

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

مهدی کیهانپور^{۱*}، مجید قاسمی^۲

۱- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر طوسی

۲- استاد گروه مهندسی مکانیک تبدیل انرژی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیر طوسی

kasra.keyhanpoor@gmail.com

چکیده:

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

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

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

Abstract:

In this research, an ammonia fuelled intermediate temperature solid oxide fuel cell (IT-SOFC) has been simulated and performance evaluated by computational fluid dynamics and machine learning. First, the geometry of the problem is modeled in an axisymmetric manner and the equations including conservation of mass, momentum, species, energy and electric charge are defined, coupled and solved using a finite element numerical code. Then, to check the machine learning algorithm, terms of power density and maximum temperature are selected as objective functions and terms of input temperature, porosity of electrodes and velocity of fuel and air flows are selected as influencing variables. After generating the adequate data by repeating the numerical solution six hundred and one times in different cases of the input parameters, the machine learning process begins by using eighty five percent of the data on the different structures of the deep neural network algorithm. The results show that in the optimal structure of the algorithm, the performance of the machine in predicting the objective functions is appropriate and acceptable. Therefore, R^2 of the machine in predicting the maximum temperature and power density functions are 0.99 and 0.98, respectively.

Key Words: Solid Oxide Fuel Cell, Ammonia, Computational Fluid Dynamics, Machine Learning, Deep Neural Network

فهرست علائم

عامل محرک انتقال به شیوه نفوذ (1/m)	d_k	میدان سرعت (m/s)	V
جرم مولی (g/mol)	M_n	چگالی (kg/m^3)	ρ
کسر مولی	x_k	لزجت دینامیکی (Pa.s)	μ
ضریب نفوذ دو تایی (m^2/s)	D_{ik}	فشار (Pa)	P
ضریب تعیین عملکرد	R^2	تخلخل	ϵ_p
میانگین خطای مطلق	MAE	ریشه میانگین مربعات خطا	RMSE
چگالی جریان الکتریکی (A/m^3)	i	نفوذ پذیری (m^2)	κ
تعداد الکترون های واکنش	n	چشمه جرمی ($kg/m^3 \cdot s$)	S_m
ثابت فارادی (C/mol)	F	کسر جرمی	ω_i
رسانندگی یونی (siemens/m)	σ_i	شار جرمی نفوذ ($kg/m^2 \cdot s$)	j_i
پتانسیل یونی (V)	ϕ_i	پتانسیل اضافی (V)	η
پتانسیل الکترونی (V)	ϕ_e	جریان الکترونی (A/m^3)	j_e
چگالی جریان تبادلی مرجع (A/m^2)	i_0	جریان یونی (A/m^3)	j_i
رسانندگی الکترونی (siemens/m)	σ_e	ضریب انتقال الکترون کاندی	α_c
سطح ویژه (m^2/m^3)	A_a	ضریب انتقال الکترون آندی	α_a
دما (K)	T	پتانسیل مدار باز (V)	V_{OCV}
فشار جزئی اکسیژن (Pa)	p_{O_2}	ثابت جهانی گازها (J/mol.K)	R
ظرفیت گرمایی ویژه (J/kg.K)	C_p	رسانندگی گرمایی (W/m.K)	k
چشمه گرمایی (W/m^3)	Q	فشار جزئی آب (Pa)	P_{H_2O}
ضریب نفوذ دو تایی مؤثر (m^2/s)	$D_{e,ik}$	فشار جزئی هیدروژن (Pa)	P_{H_2}
پیچ خوردگی	τ_F	فشار جزئی آمونیاک (Pa)	P_{NH_3}
چشمه مولی ($mol/m^3 \cdot s$)	R_i	نرخ واکنش تجزیه آمونیاک ($mol/m^3 \cdot s$)	r_{NH_3}

۱- 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 به‌عنوان 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 درجه سانتی‌گراد، دارای ساختار ساده و مقرون به‌صرفه و همچنین انعطاف در برابر سوخت‌های ورودی مختلف از جمله هیدروژن، کربن مونوکسید، کربن دی‌اکسید، زیست توده، آمونیاک و ... می‌باشد. هیدروژن با توجه به سینتیک الکتروشیمیایی بالا و انتشار صرفاً بخار آب به‌عنوان 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، به‌عنوان یک سوخت جایگزین مناسب برای هیدروژن به‌منظور 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 (۱۰۸ کیلوگرم بر مترمکعب) نسبت به هیدروژن مایع (۷۲ کیلوگرم بر مترمکعب) بیشتر می‌باشد.

امروزه درصد قابل توجهی از آمونیاک طی فرآیند هابر-بوش^۱ تولید می‌شود که حاصل آن ۱٪ از انتشار جهانی گاز کربن دی‌اکسید 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 در خصوص 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]. از این رو، 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 در سال ۲۰۱۲ برای دمای کاری متوسط (تا ۶۶۰ درجه سانتی‌گراد) معرفی گردید [۳]. برای تحلیل عملکرد پیل سوختی، دو راهکار شبیه‌سازی عددی و پژوهش‌های آزمایشگاهی تا سال‌های اخیر پرکاربرد بوده‌اند. از پژوهش‌های آزمایشگاهی با توجه 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 تحلیل سامانه را زمان‌بر و سخت

¹ Haber- Bosch Process

² Tamaru Kinetics Model

³ Temkin- Pyzhev

می‌نماید. از این رو، استفاده از هوش مصنوعی، برای پیش بینی 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^۴، اعتبار سنجی و آزمودن^۵ می‌باشد. برای آموزش ماشین به‌منظور محاسبه و پیش بینی تابع‌های هدف، باید یک مجموعه داده‌های کافی، دقیق و قابل اعتماد در حالت‌های گوناگون تولید گردد. بر این 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 عمل کرد پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای (مقارن محوری^۶) 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 عمل کرد پیل سوختی در حالت‌های گوناگون محاسبه می‌شود. سپس، فرآیند یادگیری ماشین با استفاده از الگوریتم شبکه عصبی عمیق^۷، انجام و سنجیده می‌شود. در ادامه، شماری از پژوهش‌های مرتبط با پیل سوختی و هوش مصنوعی، مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲- مروری بر پژوهش‌های پیشین:

آریاگادا و همکارانش در سال ۲۰۰۲، پیش بینی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی^۸ مورد بررسی قرار گرفت. پس از آموزش شبکه با استفاده از داده‌های حاصل از یک مدل محاسباتی، توابع هدف گوناگون شامل جریان الکتریکی، سرعت جریان هوای و دمای پیل سوختی با دو نوع سوخت ورودی هیدروژن و متان، پیش بینی گردید. نتایج حاصل حاکی از دقت مناسب پیش بینی و خطای محاسباتی بین یک تا چهار درصد برای عبارت‌های خروجی مختلف، می‌باشد [۴]. میلوفسکی و همکارانش در سال ۲۰۰۹ 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^۹ 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 در سال ۲۰۱۲، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با بازیابی مستقیم درونی^{۱۰} و سوخت ورودی شامل متان، هیدروژن و کربن مونوکسید را پیش بینی نمودند. دمای کاری، کسر مولی هیدروژن و متان در ولتاژهای اعمالی گوناگون به‌عنوان عبارت‌های ورودی برای پیش بینی 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 در سال ۲۰۱۸، 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 با دمای کاری بالا، به‌طور قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌یابد [۷]. ژو و همکارانش در سال ۲۰۲۰، با ترکیب یادگیری عمیق^{۱۱} 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

⁴ Train

⁵ Test

⁶ Axisymmetric

⁷ Deep Neural Network (DNN)

⁸ Artificial Neural Network (ANN)

⁹ Stack

¹⁰ Direct Internal Reforming (DIR)

¹¹ Deep Learning

گرفته شدند. در پایان با پیش بینی عبارت‌های شیب دما و حرارت تولیدی و به‌کارگیری الگوریتم ژنتیک، عملکرد پیل سوختی در نقطه امن، بهینه سازی گردید [۸]. سوبوتیک و همکارانش در سال ۲۰۲۱، 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^{۱۲}، لایه‌های پنهان^{۱۳}، نورون‌های هر لایه^{۱۴} و تعداد اپی‌اک‌ها^{۱۵} تحت تغییر قرار گرفته تا شرایط بهینه برای پیش بینی عبارت‌های هدف، حاصل شود [۹]. منشادی و همکارانش در سال ۲۰۲۱ با استفاده از روش حافظه طولانی کوتاه- مدت^{۱۶} که از روش‌های یادگیری عمیق می‌باشد، توان الکتریکی توربین‌های بادی بی‌پره را پیش بینی 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 پیش بینی گردید [۱۰]. سو و همکارانش در سال ۲۰۲۳، 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^{۱۷}، مدل جنگل تصادفی^{۱۸} و درخت تصمیم^{۱۹} تشریح گردید [۱۱]. عمر و همکارانش در سال ۲۰۲۳، نخست با شبیه‌سازی پیل 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 در سال ۲۰۲۳، 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^{۲۰} پس از شبیه‌سازی عددی، عملکرد پیل سوختی و احتمال نشت هیدروژن با دقت مناسب مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت [۱۳]. بوکانیک و همکارانش در سال ۲۰۲۳ به معرفی یک مدل جانشین با استفاده از هوش مصنوعی برای استفاده به جای معادله باتلر- والمر^{۲۱} 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، پیش بینی گردید. اجاباری و همکارانش در سال ۲۰۲۴ با سه الگوریتم یادگیری ماشین، عمل کرد پیل سوختی پلیمری را بررسی نمودند. در این پژوهش از روش‌های ماشین بردار پشتیبان، شبکه عصبی و گرادیان تقویت شده برای پیش بینی 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^{۲۲}، در مقایسه با روش‌های دیگر می‌باشد [۱۵]. وانگ و همکارانش در سال ۲۰۲۳، با استفاده از روش‌های شبکه عصبی و سطح پاسخ^{۲۳} عمل کرد و طراحی لایه نفوذ گاز^{۲۴} 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، عمل کرد روش سطح پاسخ مناسب است ولی با افزایش شمار نمونه‌ها، عملکرد شبکه عصبی بهبود قابل ملاحظه‌ای می‌یابد [۱۶]. مدهاوان و همکارانش در سال ۲۰۲۴، از روش‌های شبکه عصبی و تقویت گرادیان را در پیش بینی کیفیت روکش صفحه‌های پیل سوختی استفاده

¹² Activation Function

¹³ Hidden Layers

¹⁴ Neurons of per hidden layer

¹⁵ Epochs

¹⁶ Long Short- Term Memory

¹⁷ Support Vector Machine (SVM)

¹⁸ Random Forest Model (RFM)

¹⁹ Decision Tree

²⁰ Gradient-Boosted Decision Tree

²¹ Butler- Volmer

²² Kernel Principal Component Analysis (KPCA)

²³ Response Surface Methodology (RSM)

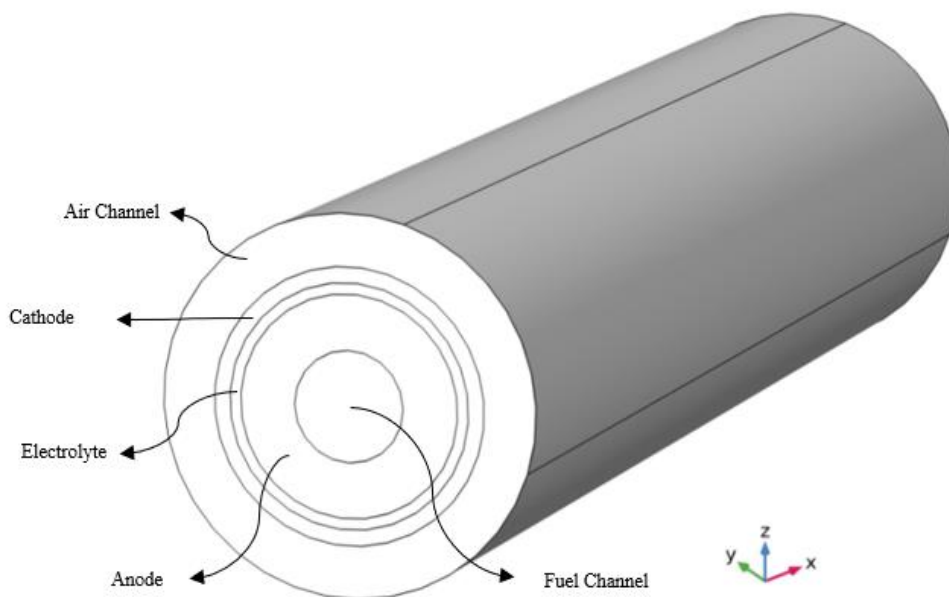
²⁴ Gas Diffusion Layer (GDL)

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 با توجه به سختی‌ها و پیچیدگی‌های ساخت و راه‌اندازی بستر آزمایش و چالش‌های اجرایی، زمان‌بر و گران‌قیمت می‌باشند. پژوهش‌های عددی نیز، با توجه به وجود هندسه‌ها، فیزیک‌ها و معادلات غیرخطی گوناگون و پیچیده در پیل سوختی، منجر به صرف هزینه‌های سنگین محاسباتی و مدت زمان طولانی، می‌گردد. ازین‌رو و با توجه 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.

