باسمه تعالی

دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده مهندسی مواد

سمینار دفاع از رساله دکتری مهندسی مواد

با عنوان

بررسی بهینه‌سازی پارامترهای طراحی ریفورمرهای پیل‌های سوختی با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی در ابعاد میکروسکوپی و ماکروسکوپی

ارائه کننده: **آزاده جعفری‌زاده**

زمان: چهارشنبه ۲ اردیبهشت ساعت ۱۰ صبح **مکان**: https://nikan.iut.ac.ir/rooms/224-yzu-oua-gqv/join

اعضای کمیته داوری:

استاد راهنما: دکتر مسعود پنجه‌پور استاد مشاور: دکتر محسن دوازده‌امامی

اساتید داور: دکترحسین احمدی‌کیا-دکتر محمود مراتیان-دکتر محسن ثقفیان

چکیده:

هدف پژوهش، طراحی و بهینه‌سازی چندمنظوره راکتور ریفورمینگ متان با بخار آب با رویکرد چندمقیاسی(DFT،CFD و یادگیری ماشین است. محاسبات DFT روی شش سطح کاتالیزوری نیکلی نشان داد که نقص جای خالی، رسوب کربن را افزایش می‌دهد، درحالی‌که دوپ کردن با پلاتین، سد انرژی رسوب کربن را بالا برده و تشکیل گونه‌های اکسیژن‌دار را تسهیل می‌کند. با استفاده از مدل میکروسینتیکی حاصل، شبیه‌سازی CFD در راکتور بستر ثابت (۸۰۰ حالت) نشان داد افزایش دمای دیواره، طول راکتور و نسبت بخار به کربن، تولید هیدروژن را بهبود می‌بخشد. سپس با بهره‌گیری از شبکه عصبی عمیق (DNN)، هزینه محاسباتی کاهش یافت. در راکتورهای فوم متخلخل (۳۵۰ شبیه‌سازی)، کاهش قطر و درصد تخلخل، کاهش سرعت گاز و افزایش دمای دیواره، عملکرد ریفورمر را بهتر کرد. مدل‌های یادگیری ماشین نظیر DNN، XGboost، OLS و Ridge تحلیل SHAP نشان دادند که دمای دیواره بیشترین اثر مثبت و سرعت گاز و تخلخل بیشترین اثر منفی را بر تولید هیدروژن دارند. الگوریتم گرگ خاکستری و ژنتیک، شرایط بهینه را یافتند و یکتایی پاسخ تأیید شد. بهینه‌سازی چندهدفه بیشینه‌سازی هیدروژن و کمینه‌سازی مقدار حرارت باقی‌مانده در فوم، جبهه پارتو را ارائه داد. در نهایت، ادغام نتایج DFT و CFD تأیید کرد که دوپ پلاتین، نرخ واکنش‌های تشکیل کربن را کاهش و مسیرهای اکسیداسیون کربن را تقویت می‌کند. بنابراین فوم‌های متخلخل جایگزین مناسبی برای بستر ثابت هستند و آلایش نیکل با پلاتین از رسوب کربن جلوگیری می‌کند.

کلمات کلیدی: ریفورمینگ متان بخار، دینامیک سیالات محاسباتی، محاسبات ابتدا به ساکن، فوم کاتالیستی سلول‌باز، یادگیری ماشین، بهینه‌سازی