

ارزیابی کارایی پیل سوختی اکسید جامد تمام متخلخل با دمای کاری متوسط و سوخت آمونیاک و اعتبارسنجی با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین

مهدی کیهانپور^۱، مجید قاسمی^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، kasra.keyhanpoor@gmail.com

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ghasemi@kntu.ac.ir

* نویسنده مخاطب

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۸/۱۸، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۳/۱۰/۰۶، پذیرش: ۱۴۰۳/۱۰/۲۱

چکیده: محدودیت منابع انرژی فسیلی و نگرانی‌های محیط زیستی، باعث تلاش برای استفاده از منابع انرژی پاک و پایدار شده است. پیل سوختی اکسید جامد با دمای کاری متوسط و سوخت آمونیاک یکی از منابع امیدبخش جهت جایگزینی با منابع متداول انرژی است. از سوی دیگر استفاده از روش‌های پیش‌بینی عملکرد پیل سوختی با دقت و سرعت مناسب و بالا، از اهمیت خاصی برخوردار است. در این پژوهش، نخست پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک، نشی الکترولیت و دمای کاری متوسط، شبیه‌سازی عددی می‌شود. سپس عبارات‌های ورودی اثرگذار برای محاسبه عملکرد پیل سوختی در شرایط مختلف انتخاب می‌شود. در این راستا، پس از ایجاد مجموعه داده‌های کافی، از الگوریتم‌های مختلف یادگیری ماشین برای پیش‌بینی توابع هدف شامل چگالی توان و دمای بیشینه پیل سوختی بهره‌گیری می‌شود. نتایج حاکی از پیچیدگی پیش‌بینی چگالی توان پیل سوختی در مقایسه با دمای بیشینه است. همچنین مشاهده شد که روش R^2 با XG Boosting برابر ۰/۹۹ بهترین کارایی را در پیش‌بینی عبارات‌های دمای بیشینه و چگالی توان دارا است.

کلیدواژگان: پیل سوختی اکسید جامد، آمونیاک، نشی الکترولیت، دمای کاری متوسط، یادگیری ماشین

مقدمه

باتوجه به نیاز روزافزون به انرژی، نگرانی‌های جهانی پیرامون محیط زیست و تغییر اقلیم، افزایش هزینه‌های استفاده از سوخت‌های فسیلی و همچنین روبه پایان بودن آن‌ها، پژوهش‌ها با رویکرد بهره‌مندی از منابع انرژی پاک و پایدار در حال انجام است. یکی از گزینه‌های امیدوارکننده در میان پژوهش‌های صورت گرفته، پیل‌های سوختی می‌باشند. پیل‌های سوختی دارای ویژگی‌های مناسب از جمله انتشار پایین آلاینده‌ها و عوارض محیط‌زیستی، سروصدای کم، دوام و پایداری مناسب، بازدهی بالا و ... می‌باشند. در این میان، پیل سوختی اکسید جامد با توجه به بازدهی بالاتر، سازگاری با سوخت‌های ورودی متنوع، امکان بهره‌مندی در مقیاس‌های متفاوت، قابلیت استفاده در چرخه‌های ترکیبی، حساسیت کم‌تر در برابر سوخت‌های ناخالص، بهای به‌صرفه‌تر کاتالیست و ... بیشتر از دیگر گونه‌های پیل سوختی مورد توجه قرار گرفته است. با این حال، دمای کاری بالای نوع متداول پیل سوختی اکسید جامد باعث مشکلات متعددی از جمله افت کارایی در طی زمان، تنش‌های حرارتی، تشکیل ترکیبات مضر از جمله اکسیدهای نیتروژن، زمان راه‌اندازی بالا و ... می‌شد. علاوه بر این، معضلات استفاده از هیدروژن در پیل‌های سوختی اکسید جامد شامل چگالی انرژی کم، نیاز به فناوری‌ها و زیرساخت‌های هزینه‌بر و پیچیده برای ذخیره‌سازی و جابجایی، خطرات ناشی از نشی و ... باعث شده تا در سال‌های اخیر پیل‌های سوختی اکسید جامد با سوختی جایگزین و دمای کاری میان‌رده (۶۷۳ تا ۹۷۳ کلوین)، مورد توجه بیشتری قرار گیرد [۱، ۲].

در میان تمامی ترکیب‌های شیمیایی، آمونیاک دارای بیشترین مقدار هیدروژن است که می‌تواند در دما و فشار متوسط

مایع‌سازی و ذخیره‌شود و از راه‌های گوناگون از جمله کشتی به نقاط مختلف جایجا شده و بدون انتشار ترکیبات کربنی مورد استفاده قرار گیرد. علاوه بر این، چگالی انرژی آمونیاک مایع تقریباً برابر با سوخت‌های فسیلی و بیش از دو برابر هیدروژن گازی فشرده شده استکه باعث شده، سوخت آمونیاک گزینه مناسبی برای کاربرد در پیل سوختی اکسید جامد باشد. پیل‌های سوختی اکسید جامد با دمای کاری میان‌رده می‌توانند به‌طور مؤثری از آمونیاک به‌عنوان سوخت استفاده نمایند. آمونیاک یک حامل انرژی بدون کربن با قابلیت تولید و توزیع مناسب نسبت به هیدروژن است. همچنین پیشرفت‌های اخیر نشان می‌دهد که مصرف مستقیم آمونیاک در پیل سوختی و تجزیه حرارتی در آند، نه‌تنها امکان‌پذیر بوده و باعث افزایش بازدهی پیل می‌شود، بلکه می‌تواند انتشار آلاینده‌های زیان‌آور و احتمال تخریب اجزای پیل را کاهش دهد [۳].

برای شبیه‌سازی پیل سوختی اکسید جامد با دمای کاری میان‌رده و سوخت آمونیاک، لازم است که از مدل‌های سینتیکی استفاده شود که روند واکنش تجزیه آمونیاک را به‌صورت دقیق و کارآمد پیش‌بینی نماید. برای مثال در دماهای کاری پایین، پدیده مهار هیدروژن قابل ملاحظه بوده و می‌تواند بر روند تجزیه آمونیاک در غلظت‌های گوناگون هیدروژن، اثرگذار باشد. در همین راستا، مدل سینتیکی تمکین-پیژوف برخلاف مدل سینتیکی تمارو که یک مدل سنتی برای دماهای بالا است، مورد توجه قرار می‌گیرد. این مدل از طریق مطالعات مختلف اعتبارسنجی شده است و کاربرد آن تا حدود دمای ۹۳۳ کلوین تأیید شده است.

در سال‌های اخیر، بهره‌گیری از زیرشاخه‌های هوش مصنوعی، مانند یادگیری ماشین در حوزه‌های مهندسی گسترش یافته است. این روش‌ها می‌توانند داده‌های پیچیده‌ای را که از شبیه‌سازی‌های عددی یا پژوهش‌های آزمایشگاهی به‌دست می‌آید، تحلیل کنند و الگوها و روابط پیچیده بین پارامترهای گوناگون را بیابند. برای مثال در شبیه‌سازی عددی پیل سوختی اکسید جامد تمام متخلخل با دمای کاری متوسط و سوخت آمونیاک، پارامترهای مختلف از جمله تخلخل الکترولیت و الکترودها، دمای کاری، واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی، غلظت ترکیبات مختلف، فشار و ... می‌توانند بر عملکرد پیل سوختی اثرگذار بوده و باعث ایجاد عبارت‌های غیرخطی و پیچیدگی در روابط و معادلات شوند. از این رو، حل و محاسبه پارامترهای هدف مانند بیشینه دما یا چگالی توان پیل سوختی می‌تواند زمان‌بر و دشوار باشد. در چنین شرایطی، تولید مجموعه داده‌های کافی و دقیق با مقادیر گوناگون پارامترهای مختلف، می‌تواند باعث آموزش و یادگیری ماشین به‌منظور استخراج رابطه و الگوی محاسبه پارامتر هدف شود. سپس، می‌توان از ماشین آموزش دیده با دقت کافی و در مدت زمان بهینه تابع هدف را در حالت‌های گوناگون پیش‌بینی نمود [۴].

در سال ۲۰۲۲، لگالا و همکارانش [۵]، عملکرد پیل سوختی پلیمری را با استفاده از دو روش یادگیری ماشین شبکه عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان^۱ بررسی نمودند. در این پژوهش، برای یادگیری ماشین از دو دسته داده آزمایشگاهی و شبیه‌سازی یک بعدی استفاده شد. برای بررسی عملکرد ماشین عبارت‌های ورودی شامل جریان، دما، فشار واکنش دهنده‌ها و رطوبت و عبارت‌های خروجی شامل ولتاژ و میزان مقاومت و آبداری غشا، انتخاب شد. نتایج نشان داد، شبکه عصبی مصنوعی عملکرد مناسب‌تری در مقایسه با ماشین بردار پشتیبان دارد. در سال ۲۰۲۴، مدهاوان و همکارانش [۶]، عملکرد الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی عبارت‌های خروجی خردگی و مقاومت پیل سوختی پلیمری، با استفاده از عبارت‌های ورودی ضخامت، زاویه تماس و ولتاژ، بررسی نمودند. در این پژوهش، روش‌های شبکه عصبی مصنوعی و تقویت گرادیان^۲ ارزیابی شده و نتایج حاکی از عملکرد مناسب شبکه عصبی مصنوعی است. در سال ۲۰۲۳، ویلیامز و همکارانش [۷]، روش توزیع گاوسی محدود زمان‌های آسایش^۳ را برای طیف‌سنجی امپدانس الکتروشیمیایی پیل سوختی اکسید جامد، به‌کار بردند. در این پژوهش داده‌های حاصل از طیف‌سنجی پیل سوختی اکسید جامد در دمای کاری ۸۷۳ کلوین مورد بررسی قرار گرفته و نتایج حاکی از عملکرد

¹ Hydrogen Inhibition

² Support Vector Machine (SVM)

³ Extreme Gradient Boosting (XGB)