۳- 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].



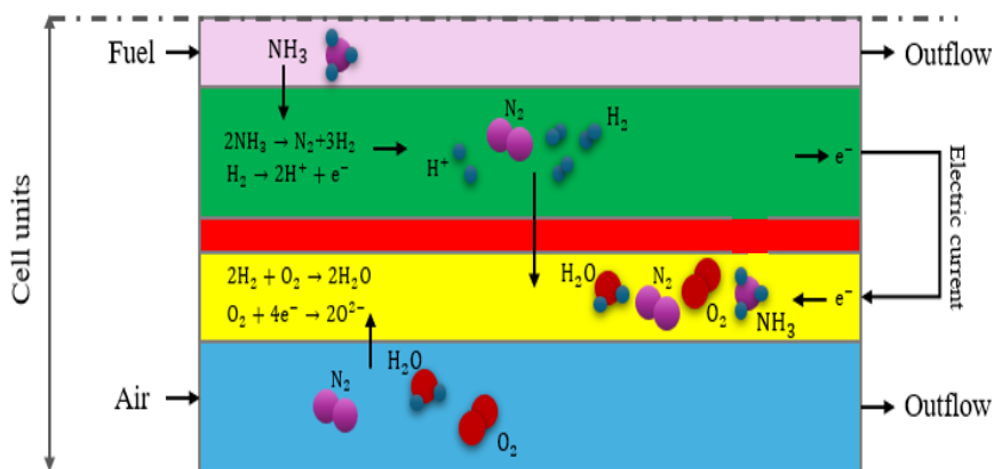
شکل ۱. هندسه سه‌بعدی پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای

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]:

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

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



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

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	۰/۵ × ۰/۳۵
پهنای الکتروود آند	۰/۳۵
پهنای الکتروولیت	۰/۰۱
پهنای الکتروود کاتد	۰/۰۶
پهنای کانال هوا	۰/۳۵
درازای پیل سوختی	۱۰

۴- 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 تراکم پذیر مفروض گردیده است. همچنین در تعریف ویژگی‌های ترمودینامیکی گونه‌ها و مخلوط، اثر کسر مولی، دما و فشار در نظر گرفته شده است.

۴-۱- سیال:

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

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

$$\rho(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \mathbf{F} \quad (3)$$

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

در عبارات فوق، کمیت‌های ρ ، \mathbf{V} ، p ، F ، μ به ترتیب میدان سرعت، چگالی جریان سیال، نیروی حجمی وارده به سیال، میدان فشار و لزجت دینامیکی مخلوط جریان سیال می‌باشند. باتوجه به انجام واکنش‌های الکتروشیمیایی و شیمیایی در الکترودها، تغییرات جرم رخ می‌دهد و برای بقای ممنت در سیال در محیط متخلخل رابطه داری - برینکمن تعریف گردیده است، براین اساس، برای تحلیل جریان‌های سیال در محیط متخلخل الکترودها و الکترولیت معادلات به قرار ذیل می‌باشند:

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

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \rho(\mathbf{V} \cdot \nabla)\mathbf{V} \frac{1}{\varepsilon_p} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}_1] + \mathbf{F} - \left(\mu \kappa^{-1} + \frac{S_m}{\varepsilon_p^2} \right) \mathbf{V} \quad (6)$$

$$\mathbf{K}_1 = \frac{1}{\varepsilon_p} \mu(\nabla \mathbf{V} + (\nabla \mathbf{V})^T) - \frac{2}{3} \mu \frac{1}{\varepsilon_p} (\nabla \cdot \mathbf{V})\mathbf{I} \quad (7)$$

در عبارات فوق، کمیت‌های κ و ε_p ، S_m ، \mathbf{K}_1 به ترتیب تنسور تنش سطحی، چشمه جرمی، تخلخل محیط و ضریب نفوذپذیری می‌باشند.

۴-۲- 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]:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_i + \rho(\mathbf{V} \cdot \nabla)\omega_i = R_i \quad (8)$$

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 ، ω_i کسر حجمی گونه‌ها و \mathbf{J}_i عبارت شار جرمی نفوذ گونه‌ها می‌باشند [۲۱].

$$\mathbf{J}_i = -(\rho \omega_i \sum_k D_{e,ik} \mathbf{d}_k) \quad (9)$$

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

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

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

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

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

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

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

۴-۳- 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:

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

A_a ، i_0 ، α_a ، α_c و F به ترتیب سطح فعال الکتروشیمیایی، چگالی جریان تبدلی مرجع، ضریب انتقال شارژ آندی و کاتدی، ثابت فارادی و پتانسیل اضافی می‌باشند. همچنین عبارت‌های C_r و C_0 به ترتیب نسبت‌های کاهش یافته و اکسایش شده غلظت گونه‌ها به مقادیر مرجع غلظت می‌باشند.

