

باسمه تعالی



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مواد

سمینار دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد گرایش شناسایی و انتخاب مواد

بهینه‌سازی و طراحی سلول‌های سوختی اکسید جامد با استفاده از روش‌های

شبیه‌سازی در مقیاس‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی

ارائه کننده: محمدعلی احمدزاده

مکان: سالن سمینار دانشکده مواد

زمان: دوشنبه ۲۶ خرداد ساعت ۱۲ ظهر

اعضای کمیته داوری:

استاد مشاور: دکتر سید جواد هاشمی‌فر

اساتید راهنما: دکتر مسعود پنجه‌پور

اساتید داور: دکتر کیوان رئیسی - دکتر اسماعیل عبدالحسینی سارسری

چکیده:

در این پژوهش، به منظور درک عمیق‌تر فرایندهای حاکم در سلول‌های سوختی اکسید جامد (SOFC)، شبیه‌سازی در مقیاس‌های میکروسکوپی و ماکروسکوپی انجام شد. در بخش میکروسکوپی، با بهره‌گیری از نظریه تابعی چگالی (DFT) پدیده نفوذ در الکترولیت جامد و میکروسینتیک آند نیکل بررسی گردید. نتایج نشان داد اسکاندیوم مؤثرترین عنصر در کاهش انرژی فعال‌سازی نفوذ است و اصلاح ساختار مکعبی با ایتیریم و اسکاندیوم، انرژی فعال‌سازی را بیش از ۵۰٪ نسبت به ساختار منوکلینیک کاهش می‌دهد. همچنین، کاتالیزور تک اتمی نیکل-پلاتین موجب بهبود میکروسینتیک آند و کاهش سد انرژی واکنش‌ها شد. در بخش ماکروسکوپی، با توسعه مدل سه‌بعدی و تحلیل حساسیت متغیرهای عملیاتی، بیشینه توان خروجی در شرایط بهینه ۲۴۲۳ وات بر متر مربع به دست آمد. در ادامه، به کمک مدل‌های یادگیری ماشین (SVM - OLS - XGBoost- DNN) مدل‌هایی برای پیش‌بینی توان خروجی توسعه داده شد که کارایی مناسبی در شناسایی ارتباط متغیرها داشت. در نهایت اثر هدایت یونی در مقیاس میکروسکوپی بر عملکرد ماکروسکوپی بررسی و مشخص شد تغییرات میکروسکوپی می‌تواند تأثیر چشمگیری بر رفتار کلی سلول داشته باشد.

کلمات کلیدی: سلول سوختی اکسید جامد، تئوری تابعی چگالی، شبیه‌سازی در مقیاس میکروسکوپی و ماکروسکوپی، میکروسینتیک، یادگیری ماشین