⁴ Finite Gaussian Distribution of Relaxation times

مناسب برای یافتن رابطه ولتاژ- جریان اکتروود بود. در سال ۲۰۲۳، وایرو و همکارانش [۸] ایمنی عملکرد پیل سوختی در صنعت کشتی‌سازی و دریایی را با استفاده از شبیه‌سازی عددی و یادگیری ماشین بررسی نمودند. برای پیش‌بینی عبارت خروجی که در این پژوهش وجود نشتی است از الگوریتم درخت تصمیم^۵ با گرادیان تقویت شده^۶ با عبارت‌های ورودی ولتاژ، جریان الکتریکی، فرکانس و مقاومت درونی، استفاده شده است. نتایج حاکی از عملکرد مناسب روش درخت تصمیم برای پیش‌بینی عملکرد امن پیل سوختی بود. در سال ۲۰۲۴، توفیق و همکارانش [۹] با استفاده از یک روش ویرایش شده شبکه عصبی مصنوعی به پیش‌بینی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای در حالت گذرا، پرداختند. در این پژوهش داده‌های لازم به صورت آزمایشگاهی تولید شده و عبارت‌های ورودی جریان، سرعت جریان‌های هوا و سوخت و دما انتخاب شد. نتایج حاکی از دقت و سرعت مناسب الگوریتم یادگیری ماشین انتخاب شده برای پیش‌بینی ولتاژ خروجی پیل سوختی بود. در سال ۲۰۲۳، ریزوندی و همکارانش [۱۰]، عملکرد دسته‌ای^۷ پیل‌های سوختی اکسید جامد را به صورت عددی و با فرض تجزیه آمونیاک ورودی به عنوان سوخت مصرفی، بررسی نمودند. با توجه به واکنش گرماگیر تجزیه آمونیاک و کاهش دما در ورودی پیل‌های سوختی، اثر تنش گرمایی در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که تجزیه آمونیاک در دو حالت مستقیم درونی و بیرونی، کم‌تر از پنج درصد در عملکرد پیل سوختی اثر می‌گذارد. همچنین مشاهده شد که تنش حرارتی در حالت جریان‌های هم‌سو^۸ کم‌تر است. همچنین اندازه تنش گرمایی با دمای ورودی و سرعت جریان هوا، به ترتیب رابطه مستقیم و وارونه دارد. در سال ۲۰۲۴، اسدی و همکارانش [۱۱]، پس از شبیه‌سازی عددی و بررسی پیل سوختی پلیمری در حالات گوناگون میدان جریان به منظور یافتن بیشترین بازدهی، با استفاده از روش هوش مصنوعی بهینه‌سازی چندهدفه^۹ مناسب‌ترین مقدارهای عبارت‌های دما، فشار، ضریب استوکیومتری آند و کاتد و رطوبت نسبی را برای به دست آوردن بیشتر مقدار چگالی توان را محاسبه نمودند. در سال ۲۰۲۴، لگالا و همکارانش [۱۲] با استفاده روش شبکه عصبی مصنوعی به بررسی عملکرد پیل سوختی و باتری مورد استفاده در خودروی تویوتا میرای پرداختند. در این پژوهش با انتخاب پانزده ویژگی ورودی و پنج عبارت خروجی، داده‌های گوناگون در حالت‌های مختلف به صورت میدانی و با پیمایش خودرو بر روی شاسی دینامومتر، استخراج شد. نتایج نشان داد که کارآمدترین ساختار شبکه در پیش‌بینی عبارت‌های هدف، با دو لایه پنهان^{۱۰} تابع فعال‌سازی^{۱۱} واحد خطی اصلاح‌شده^{۱۲} و بهینه‌سازی تطبیق لحظه‌ای^{۱۳} و با ضریب تعیین^{۱۴} بیش از ۰/۹۸ است. در سال ۲۰۲۴، پان و همکارانش [۱۳] با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی عملکرد پیل سوختی پلیمری را مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش، پس از انتخاب عبارت‌های اثرگذار، داده‌های لازم برای آموزش ماشین با استفاده از شبیه‌سازی عددی، تولید شد. نتایج نشان‌دهنده این بود که ریشه میانگین مجذور خطا^{۱۵} حدود ۰/۲ درصد است. در سال ۲۰۲۴، ژو و همکارانش [۱۴]، پس از راه‌اندازی زیرساخت آزمایشگاهی پیل سوختی پلیمری، داده‌های لازم برای استفاده از یادگیری ماشین را ایجاد نمودند. سپس، با استفاده از روش حافظه طولانی کوتاه- مدت^{۱۶} عملکرد پیل سوختی را پیش‌بینی نمودند. نتایج نشان‌دهنده ضریب تعیین بیش از ۰/۹۸ بود. در پایان با استفاده از الگوریتم ژنتیک^{۱۷} شرایط عملکرد بهینه پیل سوختی محاسبه شد. در سال ۲۰۲۳، های و همکارانش [۱۵]، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی به بهینه‌سازی عملکرد چرخه ترکیبی شامل پیل سوختی اکسید جامد و کربنات مذاب، واحد گازی‌ساز و واحد بازیابی کربن دی‌اکسید پرداختند. نتایج حاکی از توانمندی

⁵ Decision Tree (DT)

⁶ Boosted- Gradient Decision Tree

⁷ Stack

⁸ Co- Flow

⁹ Multi- Objective Optimization (MOO)

¹ Number of Hidden Layers

¹ Activation Function 1

¹ Rectified Linear Unit (ReLU) 2

¹ Adaptive Moment Estimation (Adam)

¹ Coefficient of Determination (R- Squared)

¹ Root Mean Square Error (RMSE) 5

¹ Long Short- Term Memory (LSTM)⁶

¹ Genetic Algorithm (GA) 7

شبکه عصبی در یافتن ارتباط میان داده‌های ورودی و خروجی و همچنین بهینه‌سازی سیستم، در مدت زمان اندک است. در سال ۲۰۲۴، های و همکارانش [۱۶] با استفاده از سه روش یادگیری ماشین شامل ماشین بردار پشتیبان، درخت تصمیم و شبکه عصبی مصنوعی، عملکرد چرخه سیکل ترکیبی متشکل از پیل سوختی اکسید جامد و سرمایش جذبی را بررسی و بهینه‌سازی نمودند. در سال ۲۰۲۲، وانگ و همکارانش [۱۷] با استفاده از یادگیری ماشین، عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با سوخت ورودی متان را بررسی و بهینه‌سازی نمودند. در این پژوهش، سه عبارت خروجی شامل دمای بیشینه، چگالی جریان و رسوب کربن پیش‌بینی شد. نتایج نشان‌دهنده عدد ضریب تعیین بیش از ۰/۹۷ برای عبارت‌های پیش‌بینی شده است. در سال ۲۰۲۰، ژو و همکارانش [۴] با استفاده از شبکه عصبی عمیق و شبیه‌سازی عددی یک پیل سوختی اکسید جامد با سوخت ورودی متان را مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش، در ولتاژ ۰/۷ ولت، پس از انتخاب عبارت‌های ورودی اثرگذار شامل دبی جریان در آند و کاند و دمای کاری، عبارت‌های هدف شامل چشمه حرارتی، گرادیان بیشینه دما و چگالی جریان با دقت مناسبی پیش‌بینی شده‌اند. در سال ۲۰۲۰، اسکندراوغلو و همکارانش [۱۸]، با استفاده از دو روش یادگیری ماشین شامل جنگل تصادفی^۱ و بردار پشتیبان به پیش‌بینی ولتاژ خروجی پیل سوختی اکسید جامد پرداختند. در این پژوهش، داده‌های لازم برای آموزش ماشین، به‌صورت آزمایشگاهی ایجاد شده و پس از ارزیابی ماشین، مشخص شد که دقت روش بردار پشتیبان بیشتر از جنگل تصادفی است. در سال ۲۰۲۴، لای و همکارانش [۱۹]، با استفاده از تخمین خطی چندگانه^۲ و شبکه عصبی عملکرد پیل سوختی اکسید جامد با سوخت ورودی متان را مورد ارزیابی قرار دادند. در این پژوهش پس از به‌کارگیری روش ضرایب همبستگی پیرسون^۳ و انتخاب متغیرهای ورودی اثرگذار، توان و دمای پیل سوختی پیش‌بینی شد. نتایج حاکی از خطای کم‌تر روش شبکه عصبی با مقدار ۰/۶۶ نسبت به خطای روش تخمین خطی چندگانه با مقدار ۱/۸۹ است.

برخلاف پژوهش‌های دیگر که در دمای کاری بالا یا سوخت‌های متداول انجام می‌شود، در پژوهش کنونی، از سوخت آمونیاک در دمای کاری متوسط استفاده می‌شود. سوخت آمونیاک ضمن بر خورداری از چگالی انرژی مناسب، با محیط زیست نیز سازگار است. استفاده از مدل سینتیکی تمکین- پیژوف ضمن در نظر گرفتن پدیده مهار هیدروژن و روند تجزیه آمونیاک، باعث ایجاد شرایط کارآمدتر در نتایج معادلات الکتروشیمیایی می‌شود. در ادامه با توجه به سوخت آمونیاک، مدل سینتیکی تمکین- پیژوف و دمای کاری متوسط، پیل سوختی اکسید جامد لوله‌ای تمام متخلخل با رسانش پروتون شبیه‌سازی می‌شود. سپس با مطالعه پارامتریک و تحلیل حساسیت پیل سوختی، میزان اثرگذاری شش متغیر ورودی شامل دمای کاری، تخلخل الکترولیت، آند و کاند و همچنین سرعت جریان‌های سوخت و هوا، بر توابع هدف شامل چگالی توان و بیشینه دمای پیل سوختی بررسی می‌شود. در ادامه با بررسی و محاسبه پارامترهای هدف به‌ازای مقادیر گوناگون متغیرهای ورودی، مجموعه داده‌های کافی و لازم ایجاد می‌شود. در پایان، با به‌کارگیری یازده (۱۱) الگوریتم یادگیری ماشین متفاوت ضمن بررسی جامع امکان پیش‌بینی پارامترهای هدف در پیل سوختی، توانمندی روش‌های یادشده، با یکدیگر مورد مقایسه قرار می‌شود.

هندسه و شبیه‌سازی

در این پژوهش، نخست هندسه مسأله به‌صورت دوبعدی محورمتقارن^۴ شبیه‌سازی شده است. سوخت آمونیاک و هوا به‌ترتیب از درونی‌ترین و بیرونی‌ترین کانال وارد پیل سوختی می‌شود. واکنش شیمیایی تجزیه آمونیاک درون آند انجام شده و هیدروژن لازم برای انجام واکنش الکتروشیمیایی کاهش و تولید پروتون فراهم می‌شود. سپس پروتون با گذر از الکترولیت، وارد کاتد شده و طی واکنش اکسایش، آب تشکیل می‌شود. با توجه به وجود تخلخل در الکترولیت امکان عبور گونه‌های مختلف نیز است. در شکل (۱) هندسه مسأله به‌صورت سه‌بعدی نشان داده شده است [۲۰].