پتانسیل اضافی فعال سازی (η) بصورت ذیل تعریف می‌شود:

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

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

$$V_{ocv} = 1.253 - 0.00024516T + \frac{RT}{2F} \ln \frac{p_{H_2}(p_{O_2})^2}{p_{H_2O}} \quad (20)$$

۴-۴- انرژی:

بررسی پیل سوختی به صورت غیر هم‌دما با توجه به پژوهش کیهانپور و قاسمی اثر قابل ملاحظه‌ای بر عمل کرد پیل سوختی می‌گذارد. از طرفی وجود واکنش گرماگیر تجزیه آمونیاک، واکنش‌های الکتروشیمیایی و حرارت حاصل از جریان‌های درونی الکترولیت و الکتروود، اهمیت مطالعه توزیع دما را دوچندان می‌نماید. براین اساس تغییرات دمایی پیل سوختی در ولتاژهای کاری مختلف و محل بیشینه مقدار دما می‌تواند در طراحی و بررسی پیل سوختی مفید واقع شود. برای محاسبه توزیع دما، معادله انرژی در دو بخش ۱- سیال‌های گازی در کانال‌های سوخت و هوا و ۲- محیط‌های متخلخل الکتروود و الکترولیت (جامد و سیال) تعریف و حل می‌شود. معادله انرژی به صورت ذیل می‌باشد [۲۲]:

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

در معادله (۲۱)، Q_h ، T ، C_p و k_{eff} به ترتیب ظرفیت گرمایی ویژه مخلوط گازی، دما، چشمه‌های گرمایی حاصل از واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی و ضریب رسانندگی گرمایی مؤثر می‌باشد. k_{eff} به صورت ذیل مشخص می‌گردد:

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

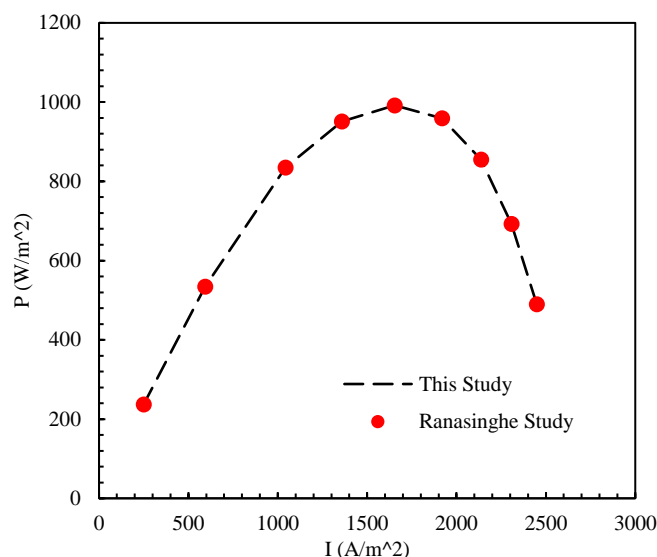
چشمه حرارتی Q_h شامل گرمای تولیدی یا مصرفی در بخش‌های مختلف پیل سوختی می‌باشد که به صورت ذیل تعریف می‌گردد:

$$Q_h = \begin{cases} \sigma_i^{el} (\nabla \phi_e^{el})^2 + Q_{elec} & \text{الکترولیت} \\ \sigma_i^c (\nabla \phi_e^c)^2 + \sigma_e^c (\nabla \phi_e^c)^2 + i\eta & \text{کاتد} \\ \sigma_i^a (\nabla \phi_e^a)^2 + \sigma_e^a (\nabla \phi_e^a)^2 + i\eta + Q_{chem} & \text{آند} \end{cases} \quad (22)$$

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

۵- حل عددی و اعتبار سنجی:

به منظور اعتبار سنجی حل عددی، پژوهش عددی راناسینگ و همکارانش شبیه‌سازی و بررسی گردید. نتایج نمودار چگالی توان - چگالی آمپر در نمودار شکل ۳ با یکدیگر مقایسه شد. همان‌طور که در شکل واضح است، نتایج بر یکدیگر هم‌پوشانی دارند [۲۳].



شکل ۳. اعتبار سنجی

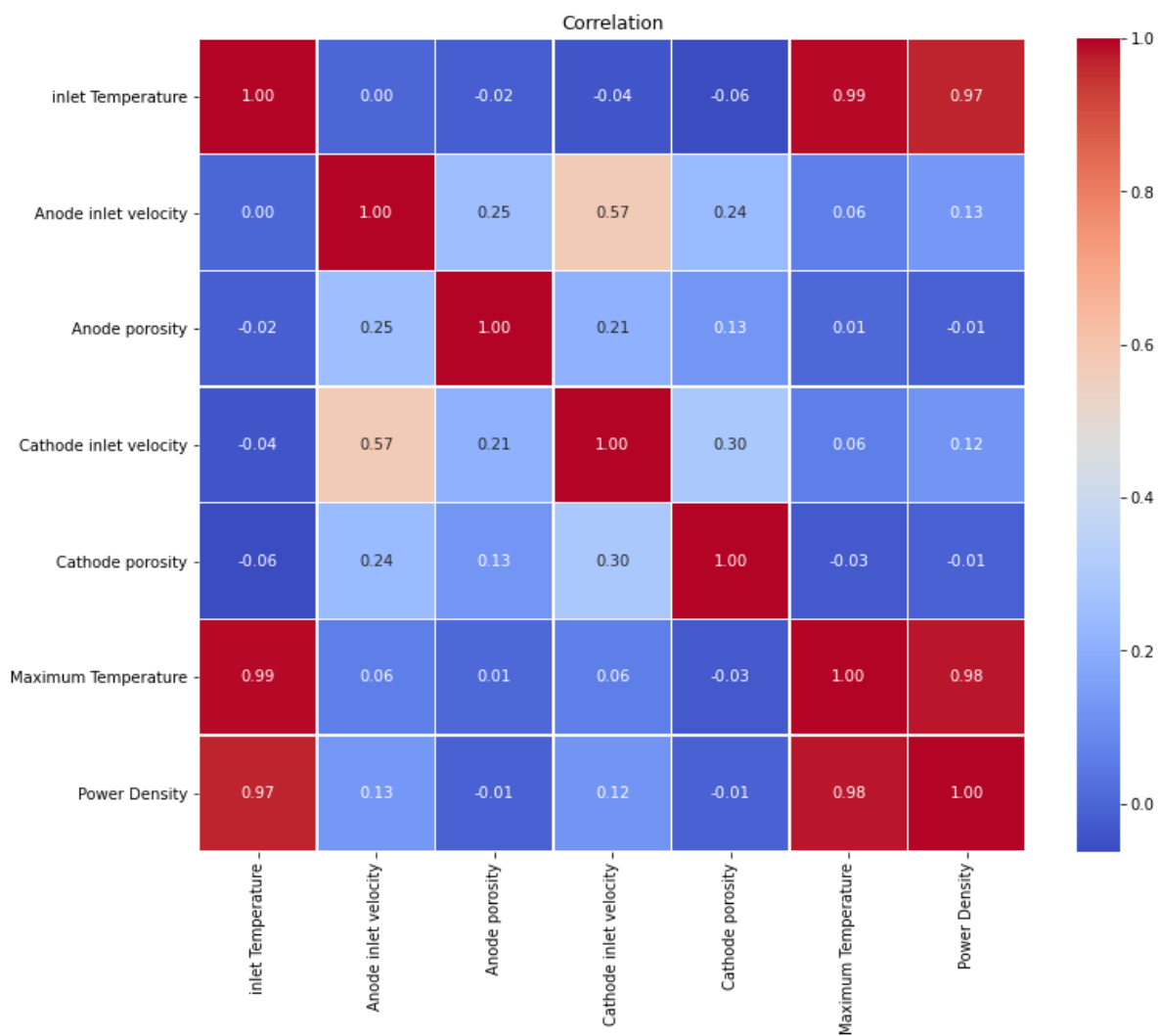
۶- یادگیری ماشین:

پس از شبیه‌سازی و اعتبارسنجی عددی، عبارتهای ورودی و خروجی انتخاب و داده‌های لازم جهت آموزش و آزمودن ماشین، تولید می‌گردد. عبارتهای هدف برای پیش بینی 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 به ترتیب، دمای اولیه پیل سوختی، تخلخل آند و کاتد و همچنین سرعت جریان‌های سوخت و هوا، در نظر گرفته می‌شوند. ولتاژ اعمالی پیل سوختی برای محاسبه حالت‌های مختلف، ۰/۷ ولت می‌باشد. پس از اعمال تغییرات در عبارتهای ورودی، معادلات حل و توابع هدف محاسبه می‌شوند. در مجموع، ۶۰۱ بار حل عددی در حالت‌های مختلف انجام می‌شود. نمای کلی از وضعیت کمی داده‌های تولیدی، در جدول ۲ نشان داده شده است [۲۴].

جدول ۲- وضعیت آماری و کمی عبارتهای ورودی و خروجی

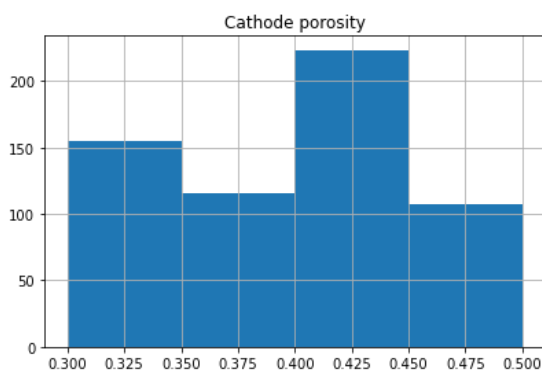
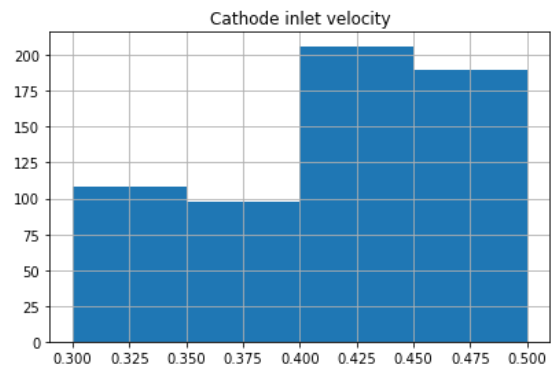
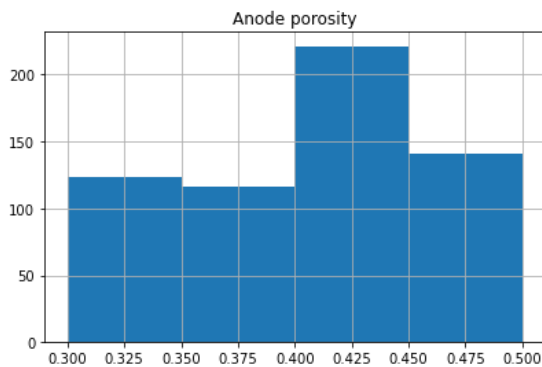
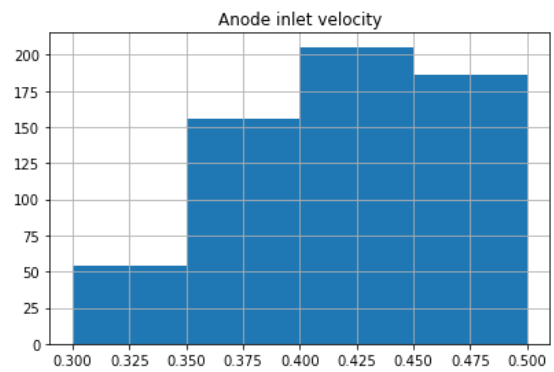
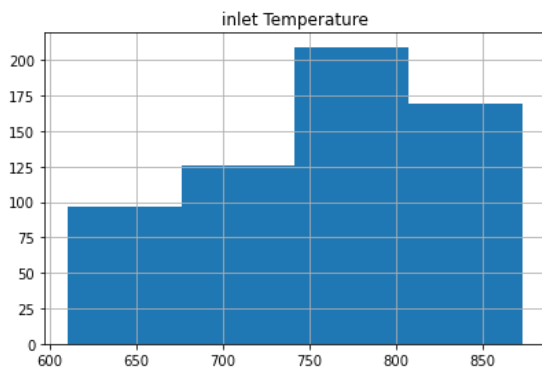
عبارت	دمای ورودی	سرعت سوخت ورودی	تخلخل آند	سرعت هوای ورودی	تخلخل کاتد	دمای بیشینه	چگالی توان
شمار داده	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱	۶۰۱
میانگین	۷۶۷/۲۲۹۶	۰/۴۱۳۴	۰/۳۹۴۰	۰/۴۰۴۶	۰/۳۸۵۴	۷۳۸/۰۷۸۶۸۵۷	۰/۰۱۸۵
انحراف معیار	۷۰/۲۰۸۸	۰/۰۵۷۳	۰/۰۶۵۴	۰/۰۶۲۶	۰/۰۶۷۳	۵۷/۲۱۳۷	۰/۰۰۷۵
کمینه اندازه	۶۱۰	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۶۰۳/۹۳	۰/۰۰۱۵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

ارتباط بین داده‌های موجود، با استفاده از ضریب همبستگی پیرسون^{۲۵}، در شکل ۴ نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که دمای ورودی پیل سوختی، دارای بیشتر ارتباط و اثر بر چگالی توان پیل سوختی می‌باشد.



