا آزمایشگاهی، پیش‌بینی کرد. در ادامه تابع هدف دیگر یعنی بیشینه دمای پیل سوختی، مورد ارزیابی و بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۱۰، نمودار ارتباط میان مقادیر واقعی و پیش‌بینی شده نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که دقت عملکرد ماشین در پیش‌بینی دمای بیشینه، به‌طور قابل ملاحظه‌ای، مناسب و بالا می‌باشد. دقت کافی و عملکرد مناسب در پیش‌بینی، باعث شده تا نقاط تقریباً بر نمودار $Y=X$ منطبق باشند.

خطاهای شبکه در پیش‌بینی چگالی توان پیل سوختی، در جدول ۳ نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که خطای جذر میانگین مربعات^۱، خطای مطلق میانگین^۲ و ضریب تعیین^۳ پیش‌بینی تابع هدف مقادیر مناسبی دارند.

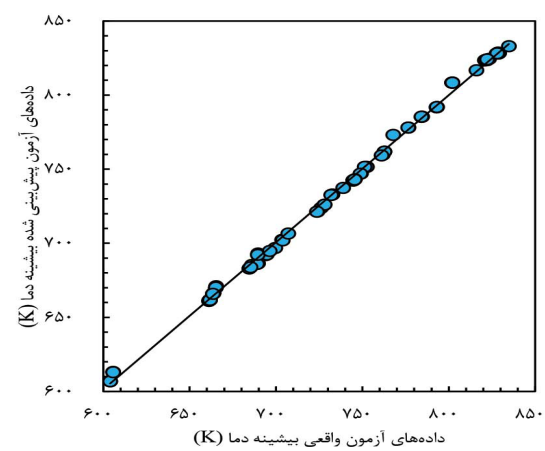
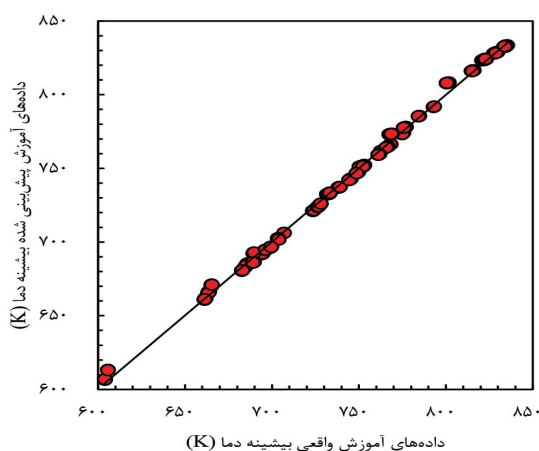
در شکل ۹، سی نقطه از مقادیر پیش‌بینی شده توسط ماشین با مقادیر اصلی حاصل از شبیه‌سازی عددی مقایسه گردیده است. مشاهده می‌گردد با تقریب و دقت قابل ملاحظه‌ای می‌توان چگالی توان پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک

جدول ۳ مقادیر خطاها و عبارتهای کیفی شبکه در پیش‌بینی چگالی توان

عبارتهای خطا در چگالی	RMSE_train	MAE_train	R ² _train	RMSE_test	MAE_test	R ² _test
توان پیل سوختی	۰/۰۰۱۳۵۱	۰/۰۰۱۰۹۱	۰/۹۶۷۱۵	۰/۰۰۱۰۹۳	۰/۰۰۰۸۶۷	۰/۹۸۲۱۵۶