¹ Random Forest (RF) ⁸
¹ Multiple Linear Regression (MLR) ⁹
² Pearson Correlation Coefficient (PCC)
² Axisymmetric ¹

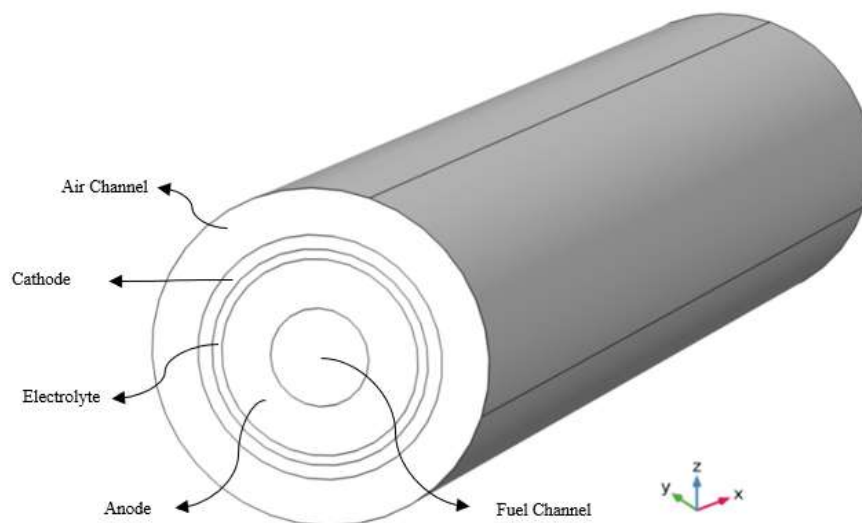


Figure 1- 3D Geometry of Tubular Fuel Cell

شکل ۱- هندسه سه بعدی پیل سوختی لوله‌ای

در شکل (۲) نیز، نمای دوبعدی هندسه مسأله به همراه گونه‌های شرکت کننده در واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی نشان داده شده است. همچنین مشاهده می شود که گونه‌ها از کانال‌های سوخت و هوا وارد شده و امکان عبور از بخش‌های گوناگون پیل سوختی را دارند. همچنین شکل (۲) واکنش شیمیایی مربوط به تجزیه آمونیاک در بخش آند را نشان می‌دهد.

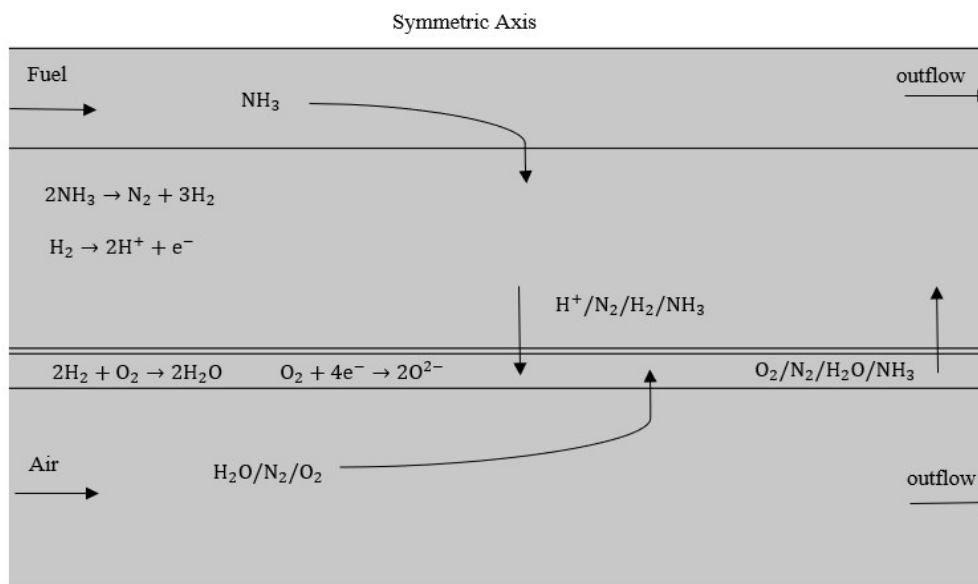


Figure 2- 2D view of SOFC Ammonia Fueled with Chemical and Electrochemical Reactions

شکل ۲- نمای دوبعدی پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک به همراه واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی

در جدول (۱)، اندازه بخش‌های گوناگون پیل سوختی نشان داده شده است.

جدول ۱- اندازه بخش‌های گوناگون پیل سوختی

Table 1- Size of the various parts of the fuel cell

Parameter	Size (mm)
Fuel channel radius	0.35/2
Anode thickness	0.35
Electrolyte thickness	0.01
Cathode thickness	0.06
Air channel thickness	0.35
Fuel cell length	10

معادلات حاکم

همانگونه که در مقدمه مقاله توضیح داده شد، پیل سوختی با سوخت آمونیاک در بازه دمایی ۶۷۳ تا ۹۷۳ کلوین کار می‌کند. ازین‌رو، مناسب است از مدل سینتیکی تمکین- پیژوف که پدیده مهار هیدروژن را نیز دربر می‌گیرد، برای تجزیه آمونیاک استفاده شود. مدل مذکور در معادله (۱) نشان داده شده است [۱].

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

در معادله (۱)، عبارت‌های r_{NH_3} ، P_{NH_3} ، P_{H_2} به ترتیب نرخ انجام واکنش شیمیایی تجزیه آمونیاک، فشار جزئی آمونیاک و هیدروژن می‌باشند. همچنین R و T نیز به ترتیب نمایانگر ثابت جهانی گازها و دما هستند. برای شبیه‌سازی عددی و بررسی عملکرد پیل سوختی، لازم است رابطه‌های حاکم بر آن شناسایی، تعریف و حل شوند. همانگونه که اشاره شد، گونه‌های مختلف در جریان‌های سوخت و هوا، با سرعت و دمای مشخص، وارد پیل سوختی شده و پس از جابجایی و نفوذ در الکترودها، در واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی شرکت می‌نمایند که نتیجه آن تولید جریان الکتریکی است. در همین راستا، معادله‌های پایستگی شامل جرم، تکانه، گونه‌ها، شار الکتریکی و انرژی تعریف و فرضیه‌های مربوطه توضیح داده می‌شوند [۲۱، ۲۲].

جریان‌های سیال

برای تحلیل و بررسی میدان سرعت و فشار جریان‌های سوخت و هوا در کانال‌ها از معادله‌های پایستگی جرم و تکانه استفاده می‌شود. معادله‌های یادشده با فرض جریان آرام و تراکم پذیر (عدد ماخ کوچکتر از ۰/۳) و در حالت پایا مطابق با رابطه‌های (۲) و (۳) تعریف می‌شوند [۲۳].

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

$$\rho(V \cdot \nabla)V = \nabla \cdot \left[-pI + \mu(\nabla V + (\nabla V)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot V)I \right] \quad (3)$$

در رابطه‌های فوق، کمیت‌های V ، ρ ، p و μ به ترتیب میدان سرعت، چگالی، میدان فشار و لزجت دینامیکی جریان سیال می‌باشند. همچنین متغیر Q_m نمایانگر تولید یا مصرف جرم بر واحد حجم است که با توجه به واکنش‌های شیمیایی و الکتروشیمیایی در الکترودها کاربرد دارد و در کانال‌ها و الکترولیت دارای مقدار صفر است. با توجه به اثر تداخل بر میدان سرعت و فشار، برای تحلیل جریان‌ها در محیط‌های متخلخل شامل الکترودها و الکترولیت، از رابطه داری- برینکمن مطابق ذیل استفاده می‌شود.

$$\frac{1}{\varepsilon_p} \rho (\nabla \cdot \nabla) V \frac{1}{\varepsilon_p} = \nabla \cdot \left[-pI + \frac{1}{\varepsilon_p} \mu (\nabla \nabla + (\nabla \nabla)^T) - \frac{2}{3} \mu \frac{1}{\varepsilon_p} (\nabla \cdot V) I \right] - \left(\mu \kappa^{-1} + \frac{Q_m}{\varepsilon_p^2} \right) V \quad (4)$$

در رابطه بالا، عبارت‌های ε_p و κ به ترتیب تخلخل محیط و ضریب نفوذپذیری می‌باشند.

گونه‌ها

جریان‌های سوخت و هوا به صورت مخلوط گازی و شامل گونه‌های هیدروژن، نیتروژن، بخار آب و آمونیاک می‌باشند که در بخش‌های آند و کاتد پیل سوختی تولید یا مصرف شده و به دو شیوه نفوذ یا کپه‌ای، جابجا می‌شوند. برای محاسبه کسر مولی گونه‌ها در هر موقعیت، از معادله پایستگی استفان-ماکسول استفاده می‌شود که در رابطه (۵) نشان داده شده است.

$$\nabla \cdot J_i + \rho (\nabla \cdot \nabla) \omega_i = R_i \quad (5)$$

در معادله (۵)، J_i و ω_i به ترتیب شار جرمی نفوذ و کسر حجمی هر گونه می‌باشند. همچنین R_i نمایانگر تولید یا مصرف هر گونه بر حسب مول بر واحد حجم است.

$$J_i = -(\rho \omega_i \sum_k D_{e,ik} d_k) \quad (6)$$

$$D_{e,ik} = \frac{\varepsilon_p}{\tau_F} D_{ik} \quad (7)$$

$$d_k = \nabla x_k + \frac{1}{p} [(x_k - \omega_k) \nabla p], x_k = \frac{\omega_k}{M_k} M_n, M_n = \left(\sum_i \frac{\omega_i}{M_i} \right)^{-1} \quad (8)$$

در رابطه‌های بالا، کمیت‌های d_k ، $D_{e,ik}$ ، τ_F ، D_{ik} ، x_k ، M_n و M_i به ترتیب عامل محرک نفوذ، ضریب نفوذ دوتایی مؤثر، پیچ‌خوردگی، ضریب نفوذ دوتایی، کسر مولی گونه‌ها، جرم مولی میانگین و جرم مولی هر گونه می‌باشند.