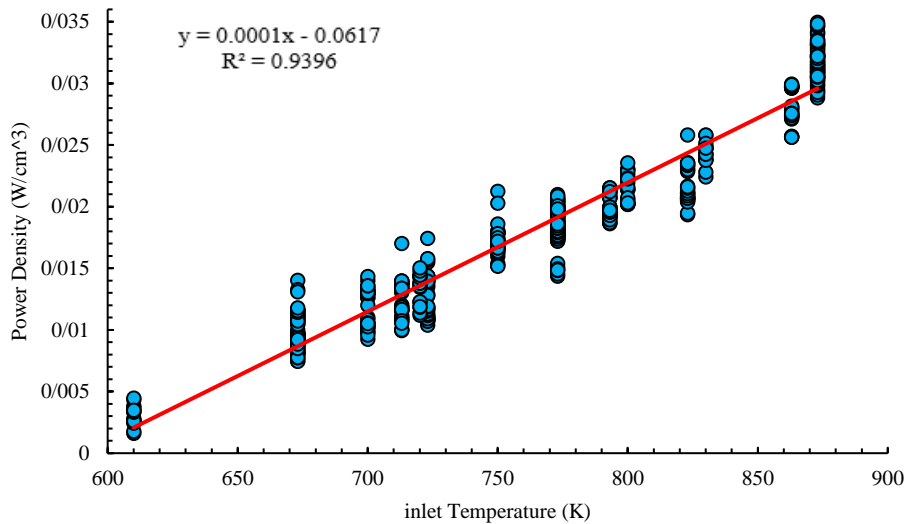
شکل ۴. همبستگی میان داده‌های گوناگون

²⁵ Pearson Correlation Coefficient (PCC)^۷



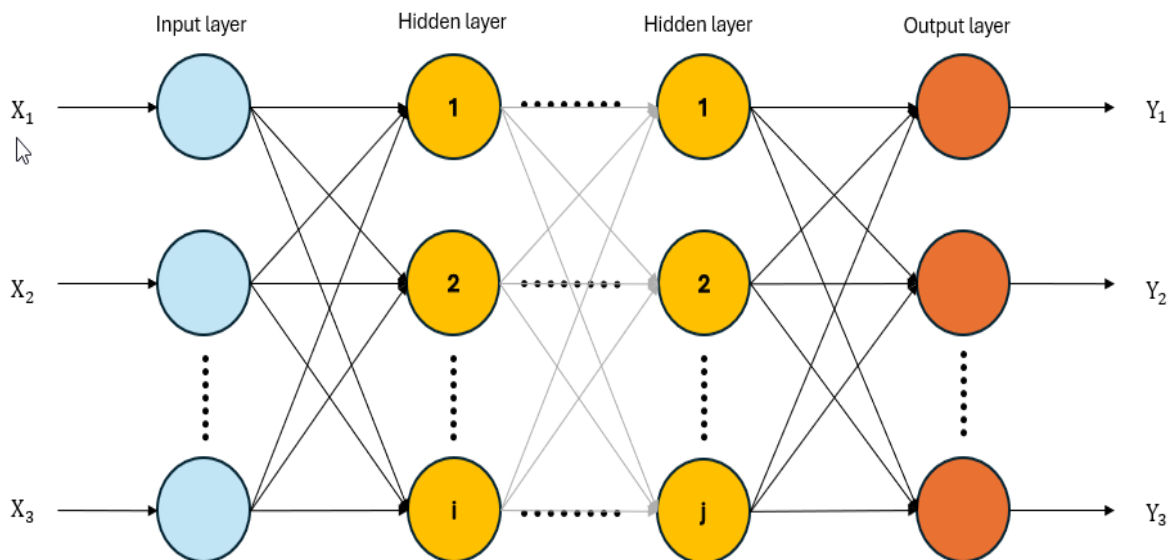
شکل ۵. توزیع داده‌ها

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 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، نشان دهنده 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.



شکل ۶. ارتباط بین دما و چگالی توان

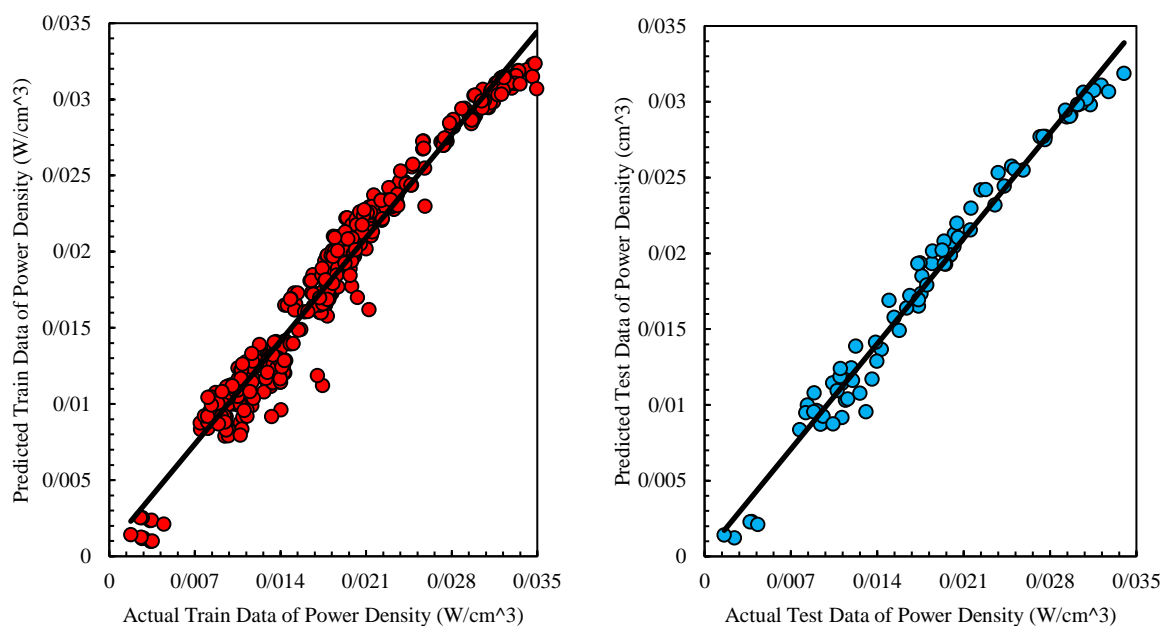
یکی از روش‌های کاربردی در یادگیری ماشین، شبکه عصبی می‌باشد. یک شبکه عصبی از بخش‌های گوناگونی شامل لایه ورودی، لایه‌های پنهانی میانی و لایه خروجی تشکیل می‌گردد. در هر لایه تعدادی سلول عصبی (نورون) وجود دارد که وظیفه پردازش و تحلیل داده‌ها را دارند. در لایه‌های پنهانی میانی، با استفاده از یک تابع فعال‌سازی،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