شکل ۹ نمودار مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده و واقعی



شکل ۱۰ نمودار مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده و واقعی

1. Root Mean Square Error (RMSE)
2. Mean Absolute Error (MAE)
3. Coefficient of Determination (R²)

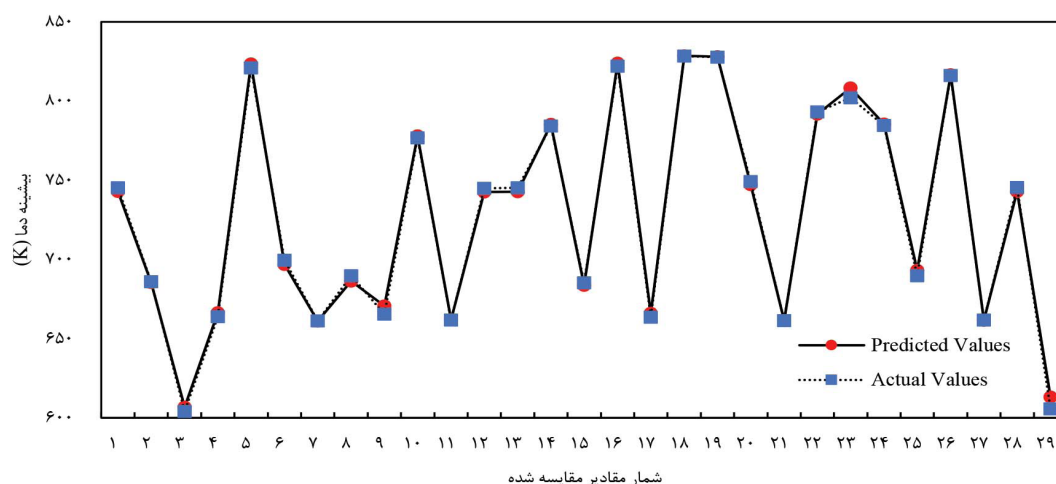
در جدول ۴، مقادیر مرتبط با عملکرد کیفی و خطای شبکه مصنوعی در پیش‌بینی بیشینه دمای پیل سوختی، نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد، ضریب تعیین نزدیک به یک شبکه نشان می‌دهد که شبکه با دقت قابل قبولی، می‌تواند دمای بیشینه پیل سوختی اکسید جامد با سوخت

آمونیاک را پیش‌بینی نماید.

در شکل ۱۱، سی نقطه پیش‌بینی شده از مجموع نقاط مورد استفاده در آزمودن کیفیت عملکرد شبکه به صورت تصادفی انتخاب و با مقادیر اصلی، مقایسه شده است. انطباق دو نمودار، حاکی از کیفیت بالای عملکرد شبکه در پیش‌بینی دمای بیشینه می‌باشد.

جدول ۴ مقادیر خطاها و عبارات‌های کیفی شبکه در پیش‌بینی بیشینه دما

عبارات‌های خطا در بیشینه دمای پیل سوختی	RMSE_train	MAE_train	R ² _train	RMSE_test	MAE_test	R ² _train
	۲/۶۱۳۳۸۸	۲/۰۶۴۱۷۴	۰/۹۹۷۸۱۷	۲/۸۱۱۷۱۸	۲/۱۵۶۹۷۱	۰/۹۹۸۰۴۶



شکل ۱۱ نمودار مقایسه مقادیر پیش‌بینی شده و واقعی دمای بیشینه

به دست آمد. سپس با آزمایش عملکرد شبکه با پانزده درصد داده باقیمانده، مشخص گردید که شبکه عصبی به صورت مناسبی می‌تواند تابع‌های هدف را پیش‌بینی نماید. همچنین مشاهده شده که دقت پیش‌بینی دمای بیشینه به نسبت چگالی توان، بیشتر می‌باشد. ضریب تعیین برای پیش‌بینی چگالی توان و دمای بیشینه توسط شبکه و براساس داده‌های آزمایشی، به ترتیب، ۹۸/۲ و ۹۹/۸٪ می‌باشد.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، پس از شبیه‌سازی پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک و دمای کاری متوسط، داده‌های لازم برای آموزش ماشین، محاسبه، دسته‌بندی و آماده‌سازی گردید. سپس، هشتاد و پنج درصد داده‌های حاصل، برای آموزش شبکه عصبی مورد استفاده قرار گرفته و حالت بهینه شبکه در پیش‌بینی عبارات‌های چگالی توان و دمای بیشینه،

مراجع

- [1]. Afif, A., Radenahmad, N., Cheok, Q., Shams, S., Kim, J. H., & Azad, A. K. (2016). Ammonia-fed fuel cells: a comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 60, 822-835.
- [2]. Fuerte, A., Valenzuela, R. X., Escudero, M. J., & Daza, L. (2009). Ammonia as efficient fuel for SOFC. *Journal of Power Sources*, 192(1), 170-174.
- [3]. Vilekar, S. A., Fishtik, I., & Datta, R. (2012). The peculiar catalytic sequence of the ammonia decomposition reaction and its steady-state kinetics. *Chemical Engineering Science*, 71, 333-344.
- [4]. Arriagada, J., Olausson, P., & Selimovic, A. (2002). Artificial neural network simulator for SOFC performance