شار الکتریکی

با انجام واکنش اکسایش در آند، گاز هیدروژن به پروتون تبدیل می‌شود. عبور پروتون‌ها و الکترون‌ها از الکترولیت و مدار الکتریکی بیرونی، باعث ایجاد جریان‌های یونی و الکتریکی می‌شود. در رابطه‌های (۹) و (۱۰)، واکنش‌های الکتروشیمیایی اکسایش و کاهش که به ترتیب در آند و کاتد پیل سوختی روی می‌دهد، نشان داده شده است.



همچنین از پایستگی شار (قانون اهم) برای بررسی و تحلیل جریان‌های یونی و الکتریکی در الکترولیت، آند و کاتد مطابق ذیل استفاده می‌شود.

$$\nabla \cdot (-\sigma_i^{el} \nabla \phi_i^{el}) = 0 \quad (11)$$

$$\nabla \cdot (-\sigma_i^a \nabla \phi_i^a) = \nabla \cdot (-\sigma_e^a \nabla \phi_e^a) = +i_{v,a} \quad (12)$$

$$\nabla \cdot (-\sigma_i^c \nabla \phi_i^c) = \nabla \cdot (-\sigma_e^c \nabla \phi_e^c) = -i_{v,c}$$

در روابط فوق، σ_e ، σ_i و ϕ_i به ترتیب رسانندگی الکترونی و یونی و پتانسیل‌های الکترونی و یونی می‌باشند. همچنین کمیت‌های $i_{v,c}$ و $i_{v,a}$ به ترتیب مشخص کننده جریانی است که در پیل سوختی تولید یا مصرف می‌شوند. برای تعیین ارتباط میان جریان و پتانسیل اضافی فعال‌سازی از رابطه باتلر-والمر استفاده می‌شود:

$$i_v = A_a i_0 (C_r \exp\left(\frac{\alpha_a F}{RT} \eta\right) - C_0 \exp\left(\frac{\alpha_c F}{RT} \eta\right)) \quad (13)$$

A_a ، i_0 ، α_a ، F و η به ترتیب سطح فعال الکتروشیمیایی الکتروکاتود متخلخل بر واحد حجم، چگالی جریان تبدیلی، ضریب جابجایی شارژ آندی و کاتدی، ثابت فارادی و پتانسیل اضافی فعال سازی می باشند. همچنین عبارت های C_0 و C_r به ترتیب نسبت های کاهیده و اکسایش شده گونه ها به مقادیر مرجع می باشند. پتانسیل اضافی فعال سازی (η) به صورت ذیل تعریف می شود:

$$\eta = \phi_e - \phi_i - V_{ocv} \quad (14)$$

V_{ocv} پتانسیل مدار باز است که در آند برابر صفر و در کاتد به صورت ذیل تعیین می شود:

$$V_{ocv} = 1.253 - 0.00024516T + \frac{RT}{2F} \ln \frac{p_{H_2}(p_{O_2})^2}{p_{H_2O}} \quad (15)$$

انرژی

باتوجه به اهمیت و اثر دما بر عملکرد پیل سوختی و همچنین واکنش شیمیایی گرماگیر تجزیه آمونیاک، رابطه پایستگی انرژی در پیل سوختی برای محاسبه میدان دمایی به کار می رود.

$$\rho C_p V \cdot \nabla T + \nabla \cdot (-k_{eff} \nabla T) = Q_h \quad (16)$$

با فرض تعادل حرارتی موضعی^۲، دمای فازهای سیال و جامد محیط های متخلخل یکسان در نظر گرفته می شود. برای جریان سیال (گاز کامل) در کانال های سوخت و هوا، ظرفیت گرمایی ویژه و میانگین جرم مولی تابعی از دما، فشار و کسر مولی گونه های مخلوط گازی محاسبه می شود. برای محاسبه میدان دما در محیط های متخلخل شامل الکترودها و الکترولیت، از ضریب رسانندگی گرمایی مؤثر استفاده می شود. در معادله (۱۶)، Q_h ، T ، C_p ، k_{eff} به ترتیب ظرفیت گرمایی ویژه، دما، چشمه یا چاه گرمایی حاصل از واکنش های شیمیایی و الکتروشیمیایی و ضریب رسانندگی گرمایی مؤثر است. k_{eff} به صورت ذیل مشخص می شود:

$$k_{eff} = \varepsilon_p k_f + (1 - \varepsilon_p) k_s \quad (17)$$

چشمه حرارتی Q_h شامل گرمای تولیدی یا مصرفی در بخش های مختلف پیل سوختی است که به صورت رابطه (۱۸) تعریف می شود.

$$Q_h = \begin{cases} \sigma_i^{el} (\nabla \phi_i^{el})^2 + Q_{elec} & \text{Electrolyte} \\ \sigma_i^c (\nabla \phi_i^c)^2 + \sigma_e^c (\nabla \phi_e^c)^2 + i\eta & \text{Cathode} \\ \sigma_i^a (\nabla \phi_i^a)^2 + \sigma_e^a (\nabla \phi_e^a)^2 + i\eta + Q_{chem} & \text{Anode} \end{cases} \quad (18)$$

² Local Thermal Equilibrium

در معادله‌ی (۱۸)، Q_{elec} ، $\sigma(\nabla\phi)^2$ ، $i\eta$ و Q_{chem} به ترتیب چشمه حرارتی حاصل از واکنش‌های الکتروشیمیایی، اتلاف گرمایی مهمی، اتلاف حرارتی پتانسیل اضافی و واکنش شیمیایی ناشی از تجزیه آمونیاک است. همچنین آنالپی حرارتی واکنش گرماگیر تجزیه آمونیاک، ۴۶ کیلوژول بر مول است.

شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی، تعریف معادلات و حل عددی از نرم‌افزار شبیه‌سازی چند فیزیکی - کامسول^۳ استفاده شده است. در این راستا، نخست هندسه مسأله مدل‌سازی شده و با استفاده از ماژول ترمودینامیک کلیه ویژگی‌های فیزیکی گونه‌ها و مخلوط‌ها تعریف می‌شود. سپس با استفاده از ماژول‌های مهندسی واکنش شیمیایی^۴، جریان آرام^۵، جابجایی گونه‌های شیمیایی^۶، انتقال حرارت^۷ و الکتروشیمی^۸ به ترتیب واکنش شیمیایی تجزیه آمونیاک و معادلات بقای تکانه، گونه‌ها، انرژی و شار الکتریکی تعریف و با یکدیگر کوپل می‌شوند.

اعتبارسنجی

در این بخش، صحت و دقت حل عددی با پژوهش راناسینگ و همکارانش [۲۴] مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۳ نمودار تغییرات چگالی توان - چگالی جریان در دو پژوهش مورد مقایسه قرار گرفته است که حاکی از دقت مناسب روش حل مورد استفاده در این پژوهش است.

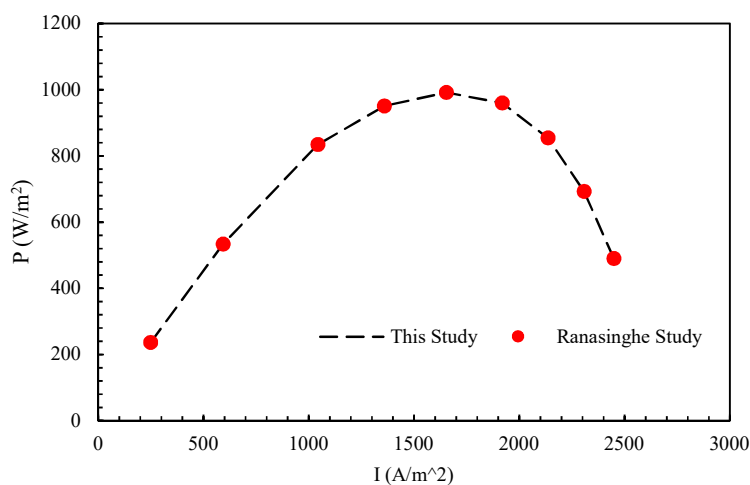


Figure 3- Power density- Current density diagram

شکل ۳- نمودار تغییرات چگالی توان - چگالی جریان

برای استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین به منظور پیش‌بینی پارامترهای هدف، نیاز به مجموعه داده‌های کافی است. بر این اساس، در مرحله نخست متغیرهای ورودی اثرگذار شامل شش عبارت تخلخل آند، تخلخل کاتد، تخلخل الکترولیت، دمای

² COMSOL multi-physics ³
² Chemical Reaction Engineering Module ³
² Laminar Flow Module ⁵
² Chemical Species Transport Module ⁶
² Heat Transfer Module ⁷
² Electrochemistry Module ⁸

ورودی، سرعت جریان سوخت و سرعت جریان هوا، انتخاب می‌شود. سپس با تغییر عبارت‌های ورودی انتخاب شده در یک بازه مشخص، مقادیر توابع هدف شامل چگالی توان و دمای بیشینه پیل سوختی محاسبه می‌شود.

تحلیل و بررسی داده‌ها

پس از شبیه‌سازی پیل سوختی اکسید جامد پروتونی با دمای کاری متوسط و سوخت آمونیاک، اثر عبارت‌های ورودی گوناگون بر عملکرد پیل سوختی، درحالی‌که سایر عبارت‌ها ثابت می‌باشند، مطالعه و بررسی می‌شود.