شکل ۷. ساختار شبکه عصبی عمیق

۷- نتایج:

پس از تولید و ایجاد مجموعه داده‌های لازم توسط کد دینامیک سیالات محاسباتی برای آموزش ماشین، با استفاده از برنامه کدنویسی پایتون^{۲۶} 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^{۲۷}، شناسایی^{۲۸}، محاسبه‌ای^{۲۹} و تانژانت هایپربولیک^{۳۰} در نظر گرفته شده است. در شبکه عصبی هر نورون وزن و اهمیت ویژه‌ای در پیش بینی تابع هدف می‌تواند داشته باشد که با استفاده از یک حل‌گر^{۳۱} محاسبه و بهینه‌سازی وزن هر سلول، انجام می‌شود. در این پژوهش، اثر سه حل‌گر متداول شامل الگوریتم بهینه‌سازی حافظه محدود برودن-فلچر-گلدفارب-شانو^{۳۲} که از خانواده روش‌های شبه-نیوتن^{۳۳} می‌باشد، گرادیان کاهش تصادفی^{۳۴} و تخمین لحظه تطبیقی^{۳۵}، به کار رفته است. برای آموزش ماشین هشتاد و پنج درصد داده‌ها اختصاص می‌یابد و باقیمانده برای آزمودن ماشین به کار می‌رود. حالت بهینه عمل کرد ساختار شبکه عصبی در پیش بینی 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 عمل کرد ماشین در پیش بینی چگالی توان براساس مقادیر ورودی نشان داده شده است. هم‌پوشانی نقاط بر روی محور $Y=X$ نمایشگر عمل کرد مناسب ماشین و نزدیکی مقادیر واقعی و پیش بینی شده به یکدیگر می‌باشد.



شکل ۸. نمودار رابطه بین داده‌های واقعی و پیش بینی شده

²⁶ Python

²⁷ Rectified Linear Unit (ReLU)

²⁸ identity

²⁹ Logistic

³⁰ tanh

³¹ Solver

³² Limited- Memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algorithm (LBFGS)

³³ Quasi-Newton Method

³⁴ Stochastic Gradient Descent (SGD)

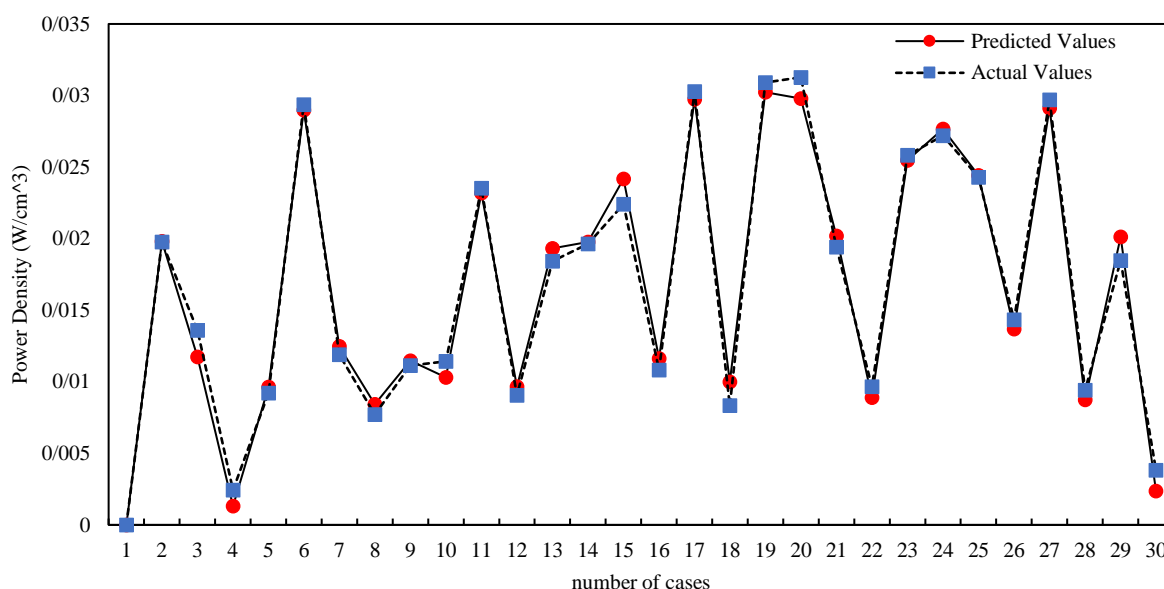
³⁵ Adaptive Moment Estimation (ADAM)

خطاهای شبکه در پیش بینی چگالی توان پیل سوختی، در جدول ۳ نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که خطای جذر میانگین مربعات^{۳۶}، خطای مطلق میانگین^{۳۷} و ضریب تعیین^{۳۸} پیش بینی تابع هدف مقادیر مناسبی دارند.

جدول ۳- مقادیر خطاها و عبارتهای کیفی شبکه در پیش بینی چگالی توان

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

در شکل ۹، سی نقطه از مقادیر پیش بینی 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 را بدون حل عددی یا آزمایشگاهی، پیش بینی کرد.