- prediction. *Journal of Power Sources*, 112(1), 54-60.
- [5]. Milewski, J., & Świrski, K. (2009). Modelling the SOFC behaviours by artificial neural network. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(13), 5546-5553.
- [6]. Chaichana, K., Patcharavorachot, Y., Chutichai, B., Saebea, D., Assabumrungrat, S., & Arpornwichanop, A. (2012). Neural network hybrid model of a direct internal reforming solid oxide fuel cell. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(3), 2498-2508.
- [7]. Cheddie, D. F. (2018). Temkin-Pyzhev kinetics in intermediate temperature ammonia-fed solid oxide fuel cells (SOFCs). *Int J Power Energy Res*, 2(3), 43-51.
- [8]. Xu, H., Ma, J., Tan, P., Chen, B., Wu, Z., Zhang, Y., Wang, H., Xuan, J., & Ni, M. (2020). Towards online optimisation of solid oxide fuel cell performance: Combining deep learning with multi-physics simulation. *Energy and AI*, 1, 100003.
- [9]. Subotić, V., Eibl, M., & Hochenauer, C. (2021). Artificial intelligence for time-efficient prediction and optimization of solid oxide fuel cell performances. *Energy Conversion and Management*, 230, 113764.
- [10]. Manshadi, M., Ghassemi, M., Mousavi, S., Mosavi, A., & Kovacs, L. (2021). Predicting the Parameters of Vortex Bladeless Wind Turbine Using Deep Learning Method of Long Short-Term Memory. *Energies* 2021, 14, 4867.
- [11]. Su, D., Zheng, J., Ma, J., Dong, Z., Chen, Z., & Qin, Y. (2023). Application of machine learning in fuel cell research. *Energies*, 16(11), 4390.
- [12]. Omer, A., Rahimipetroudi, I., Rashid, K., Yang, J. B., Hong, J. E., & Dong, S. K. (2023). Design and performance optimization of a direct ammonia planar solid oxide fuel cell for high electrical efficiency. *Journal of Power Sources*, 573, 233135.
- [13]. Vairo, T., Cademartori, D., Clematis, D., Carpanese, M. P., & Fabiano, B. (2023). Solid oxide fuel cells for shipping: A machine learning model for early detection of hazardous system deviations. *Process Safety and Environmental Protection*, 172, 184-194.
- [14]. Buchanec, S., Gnatowski, M., Hasegawa, H., & Brus, G. (2023). A Surrogate Model of the Butler-Volmer Equation for the Prediction of Thermodynamic Losses of Solid Oxide Fuel Cell Electrode. *Energies*, 16(15), 5651.
- [15]. Echabarri, S., Do, P., Vu, H. C., & Bornand, B. (2024). Machine learning and Bayesian optimization for performance prediction of proton-exchange membrane fuel cells. *Energy and AI*, 100380.
- [16]. Wang, J., Jiang, H., Chen, G., Wang, H., Lu, L., Liu, J. & Xing, L. (2023). Integration of multi-physics and machine learning-based surrogate modelling approaches for multi-objective optimization of deformed GDL of PEM fuel cells. *Energy and AI*, 14, 100261.
- [17]. Madhavan, P. V., Shahgaldi, S., & Li, X. (2024). Modelling Anti-Corrosion Coating Performance of Metallic Bipolar Plates for PEM Fuel Cells: A Machine Learning Approach. *Energy and AI*, 17, 10.
- [۱۸]. کیهانپور، م.، قاسمی، م. و پوربگیان، م. (۱۴۰۲). بررسی پارامتریک پیل سوختی اکسید جامد تمام متخلخل لوله‌های با سوخت آمونیاک و مدل سینتیکی تمکین-پیژف، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۲، ۱۲۹-۱۱۰.
- [19]. Zhang, J., Xu, H., & Li, W. (2005). Kinetic study of NH₃ decomposition over Ni nanoparticles: The role of La promoter, structure sensitivity and compensation effect. *Applied Catalysis A: General*, 296(2), 257-267.
- [۲۰]. کیهانپور، م. و قاسمی، م. (۱۴۰۱). بررسی سه بعدی کارکرد پیل سوختی پلیمری لوله ای با فرض برهم کنش سیال - جامد - گرما، روش‌های عددی در مهندسی، ۴۱، ۷۹-۹۹.
- [۲۱]. کیهانپور، م. و قاسمی، م. (۱۴۰۰). شبیه سازی سه بعدی اثر هندسه و توزیع دما بر عملکرد پیل سوختی اکسید جامد، مکانیک سیالات و آیرودینامیک امام حسین (ع)، ۱۰، ۲، ۱۸۳-۱۶۹.
- [22]. Incropera, F. P., DeWitt, D. P., Bergman, T. L., & Lavine, A. S. (1996). *Fundamentals of heat and mass transfer* (Vol. 6). Wiley New York, 1-900.
- [23]. Ranasinghe, S. N., & Middleton, P. H. (2017). Modelling of single cell solid oxide fuel cells using COMSOL multiphysics. 2017 IEEE International Conference on Environment and Electrical Engineering and 2017 IEEE Industrial and Commercial Power Systems Europe (EEEIC/I&CPS Europe), Milan, Italy, 1-6.
- [24]. Osipyan, H., Edwards, B. I., & Cheok, A. D. (2022). *Deep neural network applications*. CRC Press, 1-150.