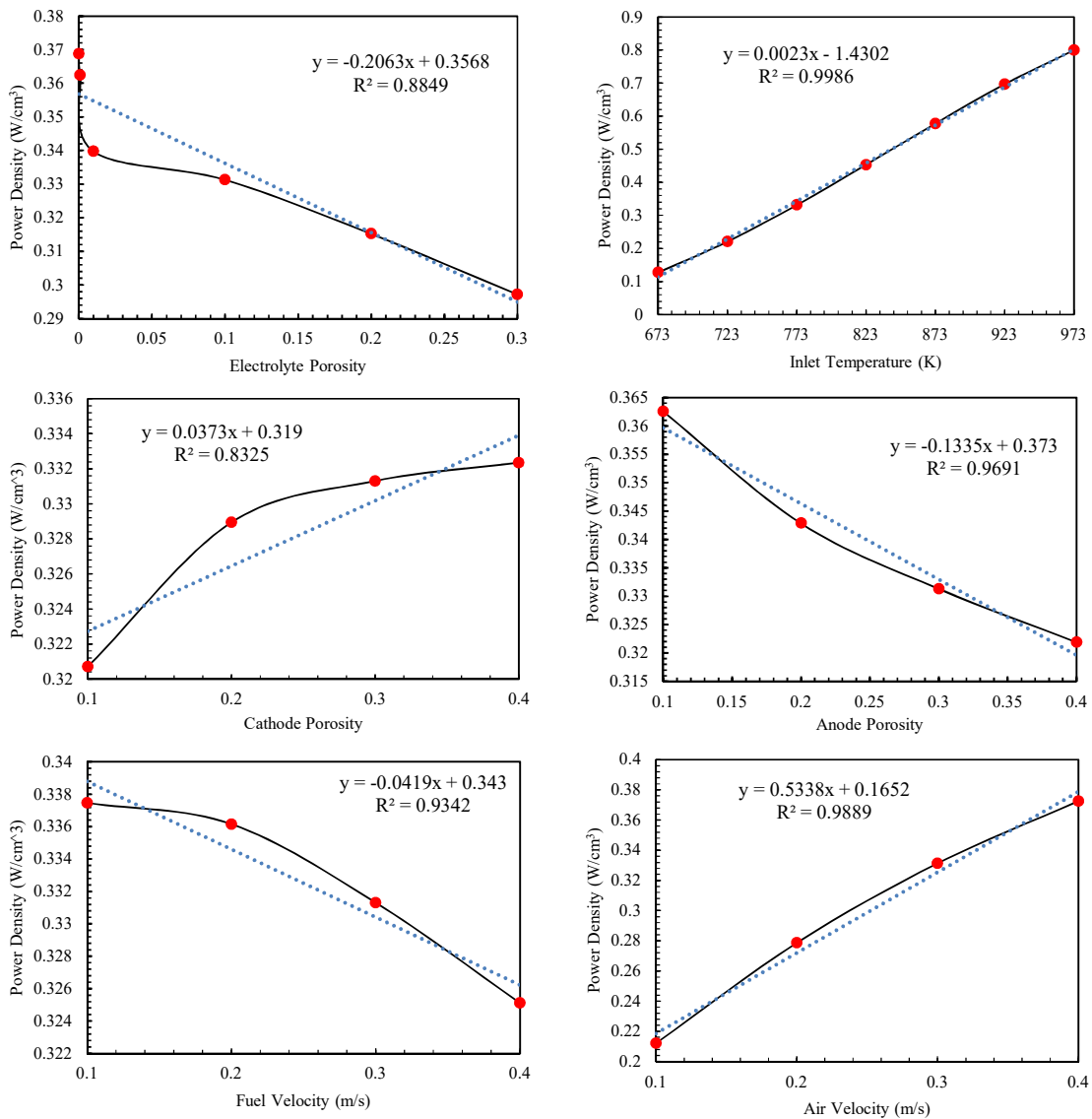


Figure 4- Effect of changing input parameters on power density

شکل ۴- اثر تغییر پارامترهای ورودی بر چگالی توان

در این راستا، با تغییر عبارت‌های ورودی در یک بازه کاربردی، عبارت‌های هدف محاسبه می‌شوند. شبیه‌سازی و حل معادلات در ولتاژ ۰/۷ ولت، دمای ورودی ۷۷۳ کلوین و تخلخل الکترولیت ۰/۱ انجام شده است. همچنین تخلخل و سرعت

جریان‌ها، به ترتیب $0/3$ و $0/3$ متر بر ثانیه در نظر گرفته شده است. در شکل ۴، تغییرات چگالی توان نسبت به عبارت‌های ورودی نشان داده شده است. همان‌گونه که شکل ۴ نشان می‌دهد، افزایش تخلخل الکترولیت باعث کاهش عملکرد پیل سوختی می‌شود. روند کاهش چگالی توان تا پیش از مقدار تخلخل $0/01$ با شیب تندتری رخ می‌دهد. برای مثال افزایش تخلخل از $0/001$ به $0/01$ و $0/3$ به ترتیب ۸ درصد و ۲۰ درصد باعث کاهش چگالی توان پیل سوختی می‌شود. افزایش دمای ورودی با افزایش چگالی توان پیل سوختی رابطه مستقیم دارد. همان‌گونه که نشان داده شده است، این افزایش با دقت مناسبی می‌تواند به صورت خطی و با تخمین مناسبی، پیش‌بینی شود. برای مثال، چگالی توان با افزایش دما از 673 به 773 و 973 کلوین به ترتیب به مقادیر $0/22$ و $0/8$ می‌رسد. افزایش میزان تخلخل در الکترودهای آند و کاتد اثرگذاری وارونه بر عملکرد پیل سوختی می‌گذارد. افزایش میزان تخلخل آند باعث کاهش چگالی توان پیل سوختی می‌شود. همان‌گونه که در شکل ۴ مشهود است، این روند کاهشی با تقریب مناسبی به صورت خطی قابل پیش‌بینی است. برخلاف اثرگذاری آند، افزایش تخلخل کاتد، باعث افزایش عملکرد پیل سوختی با شیبی غیرخطی می‌شود. همچنین مطابق شکل ۴ مشاهده می‌شود میزان اثرگذاری تخلخل آند به نسبت تخلخل کاتد، قابل ملاحظه و بیشتر است. افزایش سرعت جریان‌های سوخت و هوا نیز دارای اثرگذاری وارونه نسبت به یکدیگر بر عملکرد پیل سوختی می‌باشند. افزایش سرعت جریان هوا تقریباً به صورت خطی چگالی توان پیل سوختی را افزایش می‌دهد. برای مثال افزایش سرعت جریان هوا از $0/1$ به $0/4$ باعث افزایش چگالی توان تا حدود ۷۶ درصد می‌شود. از سوی دیگر افزایش سرعت جریان آمونیاک به عنوان سوخت ورودی، دارای رابطه معکوس با توان پیل سوختی است. همچنین این اثرگذاری به نسبت متغیرهای دیگر، کم‌تر است، به طوری که افزایش سرعت جریان سوخت از $0/1$ به $0/4$ ، چگالی توان پیل سوختی را $3/6$ درصد کاهش می‌دهد.

در شکل ۵، اثر متغیرهای ورودی انتخاب شده بر عبارت‌های هدف شامل بیشینه دما و چگالی توان پیل سوختی نشان داده شده است. نخست به اثر تخلخل الکترولیت پرداخته می‌شود، همان‌گونه که شکل ۵ نشان می‌دهد، افزایش تخلخل الکترولیت، تا حدود $0/1$ باعث افزایش بیشینه دمای پیل سوختی می‌شود، ولی با ادامه افزایش تخلخل، تغییر قابل ملاحظه‌ای در دمای بیشینه مشاهده نمی‌شود. همچنین تغییرات نمودار حاکی از روند غیرخطی اثرپذیری بیشینه دما از افزایش تخلخل الکترولیت است. برای مثال افزایش تخلخل از $0/001$ به $0/1$ باعث افزایش حدود هشت درجه‌ای بیشینه دمای پیل سوختی می‌شود.

در خصوص اثرگذاری دمای ورودی، همان‌گونه که انتظار می‌رود، رابطه مستقیم میان دمای بیشینه و دمای ورودی پیل سوختی مشاهده می‌شود. همچنین تغییرات نمودار بیشینه دما و دمای ورودی در شکل ۵ نشان می‌دهد که ارتباط میان دو عبارت یادشده با دقت مناسبی می‌تواند خطی فرض شود. در ادامه اثر متغیر تخلخل الکترودهای آند و کاتد بر بیشینه دمای پیل سوختی بررسی می‌شود. همان‌گونه که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، اثرپذیری بیشینه دما از میزان تخلخل آند و کاتد، متفاوت است. افزایش تخلخل آند، باعث کاهش بیشینه دمای پیل سوختی شده و دارای روند نسبتاً خطی است. برای مثال افزایش تخلخل از $0/1$ به $0/4$ ، می‌تواند باعث کاهش دو درجه‌ای دما شود. از سوی دیگر، افزایش تخلخل در کاتد، اثرگذاری متفاوتی بر بیشینه دمای پیل سوختی داشته و باعث افزایش دما می‌شود. برای مثال افزایش تخلخل از $0/1$ به $0/4$ ، باعث افزایش دو درجه‌ای دما در یک روند غیر خطی می‌شود. شکل ۵ نشان می‌دهد که افزایش سرعت جریان‌های سوخت و هوا، باعث افزایش بیشینه دمای پیل سوختی می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که میزان اثرگذاری سرعت جریان‌ها بر عبارت بیشینه دما، متفاوت است. برای مثال، افزایش سرعت جریان سوخت از $0/1$ به $0/4$ ، حداکثر باعث دو درجه افزایش دما می‌شود. با این حال، افزایش سرعت جریان هوا از $0/1$ به $0/4$ ، باعث حدود سی و دو درجه افزایش در بیشینه دمای پیل سوختی می‌شود.