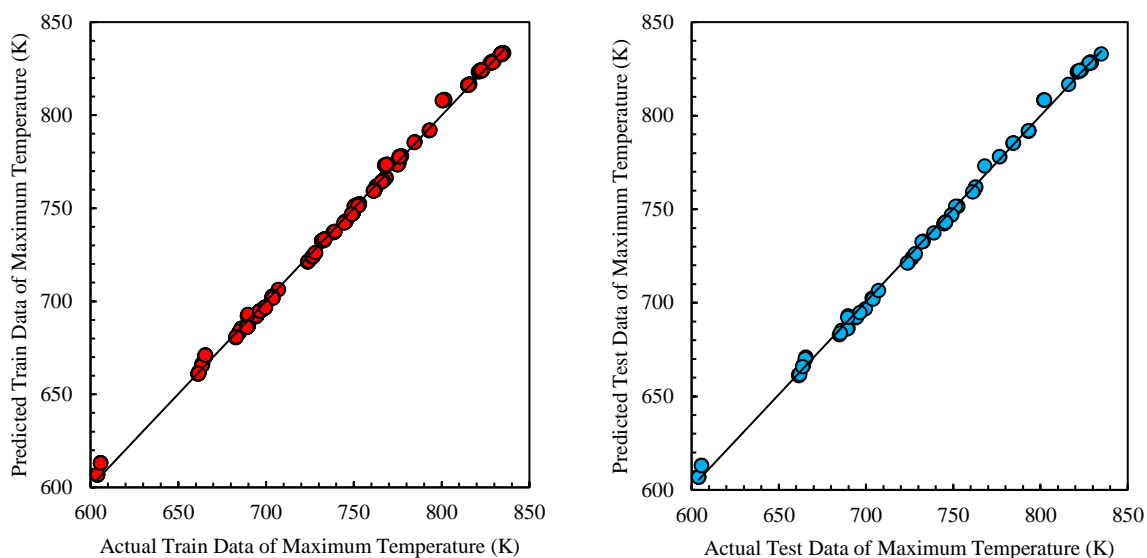
شکل ۹. نمودار مقایسه مقادیر پیش بینی شده و واقعی

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 پیش بینی شده نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که دقت عمل کرد ماشین در پیش بینی دمای بیشینه، به‌طور قابل ملاحظه‌ای، مناسب و بالا می‌باشد. دقت کافی و عمل کرد مناسب در پیش بینی، باعث شده تا نقاط تقریباً بر نمودار $Y=X$ منطبق باشند.

³⁶ Root Mean Square Error (RMSE)

³⁷ Mean Absolute Error (MAE)

³⁸ Coefficient of Determination (R²)



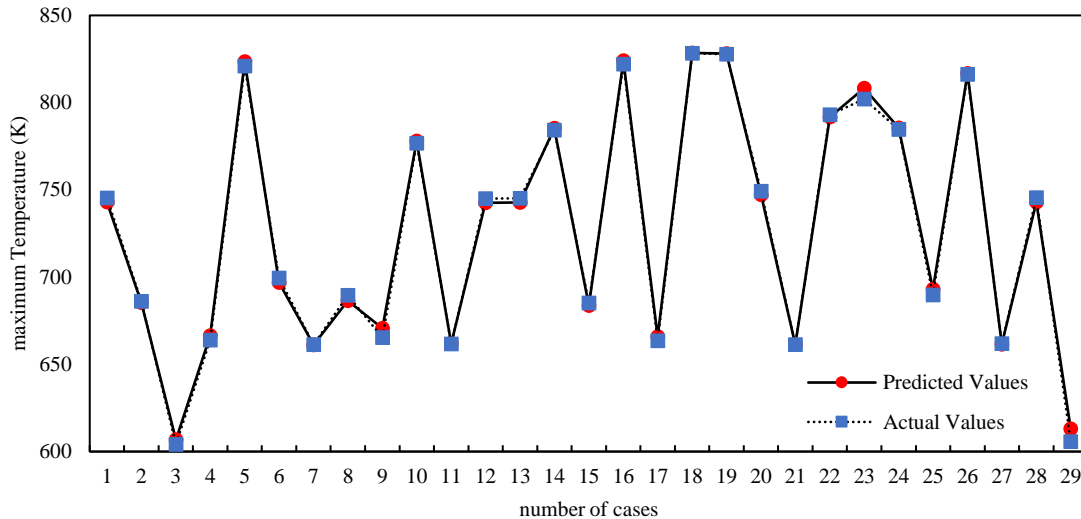
شکل ۱۰. نمودار مقایسه مقادیر پیش بینی شده و واقعی

در جدول ۴، مقادیر مرتبط با عمل کرد کیفی و خطای شبکه مصنوعی در پیش بینی 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 پیش بینی نماید.

جدول ۴- مقادیر خطاها و عبارتهای کیفی شبکه در پیش بینی بیشینه دما

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

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



شکل ۱۱. نمودار مقایسه مقادیر پیش بینی شده و واقعی دمای بیشینه

۸- نتیجه گیری:

در این پژوهش، پس از شبیه سازی پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک و دمای کاری متوسط، داده های لازم برای آموزش ماشین، محاسبه، دسته بندی و آماده سازی گردید. سپس، هشتاد و پنج درصد داده های حاصل، برای آموزش شبکه عصبی مورد استفاده قرار گرفته و حالت بهینه شبکه در پیش بینی عبارات های چگالی توان و دمای بیشینه، به دست آمد. سپس با آزمایش عمل کرد شبکه با پانزده درصد داده باقیمانده، مشخص گردید که شبکه عصبی به صورت مناسبی می تواند تابع های هدف را پیش بینی نماید. همچنین مشاهده شده که دقت پیش بینی دمای بیشینه به نسبت چگالی توان، بیشتر می باشد. ضریب تعیین برای پیش بینی چگالی توان و دمای بیشینه توسط شبکه و براساس داده های آزمایشی، به ترتیب، ۹۸/۲ و ۹۹/۸ درصد می باشد.

۹- 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*, vol. 71, pp. 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. Buchaniec, 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. Echabbari, 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*, p. 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*, vol. 14, p. 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*, vol. 17, p. 10.
۱۸. کیهانپور مهدی، قاسمی مجید. و پوربگیان مهدی. (۱۴۰۲) بررسی پارامتریک پیل سوختی اکسید جامد تمام متخلخل لوله‌ای با سوخت آمونیاک و مدل سینتیکی تمکین-پیژف، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۲، ۱۲۹، ۱۲۳-۱۱۰.
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 مهدی. و قاسمی مجید. (۱۴۰۱) بررسی سه بعدی کارکرد پیل سوختی پلیمری لوله ای با فرض برهم کنش سیال- جامد- گرما، روش‌های عددی در مهندسی، ۴۱، ۱، ۹۹-۷۹.
۲۱. کیهانپور مهدی. و قاسمی مجید. (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.