Application of Computational Fluid Dynamics and Machine Learning in Predicting Performance of Tubular Solid Oxide Fuel Cell Ammonia Fuelled

Mahdi Keyhanpour* and Majid Ghassemi

Department of Mechanical Engineering, K. N. T. University of Technology, Tehran, Iran

va.kiarostami@iau.ac.ir

DOI: 10.22078/pr.2024.5446.3424

Received: May 05, 2024

Accepted: September 14, 2024

Introduction

In recent decades, the growing global population and corresponding surge in energy demand have raised significant concerns worldwide. With the depletion of fossil fuel resources and their environmental impacts, research has increasingly focused on clean, sustainable energy alternatives. Solid oxide fuel cells (SOFCs) are a promising technology for converting chemical energy into electricity with high efficiency and minimal environmental footprint. Among SOFC variants, tubular SOFCs operating at intermediate temperatures (400–700 °C) offer advantages such as structural simplicity, cost-effectiveness, and fuel flexibility, including compatibility with hydrogen, carbon monoxide, biomass, and ammonia [1]. While hydrogen is an ideal fuel due to its electrochemical efficiency and zero carbon emissions, challenges in storage, transportation, and low volumetric energy density have spurred interest in alternative fuels like ammonia. Ammonia stands out for its ease of production, storage, high volumetric energy density (108 kg/m³ in liquid form, surpassing liquid hydrogen's 72 kg/m³), and carbon-free combustion. However, conventional ammonia production via the Haber-Bosch process contributes 1% of global CO₂ emissions, underscoring the need for sustainable synthesis methods, such as recovery from wastewater. Iran, ranking 14th globally in ammonia production (2.5 million tons annually), holds significant potential for leveraging this resource in energy applications.

Recent advancements in SOFC research emphasize moderate-temperature operation and alternative fuels, necessitating updated kinetic models like the Temkin-Pyzhev framework for ammonia decomposition. Traditional numerical and experimental approaches face high computational costs and time constraints, driving interest in machine learning (ML) as a cost-effective, rapid predictive tool [2].