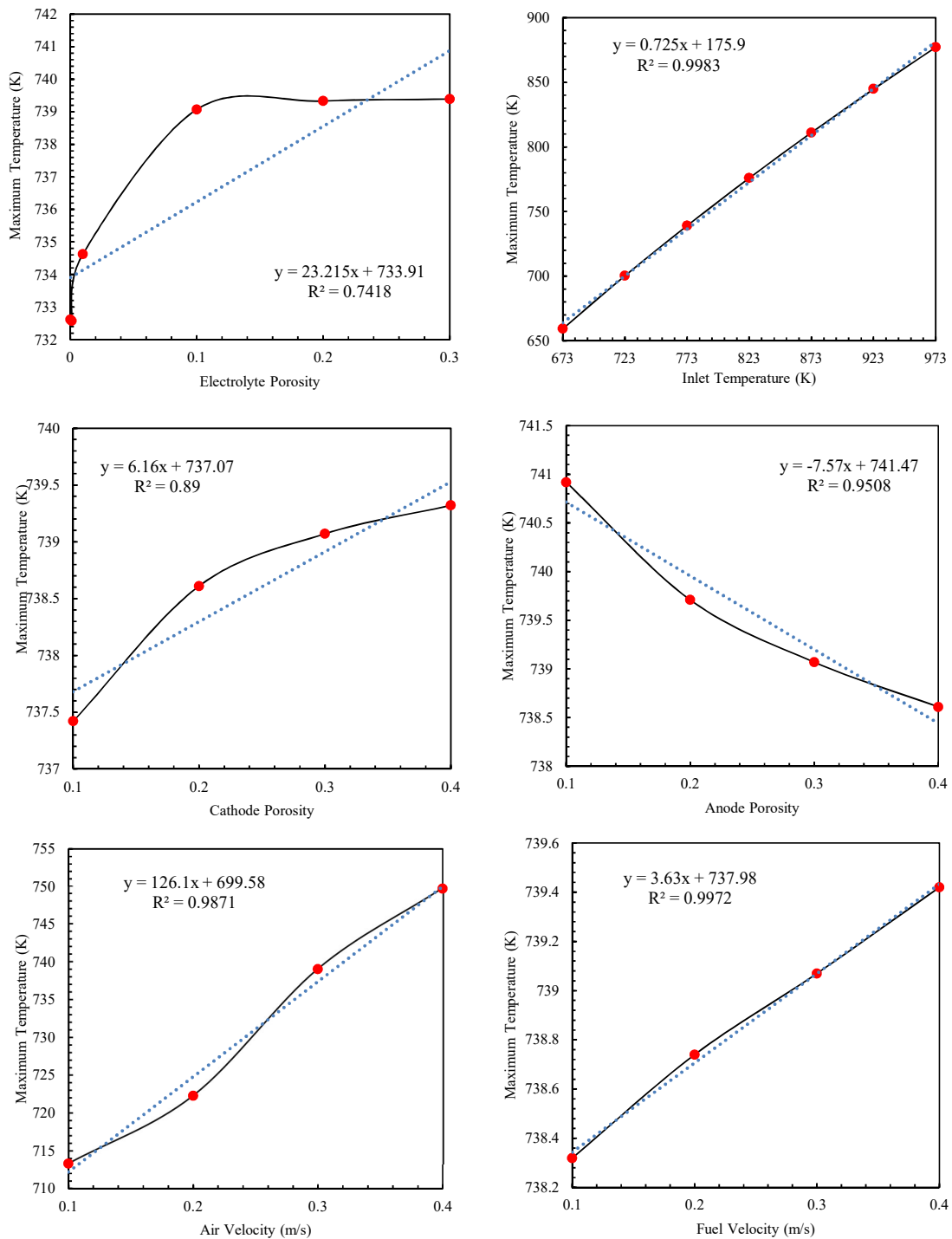


Figure 5- Effect of changing input parameters on maximum temperature

شکل ۵- اثر تغییر پارامترهای ورودی بر بیشینه دما

همبستگی میان داده‌ها

با استفاده از شبیه‌سازی و حل عددی، هزار و سی داده محاسباتی به‌ازای مقادیر گوناگون متغیرهای ورودی، تولید می‌شود. پیش از بهره‌برداری از داده‌ها برای آموزش ماشین، می‌بایست، پردازش لازم انجام شود. نخست با استفاده از روش همبستگی پیرسون^{۲۹} اثرگذاری هر عبارت روی عبارت‌های دیگر اندازه‌گیری می‌شود. در شکل ۶، میزان اثرگذاری براساس ضریب همبستگی پیرسون نمایش داده شده است. همان‌گونه که مشهود است، دمای ورودی بیشترین اثرگذاری و رابطه مستقیم را با دمای بیشینه پیل سوختی دارد.

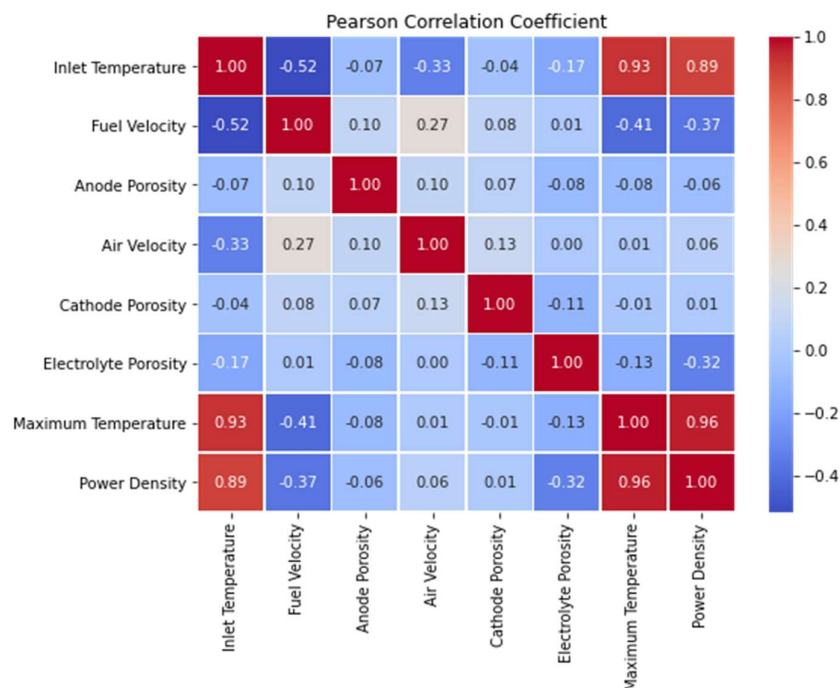


Figure 6- Pearson Correlation Coefficient

شکل ۶- ضریب همبستگی پیرسون

در ادامه، وضعیت آماری داده‌ها، پیش از انجام فرآیند پیش‌پردازش و آماده‌سازی برای آموزش ماشین در جدول ۲، نشان داده شده است. همان‌گونه که در جدول مشاهده می‌شود، سعی شده است کلیه محاسبات دربردارنده مقادیر گوناگون در بازه‌های کاربردی برای پیل سوختی اکسید جامد، باشد.

جدول ۲- وضعیت آماری داده‌ها

Table 2- Statistical Data Status

Parameters	Inlet Temperature (K)	Fuel Velocity (m/s)	Anode Porosity	Air Velocity (m/s)	Cathode Porosity	Electrolyte Porosity	Maximum Temperature (K)	Power Density (W/cm ³)
count	1030.00	1030.00	1030.00	1030.00	1030.00	1030.00	1030.00	1030.00
mean	862.63	0.26	0.32	0.28	0.34	0.11	789.08	0.37
std	92.94	0.09	0.06	0.10	0.06	0.10	62.34	0.16
min	673.00	0.10	0.10	0.10	0.10	0.0001	654.64	0.07
25%	800.00	0.15	0.25	0.20	0.30	0.01	739.56	0.23
50%	900.00	0.25	0.35	0.30	0.35	0.10	805.44	0.41
75%	950.00	0.35	0.35	0.35	0.40	0.20	836.47	0.49
max	973.00	0.50	0.50	0.50	0.50	0.50	890.70	0.69

²⁹ Pearson Correlation Coefficient (PCC)

برای کاهش اثرگذاری ترتیب قرارگیری داده‌ها بر آموزش ماشین، نخست تمامی داده‌ها برزده می‌شوند. پس از به هم خوردن ترتیب قرارگیری مقادیر، می‌بایست داده‌های لازم برای آموزش و آزمودن ماشین جدا شود. در این راستا، ۰/۸ داده‌ها برابر با ۸۲۴ عدد برای آموزش ماشین و ۰/۲ داده‌ها برابر با ۲۰۶ عدد برای آزمودن داده‌ها به کار گرفته می‌شوند.

پس از جداسازی داده‌ها برای آموزش و آزمودن ماشین، فرآیند پیش پردازش داده‌ها انجام می‌شود. برای این منظور داده‌های مورد استفاده برای آموزش، تحت فرآیند استانداردسازی قرار می‌گیرد. فرآیند استانداردسازی یک ابزار پیش پردازش است که برای استانداردسازی کلیه عبارت‌های ورودی در یک مجموعه داده استفاده می‌شود. استانداردسازی، داده‌ها را به گونه‌ای تبدیل می‌کند که هر عبارت دارای میانگین صفر و انحراف استاندارد یک باشد. این روند، برای بسیاری از الگوریتم‌های یادگیری ماشین که به مقیاس عبارت‌های ورودی حساس هستند، مهم است.

$$\mu_j = \frac{1}{n} \sum_i^n x_{ij} \quad (19)$$

در رابطه فوق، x_{ij} و μ_j به ترتیب بیانگر مقادیر مختلف و میانگین هر عبارت ورودی می‌باشند. پس از میانگین‌گیری از هر عبارت، با استفاده از رابطه (۲۰) انحراف استاندارد آن، مطابق ذیل محاسبه می‌شود:

$$\sigma_j = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_i^n (x_{ij} - \mu_j)^2} \quad (20)$$

σ_j نشان دهند انحراف استاندارد هر عبارت ورودی است. پس از محاسبه میانگین و انحراف استاندارد برای هر عبارت ورودی که برای آموزش ماشین به کار می‌رود، فرآیند برازش^۲ انجام شده است. پس از متناسب‌سازی، فرآیند تبدیل^۳ روی داده‌های به دست آمده، صورت می‌پذیرد. فرآیند تبدیل مطابق با رابطه ذیل است:

$$z_{ij} = \frac{x_{ij} - \mu_j}{\sigma_j} \quad (21)$$

z_{ij} بیانگر مقدار هر عبارت ورودی است که تحت فرآیند انحراف استانداردسازی واقع شده است. انجام فرآیند تبدیل بر روی داده‌هایی که ماشین را مورد ارزیابی عملکرد قرار می‌دهند نیز لازم است. فرآیند برازش^۲ صرفاً بر روی داده‌های آموزشی صورت می‌پذیرد تا از عدم آموزش ماشین با داده‌هایی که جهت آزمودن به کار گرفته می‌شود، اطمینان حاصل شود. پس از انجام فرآیندهای پیش پردازش بر روی داده‌ها، امکان آموزش ماشین فراهم می‌شود. برای این منظور، یازده (۱۱) الگوریتم برای یادگیری ماشین استفاده شده و در پایان مورد ارزیابی عملکرد واقع می‌شوند.

نتایج

پس از آموزش ماشین با الگوریتم‌های گوناگون، ماشین تحت ارزیابی و آزمودن قرار می‌گیرد. برای این منظور از معیار خطای مطلق میانگین^۴ و ریشه میانگین مربعات^۵ استفاده می‌شود. پس از پیش‌بینی عملکرد پیل سوختی با استفاده از ماشین آموزش دیده، خطای مقادیر به دست آمده با مقادیر واقعی محاسبه شده و اعتبار عملکرد ماشین مشخص می‌شود.

¹ Shuffle
³ Standardize
³ Fitting
³ Transforming
³ Mean Absolute Error (MAE)
³ Root Mean Square Error (RMSE)
 1
 2
 3
 4
 5

جدول ۳- عملکرد ماشین در پیش‌بینی چگالی توان با الگوریتم‌های مختلف

Table 3- Machine Performance in Power Density Prediction with Various algorithms

Regression Models	RMSE_train	MAE_train	R ² _train	RMSE_test	MAE_test	R ² _test
Linear	0.03099652	0.02289843	0.96183529	0.03154692	0.02413547	0.95963308
Stochastic Gradient Descent	0.03101462	0.02277184	0.96179071	0.03167708	0.02407398	0.95929927
Ridge	0.03099653	0.02289313	0.96183526	0.03154936	0.02413246	0.95962682
Decision Tree	0.00000000	0.00000000	1.00000000	0.01102635	0.00309556	0.99506854
Random Forest	0.00193758	0.00101979	0.99985087	0.00892497	0.00380967	0.99676909
Support Vector Machine	0.05483591	0.04573663	0.88055549	0.05402141	0.04557084	0.88162947
Lasso	0.03113737	0.02255870	0.96148766	0.03170878	0.02377720	0.95921778
Gradient Boosting	0.00630288	0.00459090	0.99842197	0.00727113	0.00528423	0.99785555
K Neighbors	0.03218481	0.02503208	0.95885302	0.04547824	0.03457744	0.91610828
XG Boosting	0.00136861	0.00102359	0.99992560	0.00613662	0.00249331	0.99847254
Artificial Neural Network	0.03099678	0.02286982	0.96183465	0.03155168	0.02410902	0.95962090

همان‌گونه که در جدول ۳ نشان داده شده است، براساس شاخص R^2 به‌ترتیب الگوریتم‌های XG Boosting، Gradient Boosting، Random Forest و Decision Tree دارای بهترین عملکرد در پیش‌بینی چگالی توان پیل سوختی می‌باشند. براین اساس، R^2 الگوریتم‌های مذکور بیش از ۰/۹۹ می‌باشند.

جدول ۴- عملکرد ماشین در پیش‌بینی بیشینه دما با الگوریتم‌های مختلف

Table 4- Machine Performance in Maximum Temperature Prediction with Various algorithms

Regression Models	rmse_train	mae_train	r2_train	rmse test	mae test	r2 test
Linear	9.634103	7.533192	0.976046	10.47626	7.887151	0.971602
Stochastic Gradient Descent	9.635198	7.519635	0.97604	10.46618	7.862889	0.971657
Ridge	9.634109	7.534488	0.976045	10.47671	7.888727	0.9716
Decision Tree	0	0	1	1.005492	0.341553	0.999738
Random Forest	0.388605	0.188909	0.999961	1.193282	0.461912	0.999632
Support Vector Machine	0.896029	0.498045	0.999793	1.238221	0.791369	0.999603
Lasso	9.634103	7.533444	0.976046	10.47658	7.887702	0.9716
Gradient Boosting	1.765142	1.162257	0.999196	2.037377	1.388921	0.998926
K Neighbors	12.70697	9.762762	0.958328	14.25822	10.52725	0.947398
XG Boosting	0.088429	0.059149	0.999998	0.518606	0.23728	0.99993
Artificial Neural Network	9.634103	7.533192	0.976046	10.47626	7.887151	0.971602

در جدول ۴، عملکرد ماشین در پیش‌بینی بیشینه دمای پیل سوختی نشان داده شده است. همان‌گونه که مشهود است، الگوریتم‌های XG Boosting، Decision Tree، Random Forest، Support Vector Machine و Gradient Boosting دارای عملکرد بهینه و R^2 بیش از ۰/۹۹ می‌باشند.

از جدول‌های ۳ و ۴ مشاهده می‌شود که دقت عملکرد الگوریتم‌ها در پیش‌بینی دمای بیشینه در مقایسه با چگالی توان مناسب‌تر است و در تمامی الگوریتم‌ها افزایش دقت مشهود است. این افزایش دقت در خصوص الگوریتم Support Vector Machine بیشتر از سایر الگوریتم‌ها است. براین اساس، R^2 ماشین در پیش‌بینی چگالی توان و دمای بیشینه، به‌ترتیب ۰/۸۸ و ۰/۹۹ است. این موضوع می‌تواند متأثر از روند خطی‌تر تغییرات بیشینه دما به نسبت تغییرات عبارات ورودی به‌ویژه دمای ورودی صورت پذیرد.

در شکل ۷، عملکرد الگوریتم‌های Support Vector Machine و XG Boosting مقایسه شده است. براین اساس، داده‌های پیش‌بینی شده و اصلی نشان داده شده است. نمودارها حاکی از انطباق مناسب و قابل قبول الگوریتم XG Boosting در مقایسه با الگوریتم Support Vector Machine است. دقت بالای پیش‌بینی باعث می‌شود نقاط بروی خط $Y=X$ قرار بگیرند و دوری از خط $Y=X$ بیانگر اختلاف قابل ملاحظه میان مقادیر اصلی و پیش‌بینی شده است.

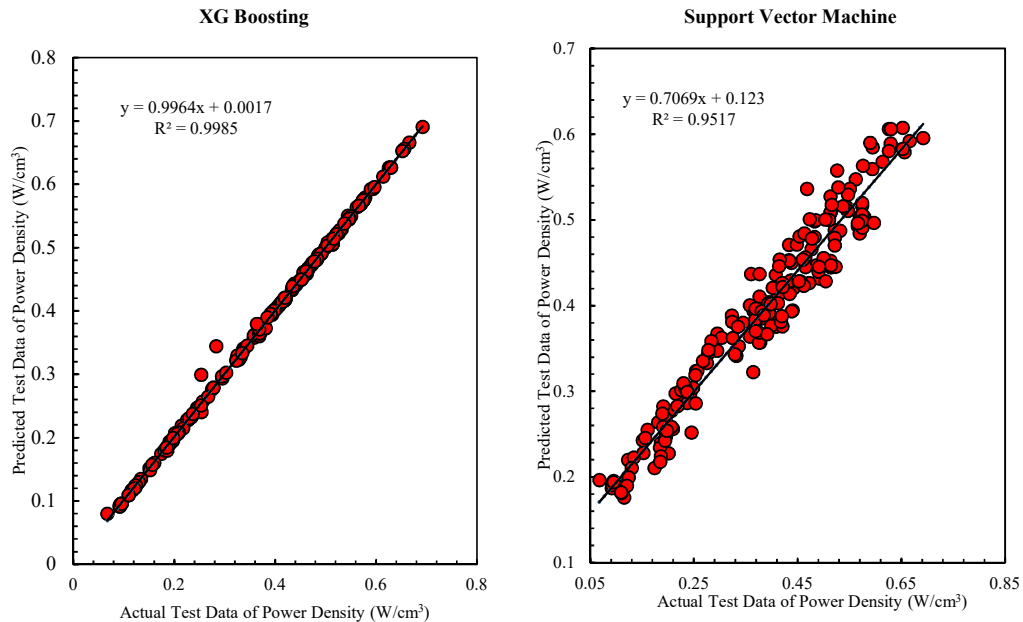


Figure 7- Comparison of XG Boosting and Support Vector Machine in Prediction of Power Density

شکل ۷- مقایسه عملکرد الگوریتم‌های XG Boosting و Support Vector Machine در پیش‌بینی چگالی توان

در ادامه در شکل ۸ نیز عملکرد XG Boosting و K Neighbours در پیش‌بینی دمای بیشینه پیل سوختی مقایسه شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود دقت پیش‌بینی دمای بیشینه در مقایسه با چگالی توان برای الگوریتم‌های گوناگون مناسب‌تر است. براین اساس K Neighbours با وجود اینکه به نسبت سایر الگوریتم‌های دقت کم‌تری دارد، ولی دارای R^2 با مقدار ۰/۹۴ است.

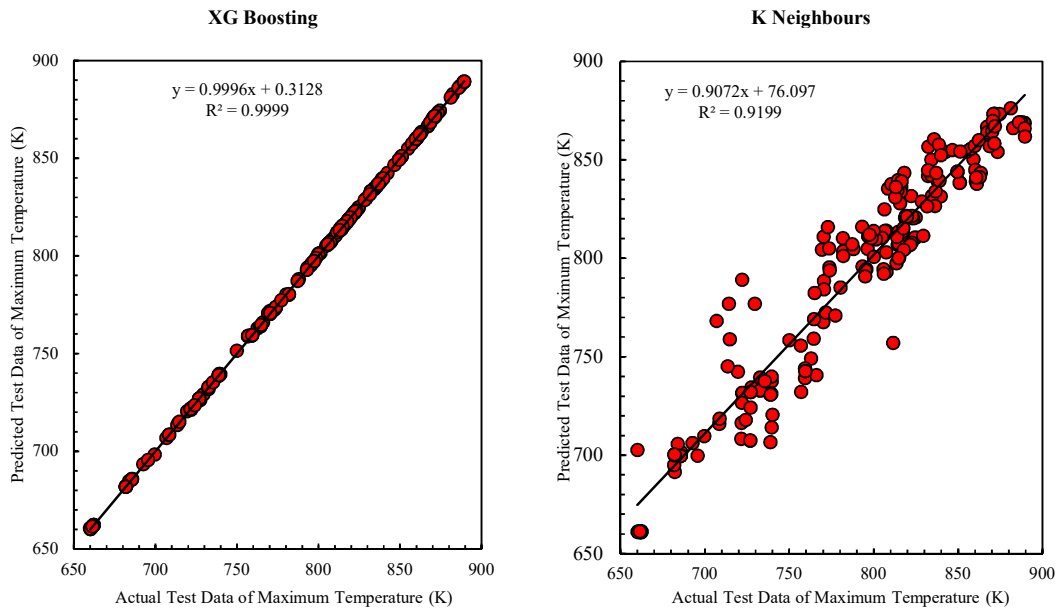


Figure 8- Comparison of XG Boosting and K Neighbours in Prediction of Power Density

شکل ۸- مقایسه عملکرد الگوریتم‌های XG Boosting و K Neighbours در پیش‌بینی چگالی توان

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نخست پیل سوختی اکسید جامد با سوخت آمونیاک، نشستی الکترولیت و دمای کاری متوسط به‌صورت لوله‌ای (مقارن‌محوری) شبیه‌سازی شده و پس از اعتبارسنجی روش حل عددی، عبارت‌های اثرگذار ورودی شامل تخلخل الکترولیت و الکترودها، سرعت جریان‌های سوخت و هوا و دمای ورودی، برای محاسبه توابع هدف شامل دمای بیشینه و چگالی توان پیل سوختی انتخاب شدند. سپس، مجموعه داده‌های لازم با تغییر عبارت‌های ورودی با تعداد هزار و سی مقدار ایجاد شده و برای آموزش ماشین مورد استفاده قرار گرفته است. هشتاد درصد داده‌ها برای آموزش ماشین با یازده الگوریتم مختلف به‌کار گرفته شده است. در پایان ماشین‌های آموزش دیده با بیست درصد داده‌های باقیمانده مورد ارزیابی عملکرد قرار می‌گیرند. اهم نتیجه‌های به‌دست آمده به‌شرح ذیل مورد اشاره قرار می‌گیرد:

- * با استفاده از ضریب همبستگی پیرسون مشاهده شد که بیشترین اثرگذاری بر توابع هدف متعلق به دمای ورودی است. همچنین مشاهده شد که اثر دمای ورودی بر دمای بیشینه بیشتر از چگالی توان پیل سوختی است.
- * عبارت‌های ورودی تخلخل الکترولیت و تخلخل آند با چگالی توان رابطه معکوس دارند. براین اساس، افزایش تخلخل آند و تخلخل الکترولیت بیشتر از سایر عبارت‌های ورودی می‌توانند باعث کاهش عملکرد پیل سوختی شوند.
- * دمای ورودی دارای رابطه مستقیم و بیشترین اثر بر دمای بیشینه پیل سوختی است. همچنین سرعت جریان سوخت نیز دارای رابطه معکوس و اثر قابل ملاحظه‌ای در مقایسه با سایر عبارت‌های ورودی بر دمای بیشینه پیل سوختی است.
- * عملکرد الگوریتم‌های مختلف در پیش‌بینی چگالی توان و دمای بیشینه با یکدیگر متفاوت است. براین اساس، الگوریتم XG Boosting و Support Vector Machine به‌ترتیب دارای بالاترین و کم‌ترین دقت در پیش‌بینی چگالی توان می‌باشند.
- * عملکرد کلیه الگوریتم‌های به‌کار رفته در آموزش و آزمون ماشین برای پیش‌بینی دمای بیشینه مناسب و دارای R^2 بالای ۰/۹ می‌باشند. براین اساس، XG Boosting و K Neighbours به‌ترتیب دارای بالاترین و کم‌ترین دقت در پیش‌بینی دمای بیشینه می‌باشند.

منابع

- [1] D. F. Cheddie, "Temkin-Pyzhev Kinetics in Intermediate Temperature Ammonia-Fed Solid Oxide Fuel Cells (SOFCs)," *Int. J. Power Energy Res.*, vol. 2, no. 3, Jul. 2018.
- [2] M. Ilbas, M. A. Alemu, and F. M. Cimen, "Comparative performance analysis of a direct ammonia-fuelled anode supported flat tubular solid oxide fuel cell: A 3D numerical study," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 5, pp. 3416–3428, Jan. 2022.
- [3] G. Jeerh, M. Zhang, and S. Tao, "Recent progress in ammonia fuel cells and their potential applications," *J. Mater. Chem. A*, vol. 9, no. 2, pp. 727–752, Jan. 2021.
- [4] X. Haoran, M. Jingbo, T. Peng, C. Bin, W. Zhen, Z. Yanxiang, W. Huizhi, X. Jin and N. Meng, "Towards online optimisation of solid oxide fuel cell performance: Combining deep learning with multi-physics simulation," *Energy AI*, vol. 1, p. 100003, Aug. 2020.
- [5] A. Legala, J. Zhao, and X. Li, "Machine learning modeling for proton exchange membrane fuel cell performance," *Energy AI*, vol. 10, p. 100183, Nov. 2022.
- [6] P. V. Madhavan, S. Shahgaldi, and X. Li, "Modelling Anti-Corrosion Coating Performance of Metallic Bipolar Plates for PEM Fuel Cells: A Machine Learning Approach," *Energy AI*, vol. 17, p. 100391, Sep. 2024.
- [7] N. J. Williams, C. Osborne, I. D. Seymour, M. Z. Bazant, and S. J. Skinner, "Application of finite Gaussian process distribution of relaxation times on SOFC electrodes," *Electrochem. commun.*, vol. 149, p. 107458, Apr. 2023.
- [8] T. Vairo, D. Cademartori, D. Clematis, M. P. Carpanese, and B. Fabiano, "Solid oxide fuel cells for shipping: A machine learning model for early detection of hazardous system deviations," *Process Saf. Environ. Prot.*, vol. 172, pp. 184–194, Apr. 2023.
- [9] M. Tofigh, Z. Salehi, A. Kharazmi, D. J. Smith, A. R. Hanifi, C. R. Koch, M. Shahbakhti, "Transient modeling of a solid oxide fuel cell using an efficient deep learning HY-CNN-NARX paradigm," *J. Power Sources*, vol. 606, p. 234555, Jun. 2024.
- [10] O. B. Rizvandi, A. Nemati, H. Nami, P. V. Hendriksen, and H. L. Frandsen, "Numerical performance analysis of solid oxide fuel cell stacks with internal ammonia cracking," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 91, pp. 35723–35743, Nov. 2023.
- [11] M. R. Asadi, M. Ghasabehi, S. Ghanbari, and M. Shams, "The optimization of an innovative interdigitated flow field proton exchange membrane fuel cell by using artificial intelligence," *Energy*, vol. 290, p. 130131, Mar. 2024.

- [12] A. Legala, M. Kubesh, V. R. Chundru, G. Conway, and X. Li, "Machine learning modeling for fuel cell-battery hybrid power system dynamics in a Toyota Mirai 2 vehicle under various drive cycles," *Energy AI*, vol. 17, p. 100415, Sep. 2024.
- [13] Y. Pan, H. Ruan, B. Wu, Y. N. Regmi, H. Wang, and N. P. Brandon, "A machine learning driven 3D+1D model for efficient characterization of proton exchange membrane fuel cells," *Energy AI*, vol. 17, p. 100397, Sep. 2024.
- [14] F. Zhou, F. Zhou, C. Sun, J. Pu, J. Li, Y. Li, Q. Xie, K. Li, H. Chen, "Efficiency optimization of fuel cell systems with energy recovery: An integrated approach based on modeling, machine learning, and genetic algorithm," *J. Power Sources*, vol. 615, Sep. 2024.
- [15] T. Hai, F. A. Alenizi, M. H. Ubeid, V. Goyal, F. M. Alhomayani, and A. S. Mohammed Metwally, "Using machine learning for comparative optimizing a novel integration of molten carbonate and solid oxide fuel cells with CO₂ recovering and gasification," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 97, pp. 38454–38472, Dec. 2023.
- [16] T. Hai, T. Hai, F. A. Alenizi, A. H. Mohammed, V. Goyal, R. K. Marjan, K. Quzwain, A. S. M. Metwally, "Solid oxide fuel cell energy system with absorption-ejection refrigeration optimized using a neural network with multiple objectives," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 52, pp. 954–972, Jan. 2024.
- [17] Y. Wang, C. Wu, S. Zhao, J. Wang, B. Zu, M. Han, Q. Du, M. Ni, K. Jiao, "Coupling deep learning and multi-objective genetic algorithms to achieve high performance and durability of direct internal reforming solid oxide fuel cell," *Appl. Energy*, vol. 315, p. 119046, Jun. 2022.
- [18] F. C. İskenderoğlu, M. K. Baltacıoğlu, M. H. Demir, A. Baldinelli, L. Barelli, and G. Bidini, "Comparison of support vector regression and random forest algorithms for estimating the SOFC output voltage by considering hydrogen flow rates," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 60, pp. 35023–35038, Dec. 2020.
- [19] M. Lai, D. Zhang, Y. Li, X. Wu, and X. Li, "Application of Multiple Linear Regression and Artificial Neural Networks in Analyses and Predictions of the Thermoelectric Performance of Solid Oxide Fuel Cell Systems," *Energies 2024, Vol. 17, Page 4084*, vol. 17, no. 16, p. 4084, Aug. 2024.
- [20] M. Keyhanpour, M. Ghasemi, and M. Pourbagian, "Parametric Study of Ammonia-Fueled Tubular AP-SOFC with Temkin-Pyzhev Kinetic Model," *Iran. Chem. Eng. J.*, vol. 22, no. 129, pp. 98–123, Oct. 2023. (in Persian)
- [21] M. Keyhanpour and M. Ghasemi, "3D Simulation of Effect of Geometry and Temperature Distribution on SOFC Performance," *Fluid Mech. Aerodyn.*, vol. 10, no. 2, pp. 169–184, Feb. 2022. (in Persian)
- [22] M. Keyhanpour and M. Ghasemi, "3D Investigation of Tubular PEM Fuel Cell Performance Assuming Fluid- Solid- Heat Interaction," *J. Comput. Methods Eng.*, vol. 41, no. 1, pp. 79–99, Dec. 2022. (in Persian)
- [23] S. Sayadian, M. Ghassemi, S. Ahmadi, and A. J. Robinson, "Numerical analysis of transport phenomena in solid oxide fuel cell gas channels," *Fuel*, vol. 311, p. 122557, Mar. 2022.
- [24] S. N. Ranasinghe and P. H. Middleton. "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, pp. 1-6, June 1, 2017.

English Abstract

Performance evaluation of IT-AP-SOFC ammonia fueled and validation using machine learning

Mahdi Keyhanpour¹, Majid Ghassemi^{2*}

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

2- Mechanical Engineering Department, K. N. T. University of Technology, Tehran, Iran, ghasemi@kntu.ac.ir

*Corresponding author

(Received: 2024/11/08, Received in revised form: 2024/12/26, Accepted: 2025/01/10)

The limitation of fossil energy sources and environmental concerns have caused efforts to use clean and sustainable energy sources. The solid oxide fuel cell with intermediate working temperature and ammonia fuel is one of the promising sources to replace conventional energy sources. On the other hand, the use of fuel cell performance prediction methods with appropriate and high accuracy and speed is significantly important. In this research, first, the solid oxide fuel cell with ammonia fuel, electrolyte leakage, and average working temperature are numerically simulated. Then the effective input parameters are selected to calculate the performance of the fuel cell in different conditions. In this regard, after generating a sufficient data set, different machine learning algorithms are used to predict the objective functions, including the power density and the maximum temperature of the fuel cell. The results indicate the complexity of predicting the power density of the fuel cell compared to the maximum temperature. It was also observed that the XG Boosting method with R^2 equal to 0.99 has the best efficiency in predicting the parameters of maximum temperature and power density.

Keywords: Solid Oxide Fuel Cell, Ammonia, Electrolyte Leakage, Intermediate Working Temperature, Machine Learning