Literature Review and Objectives

Prior studies have explored ML applications in SOFC performance prediction. Moreover, Ariagadda et al. used artificial neural networks (ANNs) to forecast electrical current and airflow in hydrogen/methane-fueled SOFCs, achieving 1–4% error rates [3]. Moreover, Milovski et al. validated ANNs with experimental data, predicting voltage and current with 1–7% error [4]. Furthermore, Cheddie demonstrated ammonia-fueled SOFCs at moderate temperatures using the Temkin-Pyzhev model, reducing thermal stresses compared to high-temperature systems [5]. Also, Zhou et al. combined deep learning and genetic algorithms to optimize methane-fueled SOFC performance [6], while Madhawan et. al. applied gradient-boosted trees to predict fuel cell coating quality [7]. Despite progress, no study has addressed ML-based performance prediction for ammonia-fueled tubular SOFCs at moderate temperatures. This research bridges this gap by integrating computational fluid dynamics (CFD) simulations

with deep neural networks (DNNs) to model a tubular SOFC's electrochemical and thermochemical behavior. Moreover, key variables—temperature, fuel composition, and flow dynamics—are analyzed to generate training data, enabling the DNN to predict power output and efficiency. By circumventing the computational and experimental burdens of traditional methods, this approach aims to deliver a reliable, efficient tool for optimizing SOFC performance, advancing the transition to sustainable energy systems.

Materials and Methods

The numerical modeling of ammonia fueled SOFC operating at intermediate temperatures was developed using a two-dimensional axisymmetric geometry, shown in Fig. 1.

The Temkin-Pyzhev kinetic model governed ammonia decomposition in the porous anode, defined by the reaction rate equation:

$$r_{\text{NH}_3} = 6 \times 10^7 \exp\left(-\frac{95600}{RT}\right) \left(\frac{P_{\text{NH}_3}^2}{P_{\text{H}_2}^3}\right)^{0.209} \quad (1)$$

where P_{NH_3} and P_{H_2} are partial pressures, T is temperature, and R is the universal gas constant. The dimensions of the various fuel cell components are shown in Table 1, including fuel/air channels, porous electrodes and an electrolyte.

Table 1 The dimensions of the various fuel cell components

Parameters	Size (mm)
Fuel channel radius	0.5 * 0.35
Anode electrode width	0.35
Electrolyte width	0.01
Cathode electrode width	0.06
Air channel width	0.35
Fuel cell length	10

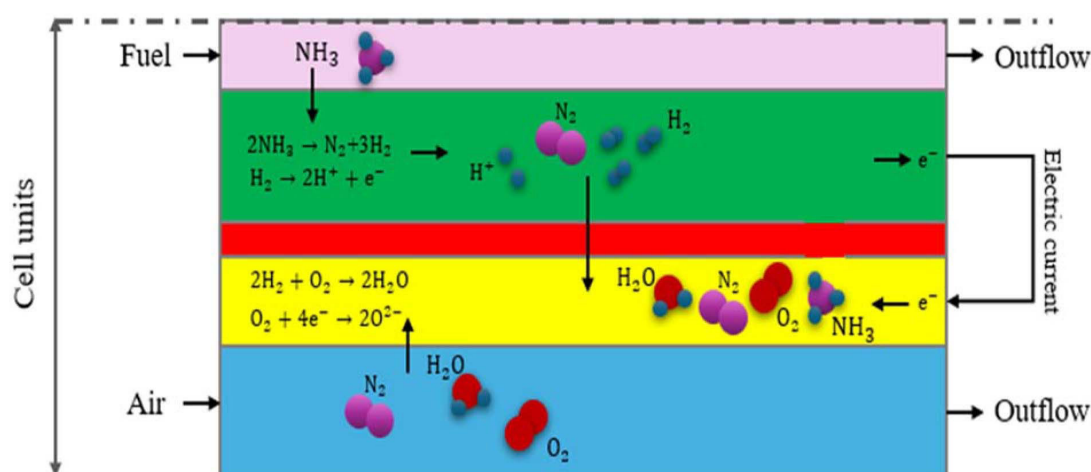


Fig. 1 All reactions and species in ammonia fueled SOFC.

Multiphysics governing equations were solved under steady-state conditions: fluid flow (compressible Navier-Stokes with Darcy-Brinkman corrections for porous media), species transport (Maxwell-Stefan diffusion with Bruggeman correction), charge conservation (Ohm's law coupled with Butler-Volmer kinetics), and energy balance (non-isothermal heat transfer with source terms from electrochemical/chemical reactions). Electrochemical heat sources included ohmic losses, activation overpotential, and endothermic ammonia decomposition.

Machine Learning Framework

A dataset of 601 simulations was generated by varying input parameters: inlet temperature (610–873 K), fuel/air flow velocities (0.3–0.5 m/s), and electrode porosities (0.3–0.5). Furthermore, output targets included power density and maximum cell temperature. After generating and creating the necessary dataset by

the computational fluid dynamics code for machine training, the neural network structure is prepared using the Python coding program. Moreover, the correlation between parameters, using the Pearson correlation coefficient, is shown in Fig. 2. It is observed that the fuel cell inlet temperature has the most relationship and effect on the fuel cell power density

After generating and creating the necessary dataset by the computational fluid dynamics code for machine training, the neural network structure is prepared using the Python coding program. Moreover, to find the optimal state of the network, different states for information processing have been used. Furthermore, four activation functions have been considered for data processing, including the rectified linear unit (ReLU), identity, logistic and hyperbolic tangent. In the neural network, each neuron can have a special weight and importance in predicting the objective function, which is calculated and optimized using a solver to calculate and optimize the weight of each cell.

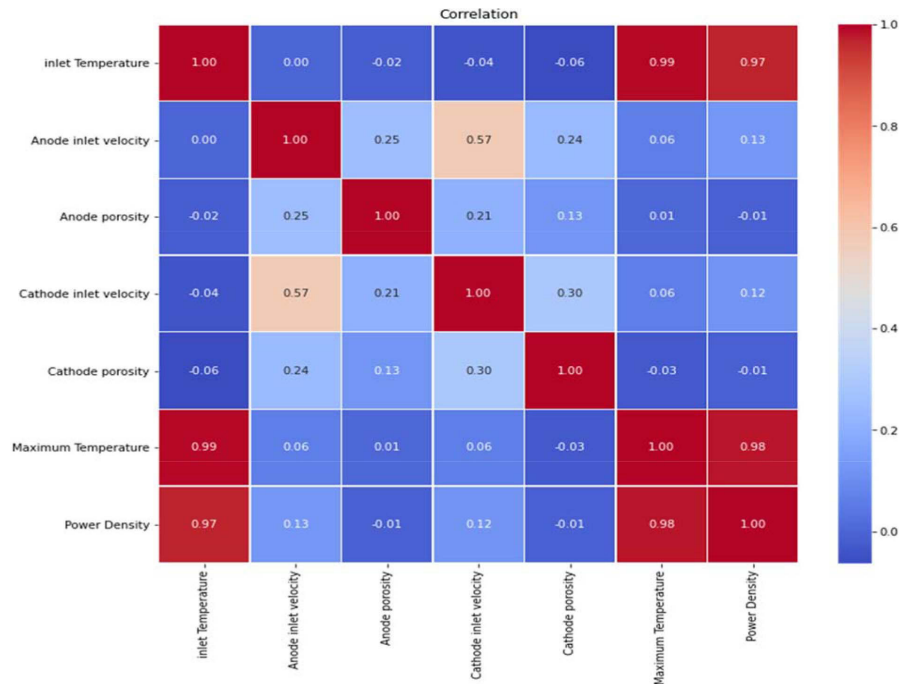


Fig. 2 Pearson correlation coefficient between parameters.

Results and Discussion

In this research, the effect of three common solvers, including the Limited- Memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algorithm (LBFGS) finite memory optimization algorithm, which is from the family of quasi-Newton methods, stochastic gradient descent (SGD), and adaptive moment estimation (ADAM), has been used. Eighty-five percent of the data are allocated for machine training, and the remainder is used for testing the machine. The optimal performance of the neural network structure in predicting the power density of a fuel cell includes the identity activation function, the LBFGS solver, and at least five middle hidden

layers. Fig. 3 shows the performance of the machine in predicting the power density and maximum temperature of the fuel cell. In Fig. 3, the overlap of the predicted with the actual data indicates the accuracy of the machine. As can be seen, the machine predicts the maximum temperature more accurately, which causes the points on the $y=x$ line to overlap more. For power density prediction, the model demonstrated a root mean square error (RMSE) of 0.001093 and a mean absolute error (MAE) of 0.000867 on the test set, with a coefficient of determination (R^2) of 0.982. Maximum temperature prediction exhibited even higher accuracy, yielding an RMSE of 2.81, MAE of 2.16, and R^2 of 0.998.

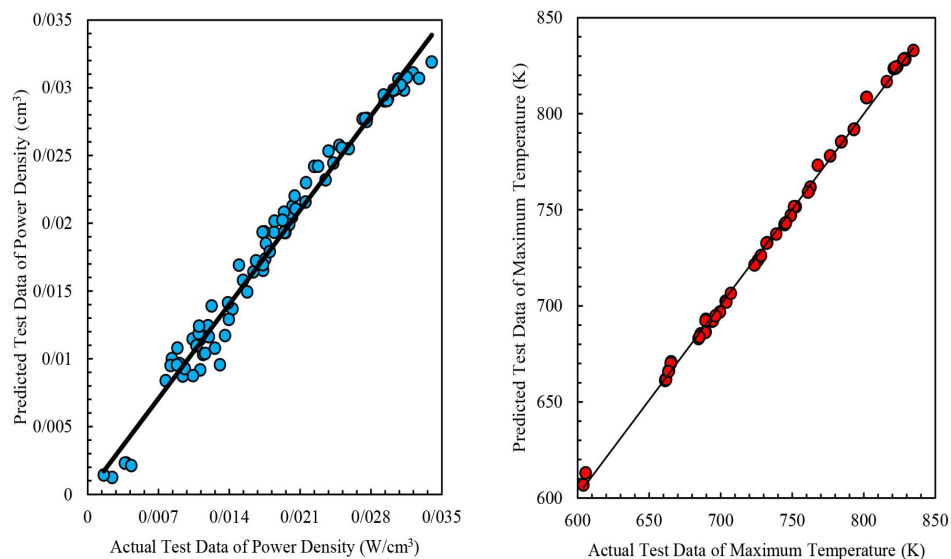


Fig. 3 Machine Performance in predicting Power Density and Maximum Temperature.

Conclusions

In this study, we successfully integrated CFD simulations with deep learning to predict the performance of an intermediate-temperature ammonia-fueled SOFC. Moreover, the DNN achieved exceptional accuracy, with test-set R^2 values of 98.2% for power density and 99.8% for maximum temperature, validating its reliability as a surrogate model. The higher precision in temperature prediction underscores the dominance of inlet temperature over velocity and porosity variations.

Nomenclatures

ADAM: Adaptive moment estimation

CFD: Computational fluid dynamics

DNNs: Deep neural networks

LBFGS: Limited-memory Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno algorithm

IT-SOFC: Intermediate temperature solid oxide fuel cell

MAE: Mean absolute error

RMSE: Root mean square error

SGD: Stochastic gradient descent

References

1. Afif, A., Radenahmad, N., Cheok, Q., Shams, S., Kim, J. H., & Azad, A. K. (2016). Ammonia-fed fuel cells: a comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 60, 822-835.
2. Arriagada, J., Olausson, P., & Selimovic, A. (2002). Artificial neural network simulator for SOFC performance prediction. *Journal of Power Sources*, 112(1), 54-60.
3. Cheddle, D. F. (2018). Temkin-Pyzhev kinetics in intermediate temperature ammonia-fed solid oxide fuel cells (SOFCs). *Int J Power Energy Res*, 2(3), 43-51.
4. Fuerte, A., Valenzuela, R. X., Escudero, M. J., & Daza, L. (2009). Ammonia as efficient fuel for SOFC. *Journal of Power Sources*, 192(1), 170-174.
5. Madhavan, P. V., Shahgaldi, S., & Li, X. (2024). Modelling Anti-Corrosion Coating Performance of Metallic Bipolar Plates for PEM Fuel Cells: A Machine Learning Approach. *Energy and AI*, 17, 10
6. Milewski, J., & Świrski, K. (2009). Modelling the SOFC behaviours by artificial neural network. *International Journal of Hydrogen Energy*, 34(13), 5546-5553.
7. Xu, H., Ma, J., Tan, P., Chen, B., Wu, Z., Zhang, Y., Wang, H., Xuan, J., & Ni, M. (2020). Towards online optimisation of solid oxide fuel cell performance: Combining deep learning with multi-physics simulation. *Energy and AI*, 1, 100003.